

## 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», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Растворенный в металле водород оказывает существенное влияние на его физико-химические свойства и прочностные характеристики. Безусловно, актуальна работа, в которой проводится количественная оценка энергий взаимодействия атомов водорода с матрицей и друг с другом в этой матрице. Актуальна и обратная задача – накопление водорода в металле.

Благодаря выбору для решения поставленных задач наиболее строгого в теоретическом плане метода первопринципного моделирования в работе получены результаты важные для понимания механизмов взаимодействия атомов водорода с дефектами кристаллической решетки. В конечном итоге это будет способствовать решению практических задач с помощью влияния на этот механизм.

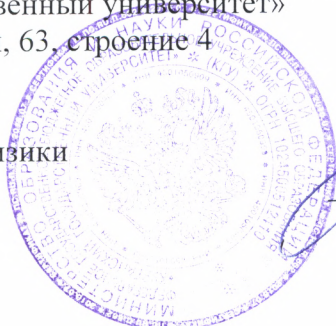
По данным, представленным в автореферате имеются следующие вопросы:

1. В чем заключается релаксация структуры для нахождения оптимального положения внедренных атомов водорода (стр.12)?
2. На рисунке 3 (стр.11) представлены  $VH_n$  комплексы с различным положением атомов водорода. Ниже в таблице 1 приведены 5 значений энергии связи. Для каких структур (при данном  $n$ ) получены эти значения? Они одинаковы или это средние значения для данного  $n$ ? То же касается и ниже приведенных значений энергий формирования комплексов  $VH_n$ .

Нужно отметить высокий уровень апробации результатов работы и тех публикаций, в которых представлены эти результаты.

Учитывая актуальность проблемы, теоретическую и практическую важность полученных результатов, современность и надежность выбранных методов исследования, обоснованность сделанных выводов и заключений, можно утверждать, что работа «Компьютерное моделирование взаимодействия водорода с вакансиями и межзеренными границами в железе, а также с межфазной границей феррит-цементит» удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям в области физики конденсированного состояния. Автор работы Верховых Анастасия Владимировна заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Курганский государственный университет»  
г. Курган, ул. Советская, 63, строение 4  
тел.8(3522)65-49-33  
e-mail: fizika@kgsu.ru  
Зав. кафедрой общей физики  
д.т.н., профессор



Б.С. Воронцов

ВЕРНО

Зав. канцелярией  
Козлова М.А.

« 11 » 11 20 16г.