



УТВЕРЖДАЮ
Директор ИФМ УРО РАН
академик РАН
В.В. Устинов
« 02 » декабря 2016 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Еникеева Наримана Айратовича
на тему «Границы зёрен и сверхпрочность наноструктурных материалов»,
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук
по специальностям 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела
и 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Актуальность темы диссертации

Как известно, в последние годы все большее внимание в области физики и механики деформируемого твердого тела уделяется разработке и применению методов обработки металлических материалов, обеспечивающих формирование в них ультрамелкозернистой структуры, характеризуемой размером зёрен в диапазоне 100–1000 нанометров и менее. К эффективным способам получения таких материалов относятся методы интенсивной мегапластической деформации (ИМД), активно развиваемые во многих научных центрах России и мира. В многочисленных исследованиях, в том числе и уральских учёных, установлено, что существенное измельчение микроструктуры приводит к заметному изменению механических и ряда физических свойств металлов и сплавов. Вместе с тем, до сих пор явно недостает обобщающих систематических исследований закономерностей и идентификации механизмов формирования такой структуры и сопровождающих данный процесс явлений. В диссертации Еникеева Н.А. на основе компьютерного моделирования и прецизионных экспериментальных исследований был проведен детальный анализ формирования и характеристик границ зёрен, образующихся при ИМД, размерных эффектов и ряда других особенностей деформационно-индуцируемых наноструктур, относящихся к границам зёрен, плотность которых в наноматериалах сильно возрастает. Актуальность и важность выбранной темы исследований не вызывает сомнений.

Структура и основное содержание диссертационной работы

Диссертационная работа Еникеева Н.А. состоит из шести глав, введения, заключения и списка литературы из 264 цитируемых источников. Работа хорошо и логично структурирована, содержит 252 страницы текста, 90 рисунков и 11 таблиц.

Во введении диссертации обозначена актуальность выбранной темы, определены цели и задачи, отражена новизна и практическая значимость, сформулированы положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена описанию концепции многоуровневой (макро-мезо-микро) схемы моделирования интенсивной пластической деформации, включающей себя использование методов моделирования пластического течения материала при заданной схеме деформирования; модели поликристаллической пластичности в вязко-пластической постановке с алгоритмом самосогласования; а также разработанного оригинального дисклинационного критерия деления зёрен для учёта эффектов измельчения микроструктуры. Эффективность данной схемы была продемонстрирована на примере модельного описания получения наноструктурной меди методом равноканального углового прессования. Полученные данные по эволюции текстуры, образованию и эволюции границ зёрен (спектров разориентировок) в зависимости от степени и режимов деформации находятся в согласии с экспериментальными данными.

Во второй главе разработанная схема моделирования процесса ИМД была применена к моделированию процессов получения наноструктурного биосовместимого титана, предназначенного для медицинских применений, и описанию деформационных механизмов в ультрамелкозернистом палладии. Плодотворность предложенного подхода позволила воплотить разработанную концепцию в качестве составной части программного комплекса, объединяющего ряд процедур для моделирования структуры и свойств, в частности, биосовместимых металлических наноматериалов. Применение численного анализа изменения ориентаций зёрен в материале под действием сжатия и сопоставление результатов с соответствующими экспериментальными *in situ* наблюдениями при осадке образца ультрамелкозернистого палладия непосредственно в колонне растрового электронного микроскопа позволило установить интересный факт кооперативного разворота групп зёрен, вносящего заметный вклад в деформацию материала.

Третья глава посвящена разработке метода количественной оценки степени неравновесности границ зёрен, который основан на сопоставлении результатов моделирования рассеяния рентгеновского рассеяния дефектными наноматериалами с данными рентгеноструктурного анализа. Эволюция плотности дислокаций с увеличением

степени деформации рассчитана также при помощи дислокационно-кинетической модели, использующей определяющие соотношения по зарождению и аннигиляции дислокаций в границах и теле зёрен. Полученные сведения о плотности дислокаций и характере их изменения согласуются с экспериментальными данными.

Четвёртая глава носит в основном экспериментальный характер, в ней приводятся результаты прямого наблюдения методом атомно-пространственной томографии сегрегаций атомов легирующих элементов на границах зёрен в ультрамелкозернистых сплавах на основе железа и алюминия в результате интенсивной пластической деформации и обсуждается природа их образования. Показано, что это явление существенно зависит от температуры и обусловлено вакансионным механизмом переноса атомов из твёрдого раствора на границы.

В пятой главе исследуется влияние обнаруженных зернограницных сегрегаций на прочность наноструктурных материалов. Автор вводит понятие сверхпрочности, определяемое как превышение измеренных значений предела текучести таких материалов над значениями, предсказываемыми соотношением Холла-Петча. Сделано предположение, что дополнительный вклад в упрочнение связан с неравномерным распределением легирующих атомов в границах зёрен и затруднением, как следствие, испускания ими дислокаций, осуществляющих пластическую деформацию. Данный механизм использован для объяснения необычного эффекта повышения прочностных характеристик наноструктурной стали, который объясняется образованием при отжиге зернограницных сегрегаций.

В шестой главе исследована радиационная стойкость ультрамелкозернистых материалов. На примере сталей, подвергнутых нейтронному и ионному облучению, показано, что повышенная плотность границ зёрен в таких материалах служит эффективными стоками радиационно-внесённых дефектов.

В заключении подводятся итог исследований и перечислены основные результаты работы.

Научная новизна результатов диссертационной работы

Все выводы и рекомендации диссертации подтверждены экспериментально, апробированы и опубликованы. Среди целого ряда новых результатов, полученных при выполнении теоретических и экспериментальных исследований закономерностей формирования структуры при интенсивных и мощных деформационных воздействиях, отметим следующее.

Представлена концепция многоуровневого моделирования процессов наноструктурирования, включающая совмещение моделирования на макро-, мезо- и

микроуровнях, учитывающих особенности течения материала и влияние технологических параметров ИМД, деформационное поведение его как поликристалла, и, наконец, измельчение микроструктуры под действием ИМД.

Разработаны микромеханические модельные представления для фрагментации и измельчения зеренной структуры в ходе ИМД.

Получены прямые свидетельства и количественные характеристики кооперативного некристаллографического вращения группы зерен при образовании УМЗ структур.

Обнаружено образование специфических зернограничных сегрегаций прямыми методами, дано физическое объяснение и установлена их связь с «эффектом сверхпрочности».

Научная и практическая значимость результатов диссертационной работы

Научная и практическая значимость заключается, прежде всего, в том, что в работе предложен новый подход к формированию высокопрочных состояний в металлических материалах за счёт тонких особенностей микроструктуры – зернограничных сегрегаций. Плодотворность предложенной многомасштабной схемы моделирования получения наноструктурных материалов подтверждена реализованным на её основе модулем программного комплекса, защищенного свидетельством о регистрации программы. Интерес представляют и данные о практическом потенциале использования ультрамелкозернистых материалов с повышенной радиационной стойкостью.

Достоверность и обоснованность результатов исследования

Достоверность полученных результатов определяется использованием современных апробированных модельных представлений по численному расчёту пластического течения и деформирования поликристаллического агрегата материала, соответствием известных данных с опытными результатами, полученными передовыми методами структурного анализа материалов.

Результаты работы широко обсуждались на многочисленных научных конференциях, хорошо представлены в достаточном количестве публикаций в ведущих рецензируемых отечественных и зарубежных научных изданиях с высоким импакт-фактором, что свидетельствует об их международном признании. Автореферат работы полно воспроизводит содержание диссертации.

Замечания по диссертационной работе

По работе имеется ряд замечаний:

1) Автором предложена концепция многоуровневого моделирования деформации поликристалла. Однако непонятно, как взаимосвязаны между собой различные уровни или

они являются независимыми. Переносятся ли результаты микроуровня (на котором описываются процессы фрагментации) на мезоуровень, описывающий деформацию поликристаллического агрегата? В результате не ясно, как проводилось «мезо+микро» моделирование (раздел 1.4.2).

2) В первой главе автор представляет микромеханические модели, которые должны описывать фрагментацию зёрен в материалах под действием деформации. В то же время, методология, предложенная в диссертации, не позволяет установить минимально возможные предельные условия, при которых невозможно дальнейшее измельчение микроструктуры, так что вопрос о достижении минимального размера зёрен под воздействием больших степеней деформации остаётся недостаточно проработанным.

3) Во второй главе отсутствуют детальные результаты, связанные с моделированием получения наноструктурированного титана.

4) Смещения атомов при моделировании рентгеновского рассеяния наноматериала с неравновесными границами зёрен рассчитаны в приближении континуальной теории упругости. В то же время, на реальное распределение атомов в кристаллитах малого размера, содержащих дефекты на границах зёрен, может оказывать существенное влияние дискретность расположения атомов: конфигурация координационных сфер, тип межатомного взаимодействия и т.д. – эффекты, которые могут быть описаны с применением других численных методов, таких как молекулярная динамика. В связи с этим возникает вопрос о критичности учёта указанных факторов при определении плотности зернограницных дислокаций.

5) При дислокационно-кинетическом моделировании автор использует за основу определяющие уравнения типа Кокса-Мекинга, модифицируя их согласно представлениям об особенностях деформационных процессов в ультрамелкозернистых материалах, в которых, как предполагается, деформационные процессы контролируются границами зёрен. В то же время, в уравнениях (3.8) и (3.10) автор использует выражение, отвечающее как раз за размножение дислокаций по механизму Франка-Рида в теле зёрен. Данное противоречие не обсуждается в работе.

6) Предложенное обобщение модели Эстрина-Тота позволило корректно описать эволюцию плотности дислокаций в зависимости от деформации (Рис. 3.3). Непонятно, как предложенная модель учитывает тепловые флуктуации и как будут изменяться полученные результаты с повышением температуры.

Сделанные замечания не ставят под сомнение выводы и не снижают в целом высокую оценку диссертационной работы.

В целом диссертационная работа Еникеева Н.А. «Границы зёрен и сверхпрочность наноструктурных материалов» является законченной научной работой, в которой получены и важные теоретические и экспериментальные результаты. Диссертация имеет все необходимые разделы от постановки задачи, методов их решения до результатов моделирования и экспериментов, их анализа, выводов и заключения. Материалы работы представлены в 2 монографиях, 1 патенте, 52 статьях, опубликованных в ведущих рецензируемых международных и российских научных журналах с высоким импакт-фактором. Автореферат диссертации и публикации полно и правильно отражают содержание работы. Диссертационное исследование Еникеева Н.А. соответствует паспортам специальностей 01.02.04 и 01.04.07.

Заключение

Считаем, что диссертационная работа «Границы зёрен и сверхпрочность наноструктурных материалов» соответствует всем требованиям Положения о порядке присуждения учёных степеней, а ее автор Еникеев Н.А. заслуживает присвоения учёной степени доктора физико-математических наук по специальностям 01.02.04 – Механика деформируемого твёрдого тела и 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа и отзыв обсуждены на научном семинаре лаборатории цветных сплавов ИФМ УрО РАН 30 ноября 2016 г (Протокол № 1).

Отзыв утверждён на заседании Учёного совета ИФМ УрО РАН 30 ноября 2016 г. (протокол № 17).

Зав. лабораторией цветных сплавов ИФМ УрО РАН,
главный научный сотрудник, доктор физ.-мат.наук, профессор
Почтовый адрес: 620990, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18
тел.: (343)378-35-54; e-mail: pushin@imp.uran.ru

В.Г. Пушин

Главный научный сотрудник ИФМ УрО РАН
Доктор физ.-мат.наук
тел.: (343)378-37-52; e-mail: yug@imp.uran.ru

Ю.Н. Горностырев

Учёный секретарь ИФМ УрО РАН
кандидат физ.-мат. наук

Т.П.Суркова