

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 004.003.01 НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ  
НАУКИ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ ИМЕНИ М.Н. МИХЕЕВА  
УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИФМ УрО РАН) МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 29.01.2021, № 1

О присуждении Разумову Илье Кимовичу, гражданину России, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Сценарии фазовых превращений и формирование микроструктуры в стали и сплавах: роль магнетизма, легирования и влияние внешних воздействий» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 30.09.2020, протокол № 6, диссертационным советом Д004.003.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН), Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, 620108, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18, приказы Минобрнауки РФ № 714/нк от 02.11.2012 и № 188/нк от 26.02.2015.

Соискатель Разумов Илья Кимович, 1976 года рождения, в 1999 году окончил с отличием Физико-технический факультет Уральского государственного технического университета (УГТУ-УПИ) (ныне Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уральский федеральный университет им. первого Президента Б.Н. Ельцина») по специальности «Ядерная физика». В 2005 году Разумов И.К. защитил кандидатскую

диссертацию по теме «Влияние границ зерен на кинетику распада твердых растворов» в Диссертационном совете Д004.003.01, по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. В период подготовки докторской диссертации работал в Институте физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук в должностях научного сотрудника, старшего научного сотрудника.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук выполнена в лаборатории цветных сплавов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный консультант – доктор физико-математических наук Горностырев Юрий Николаевич работает главным научным сотрудником, заведующим лабораторией цветных сплавов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Официальные оппоненты:

1. Мирзоев Александр Аминулаевич, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор кафедры “Физика наноразмерных систем” Южно-Уральского государственного университета, г.Челябинск;

2. Еникеев Нариман Айратович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры материаловедения и физики металлов Уфимского государственного авиационного технического университета, руководитель сектора “Моделирование объемных наноматериалов” Научно-исследовательского института физики перспективных материалов, г.Уфа;

3. Мазуренко Владимир Владимирович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой теоретической физики и прикладной математики ФГАОУ ВПО “Уральский Федеральный Университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина”, г. Екатеринбург

– дали положительные отзывы о диссертации И.К. Разумова.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Научный Центр РАН в Черноголовке (НЦЧ РАН), г. Черноголовка, в своем положительном заключении, подписанном Бучаченко Анатолием Леонидовичем, доктором химических наук, академиком РАН, главным научным сотрудником НЦЧ РАН указала, что

«Диссертационная работа соответствует пункту 1: «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» и пункту 5: «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения» Паспорта специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

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 №842 “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».

Соискатель имеет 33 работы, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, 32 из которых проиндексированы системой цитирования Web of Science, в том числе по теме диссертации 25 работ. Общий объем научных изданий 35 печатных листов.

В диссертационной работе предложен и развит новый последовательный подход к исследованию кинетики фазовых и структурных превращений в стали и сплавах, включающий создание теоретических моделей с первопринципной параметризацией, численный анализ которых позволил установить сценарии превращений в зависимости от температуры, определить морфологические особенности формирующихся фаз и выяснить механизмы реализации неравновесных состояний при интенсивных внешних воздействиях.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. *Razumov I.K.* Effect of magnetism on kinetics of  $\gamma$ - $\alpha$  transformation and pattern formation in iron, / I.K. Razumov, Yu.N. Gornostyrev and M.I. Katsnelson // Journal of Physics: Cond. Matter. –2013. – V.25. – 135401 (9 pp.)
2. Role of magnetic degrees of freedom in a scenario of phase transformations in steel / I.K. Razumov, D.V. Boukhvalov, M.V. Petrik, V.N. Urtsev, A.V. Shmakov, M.I. Katsnelson and Yu.N. Gornostyrev // Phys. Rev. B. – 2014. – V.90. – 094101 (8 pp.)
3. *Razumov I.K.* Autocatalytic Mechanism of Pearlite Transformation in Steel / I.K. Razumov, Yu.N. Gornostyrev and M.I. Katsnelson // Phys. Rev. Applied. –2017. – V.7. – 014002 (8 pp.)
4. *Разумов И.К.* Стабилизация роста перлитной колонии в результате взаимодействия углерода с дилатациями решетки / И.К. Разумов // ФТТ. –2017. –V.59, №10. – С.1885–1891.
5. *Разумов И.К.* Возможные механизмы формирования бейнитных колоний / И.К. Разумов // ФТТ. –2019. –Т.61. –№2. –С.220–223.
6. *Разумов И.К.* Псевдоспинодаль при моделировании распада сплава методом Монте-Карло / И.К. Разумов // ФТТ. –2017. –Т.59, №4. –С.627–630.
7. *Разумов И.К.* Модель распада сплава Fe-Cu с концентрационно-зависящими межатомными взаимодействиями / И.К. Разумов, И.Г.Шмаков // ФТТ. – 2019. – Т.61, №6. –С.1031–1039.
8. *Разумов И.К.* Метастабильные дисперсные состояния, возникающие при распаде трехкомпонентного сплава/ И.К. Разумов, Ю.Н. Горностырев // ФТТ. – 2019. –Т.61, №12. – С.2462–2470.

9. *Разумов И.К.* Аномальные дисперсные состояния сплавов, обусловленные сегрегацией примеси на межфазных границах / И.К. Разумов // ФТТ. – 2014. –Т.56, №4. – С.749–753.
10. *Разумов И.К.* Сегрегации на границах зерна в нанокристаллических сплавах / И.К. Разумов // Журн. Физ. Хим. –2014. –Т.88, №3. –С.485–494.
11. Неравновесные фазовые превращения в сплавах при интенсивной пластической деформации / И.К. Разумов, А.Е. Ермаков, Ю.Н. Горностырев, Б.Б. Страумал // УФН. – 2020. –Т.190,№8.–С.785–810.
12. *Разумов И.К.* Неравновесные диффузионные фазовые превращения в сплавах, обусловленные миграцией границ зерен и дислокаций / И.К. Разумов, Ю.Н. Горностырев, А.Е. Ермаков // ФТТ. –2019. – Т.61. –№2. –С.346–356

На диссертацию и автореферат поступило 5 отзывов. Все отзывы положительные. В них отмечается актуальность темы диссертационной работы, научная новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость.

Отзывы без замечаний поступили: от Хромова Константина Юрьевича, д.ф.м.н., начальника лаборатории моделирования перспективных материалов ККИАЭ НИЦ «Курчатовский институт», г.Москва и от Назарова Айрата Ахметовича, д.ф.м.н., заместителя директора по научной работе ФГБУН «Институт сверхпластичности металлов РАН», г.Уфа.

Замечания и вопросы содержатся в следующих отзывах:

1. От к.т.н., доцента Долгачева Юрия Вячиславовича и д.т.н., профессора, заслуженного деятеля науки РФ Пустовойт Виктора Николаевича, кафедра «Физическое и прикладное материаловедение» ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет», г.Ростов-на-Дону.

Замечание 1. На странице 18 автореферата идет речь о гомогенном зарождении при мартенситном превращении из флуктуаций оставшихся от высокотемпературного состояния. Из текста автореферата не очень понятно, о флуктуациях какой природы идет речь?

Замечание 2. Имеющиеся экспериментальные данные заставляют сомневаться в возможности гомогенного зарождения мартенсита (например, эксперименты на свободных от дефектов микроскопических монокристаллах).

2. От Чувильдеева Владимира Николаевича, д.ф.м.н., профессора, директора Научно-исследовательского физико-технического института Национального исследовательского Нижегородского государственного университета им. Н.И.Лобачевского, г.Нижний Новгород.

Замечание 1. Из п.2.2 и 2.3 автореферата остается неясным, как именно автор вычислил теоретическую зависимость температуры  $A_3$  от концентрации углерода. На Рис.5б отсутствуют экспериментальные данные по зависимости температуры  $A_3$  от концентрации углерода, что не позволяет оценить соответствие расчетов и экспериментальных данных.

Замечание 2. При рассмотрении кинетики ферритного превращения (стр.19) моделирование диффузионно-контролируемого процесса образования и роста полигонального феррита происходит с учетом тройных стыков зерен, вблизи которых изменяется химический потенциал углерода. Следует объяснить, почему возможно изменение этой величины вблизи тройных стыков зерен.

Замечание 3. Неясно как учитывался в Главе 5 при моделировании распада твердого раствора «критический размер зародыша» (устойчивый размер частицы, меньше которого образующиеся частицы должны растворяться).

Замечание 4. При рассмотрении процесса распада твердого раствора в трехкомпонентной системе (стр.30-31) автором выдвигается утверждение, что характер формирующихся фаз будет зависеть от соотношения коэффициентов диффузии компонент в кристаллической решетке. В частности, если скорость диффузии компонента В в матрице ниже, чем компонента А, то будут формироваться частицы со структурой «ядро (А) – оболочка (P/C)». Автору следует пояснить, почему в этом случае компоненту В будет выгоднее сформировать оболочку P/C вокруг частицы из компоненты А, а не образовать частицу второй фазы из компонента В (никак не связанную с частицей А).

3. От Урцева Владимира Николаевича, генерального директора ООО «Исследовательско-технологический центр “Аусферр”», г.Магнитогорск.

Замечание 1. Для производственной практики наиболее актуально теоретическое предсказание микроструктуры стали, возникающей в результате непрерывного охлаждения. Однако, представленные в диссертации результаты получены для изотермических условий, хотя и при различных температурах.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

1. Предложена модель фазовых превращений в железе и углеродистой стали с первопринципной параметризацией. Показано, что смена сценариев превращений (феррит, бейнит, мартенсит) при охлаждении обусловлена, прежде всего, возрастанием ближнего магнитного порядка. Предложены механизмы формирования перлитных и бейнитных колоний, выполнено моделирование типичных сценариев кинетики превращений.
2. Предложена модель распада сплава ОЦК-FeCu с первопринципной параметризацией, с учетом магнитного вклада в свободную энергию. Вычислен предел растворимости меди в согласии с экспериментальными данными. При моделировании распада методом Монте-Карло обнаружена линия, разделяющая области гомогенного и гетерогенного зародышеобразования на фазовой диаграмме.
3. Выявлены механизмы кинетической и термодинамической стабилизации дисперсных состояний при распаде трехкомпонентного сплава.
4. Представлена теория зернограничных сегрегаций для зерен конечного размера. Показано, что существует критический размер зерна, при достижении которого характер зернограничных сегрегаций качественно изменяется. Исследовано влияние границ зерен на кинетику фазовых превращений в объеме зерен.
5. Предложена диаграмма неравновесных стационарных состояний сплава в зависимости от температуры и интенсивности пластической деформации. Предложена модель неравновесных фазовых превращений, обусловленных диффузией на движущихся дислокациях и границах зерен. Показано, что в зависимости от термодинамических свойств сплава, температуры и скорости движения дефектов, возможно

разупорядочение сплава, растворение выделений равновесных фаз или распад с выделением неравновесных фаз и формирование диссипативных структур.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что в работе предложен и развит новый последовательный подход к исследованию кинетики фазовых и структурных превращений в стали и сплавах, включающий создание теоретических моделей с первопринципной параметризацией, численный анализ которых позволил установить сценарии превращений в зависимости от температуры, определить морфологические особенности формирующихся фаз и выяснить механизмы реализации неравновесных состояний при интенсивных внешних воздействиях.**

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что ряд полученных результатов могут найти непосредственное применение в металлургическом производстве (факторы, ответственные за морфологию перлитных и бейнитных колоний, условия стабилизации дисперсных состояний в многокомпонентных сплавах, критические размеры зерен при развитии зернограничных сегрегаций, морфологии сегрегаций и распада в зависимости от температуры). Последовательная теория фазовых превращений в стали и сплавах, учитывающая сдвигово-диффузионную кинетику превращения, вклад магнетизма в свободную энергию и перераспределение легирующих компонентов, может оказаться весьма востребованной для оптимизации технологических процессов. Концепция неравновесных фазовых превращений в условиях интенсивной пластической деформации систематизирует экспериментальные факты, предлагает механизмы реализации таких превращений и предсказывает возможные сценарии в зависимости от характера обработки.**



**Оценка достоверности результатов исследования выявила, что** результаты, получены с помощью апробированных конечно-разностных схем и тестирования моделей для хорошо изученных сценариев превращений (спинодальный распад, мартенситное превращение, сегрегации в крупнозеренных образцах). Имеется совпадение ряда результатов с известными экспериментальными данными (кривые старта ферритного, перлитного, бейнитного и мартенситного превращений в системе Fe-C, равновесный предел растворимости в сплаве Fe-Cu и др.) Излагаемые теоретические подходы опираются на новейшие достижения вычислительной физики и были опубликованы в ведущих высокорейтинговых журналах (Physical Review B, Physical Review Applied, Journal of Alloys and Compounds, Journal of Physics, Письма в ЖЭТФ, Успехи физических наук, Физика твердого тела и др.)

**Личный вклад соискателя** включает выбор темы исследования, постановку цели и конкретных задач диссертационной работы, а также расчеты фазовых диаграмм исследуемых систем и анализ кинетики превращений методами фазовых полей и Монте-Карло в рамках моделей с первопринципной параметризацией с использованием самостоятельно разработанных компьютерных программ. Анализ результатов исследования и подготовка статей к публикации, в большинстве случаев, выполнены совместно с научным консультантом Ю.Н. Горностыревым. Модель сдвиговых и диффузионных фазовых превращений в железе и стали сформулирована в соавторстве с Ю.Н. Горностыревым и М.И. Кацнельсоном; концепция неравновесных фазовых превращений при интенсивной пластической деформации – в соавторстве с Ю.Н. Горностыревым и А.Е. Ермаковым. Автором лично предложены теоретические модели, позволившие вычислить предел растворимости меди в сплаве ОЦК-FeCu и обнаружить предел устойчивости однородного твердого раствора с тепловыми флуктуациями состава (псевдоспинодаль). Автором лично проведен анализ механизмов автокаталитического распада

метастабильных фаз, возникновения колоний верхнего и нижнего бейнита, реализации неравновесных превращений, обусловленных локальным изменением термодинамических свойств в области ядер движущихся дефектов. Автору удалось предсказать появление равновесных дисперсных состояний при сегрегации примеси на межфазной границе, обнаружить критические размеры зерен при развитии сегрегаций и зернограничного распада. В теоретических моделях использовались параметры, полученные в результате *ab initio* расчетов С.Окатовым, Д.Бухваловым, М.Петриком, О.Горбатовым и др.

Диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, в которой разработаны модели кинетики фазовых и структурных превращений в стали и сплавах, допускающие первопринципную параметризацию с последующим моделированием микроструктур методами фазовых полей или Монте-Карло. Разработанные теоретические положения являются новым крупным научным достижением в физике конденсированного состояния. Диссертация полностью соответствует критериям «Положения о присуждении ученых степеней» в редакции, утвержденной Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 с изменениями от 21.04.2016 г. № 335.

На заседании 29.01.2021 года, проведенном в удаленном (очно-заочном интерактивном) режиме, диссертационный совет принял решение присудить Разумову Илье Кимовичу ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении открытого голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, 6 докторов наук по специальности 01.04.11 – Физика магнитных явлений, 6 докторов наук по специальности 05.16.01 – Металловедение и

термическая обработка металлов, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту – нет, проголосовали: «за» – 17, «против» – нет, «воздержался» – 1.

Председатель заседания,  
заместитель председателя диссертационного совета,  
доктор физ.-мат. наук

А.П.Носов

Ученый секретарь диссертационного совета,  
доктор физ.-мат. наук

Т.Б.Чарикова

1 февраля 2021 г.