

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Разумова Ильи Кимовича

на тему « **Сценарии фазовых превращений и формирование микроструктуры в сталях 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.

1. Актуальность темы.

Специалистам в области физического металловедения хорошо известно, что большинство эксплуатационных характеристик сталей, таких как прочностные, механические и коррозионные характеристики сталей определяются не только кристаллическим строением и химическим составом, но и микроструктурным состоянием, возникающем в процессе их изготовления и термической обработки. Несмотря на огромный прогресс физики металлов, в важнейшей прикладной области – металловедении сталей, пока не удается создать общую теорию, описывающую кинетику формирования как равновесных, так и неравновесных микроструктурных состояний под действием температуры и внешних воздействий. В частности, остаются неясными причины закономерной смены сценариев превращений (от ферритного к мартенситному) при охлаждении углеродистой стали, и механизмы формирования регулярных микроструктур (перлит, бейнит); недостаточно развита теория зернограничных сегрегаций с учетом конечного размера зерна; отсутствует целостная картина и остаются дискуссионными микроскопические механизмы неравновесных фазовых превращений в условиях интенсивной пластической деформации. Отсутствие такой теории существенно затрудняет процесс управления свойствами традиционных и разработку новых типов сталей. В связи с этим докторская диссертация И.К.Разумова, в которой делается попытка построения такой теории, безусловно актуальна.

2. Цель и новизна исследования.

Целью работы является исследование возможных механизмов фазовых и структурных превращений в сталях, а также морфологии формирующихся микроструктур при внешних воздействиях, на основе термодинамических и кинетических моделей, параметры которых могут быть определены прямыми расчетами из первых принципов. Научная новизна работы определяется рядом ранее неизвестных результатов, а именно: а) предложена новая теория фазовых и структурных превращений в углеродистой стали, в которой впервые предложена и обоснована гипотеза о ключевой роли магнетизма в смене типов превращений с температурой; б) предложен и обоснован новый автокаталитический механизм распада метастабильных фаз; в) впервые предсказано существование критического размера зерна, при достижении которого изменяются свойства зернограничных сегрегаций; г) предложен новый механизм аномальных диффузионных фазовых превращений в сталях и сплавах в условиях интенсивной пластической деформации.

3. Научная и практическая ценность работы определяется тем, что в ней сформированы теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение, связанное с разработкой научной базы для решения двух актуальных проблем металлургии – разработки перспективных материалов и создания инженерных компьютерных программ для автоматизированной системы управления технологическими процессами термообработки сталей. Полученные результаты несомненно будут полезны для дальнейших исследований в ведущих научных центрах, таких как Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН (г. Екатеринбург), Институт физики твердого тела РАН (г. Черноголовка), Курчатовский институт (г. Москва), Институт физики перспективных материалов (г. Уфа) НИТУ МИСиС (г. Мооква), Уральский федеральный университет (г. Екатеринбург), Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск), а также для разработки компьютерных систем управления технологическими процессами на ведущих предприятиях российской металлургии.

4. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации обеспечивается использованием надежных и апробированных в мировой литературе теоретических методов и пакетов программ компьютерного моделирования. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с данными экспериментов и компьютерного моделирования, полученными другими авторами. Разработанные в диссертации положения были опубликованы в 25 высокорейтинговых журналах а также докладывались на престижных международных конференциях и семинарах: International Workshop (ADIS-2014), Tegernsee (2014); 10-я Международная научно-техническая конференция «Современные металлические материалы и технологии» (СММТ-13), С.-Петербург (2013), 19-th International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (ISMANAM 2012) Moscow (2012); 17-th International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (ISMANAM 2010) Zurich (2010).

5. Общая оценка содержания диссертации.

Содержание диссертации соответствует формуле Паспорта специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния» в пунктах 1 («Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов») и 5 («Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий»). Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения, и списка литературы из 525 наименований. Объем основного текста составляет 357 страниц, включая 172 формулы, 6 таблиц и 99 рисунков.

6. Структура, содержание и завершенность работы

ВО ВВЕДЕНИИ обоснована актуальность темы диссертации, обозначены цели работы, ее научная новизна и практическая значимость, а также структура диссертации.

В ГЛАВЕ 1 приведено подробное описание различных типов фазовых и структурных превращений (в зависимости от способов термической и термомеханической обработки) и существующих методов теоретического исследования кинетики превращений в сталях, а также сформулированы задачи исследования.

В ГЛАВЕ 2 построен функционал свободной энергии железа и углеродистой стали с учетом решеточных и магнитных степеней свободы, с первопринципной параметризацией бейновского пути γ - α превращения. Показано, что смена сценариев превращений (ферритное, бейнитное, мартенситное) может быть объяснена возрастанием ближнего магнитного порядка в системе Fe-C при охлаждении. При высоких температурах реализуются ферритное и перлитное превращения, контролируемые диффузией углерода. При охлаждении до низких температур происходит мартенситное превращение, представляющее собой бездиффузионную сдвиговую перестройку решетки γ - α . При небольших переохлаждениях возможно бейнитное превращение, которое может реализовываться как с участием диффузии углерода, так и без нее.

В ГЛАВЕ 3 представлено моделирование кинетики формирования микроструктур (феррит, перлит, бейнит, мартенсит), предложены механизмы перлитного и бейнитного превращений, определены условия реализации изотермического и атермического мартенсита, пластинчатого и глобулярного перлита, верхнего и нижнего бейнита.

В ГЛАВЕ 4 исследуется кинетика распада в сплавах замещения и роль магнетизма в распаде, на примере сплава FeCu, с использованием параметров, полученных из первых принципов. Приведены результаты моделирования распада в сплаве ОЦК-FeCu методом кинетического Монте-Карло. Рассмотрен распад в разбавленном сплаве FeCu, при наличии плоской границы зерна, через центр ОЦК-ячейки. В предполо-

жении, что выделения зарождаются преимущественно на структурных дефектах (дислокации и границы зерен) построена кинетическая ТТТ диаграмма, качественно совпадающая с экспериментальными данными.

В ГЛАВЕ 5 рассмотрены механизмы стабилизации дисперсных состояний. Предсказаны условия кинетической или термодинамической стабилизации дисперсных состояний. Кинетическая стабилизация реализуется в трехфазных сплавах, когда в окрестности первичных выделений формируется оболочка третьей фазы, в которой понижены коэффициенты диффузии, так что первичные выделения оказываются "изолированы" от матрицы. Термодинамическая стабилизация возникает также и в двухфазных сплавах, если на межфазной границе имеет место тенденция сегрегации примеси, причем энергия сегрегации выше критического значения. Тогда в системе появляется равновесный размер выделений. Такая ситуация наиболее вероятна при нарушении когерентности решетки на межфазной границе. Показано, что формирование примесной оболочки вокруг выделений в двухфазных сплавах не приводит к затормаживанию распада.

В ГЛАВЕ 6 рассмотрены термодинамика и кинетика сегрегаций на границах зерен (ЗГС) и зернограничный распад с учетом измельчения размера зерна при пластической деформации. Исследована термодинамика и кинетика ЗГС в идеальном твердом растворе в рамках простой модели в форме шара радиуса L с приграничным слоем шириной d , при размещении в котором энергия примесных атомов понижается на величину энергии сегрегации. Предсказано существование при низких температурах критического размера зерна для нанокристаллических сплавов, при котором примесь покидает объем зерна, выделяясь на его границах. Получены оценки характерных времен образования сегрегаций и выделений легирующих элементов и примесей, используемых при производстве сталей, на границах зерен в ОЦК и ГЦК Fe.

В ГЛАВЕ 7 исследуются аномальные фазовые превращения в сталях и сплавах в условиях интенсивной пластической деформации. Для анализа этого явления используются представления нелинейной термодинамики неравновесных процессов, что позволило предложить диаграмму неравновесных стационарных состояний сплава в зависимости от температуры и интенсивности пластической деформации.

Предложенная диаграмма объясняет значительную часть полученных к настоящему времени экспериментальных фактов и может служить основой для классификации аномальных фазовых превращений в сталях и сплавах в условиях интенсивной пластической деформации.

Таким образом, работа представляет цельное и завершенное исследование механизмов фазовых и структурных превращений в сталях, а также морфологии формирующихся микроструктур при внешних воздействиях, на основе термодинамических и кинетических моделей. Диссертация написана ясным и понятным языком, недостатков в оформлении нет.

7. Достоинства и недостатки работы.

Большим достоинством диссертации является применение современных методов многомасштабного компьютерного моделирования, основанных на результатах вычисления энергетических параметров из первых принципов с последующим моделированием структурных и фазовых превращений методом фазовых полей и Монте-Карло с использованием оригинальных компьютерных программ. Работа, несомненно, является важным шагом на пути создания компьютерных инженерных систем выбора состава и режима термообработки сталей, основанных на последовательном статистико-термодинамическом описании фазовых диаграмм и кинетики превращений в сталях.

Замечания по работе:

1. При построении функционала свободной энергии системы Fe-C была использована первопринципная параметризация основанная на пути минимальной энергии вдоль траектории бейновской модели γ - α превращения. Именно на основе этого функционала, в работе показана смена сценариев превращений (ферритное, бейнитное, мартенситное) в зависимости от степени ближнего магнитного порядка. Однако во многих работах бейновская модель подвергнется критике и часто заменяется моделями Курдюмова-Закса, а также недавно предложенной моделью метастабильной промежуточной структуры (MIS). Хотелось бы знать, насколько изменятся выводы диссертации, если модель Бейна будет заменена другими?

2. В методе фазовых полей (а он является одним из основных в данной работе), предсказания модели существенно зависят от коэффициентов k_1 и k_n в Функционале Гинзбурга-Ландау. Физически они означают ширину границы между γ -фазой, ферритом и цементитом. В диссертации всегда приводятся результаты, полученные для одного значения этих параметров, скорее всего для краткости. Однако, хотелось бы знать насколько может изменить результаты моделирования варьирование ширины границ?
3. В главе 7 автор проводит рассмотрение разных типов неравновесных процессов и структур, возникающих при интенсивной пластической деформации сплавов. Поскольку данные процессы включают в себя и возникновение циклических диссипативных структур, то это область нелинейной неравновесной термодинамики открытых структур, поэтому автор справедливо вводит в уравнение (7.2) слагаемое dS/dt , описывающее производство энтропии. Однако, при рассмотрении стационарных неравновесных процессов это слагаемое далее не обсуждается. Насколько это правомерно?

8. Заключение.

Диссертационная работа Ильи Кимовича Разумова «Сценарии фазовых превращений и формирование микроструктуры в стали и сплавах: роль магнетизма, легирования и влияние внешних воздействий» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой предложены новая теория фазовых превращений в системе Fe-C, а также теоретически рассмотрены вопросы неравновесных фазовых превращений в условиях интенсивной пластической деформации. Указанные теории безусловно следует считать научными достижениями в области физики конденсированного состояния.

Содержание диссертации соответствует формуле Паспорта специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния» в пунктах 1 («Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов») и 5 («Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий»).

По актуальности темы исследования, объему выполненной работы, научной новизне, достоверности и научной ценности полученных результатов, обоснованности выводов и положений выносимых на защиту, представленная диссертационная работа полностью соответствует критериям, перечисленным в Постановлении Правительства РФ от 24 сентября 2013 года N842 «О порядке присуждения ученых степеней» (с изменениями, внесенными Постановлением Правительства РФ от 21 апреля 2016 г. №335), предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Илья Кимович Разумов, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,
главный научный сотрудник кафедры
«Физика наноразмерных систем»
Южно-Уральского государственного
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник

Дата: 24.12.2020

Подпись: Мирзоева А.А. заверяю: РНО

Адрес: просп. Ленина, 76, г. Челябинск, 454080
e-mail^ mirzoevaa@susu.ru

Начальник службы
селективного
контроля

С 07:30 часов
13.01.2021 г.
И.К. Разумов

(Мирзоев А.А.)

СВЕДЕНИЯ ОБ ОФИЦИАЛЬНОМ ОППОНЕНТЕ

- **фамилия, имя, отчество:** МИРЗОЕВ АЛЕКСАНДР АМИНУЛАЕВИЧ

- **ученая степень:** Доктор физико-математических наук по специальности 02.00.04 «Физическая химия»;

- **ученое звание:** старший научный сотрудник по специальности 01.04.07 «Физика твердого тела» ;

- **полное наименование организации:** Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)

- **должность:** главный научный сотрудник;

- **список основных публикаций официального оппонента** по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет (не более 15 публикаций):

1. Mirzaev, D.A., Mirzoev, A.A. Magnetic component of mixing enthalpy for BCC Fe-Cr alloys: Ab initio based model//Journal of Physics: Conference Series, 2019, 1389(1), 012007
2. Sobolev, A., Mirzoev, A. Structure and stability of (Cr, Fe)₇C₃ ternary carbides in solid and liquid state// Journal of Alloys and Compounds, 2019, 804, стр. 566-572
3. Mirzoev, A.A., Ridnyi, Y.M., Verkhoviykh, A.V. Ab initio Computer Simulation of the Energy Parameters and the Magnetic Effects in Ternary Fe-X-C (X = Si, P, S, Cr, Mn) Systems//Russian Metallurgy (Metally), 2019, 2019(2), pp. 168-172
5. Mirzayev, D.A., Mirzoev, A.A., Buldashev, I.V., Okishev, K.Y. Metastable Equilibrium between Cubic and Tetragonal Ferrites in Fe-C Alloys with Excluded Carbide Formation//Physics of Metals and Metallography, 2018, 119(12), pp. 1148-1153
6. Hydrogen interaction with ferrite/cementite interface: Ab initio calculations and thermodynamics Mirzoev, A.A., Verkhoviykh, A.V., Okishev, K.Y., Mirzaev, D.A. Molecular Physics, 2018, 116(4), стр. 482-490
7. Chirkov, P., Mirzoev, A., Mirzaev, D. Carbon Ordering in Martensite Lattice Under External Stress: Thermodynamic Theory and Molecular Dynamics Simulation//Physica Status Solidi (B), 2018, 255(7), 1700665.
8. Carbon Ordering in Martensite Lattice Under External Stress: Thermodynamic Theory and Molecular Dynamics Simulation Chirkov, P., Mirzoev, A., Mirzaev, D. (2018) Physica Status Solidi (B) V. 255(7) 1700665 .
9. Interaction between Carbon Atoms and Carbon Activity in fcc Iron: Thermodynamic Theories and Computer Simulation Ridnyi, Y.M., Mirzoev, A.A., Schastlivtsev, V.M., Mirzaev, D.A. (2018) Physics of Metals and Metallography 119(3), pp. 251-257
10. Ab initio simulation of dissolution energy and carbon activity in fcc Fe Ridnyi, Y.M., Mirzoev, A.A., Mirzaev, D.A. (2017) Physics of the Solid State 59(7), pp. 1279-1284 .
11. Ab initio modelling of the interaction of H interstitials with grain boundaries in bcc Fe Mirzaev, D.A., Mirzoev, A.A., Okishev, K.Y., Verkhoviykh, A.V. 2016 Molecular Physics 114(9), pp. 1502-1512
12. Ordering of Carbon Atoms in Free Martensite Crystals and When Enclosed in Elastic Matrix Mirzayev, D.A., Mirzoev, A.A., Chirkov, P.V. 2016 Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science 47(2), pp. 637-640

Ученый секретарь Совета ЮУрГУ



(Я. Л. Березовская)