

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Чиркова Павла Владимировича  
"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

Диссертация Чиркова П.В. посвящена компьютерному моделированию упорядочения углерода в мартенсите Fe-C на этапе двухфазного распада до начала карбидообразования. Актуальность исследований определяется рядом уникальных свойств железа и его сплавов с углеродом. Системы железа и его сплавов с углеродом являются важнейшими конструкционными материалами. Для разработки новых функциональных материалов и технологий необходима информация о механизмах происходящих процессов в этих материалах на атомном уровне. Это определило задачи диссертационной работы, связанные с разработкой и реализацией методик молекулярно-динамического моделирования искажений решетки мартенсита с различным содержанием углерода и процессов перераспределения углерода при разных температурах и внешних давлениях.

В начале оригинальной части работы был проведен расчет основного параметра упорядочения Зинера-Хачатуряна – энергии деформационного взаимодействия. Полученное значение хорошо согласуется с данными других авторов, полученных на основе первопринципных расчетов. Далее методом молекулярной динамики было проведено компьютерное моделирование процесса упорядочения углерода в мартенсите. Результаты моделирования хорошо согласуются с теоретическими кривыми. На базе полученных зависимостей определены критические концентрации углерода, при которых происходит переход порядок-беспорядок. В этой же главе описываются результаты моделирования процесса кластеризации углерода в решетке мартенсита при повышенных температурах. Полученные данные находят подтверждение в натуральных экспериментах.

Следующая часть работы посвящена исследованию влияния внешних напряжений на порядок углерода в мартенсите. Приведены данные термодинамического анализа упорядочения углерода в кристалле мартенсита, погруженного в упругую матрицу. В реальной ситуации это соответствует мартенситу заключенному в остаточный аустенит. Объясняется характер концентрационной зависимости тетрагональности мартенсита для актуальных концентраций углерода.

Также в этой главе рассматривалось действие одноосных напряжений, приложенных вдоль оси тетрагональности на процесс упорядочения атомов углерода. Получены оценки для критических напряжений, при которых должно произойти разупорядочение углерода.



Кроме того было проведено молекулярно-динамическое компьютерное моделирование действия одноосных напряжений на мартенсит. Получено качественное согласие между результатами термодинамического анализа и данными молекулярно-динамического моделирования.

В заключительной главе представлены результаты исследования влияния примесей замещения (атомы кремния) на процесс упорядочения углерода в мартенсите. Рассчитывается коэффициент диффузии углерода в феррите железа. Показано, что введение атомов кремния приводит к замедлению диффузии. Установлен, что содержание кремния в стали должно уменьшать критическую концентрацию углерода, для которой при комнатной температуре возникает тетрагональный мартенсит.

В автореферате достаточно полно представлены основные результаты диссертации. В работе впервые получены важные термодинамические и упругие характеристики мартенсита с различной концентрацией углерода, внешних напряжений и примесями замещения, актуальных для практического применения. Достоверность полученных результатов и научная обоснованность выводов определяется применением апробированных и хорошо обоснованных методов компьютерного моделирования и теоретического исследований. Замечаний нет. Результаты исследований хорошо апробированы и опубликованы в ведущих высокорейтинговых научных журналах.

Диссертационная работа Чиркова П.В. соответствует специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, физико-математической отрасли наук и удовлетворяет всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК Министерства образования и науки РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Чирков П.В. несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Мазуренко Владимир Гаврилович  
Доктор физико-математических наук, профессор  
Заведующий кафедрой теоретической физики и прикладной математики  
физико-технологического института  
ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого  
Президента России Б.Н. Ельцина»  
620002 г.Екатеринбург, ул.Мира 19  
+7 (343) 375-44-44  
30 ноября 2017 г.

Подпись профессора Мазуренко В.Г. заверяю



Ученый секретарь УрФУ Морозова В.А.