

## ОТЗЫВ

об автореферате 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»

Актуальность темы данной диссертационной работы обуславливается, прежде всего, тем, что стали, которые можно рассматривать как сплавы железа и углерода, являются на сегодняшний день одним из важнейшим конструкционных материалов. Соответственно, улучшение свойств сталей, в том числе на основе изучения соответствующих теоретических моделей, представляет большой интерес с научной и практической точек зрения. Особое внимание исследователей обращено на мартенситный переход, лежащий в основе закалки стали, протекающий при резком охлаждении ГЦК-фазы сплава железа с углеродом. Существующие теоретические подходы не описывают связанные с этим переходом процессы на атомистическом уровне.

В значительной степени рассматриваемая диссертационная работа восполняет указанный пробел. С использованием молекулярно-динамического моделирования и теоретических подходов получен ряд новых и интересных результатов:

1. С помощью метода молекулярной динамики уточнено значение параметра деформационного взаимодействия атомов углерода в решетке железа.
2. Впервые проведено атомистическое моделирование процесса отпуска мартенсита на стадии двухфазного распада, определена ориентация и геометрические размеры областей с повышенным содержанием углерода.
3. Предложен уточненный вариант теории Зинера для описания влияния внешних напряжений на упорядочение углерода в системе Fe-C.
4. Впервые найдено, что легирование кремнием приводит к снижению величины параметра деформационного взаимодействия.

Таким образом, в данной диссертационной работе удачно сочетаются применение атомистического моделирования и теоретических подходов, на основе которых получен ряд интересных результатов.

Вместе с тем, по автореферату у меня имеются некоторые замечания:

1. Следовало бы несколько детальнее и конкретнее обосновать выбор потенциала, предложенного Лау для описания систем Fe-C.

Интересно, адекватно ли он передает структуру аллотропических модификаций углерода, включая структуру алмаза.

2. Следовало бы отметить, какую именно структуру имели кластеры углерода в решетке мартенсита (описание параграфа 3.3).

3. В параграфе 3.2 упоминается NPT-ансамбль, но не указывается, какие выбирались давления, как они контролировались и как повлияли на результаты моделирования.

Сделанные замечания не снижает общего положительного впечатления от данной диссертационной работы. Учитывая актуальность темы диссертации, новизну и практическую значимость ее результатов, считаю, что данная работа в полной мере удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям по физико-математическим наукам, а ее автор – Чирков П.В. – заслуживает присуждение ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Профессор кафедры общей физики  
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»,  
доктор физико-математических наук, профессор  
Заслуженный работник высшей школы

*Самсонов*

**Самсонов Владимир Михайлович**

*На обработку персональных данных  
согласен*

Тверской государственный университет 170100, Тверь, ул. Желябова 33  
Тел: +7-920-681-41-98, e-mail: samsonoff@inbox.ru

11.12.2017

Подпись *Самсонова В.М.*  
**УДОСТОВЕРЯЮ**  
Ученый секретарь Совета Тверского  
государственного университета  
Кравченко П.Н. *Кравченко*

