



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИФМ УрО РАН
Академик РАН Мушников Н.В.

« 30 » января 2018 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу

Новоселова Ивана Игоревича «Исследование диффузионных свойств материалов с помощью метода параллельных реплик», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Актуальность темы диссертации

Ключевой задачей в разработке новых и совершенствованию имеющихся технологий является выбор режимов термомеханической обработки, которые при данном химическом составе обеспечивают достижение необходимого фазового и структурного состояния, с высокими потребительскими свойствами. В настоящее время, для достижения такой цели широко применяются методы численного моделирования различного масштабного уровня, которые играют все более важную роль в разработке новых материалов и исследовании их поведения и свойств в особых условиях. Использование таких методов сокращает объем необходимых эмпирических исследований и расходы на разработку новых технологий, двигая развитие производства.

Молекулярная динамика является одним из наиболее универсальных методов атомистического моделирования, позволяющих исследовать поведение систем на микро и мезо уровне. Высокая информативность и достоверность делает молекулярную динамику идеальным инструментом для исследования сдвиговых и диффузионно-контролируемых процессов в материалах. Однако, при текущем уровне развития вычислительной техники характерное время моделируемого процесса с использованием традиционных подходов не превышает десятков наносекунд, что делает невозможным прямое моделирование диффузионно-контролируемых процессов при реальных температурах. Поэтому не вызывает сомнений, что диссертационная работа, посвященная развитию методов и алгоритмов ускоренной молекулярной динамики, их тестированию и использованию для исследования диффузионных процессов в материалах, является весьма *актуальной* и соответствует

приоритетным направлениям развития науки в Российской Федерации. С использованием разработанных методов, в диссертации решены *практически важные* задачи, касающиеся анализа механизмов диффузии и образования зернограницных сегрегаций.

Структура и содержание диссертационной работы

Диссертация состоит из введения, 5 глав, Заключение и списка литературы из 126 наименований. Общий объем диссертации 121 страница в том числе 39 рисунков, и 1 таблица.

Во введении обосновывается актуальность выбранной темы диссертационной работы, сформулированы ее цель, научная новизна, теоретическая и практическая значимость, приведены основные положения, выносимые на защиту.

В Первой и Второй главах содержится литературный обзор, в котором подробно рассмотрены положения континуальной и атомистической теории диффузии (*глава 1*), а также теоретические и экспериментальные результаты исследований диффузионных свойств материалов (*глава 2*). Обсуждаются современные методы ускоренной молекулярной динамики (гипердинамика, метадинамика, температурно-ускоренная динамика и метод параллельных реплик (МПР)) и их применимость к исследованию диффузионных процессов.

Третья глава является методической и содержит результаты по исследованию влияния параметров МПР на результаты расчета и способов оптимизации вычислений. Определены источники погрешностей МПР и проведена оценка соответствующих ошибок. Установлено, что алгоритм детектирования событий в МПР систематически недооценивает частоту их появления и предложен метод корректировки этой ошибки. Осуществлена программная реализация МПР для ускорения квантовой молекулярной динамики (пакет PRDpy).

В четвертой главе предложенная реализация метода ускоренной квантовой молекулярной динамики (КМД) в схеме МПР применяется для исследования процессов диффузии в конкретных системах. В рамках развиваемого подхода удалось провести прямой расчет коэффициентов самодиффузии D_1 в области температур, где возможно непосредственное сопоставление с экспериментальными данными. Впервые, путем прямого расчета, удалось показать, что наблюдаемое в эксперименте отклонение коэффициента самодиффузии от закона Аррениуса обусловлено температурной зависимостью энергии образования вакансий.

В рамках развиваемого подхода исследована диффузия водорода в гидриде Ti. Использование МПР ускоренной КМД для решения этой задачи является критичным, так как построить полуэмпирический потенциал взаимодействия для этой системы не удалось. На основании расчетов результатов расчетов установлено наличие двух режимов диффузии, смена которых происходит около 1000 К. В области пониженных температур

диффузия контролируется миграцией структурных вакансий, в то время как при повышенных температурах – термически индуцированными парами Френкеля. Установлено, что пара Френкеля нестабильна при нулевой температуре, но может быть динамически стабилизирована за счет тепловых колебаний решетки Ti. Полученный вывод является важным и весьма интересным, демонстрируя существенную роль ангармонизмов решетки в процессах диффузии.

В пятой главе МПР применяется для ускорения классической молекулярной динамики и исследования процессов самодиффузии и взаимодействия точечных дефектов с границами зерен (ГЗ) в поликристалле Mo. Развиваемый метод позволил установить механизмы и рассчитать коэффициенты зернограницной диффузии, а также эффективные коэффициенты диффузии в поликристалле. Установлено, что в случае большеугловых ГЗ реализуется краудионный механизм быстрой миграции межузельных атомов по трубкам зернограницных дислокаций, в то время как для малоугловых границ доминирует гантельный механизм диффузии.

Исследована эволюция структуры междоузельных границ (МЗГ), обусловленная сегрегацией междоузлий и показано, что симметричные МЗГ способны периодически восстанавливать свою структуру при осаждении на них междоузлий. Детальный анализ результатов МД расчетов позволил выявить четыре основных режима взаимодействия дефект – граница: накопление отдельных дефектов; их взаимодействие и образование комплексов; перестройка с частичным восстановлением структуры границы и рекомбинация, приводящая к исчезновению остаточных дефектов. Показано, что на ассиметричных междоузельных границах не происходит периодического восстановления структуры, хотя во взаимодействии дефект – граница можно выделить стадии частичного восстановления и рекомбинации.

Из наиболее значимых научных результатов работы следует отметить:

- исследование процессов диффузии в области невысоких температур методами ускоренной молекулярной динамики, что позволило установить контролирующие механизмы и рассчитать с хорошей точностью коэффициенты диффузии;
- доказательство смены механизма диффузии водорода в гидриде титана с температурой;
- определение механизмов миграции межузельных атомов и вакансий вдоль ГЗ в Mo.

В работе разработан и успешно применен метод ускоренной квантовой и классической молекулярной динамики (МПР+МД). Это позволило получить ряд новых важных результатов, демонстрирующих (i) существенную роль зависимости энтальпии образования вакансий от температуры, (ii) наличие двух механизмов диффузии водорода в гидриде титана, сменяющих друг друга в зависимости от температуры, (iii) краудионный механизм быстрой миграции межузельных атомов по большеугловым ГЗ в молибдене.

Достоверность результатов и обоснованность выводов

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением моделей, имеющих строгую физическую обоснованность, использованием в данных моделях надежно установленных параметров и апробированием используемых методов в тестовых расчетах. Основные выводы диссертационной работы изложены в статьях, опубликованных в реферируемых российских и зарубежных научных журналах из списка ВАК, что также подтверждает достоверность полученных данных.

Практическая значимость полученных результатов

Разработан вычислительный код, который может использоваться для ускорения квантовой и классической молекулярной динамики методом параллельных реплик (МПР) и решения практически важных задач. Предложена методика корректировки ошибок, обусловленных использованием МПР. Рассчитанные коэффициенты диффузии водорода в гидриде титана и коэффициенты самодиффузии в поликристаллическом Мо могут использоваться для описания кинетики протекания диффузионно-контролируемых процессов.

Апробация результатов. Основные результаты диссертационной работы изложены в 5 статьях, опубликованных в журналах, рекомендованных ВАК, доложены на 9 международных и 5 всероссийских конференциях.

Замечания по диссертационной работе

1. Не ясно, чем обосновывается заключение автора о том, что «наблюдаемые отклонения от закона Аррениуса объясняются температурной зависимостью энтальпии образования вакансий, обусловленной эффектами ангармонизма» (стр. 57 диссертации) поскольку ни энтальпия образования вакансий, ни масштаб ангармонизмов в работе не обсуждаются.
2. В главе 5 рассматривается миграция специальной ГЗ вследствие осаждения на нее межузельных атомов при которой ГЗ остается плоской и перемещается, оставаясь параллельной себе. В тоже время, согласно распространенным представлениям, миграция граница обычно осуществляется путем перемещения уступов на ней. Как изменятся полученные выводы при наличии уступов на ГЗ?

Заключение

Указанные замечания не влияют на общую высокую оценку диссертационной работы, которая является законченным научно-исследовательским трудом, выполненным автором самостоятельно на высоком научном уровне с применением современных методов

исследований. Работа апробирована на целом ряде российских и международных конференций. По результатам работ опубликовано большое число статей в рецензируемых журналах из перечня ВАК.

Представленная работа посвящена актуальной теме, содержит новые важные результаты и отвечает критериям “Положения о порядке присуждения ученых степеней”, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор И. И. Новоселов заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Дата проведения семинара 5.12.2018, протокол № 10

Дата утверждения отзыва Ученым советом 30.01.2019, протокол № 1

Главный научный сотрудник, зав. лабораторией
цветных сплавов ИФМ УрО РАН,
доктор физ.-мат. наук

Ю.Н. Горностырев

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики металлов имени М.Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН)
620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18
Телефон: (343)374-02-30
Факс: (343) 374-52-44
physics@imp.uran.ru, yug@imp.uran.ru
<http://www.imp.uran.ru/>

Подпись Ю.Н. Горностырева заверяю
Ученый секретарь ИФМ УрО РАН,
кандидат физ.-мат. наук

И.Ю. Арапова