

Отзыв на автореферат

диссертации А. В. Верховых «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.

Диссертационная работа Верховых Анастасии Владимировны посвящена разработке и применению первопринципных методов для моделирования электронного строения ОЦК железа, содержащего водород в вакансиях кристаллической решетки, а также в межзеренных и межфазных границах. Исследована зависимость энергии растворения и энергии захвата водорода дефектами от их структурных особенностей и магнитного упорядочения в кристалле. Особенностью данной работы является теоретическое моделирование электронного строения и физико-химических свойств большого набора объектов с использованием наиболее трудоемкого, но и наиболее точного неэмпирического полнопотенциального метода присоединенных плоских волн, реализованного в пакете WIEN2k.

Следует отметить удачный выбор объектов исследования – комплексов из нескольких атомов водорода внутри вакансий в ОЦК-железе, в специальных границах зерен и межфазной границе феррит-цементит. Разнообразие исследованных объектов позволило установить особенности и общие закономерности в формировании химического связывания атомов водорода с атомами железа и углерода в зависимости от кристаллического окружения.

Проведенное в работе моделирование электронного строения сплавов железо-водород с использованием наиболее хорошо зарекомендовавшего себя первопринципного метода ЛППВ позволило существенно уточнить данные ряда пионерских работ, посвященных изучению водородных комплексов в моновакансиях и специальных границах зерен в кристаллах ОЦК-железа. Кроме того, автором впервые выполнены расчеты электронного строения межфазной границы феррит-цементит и показано, что она является эффективной ловушкой для атомов водорода. Полученные в работе результаты подтверждены экспериментальными данными и расчетами других авторов, что позволяет говорить о высокой достоверности, сделанных в диссертации выводов.

Особенно следует отметить, что результаты исследований Верховых А.В. могут быть полезны для выработки рекомендаций по условиям воздействия на материалы при их изготовлении.

При чтении автореферата возник вопрос о предложенном в диссертации “расширенном

варианте термодинамической теории описания равновесных концентраций” комплексов водорода. Хорошо известно, что расчеты с использованием пакета WIEN2k могут быть выполнены только для 0 К (о чем также упомянуто в автореферате на стр. 12), а для оценки термодинамических характеристик (энтальпии, свободной энергии, энтропии и др.) необходимо вычислять частоты колебаний атомов в исследуемом объекте, что является крайне трудоемкой задачей. В автореферате практически ничего не сказано о деталях построения этой термодинамической теории, и не ясно, как это было сделано.

Данный вопрос не снижает хорошего впечатления, которое оставляет диссертация. Работа в целом представляет собой серьезное научное исследование, выполненное на высоком научно-методическом уровне, направленное на решение важных и практически значимых задач. Полученные результаты обобщают и значительно расширяют существующие представления об электронном строении сплавов железо-водород.

Считаем, что диссертационная работа «Компьютерное моделирование взаимодействия водорода с вакансиями и межзеренными границами в железе, а также с межфазной границей феррит-цементит», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния, удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г № 842, а ее автор Верховых Анастасия Владимировна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Медведева Надежда Ивановна

г.н.с. лаборатории квантовой химии и спектроскопии, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник,

Рыжков Михаил Владимирович

в.н.с. лаборатории квантовой химии и спектроскопии, доктор химических наук, старший научный сотрудник

ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского Отделения Российской академии наук, 620990, ГСП, г.Екатеринбург, ул. Первомайская 91, ИХТТ УрО РАН

Телефон: (343)3623554

E-mail: medvedeva@ihim.uran.ru, ryz@ihim.uran.ru

8 ноября 2016 г.

Подписи Н.И.Медведевой и М.В.Рыжкова заверяю:

Ученый секретарь ИХТТ УрО РАН,

д.х.н.



Т.А. Денисова

