

## ОТЗЫВ

об автореферате диссертации

Ридного Ярослава Максимовича

«Взаимодействие примесей углерода в железе: *ab initio* моделирование»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по  
специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Ридного Я.М. посвящена первопринципному исследованию сплавов систем Fe-C и Fe-Si-C. Целью работы являлось изучение методами компьютерного моделирования взаимодействия атомов углерода в феррите, мартенсите и аустените, а также влияние на него атомов кремния в тройной системе Fe-Si-C. Автор работы показал, что для точного расчета активности углерода в ОЦК-железе достаточно учета взаимодействия между атомами углерода в первых 4 координационных сферах. Рассчитаны энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК железе. Особый интерес, на мой взгляд, представляет вывод о том, что учёт тетрагонального искажения оцк решетки в мартенсите существенно влияет на энергии взаимодействия между атомами углерода в железе.

Результаты диссертации опубликованы Я.М. Ридным в печати, доложены на различных конференциях и находятся в хорошем согласии с данными, полученными другими авторами.

По автореферату имеются замечания:

1. Использован малый размер модельной ячейки, что ограничивает дальность взаимодействия. Кроме того, следовало бы сравнить полученные результаты по взаимодействию C в ОЦК железе с первопринципными расчетами O и N в других ОЦК металлах (V, Nb, Ta), а результаты расчетов для Fe-C-Si, например, с Fe-C-Al системой. Такие работы имеются в литературе.

2. Вызывает нарекания использованная диссертантом терминология, которая заметно отличается от общепринятой в материаловедении. Например:

- Кремний сплавах системы Fe-Si-C не является примесью, это легирующий элемент (в цели работы); «Провести оценку влияния легирующих примесей» (4я задача); «Сплавы, допированные различными примесями» (актуальность работы). Легируют (или допируют - заимствованный термин из английского языка соответствующий, как правило, микролегированию) сплавы направленно, с целью сознательного изменения их свойств легирующими элементами, а не примесями. Примесь – это химический элемент, перешедший в сплав в процессе его производства как технологическая добавка или как составляющая шихтовых материалов. В работе эти понятия смешаны.

- Текст автореферата местами трудночитаем из-за утверждений типа «содержащийся в стали углерод приводит к возникновению мартенситного превращения», «прямым компьютерным экспериментом», «аналогичное моделирование ....., приводят к значительной ошибке» (1 пункт научной новизны), «использование достаточно надежных .. методов» (достаточных для чего или для кого?) и др. С учетом растворимости С в феррите и аустените термин «упорядочение атомов углерода в оцк и гцк железе» требует пояснения, также, как и существование «теории Зинера – Хачатуряна» (в том числе в выводе 1) нуждается в пояснении.

Отвлекаясь от досадных небрежностей, указанных в замечаниях, знакомство с авторефератом позволяет сделать вывод, что диссертационная работа выполнена на требуемом научном уровне и содержит новые результаты, имеющие научное и прикладное значение. Направление исследований и их содержание соответствует специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния. Диссертационная работа Ридного Я.М. «Взаимодействие примесей углерода в железе: *ab initio* моделирование», отвечает требованиям, предъявляемым к работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а автор заслуживает присуждения этой степени.

Согласен на обработку персональных данных

Проф. каф. Металловедения цветных металлов НИТУ МИСиС

Tel: +7 (495) 955-01-34

email: i.golovin@misis.ru

д.ф.-м.н., проф. (специальность 01.04.07)

12.11.2019

И.С. Головин

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Ленинский проспект, д. 4, 119049, г. Москва



Подпись  
заверяю

Начальник отдела кадров  
НИТУ «МИСиС»

«12» ноября 2019 г.

Гаврилова С.Ю.