

## ОТЗЫВ

### официального оппонента на диссертационную работу

Чиркова Павла Владимировича

«Компьютерное моделирование перераспределения углерода в решетке мартенсита Fe-C при выдержке и нагружении»,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Работа Чиркова П.В. посвящена атомистическому моделированию процессов перераспределения углерода в мартенсите Fe-C при заданных внешних условиях (температура, растягивающие и сжимающие напряжения) методом Классической Молекулярной Динамики (КМД) и критическому анализу и модификации термодинамических моделей упорядочения твердых растворов внедрения Зинера и Хачатуряна.

Широта спектра применений конструкционных материалов в современной промышленности и многообразие конструкционных решений и эксплуатационных условий требует от материалов различных характеристик: пластичности, твердости, много-циклового усталостной прочности, жаропрочности, коррозионной стойкости и т.п. Тонкая подстройка свойств материалов возможна путем изменения химического состава, внесением заранее заданных искажений структуры, внедрением примесных атомов, микровключений других фаз.

Развитие суперкомпьютерных технологий и сформировавшийся к настоящему времени уровень теоретического моделирования позволяют создавать компьютерные модели материалов, а затем варьировать их свойства, состав, структуру и испытываемые нагрузки виртуальным образом. Работа Чиркова П.В. является хорошим примером такого современного подхода к изучению свойств материалов. Актуальность представленной работы определяется необходимостью понимания микроскопических механизмов, ответственных за свойства наиболее востребованного класса материалов современной промышленности – сталей. Такое понимание, в принципе, позволит осуществить активацию/подавление этих механизмов при термической и/или механической обработке, что, в свою очередь, позволит модифицировать свойства материала с целью достижения требуемых характеристик.

Целью диссертационной работы было исследование методами КМД процесса упорядочения углерода в мартенсите Fe-C в стадии двухфазного распада до начала карбидообразования и получение расчетным путем параметров, входящих в термодинамические модели Зинера и Хачатуряна, а также проверка вышеуказанных моделей в прямых расчетах КМД. В диссертации хорошо отражено поэтапное проведение работ для достижения поставленных целей по принципу «от простого к сложному» с обоснованием и проверкой результатов каждого этапа.

В первой главе дан достаточно подробный обзор современного состояния проблемы описания мартенситного превращения в сплавах железа в плане существующих термодинамических моделей и возможностей моделирования систем Fe-C первопринципными методами и методами КМД с межатомными потенциалами различного уровня сложности.

Далее, во второй главе, автор выделяет основные характеристики, важные с точки зрения решения поставленной задачи (релаксационные объемы, энергии миграции, энергия взаимодействия двух внедренных атомов углерода), и тестирует различные полуэмпирические модели межатомного взаимодействия в сравнении с результатами первопринципных расчетов и экспериментальными данными по зависимости степени тетрагональности кристаллической решетки от концентрации углерода, что позволяет осуществить оптимальный выбор потенциала для последующего КМД моделирования.

В третьей главе автором вычислены значения важного термодинамического параметра (деформационного взаимодействия), определяющего свойства сплавов железа при термообработке. Нужно отметить, что расчет этого параметра проведен двумя способами (см. ниже). Прямое КМД моделирование эволюции системы при температуре 500 К с первоначальным распределением углерода по октопорам одного из трех типов показало наличие критической концентрации углерода, выше которой сохраняется первоначально заданное упорядоченное состояние с параметром порядка  $\sim 0.65$ , что находится в качественном согласии с теорией Зинера-Хачатуряна. Проведение аналогичных расчетов при более высоких температурах продемонстрировало зависимость критической концентрации углерода от температуры. Эти расчеты позволили также определить параметр деформационного взаимодействия и сравнить его со значением, полученным для холодной решетки.

Отметим здесь, что подобного рода прямое моделирование было проведено впервые, что является научной новизной работы.

Интересными являются результаты атомистического моделирования процесса отпуска мартенсита на начальной стадии двухфазного распада. Расчеты показали возможности КМД при моделировании довольно медленного процесса кластеризации углерода. Ориентация плоскостей с повышенным содержанием углерода соответствует наблюдаемой в экспериментах, а полученный энергетический эффект от кластеризации углерода оказался близок к экспериментально измеренному, что, в принципе, является дополнительным тестом для используемой модели межатомного взаимодействия. Полученный результат также должен быть отнесен к научной новизне работы.

Следующая глава посвящена исследованию влияния напряжений на явление упорядочения углерода. Здесь автор приводит критический анализ термодинамических теорий Зинера и Хачатуряна и предлагает их модификацию (вводится дополнительное условие устойчивости), приводящую к иной интерпретации экспериментальных данных о наличии тетрагональности в мартенсите при низких концентрациях углерода. В результате, применение модифицированной модели с учетом определенной в диссертации величины параметра деформационного взаимодействия  $-5.6$  эВ/атом ( $-2.73$  эВ/атом у Хачатуряна) понижает порог упорядочения до концентрации  $1.3$  ат.% ( $2.6$  ат.% у Хачатуряна) углерода при температуре  $293$  К. При этом, в отличие от модели Хачатуряна, для перехода порядок-беспорядок сохраняются признаки фазового перехода, и влияние упругой матрицы оказывается несущественным.

Далее, в рамках опять же термодинамической теории, автор рассматривает влияние одноосных напряжений на состояние упорядочения и приходит к выводу о том, что в качестве критического сжимающего напряжения, при котором происходит разупорядочение углерода, необходимо брать напряжение, соответствующее относительной, а не абсолютной стабильности, что заметно понижает величину критического напряжения по сравнению с анализом Штремеля. Различия в оценках критического напряжения по Штремелю и автору диссертации тем больше, чем меньше температура, и при нормальной температуре имеют значения  $\sim 1600$  МПа и  $\sim 700$  МПа, соответственно. Приведенные в следующем параграфе результаты

молекулярно-динамического моделирования фактически подтвердили сделанные выше теоретические выводы, однако, полученные критические напряжения оказались даже ниже, причем систематически, чем в модифицированной теории. Приведенные в диссертации объяснения, на мой взгляд, недостаточны, и вопрос требует дополнительного исследования. В целом, приведенный анализ и модификация термодинамической модели в совокупности с результатами КМД моделирования представляют наибольший научный и практический интерес из всех представленных в диссертации результатов. Результаты, несомненно, имеют научную новизну, и их достоверность уверенно доказывается взаимным согласием разных подходов (прямое КМД моделирование и термодинамическая модель) к описанию одного явления.

В последней главе автор предпринял попытку промоделировать влияние примеси замещения (Si) на упорядочение углерода, для чего был построен модельный потенциал Si-C. Результаты моделирования показали, что с увеличением концентрации кремния происходит рост параметра деформационного взаимодействия (уменьшение по абсолютной величине), что имеет следствием уменьшение степени тетрагональности при заданной температуре и концентрации углерода и повышение критической концентрации углерода для заданной температуры, при которой происходит переход порядок-беспорядок.

При общей положительной оценке изложения материала, обоснования применяемых методик и полученных результатов к диссертации можно сформулировать ряд замечаний:

- 1) Формулировка пункта научной новизны «...уточнено значение параметра деформационного взаимодействия...» является слишком сильной. Что дает автору основание утверждать, что многочисленные расчеты других авторов (имеющие большой разброс) являются менее точными? Более корректно было бы говорить о независимом расчете Параметра методами атомистического моделирования с выбранным межатомным потенциалом;
- 2) В формуле 1.4 на стр. 14 содержится ошибка: в третьем слагаемом коэффициент 2 должен стоять перед первым членом в квадратных скобках, а не перед всем слагаемым;
- 3) На стр. 14 в предпоследнем абзаце выражение «В данной формуле последнее слагаемое представляет собой конфигурационную энтропию...» является

некорректным. Последнее слагаемое представляет собой вклад в свободную энергию от конфигурационной энтропии;

4) На стр. 15 в формуле 1.5 в среднем члене равенства в знаменателе отсутствует концентрация, на стр.16 в формуле 1.6 в правой части должен стоять знак «-» ;

5) По тексту диссертации у параметра деформационного взаимодействия постоянно меняется знак +/-;

6) На стр. 25 сказано, что при превышении концентрации кремния в 10 ат.% система будет представлять собой смесь  $Fe_3Si$  и  $FeSi$ . Но, согласно стехиометрии такое возможно только при концентрациях  $>25$  ат %;

7) Формула 2.20 должна быть записана как  $E_m = E_T - E_O$ , иначе энергия миграции окажется отрицательной;

8) При описании кластеризации (параграф 3.3) следовало бы указать время моделирования, что, в принципе, дало бы представление о кинетике процесса.

9) При рассмотрении одноосного нагружения при высоких температурах хорошо было бы соотнести прилагаемые напряжения с пределом текучести для определения их достижимости на практике.

10) Модель межатомного взаимодействия в системе Fe-Si-C является весьма грубой, в частности, при описании энергетических барьеров миграции углерода не удалось даже качественно воспроизвести результаты первопринципных расчетов. Поэтому выводы о влиянии кремния, на мой взгляд, имеют исключительно качественный характер.

11) В Таб. 5.1. приведены не коэффициенты сплайна, а узловые точки.

12) В диссертации рассматривается модельная система Fe-C. В этой связи необходимо пояснить насколько представленные выводы и результаты применимы к реальным материалам (сталям), содержащим большое количество легирующих элементов в заметных концентрациях. Другими словами, с практической точки зрения, к какому классу материалов или конкретным маркам сталей результаты работы могут быть применены?

13) В автореферате на стр. 18 в последнем предложении допущена смысловая ошибка. В действительности, при увеличении параметра  $\lambda_2(0)$  с -5.2 до -4.2 эВ/атом критическая концентрация углерода должна возрасти.

Указанные недостатки не умаляют ценность полученных результатов и не влияют на общую положительную оценку диссертации. В целом можно сказать, что диссертация выполнена на высоком научном уровне, изложение материала хорошо структурировано, применяемые методики обоснованы, достоверность результатов не вызывает сомнения. Все основные результаты опубликованы в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК, Scopus, WoS. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

В связи с вышеизложенным считаю диссертацию Чиркова П.В. законченной научно-квалификационной работой, в которой с применением методов атомистического моделирования и термодинамики решена задача моделирования перераспределения углерода в железе при различных внешних условиях и получены представляющую практическую ценность количественные результаты, определяющие характер и величину перераспределение углерода в зависимости от температуры, концентрации и внешних напряжений. Диссертация соответствует критериям ВАК (п.9-11,13 «Положения ...» Пост. № 842), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Чирков Павел Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,  
заместитель начальника отделения  
теоретической физики и прикладной математики,  
д.ф.-м.н.

Дремов Владимир Владимирович



1.12.2017

Российский Федеральный Ядерный Центр-  
Всероссийский Научно-Исследовательский  
Институт Технической Физики  
им. академ. Е.И. Забабахина  
456770 Челябинская область, г. Снежинск,  
ул. Васильева 13

тел:+7(35146)54730, e-mail: vvd0531@mail.ru

Подпись Дремова В.В. заверяю

Ученый секретарь НТС РФЯЦ-ВНИИТФ

