

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации Новоселова Ивана Игоревича на тему «Исследование диффузионных свойств материалов с помощью метода параллельных реплик», представленной на соискание ученой степени по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния» и состоявшейся в НИТУ «МИСиС» 19 февраля 2019 г.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» 08.10.2018, протокол № 03.

Диссертация выполнена во Всероссийском Научно-Исследовательском Институте Автоматики им. Н.Л. Духова (Госкорпорация «Росатом»).

Научный руководитель - кандидат физико-математических наук, Янилкин Алексей Витальевич, начальник отдела Всероссийского Научно-Исследовательского Института Автоматики им. Н.Л. Духова.

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» (протокол № 3 от 08.10.2018) в составе:

1. Кудря Александр Викторович, д.т.н., профессор кафедры металловедения и физики прочности НИТУ «МИСиС, профессор – председатель комиссии;
2. Векилов Юрий Хоренович, д.ф.-м.н., профессор кафедры теоретической физики НИТУ «МИСиС», профессор;
3. Страумал Борис Борисович, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник ЛПРМ ИФТТ РАН, профессор;
4. Стегайлов Владимир Владимирович, д.ф.-м.н., заведующий отделом Объединённого института высоких температур РАН, доцент;
5. Липницкий Алексей Геннадьевич, д.ф.-м.н., профессор НИУ «БелГУ».

В качестве ведущей организации утвержден Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН.

Экспертная комиссия отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- Разработана методика корректировки ошибок, обусловленных дискретностью алгоритма детектирования событий используемого в методе параллельных реплик.
- Установлены механизмы диффузии водорода в дельта-фазе гидридов титана. Выявлена роль структурных вакансий и тепловых колебаний решетки титана в механизме образования термических пар Френкеля.
- Показано, что межзеренные границы наклона способны восстанавливать свою структуру в результате сегрегации собственных междоузлий. Установлены особенности восстановления симметричных и асимметричных границ.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- Доказана важность учета ангармонических поправок к энергии образования вакансий для корректного описания самодиффузии в алюминии.
- Развита алгоритм реализации метода параллельных реплик для ускорения квантовой молекулярной динамики, что позволило моделировать диффузионные процессы при более низких температурах.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

- Разработан вычислительный код, который может использоваться для ускорения квантовой молекулярной динамики методом параллельных реплик.
- Предложена и верифицирована методика корректировки ошибок, обусловленных использованием метода параллельных реплик.
- Рассчитаны коэффициенты диффузии водорода в гидриде титана, а также установлены механизмы взаимодействия межузельных атомов в поликристаллическом молибдене, которые могут использоваться для описания кинетики диффузионно-контролируемых процессов, протекающих в этих материалах.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- В работе используются апробированные методы моделирования и технологии обработки результатов.
- Установлено согласие результатов расчетов с опубликованными в научно-технической литературе экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя состоит в:

- Разработке вычислительного кода, используемого в работе.
- Проведении расчетов, обработке и интерпретации полученных результатов.
- Подготовке публикаций по результатам проведенных исследований.

Соискатель представил 5 опубликованных работ в рецензируемых научных изданиях из перечня, утвержденного Минобрнауки России, из них 5 опубликованы в изданиях, индексируемых в наукометрических базах данных Web of Science, Scopus.

Пункт 2.6 Положения о присуждении ученой степени кандидата наук НИТУ «МИСиС» соискателем ученой степени не нарушен.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Новоселову Ивану Игоревичу ученой степени кандидата физико-математических по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

При проведении тайного голосования экспертная комиссия в количестве 5 человек, участвовавших в заседании, из 5 человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за 5, против - нет, недействительных бюллетеней нет.

Председатель Экспертной комиссии



Кудря А.В.

19.02.2019