

## **ОТЗЫВ**

официального оппонента кандидата физико-математических наук Русакова Германа Михайловича на диссертацию Чиркова Павла Владимировича по теме «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.

### **Актуальность темы исследования.**

Понимание природы мартенситного перехода, которое лежит в основе закалки стали и возникает при резком охлаждении ГЦК-фазы сплава железа с углеродом, является одной из важнейших проблем физики металлов. Без понимания физических основ протекающих процессов на атомном уровне невозможно создание новых перспективных технологий создания сталей с необходимыми свойствами. Упорядочение углерода в мартенсите, приводящее к образованию его тетрагональности, как показали классические работы К.Зинера и А.Хачатуряна, является интересным примером фазового перехода второго рода, связанным с перестройкой атомов углерода по октаэдрическим междоузлиям кристаллической решетки. Долгое время результаты указанных работ, давших качественное понимание физики явления, вполне удовлетворяли нужды металловедения. Однако за последние десятилетия накопились экспериментальные результаты, интерпретация которых в рамках устоявшихся теорий вызывает затруднения. Развитие в последнее время методов компьютерного моделирования материалов открыло дорогу для получения новой количественно точной информации о полной энергии рассматриваемого сплава. Это позволило диссертанту провести расчеты энергии взаимодействий атомов углерода для различных конфигураций в решетке железа, определить константы деформационного взаимодействия в теории Зинера-Хачатуряна, а также прояснить многие детали процесса мартенситного превращения. Все эти факторы обуславливают высокую актуальность темы диссертационной работы Чиркова П.В., выполненной при помощи метода молекулярно-динамического моделирования и посвященной решению ряда важных задач физики мартенситного превращения, не вызывает сомнения.

### **Структура и содержание работы**

Представленная диссертационная работа состоит из пяти глав, заключения и списка литературы, в котором 134 наименования. Общий объем диссертации

составляет 115 страниц, включая 31 рисунков и 6 таблиц. Диссертация представляет собой законченное научное исследование, посвященное изучению упорядочения углерода в мартенсите железа, а также влияния внешних напряжений и легирующих элементов на данный процесс.

**Во введении** раскрывается актуальность темы, сформулированы цель работы, ее научная новизна, научная и практическая значимость, апробация результатов, определяются личный вклад автора и степень достоверности результатов, приводятся сведения о структуре диссертации.

**Глава 1** является литературным обзором. В ней изложено современное состояние механизма образования тетрагональности в мартенсите Fe-C, изложены основы теории упорядочения в растворах внедрения Зинера-Хачатуряна. Отмечается, что параметр деформационного взаимодействия  $\lambda_2(0)$  определен в широком диапазоне, также отмечается отсутствие описания упорядочения углерода на атомистическом уровне. Поэтому компьютерное моделирование является необходимой составляющей исследований мартенсита Fe-C. Формулируются цель и задачи диссертации.

**Глава 2** была посвящена выбору методов исследования и имела определяющее значение для качества работы. В ней обоснован выбор основного метода исследований - метода молекулярной динамики, в котором потенциальная энергии системы определяется с помощью потенциалов погруженного атома (EAM). В главе 2 также приведен расчет различных характеристик мартенсите для существующих в мировой литературе потенциалов системы Fe-C, проведено сравнение с экспериментальными данными и результатами первопринципного моделирования на основе теории функционала плотности (DFT). Данный анализ позволил достичь необходимой точности для описания взаимодействия углерода в мартенсите Fe-C.

**Глава 3** посвящена молекулярно-динамическому моделированию упорядочения углерода в решетке мартенсита. Проведенные расчеты для различных температур в широком диапазоне содержания углерода позволили наблюдать переход порядок-беспорядок в решетке мартенсита, что качественно подтверждает теорию Зинера-Хачатуряна. Также данные расчеты делают возможным расчет параметра деформационного взаимодействия  $\lambda_2(0)$ . Кроме того в данной главе получена ценная информация о формировании кластеров углерода в форме плоских областей при повышенных температурах, т.е. на стадии двухфазного распада

мартенсита.

**Глава 4** посвящена исследованию влияния внешних напряжений на порядок углерода в сплаве. В этой главе приведен теоретический анализ устойчивости упорядоченного состояния при действии сжимающего напряжения вдоль оси тетрагональности. Также проведено моделирование как при действии сжимающего напряжения, так и при растягивающем напряжении вдоль оси, перпендикулярной направлению тетрагональности. Основными оригинальными результатами является определение зависимостей от концентрации С и температуры значений критического напряжения.

**Глава 5** посвящена изучению взаимодействия примесей замещения на примере кремния с атомами углерода, в ней предложены потенциалы взаимодействия Si-C на основе *ab initio* расчетов. Основным результатом данной главы является расчет зависимости параметра  $\lambda_2(0)$  от содержания кремния в мартенсите.

**Заключение** содержит выводы, отражающие основные результаты работы.

**Достоверность результатов** диссертации обеспечивается использованием современных аттестованных программных и вычислительных средств, тщательным подбором параметров моделирования, ясным физическим смыслом установленных закономерностей, сравнением полученных результатов с литературными данными.

**Наиболее существенные результаты.** Наиболее важными, на наш взгляд, являются следующие результаты:

1. С помощью метода молекулярной динамики уточнено значение параметра деформационного взаимодействия атомов углерода в решетке железа  $\lambda_2(0)$ , а также впервые проведено атомистическое моделирование процесса отпуска мартенсита на стадии двухфазного распада, определена ориентация и геометрические размеры областей с повышенным содержанием углерода.
2. Проведены молекулярно-динамические расчеты влияния легирования кремния на величину параметра деформационного взаимодействия  $\lambda_2(0)$ .
3. Предложен уточненный вариант теории К. Зинера для описания влияния внешних напряжений на упорядочение углерода в системе Fe-C. Выводы теории подтверждены молекулярно-динамическим моделированием. Впервые показано, что величина критического напряжения  $\sigma_{cr}$ , приводящего к переориентации оси тетрагональности, лежит в области практически достижимых значений. Показано также,

что  $\sigma_{cr}$  линейно возрастает как функция содержания углерода в сплаве и линейно убывает с ростом температуры.

**Научная и практическая значимость работы.** Полученные в работе данные о поведении углерода в мартенсите стали позволили существенно детализировать понимание механизмов образования тетрагональности, а также влияния на него внешних напряжений и примесей замещения. Предложенная методика может служить основой для компьютерного моделирования двухфазного распада сталей, а полученные результаты исследования могут быть использованы для уточнения теории такого упорядочения. Полученные данные о влиянии кремния на свойства мартенсита системы Fe-C актуальны для разработки научных основ нового поколения бескарбидных бейнитных сталей. Исследованный эффект изменения направления тетрагональности в кристалле мартенсита при действии внешних напряжений может быть важен для теории пластической деформации стали.

**Вопросы и замечания к диссертационной работе:**

1. Сравнение параметра деформационного взаимодействия атомов углерода в решетке железа  $\lambda_2(0)$ , полученного автором методом молекулярной динамики, с результатом А.Г. Хачатуряна, который он считал наиболее точным (2,73 эВ/атом, 1974г.!) и опирающимся на приближение среднего поля, представляется не вполне корректным. Это приближение дает ошибку около 30% , которая может быть еще больше, если упорядочение сопровождается деформацией решетки. Тем более, что современные первопринципные оценки дают заметно лучшее согласие с результатами автора
2. Основной проблемой метода молекулярной динамики, которая отчетливо прослеживается и в данной работе, является исследование статистических систем при низких температурах (минимум 500 - 700 К). Поэтому интересно сравнить результаты работы с результатами, полученными методом Монте-Карло, если таковые имеются в литературе.

**Заключение.**

Указанные замечания не снижают высокой оценки научной новизны и практической ценности работы, не ставят под сомнение результаты

исследования и выводы по результатам диссертационного исследования. Диссертационная работа П.В. Чиркова написана хорошим научным языком и является законченной научно-квалификационной работой, которая может рассматриваться как решение актуальной научной задачи, имеющей важное значение для решения актуальной проблемы физики конденсированного состояния, связанной с изучением упорядочения углерода в мартенсите. По теме диссертации опубликовано 21 печатная работа, в том числе 10 статей в журналах из списка ВАК, из них 5 публикации в журналах, индексируемых Scopus и Web of Science. Диссертация соответствует паспорту специальности 01.04.07, в частности пунктам 1 и 5. Автореферат диссертации адекватно отражает её содержание.

Диссертационная работа соответствует критериям, установленным пп. 9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор Чирков Павел Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,  
кандидат физико-математических, наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, старший научный сотрудник лаб. физического металловедения ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Контактная информация

Почтовый адрес: 620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН

Тел: +79089286661; e-mail germanrusakov@yandex.ru

Герман Михайлович Русаков



Подпись Русакова  
заверяю  
Руководитель общего отдела  
Лямина Н.Ф. Лямина  
"04" 12 2014.