



Акционерное общество
Государственный научный центр
Российской Федерации –
ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
имени А.И. Лейпунского
(АО «ГНЦ РФ – ФЭИ»)

Бондаренко пл., д. 1, г. Обнинск Калужской обл., 249033
Телетайп: 183566 «Альфа». Факс: (484) 396 8225, (484) 395 8477
Телефон: (484) 399 8249 (приемная), (484) 399 8412 (канцелярия)
E-mail: postbox@ippe.ru, <http://www.ippe.ru>
ОГРН 1154025000590, ИНН 4025442583, КПП 402501001

Отзыв на автореферат

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

Диссертационная работа Новоселова И. И. посвящена развитию методов ускоренной молекулярной динамики применительно к моделированию диффузионных процессов в материалах. Работа актуальна, поскольку ее результаты позволяют значительно увеличить интервал времен диффузионных процессов, которые могут моделироваться методами квантовой молекулярной динамики. Это определяет и практическую значимость работы, так как разработанный подход позволяет существенно расширить доступный для исследования интервал температур.

В работе получен ряд важных научных результатов. Показано, что основная погрешность метода параллельных реплик, связанная с дискретностью детектирования событий, носит систематический характер и может быть скорректирована, предложено соответствующее корректировочное выражение. Новоселовым И.И. разработана программная реализация метода параллельных реплик, приспособленная для ускорения квантовых молекулярно-динамических расчетов. Созданный программный код апробирован на задаче расчета коэффициентов самодиффузии алюминия и успешно применен для исследования механизмов и расчета коэффициентов диффузии водорода в гидридах титана разного состава в широком интервале температур. Результаты расчетов согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

В качестве замечания, не снижающего общей высокой оценки работы, можно отметить, что в главе 5 следовало бы рассмотреть влияние на структуру межзеренных границ наклона в молибдене не только накопление междоузельных атомов, но и вакансий. В металлах междоузельные атомы могут создаваться в значительном количестве, по-видимому, только под облучением. При этом диффузионные потоки междоузельных атомов и вакансий на различные объекты микроструктуры близки по величине, но не одинаковы, а на границы зерен поток вакансий может быть несколько больше.

В качестве пожелания отмечу, что разработанные Новоселовым И. И. методы ускоренной молекулярной динамики могли бы быть успешно применены к моделированию диффузионных процессов в сплавах под облучением: радиационно-ускоренной диффузии и особенно радиационно-индуцированной сегрегации (РИС),

проходящих одновременно по междоузельному и вакансионному механизмам. РИС связана с различием парциальных коэффициентов диффузии элементов сплава и приводит к появлению сильной неоднородности состава сплавов возле разных объектов микроструктуры (выделений, пор, петель, границ зерен). С помощью развитых автором методов расчеты коэффициентов диффузии элементов и точечных дефектов, а также корреляционных факторов, могли бы быть проведены в практически важных для работы конструкционных материалов имеющих и проектируемых ЯЭУ интервалах температур.

Задачи, поставленные в этой работе, автором выполнены полностью. Результаты работы прошли апробацию на российских и международных конференциях, автор имеет достаточное количество публикаций в реферируемых журналах.

Представленный в автореферате материал и публикации автора показывают, что диссертационная работа выполнена на высоком научно-техническом уровне. Работа полностью соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском технологическом университете "МИСиС", предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Новоселов И.И. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник АО «ГНЦ РФ – ФЭИ»,
кандидат физико-математических наук

RMS

В.А. Печенкин

Подпись В.А. Печенкина заверяю:

Заместитель генерального директора АО «ГНЦ РФ – ФЭИ»
по науке и инновационной деятельности

Н.Г. Айрапетова



12.02.2019