

УТВЕРЖДАЮ

Федеральное государственное
бюджетное образовательное
учреждение высшего
образования «Марийский

государственный университет»

Проректор по научной работе

доктор физико-математических

наук



А.Н. Леухин А.Н. Леухин

Магюря 2024 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Максименко Вячеслава Николаевича
«Исследование упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных
сплавах на примере $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием N -body
межатомных потенциалов», представленную на соискание ученой
степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8.
Физика конденсированного состояния.

Актуальность темы диссертационной работы

Диссертационная работа Максименко Вячеслава Николаевича посвящена развитию теоретического изучения эффектов упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах методами компьютерного моделирования. Высокоэнтропийные сплавы на основе системы из тугоплавких металлов $V\text{-Cr-Nb-Mo-Ta-W}$ являются перспективными материалами для аэрокосмической промышленности. Одной из важных задач при разработке таких материалов является установление механизма диффузии. Однако, из-за ограниченности экспериментальных методов исследования, понимание диффузионных процессов необходимо дополнять исследованиями методами компьютерного моделирования. Поэтому развитие методов атомистического моделирования и исследование с их помощью эффектов упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах являются актуальными задачами. В связи с этим, решение задач в работе связанных с разработкой потенциалов межатомных взаимодействий системы $V\text{-Cr-Nb-Mo-Ta-W}$ и атомистическим моделированием с использованием данных потенциалов упорядочения и диффузии в сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ является важным для разработки новых высокоэнтропийных сплавов на основе системы из тугоплавких металлов.

Структура и содержание работы

Диссертация состоит из введения, обзора литературы (глава 1) и используемых методов (глава 2), главы, посвященной разработке потенциалов межатомных взаимодействий системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W (глава 3) и главы посвященной атомистическому моделированию с использованием разработанных потенциалов эффектов упорядочения и диффузии (глава 4), заключения, перечня сокращений и условных обозначений, а также списка литературы, включающего 138 наименований. Диссертация изложена на 140 страницах машинописного текста, содержит 49 рисунков, 13 таблиц и 33 формулы.

Во **введении** обоснована актуальность темы, степень ее разработанности, сформулированы и поставлены цель и задачи работы, положения, выносимые на защиту, перечислены новые результаты, показана их научная и практическая значимость, достоверность и обоснованность.

В **первой главе** проведен обзор литературы по теме работы. Максименко Вячеславом Николаевичем кратко рассмотрены компьютерные методы исследования эффектов упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах и обосновано преимущество методов атомистического моделирования на основе потенциалов межатомных взаимодействий.

Во **второй главе** приводится краткое описание метода молекулярной динамики с использованием потенциалов межатомных взаимодействий, метода *N-body* для разработки потенциалов межатомных взаимодействий, метода теории функционала плотности, и метода МД+МК для моделирования эффектов упорядочения.

В **третьей главе** приводится изложение построения в рамках метода *N-body* и теста потенциалов межатомных взаимодействий, которые в совокупности с разработанными ранее потенциалами позволяют проводить атомистическое моделирование сплавов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W.

В **четвертой главе** с использованием потенциалов межатомных взаимодействий системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W исследуются эффекты упорядочения и проводится расчет коэффициентов диффузии в сплавах $Cr_xMoNbTaVW$. Расчеты значений термодинамических характеристик в модельных ячейках сплавов со случайным твердым раствором и в ячейках после моделирования эффектов упорядочения показали, что уменьшение энтальпии благодаря упорядочению в высокоэнтропийных сплавах $Cr_xMoNbTaVW$ превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса, либо имеет один порядок с ним. Расчет значений коэффициентов диффузии методом молекулярной динамики в эквиатомном сплаве CrMoNbTaVW показал возможность реализации диффузии в данном сплаве без предварительного задания вакансии в модельной ячейке.

В **заключении** приведены основные результаты, полученные в работе, и даны рекомендации по их использованию.

Научная новизна результатов

При проведении исследований по теме диссертационной работы были получены следующие новые результаты:

- Разработаны *N*-body потенциалы межатомных взаимодействий для атомистического моделирования сплавов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W при любых концентрациях компонентов;
- Методами атомистического моделирования рассчитаны термодинамические характеристики сплавов $Cr_xMoNbTaVW$ и показано, что уменьшение энтальпии благодаря упорядочению в данных высокоэнтропийных сплавах превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса, либо имеет один порядок с ним;
- Методом молекулярной динамики рассчитаны коэффициенты диффузии в эквиатомном сплаве CrMoNbTaVW и показано, что в данном сплаве возможна реализация диффузии без предварительного задания вакансий в модельной ячейке.

Обоснованность и достоверность результатов обеспечивается хорошо апробированными методами, использованными для решения поставленных задач. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными и теоретическими данными, известными в научной литературе.

Научные положения диссертационной работы обоснованы, а выводы и рекомендации, представленные в диссертационной работе, находятся в соответствии с научными положениями.

Замечания по диссертационной работе

1. В диссертации не приведены некоторые формулы для расчета значений ряда характеристик металлов и сплавов для теста разработанных потенциалов межатомных взаимодействий. В этой связи не ясно, насколько корректно сопоставлять эти значения с литературными данными.

2. Для обоснования использования потенциалов V, Nb и Ta, которые были разработаны ранее и используются в диссертации для разработки потенциалов бинарных сплавов не приводится краткое изложение прогнозов характеристик металлов данными потенциалами. Вместо этого говорится, что данные потенциалы хорошо прогнозируют ряд характеристик металлов.

Необходимо отметить, что сделанные замечания не снижают общей высокой оценки работы. Все поставленные цели достигнуты и соответствуют положениям, выносимым на защиту.

Материалы диссертации достаточно полно опубликованы в 15 печатных изданиях, 9 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК для опубликования материалов диссертационных исследований, включая 7 статей в журналах, индексируемых базой данных Web of Science, и доложены на 8 всероссийских и международных конференциях.

Работа по **своему содержанию** и представленным результатам **соответствует** двум пунктам паспорта специальности 1.3.8. - Физика конденсированного состояния, физико-математические науки:

п. 1. Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств неорганических и органических соединений как в кристаллическом (моно- и поликристаллы), так и в аморфном состоянии, в том числе композитов и гетероструктур, в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления.

п. 3. Теоретическое и экспериментальное изучение свойств конденсированных веществ в экстремальном состоянии (сильное сжатие, ударные воздействия, сильные магнитные поля, изменение гравитационных полей, низкие и высокие температуры), фазовых переходов в них и их фазовых диаграмм состояния.

Исходя из вышесказанного, можно заключить, что диссертация Максименко Вячеслава Николаевича «Исследование упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах на примере $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием N -body межатомных потенциалов» представляет собой законченное научное исследование на актуальную тему. Результаты представляются достоверными и обоснованными, обладают научной новизной, практической и теоретической ценностью. Диссертация в полной мере отвечает требованиям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Максименко Вячеслав Николаевич, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. - Физика конденсированного состояния.

Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук (специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния), профессором кафедры физики и материаловедения ФГБОУ ВО «Марийского государственного университета», Мурзашевым Аркадием Ислибаевичем (424000, Республика Марий Эл, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1., тел. (9276) 80-98-36, E-mail: nanotubes59@mail.ru).

Диссертационная работа, автореферат и отзыв о диссертации Максименко Вячеслава Николаевича рассмотрены и одобрены на заседании кафедры физики и материаловедения ФГБОУ ВО «Марийского государственного университета» (протокол № 2 от 27.11.2024)

Доктор физико-математических наук,
профессор кафедры физики
и материаловедения
ФГБОУ ВО «Марийского
государственного университета»



Мурзашев Аркадий Ислибаевич

(Мурзашев Аркадий Ислибаевич защитил докторскую диссертацию по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния)

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Марийский государственный университет».

424000, Республика Марий Эл, г. Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 1.

тел. (8362)68-80-02

E-mail: rector@marsu.ru



Собственноручную подпись
Мурзашева А. И.
ДОСТОВЕРНО: вед. специалист по кадрам
отдела кадров
Маш М. В. Мамангеева
«27» 11 2024 г.