

ПРЕДСКАЗАНИЕ ОБЛАСТЕЙ ЛЕГКОГО СТЕКЛОВАНИЯ В СИСТЕМЕ Y – Co – Al

Майорова А.В.⁽¹⁾, Коваленко Д.А.⁽²⁾

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт металлургии УрО РАН
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101

Для эффективного поиска новых составов аморфных сплавов и существенного уменьшения трудовых и материальных затрат при их получении необходимо разработать надежные теоретические методы предсказания стеклообразующей способности многокомпонентных металлических сплавов.

Предложена новая модель предсказания составов объемно-аморфных сплавов (BMGs) и пленок (Ribbons) в системе Y – Co – Al. Предложенные новые параметры модели $\Theta_{X-Y}(X)$, $\Theta_{X-Y}(Y)$ позволяют прогнозировать область локализации стеклообразующих составов.

$$\Theta_{X-Y}^{1,2,3}(X) = P_{HSS} \frac{\Delta R(xr(\text{small2})-xr(\text{big}))}{\Delta R(xr(\text{small1})-xr(\text{big}))}_{y=\text{const}}, \quad (1)$$

$$\Theta_{X-Y}^{1,2,3}(Y) = P_{HSS} \frac{\Delta R(xr(\text{small1})-xr(\text{big}))}{\Delta R(xr(\text{small2})-xr(\text{big}))}_{x=\text{const}}. \quad (2)$$

$$P_{HSS} = \Delta H_{\text{mix}} \Delta S_{\sigma}/k_B \Delta S_{\sigma}/R \quad (3)$$

где x и y атомные фракции компонентов А, В в системе А – В – С соответственно; ΔH_{mix} – энтальпии смешения; $\Delta S_{\sigma}/R$ – конфигурационной энтропия, нормированная на газовую постоянную и $\Delta S_{\sigma}/k_B$ – энтропии рассогласования, нормированной на постоянную Больцмана; x_{small1} , x_{small2} and x_{big} атомные фракции small1, small2 и big атомов, r_{small1} , r_{small2} и r_{big} атомные радиусы small1, small2 и big атомов соответственно.

Нами успешно спрогнозированы несколько областей стеклования путем нахождения минимума функций $\Theta_{X-Y}^{1,2,3}(X)$, $\Theta_{X-Y}^{1,2,3}(Y)$:

$$x^{(\text{BestGFA})} \cong \arg \min_x \Theta_{X-Y}^{1,2,3}(X), \quad (4)$$

$$y^{(\text{BestGFA})} \cong \arg \min_y \Theta_{X-Y}^{1,2,3}(Y), \quad (5)$$

где x и y атомные фракции компонентов А, В в системе А – В – С соответственно. $(1 - x - y)$ - атомная фракция компонента С.

Область вблизи точки пересечения локального минимума $x_X^{(\text{BestFGA})}$ и $x_Y^{(\text{BestFGA})}$ соответствует составам с наилучшей стеклообразующей способностью. Таким образом, с помощью разработанных параметров успешно определены составы Y – Co – Al системы с наилучшей стеклообразующей способностью: 1. состав BMG – Y₄₉Co₂₈Al₂₃; 2. состав Ribbon – Y₃₈Co₅₁Al₁₁.

Результаты данной работы открывают перспективы для разработки надежных теоретических методов прогноза новых металлических стекол.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 23-23-00100).