

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 развитию атомистического моделирования для исследования эффектов упорядочения и диффузии в сплавах на основе тугоплавких металлов. Поставленные в работе задачи связаны с разработкой и тестированием потенциалов межатомных взаимодействий для системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W, а также моделированием упорядочения и диффузии в сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ методом молекулярной динамики с использованием разработанных автором многочастичных межатомных потенциалов. **Актуальность диссертационной работы не вызывает сомнения**, поскольку до настоящего времени не установлен механизм диффузии в высокоэнтропийных сплавах, в частности в $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$. Полученные результаты также найдут практическое применение при разработке высокоэнтропийных сплавов на основе тугоплавких ОЦК металлов.

Диссертация изложена на 140 страницах машинописного текста. Структура диссертации представлена четырьмя главами, введением, заключением и списком литературы из 138 наименований.

Во **введении** автором дается обоснование актуальности, научной новизны и практической значимости поставленных задач, формулируются цели исследования, дана информация о личном вкладе автора и апробации работы, собраны положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** сделан обзор современных работ по моделированию многокомпонентных сплавов. Было отмечено преимущество методов атомистического моделирования на основе потенциалов межатомных взаимодействий для исследования многокомпонентных сплавов и показаны существующие ограничения данных методов применительно к сплавам на основе тугоплавких металлов, устранению которых посвящена диссертационная работа. Указывается необходимость разработки и

верификации потенциалов взаимодействия атомов входящих в высокоэнтропийные сплавы.

Во второй главе излагаются используемые методы компьютерного моделирования: метод молекулярной динамики с использованием полуэмпирических потенциалов межатомных взаимодействий, метод расчета энергетических характеристик в рамках теории функционала плотности, реализованной в программном пакете VASP, метод разработки многочастичных потенциалов межатомных взаимодействий особой N-body формы и комбинированный метод Монте-Карло и молекулярной динамики МД+МК.

В третьей главе описаны разработка и тест потенциалов межатомных взаимодействий в рамках метода N-body для систем на основе тугоплавких металлов. В результате впервые были разработаны потенциалы межатомных взаимодействий для атомистического моделирования сплавов на основе системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W.

В четвертой главе описано исследование упорядочения в сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с помощью моделирования комбинированным методом Монте-Карло и молекулярной динамики МД+МК с использованием построенных потенциалов межатомных взаимодействий, изложенных в третьей главе. Было установлено, что вызванное упорядочением уменьшение энтальпии в высокоэнтропийных сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ по отношению к случайному твердому раствору превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса, либо имеет один порядок с ним в случае более высоких температур. Также, в данной главе описано исследование диффузии в эквиатомном сплаве CrMoNbTaVW с помощью молекулярно-динамического моделирования. На основе результатов моделирования была показана возможность существования нового явления – ускоренной диффузии в высокоэнтропийных сплавах на основе системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W по сравнению с одноатомными металлами.

В заключении изложены основные результаты работы, и даны рекомендации по их использованию.

Название диссертации отражает суть работы. Содержание диссертации соответствует специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния». Автореферат корректно и полно отражает содержание диссертации.

Таким образом, в рамках диссертационной работы В. Н. Максименко проведено полное исследование упорядочения и диффузии в сплавах $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ в рамках N-body подхода при задании межатомных

взаимодействий. Теоретическая значимость диссертационной работы В. Н. Максименко состоит в разработке потенциалов межатомных взаимодействий для сплавов на основе системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W и развитии методов их использования. Практическая значимость данной работы состоит в развитии методов атомистического моделирования и установлении возможности существования нового явления ускоренной диффузии, что может способствовать ускорению разработки новых сплавов на основе системы Cr-Mo-Nb-Ta-V-W.

Научная новизна.

К числу наиболее значимых результатов В. Н. Максименко следует отнести:

- Впервые разработаны потенциалы межатомных взаимодействий в специальной многочастичной форме N-body для атомистического моделирования сплавов на основе системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W;
- Впервые методами атомистического моделирования с учетом эффектов упорядочения показано, что вызванное упорядочением уменьшение энтальпии в высокоэнтропийных сплавах $Cr_xMoNbTaVW$ по отношению к случайному твердому раствору превышает энтропийное слагаемое в энергии Гиббса, либо имеет один порядок с ним в случае более высоких температур;
- Впервые методами атомистического моделирования показано, что в высокоэнтропийных сплавах системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W возможна реализация диффузии без задания вакантных узлов.

Выводы, сделанные В. Н. Максименко по результатам диссертационного исследования, создают необходимый научный задел для разработки новых перспективных материалов путем развития методов атомистического моделирования.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнения вследствие использования хорошо апробированных подходов к решению поставленных задач, качественных полуэмпирических потенциалов межатомного взаимодействия и согласия полученных промежуточных результатов с имеющимися в литературе данными.

Апробация работы. Результаты диссертации в полном объеме опубликованы в 15 печатных работах, включающих девять работ в научных изданиях Scopus и Web of Science, две в издании, рекомендованном ВАК и шесть материалов тезисов конференций. Автореферат соответствует тексту диссертации.

Положения, выносимые на защиту, соответствуют содержанию выполненных исследований.

По диссертационной работе можно сделать следующие замечания:

- 1) Заметное количество неточностей и пропусков слов обнаруживается в диссертации – однако большинство из них незначительные и не будут отмечены в этом отзыве.
- 2) Введение термина “N-body” в русском тексте для используемого многочастичного потенциала представляется неудачным, так как этот термин (прилагательное) в англоязычной литературе уже занят и означает “многочастичный”. Поэтому точный перевод “N-body potential” есть “многочастичный потенциал”, а не “N-body потенциал”. Также в диссертации этот термин используется в сочетании “метод N-body”, хотя описывается и используется не метод, а математическая модель многочастичного потенциала особой формы.
- 3) В разделе «2.1. Метод молекулярной динамики» утверждается, что «чтобы описать движение атомов, взаимодействиями электронов с ядрами и электронов с электронами можно пренебречь из-за большой разницы в массах атомных ядер и электронов. Поэтому достаточен учет взаимодействий только между ядрами ...». Это неверно, так как взаимодействием электронов с ионами не пренебрегают, а строят на основе его (плюс меж-ядерное ионное взаимодействие) межатомный потенциал. Малое отношение масс дает возможность электронам быстро подстраиваться под медленное движение ионов, что обосновывает адиабатическое приближение Борна-Оппенгеймера.
- 4) В разделе «2.1. Метод молекулярной динамики» также утверждается, что в этом методе «...сила, которая действует на атом, и вычисляется из его массы и ускорения.» На самом деле для интегрирования уравнений движения в методе МД требуется определить ускорение по силе, рассчитанной из градиента потенциальной энергии взаимодействия атома со своими соседями.
- 5) В разделе «3.1.1. Потенциалы чистых металлов Cr, Mo и W» и далее используется термин «потенциальные функции для потенциалов» для обозначения функций, в частности зарядовой плотности, входящих в состав потенциалов. Однако эти функции по отдельности не являются потенциальными.
- 6) В разделе 3.7. «Потенциалы для систем с твердыми растворами ОЦК решетки» на рис. 3.17 демонстрируется качественное различие с данными CALPHAD по энтальпии образования жидкости Cr-Mo, которое объясняется учетом образования ближнего порядка в МД. Почему тогда другие пары атомов дают качественное согласие?

- 7) В работе не приводятся тесты потенциалов тройных и более систем. Остается неясным, насколько чувствительны полученные результаты моделирования шестикомпонентных сплавов к введению тройных и более межатомных взаимодействий?
- 8) В работе нет четкого указания механизма диффузии в модельном эквиатомном высокоэнтропийном сплаве CrMoNbTaVW.

Сделанные замечания не влияют на основные результаты работы и не снижают ее научной значимости.

Диссертация В. Н. Максименко выполнена на высоком научном уровне и соответствует предъявляемым требованиям ВАК, а результаты, полученные в ней, актуальны и имеют важное значение для физики конденсированного состояния.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертация Максименко Вячеслава Николаевича представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует паспорту научной специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния и требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор Максименко Вячеслав Николаевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8.

Отзыв составил официальный оппонент, ведущий научный сотрудник отдела компьютерного моделирования Центра фундаментальных и прикладных исследований ФГУП «ВНИИА им. Н. Л. Духова», к.ф.-м.н., Жаховский Василий Викторович (специальность 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника, e-mail: basilz@ya.ru).

В.В. Жаховский (Жаховский В.В.) 29.11.2024

Подпись Жаховского В. В. заверяю
Ученый секретарь НТС ФГУП «ВНИИА» _____ Феоктистова Л. В.

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н. Л. Духова»,
Москва, ул. Суцневская, д. 22.

Тел.: +7 (499) 978-7803

<http://www.vniia.ru>

e-mail: vniia@vniia.ru