

## Отзыв

Официального оппонента на диссертационную работу П.А. Покаташкина «Молекулярно-динамическое исследование механических свойств боронасыщенных соединений со структурой типа  $\alpha$ -бора», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа Павла Александровича Покаташкина посвящена атомистическому моделированию  $\alpha$ -бора и карбида бора ( $B_4C$ ).

Сочетание легкости и твердости делают  $B_4C$  перспективным материалом для создания современных покрытий, для изготовления легких бронежилетов высокого класса защиты. Несмотря на то, что поведение карбида бора при ударном нагружении исследуется с конца 60-х годов, множество особенностей пока не нашли своего объяснения. Согласно базе данных Scopus, количество публикаций по ключевому слову «карбид бора» выросло в три раза за последние десять лет. Данный факт наглядно демонстрирует **актуальность** работы. Отчасти, увеличение внимания к этому материалу объясняется всеобщим прогрессом в развитии и улучшении доступности методов компьютерного моделирования, в частности методов расчета из первых принципов. Использование современных теоретических методов позволило лучше понять сложнейшую структуру данного материала. Однако, теоретические подходы, основанные на теории функционала электронной плотности, не позволяют моделировать большие системы. Таким образом, решение задачи построения потенциалов межатомного взаимодействия открывает новые возможности для атомистического исследования данных веществ.

Построение потенциалов межатомного взаимодействия является сложной проблемой *per se*. Следует обратить внимание на существование большого количества различных боридных керамик со структурой типа  $\alpha$ -бора. Таким образом моделирование структуры и механических свойств  $\alpha$ -бора может пролить свет на общие механизмы поведения и керамических материалов со схожей структурой. Потенциал межатомного взаимодействия для карбида бора может использоваться как для выяснения особенностей, присущих исключительно  $B_4C$ , так и для определения количественных характеристик.

Поскольку построенные потенциалы межатомного взаимодействия являются первыми из опубликованных в литературе, позволяющих моделировать такие сложные структуры, то **новизна** работы является очевидной. Впервые представлены теоретические оценки предела текучести боридных керамик при скольжении вдоль аморфных зон.

**Ценность.** Благодаря построению потенциалов межатомного взаимодействия, стало возможным проводить молекулярно-динамические расчеты для обсуждаемых материалов. Таким образом, открывается новая возможность для теоретических исследований данных материалов и их производных.

Предложенные механизмы деформации вносят ясность в обсуждавшееся в десятках статей явление. Рассчитанная количественная зависимость предела текучести от давления позволяет проводить гидродинамические расчеты в моделях сплошной среды.

**Достоверность** основных результатов работы подтверждается проведенной верификацией потенциалов межатомного взаимодействия, а также согласием результатов с известными экспериментальными данными. Материалы исследования опубликованы в ведущих иностранных научных журналах, докладывались на различных конференциях, в т.ч. и международных, и хорошо известны научной общественности.

Тем не менее, представленная работа не лишена недостатков. По моему мнению, наиболее важными являются следующие замечания.

1. В диссертации используется термин «энергия» даже при расчетах при конечных температурах. Было бы корректнее указывать какой конкретно термодинамический потенциал имеется в виду.
2. При описании процедуры построения межатомного потенциала для  $\alpha$ -бора используемые конфигурации описаны крайне общим образом. Использование таблицы (как сделано в главе 4) или более подробное их описание позволило бы отчетливее представлять область фазового пространства, на котором тренировался потенциал.
3. Нет описания тестирования качества и точности полученного потенциала для карбида бора в зависимости от количества выбранных конфигураций. Указано, что было использовано 120 конфигураций, значительно ли

изменяться результаты, если увеличить количество конфигураций до 200, 300?

4. В тексте диссертационной работы встречаются опечатки и грамматические ошибки.

Однако эти недостатки не снижают общего положительного впечатления от работы. Соискателем внесен существенный вклад в исследование боридных керамик. Содержание автореферата соответствует диссертации.

Представленная работа полностью **удовлетворяет всем требованиям**, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленным в «Положении о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842 с дополнениями от 21 апреля 2016 года №335, и **соответствует специальности 01.04.07** – физика конденсированного состояния, а её автор П.А. Покаташкин заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

Старший научный сотрудник  
Лаборатория компьютерного дизайна материалов  
Сколковский институт науки и технологий  
к.ф.-м.н.,  
01.04.07 – физика конденсированного состояния

Квашнин Александр Геннадьевич

ул. Нобеля, д. 3, Москва, Россия, 143026  
Телефон: +7 (915) 175 05 40  
E-mail: a.kvashnin@skoltech.ru

Подпись Квашнина А.Г. заверяю  
Руководитель отдела  
кадрового администрирования  
Сколковский институт науки и технологий

Бурденко Наталья Геннадьевна



26.10.2018