

## 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.

Диссертация Верховых А.В. посвящена теоретическому исследованию взаимодействия водорода с точечными и протяженными дефектами железа и цементита: вакансиями, границами зерен и др. Несмотря на многочисленные экспериментальные и теоретические исследования свойств дефектного железа с водородом ряд вопросов требует микроскопического изучения. Так до сих пор отсутствует последовательная количественная теория флокенообразования, разработка количественной теории захвата атомарного водорода различными дефектами находится на начальной стадии. Одним из важнейших способов получения информации, в настоящее время являются численные исследования, которые, благодаря развитию компьютерных технологий, в настоящее время значительно проще для реализации по сравнению с проведением реального эксперимента, но в тоже время являются надежным источником информации об особенностях тех или иных моделей. Таким образом, исследуемая в диссертации проблема является актуальной.

В данной работе была разработана методика первопринципного моделирования взаимодействия атомов водорода с точечными и протяженными дефектами кристаллов ОЦК железа в ферромагнитной и парамагнитной фазах. В рамках теории функционала плотности проведены расчеты энергии образования и атомной структуры комплексов из  $n$  атомов водорода в полости вакансии ОЦК железа. Рассчитана энергия образования комплексов водород-вакансия. При этом показано, что равновесная концентрация вакансий значительно возрастает в результате взаимодействия с водородом. Проведены исследования влияния локальной магнитной конфигурации на энергию образования вакансии и захвата ими атомов водорода в ОЦК железе. Дано объяснение зависимости энергии захвата водорода вакансией в парамагнитном варианте ОЦК железа, связанное с локальным магнитным порядком.

В диссертации также проведено исследование равновесных конфигураций межзеренных границ ОЦК железа в присутствии атомов железа. Определены энергии ловушек на границах зерен. Показано, что высокая энергия связи атомов водорода с межзеренной границей  $\Sigma 5(210)$  обусловлена несимметричной конфигурацией атомов железа. Построена атомистическая модель межфазной границы феррит-цементит с ориентационным соотношением Исайчева. Определены энергии ловушек для

атомов водорода, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными и другими теоретическими исследованиями.

В автореферате достаточно полно представлены основные результаты диссертации. В работе развиты существующие методы первопринципного численного исследования взаимодействия атомов водорода с точечными и протяженными дефектами в кристаллах железа и системах феррит-цементит. Достоверность полученных результатов и научная обоснованность выводов определяется применением апробированных и хорошо обоснованных методов теоретического исследования, высокой статистикой численного исследования. Замечаний нет. Результаты исследований хорошо апробированы и опубликованы в ведущих научных журналах.

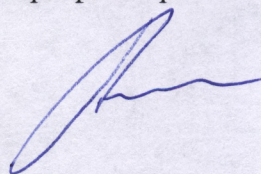
Диссертационная работа Верховых А.В. удовлетворяет всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК Министерства образования и науки РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Заведующий кафедрой теоретической физики и прикладной математики  
ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого  
Президента России Б.Н. Ельцина»

Доктор физико-математических наук, профессор

Мазуренко Владимир Гаврилович

24 октября 2016 г.



Подпись профессора Мазуренко В.Г. заверяю,

Адрес: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19, Email: [mgnov@mail.ru](mailto:mgnov@mail.ru)

Ученый секретарь УрФУ Морозова В.А.

