

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Павла Владимировича 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

Актуальность темы диссертационной работы П.В. Чиркова видна уже из заголовка – углерод и его распределение в кристаллической решетке железа определяет все - само понятие стали, ее свойства и их изменение при деформации и термической обработке. К сожалению, само расположение углерода в решетке обеих модификаций железа и изменение этого расположения под действием температуры и напряжений до сих пор остается предметом дискуссии, а без знания положения атомов углерода невозможно целенаправленно управлять свойствами стали, выбирать режимы термической обработки и системы легирования. Выполненная П.В. Чирковым диссертационная работа представляет собой существенное научное продвижение в этом направлении.

Существо этой диссертации заключается в применении самых современных методов компьютерного моделирования для развития теории Зинера-Хачатуряна, согласно которой тетрагональность мартенсита определяется упорядоченным расположением атомов углерода в октаэдрических междуузлиях предпочтительно ориентированных вдоль одного из трех кубических направлений решетки железа. Полученные П.В. Чирковым оригинальные результаты является следствием умелого применения новых расчетных методов. Наиболее интересными мне представляются:

- уточнение влияния напряжений на ориентировку оси тетрагональности;
- периодическая картина плоских скоплений атомов углерода при выдержке, полученная расчетным путем (рис.3 в автореферате). Фактически автору удалось показать зарождение будущего перлита на самых ранних стадиях распада мартенсита.

По работе можно высказать несколько замечаний.

1. Принципиально слабым местом теории Зинера-Хачатуряна является ничем пока не подтвержденная гипотеза о размещении углерода в октаэдрической пустоте решетки альфа-железа. Величина межатомного зазора вдоль кубической оси составляет всего около 0,4 А, а диаметр атома углерода в структурах и алмаза, и цементита, составляет 1,54 А. Согласно оценкам Я.И. Френкеля кристаллическая решетка металла теряет устойчивость при изменении межатомного расстояния на 10%, чему и соответствует точка плавления. Имея в руках мощные вычислительные ресурсы, используемые в диссертации, можно было бы подсчитать, на какое расстояние распространяются столь значительные

