

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.435.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «ЮГО-ЗАПАДНЫЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»,
МИНОБРНАУКИ РОССИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 19.12.2024 г. № 13

О присуждении Максименко Вячеславу Николаевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Исследование упорядочения и диффузии в высокоэнтропийных сплавах на примере $\text{Cr}_x\text{MoNbTaVW}$ с использованием N -body межатомных потенциалов» по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния принята к защите 17.10.2024 года (протокол заседания № 10) диссертационным советом 24.2.435.01, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Юго-Западный государственный университет», Минобрнауки России, адрес: 305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94, приказ о создании диссертационного совета № 714/нк от 02.11.2012 г.

Соискатель Максименко Вячеслав Николаевич 1993 года рождения. В 2015 году окончил федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет» по специальности «наноматериалы» и присвоена квалификация инженер. В 2019 г. окончил аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет» и присвоена квалификация «Исследователь. Преподаватель-исследователь» по направлению подготовки 03.06.01 – «Физика и астрономия» специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Работает младшим научным сотрудником в лаборатории физико-химической инженерии композиционных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем

химической физики и медицинской химии Российской академии наук (Минобрнауки России) и инженером в Региональном центре нанотехнологий федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Юго-Западный государственный университет» (Минобрнауки России).

Диссертация выполнена в лаборатории физико-химической инженерии композиционных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук (Минобрнауки России).

Научный руководитель Липницкий Алексей Геннадьевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры наноматериалов и нанотехнологий федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет».

Официальные оппоненты:

1. Зольников Константин Петрович, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, г. Томск.

2. Жаховский Василий Викторович, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник центра фундаментальных и прикладных исследований всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н. Л. Духова, г. Москва.

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Марийский государственный университет», г. Йошкар-Ола, в своем положительном заключении, подписанном Мурзашевым Аркадием Ислибаевичем, доктором физико-математических наук, профессором кафедры физики и материаловедения федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Марийский государственный университет», указала, 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.

Соискатель имеет 33 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 15 работ, из них 9 работ в изданиях, рекомендованных ВАК РФ.

Наиболее значимые работы:

1. Maksimenko V. N., Lipnitskii A. G., Kartamyshev A. I., Poletaev D. O., Kolobov Yu. R. The N-body interatomic potential for molecular dynamics simulations of diffusion in tungsten //Computational Materials Science. – 2022. – Т. 202. – С. 110962.
2. Poletaev D. O., Lipnitskii A. G., Maksimenko V. N., Kolobov Yu. R., Beresnev A. G., Gusakov M. S. The N-body interatomic potentials for molecular dynamics simulations of diffusion in C15 Cr₂Ta Laves phase //Computational Materials Science. – 2023. – Т. 216. – С. 111841.
3. Maksimenko V. N., Lipnitskii A. G., Saveliev V. N., Nelasov I. V., Kartamyshev A. I. Prediction of the diffusion characteristics of the V-Cr system by molecular dynamics based on N-body interatomic potentials //Computational Materials Science. – 2021. – Т. 198. – С. 110648.
4. Maksimenko V. N., Lipnitskii A. G. Development of n-body interatomic potentials for calculating the thermodynamic characteristics of V-Nb-Mo-W alloys //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2021. – Т. 1014. – №. 1. – С. 012022.
5. Lipnitskii A. G., Maksimenko V. N., Nelasov I. V. Method of molecular dynamics investigation of diffusion in solid solutions with consideration of ordering effects on the example of V₅₀W₅₀ and V₉₀W₁₀ alloys //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2021. – Т. 1014. – №. 1. – С. 012021.
6. Maksimenko V. N., Lipnitskii A. G., Nelasov I. V. Construction of interatomic potentials of VW on the basis of CALPHAD data on the formation enthalpy //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing, 2019. – Т. 2167. – №. 1.

7. Lipnitskii A. G., Maksimenko V. N., Nelasov I. V., Kartamyshev A. I. Interatomic potential for the simulation of diffusion processes in tungsten //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing, 2019. – Т. 2167. – №. 1.

8. Максименко В. Н., Боев А. О., Липницкий А. Г., Савельев В. Н., Картамышев А. И. Потенциалы межатомных взаимодействий для моделирования хрома //Ядерная физика и инжиниринг. – 2017. – Т. 8. – №. 1. – С. 69-75.

9. Максименко В. Н. и др. Моделирование упорядочения и диффузии в сплавах CrXMoNbTaVW в рамках N-частичного подхода при задании межатомных взаимодействий //Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. – 2024. – Т. 14. – №. 2. – С. 88-107.

На диссертацию и автореферат поступили 9 отзывов от:

1. доктора физико-математических наук, профессора Зольникова Константина Петровича, главного научного сотрудника института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН, *отзыв положительный*. Имеются замечания: (1) 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; (2) В работе нет детального изложения методики расчета коэффициентов диффузии из результатов моделирования методом молекулярной динамики; (3) В работе не приведен анализ сходимости расчетов теории функционала электронной плотности. Насколько надежными являются результаты данных расчетов для сплавов ОЦК d-металлов?

2. кандидата физико-математических наук Жаховского Василия Викторовича, ведущего научного сотрудника центра фундаментальных и прикладных исследований всероссийского научно-исследовательского института автоматизики им. Н. Л. Духова, *отзыв положительный*. Имеются 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.

3. доктора физико-математических наук, Мурзашева Аркадия Ислибаевича, профессора кафедры физики и материаловедения ФГБОУ ВО «Марийского государственного университета» — ведущая организация, *отзыв положительный*. Имеются замечания: (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.

4. доктора физико-математических наук Коротеева Юрия Михайловича, старшего научного сотрудника лаборатории физики поверхностных явлений Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт физики прочности и материаловедения» Сибирского отделения Российской академии наук, *отзыв положительный*. Имеются замечания: (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 CALPHAD на рисунке 4: "Данные CALPHAD [3 1] — линии;"

5. доктора физико-математических наук Кадомцева Андрея Георгиевича, главного научного сотрудника, заведующего лабораторией физики прочности ФТИ им. А.Ф. Иоффе и доктора физико-математических наук, профессора, Бетехтина Владимира Ивановича, главного научного сотрудника лаборатории физики прочности ФТИ им. А.Ф. Иоффе, *отзыв положительный*. Замечаний нет.

6. кандидата физико-математических наук Сивака Александра Борисовича, начальника лаборатории РТЛ ОТР ККТЭИПТ НИЦ «Курчатовский институт», *отзыв положительный*. Замечаний нет.

7. доктора физико-математических наук Белякова Андрея Николаевича, ведущего научного сотрудника лаборатории Механических свойств наноструктурных и жаропрочных материалов НИУ «БелГУ» и кандидата физико-математических наук, Бодяковой Анны Игоревны, старшего преподавателя кафедры материаловедения и нанотехнологий НИУ «БелГУ», *отзыв положительный*. Имеются 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.

8. кандидата физико-математических наук Святкина Леонида Александровича, доцента отделения экспериментальной физики инженерной школы ядерных технологий федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», *отзыв положительный*. Имеются 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 2300°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 Mo с использованием разработанного для молибдена потенциала.

9. кандидата физико-математических наук Аксенова Дмитрия Александровича, старшего преподавателя Сколковского института науки и технологий, *отзыв положительный*. Имеются 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 HfH_f практически не зависит от температуры, а следовательно, и от изменений объёма, 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?

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обусловливается их авторитетностью и компетентностью в области физики конденсированного состояния.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

доказана перспективность метода N -body для задания межатомных взаимодействий в системе ОЦК тугоплавких металлов V - Cr - Nb - Mo - Ta - W ;

предложен конструктивный подход к теоретическому прогнозу характеристик сплавов системы ОЦК тугоплавких металлов V-Cr-Nb-Mo-Ta-W при различных концентрациях компонентов на основании атомистического моделирования.

доказана перспективность использования атомистического моделирования для прогнозов эффектов упорядочения и диффузии в многокомпонентных сплавах, в том числе высокоэнтروпийных.

Теоретическая значимость исследований обоснована тем, что:

проведена модернизация метода построения *N*-body потенциалов для случая использования экспериментальных и теоретических данных об энтальпии образования и параметрах решеток в бинарных твердых растворах;

изложены доказательства существования нового явления ускоренной диффузии по коллективному механизму в высокоэнтропийных сплавах ОЦК тугоплавких металлах;

раскрыты существенные проявления энтальпии, сопоставимые с энтропийным вкладом в энергию Гиббса в высокоэнтропийных сплавах $Cr_xNbMoTaVW$;

раскрыта необходимость учета эффектов упорядочения при расчете методами атомистического моделирования термодинамических характеристик в исследованных высокоэнтропийных сплавах;

применительно к проблематике диссертации результативно использованы методы разработки *N*-body межатомных потенциалов, молекулярной динамики, и комбинированный метод молекулярной динамики и Монте-Карло МД+МК.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны и внедрены новые межатомные потенциалы для моделирования Cr, Mo и W, позволившие получать более точные и качественные прогнозы характеристик дефектов и диффузионных процессов;

разработаны и внедрены межатомные потенциалы для всех бинарных сплавов системы V-Cr-Nb-Mo-Ta-W для моделирования сплавов этой системы при различных концентрациях компонентов;

определены перспективы практического использования, разработанных потенциалов для прогноза атомных характеристик сплавов для ускоренной разработки новых металлических материалов на основе системы Cr-Mo-Nb-Ta-V-W;

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

использован известный метод N -body при разработке потенциалов межатомных взаимодействий для прогнозирования диффузионных характеристик металлов;

установлено качественное и количественное согласие прогнозов на основе разработанных потенциалов системы Cr-Mo-Nb-Ta-V-W характеристик металлов и сплавов между экспериментальными и расчетными данными по методам ТФП и CALPHAD;

использован программный вычислительный комплекс VASP с практической реализацией теории функционала электронной плотности при получении расчетных данных для построения потенциалов межатомных взаимодействий.

Личный вклад соискателя состоит в: разработке потенциалов межатомных взаимодействий, проведении ТФП квантово-механических расчетов, моделировании комбинированным методом молекулярной динамики и Монте-Карло МД+МК упорядочения и методом молекулярной динамики диффузии с использованием построенных потенциалов в сплаве $Cr_xMoNbTaVW$. Основные результаты моделирования и их обработка получены лично автором или при его непосредственном участии. Автор внес значительный вклад в написание статей, раскрывающих содержание работы, непосредственно участвовал как докладчик на конференциях и семинарах при апробации научных результатов. Анализ и интерпретация полученных результатов, выводы и научные положения, выносимые на защиту, сформулированы автором лично.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания: недостаточно полное описание метода разработки потенциалов межатомных взаимодействий в ходе доклада, неточность формулировок выводов о проделанной работе.

Соискатель ответил на задаваемые ему вопросы и аргументировал корректность прогнозов моделирования, разработанными межатомными потенциалами, обосновал поставленные задачи.

На заседании 19 декабря 2024 года диссертационный совет принял решение: за успешное решение важной научной задачи, направленной на развитие методов атомистического моделирования, имеющей значение для развития физики

конденсированного состояния, присудить Максименко Вячеславу Николаевичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 13 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за — 12, против — 1, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного
совета 24.2.435.01



Кузьменко Александр
Павлович

Ученый секретарь диссертационного
совета 24.2.435.01

Кочура Алексей
Вячеславович

«19» декабря 2024 г.