

ПРЕДСКАЗАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ ФАЗ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ IV И V ГРУПП

Русских А.С.¹, Балякин И.А.¹, Красиков С.А.¹, Жилина Е.М.¹

¹⁾ Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург, Россия

E-mail: Russkih_a_s@mail.ru

PREDICTION OF PHASE FORMATION OF HIGH-ENTROPY ALLOYS OF GROUPS IV AND V

Russkih A.S.¹, Balyakin I.A.¹, Krasikov S.A.¹, Zhilina E.M.¹

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

A computer simulation of a high-entropy Al Ti Zr V Nb alloy was performed using the ab-initio molecular dynamics method for phase formation.

Высокоэнтروпийные сплавы (ВЭСы) представляют собой твердые растворы простой кристаллической структуры, содержащие обычно пять и более элементов, при этом доля каждого компонента варьируется от 5 % до 35 %. Необходимо также отметить что в системе нет преобладающего элемента. Рассматриваемый в данной рукописи тугоплавкий высокоэнтропийный сплав (ТВЭС) имеют интерес в научных кругах из-за их привлекательных высокотемпературных механических свойств. ТВЭС как правило основаны на тугоплавких металлах, но могут также содержать другие элементы низкой плотности. Как правило, ТВЭС обладают высокой прочностью и твердостью.

Для предсказания формирования фаз в тугоплавком высокоэнтропийном сплаве AlTiZrVNb возможно использование методов компьютерного моделирования. Один из возможных методов — это расчёт парциальных функций радиального распределения [1] сплава в жидком состоянии. Если компоненты в сплаве имеют близкие значения парциальной функции радиального распределения, то неупорядоченный твердый раствор образуется с большей вероятностью.

Работа выполнена в соответствии с государственным заданием ИМЕТ УрО РАН, вычисления производились на кластере «Уран» ИММ УрО РАН.

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