

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию 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.

Диссертация В.Н. Максименко посвящена разработке межатомных потенциалов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W для атомистического моделирования эффектов упорядочения и диффузии в сплавах данной системы. В связи с этим, задачами работы являются построение потенциалов межатомных взаимодействий и их использование для атомистического моделирования упорядочения и диффузии в многокомпонентных сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$. Поскольку на данный момент в научном сообществе нет общепринятого представления по механизму диффузии в высокоэнтропийных сплавах, развитие методов атомистического моделирования и исследование с их помощью диффузионных процессов и эффектов упорядочения будут полезны для разработки новых высокоэнтропийных сплавов. Это свидетельствует об актуальности диссертационной работы В.Н. Максименко.

Диссертация состоит из четырех глав, введения, заключения и изложена на 140 страницах машинописного текста, включая список литературы из 137 наименований.

Во **введении** приводится актуальность темы исследования, описание научной проблемы, формулируются цель и задачи работы.

Первая глава работы посвящена литературному обзору по теме исследования. В данной главе изложены наиболее распространенные на данный момент методы моделирования многокомпонентных сплавов и отмечены их главные преимущества и недостатки. Обоснован вывод о преимуществе методов атомистического моделирования на основе потенциалов межатомных взаимодействий для исследования эффектов упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W. Однако, для проведения такого исследования отсутствовали межатомные потенциалы для отмеченной системы. Поэтому в данной диссертационной работе проводится разработка и тест соответствующих межатомных потенциалов.

Вторая глава посвящена изложению методов компьютерного моделирования, использованных в работе, таких как: метод разработки

потенциалов межатомных взаимодействий *N*-body, метод молекулярной динамики с использованием полуэмпирических потенциалов межатомных взаимодействий, метод теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP, и комбинированный метод Монте-Карло и молекулярной динамики МД+МК.

В третьей главе представлены результаты разработки оригинальных межатомных потенциалов для моделирования сплавов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W в рамках метода *N*-body. Разработанные межатомные потенциалы впервые позволили проводить атомистическое моделирование сплавов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W при любых концентрациях компонентов в широкой области температур.

В четвертой главе изложено впервые проведенное атомистическое моделирование упорядочения и диффузии в ряде сплавов $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием разработанных межатомных потенциалов. Из анализа результатов моделирования установлено, что уменьшение энтальпии из-за эффектов упорядочения в высокоэнтропийных сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ при температурах 500 и 1000 С превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса, а при температурах 1700 и 2300 С имеет один порядок с ним. Также, из результатов атомистического моделирования диффузии в эквиатомном сплаве CrMoNbTaVW показана возможность существования нового явления ускорения диффузии в высокоэнтропийных сплавах.

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

Таким образом, диссертационная работа В. Н. Максименко «Исследование упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах на примере $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием *N*-body межатомных потенциалов», является завершенным исследованием и носит комплексный характер. Теоретическая значимость диссертационной работы В.Н. Максименко заключается в развитии методов атомистического моделирования на основе межатомных потенциалов. Практическая значимость данной работы состоит в разработке межатомных потенциалов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W и в установлении с их помощью методами атомистического моделирования возможности существования нового явления ускоренной диффузии.

Научная новизна. К числу наиболее значимых новых результатов В.Н. Максименко следует отнести следующие:

- Разработку *N*-body межатомных потенциалов для атомистического моделирования сплавов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W при любых концентрациях компонентов;

- Установление методами атомистического моделирования, что уменьшение энтальпии из-за эффектов упорядочения в высокоэнтропийных сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ при температурах 500 и 1000 С превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса, а при температурах 1700 и 2300 С имеет один порядок с ним;
- Установление методами атомистического моделирования возможности реализации в высокоэнтропийных сплавах системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W диффузии без задания вакантных узлов.

Выводы, сделанные В.Н. Максименко по результатам диссертационного исследования, создают необходимый научный задел для понимания механизма диффузии в высокоэнтропийных сплавах и дальнейшей разработки новых перспективных металлических материалов.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнения, поскольку для решения задач, поставленных в данном исследовании, использованы хорошо апробированные методы и полученные результаты моделирования согласуются с результатами из литературных источников других независимых методов. Получено хорошее согласие прогнозируемых параметров решеток, энтальпий образования и коэффициентов диффузии в рассмотренных ОЦК металлах и бинарных сплавах на их основе с результатами известных экспериментальных исследований этих характеристик для ряда температур.

Вместе с тем, по диссертационной работе следует сделать следующие замечания:

- В работе не приведен анализ атомной структуры, формирующейся в результате упорядочения. Неясно, чем отличается модельная решетка после упорядочения от соответствующей решетки в случае приближения случайного твердого раствора.
- В работе нет детального изложения методики расчета коэффициентов диффузии из результатов моделирования методом молекулярной динамики.
- В работе не приведен анализ сходимости расчетов теории функционала электронной плотности. Насколько надежными являются результаты данных расчетов для сплавов ОЦК d-металлов?

Сделанные замечания не уменьшают значимости полученных результатов. Поставленные и решенные задачи диссертационного исследования полностью соответствуют специальности 1.3.8. - Физика конденсированного состояния. По материалам диссертации опубликовано

девять научных работ в высокорейтинговых журналах, из которых семь индексируются в базах данных Scopus и Web of Science и две в издании, рекомендованном ВАК. Результаты работы неоднократно докладывались на международных и национальных конференциях.

Автореферат соответствует тексту диссертации. Положения, выносимые на защиту, соответствуют содержанию выполненных исследований.

Диссертация В. Н. Максименко выполнена на высоком научном уровне и полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям в действующем «Положении о присуждении ученых степеней» ВАК Министерства образования и науки Российской Федерации в редакциях постановления Правительства РФ от 24.09.2013 за № 842 и приказа Министерства образования и науки РФ № 1093 от 10.11.2017, а ее автор, без сомнения, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8.- Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент доктор физико-математических наук (специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния), профессор, главный научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск:



/Зольников Константин Петрович

18.11.2024 г.

Почтовый адрес:

634055, Россия, г.Томск, пр.Академический, 2/4,

Тел.: +7(3822)286-972, адрес электронной почты: kost@ispms.ru

Подпись д.ф.-м.н. профессора Зольникова К.П. заверяю:

ученый секретарь ИФПМСО РАН

к.ф.-м.н.



Н.Ю. Матолыгина

Полное наименование организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

Юридический адрес: 634055, Россия, г.Томск, пр.Академический, 2/4.

Тел.: +7(3822)49-18-81, root@ispms.tsc.ru, <http://www.ispms.ru>