

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Верховых А.В. «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»

К настоящему времени хорошо известно, что водород оказывает большое влияние на свойства железа и сплавов на его основе. Прежде всего, имеется в виду негативное влияние на их физические и механические свойства, которые проявляется, в частности, в охрупчивании и образовании трещин. Значительную роль в этих процессах играет захват атомов водорода дефектами структуры, в роли которых могут выступать вакансии, примесные атомы, межзеренные и межфазные границы. К настоящему моменту можно считать доказанным, что флокены (микротрещины) представляют собой внутренние микрополости (поры), заполненные водородом. Вместе с тем, до сих пор последовательная количественная теория явления флокенообразования отсутствует. В связи с этим и по ряду других соображений, разработка основ теории захвата атомарного водорода в ловушки, вызванные дефектами структуры, представляет актуальную задачу современного материаловедения.

Основной целью данной работы являлось изучение взаимодействия водорода с дефектами структуры и границами зерен методами первопринципного моделирования. Для достижения поставленной цели автором впервые, в рамках теории функционала плотности, проведено моделирование энергии образования и атомной конфигурации комплексов из атомов водорода, расположенных внутри вакансии в кристалле ОЦК-железа. Это позволило уточнить результаты, полученные ранее другими авторами. Было, в частности, показано, что взаимодействие с атомами водорода значительно увеличивает равновесную концентрацию вакансий в ОЦК-железе. Определено количество атомов водорода, которое способны связать вакансии. Это позволило показать, что для ОЦК-железа при всех концентрациях и температурах не удастся обеспечить существенное связывание водорода вакансиями для борьбы с водородной деградацией.

Несомненно, результаты, полученные Верховых А.В. представляют интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Развитый на основе теории функционала плотности подход закладывает научные основы для понимания механизмов связи водорода с вакансиями, межзеренными и межфазными границами. В соответствии с отмеченным выше, автором данной диссертационной работы выполнено вполне завершённое исследование, в результате которого получен ряд новых и интересных результатов.

Вместе с тем, по автореферату у меня имеется несколько замечаний:

1. Базовый вариант метода функционала электронной плотности не предполагает использования температуры как одного из параметров

системы, а имеющиеся подходы к учету температуры представляются косвенными и не вполне надежными. На с. 12 автореферата самим автором отмечается, что программный пакет WIEN2k предусмотрен только для расчетов при 0К. Следовало бы несколько подробнее пояснить, каким образом результаты, относящиеся к 0К распространялись на конечную температуру. Можно ли понимать так, что просто перемасштабировались межатомные расстояния в исследованных модельных системах в соответствии с коэффициентом теплового расширения?

2. Следовало бы хотя бы кратко пояснить, какие именно термодинамические расчеты или подходы упоминаются в тексте автореферата;
3. В качестве формального замечания отмечу, что не следовало в одном предложении (см. с. 4) использовать и англоязычные (EAM, DFT), и русскоязычные (МД) сокращения.

Сделанные замечания не умаляют достоинств данной работы. Учитывая актуальность темы диссертации, новизну и практическую значимость ее результатов, считаю, что она в полной мере отвечает требованиям, предъявляемым кандидатским диссертациям по физико-математическим наукам, а ее автор – Верховых Анастасия Владимировна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Профессор кафедры общей физики
Тверского государственного университета,
доктор физико-математических наук,
профессор

Заслуженный работник высшей школы Самсонов В.М.Самсонов

Подпись Самсонова В.М.
удостоверяю:
Начальник управления
аспирантуры и докторантуры



170002, Садовни пер., 35
г. Тверь

Тел.: (4822) 58-14-93

e-mail: scsamsonoff@inbox.ru 10.11.16