

ОТЗЫВ

на автореферат 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

Известно, что стали имеют широкое применение в промышленности. По некоторым оценкам более 90% всех металлических материалов, используемых в современной индустрии, составляет именно железо и его сплавы. Добавление небольшого количества углерода (~ 1 ат.%) значительно повышает прочностные характеристики железа. Закалка сталей также способствует повышению их прочности. Однако природа мартенситного превращения, при котором формируется феррит (раствор углерода в α -Fe) остается дискуссионной. Считается, что она связана с взаимодействием и упорядочением растворенных в матрице железа атомов углерода. Из эксперимента известно, что добавление кремния повышает растворимость углерода в железе и понижает количество выделяемого карбида. Поэтому для объяснения физической природы фазовых превращений в сталях необходимо, прежде всего, установить микроскопические механизмы взаимодействия и упорядочения атомов углерода в различных фазах железа, а также его взаимодействия с кремнием в тройных системах.

В диссертационной работе Ридного Я.М. была поставлена задача – изучить методами из первых принципов механизмы влияния кремния на особенности взаимодействия атомов углерода в железе. Для решения данной задачи автором была рассчитана электронная структура железа в ОЦК, ГЦК и ОЦТ фазах, содержащих примеси углерода и/или кремния. Проведен детальный анализ C–C взаимодействия в зависимости от локального окружения атомов углерода и фазового состояния железа. Ридному Я.М. удалось показать, что C–C взаимодействие в ГЦК железе носит отталкивающий характер, при этом наиболее сильное отталкивание наблюдается между атомами углерода, являющимися вторыми соседями. Обнаружено, что атомы кремния существенно влияют на это взаимодействие, причем механизм данного влияния заключается в изменении магнитных моментов атомов железа. Моделированием методом Монте-Карло с использованием полученных данных о C–C взаимодействии как функции расстояния и некоторых данных из литературы было показано, что применение разных потенциалов взаимодействия приводит практически к одной и той же кривой активности углерода в ГЦК железе.

Отметим, что научная новизна работы заключается в комплексном характере исследования механизмов межатомного взаимодействия углерода, кремния и атомов матрицы в железе с разной атомной структурой. Работа имеет научную значимость, которая заключается в возможности использования полученных данных для построения термодинамических моделей и расчета равновесных диаграмм состояния сплавов на основе Fe–C. Практическая значимость работы заключается в получении новых знаний, которые могут быть использованы для разработки научных основ нового поколения бескарбидных сталей.

В качестве замечания следует отметить следующее: в автореферате уделяется недостаточное внимание электронной подсистеме. Интересно было бы увидеть, как меняется распределение электронной плотности, а также плотности намагниченности между взаимодействующими атомами углерода, железа и кремния. Не приводятся детали расчета

активности углерода. Также необходимо отметить наличие большого числа опечаток, орфографических и стилистических ошибок в автореферате. В то же время, отмеченные выше замечания не затрагивают основные положения работы и ни в коей мере не снижают общей положительной оценки работы.

Результаты, полученные Ридным Я.М., представляются достоверными, поскольку в диссертации использовался современный наиболее точный полно-потенциальный линейный метод присоединенных плоских волн, реализованный программным пакетом WIEN2k. Полученные результаты неоднократно докладывались на международных и всероссийских конференциях. По материалам диссертации опубликовано 12 статей в российских научных журналах, рекомендованных ВАК.

По актуальности проблемы, объему и научному уровню выполненных исследований, представленная диссертационная работа «Взаимодействие примесей углерода в железе: ab initio моделирование» удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор Ридный Ярослав Максимович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Кулькова Светлана Евгеньевна
доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник

Бакулин Александр Викторович
кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник

Лаборатории физики нелинейных сред
Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук
634055, г. Томск, пр. Академический 2/4
(3822) 49-18-81, root@ispms.tomsk.ru, www.ispms.ru

11.11.2019



«30.11.2019» УЧЕНЫЙ
СЕКРЕТАРЬ ИФМ СО РАН
Ю. М. ВАГИНА

Согласна на включение в аттестационное дело и дальнейшую обработку моих персональных данных, необходимых для процедуры защиты диссертации Ридного Ярослава Максимовича, исходя из нормативных документов Правительства, Минобрнауки и ВАК, в том числе на размещение их в сети Интернет на сайте ЮУрГУ, на сайте ВАК, в единой информационной системе.

Кулькова Светлана Евгеньевна
профессор, доктор физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния,
главный научный сотрудник
Лаборатории физики нелинейных сред
Института физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук
634055, г. Томск, пр. Академический 2/4
(3822) 49-18-81, root@ispms.tomsk.ru, www.ispms.ru



11.11.2019

Согласен на включение в аттестационное дело и дальнейшую обработку моих персональных данных, необходимых для процедуры защиты диссертации Ридного Ярослава Максимовича, исходя из нормативных документов Правительства, Минобрнауки и ВАК, в том числе на размещение их в сети Интернет на сайте ЮУрГУ, на сайте ВАК, в единой информационной системе.

Бакулин Александр Викторович
кандидат физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния,
научный сотрудник
Лаборатории физики нелинейных сред
Института физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук
634055, г. Томск, пр. Академический 2/4
(3822) 49-18-81, root@ispms.tomsk.ru, www.ispms.ru



11.11.2019



«ИФПМ СО РАН»
УЧЕНЫЙ
АЛЕКСАНДР В. БАКУЛИН
ПОДПИСЬ

