

## ОТЗЫВ

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

Компьютерное моделирование в настоящее время - общепринятый метод научного исследования, в частности в физическом и физико-химическом материаловедении. Он занимает естественную нишу между экспериментальным исследованием и традиционной аналитической теорией. Следует отметить, что выбранные диссертантом объекты исследования – водород-металлические системы широко встречаются в современной технике. Для управления растворимостью водорода в металлах большой интерес представляет изучение захвата водорода дефектами кристаллической решетки. Однако экспериментальные методы оценки энергии захвата водорода подобными ловушками очень затруднены и дорогостоящи при относительно невысокой точности. Таким образом, можно полагать, что диссертационная работа А.В. Верховых, имеющая цель провести комплексное изучение взаимодействия водорода с такими дефектами структуры как вакансии, межзеренные и межфазные границы, с помощью методов компьютерного моделирования, несомненно, актуальна.

Оценивая научную новизну рецензируемой работы, следует отметить, что в ней впервые проведено исследование взаимодействия водорода с вакансией в парамагнитном ОЦК-железе, а также с межфазной границей феррит-цементит с ориентационным соотношением Исайчева. Важным, на мой взгляд, представляется полученный результат о зависимости энергии связи водорода с дефектами от их магнитного упорядочения и симметрии структуры.

Апробация работы и перечень публикаций автора отвечает требованиям ВАК, как по перечню изданий, так и по количеству публикаций.

Оценивая представленную диссертационную работу Верховых Анастасии Владимировны, считаю, что она отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Д.физ.-мат-н., доц.,  
декан физического факультета  
ФГБОУ ВО «ЧелГУ»

Таскаев Сергей Валерьевич, Email: tsv@esu.ru  
тел.: 9193140000, 454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129-214

Таскаев С.В.

Подпись

удостоверяю

*Сергей Валерьевич Таскаев*  
*оценка имеет по кафедре* 28.10.2016