

Отзыв

на автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук:

Ридный Ярослав Максимович "Взаимодействие примесей углерода в железе: ab initio моделирование" (01.04.07- "физика конденсированных состояний")

Рецензенты:

1. Большов Леонид Авраамович
160000, г. Вологда, ул. Ленина, 15; телефон 8- 964-662-44-64,
e-mail: labolshov@mail.ru
Вологодский государственный университет (ВоГУ); профессор кафедры математики, доктор физико-математических наук, специальность – "физическая химия".
2. Корнейчук Светлана Константиновна
160000, г. Вологда, ул. Ленина, 15; телефон 8-921-231-73-13,
e-mail: korn_sk@mail.ru
Вологодский государственный университет (ВоГУ); доцент кафедры физики, кандидат физико-математических наук, специальность – 01.04.10 "физика полупроводников и диэлектриков".

Первые попытки расчета парного потенциала взаимодействия С-С в решетке феррита сводились к теории деформационного взаимодействия. Однако большое отрицательное значение этого потенциала для первой координационной сферы (-1,18эВ, А.Г. Хачатурян) говорит скорее в пользу распада твердого раствора, нежели в пользу упорядочения.

В прошлом веке появились теории межатомного взаимодействия в металлах, основанные на теории Томаса-Ферми, теории псевдопотенциала, теории функционала электронной плотности. Затем появилась электронная теория сплавов. Эта теория позволяет оценить эффективные потенциалы межатомного взаимодействия в сплавах. Эти оценки принято относить к химическому взаимодействию. Доведение расчетов электронной теории сплавов до числа осуществляется численными методами с применением современной вычислительной техники. В последние два десятилетия методы электронной теории сплавов были применены для расчетов потенциалов химического взаимодействия между атомами углерода в октаэдрических междоузлиях ОЦК решетки. Представленная диссертация попадает в категорию таких работ, которые составляют main stream физики сплавов. Актуальность представленной диссертации вполне очевидна.

Следует отметить тщательность проделанной диссертантом работы. Он занимался темой диссертации в течение многих лет, доложил результаты своих исследований на очень многих конференциях, опубликовал 26 статей по теме диссертации, в том числе 4 статьи в высокорейтинговых журналах. Объем

диссертации довольно приличный. Диссертация содержит обширный библиографический список.

Большой интерес представляют данные по значениям потенциалов парного взаимодействия между атомами углерода в феррите, мартенсите и аустените, полученные в расчетах диссертанта и представленные им в таблицах 1-3 автореферата. Эти данные требуют дальнейшего осмысления.

Важным и нетривиальным выводом диссертанта является вывод о том, что в феррите химический вклад во взаимодействие между атомами углерода сопоставим с деформационным.

Нам представляется уместным сделать несколько замечаний по материалу диссертации.

1. Диссертант подчеркивает первопринципность представленных расчетов. Хотя уравнение Шредингера и распределение Гиббса безусловно первопринципны, но в расчетах электронной теории сплавов на эту первопринципность нанизываются различные частные модели и приближения. Это следовало бы отметить в работе.
2. Термодинамическая активность углерода в аустените рассчитана диссертантом методом Монте-Карло. Нам кажется, что эти расчеты проще было сделать с помощью микрокалькулятора, используя разложение логарифма коэффициента активности углерода в ряд по степеням концентрации и усечение этого ряда с удержанием линейного и квадратичного членов.
3. На стр.7 автореферата диссертант утверждает, что наиболее достоверным методом определения потенциалов взаимодействия между атомами углерода в сплавах железа является атомистическое компьютерное моделирование на основе теории функционала электронной плотности. Это утверждение представляется нам слишком оптимистичным. Метод функционала электронной плотности использует волновые функции электронов в атоме, определенные для основного состояния. Поэтому результаты расчетов по этой теории относятся к основному состоянию системы, то есть к температуре $T=0$. Поэтому применение теории к конечной температуре рассчитано на большую, но не очень обоснованную удачу.

Во-вторых, не исследован вопрос о том, как размер суперячейки в компьютерных расчетах влияет на достоверность результатов.

Сделанные замечания не влияют на общее положительное отношение рецензентов к представленной диссертации. Диссертация вносит существенный вклад в понимание природы взаимодействия между атомами углерода в сплавах железа. Диссертант, бесспорно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Рецензенты согласны на обработку персональных данных.

Большов Л.А.
Корнейчук С.К.

Подписи Большова Л.А., Корнейчук С.К. заверяю.

Менеджер по персоналу отдела
кадрового администрирования

20.11.2019г.



Мадринос В.А.