

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ВЭС С ПОМОЩЬЮ МОДЕЛЕЙ НА РЕШЕТКЕ

Мешков Е.А., Новоселов И.И., Янилкин А.В.*

ВНИИА, Москва, Россия

**novoselov@vniia.ru*

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) являются новым классом перспективных металлических материалов, они содержат 4 и более основных компонентов в примерно равных концентрациях. На сегодняшний день уже получены ВЭС, превосходящие традиционные сплавы по различным характеристикам: жаропрочности, устойчивости к коррозии, радиационной стойкости.

Однако атомно-масштабное моделирование ВЭС затруднено из-за сложного химического состава этих материалов. Так, квантовая молекулярная динамика (МД) не позволяет достичь необходимых пространственно-временных масштабов, а классическая МД не в состоянии обеспечить достаточную точность расчетов. Таким образом, необходимо разработать новый подход, который позволил бы точно и вычислительно эффективно описывать ВЭС на атомном масштабе.

В данной работе исследуется эволюция структуры ВЭС с помощью методов кинетического Монте-Карло. Для расчета энергии системы используется модель на решетке [1], позволяющая воспроизводить результаты квантово-механических расчетов с ошибкой менее 5 мэВ/атом. Использование данного подхода позволило выявить упорядочение FeCoNiCr, заключающееся в образовании супер-решеток Fe и Cr.

Исследование проведено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00736.

1. Shapeev, A. // Computational Materials Science 2017. V. 139. p. 26