

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Ридного Ярослава Максимовича
«Взаимодействие примесей углерода в железе: ab initio моделирование»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 01.04.07 – Физика
конденсированного состояния.

Актуальность темы исследования.

Диссертационная работа Ридного Я.М. посвящена изучению взаимодействия между атомами углерода в железе, а также оценке влияния на это взаимодействие легирующих примесей. Актуальность тематики исследования обусловлена тем, что углерод является одним из самых распространенных атомов внедрения в сплавах на основе железа. Мартенситное превращение в системе железо-углерод является одним из основных способов достижения высокой прочности конструкционных материалов на основе железа («закалка» стали). Помимо углерода в сталях присутствует ряд других элементов, которые добавляют для улучшения характеристик сталей, например кремний. Понимание особенностей взаимодействия и упорядочения атомов углерода в различных решетках железа является критически важным для современных металлургических технологий, а также представляет интерес с фундаментальной точки зрения. Так чистое железо является «классическим» объектом исследования в теории магнетизма и изменение его магнитных свойств при различных модификациях привлекает значительное внимание исследователей.

В работе использовались современные численные методы теории функционала электронной плотности для расчёта атомной и электронной структуры материалов. Такой подход для моделирования физических свойств материалов интенсивно развивался в последние годы и широко используется в физике конденсированного состояния. Он не только дает возможность с хорошей точностью описывать известные экспериментальные данные, но и, что представляет особенный интерес, прогнозировать новые технологически важные фазы материалов. Применение численных методов теории функционала электронной плотности в рецензируемой работе позволило изучить параметры межатомных взаимодействий, которые с большим трудом могут быть оценены из экспериментальных данных.

Структура и содержание диссертации.

Диссертационная работа, объемом 129 страниц машинописного текста, состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 130 наименований. Автореферат корректно воспроизводит основные результаты диссертации, опубликованные работы отражают содержание диссертации. Диссертация является завершённым научным исследованием, в ней обоснована постановка задачи, выбор методов исследования, ясно изложены основные результаты, приведено сравнение с известными литературными данными и чётко сформулированы положения, выносимые на защиту.

Во введении обоснована актуальность, научная и практическая ценность работы, обозначены цели исследования, сформулированы конкретные задачи диссертации, изложены положения, выносимые на защиту, и приводятся сведения об апробации работы, публикациях, структуре и объёме диссертации.

Глава 1 является литературным обзором. В ней представлено современное состояние проблемы экспериментальных и теоретических исследований взаимодействий углерод-углерод в различных фазах железа, а также влиянию на это взаимодействие примесей замещения. Обзор сделан квалифицированно, отражает существующий уровень исследований, позволил определить основные проблемы в выбранной тематике и сформулировать цели и задачи диссертационного исследования.

Глава 2 посвящена выбору численных методов для решения поставленных в диссертационном исследовании задач. Описан использованный программный комплекс для моделирования физических свойств материалов WIEN2k и методика проведения численных экспериментов. Изложен принцип проведения расчетов и выбор параметров моделирования, которые влияют на точность и время сходимости расчетов.

Глава 3 посвящена расчёту энергий растворения углерода, а также энергии взаимодействия пар углерод-углерод в различных координационных сферах в ОЦК- и ОЦТ-решётках железа. В работе было учтено множество факторов, влияющих на результаты первопринципных расчетов, такие как размер суперячейки, количество k-точек и т.д. Проведены тестовые расчёты параметров решётки, магнитных моментов и энергий растворения углерода в ОЦК- и ОЦТ-железе. Согласие с экспериментальными

работами и работами других авторов, позволяет сделать вывод о достоверности результатов, получаемых при помощи выбранной автором методики.

Глава 4 посвящена расчёту энергий растворения углерода, а также энергии взаимодействия пар углерод-углерод в различных координационных сферах ГЦК-железа в неупорядоченном магнитном состоянии. Автором был разработан программный комплекс для проведения расчетов методом Монте Карло, что позволило изучить влияние параметров взаимодействия углерод-углерод на ход концентрационной зависимости активности углерода.

Глава 5 посвящена моделированию взаимодействия атомов углерода с кремнием в ОЦК-железе. Определены критические конфигурации, в которых кремний значительно изменяет взаимодействие между атомами углерода. Также на всех этапах модификации исходной матрицы железа автор отслеживает изменение магнитных свойств системы через расчет атомных магнитных моментов.

Замечания по диссертации. В диссертационной работе имеются следующие недостатки:

1. В исследовании автор использует современные численные методы первопринципного моделирования для изучения взаимодействий между атомами углерода в железе. В принципе такой подход дает возможность исследователю проводить микроскопический анализ электронной структуры и различных видов взаимодействий на уровне отдельных орбитальных состояний отдельных атомов. В простейшем случае это можно сделать через анализ парциальных плотностей состояний. Недавно в работе [Phys. Rev. Lett. 116 (21), 217202 (2016)] было показано, что даже в чистом железе наблюдается очень богатая орбитальная физика - t_{2g} и e_g состояния атомов железа демонстрируют совершенно разную степень локализации. Это, в свою очередь, находит отражение в различном вкладе этих орбитальных состояний в магнитные свойства железа. К сожалению, автор диссертации ограничивается анализом результатов на уровне атомов. Вместе с тем важно было проанализировать изменения, происходящие в 3d оболочке железа при внедрении примесей углерода.

2. Значительное внимание в диссертации уделяется моделированию парамагнитной фазы железа. Автор проводит анализ предыдущих первопринципных исследований и рассматривает различные сценарии магнитных конфигураций, симулирующих неупорядоченное магнитное состояние в железе. Однако, всё рассмотрение происходит в рамках одночастичных подходов, основанных на теории функционала электронной плотности. Вместе с тем парамагнитное состояние является многочастичным по своей природе и для его моделирования необходимо применение соответствующих численных подходов, таких как теория динамического среднего поля. К сожалению, это не обсуждается в данной работе. Симуляции парамагнитной фазы чистого железа при помощи такого подхода посвящено довольно большое число статей (например, [Phys. Rev. B 94 161117 (2016); Phys. Rev. B 96, 075108 (2017)] и др.).

3. Согласно тексту диссертации автором проводилось моделирование 16 различных антиколлинеарных магнитных конфигураций для симуляции неупорядоченного состояния железа. Визуализация и анализ этих структур в работе отсутствует, что не позволяет определить различия между ними. В чём отличие между этими конфигурациями на уровне электронной структуры? Также отсутствует обсуждение, почему при моделировании неупорядоченной фазы не рассматривались неколлинеарные магнитные структуры.

4. С моей точки зрения любая научно-исследовательская работа должна быть не только направлена на объяснение существующих экспериментальных данных, но и также обладать «предсказательной силой». Например, может ли автор на основе большого числа смоделированных конфигураций атомов углерода в железе выделить те, которые могут быть интересны с технологической точки зрения.

Также у меня есть ряд замечаний по оформлению работы:

А. Автор в ряде случаев использует неудачное (громоздкое) представление результатов. Например, подписи осей ординат на рисунках 3.1, 3.3 и др. содержат большие числа, которые представляют собой минимальную энергию моделируемой системы, что можно было бы указать в подписи к рисунку.

В. Есть неудачные формулировки, «атом углерода расталкивает атомы железа».

С. В работе отсутствуют цветные рисунки. Хотя восприятие и анализ графиков, таких как 4.9, 4.10 и 4.11, были бы гораздо проще для рисунков в цвете.

Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным «Положением о порядке присуждения ученых степеней».

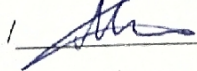
Указанные недочеты не снижают высокой оценки научной новизны и практической ценности работы, не ставят под сомнение результаты исследования и выводы, сформулированные по результатам диссертационного исследования. Диссертационная работа Я.М. Ридного написана хорошим научным языком, легко читается и является законченной научно-квалификационной работой, которая может рассматриваться как решение актуальной научной задачи, имеющей важное значение для физики твердого тела и физического металловедения сталей. Все положения и выводы диссертации четко сформулированы и достаточно строго обоснованы. Диссертация соответствует паспорту специальности 01.04.07, в частности пунктам 1 и 5. Автореферат правильно отражает содержание диссертации.

Диссертационная работа отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертации на соискание учёной степени кандидата наук, которые сформулированы в критериях п. II п.п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК РФ, а её автор, Ридный Ярослав Максимович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Согласен на обработку персональных данных.

Официальный оппонент, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедры «Теоретической физики и прикладной математики» ФГАОУ ВО «Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», ул. Мира, 19, г. Екатеринбург, 620002.

Сл. Тел. 8(343) 375-95-42; e-mail.ru: v.v.mazurenko@urfu.ru.

/  /

(подпись)

Мазуренко Владимир Владимирович

(расшифровка подписи)

Подпись Мазуренко Владимира Владимировича заверяю

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
УРФУ
МОРОЗОВА В. А.



(расшифровка подписи)

Дата «__» 18 НОЯ 2019 2019 г.