

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 004.003.01
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ МЕТАЛЛОВ
ИМЕНИ М.Н. МИХЕЕВА УРАЛЬСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК (ИФМ УрО РАН) МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 14.02.2020, № 2

О присуждении Ершову Николаю Владимировичу, гражданину России, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Закономерности формирования атомной структуры магнитомягких железокремнистых сплавов» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 16.10.2019, протокол № 13, диссертационным советом Д004.003.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской Академии наук (ИФМ УрО РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 620108, Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18, приказы Минобрнауки РФ № 714/нк от 02.11.2012 и № 188/нк от 26.02.2015.

Соискатель Ершов Николай Владимирович, 1952 года рождения, в 1975 году окончил физический факультет «Уральского ордена Трудового Красного Знамени государственного университета им. А. М. Горького». Решением Государственной экзаменационной комиссии присвоена квалификация «физик» по специальности «физика». Ершов Н. В. в 1984 году защитил диссертацию по теме «Применение регулярных методов решения обратных задач в структурных исследованиях твердых тел», и решением диссертационного совета в Уральском государственном университете им. А. М. Горького от 24 мая 1984 г. ему присуждена ученая степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика твердого тела.

В период подготовки докторской диссертации соискатель Ершов Николай Владимирович работал в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН в лаборатории микромагнетизма, в должности старшего научного сотрудника.

Диссертация выполнена в лаборатории микромагнетизма Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук.

Научный консультант – доктор физико-математических наук Горностырев Юрий Николаевич является главным научным сотрудником, заведующим лаборатории цветных сплавов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов имени М. Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

- Исхаков Рауф Садыкович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией физики магнитных пленок Института физики им. Л. В. Киренского СО РАН, г. Красноярск;
- Горнаков Владимир Степанович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Московская область;
- Гельчинский Борис Рафаилович, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов, Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург

дали положительные отзывы о диссертации Н. В. Ершова.

Ведущая организация «Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН» в своем положительном заключении, подписанным Набережновым Александром Алексеевичем, доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником лаборатории нейтронных исследований Отделения физики диэлектриков и полупроводников и Соколовым Игорем Александровичем, доктором физико-математических наук, руководителем Отделения физики диэлектриков и полупроводников, указала, что «диссертационная работа Ершова Николая Владимировича «Закономерности формирования атомной структуры

магнитомягких железокремнистых сплавов» представляет собой научно-квалификационную работу, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в развитии физики магнитомягких сплавов на основе железа, изложены новые научно обоснованные представления о формировании атомной структуры железокремнистых сплавов в кристаллическом и нанокристаллическом состоянии, которые дают возможность целенаправленного формирования свойств магнитомягких материалов и обеспечения их высокой термической стабильности, являются основой для разработки лабораторных технологий получения магнитомягких материалов с оптимальным сочетанием магнитных свойств, перспективных для применения в высокотехнологических отраслях промышленности Российской Федерации.

По актуальности темы исследования, объему выполненных исследований, научной новизне, практической значимости и достоверности полученных результатов, обоснованности выводов и положений представленная диссертационная работа соответствует критериям, перечисленным в Постановлении Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 "О порядке присуждения ученых степеней" (с изменениями, внесенными Постановлением Правительства РФ от 21 апреля 2016 г. № 335), предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Ершов Николай Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния».

Соискатель имеет 106 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях и индексируемых системой цитирования Web of Science, в том числе по теме диссертации 25 работ. Общий объем научных изданий 87 печатных листов.

В диссертационной работе развито направление экспериментальных и теоретических исследований о закономерностях формирования атомной структуры кристаллических и нанокристаллических железокремнистых сплавов. Результаты, представленные в диссертационной работе, носят фундаментальный характер, дополняют и развивают современные представления о происхождении наведенной анизотропии магнитных свойств в железокремнистых сплавах, знание которых имеет особое значение для улучшения эксплуатационных

свойств ранее разработанных и для создания новых магнитомягких материалов, и представляют собой существенный вклад в развитие физики конденсированного состояния. Новые знания дают возможность целенаправленного формирования требуемых свойств магнитомягких материалов и обеспечения их высокой термической стабильности, являются основой для разработки лабораторных технологий получения магнитомягких материалов с оптимальным сочетанием магнитных свойств, перспективных для применения в высокотехнологических отраслях промышленности Российской Федерации.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Ближний порядок в монокристаллах α -Fe-Si / Ю. П. Черненко, В. И. Федоров, В. А. Лукшина, Б. К. Соколов, Н. В. Ершов // Физика металлов и металловедение. — 2001. — Т. 92, № 2. — С. 95–100.
2. Short-range order in α -Fe-Si single crystals / Yu. P. Chernenkov, V. I. Fedorov, V. A. Lukshina, B. K. Sokolov, N. V. Ershov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2003. — Vol. 254–255. — P. 346–348.
3. Рентгеновское диффузное рассеяние от монокристаллов α -Fe и α -Fe_{1-x}Si_x / Ю. П. Черненко, В. И. Федоров, В. А. Лукшина, Б. К. Соколов, Н. В. Ершов // Физика металлов и металловедение. — 2005. — Т. 100, № 3. — С. 39–47.
4. B2 and D0₃ clusters in soft magnetic single crystal Fe_{1-x}Si_x alloys with induced magnetic anisotropy / N. V. Ershov, Yu. P. Chernenkov, V. A. Lukshina, V. I. Fedorov, B. K. Sokolov // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. — 2006. — Vol. 300, No. 1. — P. e469–e472.
5. The structural origin of induced magnetic anisotropy in α -Fe_{1-x}Si_x ($x = 0.05 - 0.08$) alloys / N. V. Ershov, Yu. P. Chernenkov, V. A. Lukshina, V. I. Fedorov, B. K. Sokolov // Physica B: Condensed Matter. — 2006. — Vol. 372, No. 1–2. — P. 152–155.
6. An X-ray diffraction study of the short-range ordering in the soft-magnetic Fe-Si alloys with induced magnetic anisotropy / Yu. P. Chernenkov, N. V. Ershov, V. A. Lukshina, V. I. Fedorov, B. K. Sokolov // Physica B: Condensed Matter. — 2007. — Vol. 396, No. 1–2. — P. 220–230.
7. Роль магнетизма в формировании ближнего порядка в сплавах железо-кремний / О. И. Горбатов, А. Р. Кузнецов, Ю. Н. Горностырев, А. В. Рубан, Н. В. Ершов, В. А. Лукшина, Ю. П. Черненко, В. И. Федоров // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 2011. — Т. 139, № 5. — С. 969–982.
8. Структура сплавов α -FeSi с 8 и 10 ат.% кремния / Н. В. Ершов, Ю. П. Черненко, В. А. Лукшина, В. И. Федоров // Физика твердого тела. — 2012.

— Т. 54, № 9. — С. 1813–1819.

9. Structure of Nanocrystals in Finemets with Different Silicon Content and Stress-Induced Magnetic Anisotropy / N. V. Ershov, Yu. P. Chernenkov, V. I. Fedorov, V. A. Lukshina, N. M. Kleinerman, V. V. Serikov, A. P. Potapov, N. K. Yurchenko // Nanocrystal. Ed. Y. Masuda. — InTech, Rijeka, Croatia, 2011. — P. 415–436.
10. Влияние кристаллизующего отжига под нагрузкой на магнитные свойства и структуру магнитомягкого сплава FeSiNbCuB, легированного хромом / Н. В. Ершов, В. И. Федоров, Ю. П. Черненко, В. А. Лукшина, Д. А. Шишкин // Физика твердого тела. — 2017. — Т. 59, № 9. — С. 1724–1737.

На автореферат диссертации поступило 7 отзывов. Все отзывы положительные. В них отмечается актуальность темы диссертационной работы, научная новизна полученных результатов, их теоретическая и практическая значимость. Отзывы без замечаний поступили от: Патрина Геннадия Семеновича, доктора физико-математических наук, директора Института инженерной физики и радиоэлектроники Сибирского федерального университета, г. Красноярск; Скулкиной Надежды Александровны, доктора физико-математических наук, профессора отдела магнетизма твердых тел, департамента фундаментальной и прикладной физики, Института естественных наук и математики, Уральского федерального университета, г. Екатеринбург; Ворониной Елены Валентиновны, доктора физико-математических наук, заведующего кафедрой физики твердого тела, Института физики, Казанского федерального университета, г. Казань; Голосовского Игоря Викторовича, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника Петербургского института ядерной физики НИЦ «Курчатовский институт», г. Гатчина Ленинградской области.

Замечания и вопросы содержатся в следующих отзывах:

- от Головина Игоря Станиславовича, доктора физико-математических наук, профессора кафедры металловедения цветных металлов, Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», г. Москва.

Замечания:

1. В частности, автор показал, что при повышении концентрации Si в сплаве до 8 % B2 кластеры постепенно превращаются в D0₃ кластеры, при этом расстояние между ближайшими атомами Si, несмотря на увеличение концентрации кремния в сплаве, увеличивается от a до $a\sqrt{2}$. Аналогичный эффект увеличения расстояния между атомами

Si в 'парах' имеет место при переходе из парамагнитного состояния в ферромагнитное. Из текста автореферата не вполне понятно, следует ли рассматривать эти эффекты как независимые или взаимосвязанные.

2. Еще одним вопросом является такой: возможно ли в исследуемых сплавах при увеличении в них концентрации атомов Si формирование не $D0_3$ кластеров, а так называемой «модифицированной- $D0_3$ » структуры (или кластеров)?

- от Дорофеева Геннадия Алексеевича, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника отдела Физико-технического института, Удмуртского федерального исследовательского центра УрО РАН, г. Ижевск.

Замечание:

1. Формула Шеррера, использованная автором для определения средних размеров упорядоченных областей по ширине дифракционных линий, справедлива при отсутствии микроискажений решетки, которые вносят вклад в ширину линии. Следовало бы обосновать применимость формулы в данной работе.
2. По прочтении автореферата осталось непонятным, как сдвигаются ближайшие соседи кремния. Согласно модельной атомной структуре в расчетах по программе DISCUS (стр. 17) атомы Fe, находящиеся в 3-х первых координационных сферах, смещаются в направлении атомов Si. В то время как в первопринципных расчетах получено (стр. 19), что первые ближайшие соседи атома Si удаляются от него. Следует пояснить, является ли это кажущимся противоречием.
3. Замечания по оформлению автореферата.
 - Имеются два различных рисунка, обозначенные одинаково как Рисунок 2.
 - Обязательные для автореферата разделы, такие как Актуальность темы, Цель работы и задачи исследования, Научная новизна и особенно Положения, выносимые на защиту, а также Заключение, выглядят слишком пространными. Так в изложении защищаемых положений не нужны слова типа "обнаружена...", "сформулированы...", "получены...", "определены...", "установлено..." и т.д., а нужны короткие твердые научные положения.
 - Как результат неоправданной растянутости этих разделов (при требуемой ограниченности количества страниц автореферата) некоторые существенные для понимания сути работы подробности упущены в автореферате. Так, например, не указывается длина волны используемого рентгеновского излучения, и стоит только догадываться, что это Mo K α . Что имеется в виду под координацией 6:2 на стр. 26?

- от Шабашова Валерия Александровича, доктора физико-математических наук, главного научного сотрудника лаборатории механических свойств ФГБУН Института физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН, г. Екатеринбург.

Замечание:

1. В качестве замечания отмечу отсутствие в автореферате пояснений по алгоритму

расчета ближнего атомного порядка с использованием мессбауэровской спектроскопии в Fe-Si сплавах, и в частности, возможности выделения анизотропного вклада в магнитную сверхтонкую структуру мессбауэровских спектров, формирующегося при упорядочении кремния.

Выбор официальных оппонентов доктора физико-математических наук Р. С. Исхакова, доктора физико-математических наук В. С. Горнакова и доктора физико-математических наук Б. Р. Гельчинского, а также ведущей организации обосновывается публикациями оппонентов, тематикой структурного подразделения ведущей организации и публикациями доктора физико-математических наук А. А. Набережного и доктора физико-математических наук И. А. Соколова, относящимися к сфере исследований, которым посвящена диссертация.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. В железокремнистых сплавах, содержащих от 5 до 10 ат.% кремния, обнаружены локально упорядоченные кластеры, состоящие из пары ячеек B2 фазы (типа CsCl), имеющих общую грань и центрированные атомами кремния. Кластеры имеют анизотропную форму с осью анизотропии, параллельной оси $\langle 100 \rangle$ или одному из направлений легкого намагничивания, и могут быть равновероятно ориентированы вдоль трех осей $\langle 100 \rangle$.
2. Установлено, что B2 кластеры формируются в сплавах во время выдержки при высоких температурах или в парамагнитном состоянии и сохраняются после охлаждения, потому что диффузионная перестройка B2 кластеров в D0₃ фазу не может происходить спонтанно, требует термической активации и развивается постепенно в процессе отжига в ферромагнитном состоянии.
3. Обнаружена анизотропия пространственного распределения B2 кластеров в монокристаллах сплавов с 5 и 6 ат.% кремния, подвергнутых термомагнитной (ТМО) или термомеханической (ТМехО) обработке с целью наведения осевой магнитной анизотропии вдоль одной из осей легкого намагничивания; вдоль оси магнитной анизотропии протяженность B2 кластеров больше, поперек нее меньше.
4. Определены параметры атомной структуры нанокристаллических сплавов

Fe-Si-Nb-Cu-V при концентрации кремния от 0 до 13.5 ат.% в исходном состоянии и после нанокристаллизующего отжига без внешних воздействий: в закаленных из расплава образцах имеются области размером около 2 нм с ближним порядком, характерным для α -FeSi; после отжига в нанокристаллах размером около 10 – 12 нм параметр ОЦК решетки по мере увеличения концентрации кремния монотонно уменьшается, при содержании кремния более 9 ат.% в нанокристаллах появляется упорядоченная фаза Fe_3Si , объемная доля которой при наибольшей концентрации кремния достигает 80%.

5. Обнаружена анизотропия остаточных деформаций решетки нанокристаллов после ТМехО: решетка растянута вдоль направления приложения растягивающего напряжения и сжата в поперечном направлении, вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ деформации не наблюдаются, но увеличиваются по мере увеличения угла между направлением измерений и ближайшей осью $\langle 111 \rangle$. Степень анизотропии деформации нанокристаллов не менее чем в четыре раза выше степени анизотропии деформации массивных кристаллов железокремнистого сплава при тех же условиях.
6. Разработана модель механизма формирования наведенной при отжиге под нагрузкой магнитной анизотропии, в основе которой лежит эффект Виллари и которая объясняет смену типа магнитной анизотропии с продольной на поперечную по мере увеличения концентрации кремния.
7. Сформулированы новые представления о магнитоупругом механизме формирования наведенной магнитной анизотропии при термомагнитной или термомеханической обработке в кристаллических и нанокристаллических железокремнистых сплавах, основанные на результатах экспериментальных и теоретических исследований.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что полученные данные об атомной структуре кристаллических и нанокристаллических магнитомягких железокремнистых сплавов существенно дополняют и развивают современные представления о механизмах формирования локальной атомной структуры и магнитных свойств, в частности, о формировании диффузионной наведенной магнитной анизотропии, которая в значительной степени определяет зависимость магнитомягких свойств сплавов от направления. В результате теоретического моделирования ближнего атомного

упорядочения в железокремнистых сплавах на основании экспериментальных данных было показано определяющее влияние магнитного порядка на зависимость энергии эффективного взаимодействия между атомами кремния от расстояния в α -железе и, как следствие, на характер и тип развивающегося в сплаве локального атомного порядка.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что в ходе исследований успешно решена важнейшая техническая задача – повышение чувствительности прямых методов исследования атомной структуры, перспективных для применения магнитомягких сплавов на основе железа, например, железо-алюминий, железо-галлий или железо-германий.

Приведенные в диссертации Н. В. Ершова результаты исследований атомной структуры железокремнистых сплавов в кристаллическом и нанокристаллическом состояниях, закономерностей ее формирования, механизмов наведения магнитной анизотропии дают возможность целенаправленного формирования требуемых свойств магнитомягких материалов и обеспечения их высокой термической стабильности, являются основой для разработки лабораторных технологий получения магнитомягких материалов с оптимальным сочетанием магнитных свойств, перспективных для применения в высокотехнологических отраслях промышленности Российской Федерации.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

- результаты, полученные разными методами на одних и тех же образцах, не противоречат друг другу, являются взаимодополняющими и характеризуются хорошей воспроизводимостью;
- выводы работы не имеют принципиальных расхождений с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными других исследователей;
- теоретические результаты первопринципного моделирования механизмов локального упорядочения атомов в железокремнистых сплавах получены с использованием достаточно надежных и многократно апробированных теоретических методов, результаты находятся в соответствии с экспериментальными данными и согласуются с имеющимися ранее

результатами первопринципных расчетов, полученными другими авторами для магнитомягких сплавов железа.

Личный вклад соискателя состоит в формулировке цели и задач исследования, в выборе пути их реализации, в координации научно-исследовательских работ по теме диссертации, в формулировке ее основных положений и выводов. Термические обработки образцов сплавов, в том числе рафинирующие и релаксационные отжиги, нанокристаллизующие отжиги, ТМО и ТМехО, по программе, разработанной автором диссертации, были выполнены сотрудниками лаборатории микромагнетизма ИФМ УрО РАН. Структурные исследования методом рентгеновской дифракции выполнялись с использованием уникального оборудования в лаборатории физики кристаллов ПИЯФ НИЦ «Курчатовский институт» при активном непосредственном участии автора, использовались как стандартные методы анализа интенсивностей рентгеновской дифракции, так и оригинальные подходы, разработанные с участием автора. Мёссбауэровские измерения и математическая обработка ЯГР–спектров были выполнены в лаборатории ферромагнитных сплавов ИФМ УрО РАН. Комплексный обобщающий анализ результатов структурных исследований выполнялся автором. Все теоретические модельные расчеты были инициированы автором. Расчеты локальных искажений, магнитных моментов и сверхтонкого поля на атомах железа были выполнены в ФТИ УрО РАН. Анализ полученных результатов, их обсуждение, сопоставление с результатами экспериментальных исследований проводились при активном участии автора. Автором были подготовлены статьи и доклады в соавторстве с коллегами, проведено обобщение полученных результатов и сформулированы основные выводы работы. Материал диссертации неоднократно докладывался автором лично на международных и отечественных конференциях в виде приглашенных, устных и стендовых докладов.

Диссертация «Закономерности формирования атомной структуры магнитомягких железокремнистых сплавов» Ершова Николая Владимировича является научно-квалификационной работой, в которой выяснены закономерности формирования атомной структуры магнитомягких железокремнистых сплавов в кристаллическом и нанокристаллическом состояниях, установлены зависимости атомной структуры сплавов от

содержания кремния, условий термической обработки, а также от внешнего магнитного поля и поля механического напряжения; развиты представления о механизме влияния структурных состояний на фундаментальные, практически важные магнитные свойства, расширяющие возможности совершенствования магнитомягких сплавов на основе железа.

Диссертация соответствует критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемых к докторским диссертациям, в редакции, утвержденной Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 с изменениями от 21.04.2016 г. № 335.

На заседании 14.02.2020 года диссертационный совет принял решение присудить Ершову Николаю Владимировичу ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, 5 докторов наук по специальности 01.04.11 – Физика магнитных явлений, 5 докторов наук по специальности 05.16.01 – Металловедение и термическая обработка металлов, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту – нет, проголосовали: за – 14, против – 1, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук, академик РАН

В.В. Устинов

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук

Т.Б. Чарикова

17 февраля 2020 г.