

О т з ы в

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

Водород играет большую роль в железе и сплавах на его основе, оказывая значительное влияние на их физические и механические свойства, вызывая охрупчивание, образование трещин и т.п. Значительную роль в этих процессах играет захват атомов водорода дефектами структуры, в роли которых могут выступать вакансии, примесные атомы, межзеренные и межфазные границы, дислокации и другие дефекты решетки. Растворимость водорода уменьшается с понижением температуры, что становится причиной его выделения при охлаждении изделий, приводящей к охрупчиванию и появлению трещин. В последние годы также активно исследуется накопление и хранение водорода в сплавах, в которых его растворимость исключительно велика. Поэтому изучение взаимодействия водорода с вакансиями и межзеренными границами и разработка основ теории захвата атомарного водорода в ловушки, вызванные дефектами структуры, представляет актуальную задачу современного материаловедения и лежит в русле современных мировых исследований.

Представляет интерес проведенные в работе расчеты взаимодействия водорода со специальными границами зерен (ГЗ) $\Sigma 5(310)$, $\Sigma 5(210)$ и $\Sigma 3(111)$. Обнаружено, что рассмотренные специальные ГЗ представляют собой ловушки для атома водорода. Выявлены особенности зависимости энергии связи водорода с ГЗ.

Интересно проведенное впервые первопринципное моделирование межфазной границы феррит-цементит с ориентационным соотношением Исайчева, и выполненное исследование взаимодействия водорода с данной межфазной границей. Обнаружено, что межфазная граница представляет собой ловушку для атомов водорода.

Имеется следующее замечание: из автореферата не ясно, проводилась ли релаксация структуры моделируемой межфазной границы феррит-цементит. Известно, что структура границ может существенно меняться в ходе релаксации.

Указанное замечание не снижает существенно ценность работы. Диссертация выполнена на высоком научном уровне, отвечает соответствующим требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния, а ее автор, А.В. Верховых, заслуживает присуждения искомой степени.

Старший научный сотрудник лаборатории механических свойств ИФМ УрО РАН, кандидат технических наук

Подпись

Кузнецов

А.Р. Кузнецов

«14» октября 2016 г.

печать

Почтовый адрес: 620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

Тел.: +79193748241

E-mail: a.kuznetsov@imp.uran.ru

Отзыв А.Р. Кузнецова заверяю



Подпись <i>Кузнецова</i>
заверяю
Руководитель общего отдела
<i>Куз</i> Н.Ф.Лямина
«14» 10 2016 г.

М. И. Куртеев