

ОТЗЫВ

официального оппонента кандидата физико-математических наук Выходца Владимира Борисовича на диссертацию Верховых Анастасии Владимировны по теме «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

Актуальность темы исследования.

Актуальность тематики «Водород в металлах» обусловлена широкой распространенностью водорода в природе и технологиях, его высокой химической активностью, наибольшей среди всех элементов диффузионной подвижностью атомов водорода в материалах, его участием во многих природных и технологических процессах, сильным влиянием водорода на механические, физико-химические и функциональные свойства материалов даже при низких концентрациях. Эта тема актуальна для многих отраслей техники, включая металлургию, химическое машиностроение, ядерную, атомную и водородную энергетику. Для каждого из этих направлений первоочередное значение имеют данные о различных энергетических параметрах систем водород - металл, включая теплоту растворения, энергию активации диффузии, энергию взаимодействия атомов водорода с дефектами структуры. Все эти факторы обуславливают высокую актуальность темы диссертационной работы Верховых А.В. Актуальность, несомненно, усиливает использование в работе методик расчетов атомной и электронной структуры материалов из первых принципов. Этот подход широко развивался в последние годы, получил высокую репутацию в физике конденсированного состояния, и можно только приветствовать, что он был применен в диссертации для расчета параметров взаимодействия водорода с дефектами в железе, который был и остается важнейшим для техники материалом.

Структура и содержание диссертации.

Диссертационная работа изложена на 158 страницах, состоит из введения, 5 глав, заключения и списка использованной литературы из 233 наименований. Автореферат соответствует содержанию диссертации, опубликованные работы отражают содержание диссертации. Диссертация является завершенным исследованием, в ней обоснована постановка работы, выбор методов исследования, ясно изложены полученные результаты, проведено сопоставление с литературными данными, сформулированы положения, выносимые на защиту.

Во введении обоснована актуальность, научная и практическая ценность работы, обозначены цели исследования, сформулированы конкретные задачи диссертации, изложены положения, выносимые на защиту и приводятся сведения об апробации работы, публикациях, структуре и объеме диссертации. По всем этим пунктам у меня замечаний нет, они адекватно отражают мировой уровень исследований в данной области и соответствуют фактическому содержанию работы и публикациям автора.

Глава 1 является литературным обзором. В ней изложено современное состояние проблемы взаимодействия водорода с металлами, механизмы и теории водородной деградации, содержатся современные представления о дефектах структуры, представлены существующие подходы к моделированию взаимодействия водорода с металлами т.д. Обзор сделан квалифицированно, он адекватно отражает существующий уровень исследований и позволил обозначить болевые точки современного состояния проблемы и сформулировать

цели и задачи диссертационного исследования.

Глава 2 была посвящена выбору методов исследования и имела определяющее значение для качества работы. В ней был обоснован выбор основного метода исследований (теории функционала плотности DFT), метода линейризованных присоединенных плоских волн в рамках DFT и программного пакета WIEN2k, в котором эти методы были реализованы. В главе 2 были также подробно рассмотрены критерии выбора параметров моделирования, обеспечивающего достижение высокой точности и надежности расчета энергетических параметров. Последующее представление результатов в главах 3, 4 и 5, включая сопоставление с экспериментальными данными, подтвердило, что автор диссертации является квалифицированным специалистом в технологиях компьютерных расчетов электронных, магнитных и структурных свойств материалов.

Глава 3 посвящена расчету энергий взаимодействия атомов водорода с вакансиями в ферромагнитном и парамагнитном состояниях железа, имеющего объемно-центрированную кубическую (ОЦК) решетку, при этом были учтены практически все факторы, влияющие на надежность расчетных результатов. К ним относятся, например, достаточный размер системы, расчетное воспроизведение фазы железа и его магнитного состояния, расчетное значение параметра решетки, учет соображений симметрии, сопоставление с имеющимися экспериментальными данными и т.д. При выполнении расчетов была получена фундаментальная информация об энергетических состояниях комплексов, состоящих из вакансии и атомов водорода с варьированием количества атомов водорода в комплексе. Для комплекса с одним атомом водорода рассчитано равновесное положение атома водорода, для комплексов с двумя и более атомами водорода получена детальная и физически прозрачная информация о влиянии атомов водорода на концентрацию вакансий, влиянию ближнего магнитного порядка на энергетические параметры системы. Эти результаты имеют также значение для приложений.

Глава 4 посвящена моделированию взаимодействия водорода с межзеренными границами в железе. В этой главе были рассмотрены также и более общие вопросы, а именно, построение модели границы зерна и расчет энергетических характеристик границ зерен в исследуемом материале. Как и в главе 3, большое внимание уделялось обоснованию и выбору оптимальных параметров моделирования. Основными оригинальными результатами этой главы были расчетные значения энергий взаимодействия атомов водорода с несколькими специальными границами в ОЦК-железе.

Глава 5 посвящена моделированию взаимодействия атомов водорода с межфазной границей феррит – цементит. Этот вопрос представляет большой интерес для теории и практики, поскольку межфазные границы указанного типа практически всегда присутствуют в сталях. Рассмотрению взаимодействия водорода с межфазной границей предшествует построение структурной модели границы и выбор оптимальных параметров моделирования. Основными оригинальными результатами этой главы были расчетные значения энергий взаимодействия с межфазной границей, включая детализацию в этих взаимодействиях роли атомов железа и углерода в контактирующих фазах.

Ценность работы Верховых А. В. для теории и практики, на мой взгляд, далеко выходит за рамки конкретной системы водород – железо. Значение исследования не ограничивается вкладом в проблему образования флокенов в сталях, оригинальными данными о взаимодействии атомов водорода с вакансиями, границами зерен и межфазными границами в системах на основе железа, хотя это само по себе имеет важное значение. В диссертации на современном уровне сформированы принципы теоретического подхода,

обеспечивающего получение надежных теоретических результатов по атомной и электронной структуре конденсированных фаз, содержащих атомы водорода. Это могут быть другие металлические системы и не только металлы. В диссертации наглядно и убедительно показано, что можно обеспечить получение достоверных данных по электронной структуре систем водород – металл с помощью теоретических методов, основанных на теории функционала плотности. Хотя я сам являюсь экспериментатором, готов признать, что теоретические подходы на данном этапе исследований свойств систем водород – металл являются более информативными, чем экспериментальные методики. Еще раз хочу подчеркнуть высокий уровень достоверности результатов, выводов и практических рекомендаций работы, что было достигнуто за счет ориентации работы на надежные методы расчетов и критериев при выборе оптимальных параметров моделирования.

Материалы, представленные в работе, многократно докладывались и обсуждались на Всероссийских и международных конференциях и опубликованы в 31 печатной работе, в том числе 14 статей в журналах из списка ВАК, из них 4 публикации в журналах, индексируемых Scopus и Web of Science. Элементы новизны присущи следующим научным результатам диссертации:

- Впервые проведено моделирование энергии образования и атомной конфигурации комплексов из n атомов водорода полнопотенциальным методом линеаризованных присоединенных плоских волн в программном пакете WIEN2k, что существенно уточнило данные более ранних работ. На основе полученных результатов представлен уточненный вариант статистической теории образования вакансий в сплавах Fe–H.

- Впервые выполнено первопринципное моделирование взаимодействия водорода с вакансией в парамагнитном ОЦК-железе.

- Впервые, проведено существенное уточнение результатов взаимодействия водорода со специальной границей зерна $\Sigma 5(210)$.

- Впервые было проведено первопринципное моделирование межфазной границы феррит-цементит с ориентационным соотношением Исайчева, и выполнено исследование взаимодействия водорода с данной межфазной границей.

Личный вклад соискателя. Я несколько раз общался с Верховых А.В. при работе над отзывом. У меня сложилось впечатление, что она свободно ориентируется в физике конденсированного состояния, проблеме «водород в металлах», примененных в диссертации методиках и расчетах. На этом основании я делаю заключение, что личный вклад соискателя в работу был определяющим.

Критические замечания по диссертационной работе.

Мое впечатление о диссертации Верховых А.В. является положительным, и у меня есть только частные вопросы и замечания, которые не влияют на общее благоприятное впечатление от работы. Прошу Верховых А.В. при защите диссертации дать ответы на следующие замечания:

1. Почему при выборе равновесных положений атомов водорода в ОЦК решетке использовались соображения симметрии? Разве исключено, что равновесными окажутся координаты с пониженной симметрией?
2. В работе значение параметра ОЦК-решетки выступает как важный критерий, определяющий точность структурных и энергетических расчетов. В этом случае считаю целесообразным привести данные о чувствительности результатов расчета к выбранному значению параметра решетки.
3. На рис. 8 автореферата представлены интересные данные, свидетельствующие об

осциллирующем характере зависимости локального магнитного момента и межплоскостного расстояния от номера плоскости в цементитной фазе. В то же время в ферритной области осцилляций нет. Прошу пояснить физический смысл столь различного поведения указанных зависимостей в этих кристаллических фазах.

4. Для водорода в металлах большое значение имеют данные по изотопным эффектам в диффузии и растворимости, в том числе в теплоте растворения и энергии активации диффузии. Такие данные считаются важными для понимания механизмов процессов. По какой причине вопросы об изотопных эффектах в диссертации не рассматриваются? Являются ли указанные изотопные зависимости тривиальными?

Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней.

Диссертация Верховых Анастасии Владимировны является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи о теоретическом расчете атомной и электронной структуре комплексов водород – вакансии в железе, а также рассчитаны энергии взаимодействия атомов водорода с вакансиями в ОЦК-железе, межзеренными и межфазными границами в ферритных сталях. Представленное исследование имеет значение, в первую очередь, для физики конденсированного состояния, а также для металлургии и методологии компьютерного моделирования свойств конденсированных систем, что соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени.

Официальный оппонент
кандидат физико-математических
наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния
ведущий научный сотрудник
Института физики металлов
им. М.Н. Михеева УрО РАН

Владимир Борисович Выходец

Контактная информация

Почтовый адрес: 620990 г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской 18, Институт физики металлов УрО РАН

Сл. тел. +7(343)3783846; моб. тел. +79222074382; e-mail: vykhod@imp.uran.ru.

