

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

В физике конденсированного состояния имеются задачи, решение которых выходят за пределы возможностей современного эксперимента. К таким задачам относится установление механизма взаимодействия атомов примесей в кристаллической матрице. Применение компьютерного моделирования здесь становится необходимым. Особенно важно первопринципное решение таких задач. Считаю, что представленная диссертационное исследование Ридного Я.М. безусловно актуально. Для решения поставленных задач автор применил наиболее корректные методы, что обеспечило надежность и достоверность полученных результатов. Научная новизна работы заключена в установлении ряда важных факторов взаимного влияния атомов углерода, таких как «отталкивательный характер», «сопоставимость химического вклада с деформационным»; зависимость этого взаимодействия от наличия атомов кремния в матрице железа.

Результаты работы «Взаимодействие примесей углерода в железе: *ab initio* моделирование» широко обсуждены на профильных представительных международных и отечественных конференциях.

Весомость полученных данных подтверждается публикациями в работах индексируемых в Scopus и Web of Science.

По автореферату диссертации имеется ряд вопросов и замечаний.

Вопросы

1. Критерий отрелаксированности моделируемым ячеек. Каков он?
2. Как по расчетам *ab initio* оценивалась активность? (в реферате этому уделено большое внимание)
3. Можно ли более подробно разъяснить утверждение «взаимодействие между примесями углерода носит упругий, а значит дальнедействующий характер».

Замечания

Стр.4. Не понятно предложение «Аналогичное моделирование проведено также для двух антиферромагнитных структур, приводят к значительной ошибке».

Стр. 12. «Высокая точность пакета WIEN2k ограничила наши возможности ячейкой из 54 атомов».

Наверное, ограничение связано с имеющейся у Вас вычислительной техникой?

Стр. 16. «Из таблицы 4 видно, что кремний существенно изменяет взаимодействие между атомами углерода...» и далее «... обнаружили, что природа взаимодействия кремния на взаимодействие углерод-углерод связана с изменением магнитных моментов на атомах железа».

Но это говорит только о взаимодействии атомов кремния с атомами железа, а не углерода.

Указанные замечания не снижают общей высокой оценки работы.

Считаю, что диссертация отвечает требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Ридный Ярослав Максимович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

P.S. Согласен на обработку моих персональных данных

Доктор технических наук по специальности
02.00.04 -Физическая химия,
Профессор кафедры физики
Курганского госуниверситета

15.11.2019



Воронцов Борис Сергеевич

640020, г. Курган, ул. Советская, 63, стр. 4. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Курганский государственный университет"

т. 8 (3522) 65-49-33

e-mail: fizika@kgsu.ru

Подпись заверяю

Зав. канцелярией

Курганского госуниверситета

М.А. Козлова