



механизмах процесса зернограничной диффузии. При этом следует отметить, что подавляющее большинство известных экспериментальных данных относятся к измерениям диффузии изотопов, т.е. по существу такие данные относятся к изучению процесса диффузии в разбавленных твердых растворах. В таких модельных растворах многие значимые особенности рассматриваемого процесса могут быть не обнаружены. В то же время с практической точки зрения более важными являются реальные твердые растворы, на анализе процесса диффузии в которых и построена представленная диссертационная работа. Таким образом, и само явление, и выбранные системы, как объекты исследования, обосновывают актуальность темы диссертационной работы А.О.Родина.

### **Структура и объем диссертационной работы.**

Диссертация изложена на 208 страницах, в том числе введения, 4 разделов, заключения, списка литературы из 146 источников и приложения. Текст диссертации содержит 72 рисунка и 24 таблицы. Кроме того, представлен автореферат на 45 страницах, в котором дополнительно приведены основные публикации автора по теме диссертации (34 работы).

**Научная новизна** сформулирована во введении и выводах к диссертационной работе. К числу наиболее важных научных результатов можно отнести следующие:

1. Разработана и экспериментально подтверждена (на примере диффузии примесей кобальта и железа в меди) макроскопическая модель зернограничной диффузии, описывающая различие в поведении примесей с положительной и отрицательной адсорбцией.

2. В рамках теории ассоциированных растворов построена модель, описывающая зернограничную диффузию для систем с сильным химическим взаимодействием между атомами основы и диффузанта.

3. Установлено, что учет образования ассоциатов атомов диффундирующего вещества и основы позволяет рассчитать концентрации различных атомов на границах зерен и условия замедления зернограничной диффузии. Модель удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными по зернограничной диффузии меди и железа в алюминии, а также с имеющимися оригинальными результатами компьютерного моделирования процесса диффузии в этих системах. Впервые дано количественное объяснение эффекту замедления процесса диффузии при предварительном легировании металла-основы химическим элементом, характеризующимся сильным взаимодействием с атомами диффундирующего элемента.

**Практическая значимость** диссертационной работы заключается в том, что предложенные модели позволяют предсказывать диффузию атомов элементов замещения по границам зерен с учетом химического взаимодействия в интервалах концентраций, соответствующих реальным промышленным сплавам. Сформулированный подход позволяет проводить необходимые расчеты путем численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений, что является достаточно простой задачей. Полученные результаты могут быть использованы в решении важных технологических задач, таких как распределение концентрации элементов после химико-термической обработки сплавов (цементация и азотирование сталей и никелевых сплавов), в процессе эксплуатации сталей и сплавов с покрытиями (например, жаропрочные сплавы), а также дают возможность оценить стабильность металлических композиционных структур (например, омедненных алюминиевых проводов – copper-clad aluminum wires и во многих других случаях).

Результаты диссертационной работы А. О. Родина могут быть использованы во всех занимающихся разработкой и созданием жаропрочных и жаростойких материалов организациях и предприятиях различных министерств и ведомств РФ, в том числе Росатома (ВНИИ неорганических материалов им. А. А. Бочвара (г. Москва) и другие), Роскосмоса (АО «Композит») и другие), предприятиях авиационной промышленности Минпромторга и других. Среди научных организаций, которые могут быть напрямую заинтересованы в использовании результатов диссертационной работы, кроме ведущей по диссертационной работе организации ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН ( лаборатория физико-химической инженерии композиционных материалов), можно указать Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипяна РАН (лаборатория поверхностей раздела в металлах), а также Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН и Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения РАН. Результаты исследований могут быть внедрены в таких научно-производственных центрах как упоминавшийся выше АО «Композит» и Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов Национального исследовательского центра «Курчатовский институт».

**Достоверность полученных результатов** подтверждается согласием между предсказаниями разработанной в диссертации теоретической модели, экспериментальными данными и результатами компьютерного моделирования. Результаты исследований опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных научных журналах и были представлены автором диссертации в виде устных пленарных и приглашенных докладов на широко известных представительных российских и международных

конференциях, соответствующих теме диссертации. Это также подтверждает соответствие диссертационной работы мировому уровню исследований диффузии и диффузионно-контролируемых процессов в металлах и сплавах.

Содержание автореферата полностью соответствует содержанию диссертации. При анализе диссертационной работы возникли следующие вопросы и замечания:

1. Автор диссертационной работы при описании зернограничной диффузии использует общую классификацию Харрисона, не обращаясь к известной уточненной классификации асимптотических режимов зернограничной диффузии Разумовского-Мишина. В соответствии с этой классификацией можно выделить пять таких режимов: С, В1, В2, В3, В4. В серии известных экспериментальных работ на примере ряда металлических би- и поликристаллов экспериментально установлено, что в режиме В1, отвечающем максимальному градиенту концентрации диффундирующей примеси в границе зерна и приграничном объеме зерен, наблюдается инициируемая диффузией миграция границ зерен, а при наличии внешнего напряжения – значительное уменьшение сопротивления проскальзыванию по границам зерен. Причиной этого является зарождение дислокаций на границах зерен и даже формирование дислокационных стенок в приграничных объемах зерен. Данные эффекты свидетельствуют о релаксации возникающих при зернограничной диффузии напряжений (в указанном выше режиме диффузии В1). В таких случаях для расчета движущей силы зернограничной диффузии нужно перейти к градиентам химического потенциала, а не ограничиться только градиентом концентраций. Почему в диссертационной работе этот вопрос не обсуждается?
2. В первом разделе приведен массив данных по диффузии в четырех системах (на основе меди, никеля, алюминия и серебра). Достаточно много данных имеется и по зернограничной диффузии в железе. Почему эти данные не были рассмотрены в рамках работы?
3. Как справедливо указывает автор, подавляющее большинство имеющихся в литературе данных получено методом радиоактивных изотопов, где измеряется либо средняя по слою, либо остаточная активность. Однако, модель оперирует только концентрациями. Можно ли провести адекватный пересчет, чтобы надежно оценить численные значения концентраций элементов?
4. Почему применение предложенных моделей ограничено только примесями замещения, хотя именно примеси внедрения представляют типичные примеры сильного химического взаимодействия в металлах и сплавах?

5. В работе используется термин «комплексы», который в химии обычно используют для обозначения части комплексных соединений. В теории растворов используется модель ассоциированных растворов и для обозначения специфических образований из атомов и молекул используется термин «ассоциаты». Этот термин был бы более подходящим к использованию в разработанных в диссертации моделях.
6. Не ясным из текста работы остался вопрос о том, почему первые три раздела диссертации названы главами, а четвертый — разделом?

Вышеупомянутые замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы Родина А.О. Совокупность результатов представляет собой значимое научное достижение в области диффузии в твердых телах, значительно повышает уровень понимания диффузионных процессов в таких системах и способность предсказать их скорости. Диссертационная работа Родина А.О. соответствует научной специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния». По актуальности, научной новизне и объему выполненных исследований диссертация представляет собой завершённую научную работу.

Диссертационная работа Родина А.О. «Зернограничная диффузия в металлических системах с сильным химическим взаимодействием» отвечает всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ МИСИС П 710.05-22, предъявляемым к диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а ее автор, Родин Алексей Олегович, заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 - «Физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа, автореферат и отзыв обсуждались и одобрены на 173 - ем заседании Секции №5 Ученого совета ФИЦ ПХФ и МХ РАН 15 февраля 2024 года. Присутствовали 16 сотрудников. Результаты голосования 16- «за», 0 – «против». Протокол № 173 от 15.02.2024.

Председатель Секции №5 Ученого совета  
ФИЦ ПХФ и МХ РАН,  
зав. химико -технологическим  
отделом, к.х.н.



/И.С. Седов /

Ученый секретарь, ведущий научный сотрудник,  
к.х.н.,

 / Е.Е. Файнгольд /