

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Пасынкова А.Ю. «Термодинамика и кинетика эволюции структуры и фазового состава низколегированных сталей при аустенитизации и горячей деформации», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Актуальность темы диссертации. Диссертационная работа Пасынкова направлена на развитие и использование в практических приложениях методов моделирования фазовых и структурных превращений в многокомпонентных сплавах при термической и термомеханической обработке. Развиваемые в данной работе термодинамические методы, и методы моделирования кинетики фазовых превращений весьма важны для решения основной задачи материаловедения – разработки новых материалов с заданными свойствами. Основное же внимание в диссертации сосредоточено на прогнозировании состояния ансамбля карбонитридных частиц в сталях (как при горячей деформации, так и при изотермической выдержки), что имеет высокое прикладное значение. Таким образом, данную работу можно охарактеризовать, как актуальную и с фундаментальной и с практической точек зрения. На создание опытных сталей тратятся огромные деньги. Но количество опытных плавок можно резко уменьшить в пределе до нуля, если перед экспериментами провести компьютерное моделирование тех процессов, которые отражают функциональное назначение материала.

Актуальность практического применения полученных в данной работе результатов обусловлена ещё и тем, что для эффективного прогнозирования и управления свойствами современных комплексно-легированных сталей и сплавов, зачастую подвергаемых многостадийной термической и термомеханической обработке, применение традиционных упрощённых моделей и, тем более, чисто экспериментальных методов явно недостаточно. Этим и обусловлено постоянное развитие методов компьютерного моделирования в этой области, чему посвящена и данная работа.

Структура и основное содержание диссертации.

Основная часть диссертации включает пять глав. **В первой главе** подробно описываются подходы, применяемые в настоящее время для решения проблем термодинамического моделирования, и моделирования эволюции структуры во время термической и термомеханической обработок. Глава заканчивается постановкой задач исследования. **Во второй главе**, посвящённой термодинамическому моделированию, составляется термодинамическое описание системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si и приводятся результаты расчётов по исследованию зависимости фазового состава сталей от количества легирующих элементов и температуры. Термодинамическое описание системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si составляется с помощью т.н. CALPHAD-метода, который основан на физических моделях межатомного взаимодействия, но немалую роль в данном методе играет аппроксимация неизвестных функций степенными рядами, что заметно снижает его “физичность”. Тем не менее, на сегодняшний день это практически единственный метод термодинамического описания многокомпонентных систем, поэтому его выбор выглядит оправданным.

С помощью построенного термодинамического описания была проведена серия расчетов по оценке влияния ряда легирующих элементов на растворимость карбонитридов для низколегированных сталей.

Третья глава рассказывает о методах моделирования эволюции дисперсных ансамблей карбонитридных выделений. В работе обобщены ранее предложенные методы

моделирования кинетики диффузионных фазовых превращений на случай нескольких карбонитридных фаз. При этом предложенные модели описывают эволюцию выделений в многокомпонентных системах на всех стадиях (зарождения, роста, растворения и коагуляции) и учитывают конечные доли выделений вторых фаз и полидисперсность ансамблей выделений.

С помощью предложенного подхода выполнена серия расчетов по моделированию эволюции выделений нескольких составов для сталей легированных Ti, Nb и V. Где было показано, что исходное распределение выделений одной карбонитридной фазы может оказывать заметное влияние не только на эволюцию выделений этой фазы, но и на кинетику эволюции выделений другой карбонитридной фазы.

В четвертой главе предложен метод для прогнозирования среднего размера зерна аустенита к концу изотермической выдержки для низколегированной стали. Подход основан на совместном использовании кинетической модели из третьей главы и моделей зинеровского типа. Сравнение результатов моделирования и экспериментальных результатов показали, что, получая информацию о состоянии ансамбля карбонитридных выделений с помощью методов кинетического моделирования, можно с достаточной точностью прогнозировать размер аустенитного зерна в температурном диапазоне, соответствующем области температур нагрева под прокатку для микролегированных сталей.

В последней пятой главе предложен метод для прогнозирования структуры при (и после) горячей деформации, в котором учитывается взаимное влияние изменения при деформации таких структурных параметров, как плотность дислокаций, средний размер зерна аустенита (с учетом релаксационных процессов рекристаллизации и возврата, а так же процессов выделения вторых фаз), и эволюции карбонитридных фаз. Полученные с помощью этой модели результаты показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

В заключении сформулированы основные выводы по работе.

Научная новизна, обоснованность и достоверность результатов.

Научная новизна в “термодинамической” главе – это предложенное термодинамическое описание шестикомпонентной системы Fe–V–Nb–Ti–C–N–Al–Cr–Mn–Ni–Si и подробный анализ карбонитридообразования в аустенитной области фазовой диаграммы данной системы, который был выполнен впервые. CALPHAD-метод, на основе которого построено термодинамическое описание, по своей сути наилучшим образом удовлетворяет всем экспериментальным данным. Поэтому выполненные в диссертации результаты термодинамических расчётов и выводы по ним можно считать достаточно достоверными.

Методы и модели, предложенные в данной работе для расчёта поведения частиц второй фазы при термической обработке, основаны на работах научного руководителя диссертанта, В.В. Попова. Большинство модельных приближений, использованных в диссертации, уже применялись в работах Попова, а также в работах других авторов, где была проанализирована их адекватность в различных условиях, а также проводилось сравнение со множеством экспериментальных данных. Это обстоятельство, а также удовлетворительное согласие экспериментальных данных с результатами расчётов, выполненных в данной диссертационной работе, указывает на приемлемую достоверность результатов кинетического моделирования, по крайней мере, в пределах области применимости предложенных моделей. Что касается научной новизны, то впервые разработана модель для описания эволюции нескольких ансамблей выделений сложного состава в многокомпонентных системах в процессе изотермической выдержки на всех стадиях процесса: зарождения, роста, растворения и коагуляции. При этом в модели

учитывается конечность объёмной доли выделений, полидисперсность ансамбля выделений и диффузионное взаимодействие элементов в матрице.

Последняя глава также достаточно интересна с точки зрения научной новизны. В ней предложена модель для прогнозирования фазового состава и структуры стали, подвергаемой горячей пластической деформации, с учётом взаимовлияния эволюции карбонитридных частиц, кинетики изменения среднего размера зерна и изменения плотности дислокаций при деформации и рекристаллизации. При этом автору удалось избежать чрезмерного использования феноменологических и/или регрессионных моделей с подгончными параметрами, которое часто встречается при моделировании таких процессов. Соответственно, применение физически проработанных моделей расширяет диапазон применимости предложенных алгоритмов и имеет хороший потенциал для дальнейшего развития.

Практическая и научная ценность результатов диссертации. Развитые в данной работе методы термодинамического и кинетического моделирования, а также результаты расчётов могут быть использованы в металлургической отрасли экономики, помогая снизить себестоимость продукции за счёт более оптимального легирования и выбора режима термической и термомеханической обработки сплавов. Практическая ценность работы подтверждается тем, что ее результаты были получены при поддержке грантов РФФИ, молодежным проектом УрО РАН, а разработанные в диссертации модели и методы применялись при выполнении хозяйственных договоров.

Замечания по результатам исследования: I.J. Agren в статье Thermodynamics of stable and metastable structures in Fe-C system. CALPHAD: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry 46, (2014), 148-158 провёл пересмотр термодинамических параметров системы Fe-C, представленных Густафсоном. Хотя главным предметом критики были параметры альфа-фазы, но их изменение привело к изменению параметров и для гамма-фазы. Не проводил ли автор диссертации анализа изменения растворимости хотя бы простых карбидов в результате изменения основных функций?

2. Мне кажется очевидным, что неучёт каких либо других механизмов торможения границы, например, при образовании зернограничных сегрегации серы, фосфора и др. элементов будет отражаться в Вашей модели как дополнительный эффект измельчения «теоретического» размера зерна. Возможно, в этом заключается причина некоторого расхождений результатов моделирования и расчётов по формулам Зинера или Хиллберта.

3. Я настоятельно рекомендую автору диссертации и его научным руководителям попробовать написать популярную брошюру для заводских металлургов и физиков о том, как нужно конструировать высокопрочные стали с помощью компьютера без мудреных формул, но ясно, четко и понятно. Сейчас в лабораториях металлофизики гораздо больше компьютеров, чем микроскопов и твердомеров, а чем полезным занять их сотрудники не знают.

Публикации. Основные результаты диссертации изложены в 6-ти рецензируемых ВАК журналах и других научных изданиях и докладывались на Российских и международных научных конференциях.

Содержание диссертационной работы Пасынкова правильно отражено в автореферате.

Заключение.

Совокупность результатов, полученных в диссертации Пасынкова Александра Юрьевича, дает существенный вклад в развитие методов прогнозирования фазового состава и структуры многокомпонентных сплавов при термической и термомеханической обработке. При дальнейшем развитии этого направления можно будет конструировать состав сталей на компьютере без использования опытных плавок. Диссертационное исследование соответствует специальности 01.04.07 «физика конденсированного

состояния», п. 5. «Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения».

Считаю, что диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям п. 9 Положения «О присуждении ученых степеней» ВАК Министерства образования и науки РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Пасынков Александр Юрьевич, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Профессор кафедры «Компьютерное
моделирование и нанотехнологии» ЮУрГУ
доктор физ.-мат. наук

Д.А. Мирзаев
«26» апреля 2019 г.

Сведения об официальном оппоненте

ФИО: Мирзаев Джалал Аминулович

Ученая степен, звание: доктор физико-математических наук, специальность 01.04.07,
профессор

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

Должность: Профессор кафедры «Компьютерное моделирование и нанотехнологии»

Почтовый адрес: 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, ЮУрГУ, физический факультет, Кафедра компьютерного моделирования и нанотехнологий

Телефон: +7 (351) 267-99-00

E-mail: info@susu.ru

ВЕРНО

Ведущий документовед
О.В. Брюхова

С отзывом ознакомлен.
Пасынков А.Ю.
07.05.2019

Сведения об официальном оппоненте

ФИО: Мирзаев Джалал Аминович

Ученая степень, звание: доктор физико-математических наук, специальность 01.04.07, профессор

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

Должность: Профессор кафедры «Компьютерное моделирование и нанотехнологии»

Почтовый адрес: 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, ЮУрГУ, физический факультет, Кафедра компьютерного моделирования и нанотехнологий

Телефон: +7 (351) 267-99-00

E-mail: info@susu.ru

Список публикаций в сфере исследований, которым посвящена диссертация:

- 1 Окишев К.Ю., Мирзаев Д.А., Созыкина А.С. Кинетика фазовых превращений в высокохромистых чугунах и сталях // В книге: АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИЧЕСКОГО МЕТАЛЛОВЕДЕНИЯ СТАЛЕЙ И СПЛАВОВ материалы XXIV Уральской школы металлословов-термистов. ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова». 2018. С. 32-33.
- 2 Ридный Я.М., Мирзоев А.А., Мирзаев Д.А. Компьютерное моделирование энергетических параметров и магнитных эффектов в тройной системе Fe-Si-C // Известия высших учебных заведений. Физика. 2018. Т. 61. № 2. С. 34-38.
- 3 Яковлева И.Л., Терещенко Н.А., Мирзаев Д.А., Булдашев И.В. Структурный аспект изотермического бейнитного превращения в высокоуглеродистой марганец-кремнистой стали // Физика металлов и металловедение. 2018. Т. 119. № 10. С. 1012-1017.
- 4 Chirkov P., Mirzoev A., Mirzaev D. CARBON ORDERING IN MARTENSITE LATTICE UNDER EXTERNAL STRESS: THERMODYNAMIC THEORY AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION // Physica Status Solidi (B): Basic Solid State Physics. 2018. Т. 255. № 7. С. 1700665.
- 5 Терещенко Н.А., Яковлева И.Л., Мирзаев Д.А., Булдашев И.В. Образование бескарбидного бейнита в высокоуглеродистой кремнистой стали при изотермических условиях // Письма в Журнал технической физики. 2017. Т. 43. № 24. С. 9-16.
- 6 Мирзаев Д.А., Яковлева И.Л., Терещенко Н.А., Урцев В.Н. Возможность аномального образования перлита в среднеуглеродистой стали после кратковременного нагрева выше АС1 // Металловедение и термическая обработка металлов 11 №, р.6. 2016
- 7 Мирзаев Д.А., Мирзоев А.А., Булдашев И.В., Окишев К.Ю. Термодинамический анализ возникновения тетрагонального бейнита в сталях // Физика металлов и металловедение. 2017. Т. 118. № 6. С. 547-553.

Ученый секретарь ученого совета

Южно-Уральского государственного университета

Березовская Я.Л.