

## Отзыв

на автореферат диссертации Чиркова Павла Владимировича «Компьютерное моделирование перераспределения углерода решетки мартенсита Fe-C при выдержке и нагружении», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Основой закалки сталей является мартенситное превращение, при котором сдвиговым путем происходит перестройка кристаллической ГЦК фазы в тетрагональную альфа-фазу. К. Зинером, а позднее А. Г. Хачатуряном разработана теория для объяснения механизма образования тетрагонального мартенсита, в основе которой лежит принцип коллективного деформационного взаимодействия атомов углерода. В последние годы резко возросло число работ по изучению процессов, происходящих в мартенсите, в том числе на атомистическом уровне и методом молекулярной динамики (МД). Поэтому диссертация Чиркова П. В., посвященная изучению упорядочения в мартенсите Fe-C в стадии двухфазного распада методом компьютерного моделирования, представляет несомненный интерес не только для теоретического материаловедения, но и для экспериментаторов, работающих в области физики конденсированного состояния.

Автором разработана методика МД моделирования мартенсита Fe-C с использованием метода погруженного атома (EAM) и уточнены значения параметра деформационного взаимодействия атомов углерода в решетке железа. Впервые показано, что легирование кремнием приводит к снижению величины параметра деформационного взаимодействия на 20%. Эти результаты представляют большой интерес и могут быть использованы экспериментаторами при разработке безкарбидных бейнитных сталей. Диссертантом впервые проведено атомистическое моделирование процесса отпуска мартенсита на стадии двухфазного распада и показано, что величина критического напряжения, приводящего к переориентации оси тетрагональности находятся в области практически достижимых значений.

В качестве замечаний можно отметить следующие:

– из текста автореферата непонятно, насколько могут изменить легирующие элементы эффекты, установленные автором для сплава Fe-C.

– учитывают ли расчеты различную морфологию образующегося мартенсита, поскольку в высокоуглеродистых сталях возникают отдельные кристаллы мартенсита, а низкоуглеродистых образуется пакетный мартенсит.

В целом диссертационная работа «Компьютерное моделирование перераспределения углерода в решетке мартенсита Fe-C при выдержке и нагружении» представляет собой законченное исследование, представляющие интерес для специалистов в области физики конденсированного состояния и материаловедения. Диссертация удовлетворяет требованиям ВАК п.9 к кандидатским диссертациям, а ее автор Чирков Павел Владимирович заслуживает присуждение ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Научный руководитель  
отдела материаловедения  
ФГБУН Института физики металлов  
имени М.Н. Михеева УрО РАН  
Академик РАН, главный научный сотрудник  
лаб. физического металловедения

Вадим Михайлович Счастливец

Главный научный сотрудник  
лаб. физического металловедения  
ФГБУН Института физики металлов  
имени М.Н. Михеева УрО РАН  
E-mail: labmet@imp.uran.ru  
620108, г. Екатеринбург,  
ул. С. Ковалевской, 18

Ирина Леонидовна Яковлева

