

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.

Фазовые превращения, и в частности мартенситный переход, в твердых растворах внедрения железо-углерод являются одним из важнейших направлений исследований в физике металлов, поскольку данные растворы являются основой производства важнейших конструкционных сплавов и сталей. Однако, до сих пор остается невыясненным влияние растворенных в железе атомов углерода на развитие мартенситного перехода (имеющего бездиффузионный, кооперативный характер) или «промежуточного» бейнитного превращения. При этом большую роль в данных превращениях играет взаимодействие в углеродной подрешетке. Изучение этого взаимодействия прямыми экспериментальными методами не привело к успеху, поэтому в настоящее время эту проблему пытаются решить методами компьютерного моделирования. В свете этого рецензируемая работа, посвященная изучению взаимодействия между примесями углерода в ОЦК и ГЦК решетках, безусловно, является актуальной. Автор работы применяет для решения поставленной задачи современные методы первопринципного моделирования, позволяющие достаточно надежно вычислить полную энергию системы для различных степеней структурного и магнитного порядка. При этом используется хорошо опробованный и широко применяемый в мире программный пакет WIEN-2k.

В мировой литературе имеется значительное количество первопринципных расчетов энергии взаимодействия углерод-углерод в отдельных фазах, однако для изучения фазовых превращений очень важно иметь расчетные значения для разных фаз, выполненные в рамках одного пакета с одинаковой точностью вычислений. Именно это обстоятельство определяет новизну и значимость проделанной работы. Полученные автором результаты могут быть использованы для построения уточненных термодинамических моделей твердых растворов Fe-C, пригодных для описания разнообразных фазовых превращений. Полученные данные о влиянии кремния на свойства системы ОЦК Fe-C важны также для разработки научных основ теории перспективных бескарбидных бейнитных сталей. Это свидетельствует о **новизне и практической значимости** диссертационной работы.

Диссертационная работа Ридного Я.М. содержит 129 страниц и состоит из введения, пяти глав, заключения и библиографического списка (130 наименований).

Во введении обоснована актуальность, научная и практическая значимость работы, обозначены цели исследования, сформулированы конкретные задачи, изложены положения, выносимые на защиту, и приводятся сведения об апробации работы, публикациях, структуре и объёме диссертации. По этим пунктам замечаний нет, они адекватно отражают мировой уровень исследований в данной области и соответствуют фактическому содержанию работы и публикациям автора.

Первая глава - обзорная. В ней изложено современное состояние исследований растворимости и взаимодействий углерод-углерод в различных фазах железа, а также влиянию на это взаимодействие примесей замещения. Обзор адекватно отражает существующий уровень исследований и позволяет обозначить наиболее существенные проблемы, сформулировать цели и задачи диссертационного исследования.

Вторая глава посвящена выбору методов исследования. В данной главе описан использованный программный пакет моделирования WIEN2k и методика проведения расчетов. Изложены технические детали расчетов и выбор параметров моделирования, которые влияют на точность и время достижения сходимости результатов.

Третья глава посвящена расчёту энергетических параметров взаимодействия углерод-углерод в различных координационных сферах в ОЦК- и ОЦТ-решетках железа. В работе были учтены практически все факторы, влияющие на качество результатов, 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, говорит о достоверности выбранной автором методики моделирования.

Четвёртая глава посвящена расчёту энергетических параметров взаимодействия углерод-углерод в различных координационных сферах ГЦК-железа. Среди полученных результатов хотелось бы особо отметить расчет энергии углерод-углерод взаимодействия в парамагнитном состоянии, которое моделировалось случайным распределением магнитных моментов в SQS приближении. Кроме того, автором была написана компьютерная программа, реализующая моделирование конфигурационной энергии твердого раствора методом Монте-Карло, которая позволила изучить влияние энергий взаимодействия между атомами углерода на ход концентрационной зависимости активности в хорошем согласии с экспериментом.

Пятая глава посвящена моделированию взаимодействия атомов углерода с кремнием в ОЦК-железе. В данной главе впервые показано влияние кремния на взаимодействие между атомами углерода в ОЦК-железе. Показано, что кремний сильно изменяет взаимодействие между атомами углерода, если он находится вблизи них. Полученный результат представляет интерес в контексте влияния легирующих элементов на термодинамику твердых растворов на основе Fe-C.

Замечания по диссертации. По диссертационной работе имеются следующие вопросы и замечания:

1. В таблице 3.6 приведены значения энергий взаимодействия до 11-й координационной сферы. Помещаются ли столь дальние взаимодействия в расчетной ячейке из 54 атомов? И принималось ли во внимание наличие вкладов во взаимодействие от фиктивных атомов, возникающих вследствие периодических граничных условий. Такой же вопрос относится и результатам расчетов взаимодействия атомов углерода в 32-атомной ячейке (таблица 4.7).
2. В таблице 3.3 приведены энергии растворения углерода в ОЦТ железе. Однако не ясно, как определялась и чем обусловлена величина тетрагональности ОЦТ железа. Позже, при обсуждении результатов, представленных в таблице 3.7, величина тетрагональности рассчитывалась путем помещения в расчетную ячейку пары атомов углерода. В таком случае, энергия растворения углерода в ОЦТ железе должна включать и взаимодействие с другими атомами углерода.
3. В главе 5 обсуждается влияние Si на взаимодействие между атомами углерода. Однако остался не ясным вопрос о возможности реализации и устойчивости рассматриваемых конфигураций, если энергии взаимодействия Si-C положительны.
4. В разделе 4.2 говорится, что «в работе [68] аппроксимация производилась, также, как и в нашей работе уравнениями Мурнагана». Не ясно, об аппроксимации какой величины идет речь. Уравнения Мурнагана используются для описания термодинамики, а данном разделе речь идет о деталях расчета и выборе сетки k-точек (число которых $12 \times 12 \times 12$, пожалуй, уж очень велико).

Заключение

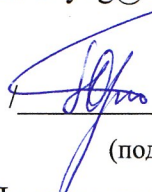
Указанные замечания не влияют на общую высокую оценку диссертационной работы, выполненной автором самостоятельно на высоком научном уровне с применением современных методов исследований. Диссертация является законченной научно-квалификационной работой, которая может рассматриваться как решение

актуальной научной задачи, имеющей важное научное и практическое значение. Работа апробирована на целом ряде российских и международных конференций. По результатам работ опубликовано большое число статей в рецензируемых журналах из перечня ВАК. Все положения и выводы диссертации чётко сформулированы и достаточно строго обоснованы. Диссертация соответствует паспорту специальности 01.04.07, в частности пунктам 1 и 5. Автореферат правильно отражает содержание диссертации.

Представленная работа отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертации на соискание учёной степени кандидата наук, которые сформулированы в п.9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, а её автор, Ридный Ярослав Максимович, заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией цветных сплавов ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, г. Екатеринбург, 620990.

Сл. Тел. 8(343) 378-35-21; e-mail.ru: yug@imp.uran.ru



(подпись)

/ Горностырëв Юрий Николаевич

(расшифровка подписи)

Подпись Горностырëва Юрия Николаевича заверяю

и.о. уч. секр.



(подпись)

Гудина С.В.

(расшифровка подписи)

Дата «17» ноября 2019 г.

