

ОТЗЫВ

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

Значение любых работ, посвященных изучению строения и свойств сплавов железа с углеродом, не нуждается в обосновании. Именно в последние годы эти исследования получили новый импульс, который связан с появлением возможности проведения первопринципных расчетов, использующих профессионально подготовленные программные пакеты. Однако, за исключением работы Н Ohtsuka и др. 2015 года, для решения проблемы взаимодействия атомов углерода в железе эти расчеты не проводились. В отличие от авторов указанной работы, Я.М.Ридный не использует псевдопотенциальное приближение, а оперирует всеми электронами рассматриваемых атомов. В этом рецензент видит существенный вклад диссертанта в развитие как техники первопринципных расчетов, так и научных представлений о поведении углеродных атомов в сталях.

Судя по тексту автореферата, Я.М.Ридный разработал авторскую методику первопринципного моделирования с использованием современного пакета компьютерных программ WIEN2k, разработал и реализовал оригинальную программу расчета активности углерода в различных кристаллических решетках железа методом Монте-Карло. Это свидетельствует о том, что вычислительная квалификация диссертанта вполне соответствует ученой степени, на которую он претендует.

В числе наиболее интересных, с моей точки зрения, результатов проведенного исследования выделяю:

- установление факта взаимного отталкивания атомов углерода в ГЦК-железе, наиболее ярко проявляющееся во второй координационной сфере;
- доказательство независимости результатов расчета активности углерода в γ -железе от вида потенциала взаимодействия между его атомами;
- влияние кремниевых атомов на магнитные моменты атомов железоуглеродных сплавов и через него – на взаимодействие атомов углерода между собой.

По автореферату Я.М.Ридного у рецензента есть некоторые вопросы и критические замечания:

- имеются ли у диссертанта какие-либо соображения по поводу причин того, что взаимное отталкивание атомов углерода наиболее сильно именно во второй координационной сфере?
- из текста автореферата не ясно, на какой вычислительной технике и где проводились расчеты диссертанта;

- на стр.3. приводится ряд элементарных и общеизвестных положений физики растворов железа, которые, по моему мнению, не стоило приводить, учитывая ограниченный объем автореферата.

Подводя итог анализу автореферата, отмечу, что к защите представлены результаты весьма глубокого исследования актуальной научной темы, выполненного на высоком профессиональном уровне. В работе получен ряд новых научных выводов, которые можно считать существенным вкладом в физику конденсированного состояния. Они хорошо апробированы на международных и российских конференциях и достаточно полно представлены в публикациях диссертанта и его сотрудников.

Полагаю, что работа «Взаимодействие примесей углерода в железе: ab initio моделирование» соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Постановлением правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г. (в ред. от 28.08.2017 г.), а ее автор Ридный Ярослав Максимович вполне заслуживает присуждения искомой ученой степени.

Профессор кафедры физики, технологии
и методики преподавания физики и технологии,
Уральского государственного педагогического
университета, заслуженный деятель науки РФ,
профессор, доктор физико-математических наук
по специальности 01.04.14 - Теплофизика и
теоретическая теплотехника
Попель Петр Станиславович.
Адрес организации: Екатеринбург,
620017, пр. Космонавтов, 26,
Тел.: 922 204 44 22,
e-mail: pspopel@mail.ru



20 ноября 2019 г.

Автор отзыва согласен на обработку персональных данных



Подпись П. С. Попель
Заверено инсп. ОК УрГПУ

