

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Новоселова И.И. «Исследование диффузионных свойств материалов с помощью метода параллельных реплик», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация Новоселова И.И. посвящена исследованию механизмов и расчету коэффициентов диффузии на атомарном уровне в различных материалах. Хорошо известно, что исследование термически-активируемых процессов, в частности, диффузионных, осложнено резким падением скорости их протекания при уменьшении температуры. Поэтому прямое молекулярное моделирование таких процессов возможно только при достаточно высоких температурах, которые, как правило, существенно выше предполагаемой температуры эксплуатации материала, а зачастую недоступны и для экспериментальных исследований. Это затрудняет верификацию полученных результатов, а также существенно ограничивает их применимость на практике, в особенности, когда речь идет о сложных системах, где наблюдаются значительные отклонения от кинетики Аррениуса.

В работе Новоселова И.И. для решения проблемы моделирования диффузионных процессов при пониженных температурах используется метод параллельных реплик, реализующий один из алгоритмов так называемой ускоренной молекулярной динамики. Автор обнаружил ошибку в оригинальном алгоритме метода и предложил методику корректировки этой ошибки, а также разработал программный код для ускорения метода квантовой молекулярной динамики при моделировании процесса диффузии. Использование предложенной методики на примере алюминия и гидрида титана позволило получить ряд новых значимых результатов. В частности, показано, что для корректного описания самодиффузии в широком диапазоне температур необходимо учитывать вклад ангармонических поправок в энергию образования вакансий. Помимо этого, были исследованы механизмы диффузии водорода в гидридах титана в широком интервале температур. Следует подчеркнуть, что автору впервые удалось провести сравнение с экспериментальными данными по коэффициенту самодиффузии при низких температурах для гидрида титана, а также теоретически продемонстрировать неаррениусовский характер зависимости коэффициента самодиффузии от температуры.

В качестве недостатка автореферата, не влияющего на общую оценку работы, следует указать различные единицы, использованные для коэффициента диффузии на рис. 2 и 4, что затрудняет восприятие полученных результатов.

Тема диссертационной работы Новоселова И.И., безусловно, обладает актуальностью, а сама работа выполнена на высоком научном и методическом уровне. Полученные результаты представляют интерес как с научной, так и с практической точек зрения. Не вызывает сомнений, что диссертационная работа Новоселова И.И. отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

**Отзыв подготовил:** Заведующий лабораторией моделирования свойств материалов  
Объединенного Института Высоких Температур РАН

Кандидат физико-математических наук

Левашов Павел Ремирович

**Почтовый адрес:** 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2

Тел.: +7 (495) 484-2456; факс: +7 (495) 485-7990; e-mail: pasha@ihed.ras.ru

Подпись Левашова П.Р. заверяю:

Ученый секретарь ФГБУН Объединенного института высоких температур РАН

д.ф.-м.н.



Амиров Равиль Хабибулович

« 14 » февраля 2019 г.