

ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ СПЛАВЫ ДЛЯ ВОДОРОДНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Зайцева К.В.^{1,2}, Юрьев А.А.^{1,2}, Сидоров Н.И.¹, Ремпель А.А.^{1,2}

¹⁾ Институт металлургии УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

²⁾ Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: ms.great28@mail.ru

HIGH ENTROPY ALLOYS FOR HYDROGEN ENERGY

Zaitseva K.V.^{1,2}, Yuryev A.A.^{1,2}, Sidorov N.I.¹, Rempel A.A.^{1,2}

¹⁾ Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

In this work, the synthesis and computer modeling of high entropy alloys (HEA) for a hydrogen energy. The computer modeling was used for the evaluation of chemical element list and chemical composition of HEA. Selected composition of four, five and six elements HEA were synthesized by the technique.

В данной работе использован высокотемпературный метод синтеза высокоэнтروпийных сплавов (ВЭС) в дуговой печи в атмосфере аргона. В работе синтезированы четырехэлементный CoCrFeNi, пятиэлементный CoCrFeNiV и шестиэлементный CoCr_{0,03}Fe_{0,12}Ni_{0,3}AlCu_{0,1} сплавы. Для синтеза использовали высокочистые металлы (не менее 99.95%). Структуру и химический состав сплавов исследовали на сканирующем электронном микроскопе, рентгенофазовый анализ образцов провели на дифрактометре. Установлено, что синтезированные сплавы имели структуры: ГЦК, ГЦК+ОЦК и ПК+ОЦК. Микротвердость (HV 50 г) сплавов составила: 374, 706 и 591, соответственно.

Состав сплавов был подобран с помощью квантово-химической молекулярной динамики в жидком состоянии при температуре 2000 К. Для проверки критерия существования ВЭС [1], основанного на близости положений и высоты первого максимума структурных функций, были рассчитаны парциальные функции радиального распределения атомов. Кроме того, были оценены полуэмпирические критерии, принятые при анализе ВЭС и основанные на данных по атомным радиусам, энтальпиям смешения и электронной плотности.

Часть исследований выполнена на ЦКП «Урал-М» ИМЕТ УрО РАН.

Работа поддержана государственным заданием ИМЕТ УрО РАН.

10. J.-W Yeh et. al. Adv. Eng. Mater 6, 299-303, (2009)