

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».

Компьютерное моделирование является незаменимым инструментом в физике конденсированного состояния и материаловедении. Особую роль компьютерное моделирование играет при изучении процессов, проходящих на временных и пространственных масштабах, недоступных для экспериментального изучения. Одной из актуальных задач является моделирование мартенситных превращений. Такие превращения экспериментально изучаются уже многие десятилетия, однако многие вопросы, связанные с пониманием их природы на атомном и нанометровом масштабах, до сих пор остаются открытыми. Изучение мартенситных превращений методами компьютерного моделирования требует рассмотрения систем с числом частиц порядка 10^6 на временах порядка микросекунд. Подобные расчёты стали массово доступны сравнительно недавно, и поэтому многие актуальные задачи в этой области еще не решены. В связи с этим диссертационная работа Чиркова П.В., посвященная компьютерному моделированию перераспределения углерода в решетке мартенсита Fe-C, является актуальной. В работе разработана методика молекулярно-динамического моделирования мартенсита Fe-C с использованием EAM потенциалов, и с помощью данной методики получен ряд важных результатов. Так, например, впервые было проведено моделирование процесса отпуска мартенсита на стадии двухфазного распада и определены ориентация и геометрические размеры областей с повышенным содержанием углерода.

В ходе ознакомления с авторефератом возникли следующие вопросы и замечания:

1. Из текста автореферата не вполне ясно, как проводился анализ EAM потенциалов для системы Fe-C, и почему для дальнейших расчетов был выбран набор потенциалов, предложенный в работе [12].
2. При описании результатов моделирования кластеризации углерода в решетке мартенсита (стр. 10-11 автореферата) приводятся полученные в расчетах размеры зон с повышенным и пониженным содержанием углерода (20 и 30 ангстрем, соответственно). Также указывается, что подобные структуры наблюдались ранее как в эксперименте, так и в численных расчетах. Возникает вопрос: как соотносятся результаты, полученные в диссертации, с работами других авторов?
3. В тексте автореферата не указаны методики, согласно которым автором были сгенерированы и верифицированы потенциалы погруженного атома для мартенсита системы Fe-Si-C. По этой причине трудно оценить адекватность результатов, полученных с помощью данных потенциалов.

Приведенные замечания не касаются существа работы и значения полученных результатов. Работа является законченной и выполнена автором на высоком научном уровне. Приведенные научные результаты являются достоверными, выводы и рекомендации

обоснованными. Автореферат содержит достаточное количество исходных данных, имеет пояснения, рисунки, графики, квалифицированно написан и аккуратно оформлен. Основные результаты работы опубликованы в пяти статьях в журналах, индексируемых в базе данных Web of Science.

На основе сказанного, считаем, что автореферат отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, а его автор Чирков П. В. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «физика конденсированного состояния».

Авторы отзыва согласны на обработку персональных данных.

старший научный сотрудник
лаборатории аналитической химии
Института металлургии УрО РАН,
кандидат физико-математических наук
по специальности 01.04.07 –
«Физика конденсированного состояния»

Рыльцев Роман Евгеньевич

заведующий
лабораторией аналитической химии
Института металлургии УрО РАН,
доктор химических наук
по специальности 02.00.04 –
«Физическая химия»

Шуняев Константин Юрьевич

Дата: «28» ноября 2017г.

620016 г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101, Институт металлургии УрО РАН

Рабочий телефон: 8 (343) 232-91-04

Адреса электронной почты: ryltsev@mail.ru, k_shun@mail.ru

Подписи Рыльцева Р.Е. и Шуняева К.Ю заверяю:

Врио Ученого секретаря ИМЕТ УрО РАН

Долматов Алексей Владимирович

