

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации Родина Алексей Олеговича на тему «Зернограничная диффузия в металлических системах с сильным химическим взаимодействием», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния» и состоявшейся в НИТУ МИСИС 15 марта 2024 года.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ МИСИС 20.11.2023, протокол № 15.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС». Научный консультант – д. ф.-м. н., профессор, профессор кафедры физической химии НИТУ МИСИС Бокштейн Борис Самуилович.

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ МИСИС (протокол № 15 от 20.11.2023) в составе:

1. Левашов Евгений Александрович, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой порошковой металлургии и функциональных покрытий НИТУ МИСИС - Председатель комиссии;

2. Кудря Александр Викторович, д.т.н., профессор, заместитель заведующего кафедрой металловедения и физики прочности НИТУ МИСИС;

3. Ховайло Владимир Васильевич, д.ф.-м.н., профессор кафедры функциональных нано-систем и высокотемпературных материалов НИТУ МИСИС;

4. Головин Игорь Станиславович, д.ф.-м.н., профессор кафедры металловедения цветных металлов НИТУ МИСИС;

5. Попов Владимир Владимирович, д.т.н., главный научный сотрудник лаборатории диффузии Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук;

6. Чувильдеев Владимир Николаевич, д.ф.-м.н., профессор, директор Научно-исследовательского физико-технического института Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского";

7. Синицын Виталий Витальевич, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник лаборатории квантовых кристаллов Института физики твердого тела РАН,

В качестве ведущей организации утверждено Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН (ФИЦ ПХФ и МХ РАН), г. Черноголовка, Московская область.

Экспертная комиссия отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- **разработана макроскопическая модель**, описывающая различие в поведении примесей с положительной и отрицательной адсорбцией. Модель предсказывает, что при положительной адсорбции дополнительная движущая сила, связанная с градиентом поверхностной энергии может не включаться в рассмотрение, тогда как при отрицательной адсорбции эта сила оказывает значительное тормозящее действие на диффузию;
- **получено экспериментальное подтверждение** результатов расчетов, выполненных по разработанной модели зернограничной диффузии для случая отрицательной адсорбции на примере диффузии кобальта и железа в меди;
- **разработана модель**, описывающая в рамках теории ассоциированных растворов зернограничную диффузию для систем с сильным химическим взаимодействием. Показано, что учет образования комплексов приводит к возможности предсказания замедленной зернограничной диффузии, а также предсказывает максимально возможную зернограничную концентрацию;
- **получено экспериментальное подтверждение** результатов расчетов, выполненных по разработанной модели зернограничной диффузии с учетом образования комплексов на примере исследования диффузии меди и железа в алюминии;
- **разработана модель**, объясняющая замедление диффузии при наличии примесей, характеризующейся высокой энергией отталкивания от атомов диффузанта, основанная на результатах исследования диффузии серебра в меди, легированной железом;
- **построен алгоритм** для анализа характеристик системы с использованием фазовых диаграмм, а также возможных отклонений поведения системы при зернограничной диффузии.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

научно обосновано и экспериментально подтверждено, что для систем характеризующихся отрицательной адсорбцией, таких как Fe и Co в меди, скорость зернограничной диффузии будет ниже, чем в соответствии с предсказаниями по модели Фишера – Гиббса, за счет дополнительной движущей силы в виде градиента поверхностной

энергии, а для систем с положительной адсорбцией этот эффект играет роль только при отсутствии оттока вещества в объем.

научно обосновано и экспериментально подтверждено, что для систем, характеризующихся положительной адсорбцией при наличии сильного взаимодействия между атомами (Fe в Al, Cu в Al), скорость зернограницной диффузии за счет образования атомных комплексов может существенно замедляться по сравнению с предсказаниями модели Фишера- Гиббса.

изучена связь между физико-химическими параметрами взаимодействия и особенностями зернограницной диффузии. Установлено, что отрицательная энергия взаимодействия приводит к ускорению зернограницной диффузии при слабых ее значениях, однако при сильном взаимодействии наблюдается существенное замедление зернограницной диффузии. При положительных значениях замедление происходит тем сильнее, чем больше эти отклонения. При сильном взаимодействии диффундирующих атомов с атомами примесей в матрице замедление происходит как при положительных, так и при отрицательных значениях энергии взаимодействия за счет образования комплексов и мест на границах зерен, недоступных для адсорбции и диффузии.

разработан алгоритм предварительного анализа систем диффузант-матрица, обеспечивающий выявление наиболее сильных факторов, влияющих на зернограницную диффузию. Показано, что при положительной адсорбции эффекты взаимодействия существенны, если атомы разного сорта склонны к образованию промежуточных фаз (сильная отрицательная энергия взаимодействия). В случае, когда энергии взаимодействия не велики, то основным эффектом, доминирующим при высоких концентрациях, является адсорбционное насыщение, проявляющееся в ослаблении вклада от обогащения границы зерна. При отрицательной адсорбции возникает дополнительная движущая сила, связанная с градиентом поверхностной энергии, которую следует учитывать при расчетах, особенно, в режимах одновременной диффузии по границам и объему зерен.

Методология научного исследования в рамках диссертации, заключается в комплексном использовании построений **физических моделей** зернограницной диффузии с выявлением физико-химических факторов, **экспериментальной проверке** с проведением исследований зернограницной диффузии на индивидуальных (изолированных) границах в поликристаллах методом сканирующей электронной микроскопии с локальным микроанализом, а также с анализом результатов компьютерного моделирования, который позволил выявить наиболее значимые факторы.

Практическая значимость работы заключается в том, что предложен способ учета различных эффектов при решении задач массопереноса в поликристаллических

системах с использованием результатов измерения параметров зернограницной диффузии в бесконечно разбавленных растворах, на системы с неразбавленными растворами. Предложен способ построения математической задачи для неразбавленных растворов. При этом предсказаны случаи, когда решение соответствует ранее полученным результатам, а когда наблюдается отличие.

Результаты, связанные с разработкой расчетных модулей, **внедрены** в образовательный процесс в рамках авторских программ дисциплин по направлению подготовки 22.04.01 в рамках магистерской программы «Advanced Materials Science» (Современное материаловедение).

Оценка достоверности результатов исследования выявила следующее:

Для экспериментальных исследований использовано современное аналитическое оборудование, а сами результаты исследований подтвердили результаты расчетов по предложенным моделям.

Заложенные физические модели образования комплексов подтверждены результатами **компьютерного моделирования**, результаты которого совпадают в целом и с результатами **экспериментальных исследований**.

Личный вклад соискателя состоит в обосновании актуальности, формулировании целей и направления исследований, формулировке задач, необходимых для достижения целей. Автор непосредственно проводил анализ литературных данных, осуществлял выбор систем для экспериментальных исследований по зернограницной диффузии, а также принимал участие в экспериментальных исследованиях, формулировал физические модели для описания зернограницной диффузии, строил их математическое описание и проводил расчеты. Участвовал в постановке задач по компьютерному моделированию и анализе результатов, проводил сравнение с имеющимися литературными и собственными данными. Совместно с научным консультантом участвовал в формулировании научной новизны и практической значимости, а также выводов диссертационной работы.

Результаты опубликованы в 31 печатной работе, из которых **29** работ в изданиях, входящих в перечень ВАК РФ и базы Web of Science/Scopus и доложены на **20** международных конференциях. Автор диссертации принимал непосредственное участие в написании статей, тезисов и подготовке презентаций.

Пункт 2.6 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСиС» соискателем ученой степени не нарушен.

Диссертация Родина Алексея Олеговича соответствует критериям п. 2 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ МИСИС. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой на основании построенных

моделей, результатов экспериментальных исследований, данных компьютерного моделирования сформулированы теоретические положения, квалифицируемые как **значимое научное достижение** в области диффузии в поликристаллических телах, что приводит к существенному расширению понимания и возможности прогнозирования процессов массопереноса в поликристаллических металлах и сплавах.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Родину Алексею Олеговичу ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

Результаты голосования: при проведении тайного голосования экспертная комиссия в составе 7 человек, участвовавших в заседании, из 7 человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за 7, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель Экспертной комиссии

Левашов Евгений Александрович

15.03.2024