

ОТЗЫВ

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

Работа посвящена разработке межатомных потенциалов для системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W и прогноза с помощью этих потенциалов эффектов упорядочения и диффузии в твердых растворах $\text{Cr}_x\text{NbMoTaVW}$.

Тема диссертационной работы вполне актуальна и заключается в возрастающем исследовательском интересе к высокоэнтропийным сплавам. Особое внимание заслуживают высокоэнтропийные сплавы на основе тугоплавких элементов, таких как W, Ta, Mo, Nb и других, поскольку обладают повышенными механическими свойствами при высоких температурах.

В работе получен большой объем новых результатов, в частности, разработаны новые межатомные потенциалы для моделирования Cr, Mo и W, которые имеют преимущество более точного прогноза ряда характеристик этих металлов, включая энергии образования вакансий, тепловое расширение, температуру плавления и другие характеристики, важные для достоверности прогноза характеристик дефектов и диффузионных процессов в этих металлах.

Впервые разработаны межатомные потенциалы для всех бинарных сплавов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W, что позволяет моделировать сплавы этой системы при любых концентрациях компонентов.

Следует отметить, что полученные теоретические результаты, когда это возможно, хорошо коррелируют с имеющимися экспериментальными данными.

К сожалению, автореферат напечатан в черно-белом варианте, что осложняет восприятие материала, но электронный вариант реферата цветной.

Считаем, что работа «Исследование упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах на примере $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием N-Body межатомных потенциалов», отвечает требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно п.9 Положения «О порядке присуждения ученых степеней», соответствует паспорту

специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния», а ее автор Максименко Вячеслав Николаевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

Зав. лаборатории физики прочности ФТИ им. А.Ф. Иоффе,
главный научный сотрудник, д. ф.-м. н.

На обработку персональных данных согласен



А.Г. Кадомцев

194021, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
Тел. (812)292-73-22, E-mail: andrej.kadomtsev@mail.ioffe.ru

01.04.04 - Физика конденсированного состояния

Главный научный сотрудник ФТИ им. А.Ф. Иоффе,
д. ф.-м. н., профессор

На обработку персональных данных согласен



В. И. Бетехтин

194021, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
Тел. (812) 292-73-22, E-mail: vladimir.betekhtin@mail.ioffe.ru

01.04.04 - Физика конденсированного состояния



Подпись Кадомцева А.Г. удостоверяю
зав.отделом кадров ФТИ им.А.Ф.Иоффе

 Н.С. Бузенко



Подпись Бетехтина В.И. удостоверяю
зав.отделом кадров ФТИ им.А.Ф.Иоффе

 Н.С. Бузенко
26.11.2024г.

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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 направлена на разработку и использование потенциалов межатомных взаимодействий для моделирования эффектов упорядочения и диффузии в многокомпонентных сплавах тугоплавких металлов. В рамках работы были поставлены задачи по разработке и тестированию потенциалов межатомных взаимодействий для системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W, а также по моделированию упорядочения и диффузии в сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием этих потенциалов.

Актуальность диссертационной работы не подлежит сомнению, поскольку разработка потенциалов межатомных взаимодействий и установление механизма диффузии в высокоэнтропийных сплавах являются важными задачами. Результаты диссертационной работы имеют большое значение для понимания диффузионных процессов в высокоэнтропийных сплавах.

Подходы и методы, использованные в работе, такие как теория функционала плотности, метод молекулярной динамики, метод разработки N -body межатомных потенциалов взаимодействия, хорошо зарекомендовали себя и подходят для проведения исследований подобного рода.

Диссертантом были разработаны потенциалы межатомных взаимодействий для системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W. С их помощью было продемонстрировано, что уменьшение энтальпии за счет упорядочения в высокоэнтропийных сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса или сопоставимо с ним. Также было установлено, что в данном сплаве эквиатомного состава возможна диффузия без предварительного создания вакансий в модельной ячейке.

Значимость диссертационной работы В. Н. Максименко заключается в развитии методов атомистического моделирования и установлении возможности существования нового явления ускоренной диффузии, что может позволить уточнить существующие представления о механизме диффузии в высокоэнтропийных сплавах и ускорить их разработку.

В качестве замечаний к автореферату диссертации можно указать следующее:

- 1) В большинстве таблиц и графиков, где сравниваются полученные диссертантом различные характеристики металлов и сплавов с результатами эксперимента и расчетов другими методами, не приводится процентное отношение отличий между ними.
- 2) Для построения потенциалов взаимодействия между атомами ОЦК d -металлов в работе использована теория функционала плотности (ТФП). Как известно, в этих металлах имеются большие градиенты валентной электронной плотности, а значит, возможны значительные ошибки в результатах ТФП расчетов из-за используемых приближений к функционалу обменно-корреляционной плотности. Однако данные ошибки ТФП в автореферате не обсуждаются.

- 3) В тексте автореферата не поясняется, что подразумевается под областями с нарушением устойчивости ОЦК фазы в подписи к рисунку 4. Кроме этого, непонятно какими линиями показаны данные CALPAD на рисунке 4: “Данные CALPHAD [31] – линии;”.

Сделанные замечания, однако, никоим образом не уменьшают значимости научных результатов, полученных автором, и не влияют на общую положительную оценку работы.

В целом, диссертация В. Н. Максименко представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, выполненную на высоком уровне. Она содержит новые результаты, имеющие как теоретическую, так и практическую значимость. По моему мнению, диссертация полностью соответствует паспорту специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния, а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

старший научный сотрудник лаборатории физики поверхностных явлений Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физики прочности и материаловедения» Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН)

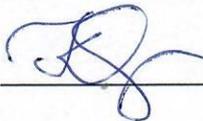
Доктор физико-математических наук
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Дата: 05.12 2024 г.  Коротеев Юрий Михайлович

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН).

Адрес: 634055, г. Томск, просп. Академический, 2/4.
Телефон: +7 9539218818
Электронная почта: koroteev@ispms.tsc.ru

Я, Коротеев Юрий Михайлович, даю согласие на обработку моих персональных данных, связанную с защитой диссертации и оформлением аттестационного дела В. Н. Максименко.

Дата: 05.12 2024 г.  Коротеев Юрий Михайлович

Подпись Коротеева Юрия Михайловича удостоверяю

Учёный секретарь ИФПМ СО РАН

Дата: 05.12 2024 г.  Н.И. Матольгина
М.П.



ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Максименко Вячеслава Николаевича на тему: «Исследование упорядочивания и диффузии в высокоэнтропийных сплавах на примере $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием N-body межатомных потенциалов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа Максименко В.Н. посвящена разработке потенциалов межатомного взаимодействия для системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W и предсказанию с помощью этих потенциалов эффектов упорядочивания и диффузии в твердых растворах $\text{Cr}_x\text{NbMoTaVW}$ ($x = 0, 0,5, 1, 2, 3$). Поскольку экспериментальные методы имеют значительные ограничения при изучении явлений, происходящих на атомном и микроскопическом уровне в металлах и сплавах, решение проблемы построения физически-обоснованных потенциалов межатомного взаимодействия в многокомпонентных сплавах и изучение с их помощью таких явлений является чрезвычайно актуальным.

Поставленные задачи были успешно выполнены, что подтверждается публикациями основных результатов в научных рецензируемых журналах, их апробацией на конференциях, наличием разработанных и валидированных потенциалов межатомного взаимодействия для описания сплавов $\text{Cr}_x\text{NbMoTaVW}$. Проведенное с помощью разработанных потенциалов методами компьютерного моделирования исследование диффузии в этих сплавах позволило установить возможность существования ускоренной диффузии по коллективному механизму, которая может снизить верхний предел рабочих температур для сплавов этой системы, что определяет практическую значимость выполненной работы.

Научная новизна работы определяется получением количественных данных по энтальпии образования высокоэнтропийных сплавов $\text{Cr}_x\text{MoNbMoTaW}$ с учетом эффектов упорядочения и демонстрацией того, что

вклад энтальпии сопоставим с энтропийным вкладом в гиббсовскую энергию образования этих сплавов.

Считаю, что работа Максименко Вячеслава Николаевича «Исследование упорядочивания и диффузии в высокоэнтропийных сплавах на примере $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием N-body межатомных потенциалов» является законченным исследованием, выполненным по актуальной для вычислительного материаловедения тематике на высоком научном уровне. Диссертационная работа соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленных «Положением о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 в действующей редакции), а ее автор Максименко Вячеслав Николаевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

Кандидат физико-математических наук, *01.04.07- физика конденсированного состояния*
начальник лаборатории РТЛ ОТР ККТЭиПТ
НИЦ «Курчатовский институт»,
123182, Россия, Москва, пл. Академика
Курчатова, д. 1,
+7 903 636-92-47,
Sivak_AB@nrcki.ru



(подпись)

Сивак А.Б.

«03» 12 2024 г.

Подпись Сивака А.Б. заверяю
Главный ученый секретарь
НИЦ «Курчатовский институт»





(подпись)

Борисов К.Е.

«03» 12 2024 г.

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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

В последнее время все интенсивнее ведутся как экспериментальные, так и теоретические исследования структурно-фазового состояния и физико-механических свойств высокоэнтропийных сплавов (сплавы, состоящие из 5 и более элементов). Синтез таких сплавов с заданными свойствами в перспективе может позволить решить многие задачи в различных областях науки и техники, поскольку за счет варьирования состава этих сплавов можно формировать системы с высокими эксплуатационными характеристиками и фазовой стабильностью в широком диапазоне температур. Одним из направлений исследований в данной области является синтез высокоэнтропийных сплавов на основе тугоплавких элементов, таких как W, Ta, Mo, Nb и других, поскольку они могут обладать превосходными механическими свойствами при высоких температурах. Такие сплавы могут быть синтезированы, в частности, на основе системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W. Однако в подобных сплавах остается не решенной проблема задания и контроля их диффузионных характеристик. Ввиду большого спектра возможностей варьирования состава высокоэнтропийных сплавов, их синтез с последующим анализом структурно-фазового состояния и свойств приводит к необходимости проведения многочисленных экспериментов, направленных на поиск оптимальных составов этих сплавов. Ключевой задачей при решении данной проблемы является моделирование структуры сплавов и создание численных моделей, описывающих особенности взаимодействия между их элементами и прогнозирования диффузионных характеристик, что в дальнейшем позволит существенно сократить время и трудозатраты по поиску оптимальных составов высокоэнтропийных сплавов с заданными эксплуатационными свойствами. В связи с выше сказанным, диссертационная работа Максименко В.Н., посвященная разработке потенциалов межатомных взаимодействий для системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W и их применению для моделирования процессов упорядочения и диффузии в твердых растворах $\text{Cr}_x\text{NbMoTaVW}$, где $x=0, 0,5, 1, 2, 3$, является несомненно актуальной.

В процессе выполнения работы диссертантом был получен **ряд новых важных научных результатов:**

1) Выявлено, что основным вкладом в энтальпию образования упорядоченного твердого раствора высокоэнтропийных сплавов $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ является вклад, связанный с эффектом упорядочения. Так, уменьшение энтальпии, вызванное упорядочением в этих сплавах, либо превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса (при 500 и 1000 °C), либо имеет с ним один порядок (при 1700 и 2300 °C).

2) Показано, что в эквиатомном сплаве CrMoNbTaVW диффузия всех его компонентов заметно выше по сравнению с самодиффузией в этих металлах при тех же температурах. Кроме того, в высокоэнтропийных сплавах CrMoNbTaVW диффузия компонентов может протекать и без наличия вакансий в решетке в отличие от диффузии в чистых ОЦК металлах, формирующих данный сплав.

3) Результаты проведенных исследований указывают на возможность реализации механизма диффузии в сплаве CrMoNbTaVW , в основе которого лежит согласованное перемещение атомов разного сорта, несмотря на существенные различия в величинах их температур плавления и атомных радиусов.

Обоснованность научных положений и достоверность полученных результатов обеспечивается применением современных программных пакетов и методов расчета, непротиворечивостью полученных результатов, а также качественным и количественным согласием полученных результатов с экспериментальными данными. Результаты диссертационной работы опубликованы в рецензируемых научных изданиях и прошли необходимую апробацию на международных научных конференциях.

Практическая ценность работы заключается в построении полного набора N -body потенциалов, позволяющего моделировать компоненты системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W при любых концентрациях элементов в широкой области температур. Использование этого набора для предсказания структуры и физико-механических свойств высокоэнтропийного сплава CrMoNbTaVW в зависимости от содержания в нем элементов существенно ускорит процесс разработки новых перспективных материалов на основе системы Cr-Mo-Nb-Ta-V-W.

Значимость полученных результатов для науки состоит в разработке конструктивного подхода к компьютерному моделированию высокоэнтропийных сплавов за счет модернизации метода построения межатомных потенциалов и совершенствования методов их применения для изучения структуры, термодинамических и диффузионных характеристик высокоэнтропийных сплавов с учетом эффектов упорядочения. Обнаружена возможность отслеживания наличия или отсутствия явления ускорения диффузии по коллективному механизму в высокоэнтропийных сплавах.

По автореферату диссертации имеются следующие замечания:

1) В актуальности темы исследования отсутствует ясная аргументация выбора системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W в качестве объекта исследования. Из текста автореферата неясно, какие есть альтернативы изучаемому в диссертационной работе сплаву и актуальны ли для них проблемы установления диффузионных характеристик.

2) В тексте автореферата отсутствует описание метода построения потенциалов на основе экспериментальных и CALPHAD данных для бинарных систем с твердыми растворами. Описание данного метода наиболее важно, поскольку, как следует из текста автореферата, он является оригинальным.

3) В тексте автореферата отсутствует хотя бы краткое описание используемых методов молекулярной динамики и Монте-Карло. Так же ничего не говорится о сходимости результатов моделирования данными методами от размера модельной ячейки, числа шагов и т.д..

4) На стр. 11 отмечается, что «рассчитанные с помощью потенциалов, значения температур плавления для Cr и W совпадают с известными экспериментальными значениями в пределах ошибки расчета... Рассчитанные с помощью потенциалов теплоты плавления для Cr, Mo и W близки к соответствующим величинам известных экспериментальных данных». Однако в автореферате отсутствует обсуждение достаточно сильного отличия (более 20%) рассчитанной теплоты плавления вольфрама от экспериментального значения из работы [80] (таблица 2), несмотря на очень хорошее согласие рассчитанного значения температуры плавления W с экспериментальным из той же работы [80].

5) На рисунке 3 экспериментальные и CALPHAD данные обозначаются одинаково, что не позволяет четко проследить, для каких твердых растворов рассчитанные энтальпии образования хорошо согласуются именно с экспериментальными данными. На стр. 13 указывается, что «Максимальные отклонения порядка 10^{-4} эВ/атом», однако на рисунке 3 для твердого раствора Cr-W отклонение

рассчитанных с помощью потенциалов значений от экспериментальных или CALPHAD данных достигает 10^{-2} эВ/атом, что никак не комментируется в тексте автореферата.

6) В тексте автореферата отсутствует подробное описание представленной на рисунке 4 информации, что затрудняет понимание обсуждаемых диссертантом результатов моделирования на стр. 15. Неясно, чем отличаются ОЦК1 и ОЦК2 фазы, почему красные кружки наблюдаются и выше фиолетовой линии при $X = 0$ и $T > 1500^\circ\text{C}$, как проявлялось нарушение устойчивости ОЦК фазы в областях, отмеченных красными снежинками, почему красная снежинка лежат на зеленой линии, указывающей области стабильности ОЦК фазы согласно экспериментальным работам при $X = 1$ и $T \approx 2300^\circ\text{C}$?

7) На рисунке 5 выбор шкалы делений и указываемых у них значений коэффициентов диффузии затрудняет работу с представленными зависимостями: очень сложно определить значение коэффициентов диффузии по делениям без подписанных значений и сопоставить их между собой для разных металлов в сплаве. Также неясно, почему на рисунке 5 отсутствуют результаты расчета коэффициентов самодиффузии в чистом Мо с использованием разработанного для молибдена потенциала.

Сделанные замечания не снижают значимость научных результатов, полученных автором, и не влияют на общую положительную оценку работы. В целом, автореферат и научные публикации В.Н. Максименко позволяют сделать вывод о том, что диссертационная работа «Исследование упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах на примере $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием N -body межатомных потенциалов» представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, выполненную на высоком уровне. Она содержит новые результаты, имеющие как теоретическое, так и практическое значение. По моему мнению, диссертация полностью соответствует паспорту специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния, а соискатель заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Доцент отделения экспериментальной физики
инженерной школы ядерных технологий

федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

634050, г. Томск, проспект Ленина, д. 30, тел. +7 (3822) 60-63-33,

email: tpu@tpu.ru, <https://tpu.ru>

Кандидат физико-математических наук

01.04.07 - Физика конденсированного состояния

/ Святкин Леонид Александрович

Я, Святкин Леонид Александрович, даю согласие на обработку моих персональных данных, связанную с защитой диссертации и оформлением аттестационного дела В.Н. Максименко.

11.12.2024

/ Святкин Леонид Александрович

Подпись Л. А. Святкина удостоверяю

И.о. ученого секретаря ТПУ

/ Новикова Валерия Дмитриевна



ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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.

В рамках диссертационной работы В. Н. Максименко проведено исследование методами компьютерного моделирования процессов упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием разработанных потенциалов межатомных взаимодействий. Стремительное развитие компьютерной техники и, как следствие, методов компьютерного моделирования, в том числе в области материаловедения, способствует улучшению атомистического моделирования. Одной из ключевых проблем в этой области является отсутствие надежных потенциалов межатомных взаимодействий. Попытка решения этой проблемы, касающейся сплавов системы тугоплавких металлов CrMoNbTaVW , делает диссертационную работу особенно актуальной.

Для достижения целей диссертационной работы используются такие методы, как метод молекулярной динамики, теория функционала плотности, комбинированный метод Монте-Карло и молекулярной динамики, а также метод разработки межатомных потенциалов N -body. Сравнительный анализ известных экспериментальных данных и данных, полученных разными взаимодополняющими методами моделирования, подтверждает достоверность полученных результатов.

В рамках диссертационной работы были разработаны потенциалы межатомных взаимодействий для системы на основе тугоплавких металлов CrMoNbTaVW . С использованием отмеченных потенциалов атомистическими методами моделирования было показано, что в высокоэнтропийных сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ значение уменьшения энтальпии, вызванное упорядочением, сопоставимо или превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса. Также методом молекулярной динамики были рассчитаны коэффициенты диффузии в сплаве CrMoNbTaVW , и показано, что диффузия в данном сплаве может идти без предварительного задания вакантных узлов в модельной ячейке.

Результаты диссертационной работы В. Н. Максименко, имеют большое значение для развития методов атомистического моделирования в исследованиях, направленных на изучение процессов упорядочения и диффузии в металлах и сплавах, в том числе и высокоэнтропийных.

К автореферату диссертации можно сделать следующие замечания:

1) На рисунках 1, 3, 5 представлены результаты сравнительного анализа экспериментальных точек и расчетных значений, однако в автореферате отсутствует какой-либо численный статистический анализ соответствия расчетных и экспериментальных данных.

2) Из автореферата не ясно, для каких изделий может быть использован высокоэнтропийный сплав системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W.

Однако сделанные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы и ее научной ценности.

Диссертация В. Н. Максименко соответствует пунктам 1 и 3 паспорта специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки) и требованиям ВАК, установленным в «Положении о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства РФ от 24.09.2013 №842 в действующей редакции) и представляет собой завершённое научное исследование, выполненное на высоком уровне, содержит новые научные результаты, имеющие как теоретическую, так и практическую значимость. Считаем, что соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Старший преподаватель кафедры
материаловедения и нанотехнологий
НИУ «БелГУ», канд. физ.-мат. наук
по специальности 01.04.07. – Физика
конденсированного состояния

Бодякова Анна Игоревна

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет» (НИУ «БелГУ»), 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85, телефон: +7 (4722) 58-54-57, факс: (4722) 30-10-12, bodyakova-ai@yandex.ru.
На обработку персональных данных согласна.

Ведущий научный сотрудник лаборатории
Механических свойств наноструктурных
и жаропрочных материалов НИУ «БелГУ»,
д-р физ.-мат. наук по специальности
01.04.07. – Физика конденсированного
состояния, профессор

Беляков Андрей Николаевич

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет» (НИУ «БелГУ»), 308015, г. Белгород, ул. Победы, 85, телефон: +7 (4722) 58-54-57, факс: (4722) 30-10-12, belyakov@bsu.edu.ru.
На обработку персональных данных согласен.

12.12.2024



ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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.

В диссертации В.Н. Максименко выполнено моделирование упорядочения и диффузии в сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием оригинальных потенциалов межатомных взаимодействий. Основные задачи работы включали разработку потенциалов для молекулярно-динамического моделирования системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W, а также моделирование процессов упорядочения и диффузии методами молекулярной динамики и комбинированным методом Монте-Карло и молекулярной динамики.

Актуальность исследования обусловлена значением таких направлений мировой науки, как создание потенциалов межатомных взаимодействий и изучение высокоэнтропийных сплавов. Для достижения целей использовались как известные методы (молекулярная динамика, теория функционала плотности), так и оригинальная модификация метода разработки потенциалов N -body для бинарных систем с твердыми растворами, что обеспечивает высокую достоверность полученных результатов.

В ходе работы были созданы универсальные потенциалы для моделирования системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W при любых концентрациях компонентов. С их помощью установлено, что в сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ снижение энтальпии за счет упорядочения может быть сравнимо или превышать вклад энтропии в энергию Гиббса. Также методами молекулярной динамики рассчитаны коэффициенты диффузии компонентов сплава CrMoNbTaVW , показавшие возможность диффузии без введения вакансий в модельной ячейке.

Результаты диссертации В.Н. Максименко имеют значимость для изучения упорядочения и диффузии в тугоплавких металлах и их сплавах с использованием атомистического моделирования и потенциалов межатомных взаимодействий. В автореферате диссертации можно отметить следующие замечания:

- 1) Присутствуют незначительные опечатки в тексте.
- 2) Из данных в таблице 4 упорядоченным и разупорядоченным состояниями близко к значению энтальпии образования сплава $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ для всех рассмотренных значений x . Из этого следует, что основной вклад в энтальпию образования упорядоченного твердого раствора данных сплавов вносит вклад, связанный с эффектом упорядочения.

а. Какие ещё эффекты, кроме упорядочения, могут вносить вклад в энтальпию образования сплава? Может ли это быть связано с PV -эффектом? Однако, согласно таблице, видно, что значение H_f практически не зависит от температуры, а следовательно, и от изменений объема, вызванных тепловым расширением.

- 3) Из автореферата остаётся неясным, использовались ли какие-либо данные о диффузионных характеристиках при обучении потенциалов.
- 4) Почему энергия активации для диффузии с вакансией оказывается выше, чем без вакансии для V и W? Это выглядит нелогично и требует пояснений.
- 5) На рисунке 5 представлены коэффициенты диффузии металлов, из которых видно, что добавление вакансий практически не влияет на результаты. Это утверждение выносится в выводы, однако в тексте не указана концентрация вакансий. Поскольку коэффициенты диффузии напрямую зависят от их концентрации, это значение необходимо явно указать.
- 6) Механизм диффузии без вакансий остаётся неясным. В тексте утверждается, что это коллективные смещения, однако любые коллективные смещения предполагают первоначальное образование пары Френкеля. Возникают вопросы: формируются ли такие пары в молекулярно-динамическом моделировании, какова их энергия образования, и насколько точно потенциалы воспроизводят энергетику этих пар по сравнению с расчётами в рамках теории функционала плотности (ТФП)?
- 7) Указывается, что вклад энтальпии сопоставим с вкладом энтропии. Однако в работе не рассмотрены фундаментальные и практические последствия этого результата. Является ли это универсальной особенностью высокоэнтропийных сплавов или характерно исключительно для исследуемой системы?

Несмотря на сделанные замечания, значимость научных результатов, полученных автором диссертационной работы, достаточно высокая и общая оценка работы является положительной.

Диссертация В. Н. Максименко содержит новые результаты, имеющие как теоретическое, так и практическое значение и представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, выполненную на высоком уровне. Она полностью соответствует паспорту специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния. Считаю, что соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Старший преподаватель Сколковского института науки и технологий,

к.ф.-м.н. Аксенов Дмитрий Александрович

12.12.2024

Шифр специальности: 01.04.07,

Физика конденсированного состояния

Сколковский институт науки и технологий,

Территория Инновационного Центра “Сколково”,

улица Большой Бульвар, д. 30, стр 1 Москва 121205, Россия

Телефон института: +7 (495) 280 14 81,

Личный телефон: +7 (977) 663 81 41

Е-mail: d.aksenov@skoltech.ru, Профиль: <https://faculty.skoltech.ru/people/dmitryaksenov>

Директор Аксенова Д.А.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЙ ЦЕНТР
КАДРОВОГО АДМИНИСТРИРОВАНИЯ
ГУК О.С.

