

Исследование стабильности высокоэнтропийных сплавов методами классической
молекулярной динамики

Маркина Е.М., Новоселов И.И., Янилкин А.В.

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н.Л. Духова

На сегодняшний день наблюдается увеличение интенсивности исследований высокоэнтропийных сплавов (ВЭС) [1], то есть сплавов из пяти и более образующих элементов, концентрации которых примерно равны. ВЭС привлекают внимание своими уникальными свойствами: высокая устойчивость к коррозии и износостойкость, хорошие показатели твердости и прочности. Несмотря на перспективность уже полученных результатов, ВЭС остаются существенно менее изученными по сравнению с традиционными сплавами из одного и двух образующих компонентов. Таким образом, исследование термодинамики ВЭС представляет большой интерес с точки зрения создания новых материалов, превосходящих своими характеристиками традиционные сплавы.

В настоящей работе было проведено молекулярно-динамическое моделирование процесса гомогенизации двухкомпонентной системы в изобарно-изотермическом ансамбле. Взаимодействие частиц описывается потенциалом Леннарда-Джонса.

Исследована зависимость энтальпии смешения от соотношения компонентов и энергий связи атомов системы. Проведено сопоставление данных, полученных из моделирования, с результатами термодинамических расчетов [2]. Оба подхода предсказывают, что в случае идеальных растворов энтальпия смешения равна нулю, а для регулярных растворов - квадратично зависит от мольной доли одного из компонентов. Также определено влияние состава смеси и энергий атомов в системе на структуру кристаллизованных расплавов.

В данной работе предложен метод определения термодинамической стабильности двухкомпонентных сплавов. Результаты работы метода демонстрируют качественное согласие с оценками в квазихимическом приближении. Данный подход может быть распространен на системы с большим количеством элементов, что в будущем позволит предсказывать термодинамическую стабильность ВЭС на основе молекулярно-динамических расчетов. Таким образом можно оптимизировать процедуру поиска ВЭС, обладающих уникальными свойствами по сравнению с уже имеющимися сплавами.

Литература.

- [1] *J.W. Yeh, S.K. Chen, S.J. Lin, J.Y. Gan, T.S. Chin, T.T. Shun, C.H. Tsau, S.Y. Chang.* Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. - *Advanced Engineering Materials*. – 2004. – № 6. – С. 299-303.
- [2] *Физическое материаловедение/ под ред. Б.А. Калина. [и др.]. – Т.2. - Основы материаловедения. - М.: МИФИ, 2007. – 608 с.*