

Исследование упорядочения многокомпонентных систем методами атомистического моделирования

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

Московский физико-технический институт (государственный университет)
Всероссийский научно-исследовательский институт автоматике им. Н.Л. Духова

Высокоэнтропийными (ВЭС) называются сплавы, содержащие пять или более компонентов в приблизительно равных концентрациях [1]. ВЭС являются перспективным классом новых материалов благодаря своим уникальным свойствам [2-6]. Однако, несмотря на многолетние усилия исследователей по всему миру [7-8], до сих пор не выявлены универсальные критерии для предсказания фазовой стабильности ВЭС.

На сегодняшний день одними из фундаментально обоснованных методов исследования стабильности ВЭС являются квантовое (QMD) [9-12] и классическое (CMD) [13-15] молекулярно-динамическое моделирование. QMD самый достоверный, но и самый ресурсоемкий метод, что накладывает ограничения на времена расчетов. Поэтому QMD обычно проводят для маленьких систем и исследуют жидкости [9-11], так как они быстрее твердых тел достигают равновесного состояния. Однако, нет свидетельств того, что результаты таких QMD расчетов будут верны для кристаллов реальных размеров.

Единственным вычислительно эффективным методом изучения стабильности твердых тел является кинетический Монте-Карло (KMC) [16, 17]. Отсутствие атомной динамики делает его менее точным, чем QMD и CMD, зато позволяет проводить расчеты на больших временах.

В настоящей работе было исследовано упорядочение многокомпонентных систем с помощью CMD и KMC. Вычислена степень упорядочения систем с различным химическим составом, который задавался вариацией межатомного потенциала. Рассмотрены как твердые, так и жидкие многокомпонентные растворы.

Для описания фазовой стабильности системы были предложены параметры порядка, определяемые локальным атомным окружением. Термодинамическая движущая сила распада раствора была рассчитана как разница свободных энергий Гиббса между идеально смешанным раствором и состоянием, когда выделилась новая фаза.

KMC и CMD расчеты показали согласующиеся данные для кристаллов. Однако, результаты CMD расчетов для жидкостей продемонстрировали только качественное согласие с данными для твердых тел. Для кристаллов новая фаза выделялась, когда значение движущей силы было близко к нулю. А в случае жидкостей упорядочение системы происходило при существенно больших значениях движущей силы распада раствора. В работе обсуждаются возможные причины количественного различия.

Также было изучено влияние размера системы на степень упорядочения. Было показано, что моделирование для маленьких расчетных ячеек, типичных для QMD, может давать неверные результаты. В подобных системах наблюдается подавление упорядочения.

Литература

- [1] *Yeh J.-W., Chen S.-K., Lin S.-J., Gan J.-Y., Chin T.-S., Shun T.-T., Tsau C.-H., Chang S.-Y.* Nanostructured High-Entropy Alloys with Multiple Principal Elements: Novel Alloy Design Concepts and Outcomes // *Adv. Eng. Mater.* 2004. V. 6, N. 5. P. 299–303.
- [2] *Senkov O.N., Wilks G.B., Scott J.M., Miracle D.B.* Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys // *Intermetallics*. 2011. V. 19. P. 698-706.
- [3] *Laktionova M.A., Tabchnikova E.D., Tang Z., Liaw P.K.* Mechanical properties of the high-entropy alloy Ag_{0.5}CoCrCuFeNi at temperatures of 4.2–300K // *Low Temperature Physics*. 2013. V. 39. N. 7. P. 630-632.

- [4] *Chuang M.-H., Tsai M.-H., Wang W.-R., Lin S.-J., Yeh J.-W.* Microstructure and wear behavior of $\text{Al}_x\text{Co}_{1.5}\text{CrFeNi}_{1.5}\text{Ti}_y$ high-entropy alloys // *Acta Materialia*. 2011. V. 59. P. 6308–6317.
- [5] *Zhou Y.J., Zhang Y., Wang Y.L., Chen G.L.* Solid solution alloys of AlCoCrFeNiTi_x with excellent room-temperature mechanical properties // *Applied Physics Letters*. 2007. V. 90. N. 18. P. 1-3.181904
- [6] *Yang X., Zhang Y.* Cryogenic Resistivities of NbTiAlVTaLax , CoCrFeNiCu and CoCrFeNiAl High Entropy Alloys // *Advanced Materials and Processing*. 2010. P. 51-54.
- [7] *Zhang Y., Zuo T.T, Tang Z., Gao M.C., Dahmen K.A., Liaw P.K., Lu. Z.P.* Microstructures and properties of high-entropy alloys // *Progress in Materials Science*. 2014. V. 61. P. 1-93.
- [8] *Murty B.S., Yeh J.W., Ranganathan S.* High-Entropy Alloys. Elsevier, 2014. 218 p.
- [9] *Gao M.C, Alman D.E.* Searching for Next Single-Phase High-Entropy Alloy Compositions // *Entropy*. 2013. V. 15. N. 10. P. 4504-4519.
- [10] *Diao H., Santodonato L.J., Tang Z., Egami T., Liaw P.K.* Local Structures of High-Entropy Alloys (HEAs) on Atomic Scales: An Overview // *JOM*. 2015. V. 67. N. 10. P. 2321-2325.
- [11] *Santodonato L.J., Zhang Y., Feygenson M., Parish C.M., Gao M.C., Weber R.J., Neufeind J.C., Tang Z., Liaw P.K.* Deviation from high-entropy configurations in the atomic distributions of a multi-principal-element alloy // *Nature Communications*. 2015. V. 6. N. 5964. P. 1-13.
- [12] *Li X., Tian F., Schöneck S., Zhao J., Vitos L.* Ab initio-predicted micro-mechanical performance of refractory high-entropy alloys // *Scientific Reports*. 2015. V. 5. N. 12334. P. 1-7.
- [13] *Kao S.-W., Yeh J.-W., Chin T.-S.* Rapidly solidified structure of alloys with up to eight equal-molar elements - a simulation by molecular dynamics // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2008. V. 20. N. 14. P. 1-7.145214
- [14] *Xie L., Brault P., Thomann A.-L., Bauchire J.-M.* AlCoCrCuFeNi high entropy alloy cluster growth and annealing on silicon: A classical molecular dynamics simulation study // *Applied Surface Science*. 2013. V. 285P. P. 810-816.
- [15] *Egami T., Guo W., Rack P.D., Nagase T.* Irradiation Resistance of Multicomponent Alloys // *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2014. V. 45. N. 1. P. 180-183.
- [16] *Liu Z., Lei Y., Gray C., Wang G.* Examination of Solid-Solution Phase Formation Rules for High Entropy Alloys from Atomistic Monte Carlo Simulations // *JOM*. 2015. V. 67. N. 10. P. 2364-2374.
- [17] *Wang S.* Atomic Structure Modeling of Multi-Principal-Element Alloys by the Principle of Maximum Entropy // *Entropy*. 2013. V. 15. N. 12. P. 5536-5548.

