

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 Ярослава Максимовича посвящена многостороннему исследованию растворенного углерода в различных фазах железа. Актуальность темы связана с широким использованием железоуглеродистых сталей в промышленности, а также большим интересом к попытке объяснить фазовые превращения в них. В диссертации для теоретического исследования было выбрано *ab initio* моделирование, которое, на сегодняшний день, также набирает популярность по всему миру в связи ростом мощностей современных компьютеров и эффективных технологий распараллеливания расчетов. Таким образом, складывается представление об авторе как о специалисте, хорошо ориентирующемся в современных научных тенденциях.

Материал автореферата представлен на 24 страницах, написан ясным научным языком. Хорошо видно, что автором проработано огромное количество многолетней информации, которая тщательно проанализирована. В автореферате представлены результаты энергии взаимодействия углерода и его активности в различных фазах железа. Результаты представлены в сравнении с работами предшественников и выглядят убедительно. Стоит отметить реализацию собственного программного кода для расчетов активности углерода методом Монте-Карло, которая показывает, что автор также обладает компетентностью в области программирования.

Расчет магнитных состояний в теории функционала плотности имеет принципиальную трудность, что связано с особенностью задания магнитных моментов. Вдобавок к этому, при попытке реализации различных магнитных состояний для расчета требуется перебор некоторого числа различных конфигураций с различными комбинациями магнитных моментов. Такая же проблема встает и в немагнитных расчетах при внедрении чужеродного атома в состав первоначальной ячейки, когда способов внедрения этого атома может оказаться больше, чем доступно для дальнейших расчетов. В автореферате не указано, сталкивается ли автор с данной проблемой и как она решается.

Тем не менее, данное замечание не снижает значимости проведенного исследования. Диссертационная работа полностью удовлетворяет

требованиям ВАК, а ее автор Ридный Ярослав Максимович заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Согласна на обработку персональных данных.

Старший научный сотрудник
МНИЦТМ Самарского национального
исследовательского университета
им. академика С.П. Королева
+7-927-027-01-66
e-mail: a-gurska@yandex.ru
Специальность 01.04.02 теоретическая физика
Кандидат физ.-мат. наук
29 октября 2019г.

А.В. Гурская

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева", 443086, г. Самара, Московское шоссе, д.34.

Подпись Гурской А.В. удостоверяю.

Ученый секретарь



В.С. Кузьмичев