

## Отзыв научного руководителя

### о диссертационной работе Верховых Анастасии Владимировны «Компьютерное моделирование взаимодействия водорода с вакансиями и межзеренными границами в железе, а также с межфазной границей феррит- цементит»

Начиная с 4-го курса обучения в Южно-Уральском государственном университете Верховых А.В. принимала активное участие в научных исследованиях по компьютерному моделированию материалов, за успехи в которых награждалась именными стипендиями администрации г.Челябинска (2010), Губернатора Челябинской области (2011). В 2012 г. она с отличием окончила магистратуру физического факультета ЮУрГУ и, поступив в аспирантуру, продолжила научную работу в данном направлении. Обучаясь в аспирантуре, Анастасия стала лауреатом Всероссийского и областного молодежных конкурсов научных работ по современным проблемам фундаментальных и прикладных наук, была награждена именными стипендиями законодательного собрания Челябинской области (2013) и Президента Российской Федерации (2014).

Благодаря достигнутому в настоящее время прогрессу в разработке эффективных схем решения многочастичных задач и средств вычислений стало возможным предсказание макроскопических свойств конденсированных неупорядоченных систем на уровне, достаточном для количественного сравнения с экспериментом. Диссертационная работа Верховых А.В. является частью разрабатываемой на кафедре общей и теоретической физики ЮУрГУ тематики по изучению водородной деградации железа и сплавов на его основе методами компьютерного моделирования. Одним из ключевых моментов такого моделирования является определение энергетических параметров взаимодействия растворенных атомов водорода с дефектами структуры решетки железа. Поскольку данные взаимодействия являются сугубо локальными, то прямое экспериментальное определение данных энергетических характеристик затруднено и весьма затратно. В последние годы в мировой литературе для оценки взаимодействий примесей с дефектами все чаще применяют методы первопринципного компьютерного моделирования. Таким образом, тематика диссертационной работы весьма актуальна и лежит в русле мировой науки. Следует отметить, что Верховых А.В., используя методы моделирования атомной и электронной структуры материала, провела достаточно глубокий научный анализ поставленной перед ней проблемы, что позволило полностью решить поставленные перед ней задачи и получить результаты, обладающие научной и практической значимостью.




Работа в области расчетов электронной структуры неупорядоченных систем. подразумевает глубокие знания физических основ строения вещества, свободное владение аппаратом квантовой и статистической физики и профессиональное использование техники высокопроизводительных вычислений. За время работы над диссертацией Верховых А.В. показала себя подготовленным исследователем, вполне освоившим указанные компетенции. Можно отметить, также высокий уровень заинтересованности, активности, усердия и прилежания, проявленного аспирантом при выполнении диссертационной работы.

Принимая во внимание все сказанное, считаю, что Верховых А.В. безусловно достойна присвоения звания кандидата физико-математических наук.

Д.ф.-м.н., старший научный сотрудник,  
профессор кафедры общей и теоретической  
физики ЮУрГУ.

Челябинск, 454080, пр. Ленина 76, ЮУрГУ  
(351) 265-47-13  
mirzoev@physics.susu.ac.ru



 А.А. Мирзоев

09.06. 2016г.

  
ЕД. ДОКУМЕНТОВЕД  
О.В. ГРИШИНА