

Отзыв

На автореферат диссертационной работы П.В. Чиркова «Компьютерное моделирование перераспределения углерода в решётке мартенсита Fe-C при выдержке и нагружении», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Представленная к защите кандидатская диссертация посвящена решению задачи, находящейся более полувека под пристальным вниманием исследователей и до сей поры не потерявшей своей актуальности, поскольку объект исследования, структура железоуглеродистого мартенсита, остаётся основой большого класса современных конструкционных материалов.

Причина столь длительного интереса заключается в сочетании фундаментальности вопроса о природе и характере размещения углерода в кристаллической решётке мартенсита и сложности самой задачи, решение которой требует постоянного совершенствования применяемых методов анализа.

Исследование, выполненное Павлом Владимировичем Чирковым, является весьма качественным приближением к пониманию механизма возникновения тетрагональности мартенсита и её изменения под влиянием содержания углерода, температуры и напряжённого состояния.

Поскольку *ab initio* расчеты, основанные на теории функционала локальной плотности, практически нереализуемы из-за ограничений, налагаемых большим объёмом подлежащих исследованию атомных кластеров и недостаточной мощностью компьютеров, автор удачно применил молекулярную динамику в сочетании с современной моделью погружённого атома, учитывающей электронный вклад в потенциал межатомного взаимодействия для железа.

Полученные результаты позволили уточнить предшествующие представления о ближнем порядке в распределении атомов углерода по подрешёткам октаэдрических междоузлий и получить новые результаты, отличающиеся высокой степенью достоверности.

Результаты, составляющие основу данной диссертации, свидетельствуют о высоком уровне выполненного исследования и получены впервые.

Автор рассчитал параметры решётки мартенсита в зависимости от содержания углерода и температуры отпуска, определив критические концентрации перехода от кубического мартенсита к тетрагональному.

Отлично промоделирован спинодальный распад железоуглеродистого мартенсита при отпуске и получен конкретный тип плоскости кластеризации атомов углерода. К сожалению, ограниченные возможности по временным параметрам, доступным в расчетах методами молекулярной динамики, не позволили исследовать ранние стадии распада в области комнатных температур и ниже.

В МД моделировании влияния внешних напряжений определено критическое напряжение для начала перехода атомов углерода в подрешётки *a* и *b* с последующим заполнением лишь одной из них. Результаты моделирования хорошо совпали с уточнённой автором теорией Зинера.

Оригинальным является моделирование влияния кремния на деформационное взаимодействие и тетрагональность мартенсита.

Выполненное исследование существенно развивает современные представления о природе деформационных взаимодействий в структуре железоуглеродистого мартенсита, что даёт основу для разработки перспективных технологических операций.

Диссертационная работа соответствует требованиям, предъявляемым кандидатским диссертациям и её автор, Павел Владимирович Чирков, несомненно заслуживает присуждения ему искомой ученой степени по специальности 01.04.07 «физика конденсированного состояния».

Главный научный сотрудник отдела физических основ легирования сталей и сплавов
Института металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН Украины
профессор, доктор технических наук, шифр специальности 01.04.07,

Бульв. Вернадского 36, 03680 Киев, Украина
gavr@imp.kiev.ua

В.Г. Гаврилюк

Подпись профессора Гаврилюка подтверждаю
ученый секретарь Института металлофизики им. Г.В. Курдюмова НАН
Украины,
канд. физ.-мат. наук



Е.В. Кочелаб

21.11.2017