

Структура многокомпонентных радиационно-стойких твердых растворов на основе системы Ti-Zr-Nb-Hf: эксперимент и моделирование

П 25

В.В. Углов^{1,2}, С.В. Злоцкий¹, И.В. Сафронов¹, Н.А. Степанюк¹, Д.В. Есипенко¹

1. Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
2. НИЯУ МИФИ, Москва, Россия



ВВЕДЕНИЕ

Начиная с 2000-ых годов многокомпонентные сплавы, они же сплавы с несколькими основными элементами или концентрированные сплавы твердых растворов являются объектом повышенного внимания у исследователей и учёных. Концентрированные сплавы твердых растворов определяются как сплавы, которые содержат от 2 и более основных элементов в равных или почти равных атомных концентрациях. При определенных комбинациях элементов в этих сплавах возможно получение высоких показателей сопротивления ползучести, термической стойкости, коррозионной стойкости, радиационной стойкости и др. [1-3]. Многие свойства данных сплавов связывают с 4-мя основными эффектами: высокой энтропией смешивания (термодинамика), значительным локальным искажением решетки (структура), многоэлементностью состава (синергия) и замедленной диффузией (кинетика) [2-4]. Целью данной работы являлось установление связи между локальной структурой и искажением решетки в сплавах на основе Ti-Zr-Nb-Hf.

МЕТОДИКА

Эволюционное моделирование (машинное обучение) с помощью Universal Structure Predictor: Evolutionary Xtallography (USPEX) кода [5-7] + ab initio структурная оптимизация с переменной супер-ячейкой с помощью Quantum Espresso пакета [8, 9].

Эволюционное моделирование:

- кубическая супер-ячейка размером 3×3×3 трансляций не примитивных ячеек (54 атома);

- применение одного вариационного оператора – оператора перестановок;

- размер популяции – 24 структуры;

- критерий остановки – 54 поколения;

- 3-х ступенчатая оптимизация.

Структурная оптимизация:

- GGA приближение для обменно-корреляционного потенциала;

- PAW псевдопотенциал;

- энергия обрезания плоских волн 55 Ry;

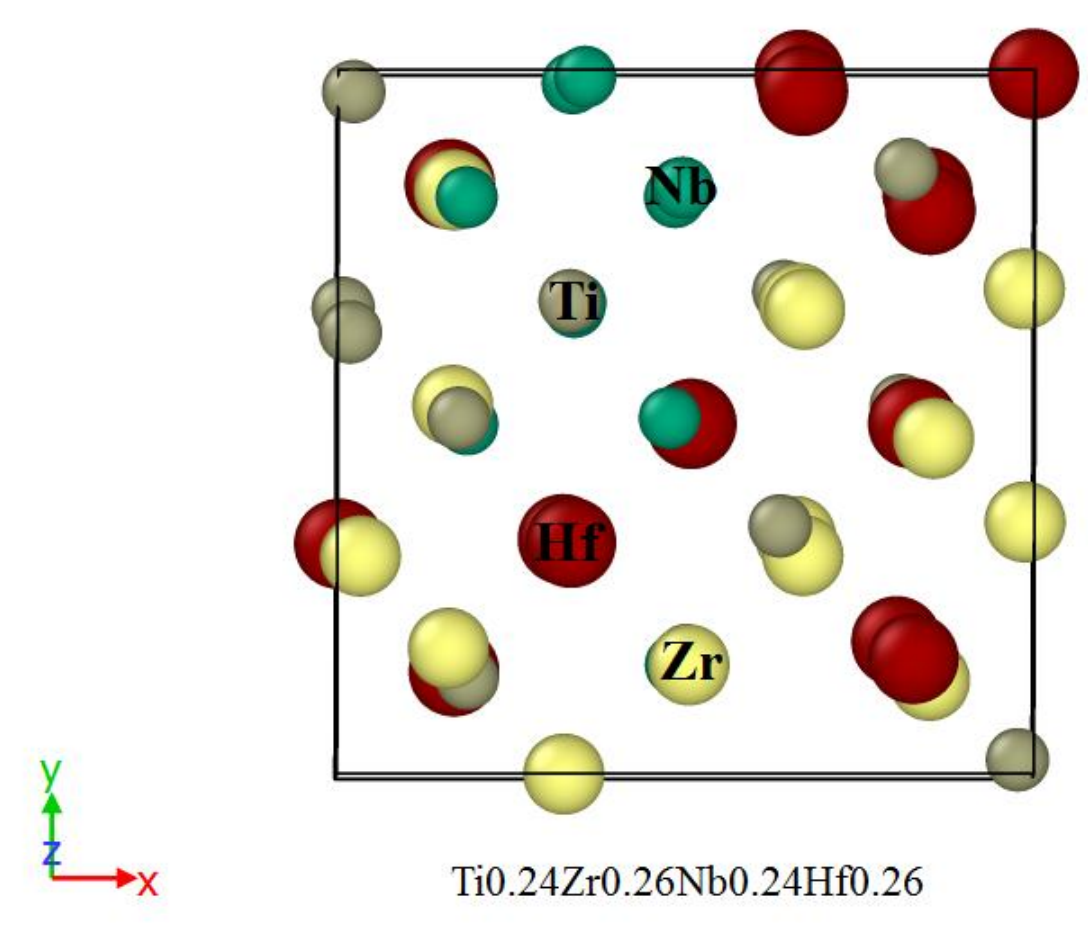
- расчет по G-точке.

Сравнение структур, смоделированных на основе эволюционного и обобщенной квазислучайной структуры (GQS) методов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

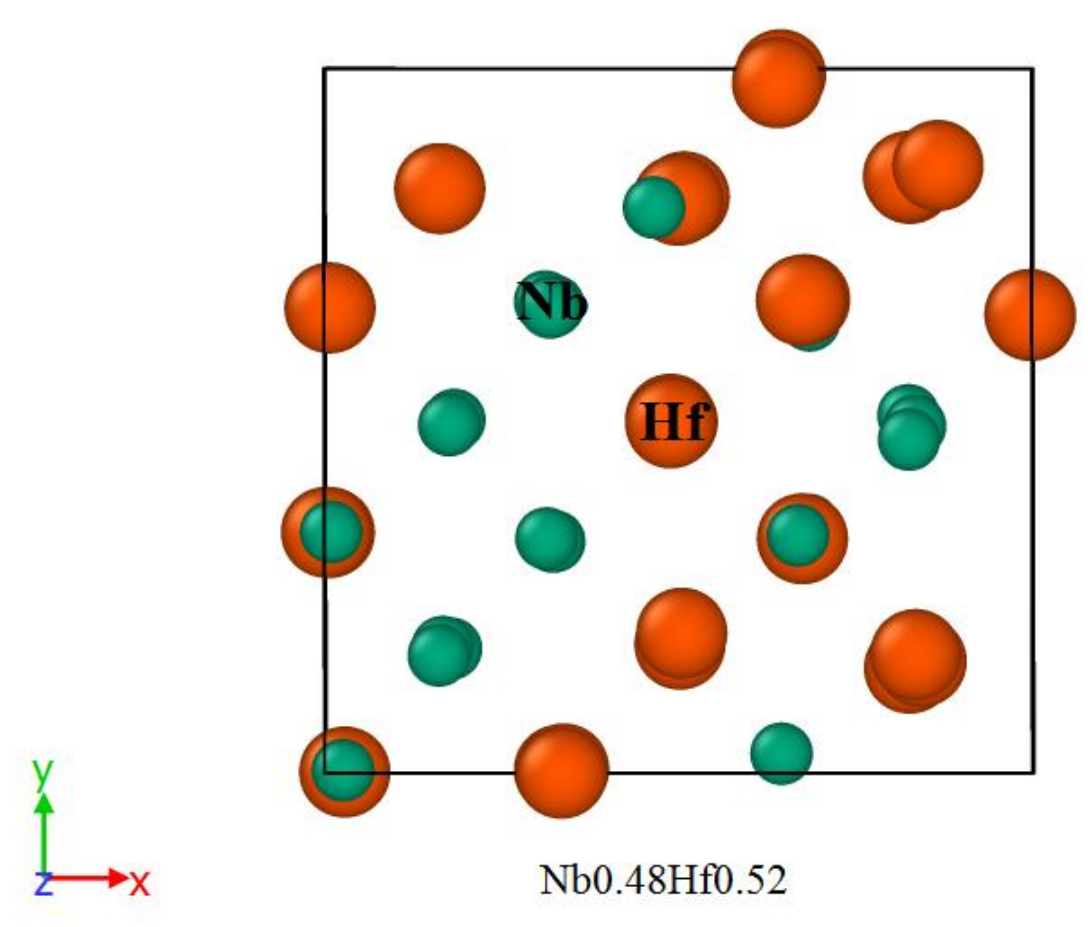
1. Структура (эволюционный метод)

a, b, c = (3.4267, 3.4627, 3.4483) Å; α, β, γ = (89.55, 89.84, 89.86)°



Ti_{0.24}Zr_{0.26}Nb_{0.24}Hf_{0.26}

a, b, c = (3.4580, 3.4440, 3.4323) Å; α, β, γ = (90.09, 90.06, 90.10)°



Nb_{0.48}Hf_{0.52}

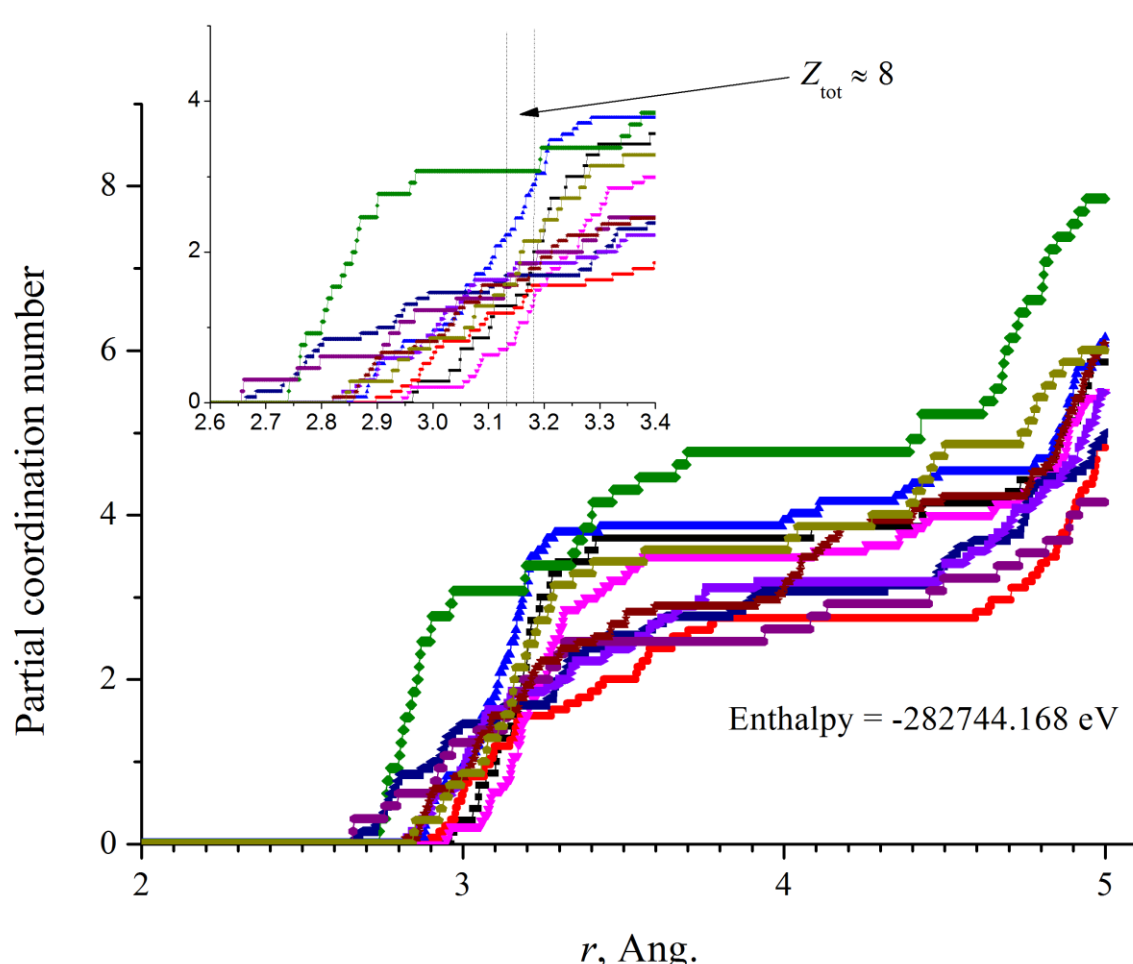
• Среднее значение параметра решетки a_0 для TiZrNbHf сплава 3,4458 Å (экс. значение 3,4365 Å). a_0 для NbHf сплава 3,4448 Å.

• Визуально наблюдается значительное искажение (дисторсия) ОЦК решетки в обоих сплавах.

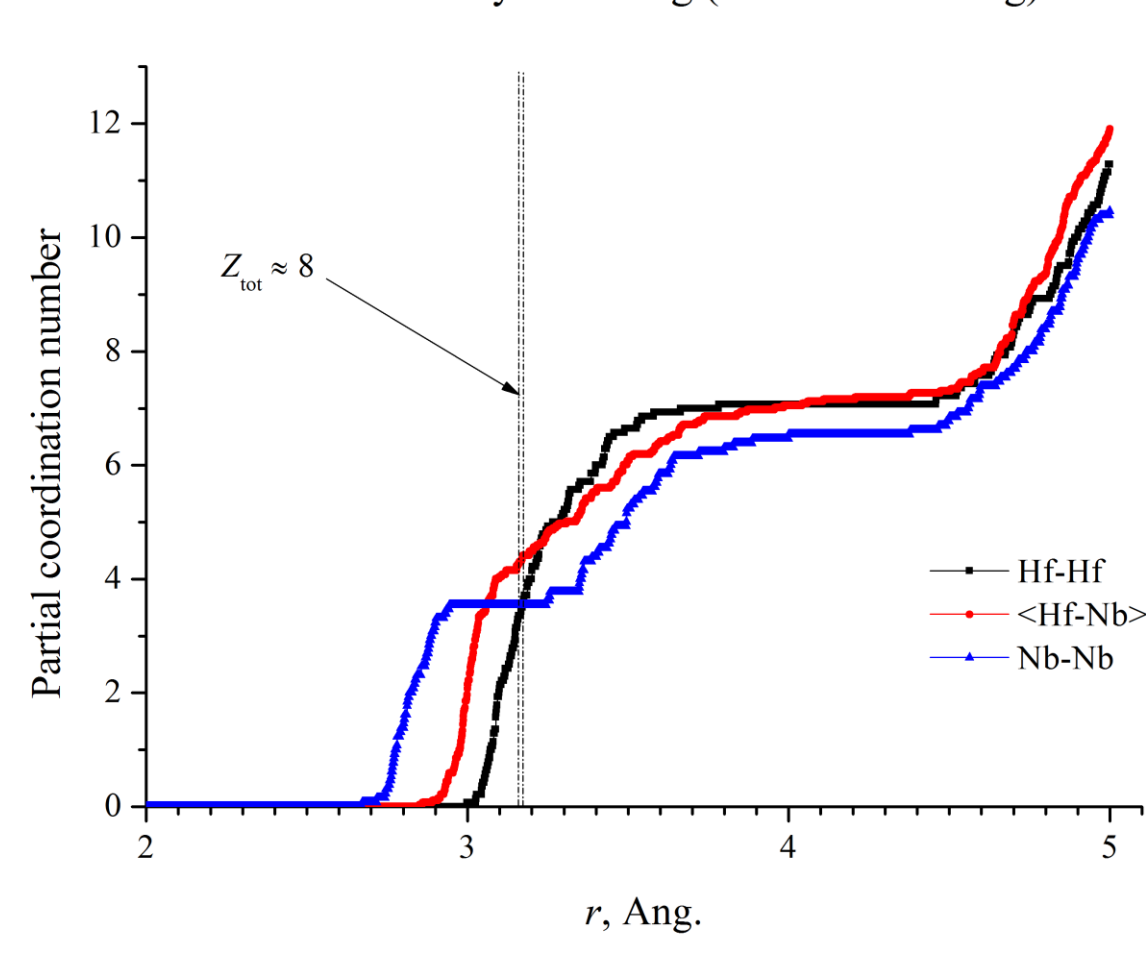
2. Анализ парциальных координационных чисел (эволюционный метод и метод обобщенной квазислучайной структуры)

Вычисление радиальных функций распределения и парциальных координационных чисел проведено с помощью скрипта для программы LAMMPS [10].

Evolutionary modeling (machine learning)

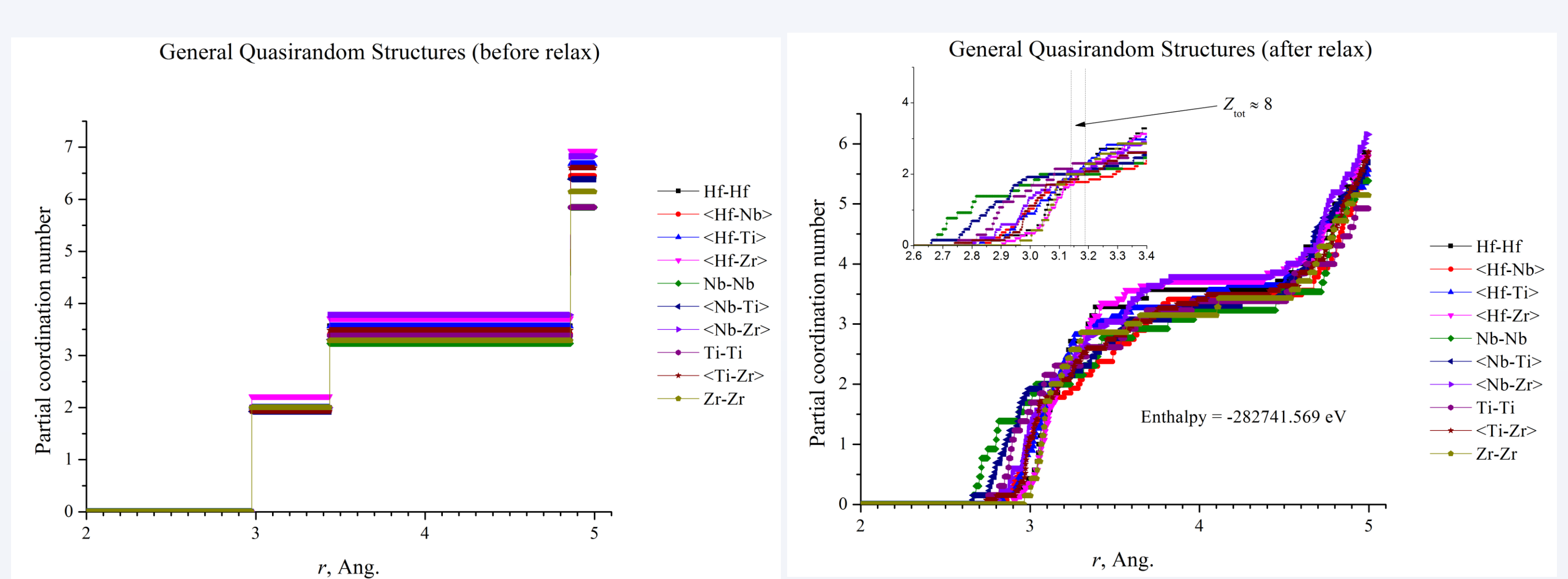


Evolutionary modeling (machine learning)



• Структура обоих сплавов не представляет собой неупорядоченный твердый раствор. Обнаружен ближний порядок (локальное химическое упорядочение) не только в бинарном NbHf сплаве, но и в тетраарном TiZrNbHf сплаве.

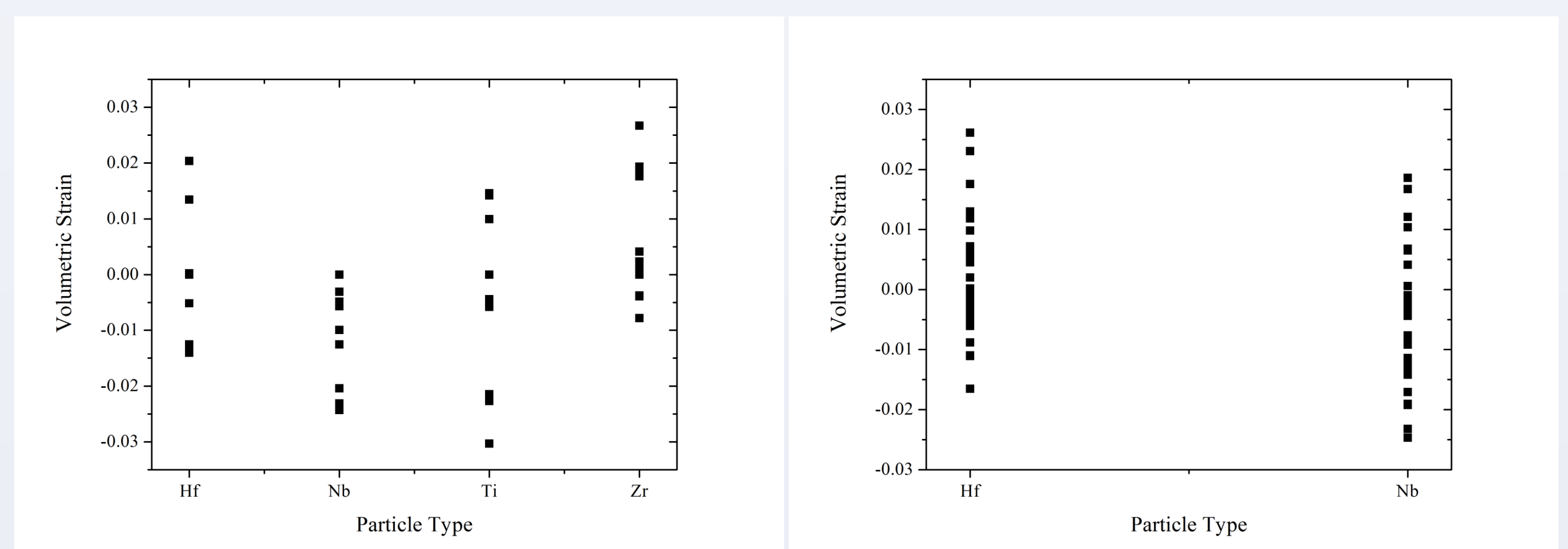
• Эффект ближнего порядка приводит к тому, что в TiZrNbHf сплаве атомы Hf предпочитают окружать себя атомами Ti, атомы Nb – Nb, атомы Zr – Zr, а в NbHf сплаве атомы Nb – Hf.



- Энтальпия TiZrNbHf сплава, смоделированного по эволюционному методу (машинное обучение) ниже, чем по методу обобщенной квазислучайной структуры.
- Эффект ближнего порядка не проявляется в TiZrNbHf сплаве, смоделированном методом обобщенной квазислучайной структуры. В данной случае есть только эффект искажения кристаллической решетки после релаксации структуры.

3. Искажение решетки (эволюционный метод)

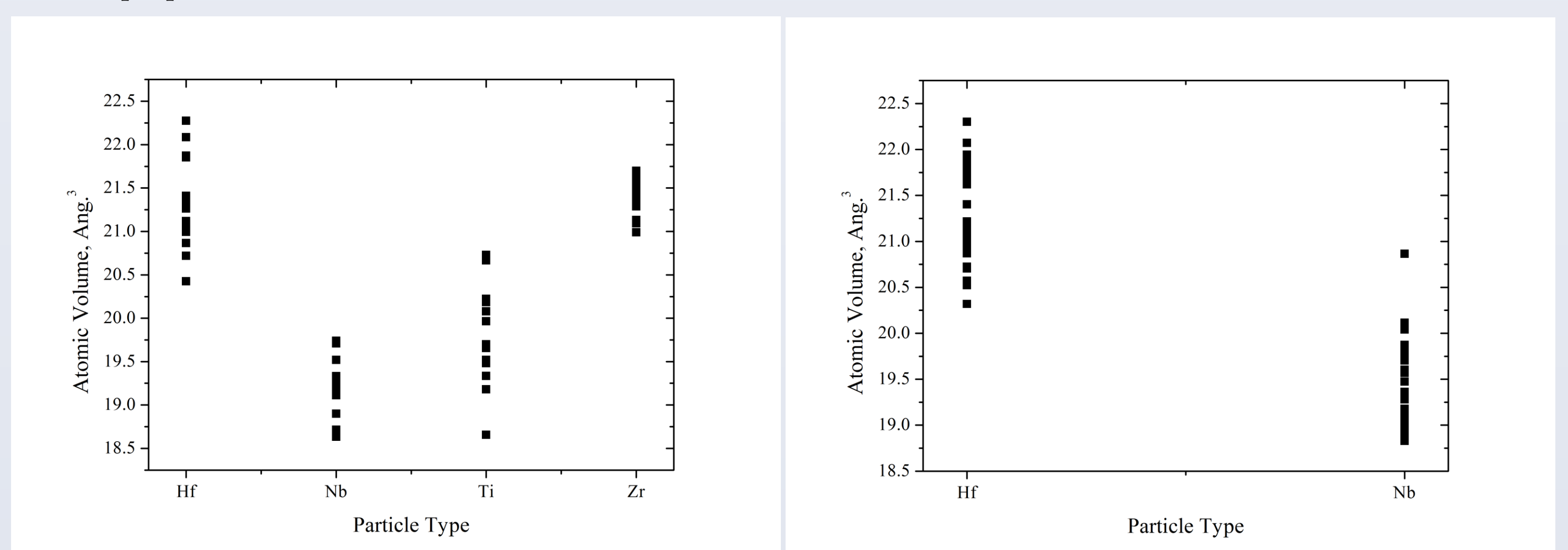
Анализ проделан на основании вычислений объемной упругой деформации решетки на атомарном уровне с помощью программы Ovito [11]. Локальная деформация вычислялась путем сравнения текущих положений атомов с эталонной структурой (идеальной, без деформации кристаллической структурой с заданным параметром решетки).



- По абсолютному значению объемная деформация может достигать ~3% в обоих сплавах.
- Усложнение композиционного состава (NbHf→TiZrNbHf) почти не меняет уровень деформаций.

3. Распределение атомных объемов (эволюционный метод)

Анализ проделан на основании вычислений объемов Вороного с помощью программы Ovito [11].



- В TiZrNbHf сплаве наименьшие объемы характерны для атомов Nb и Ti, что означает более быструю диффузию этих атомов.
- В NbHf сплаве наблюдается расширение распределения атомных объемов для Nb.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

• В NbHf и TiZrNbHf сплавах обнаружен ближний порядок, что повлияет на энергетические характеристики дефектов (изменение энергетического ландшафта в виде множества барьеров, появление локальных ловушек, анизотропных диффузионных каналов).

• Локальная деформация в обоих сплавах может достигать ~3%, что значительно повлияет на диффузию в них. Выявлено, что усложнение композиционного состава (NbHf→TiZrNbHf) почти не меняет уровень локальных деформаций.

БЛАГОДАРНОСТЬ

При проведении работ были использованы ресурсы высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J.W. Yeh, Y.L. Chen, S.J. Lin, S.K. Chen. Mater. Sci. Forum 560 (2007) 1-9
2. Y. Zhang, T. T. Zuo, Z. Tang et al. Progress in Materials Science 61 (2014) 1-93.
3. D.B. Miracle, O.N. Senkov. Acta Materialia 122 (2017) 448-511.
4. J.W. Yeh. Chim Sci Mater 31 (2006) 633-48.
5. A.R. Oganov and C.W. Glass. The Journal of Chemical Physics, 124:244704, 2006.
6. A.O. Lyakhov, A.R. Oganov, H.T. Stokes, and Q. Zhu. Comp. Phys. Comm., 184:1172-1182, 2013.
7. A.R. Oganov, A.O. Lyakhov, and M. Valle. Accounts of Chemical Research, 44(3):227-237, 2011.
8. P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra et al. J.Phys.: Condens.Matter 21, 395502 (2009)
9. P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, O. Bunau et al. J.Phys.: Condens.Matter 29, 465901 (2017)
10. Plimpton, S. J. Comput. Phys. - 1995. - Vol. 117, № 1. - P. 1-19.
11. Stukowski, A. Model. Simul. Mater. Sci. Eng. - 2009. - Vol. 18, № 1. - P. 015012-7.