

Фазовые превращения и прочность кристаллов



ТЕЗИСЫ

**XI Международной конференции ФППК-2020,
посвященной памяти академика Г.В. Курдюмова**

Черноголовка, 26-30 октября 2020 г

Российская Академия наук
Министерство науки и высшего образования РФ
Научный Совет РАН по физике конденсированных сред.
Межгосударственный координационный совет по физике прочности
и пластичности материалов
Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС»
Институт физики твердого тела РАН
Научный Центр металловедения и физики металлов им. Г.В. Курдюмова
ФГУП "ЦНИИчермет им. И.П. Бардина"

Одиннадцатая Международная Конференция
**«Фазовые превращения и
прочность кристаллов»,**
памяти академика Г.В. Курдюмова

Под редакцией д.ф.м.н. Б.Б.Страумала

XI International G.V. Kurdjumov conference
"Phase transformations and strengths of the crystals"

Черноголовка, 26 – 30 октября 2020 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Черноголовка
2020

Фазовые превращения и прочность кристаллов: сб. тезисов XI Международной конференции (26 – 30 октября 2020 года, Черногоровка) / под ред. Б.Б. Страумала. – Черногоровка, 210 с. – ISBN.

ISBN 978-5-6040418-0-2



9 785604 041802

© Российская Академия наук, 2020
© Страумал Б.Б. (редактор), 2020

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВОВ СИСТЕМЫ Al–Co–Cr–Fe–Ni НА ОСНОВЕ РАСЧЕТА ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

Осинцев К.А.^{1,2}, Коновалов С.В.^{1,2}, Громов В.Е.¹, Панченко И.А.¹

¹Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк, Россия

²Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, г. Самара, Россия, kirilloss@yandex.ru

В настоящее время высокоэнтропийные сплавы вызывают высокий научный интерес, в связи с их уникальной микроструктурой, композиционным составом и механическими свойствами. В отличие от традиционных сплавов, которые содержат один или два основных элемента, высокоэнтропийные сплавы образуются из не менее пяти основных элементов, находящихся в эквимольном или в близком к эквимольному соотношении. Такое соотношение элементов в материале приводит к высокой энтропии системы, что обеспечивает получение сплава, обладающего уникальными свойствами, которые не могут быть достигнуты с помощью традиционных способов микролегирования.

Несмотря на большое количество исследований, направленных на изучение сплава системы Al–Co–Cr–Fe–Ni в литературе нет обобщенных данных по влиянию каждого из компонентов данной системы на микроструктуру и свойства получаемого материала. Обобщение известных сведений и моделирование недостающих данных с помощью анализа феноменологических критериев, позволяет сформировать более полное представление об оптимальном содержании каждого из компонентов в сплаве.

В настоящей работе был проведен расчет феноменологических параметров, которые позволяют определить, какой фазовый состав будет иметь высокоэнтропийный сплав. Молярное соотношение каждого из элементов варьировалось от $x = 0$ до 4 с шагом 0,05, что позволило получить расширенную информацию о влиянии каждого элемента на различные феноменологические параметры и формирование соответствующего фазового состава. Рассчитаны и соотнесены с известными граничными условиями образования тех или иных фаз (правила Юм-Розери) следующие параметры: конфигурационная энтропия смешения, ΔS_{mix} , энтальпия смешения ΔH_{mix} , термодинамический параметр, Ω , разница в атомных радиусах, δr , концентрация валентных электронов, VEC, электроотрицательность по Полингу, $\Delta \chi_{Pauling}$ и Аллену, $\Delta \chi_{Allen}$.

Было установлено, что формирование твердого раствора с ОЦК кристаллической решеткой прогнозируется в сплавах $Al_{1,45-4}CoCrFeNi$, в $AlCo_{0-0,2}CrFeNi$, и в $AlCoCrFeNi_{3,0-4,0}$. Сплавы, в которых стабилен ГЦК твердый раствор: $Al_xCoCrFeNi$ при $x = 0-0,15$ и $AlCoCrFeNi_x$ при $x = 0-0,45$. Во многих сплавах вероятно образование ОЦК+ГЦК кристаллической решетки: $Al_xCoCrFeNi$ при $x = 0,2-1,4$, $AlCo_xCrFeNi$ при $x = 0,2-4,0$, $AlCoCrFe_xNi$, в при $x = 0-4,0$, в $AlCoCrFeNi_x$ при $0,45 < x < 3,0$. Образование фаз Лавеса и ТПУ-фазы по результатам расчета феноменологических параметров не обнаружено в системе Al–Co–Cr–Fe–Ni при различном молярном соотношении элементов.

Таким образом, расчет значений феноменологических параметров для высокоэнтропийных сплавов системы Al–Co–Cr–Fe–Ni увеличил возможный диапазон получения твердых растворов на основе ОЦК и ГЦК кристаллических решеток. Дальнейшее направление исследования может быть связано с уточнением граничных условий образования тех или иных фаз в соответствии с практическими испытаниями.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 20-19-00452).