

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.298.04, СОЗДАННОГО
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ЮЖНО-
УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело №

решение диссертационного совета от 18.12.2019 № 30

О присуждении Ридному Ярославу Максимовичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Взаимодействие примесей углерода в железе: ab initio моделирование» по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния» принята к защите 16 октября 2019 г., протокол №30П диссертационным советом Д 212.298.04, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, приказ № 105/нк от 11.04.2012.

Соискатель Ридный Ярослав Максимович 1991 года рождения, в 2014 году окончил с отличием Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет) по направлению «Прикладные математика и физика».

С 1 сентября 2014 г. по 31 августа 2018 г. обучался в очной аспирантуре Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)». В настоящее время работает ассистентом на кафедре оптоинформатики в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Министерство науки и высшего образования РФ.

Диссертация выполнена на кафедре физики наноразмерных систем в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Министерство науки и высшего образования РФ.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Мирзоев Александр Аминулаевич, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», кафедра физики наноразмерных систем, профессор.

Официальные оппоненты:

Горностырёв Юрий Николаевич, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики металлов имени М. Н. Михеева» Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, заведующий лабораторией цветных сплавов;

Мазуренко Владимир Владимирович, доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина», г. Екатеринбург, заведующий кафедрой теоретической физики и прикладной математики.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург в своем положительном отзыве, подписанном Анатолием Аркадьевичем Юрьевым, кандидатом физико-математических наук, старшим научным сотрудником, старшим научным сотрудником лаборатории порошковых, композиционных и наноматериалов и утвержденном директором, член-корр. РАН, доктором физико-математических наук, профессором Ремпелем Андреем Андреевичем, указала, что в целом диссертация отвечает квалификационным требованиям, установленным в п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор Ридный Ярослав Максимович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 26 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 26 работ, из них в рецензируемых научных изданиях, входящих в перечень ВАК, опубликовано 12 работ, из них 4 работы опубликованы в журналах, индексируемых Scopus и Web of Science.

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК:

1. Ридный, Я.М. Ab-initio моделирование влияния ближнего окружения примесей углерода на энергию их растворения в ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2013. – Т.5. – №2. – С. 108–116.
2. Ридный, Я.М. Ab-initio моделирование энергии растворения атома углерода в парамагнитном ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2014. – Т.6. – №3. – С. 86–91.
3. Ридный, Я.М. Расчёт из первых принципов энергий взаимодействия между атомами углерода в антиферромагнитном двухслойном ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2014. – Т.6. – №4. – С. 53–58.
4. Ридный, Я.М. Примеси углерода в парамагнитном ГЦК-железе: ab-initio моделирование энергетических параметров / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2015. – Т.7. – №2. – С. 56–63.
5. Ридный, Я.М. Влияние энергий взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе на концентрационную зависимость активности углерода / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Metallurgy. – 2016. – Т.16. – №3. – С. 24–31.
6. Ридный, Я.М. Определение оптимальных параметров моделирования для максимально точных расчётов энергий в ОЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2016. – Т.8. – №4. – С. 63–69.
7. Ридный, Я.М. Примеси кремния в ОЦК-железе: ab-initio моделирование свойств и энергетических параметров / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Metallurgy. – 2017. – Т.17. – №3. – С. 46–53.
8. Ридный, Я.М. Монте-карло моделирование активности углерода в ОЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Metallurgy. – 2018. – Т.18. – №4. – С. 28–33.

Публикации в изданиях, индексируемых базами данных Scopus и Web of Science :

9. Ридный, Я.М. Ab initio моделирование энергии растворения и активности углерода в ГЦК-Fe / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Физика твёрдого тела. – 2017. – Т.59. – №7. – С. 1255–1260.

10. Ридный, Я.М. Взаимодействие между атомами углерода и активность углерода в ГЦК-железе: термодинамические теории и компьютерное моделирование / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, В.М. Счастливцев, Д.А. Мирзаев // Физика Металлов и Металловедение. – 2018. – Т.119. – №3. – С. 264–270.

11. Ридный, Я.М. Первопринципное компьютерное моделирование энергетических параметров и магнитных эффектов в тройной системе Fe-Si-C / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Известия вузов. Физика. – 2018. – Т.61. – №2. – С. 34–38.

12. Ридный, Я.М. Первопринципное компьютерное моделирование взаимодействия атомов углерода на различных расстояниях в ОЦК- и ОЦТ-решетках феррита и мартенсита / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, В.М. Счастливцев, Д.А. Мирзаев // Физика Металлов и Металловедение. – 2018. – Т.119. – №6. – С. 611–617.

На диссертацию и автореферат поступило 9 отзывов (все положительные):

1. Доктора технических наук, профессора кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования “Курганский государственный университет”, Воронцова Бориса Сергеевича: 1) Критерий отрелаксированности моделируемых ячеек. Каков он? 2) Как по расчётам *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 дальнодействующий характер». 4) Стр. 4 Не понятно предложение «Аналогичное моделирование проведено также для двух антиферромагнитных структур, приводит к значительной ошибке». 5) Стр.12 «Высокая точность пакета WIEN2k ограничила наши возможности ячейкой из 54 атомов». Наверное ограничение связано с имеющийся у вас вычислительной техникой? 6) 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».

2. Доктора технических наук, профессора, главного научного сотрудника Института металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины, Гаврилюка Валентина Геннадиевича без замечаний.

3. Доктора физико-математических наук, профессора, профессора кафедры Металловедения цветных металлов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС"», Головина Игоря Станиславовича: 1) Использован малый размер модельной ячейки, что ограничивает дальность взаимодействия. Кроме того, следовало бы сравнить полученные результаты по взаимодействию С в ОЦК железе с первопринципными расчётами О и N в других ОЦК металлах (V, Nb, Ta), а результаты расчётов для Fe-C-Si, например, с Fe-C-Al системой. Такие работы имеются в литературе. 2) Вызывает нарекания использованная диссертантом терминология, которая заметно отличается от общепринятой в материаловедении. Например: а) Кремний в сплавах системы Fe-Si-C не является примесью, это легирующий элемент (в цели работы); «Провести оценку влияния легирующих примесей» (4я задача); «Сплавы допированные различными примесями» (актуальность работы). Легируют (или допируют – заимствованный термин из английского языка соответствующий, как правило, микролегированию) сплавы направленно, с целью сознательного изменения их свойств легирующими элементами, а не примесями. Примесь – это химический элемент, перешедший в сплав в процессе его производства как технологическая добавка или как составляющая шихтовых материалов. В работе эти понятия смешаны. б) Текст автореферата местами трудночитаем из-за утверждений типа «содержащийся в стали углерод приводит к возникновению мартенситного превращения», «прямым компьютерным экспериментом», «аналогичное моделирование ...», приводят к значительной ошибке» (1 пункт научной новизны), «использование достаточно надёжных ... методов» (достаточных для чего и для кого?) и др. С учётом растворимости С в феррите и аустените термин «упорядочение атомов углерода в оцк и гцк железе» требует пояснения, также, как и существование «теории Зинера - Хачатуряна» (в том числе в выводе 1) нуждается в пояснении.

4. Кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника МНИЦТМ Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования Самарский национальный исследовательский университета им. акад. С.П. Королева, Гурской Альбины Валентиновны: 1) Расчёт магнитных состояний в теории функционала плотности имеет принципиальную трудность, что связано с особенностью задания магнитных моментов. Вдобавок к этому, при попытке реализации различных магнитных состояний для расчёта требуется перебор некоторого числа различных конфигураций с различными

комбинациями магнитных моментов. Такая же проблема встаёт и в немагнитных расчётах при внедрении чужеродного атома в состав первоначальной ячейки, когда способов внедрения этого атома может оказаться больше, чем доступно для дальнейших расчётов. В автореферате не указано, сталкивается ли автор с данной проблемой и как она решается.

5. Доктора физико-математических наук, профессора, главного научного сотрудника лаборатории физики нелинейных сред Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Кульковой Светланы Евгеньевны и кандидата физико-математических наук, научного сотрудника лаборатории физики нелинейных сред Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Бакулина Александра Викторовича: 1) 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. 2) В автореферате не приводятся детали расчёта активности углерода.

6. Доктора технических наук, доцента, профессора кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет гражданской авиации», Капуткина Дмитрия Ефимовича: 1) Не показаны преимущества предложенной автора модели по отношению к другим для ОЦК железа. 2) И для ОЦК, и для ГЦК железа приведены результаты расчётов зависимости активности углерода от его концентрации в твёрдом растворе только при одной температуре (1000 К для ОЦК и 1423 К для ГЦК).

7. Доктора физико-математических наук, профессора, профессора кафедры физики, технологии и методики преподавания физики и технологии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уральский государственный педагогический университет», заслуженного деятеля науки РФ, Попеля Петра Станиславовича: 1) Имеются ли у диссертанта какие-либо соображения по поводу причин того, что взаимное отталкивание атомов углерода наиболее сильно именно во второй координационной сфере? 2) Из текста автореферата не ясно, на какой вычислительной технике и где проводились расчёты диссертанта. 3) На стр. 3 приводится ряд элементарных и общеизвестных положений физики растворов железа, которые, по моему мнению, не стоило приводить, учитывая ограниченный объём автореферата.

8. Доктора физико-математических наук, профессора кафедры математики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Вологодский государственный университет», Большова Леонида Авраамовича и кандидата физико-математических наук, доцента кафедры физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Вологодский государственный университет», Корнейчук Светланы Константиновны: 1) Диссертант подчёркивает первопринципность представленных расчётов. Хотя уравнение Шрёдингера и распределение Гиббса безусловно первопринципны, но в расчётах электронной теории сплавов на эту первопринципность нанизываются различные частные модели и приближения. Это следовало бы отметить в работе. 2) Термодинамическая активность углерода в аустените рассчитана диссертантом методом Монте-Карло. Нам кажется, что эти расчёты проще было сделать с помощью микрокалькулятора, используя разложение логарифма коэффициента активности углерода в ряд по степеням концентрации и усечение этого ряда с удержанием линейного и квадратичного членов. 3) На стр.7 автореферата диссертант утверждает, что наиболее достоверным методом определения потенциалов взаимодействия между атомами углерода в сплавах железа является атомистическое компьютерное моделирование на основе теории функционала плотности. Это утверждение представляется нам слишком оптимистичным. Метод функционала электронной плотности использует волновые функции электронов в атоме, определённые для основного состояния. Поэтому результаты расчётов по этой теории относятся к основному состоянию системы, то есть к температуре $T=0$ К. Поэтому применение теории к конечной температуре рассчитано на большую, но не очень обоснованную удачу. 4) Не исследован вопрос о том, как размер суперячейки в компьютерных расчётах влияет на достоверность результатов.

9. Доктора физико-математических наук, профессора, профессора кафедры общей физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет», Самсонова Владимира Михайловича: 1) В п.2 раздела «Научная новизна» и в описании главы 3 диссертации говорится об обнаружении эффекта отталкивания между атомами углерода, расположенными во второй координационной сфере ГЦК-железа. Обычно силы отталкивания проявляются только на малых расстояниях, т.е. между ближайшими соседями. Можно ли понимать так, что эти силы действуют между любыми атомами во второй координационной сфере, независимо от расстояния между ними? Можно ли утверждать, что речь идёт о реальных

силах отталкивания или же это, скорее, формальный положительный вклад $\Delta E(C-C)$, который даёт адекватное значение энергии связи системы?

2) В п.5 раздела “Научная новизна” говорится о прямом компьютерном эксперименте. Не понятно, какой смысл вкладывается в этот термин, т.е. в чём суть отличия прямого компьютерного эксперимента от косвенного.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что оппоненты и ведущая организация являются специалистами, работающими в области, близкой к теме диссертации, что подтверждается их публикациями.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований: разработана единая методика проведения компьютерного моделирования взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-, ОЦТ- и ГЦК-фазах железа методом теории функционала плотности; **доказана** важность учета С-С взаимодействия вплоть до четвертой координационной сферы для перенасыщенных растворов углерода в ОЦК-железе; **доказано**, что примесь кремния существенно изменяет взаимодействие между ближайшими к ней атомами углерода; **предложена** гипотеза о природе влияния кремния на взаимодействие пары углерод-углерод; **доказано**, что одну и ту же кривую активности углерода в ОЦК-железе можно получить, используя различные потенциалы взаимодействия между атомами углерода.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что: применительно к проблематике диссертации результативно использован подход к расчету углерод-углеродного взаимодействия в различных фазах железа на основе теории функционала плотности, который позволил существенно детализировать понимание природы указанного взаимодействия; **проведен расчёт** энергетических параметров взаимодействия пары углерод-углерод в различных фазах железа на различных расстояниях между ними; **изучено** влияние примесей замещения (на примере кремния) на углерод-углеродное взаимодействие в сплавах железа; **доказаны** основные положения теории мартенситного превращения Хачатуряна, связанные с тетрагональным искажением атомами углерода ОЦК решётки железа и влияния этого искажения на энергию различных конфигураций пары атомов углерода; **изложены** результаты об ослаблении примесью кремния С-С взаимодействия в железе, которые могут частично объяснить задержку кремнием распада пересыщенного углеродом ОЦК раствора железа с выделением карбидов железа.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что: в работе **определены** энергетические параметры, которые позволяют существенно увеличить достоверность моделирования упорядочения углерода в феррите, мартенсите и аустените; **представлены** данные о влиянии кремния на энергии взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-железе, которые важны для разработки современного поколения бескарбидных бейнитных сталей.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что: теория построена на использовании надёжных и апробированных методов исследования кристаллических структур; **проведена** оптимизация параметров программного пакета WIEN-2k для получения требуемой точности моделирования энергетических параметров; **установлено**, что ряд полученных в диссертации результатов согласуется с опубликованными ранее данными ведущих отечественных и зарубежных авторов о параметрах взаимодействия между атомами углерода в решётке железа; **выводы** диссертации обоснованы и согласуются с современными представлениями об упорядочении углерода и механизме образования тетрагональности мартенсита.

Личный вклад соискателя состоит в: непосредственном участии в постановке задач исследования; тестировании и оптимизации параметров моделирования программного пакета WIEN-2k; в проведении расчётов из первых принципов параметров решетки и полной энергии систем железо-углерод; обработке и интерпретации расчётных данных; в апробации результатов исследования; написании основных публикаций по выбранной теме.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, основной идейной линии, и взаимосвязи выводов с целью работы. По своему содержанию диссертация отвечает паспорту специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния в частях 1 (теоретическое изучение физической природы свойств металлов и их сплавов), 5 (разработка математических моделей физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения, определение термодинамических свойств веществ).

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой содержится научно-обоснованное решение важной проблемы

физики конденсированного состояния – определение энергии взаимодействия углерод-углеродных пар, находящихся на различных расстояниях друг от друга в различных фазах железа, и оценка влияния на их взаимодействие примесей замещения. В целом диссертация отвечает квалификационным требованиям, установленным в п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор Ридный Ярослав Максимович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

На заседании 18 декабря 2019 г. диссертационный совет принял решение присудить Ридному Ярославу Максимовичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 29 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 32 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 29, против «нет», недействительных бюллетеней «нет».

Председатель диссертационного совета,
Д 212.298.04 при ФГАОУ ВО «ЮУрГУ
(НИУ)» чл. корр. РАН, доктор химических
наук, профессор

 Г.П. Вяткин

Ученый секретарь диссертационного совета,
Д 212.298.04 при ФГАОУ ВО «ЮУрГУ
(НИУ)», кандидат физико-математических
наук, доцент

 С.И. Морозов

Дата оформления заключения «18» декабря 2019 г.