

ОТЗЫВ
официального оппонента
на диссертационную работу Ненада Драгановича Симич-Лафицкого
«Симметрично допустимые структурные модели образования карбидных
фаз в сталях и сплавах», представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Н.Д. Симич-Лафицкого посвящена изучению и моделированию механизмов фазовых превращений в сталях и сплавах с участием карбидных фаз – актуальной проблеме, имеющей большое значение в физике конденсированного состояния и может быть полезна при моделировании процессов структурообразования при термической обработке сталей. Целью работы является разработка трехмерных структурных моделей образования и превращений карбидных фаз в сталях, а также образования в сталях комплексных неметаллических включений путём срастания сульфидов, оксидов и карбидов.

Развитие компьютерной техники, разработка удобных программных продуктов способствовали их эффективному использованию при решении физических задач, расширению возможностей геометрического моделирования, в том числе графического построения и анализа многомерных структурных моделей различных фаз. Диссертационная работа Н.Д. Симич-Лафицкого является логичным продолжением развиваемого проф. В.С. Крапошиным направления по обобщению и формализации фазовых переходов в сплошных конденсированных средах на примерах решения задач моделирования конкретных фазовых и структурных превращений в сталях сплавах.

В рассматриваемой диссертационной работе изучение и моделирование механизмов превращений выполнено с использованием операций некристаллографической симметрии, что позволяет расширить представления о процессах преобразования кристаллических структур. Это дало возможность автору предложить принципиально новое описание механизмов фазовых превращений и процессов образования комплексных неметаллических включений в сталях.

Работа Н.Д. Симич-Лафицкого состоит из введения, 6 глав и заключения, изложена на 165 страницах, содержит 67 рисунков и 3 таблицы. Список литературы включает 231 работу.

Во *введении* кратко обосновывается актуальность работы, сформулирована цель, перечислены положения, выносимые на защиту, отмечена научная новизна, достоверность и практическая значимость результатов, личный вклад автора, апробация работы и публикация материалов диссертации, содержание по главам.

Первая глава представляет аналитический обзор литературы, занимает практически половину текста диссертации. В обзоре очень подробно и высокопрофессионально практиче-

ски в историческом плане описано развитие представлений о полиморфных превращениях ($\text{ГЦК} \leftrightarrow \text{ОЦК}$; $\text{ГЦК} \leftrightarrow \text{ГПУ}$; $\text{ОЦК} \leftrightarrow \text{ГПУ}$) в сталях и других сплавах, обсуждены достоинства и ограничения имеющихся на настоящее время структурных моделей, в особенности применительно к построению модели областей сопряжения исходной и конечной фаз, границ зёрен и двойников. Приведён большой объём экспериментальных данных. Материал изложен хорошим литературным языком. В заключении даётся обоснование цели и постановки задач собственного исследования.

В качестве вопроса (замечания) можно отметить следующее: каким образом автор ознакомился с таким большим количеством первоисточников весьма ранних (до 1945 года) или опубликованных в редких изданиях работ? Если в тексте приведены т.н. ссылки по ссылкам, то это надо указывать.

Во второй главе представлены методики исследования. Методическая новизна диссертации проявляется в использовании локальной теоремы кристаллографии (теорема Делоне). В этом подходе бесконечная трехмерно-периодическая кристаллическая структура – результат взаимодействия конечных кристаллохимически допустимых (энергетически выгодных) строительных единиц, например, координационных полиэдров. Данная теорема является теоретической основой диссертации.

В качестве основного программного продукта геометрического моделирования для 3D-моделирования кристаллографических структур используется программа SolidWorks.

В третьей главе моделирование атомистической структуры границ двойников и дефектов упаковки ГЦК структуры, механизмов полиморфного превращения $\text{ГЦК} \leftrightarrow \text{ГПУ}$, образования дефектов упаковки и двойников выполнено на языке атомных кластеров. На примере взаимного превращения различных модификаций карбида ниобия (NiC , Ni_2C) показано, что структура границы дефекта упаковки хорошо объясняет неоднородность содержания углерода по объему частицы карбида и лёгкость перехода из одной модификации в другую. Впервые на выбранном языке преобразования атомных кластеров описан механизм взаимного превращения $\text{ГЦК} \leftrightarrow \text{ГПУ}$, который в то же время является и механизмом образования двойников и дефектов упаковки.

Четвертая глава посвящена рассмотрению проблемы взаимного превращения аустенит \leftrightarrow цементит и изучению связи ориентационных соотношений аустенит/цементит со структурой рассматриваемых фаз (аустенит, феррит, карбид). Представлена атомарная модель механизма взаимного перехода аустенит \leftrightarrow цементит, который одновременно в рамках рассматриваемой модели является и механизмом образования зародыща. Модель хорошо согласуется с экспериментальными данными по ориентационным соотношениям аустенит-цементит и объясняет происхождение этих соотношений. Обращается внимание на то, что

ромбоздр (структурообразующий кластер аустенита), являющийся частью структуры цементита, ориентирован по отношению к единому кристаллу цементита так же, как и кристалл аустенита в целом по отношению к цементиту.

Пятая и шестая главы посвящены решению «условно» прикладных задач материаловедения. Пятая глава посвящена изучению и моделированию механизма образования карбидов тугоплавких металлов типа MC, выделяющихся на фронте превращения аустенит → феррит при охлаждении микролегированной низкоуглеродистой листовой стали. Предложена и проанализирована модель поэтапного перехода структурных элементов (кластеры аустенита (феррита) → цементит → карбид типа MC).

В шестой главе представлена модель строения промежуточного слоя в комплексных неметаллических включениях, образующихся в низкоуглеродистой микролегированной стали. Сформулированы закономерности симметрично-допустимого образования сростков неметаллических фаз в сталях (пример $MgO \cdot Al_2O_3$ и MnS), также сформулирован структурно-геометрический критерий запрета на образование сростка неметаллических фаз (пример Fe_3C и $MgO \cdot Al_2O_3$).

Замечания по работе.

– Применение структурно-симметричного подхода для описания механизмов фазовых переходов с одной стороны позволило уточнить некоторые общие черты механизмов перестройки кристаллических плотноупакованных решёток, описать и визуализировать особенности строения переходных областей (межфазных границ, когерентных границ двойников и др.), но с другой стороны не описывает, например, наличие и образование реальной структуры дефектов решётки, неизбежно возникающих при превращениях в твёрдом теле, не учитывает изменение физических характеристик разных фаз, взаимодействие между атомами, в том числе разных сортов и т.п. Эти и другие ограничения развиваемой теории в сопоставлении с наблюдаемыми экспериментальными данными желательно было бы сформулировать обсудить в диссертации.

– В диссертации утверждается, что в частицах NbC присутствует большое количество дефектов упаковки и двойников, однако нет экспериментального подтверждения (например, изображения, полученные на микроскопе) этого факта. Далее в неявном виде автор предполагает, что для образования карбидов NbC и Nb₂C требуется диффузия Nb для замены атомов Fe в решётке цементита, но может быть и другой путь – атомы углерода стремятся к атомам ниобия. Нужно бы обсудить разные варианты.

– Излишне категоричны формулировки п. 4 «Научной новизны» и «Общих выводов», а также п. 4 «Положений, выносимых на защиту» относительно образования карбидов MC или сростков неметаллических включений $MnS/MgAl_2O_4/Fe_3C$ при горячей прокатке низко-

углеродистых сталей. Ничего не имея против предложенных геометрических моделей, на мой взгляд, автор необоснованно утверждает, что эти процессы идут при горячей прокатке или при охлаждении после неё. Между тем горячая прокатка может проводиться по разным температурно-деформационным режимам, сопровождаться разными структурными и фазовыми превращениями, а карбиды и неметаллические включения образовываться и без прокатки. То есть привязка к горячей прокатке сделана некорректно, тем более роль деформации и деформационной структуры автором и не обсуждается.

Указанные замечания не снижают общую ценность диссертации. В целом диссертационная работа Н.Д. Симич-Лафицкого внутренне непротиворечива, представляет собой завершённое исследование, в котором получены новые решения важных научных задач физического материаловедения в области физики фазовых и структурных переходов в твёрдом теле.

Автореферат отражает основное содержание диссертации.

Работа Н.Д. Симич-Лафицкого апробирована в высокорейтинговых журналах и на конференциях, ясно и на современном уровне написана, имеет очевидное теоретическое и практическое значение, удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, а её автор Н.Д. Симич-Лафицкий, несомненно, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Автор отзыва согласен на обработку персональных данных.

Главный научный сотрудник кафедры обработки металлов давлением
Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»,
доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика твердого тела»,

профессор

Людмила Михайловна Капуткина

30 декабря 2019 г.

119049, г. Москва, Ленинский проспект, д. 4, «НИТУ «МИСиС»,
Тел. 8 (499) 230-28-20; Email: kaputkina@mail.ru; Web-сайт: www.misis.ru

Подпись Капуткиной Людмилы Михайловны заверяю:

Проректор по безопасности и
общим вопросам НИТУ «МИСиС»

И.М. Исаев