

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации П.В. ЧИРКОВА "Компьютерное моделирование перераспределения углерода в решетке мартенсита Fe-C при выдержке и нагружении», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа П.В. ЧИРКОВА посвящена классической, но не теряющей своей актуальности проблеме мартенситного перехода в сталях. Автором разработана оригинальная методика молекулярно-динамического моделирования переупорядочения углерода и связанного с ним тетрагонального искажения ОЦК решетки железа при изотермических выдержках (отпуске) мартенсита и под воздействием одноосных напряжений. Расчеты с использованием потенциалов межчастичного взаимодействия погруженного атома позволили промоделировать фазовый переход II рода из тетрагональной в кубическую фазу мартенсита в хорошем согласии с феноменологической теорией Зинера-Хачатуряна. Впервые получена концентрационная и температурная зависимость критического значения одноосного напряжения, перебрасывающего ось тетрагональности мартенсита.

Модельные расчеты соискателя дополнены анализом имеющихся теорий упорядочения углерода в железе, что также дало новые важные результаты. Установленное автором дополнительное требование термодинамической устойчивости тетрагональной структуры значительно – в несколько раз – уменьшило оценку в рамках теории Зинера для величины критического напряжения, при котором происходит скачкообразное уменьшение параметра порядка до нуля. Еще более впечатляющий результат учета этого требования – демонстрация принципиальной ошибки в теории Хачатуряна для упорядочения кристалла в упругом окружении [А.Г. Хачатурян. Углерод в мартенсите стали. Несовершенства кристаллического строения и мартенситное превращение. М.: Наука, 1971]. Согласно теории Хачатуряна, наличие упругой среды вокруг кристалла аустенита должно приводить к исчезновению фазового перехода порядок-беспорядок и сохранению тетрагональности мартенсита при любых температурах. Соискатель устранил эту ошибку, которую никто не мог выявить более 45 лет.

Диссертационная работа П.В. ЧИРКОВА выполнена на высоком теоретическом уровне – как в отношении компьютерных расчетов, так и в аналитическом плане, и представляет собой законченное научное исследование. Новизна и научная значимость проведенных исследований не вызывают сомнений. Результаты диссертационной работы надежно апробированы. Они доложены на 9 российских и международных конференциях и опубликованы в 4 статьях в журналах из базы Web of Science.

Работа отвечает требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, П.В. ЧИРКОВ, заслуживает присуждения искомой

степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Заведующий лабораторией физики высоких давлений  
Института физики твердого тела РАН  
доктор физ.-мат. наук



В.Е. Антонов

142432 Черноголовка Московской обл.  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики твердого тела Российской академии наук  
Антонов Владимир Евгеньевич  
доктор физ.-мат. наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния  
+7 (496) 5224027  
[antonov@issp.ac.ru](mailto:antonov@issp.ac.ru)

Подпись В.Е. Антонова заверяю:

Ученый секретарь ИФТТ РАН  
доктор физ.-мат. наук



Г.Е. Абросимова

08.12.2017

Я согласен на обработку моих персональных данных.



В.Е. Антонов