

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Ридного Ярослава Максимовича
“Взаимодействие примесей углерода в железе: *ab initio* моделирование”,
представленной на соискание учёной степени кандидата физико-
математических наук по специальности 01.04.07 - Физика
конденсированного состояния.

Тема данной диссертационной работы актуальна как с научной, так и с прикладной точек зрения. Фундаментальный аспект актуальности обуславливается тем, что закономерности межатомного взаимодействия и упорядочения атомов углерода в ОЦК- и ГЦК-железе к настоящему времени остаются не вполне ясными. Изучение этого взаимодействия и атомного упорядочения прямыми экспериментальными методами (включая изучение концентрационной зависимости активности углерода в железе) затруднительно, что делает особо актуальным решение данной задачи методами компьютерного моделирования, включая первопринципное моделирование. С прикладной точки зрения актуальность темы диссертации обуславливается широким применением железа и его сплавов в технике. Это, в частности, касается бинарных систем Fe-C и Fe-Si.

В ходе выполнения исследований по теме диссертации Ридный Я.М. получил ряд новых интересных результатов. В частности, была разработана и реализована методика первопринципного моделирования исследуемых систем, рассчитаны энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе, проведены расчёты коэффициентов активности углерода в ГЦК- и ОЦК-решётках железа методом Монте-Карло, изучено влияние примеси кремния на взаимодействие углерод-углеродной пары в матрице железа.

Таким образом, диссертационная работа Ридного Я.М. является многогранным и вполне завершённым исследованием, актуальным по теме, характеризующимся новизной и практической значимостью полученных результатов. Вместе с тем, по автореферату имеются следующие замечания:

1. В п. 2 раздела “Научная новизна” и в описании главы 3 диссертации говорится об обнаружении эффекта отталкивания между атомами углерода, расположенными во второй координационной сфере ГЦК-железа. Обычно силы отталкивания проявляются только на малых расстояниях, т.е. между ближайшими соседями. Можно ли понимать так, что эти силы действуют между любыми атомами во второй координационной сфере, независимо от расстояния между ними? Можно ли утверждать, что речь идёт о реальных силах отталкивания или же это, скорее, формальный положительный вклад $\Delta E(C - C)$, который даёт адекватное значение энергии связи всей системы?
2. В п. 5 раздела “Научная новизна” говорится о прямом компьютерном эксперименте. Не понятно, какой смысл вкладывается в этот термин, т.е. в чём суть отличия прямого компьютерного эксперимента от косвенного.

Сделанные замечания не снижают общего положительного впечатления от данной диссертационной работы. Учитывая актуальность

темы диссертации, новизну и практическую значимость ее результатов, считаю, что данная работа в полной мере удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям по физико-математическим наукам, а ее автор – Ридный Ярослав Максимович – заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

Профессор кафедры общей физики
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»,
доктор физико-математических наук, профессор,
Заслуженный работник высшей школы

Самсонов

Самсонов Владимир Михайлович

Тверской государственный университет 170100, Тверь, ул. Желябова 33
Тел: +7-920-681-41-98, e-mail: samsonoff@inbox.ru

На обработку персональных данных согласен

Самсонов

*Подпись В.М. Самсонова
удостоверяю.*

Начальник отдела кадров И.Ю. Кашкова

4.12.2019

