

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 ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Поведение водорода в металлах интенсивно изучалось экспериментальными и теоретическими методами на протяжении всего прошлого столетия и этот интерес не угасает в настоящее время. Известно, что даже присутствие даже незначительного количества водорода может критически сказываться на механических свойствах материалов, вызывая их охрупчивание и образование трещин, что существенно ограничивает технологическое применение многих металлов и их сплавов. Существенную роль в деградации металлов под действием водорода оказывает процесс его захвата дефектами кристаллической структуры. Считается, что при понижении температуры растворимость водорода понижается, что приводит к его выделению и образованию внутренних полостей в материале, заполненных водородом. Другая проблема, связанная с поведением водорода в металлах и сплавах, заключается в разработке материалов для его хранения. Это требует высокой растворимости водорода в таких материалах, и, как следствие, разработки основ теории захвата атомарного водорода различными ловушками: вакансиями, примесями замещения и др. В этой связи диссертационная работа Верховых А.В., посвященная изучению взаимодействия водорода с вакансиями, границами зерен и межфазными границами в железе, несомненно, является актуальной.

В диссертационной работе Верховых А.В. проводится первопринципное изучение особенностей поведения водорода в железе, содержащем межзеренные и межфазные границы раздела. Изучается изменение атомной и электронной структуры металла в присутствии водорода и водород-вакансионных комплексов. Автором определена критическая заселенность водородом вакансии, при этом показано, что при увеличении заселенности вакансии возрастает отталкивание между атомами водорода. Изучено влияние водорода на равновесную концентрацию вакансий в ОЦК железе. Показано, что невозможно достичь такого захвата водорода вакансиями для рассмотренных температур и концентраций водорода, что позволило бы ограничить его негативное влияние на материал. Впервые было проведено первопринципное изучение взаимодействия водорода с моновакансией в парамагнитном ОЦК железе в рамках модели локальных коллинеарных магнитных моментов. Показано, что более слабое взаимодействие водород-вакансия в парамагнитном железе, по сравнению с ферромагнитным, вызвано магнитными эффектами, а не тепловым расширением решетки. Необходимо отметить результаты, полученные при изучении взаимодействия водорода на внутренних границ раздела. Автор показал, что не только специальные границы зерен в ОЦК железе $\Sigma 5(310)$, $\Sigma 5(210)$, $\Sigma 3(111)$, но и межфазная граница феррит-цементит представляют собой ловушки для водорода. В последнем случае взаимодействие водорода с атомами углерода приводит к увеличению энергии связи водорода с матрицей.

Научная значимость работы не вызывает сомнений, поскольку полученные результаты позволяют продвинуться в понимании механизмов взаимодействия водорода с дефектами и могут быть использованы для построения термодинамических моделей. Результаты,

полученные Верховых А.В., представляются достоверными, поскольку использовался современный и хорошо зарекомендовавший себя программный код Wien2k, в рамках которого реализован один из наиболее точных методов расчета электронной структуры материалов – полно-потенциальный линейный метод присоединенных плоских волн. Кроме того, имеется хорошее согласие полученных результатов с экспериментальными данными и результатами других теоретических работ. Основные результаты опубликованы в 14 реферируемых научных журналах, а также докладывались на многочисленных российских и международных конференциях.

Данная работа не лишена определенных недостатков.

В частности в автореферате практически не описан расчет парамагнитного состояния железа, поэтому из текста автореферата не всегда удается понять, о чем идет речь. Например, на стр. 12 написано: «В парамагнитном состоянии ОЦК-железа водород был помещен в 5 различных конфигураций на расстояние 0.23 Å от центра октапоры...». Даже из контекста не понятно, что речь идет не о пяти различных позициях водорода на одинаковом расстоянии от октапоры, а о пяти различных парамагнитных конфигурациях матрицы железа, а атом водорода, по-видимому, помещался в одну и ту же позицию.

Имеются также отдельные оформительские недостатки и описки. Например, в таблице 3 результаты для энергии растворения водорода на границах зерен $\Sigma 5(310)$, $\Sigma 5(111)$ приведены с точностью до одного знака после запятой, тогда как для $\Sigma 5(210)$ и других характеристик приведены два знака после запятой. При этом автор сравнивает с результатами других работ, где также даны два знака после запятой. Вместо стандартного обозначения ридберга используется «Рб» на стр.9.

Отмеченные выше замечания не затрагивают основные положения работы и ни в коей мере не снижают общей положительной оценки работы. По актуальности проблемы, объему и научному уровню выполненных исследований, представленная диссертационная работа «Компьютерное моделирование взаимодействия водорода с вакансиями и межзеренными границами в железе, а также с межфазной границей феррит-цементит» удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Верховых Анастасия Владимировна заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Бакулин Александр Викторович
кандидат физико-математических наук,
младший научный сотрудник

Кулькова Светлана Евгеньевна
доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник

Лаборатория физики нелинейных сред
Института физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук
634055, г. Томск, пр. Академический 2/4
(3822) 49-18-81, root@ispms.tomsk.ru, www.ispms.ru
28.10.2016

