

**ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ И ФАЗОВЫЕ ДИАГРАММЫ НА ИХ ОСНОВЕ***Бурчаков А.В., Емельянов М.А.*Самарский государственный технический университет  
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 244

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС), представляющие собой твердые растворы пяти и более химических элементов (обычно металлов) в близких (чаще в эквивалентных) соотношениях, в последние годы вызывают все больший интерес как с теоретической, так и с практической точки зрения. Основная задача при изучении ВЭС – создание методов прогнозирования стабильности и алгоритмов направленного дизайна ВЭС заданного состава. С термодинамической точки зрения формирование простых твердых растворов в ВЭС в виде одной фазы наблюдается, когда выполняется условие  $\Omega \geq 1,1$  и  $\delta \leq 6,6$  %, а формирование многофазной структуры, состоящей из твердых растворов и фаз интерметаллидов, выполняется при условии  $1,1 < \Omega < 10$  и  $\delta > 3,8$  %. Здесь  $\Omega$  – обобщенный термодинамический параметр рассчитывается по уравнению:

$$\Omega = \frac{T_m \cdot \Delta S_{\text{mix}}}{|\Delta H_{\text{mix}}|},$$

где  $T_m$  – температура плавления, а  $\Delta S_{\text{mix}}$  и  $\Delta H_{\text{mix}}$  – энтропия и энтальпия смешения.

Разница в атомных размерах рассчитывается по формуле

$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^N c_i \cdot \left(1 - \frac{r_i}{\bar{r}}\right)^2},$$

где  $c_i$  – доля  $i$ -го компонента;  $r_i$  – атомный радиус  $i$ -го элемента;  $\bar{r}$  – средний радиус (с учетом атомных долей)

Для совокупности ВЭС проведен расчет по приведенной методике и выполнен прогноз образования одной фазы твердого раствора либо распад на несколько фаз. Проведено сравнение расчетных данных с экспериментальными сведениями о фазовых состояниях ВЭС. Помимо этого в работе впервые проведено 3D моделирование фазового комплекса трехкомпонентной системы Fe – Co – Mn в координатах «состав – температура». Построение модели осуществлялось в программе КОМПАС 3D v21. Компоненты системы входят в состав т. н. Кантровского сплава CrMnFeCoNi – классического ВЭС. С помощью моделей фазовых диаграмм многокомпонентных систем (МКС) можно спрогнозировать фазы, отвечающие по составу ВЭС. Таким образом, используя термодинамический расчет и модели фазовых диаграмм МКС, имеется возможность априори определить возможность образования фазы твердого раствора ВЭС.

*Работа выполнена в рамках гранта РНФ (проект № 22-23-00322).*