

УТВЕРЖДАЮ

ВРИО директора

ИМЕТ УрО РАН,

к.т.н.

Ю.А. Чесноков

«17» ноября 2017 г.



гербовая печать

## О Т З Ы В

ведущей организации Институт металлургии УрО РАН о научно-практической ценности диссертации **Чиркова Павла Владимировича** на тему: «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 исследования.

Природа мартенситного перехода, лежащего в основе закалки стали, и возникающего при резком охлаждении ГЦК-фазы сплава железа с углеродом, является одной из важных проблем физики металлов. Это вызвано логикой развития физического материаловедения, так как бездиффузионное мартенситное превращение в системе Fe-C является интересным примером фазового перехода второго рода, связанным с упорядочением внедренных в решетку железа атомов углерода. Долгое время результаты работ, давших качественное понимание физики явления, вполне удовлетворяли нужды материаловедения. Однако за последние десятилетия накопились экспериментальные результаты, интерпретация которых в рамках устоявшихся теорий вызывает затруднения. С другой стороны существует необходимость разработки новых перспективных технологий создания сталей с требуемыми свойствами, что невозможно без понимания физических основ протекающих процессов на атомном

уровне. Развитие в последнее время методов компьютерного моделирования материалов дало возможность 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. В связи с вышесказанным, актуальность диссертационной работы Чиркова П.В., выполненной в рамках молекулярно-динамического моделирования и посвященной решению ряда важных задач физики мартенситного превращения, не вызывает сомнения.

Научная новизна. В научной литературе имеется небольшое число работ по данной тематике. На этом фоне диссертацию П.В. Чиркова отличают несколько новых результатов. Во-первых, разработана методика МД моделирования мартенсита Fe-C с использованием EAM потенциалов. Во-вторых, с помощью метода молекулярной динамики уточнено значение параметра деформационного взаимодействия атомов углерода в решетке железа  $\lambda$ , впервые проведено атомистическое моделирование процесса отпуска мартенсита на стадии двухфазного распада, определена ориентация и геометрические размеры областей с повышенным содержанием углерода. Впервые показано, что легирование кремнием приводит к снижению величины параметра деформационного взаимодействия  $\lambda$  примерно на 20 %, а также к уменьшению степени тетрагональности. В третьих, 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 ценность работы. Разработанные в диссертации методы моделирования упорядочения атомов углерода при мартенситном превращении позволили существенно детализировать понимание механизмов образования тетрагональности в системе Fe-C, а также влияния на него внешних напряжений и примесей замещения. Предложенная методика может служить основой для компьютерного моделирования процессов упорядочения углерода на стадии двухфазного распада сталей, а результаты исследования могут быть использованы для уточнения теории такого упорядочения. Обнаруженный эффект переброса оси тетрагональности в кристалле мартенсита при действии внешних напряжений может быть важен для теории пластической деформации стали. Полученные данные о влиянии кремния на свойства мартенсита системы Fe-C важны для разработки научных основ нового поколения бескарбидных бейнитных сталей.

Материалы диссертации могут использоваться в практической работе специалистами по компьютерному материаловедению, а также могут быть включены в лекционные курсы по методам компьютерного моделирования материалов в университетах.

Достоверность результатов диссертации обеспечивается использованием современных теоретических моделей и хорошо изученных и протестированных пакетов компьютерных программ для проведения молекулярно-динамического моделирования материалов, ясным физическим смыслом установленных закономерностей, сравнением полученных результатов с литературными данными.

Замечания по диссертационной работе:

1) Для описания межионного взаимодействия Si-Si и Si-Fe выбран потенциал точно такой же, как для взаимодействия Fe-Fe, что является, на наш взгляд, достаточно грубым приближением, которое может исказить реальные свойства и структуру изучаемых систем.

2) Потенциал взаимодействия для системы Fe-C выбран без достаточного обоснования его применимости и достоверности, не проведены сравнительные тестовые расчеты с другими потенциалами.

3) В работе исследуются энергетические характеристики, например, энергия взаимодействия углерод-углерод и т.п., которые вычисляются как разность больших величин (полных энергий), но эти большие величины нигде не приведены и не оценивалась их точность.

4) Обзорная глава имеет размер порядка 40 страниц, что составляет больше 30% общего объема диссертации, что нежелательно.

Указанные замечания не влияют на общую положительную оценку работы. В целом диссертационная работа *П.В. Чиркова* является законченной научно-квалификационной работой, содержащей новое решение актуальной задачи по учету влияния внешних напряжений и легирования на процесс образования тетрагональности в системе Fe-C. Работа выполнена на высоком научном уровне, автором сформулирована новая научная и практически значимая информация по проблеме мартенситного превращения в системе железо-углерод. Полученные диссертантом теоретические результаты сопровождались компьютерным экспериментом, позволившим провести проверку наиболее важных результатов. При этом, были использованы современные теоретические модели и методики. Все основные результаты диссертации опубликованы в центральных российских и международных журналах. Автореферат достаточно полно и правильно отражает содержание и результаты диссертации.

Результаты диссертационной работы, могут быть использованы в научных учреждениях, занимающихся исследованиями перспективных сталей и сплавов, для которых существенны корреляционные эффекты. В частности, результаты исследования могут представлять интерес для Института физики металлов и Института металлургии УрО РАН (г. Екатеринбург), Института металлургии и материаловедения имени А. А. Байкова РАН (г. Москва), Московского, Уральского и Сибирского федеральных университетов, Института физики твердого тела РАН,

Московского института стали и сплавов, Южно-Уральского государственного университета и др.

Заключение. Диссертационная работа Чиркова Павла Владимировича «КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ УГЛЕРОДА В РЕШЕТКЕ МАРТЕНСИТА Fe-C ПРИ ВЫДЕРЖКЕ И НАГРУЖЕНИИ», соответствует требованиям п.п.9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а сам автор - достоин присуждения искомой ученой степени по специальности 01.04.07– физика конденсированного состояния.

Диссертация обсуждена на заседании расширенного научного семинара лаборатории порошковых, композиционных и наноматериалов. Участники семинара положительно оценили научную и практическую значимость диссертационной работы. Положительный отзыв на диссертационную работу Чиркова Павла Владимировича от ИМЕТ УрО РАН в качестве ведущей организации одобрен на заседании Ученого совета, протокол №10 от 17 ноября 2017 г.

620016, Российская Федерация, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101  
ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения РАН  
Тел.: +7 (343) 267-91-24. Факс: +7 (343) 267-91-86. E-mail: imet.uran@gmail.com  
<http://imet-uran.ru>

Руководитель семинара,

Ст.н.с. лаборатории порошковых, композиционных и наноматериалов,  
кандидат физико-математических наук



А.А. Юрьев