

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Верховых Анастасии Владимировны «Компьютерное моделирование взаимодействия водорода с вакансиями и межзеренными границами в железе, а также с межфазной границей феррит-цементит», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Деградация свойств сталей и конструкционных материалов на основе железа, работающих в водороде и водородсодержащих средах, представляет большую проблему. Зарождение пор, заполненных водородом, вероятно на дефектах, а именно на вакансиях, межзеренных границах, а также межфазных границах феррит-цементит, рассмотренных в диссертации. Особое внимание вызывает исследование самых ранних стадий этого процесса. В работе А.В. Верховых исследуется взаимодействие атомов водорода с перечисленными дефектами, поэтому она актуальна и представляет практический интерес. Применение первопринципного метода расчета полной энергии кристалла в рамках теории функционала плотности и продуманное использование широко используемого пакета WIEN2k свидетельствуют о достоверности полученных результатов.

При моделировании вакансии в железе автором проводилась релаксация атомной структуры суперячейки (параграф 3.2). Однако о релаксации после внесения в вакансию атомов водорода, причем в количествах, достигающих 5 атомов водорода на одну вакансию, в автореферате не сказано. Этот вопрос требует комментария.

Судя по содержанию автореферата, диссертационная работа А.В. Верховых удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Результаты опубликованы в ведущих научных журналах, многократно обсуждались на представительных конференциях и семинарах. Основные положения и результаты диссертации обладают несомненной новизной. Считаю, что Верховых Анастасия Владимировна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры
электроники твердого тела
физического факультета СПбГУ

198904, г. Санкт-Петербург, Старый Петергоф, ул. Ульяновская, д. 1, к. М.
Габис Игорь Евгеньевич, тел.: 8(812) 4284539, Email: i.gabis@spbu.ru

ЛИЧНУЮ ПОДПИСЬ
ЗАВЕРЯЮ. НАЧАЛЬНИК
ОТДЕЛА КАДРОВ
Н. И. МАШТЕПА



И.Е.Габис

Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/expert.html>

Держать под контролем

по адресу инициативе