

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Разумова Ильи Кимовича на тему «Сценарии фазовых превращений и формирование микроструктуры в стали и сплавах: роль магнетизма, легирования и влияние внешних воздействий», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07– «Физика конденсированного состояния»

Актуальность темы диссертации

Фазовое и структурное строение материалов во многом определяет их эксплуатационные свойства. При этом экспериментальная картина фазовых превращений в сплавах (в том числе, на основе железа) до сих пор остаётся существенно более сложной и богатой по сравнению со сценариями, воспроизводимыми в теоретических подходах. В частности, продолжают оставаться дискуссионными механизмы трансформации микроструктур в сталях при отжиге или при непрерывном охлаждении; особенности фазового и структурного строения нанокристаллических сплавов; неравновесные фазовые превращения и перераспределение легирующих атомов в условиях интенсивной пластической деформации и другие явления. Решение этих проблем предполагает, с одной стороны, развитие последовательных математических моделей фазовых превращений, допускающих первопринципную параметризацию, с другой стороны – моделирование кинетики превращений методами фазовых полей или Монте-Карло. В диссертации достигнут существенный прогресс в развитии обозначенных подходов. Особенностью работы является сочетание теоретических подходов различного масштабного уровня с использованием результатов первопринципных расчетов для параметризации свободной энергии в предлагаемых математических моделях, а также последующее исследование реалистичной кинетики превращений путем численного решения дифференциальных уравнений либо атомистическим моделированием.

Оценка структуры и содержания работы

Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения, списка обозначений, списка литературы из 523 наименований и 2 приложений, включает 172 формулы, 6 таблиц и 99 рисунков. Объем диссертации 365 страниц.

Во введении обсуждается актуальность темы, сформулированы цели и задачи работы, показана её научная новизна и практическая значимость, перечислены положения, выносимые на защиту, представлена структура диссертации и указан личный вклад автора.

В первой главе приведены сведения о возможных сценариях фазовых и структурных превращений в сплавах и обсуждены основные методы соответствующего теоретического исследования. Сделан вывод, что для достижения поставленных целей наиболее актуальны разработка последовательных моделей фазовых превращений, допускающих первопринципную параметризацию, и последующее моделирование кинетики превращений методами фазовых полей или Монте-Карло.

Во второй главе рассмотрена термодинамика фазовых и структурных превращений в железе и углеродистой стали. Предложен функционал свободной энергии Гинзбурга-Ландау с первопринципной параметризацией, учитывающий решеточную и магнитную степени свободы и присутствие углерода. Показано, что возрастание магнитного порядка играет важную роль в смене сценариев превращений при охлаждении таких материалов, в том числе, ответственно за реализацию γ - α превращения в чистом железе.

В третьей главе рассчитывается кинетика формирования микроструктур в углеродистой стали путем компьютерного моделирования в рамках метода фазовых

полей с использованием функционала свободной энергии Гинзбурга-Ландау, предложенного в главе 2. Из полученных результатов можно отметить вытекающее из них объяснение образования микроструктур пластинчатого и глобулярного перлита, а также верхнего и нижнего бейнита.

В четвёртой главе проведён анализ кинетики распада в сплаве «железо-медь», который (в отличие от рассмотренной выше системы «железо-углерод») является сплавом замещения. Предложена теоретическая модель с первопринципной параметризацией, позволяющая рассчитать предел растворимости меди в железе в хорошем согласии с экспериментальными данными. Приведены результаты атомистического моделирования кинетики распада, которое предсказывает наличие так называемой физической спинодали на фазовой диаграмме реального сплава с учетом тепловых флуктуаций его состава.

В пятой главе анализ кинетики распада в сплавах замещения применён к решению технологически значимой проблемы поиска механизмов стабилизации дисперсных состояний при распаде в трехкомпонентном сплаве. Обнаружены механизмы кинетической и термодинамической стабилизации дисперсных состояний.

Шестая глава посвящена исследованию термодинамики и кинетики формирования зернограничных сегрегаций с учетом конечного размера зерен. Предложенные и развитые теоретические модели, допускающие первопринципную параметризацию, являются наиболее актуальными для нанокристаллических сплавов, когда доля атомов, принадлежащих границам зёрен, сопоставима с их объёмной долей. Предсказано существование критического размера зерна в модели идеального твёрдого раствора. Для сплавов, имеющих термодинамический стимул распада, выполнено моделирование кинетики распада и формирования зернограничных сегрегаций методом фазовых полей, систематизированы возможные морфологии распада.

В седьмой главе рассмотрены фазовые превращения в условиях интенсивной пластической деформации при умеренных температурах, когда в результате внешнего воздействия механическая энергия преобразуется во внутреннюю энергию сплава, так что сплав в процессе воздействия удаляется от состояния термодинамического равновесия. Несмотря на большой объем имеющихся в литературе экспериментальных фактов, физические механизмы, ответственные за сопровождающие этот процесс структурные превращения, до сих пор остаются дискуссионными. В работе предлагается и исследуется модель, основанная на представлении о локальном развитии неравновесного превращения на движущихся структурных дефектах (дислокациях и границах зёрен), в области которых термодинамические свойства сплава локально изменены, а скорость диффузии существенно выше, чем в объеме материала. В зависимости от параметров модель допускает реализацию широкого спектра неравновесных фазовых превращений, включая разупорядочение, растворение выделений, стационарные дисперсные состояния и так далее.

В заключении сформулированы основные результаты и представлены выводы по работе.

Научная ценность и новизна работы обусловлена следующими достижениями: (i) разработана теория фазовых и структурных превращений в углеродистой стали с первопринципной параметризацией, и впервые показано, что магнетизм играет ключевую роль в смене сценариев превращений с температурой; (ii) предложены возможные механизмы формирования перлитных и бейнитных колоний, показано, что автокаталитический механизм распада метастабильных фаз отличается от классической нуклеации и спинодального распада и может иметь отношение не только к перлитному

превращению в стали, но и к другим эвтектоидным и эвтектическим системам; (iii) предложен последовательный подход, впервые позволивший вычислить предел растворимости Cu в матрице ОЦК-Fe в согласии с экспериментом и выявить роль магнетизма в распаде сплава замещения Fe-Cu; (iv) установлено существование критического размера зерна, при достижении которого объем зерна очищается от растворённых атомов, а их концентрация на границе зерна начинает зависеть от его размера; (v) предложена модель неравновесных фазовых превращений в сплавах в условиях интенсивной пластической деформации, основанная на представлении о локальном развитии фазового превращения на структурных дефектах.

На мой взгляд, наибольшую **практическую значимость** в результатах работы имеет развитие подходов атомистического моделирования фазовых превращений с первопринципной параметризацией, а также аналитические модели термодинамики и кинетики формирования зернограницных сегрегаций в нанокристаллических сплавах, которые могут быть применены к целенаправленному проектированию новых материалов со структурно-управляемыми свойствами.

Достоверность полученных результатов обеспечивается сравнением полученных результатов с экспериментальными данными, тестированием предлагаемых моделей для хорошо изученных сценариев превращений, использованием апробированных конечно-разностных схем, публикацией полученных результатов в ведущих рецензируемых журналах.

В то же время, к работе имеется ряд **замечаний**:

- 1) Утверждение автора о "замороженном состоянии", достигнутом после воздействия больших пластических деформаций под высоким давлением требует критического анализа. Известно (об этом также упоминается в тексте диссертации), что в таких условиях могут генерироваться избыточные вакансии с плотностью, близкой к предплавильной. Однако, под давлением они связаны, и работы, например, группы Цехетбауэра-Шафлера показывают, что значимые эффекты могут происходить уже после деформации - при разгрузке и рекомбинации вакансий в результате снятия давления. Разработанные модельные представления не учитывают подобный феномен, роль давления в целом детально не обсуждается.
- 2) Зёрна в работе аппроксимируются шарами, тогда как, согласно схеме простого сдвига при ИПД существенным фактором становится удлинение зерна. При этом наличие сегрегаций может уменьшать движущую силу миграции границ зёрен и усугублять этот эффект.
- 3) Экспериментальные данные указывают на то, что сегрегация по границам зёрен в наноструктурных материалах, полученных ИПД, может иметь явно выраженный неравномерный характер. Более того, некоторые границы в материале могут быть обеднены тем же самым элементом, что сегрегирует на других границах. Рассмотренные подходы к моделированию не воспроизводят этот факт, важный для проявления свойств.
- 4) В диссертации утверждается (стр. 247), что дислокационная мода деформации сменяется ротационной при размере зёрен в 200 нм. Это несколько противоречит многим работам (в том числе, включающим результаты текстурных исследований), где прекращение работы механизма дислокационного скольжения допускается при критическом размере зёрен на порядок меньшем.
- 5) Объём диссертации и автореферата кажутся завышенными. В частности, первая глава представляется избыточной, поскольку постановка задачи дана во введении, а литературный обзор в той или иной мере приводится в начале

каждой из последующих глав. Также встречается повторяющиеся описание методических аспектов (например, про алгоритм Метрополиса) и введение сокращений. Название диссертации в части «стали и сплавов», возможно, имеет чересчур обобщённый характер, так как в работе рассмотрены в основном сплавы на основе железа. В тексте встречаются пунктуационные погрешности, хотя в целом диссертация написана грамотным и ясным научным языком.

В то же время, отмеченные замечания не влияют на положительную в целом оценку диссертационной работы Разумова И.К. и не ставят под сомнение квалификацию автора либо основные выводы и положения, выносимые на защиту.

Заключение

Диссертационная работа Разумова Ильи Кимовича «Сценарии фазовых превращений и формирование микроструктуры в стали и сплавах: роль магнетизма, легирования и влияние внешних воздействий» представляет собой цельную и законченную научно-квалификационную работу, выполненную на высоком научном уровне. Совокупность полученных результатов в области разработки последовательных моделей фазовых превращений и моделирования кинетики превращений можно классифицировать как значительное научное достижение в физике конденсированного состояния.

Диссертационная работа соответствует паспорту научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации.

По актуальности, научной новизне, практической значимости, достоверности полученных результатов, обоснованности выводов, представленная диссертационная работа соответствует требованиям п.9 положения «О порядке присуждения ученых степеней» утвержденном постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года №842 (с изменениями от 21 апреля 2016 г. №335), предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Разумов Илья Кимович, является высококвалифицированным научным работником и заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

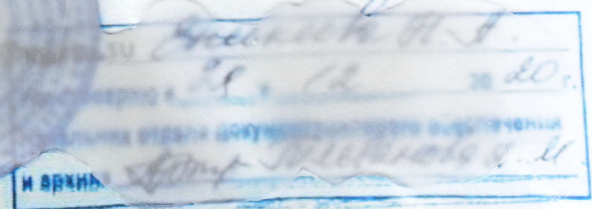
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Института физики перспективных
материалов, профессор кафедры Материаловедения
и физики металлов федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Уфимский государственный
авиационный технический университет»
Докторская диссертация защищена
по специальностям 01.02.04 – Механика
деформируемого твёрдого тела и
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Еникеев Нариман Айратович

«29» 12 2020 г.

С отзывом ознакомлен
И.К. Разумов / И.К. Разумов
31.12.2020 г.

Адрес: 450008, г. Уфа, ул. Карла Маркса
Телефон: +7 (347) 273-44-49; Email: razumov@uafu.ru



Сведения об официальном оппоненте

по диссертации Разумова Ильи Кимовича
 на тему: «Сценарии фазовых превращений и формирование микроструктуры в стали и сплавах: роль магнетизма, легирования и влияние внешних воздействий»
 на соискание ученой степени доктора физико-математических наук
 по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния,
 представленной к рассмотрению в диссертационном совете Д 004.003.01 при Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН) по адресу: 620108, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской 18.

| | |
|---|--|
| Фамилия Имя Отчество | Еникеев Нариман Айратович |
| Ученая степень (шифр специальности по диплому), ученое звание | доктор физико-математических наук по специальностям: 01.02.04 — Механика деформируемого твердого тела; 01.04.07 — Физика конденсированного состояния |
| Место работы, должность | Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Уфимский государственный авиационный технический университет», С.н.с. Научно-исследовательского института физики перспективных материалов, руководитель сектора «Моделирование объемных наноматериалов», профессор кафедры Материаловедения и физики металлов |
| Почтовый индекс, адрес | 450008, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. К. Маркса, д. 12/3 |
| Контактный телефон | +7(347)2734449 |
| Адрес электронной почты | nariman.enikeev@ugatu.su |

Список монографий и основных публикаций по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций)

| | |
|----|---|
| 1. | I. Sabirov; N. A. Enikeev; M. Yu. Murashkin; R. Z. Valiev, Bulk Nanostructured Materials with Multifunctional Properties, Springer, 2015, p. 161 (монография) |
| 2. | A. Mohammadi, N.A. Enikeev, M. Yu. Murashkin, M. Arita, K. Edalati, Developing age-hardenable Al-Zr alloy by ultra-severe plastic deformation: significance of supersaturation, segregation and precipitation on hardening, Acta Mater. 203 (2021) 116503 |
| 3. | M. Odnobokova, A. Belyakov, N. Enikeev, R. Kaibyshev, R. Z. Valiev, Microstructural Changes and Strengthening of Austenitic Stainless Steels during Rolling at 473 K, Metals 10 (2020) 1614 |
| 4. | A. Mazilkin, Yu. Ivanisenko, X. Sauvage, A. Etienne, B. Radiguet, R.Z. Valiev, M. Abramova, N. Enikeev, Nanostructured Fe-Cr-W Steel Exhibits Enhanced Resistance to Self-Ion Irradiation, Adv. Eng. Mater. 22 (2020) 1901333 |
| 5. | S.V. Bobylev, N.A. Enikeev, A.G. Sheinerman, R.Z. Valiev, Strength enhancement induced by grain boundary solute segregations in ultrafine-grained alloys, Int. J. Plast. 123 (2019) 133–144 |

| | |
|-----|--|
| 6. | A.E. Medvedev, M.Y. Murashkin, N.A. Enikeev, I. Bikmukhametov, R.Z. Valiev, P.D. Hodgson, R. Lapovok, Effect of the eutectic Al-(Ce,La) phase morphology on microstructure, mechanical properties, electrical conductivity and heat resistance of Al-4.5(Ce,La) alloy after SPD and subsequent annealing. <i>J. Alloys Compd.</i> 796 (2019) 321-330 |
| 7. | V.K. Shamardin, M.M. Abramova, T.M. Bulanova, A.A. Karsakov, A.E. Fedoseev, A.V. Obukhov, R.Z. Valiev, I.V. Alexandrov, G.I. Raab, N.A. Enikeev, Stability of the structure and properties of an ultrafine-grained Cr-Ni steel irradiated with neutrons in nuclear reactor core conditions. <i>Mater.Sci. Eng. A</i> 712 (2018) 365–372 |
| 8. | A. Mazilkin, M.M. Abramova, N.A. Enikeev, I.V. Lomakin, R.Z. Valiev, Yu. Ivanisenko, C. Kübel, A. Etienne, X. Sauvage, B. Radiguet, The effect of tungsten on microstructure and mechanical performance of an ultrafine Fe-Cr steel. <i>Mater. Lett.</i> 227 (2018) 292–295 |
| 9. | J.G. Kim, N.A. Enikeev, J.B. Seol, M.M. Abramova, M.V. Karavaeva, R.Z. Valiev, C.G. Park, H.S. Kim, Superior Strength and Multiple Strengthening Mechanisms in Nanocrystalline TWIP Steel. <i>Sci. Rep.</i> 8 (2018) 11200(1-10) |
| 10. | А. В. Зиновьев, М. Г. Бапанина, Р. И. Бабичева, Н. А. Еникеев, С. В. Дмитриев, К. Zhou, Деформация нанокристаллических бинарных алюминиевых сплавов с сегрегацией Mg, Co и Ti по границам зерен. <i>ФММ</i> , 2017, том 118, № 1, с. 69-78 |
| 11. | E. Hug, R. Prasath Babu, I. Monnet, A. Etienne, F. Moisy, V. Pralong, N. Enikeev, M. Abramova, X. Sauvage, B. Radiguet, Impact of the nanostructuration on the corrosion resistance and hardness of irradiated 316 austenitic stainless steels / <i>Appl. Surf. Sci.</i> 2017. V. 392. P. 1026-1035. |
| 12. | E. Aydogan, T. Chen, J.G. Gigax, D. Chen, X. Wang, P.S. Dzhumaev, O.V. Emelyanova, M.G. Ganchenkova, B.A. Kalin, M. Leontiva-Smirnova, R.Z. Valiev, N.A. Enikeev, M.M. Abramova, Y. Wu, W.Y. Lo, Y. Yang, M. Short, S.A. Maloy, F.A. Garner, L. Shao, Effect of self-ion irradiation on the microstructural changes of alloy EK-181 in annealed and severely deformed conditions. <i>J. Nucl. Mater.</i> 487 (2017) 96-104 |
| 13. | M. Odnobokova, A. Belyakov, N. Enikeev, D.A. Molodov, R. Kaibyshev, Annealing behavior of a 304L stainless steel processed by large strain cold and warm rolling. <i>Mater. Sci. Eng. A</i> 689 (2017) 370-383 |
| 14. | J.G. Kim, N.A. Enikeev, M.M. Abramova, B.H. Park, R.Z. Valiev, H.S. Kim, Effect of initial grain size on the microstructure and mechanical properties of high-pressure torsion processed twinning-induced plasticity steels. <i>Mater. Sci. Eng. A</i> 682 (2017) 164-167 |
| 15. | S.V. Dobatkin, O.V. Rybalechenko, N.A. Enikeev, A.A. Tokar, M.M. Abramova, Formation of fully austenitic ultrafine-grained high strength state in metastable Cr-Ni-Ti stainless steel by severe plastic deformation / <i>Mater. Lett.</i> 2016. Vol. 166. P. 276-279. |

Не являюсь членом экспертного совета ВАК. Согласен на включение моих персональных данных в аттестационное дело, размещение в Интернете и их обработку.

Подпись официального оппонента

Еникеев Н.А.

28.12.2020

