

Отзыв

на автореферат диссертации Чиркова П.В. «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 Чиркова П.В. посвящена теоретическому изучению образования тетрагонального мартенсита Fe-C и влияния внешних напряжений и примесей. Основная цель работы - установление на микроскопическом уровне упорядочения углерода при различных процессах: на стадии двухфазного распада, при изотермической выдержке и в зависимости от его концентрации. Огромным преимуществом выполненной работы является то, что будучи теоретической, она максимально приближена к реальным процессам, происходящим в сталях. Разработанная методика моделирования тетрагонального мартенсита в рамках молекулярной динамики, позволила диссертанту детально исследовать параметры деформационного взаимодействия атомов углерода, предсказать перераспределение углерода в зависимости от температуры и внешних напряжений.

Диссертантом проведена огромная методическая работа, установлены оптимальные параметры расчетов, обеспечивающие наилучшую точность, проведена детальная интерпретация результатов в рамках различных моделей упорядочения. Систематические исследования углерода в мартенсите, выполненные автором, представляются весьма важными, поскольку они позволили установить микроскопические механизмы в изменении распределения углерода при различных условиях, в частности предсказать ориентацию и геометрические размеры областей с повышенным содержанием углерода.

Достоверность результатов основывается на применении в диссертации хорошо проверенных расчетных методов, а во-вторых - согласием теоретических результатов, полученных в диссертационной работе, с экспериментальными данными.

Полученные результаты, несомненно, имеют научную и практическую ценность, поскольку в результате проведенных исследований достигнуто понимание механизмов образования тетрагонального мартенсита в зависимости от концентрации углерода, примесей замещения (кремний), внешних напряжений.

Замечания и вопросы:

1. Полученные в работе величины параметра деформационного взаимодействия в два раза больше предполагаемых ранее. Как это расхождение влияет на выводы о механизме образования мартенсита в рамках модели А.Г. Хачатуряна.

2. В автореферате не представлен механизм кластеризации углерода в решетке мартенсита. Не противоречит ли углеродная кластеризация выводам об отталкивании атомов углерода в решетках ОЦК и ГЦК Fe (K. Oda, H. Fujimura, H. Ino, J. Phys. Condens. Mat. 6 (1994) 679–692; H.K.D.H. Bhadeshia, J. Mater. Sci. 39 (2004) 3949–3955; D.J. Hepburn, D. Ferguson, S. Gardner, G.J. Ackland, Phys. Rev. B 88 (2013) 024115.

Однако, отмеченные замечания не умаляют высокой теоретической и практической значимости полученных результатов по распределению углерода в мартенсите.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне с использованием современных методов и подходов теории конденсированного состояния. Результаты работы были неоднократно доложены автором на многочисленных российских и международных научных конференциях и достаточно полно представлены в публикациях в ведущих международных и отечественных журналах. Следует отметить, что количество публикаций диссертанта значительно превышает минимум необходимый для защиты кандидатской диссертации.

Актуальность темы, объем работы и новизна полученных в диссертации результатов отвечают требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор Чирков П.В. заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Я, Медведева Надежда Ивановна, согласна на обработку персональных данных.

Главный научный сотрудник
лаборатории Квантовой химии и спектроскопии
им. А.Л. Ивановского, ФГБУН
Институт химии твердого тела УрО РАН,
Доктор физико-математических наук
02.00.21 – химия твердого тела
E-mail: medvedeva@ihim.uran.ru,
Тел. +7 (343) 362-3554



Медведева Надежда Ивановна

Адрес организации: 620990, Екатеринбург, ГСП, ул. Первомайская, 91, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии твердого тела УрО РАН, www.ihim.uran.ru, Тел. +7 (343) 374-5219.

Подпись Медведевой Н.И. заверяю
Ученый секретарь ФГБУН
Институт химии твердого тела УрО РАН,
Доктор химических наук



Денисова Т.А.

Дата: 05.12.2017