

# СВОЙСТВА ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ И РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ CoCrFeNi И HfNbTiZr СПЛАВОВ

П 5

И.В. Сафронов<sup>1</sup>, В.В. Углов<sup>1,2</sup>, С.В. Злоцкий<sup>1</sup>, Н.А. Степанюк<sup>1</sup>, Д.В. Есипенко<sup>1</sup>

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



51MTK

## ВВЕДЕНИЕ

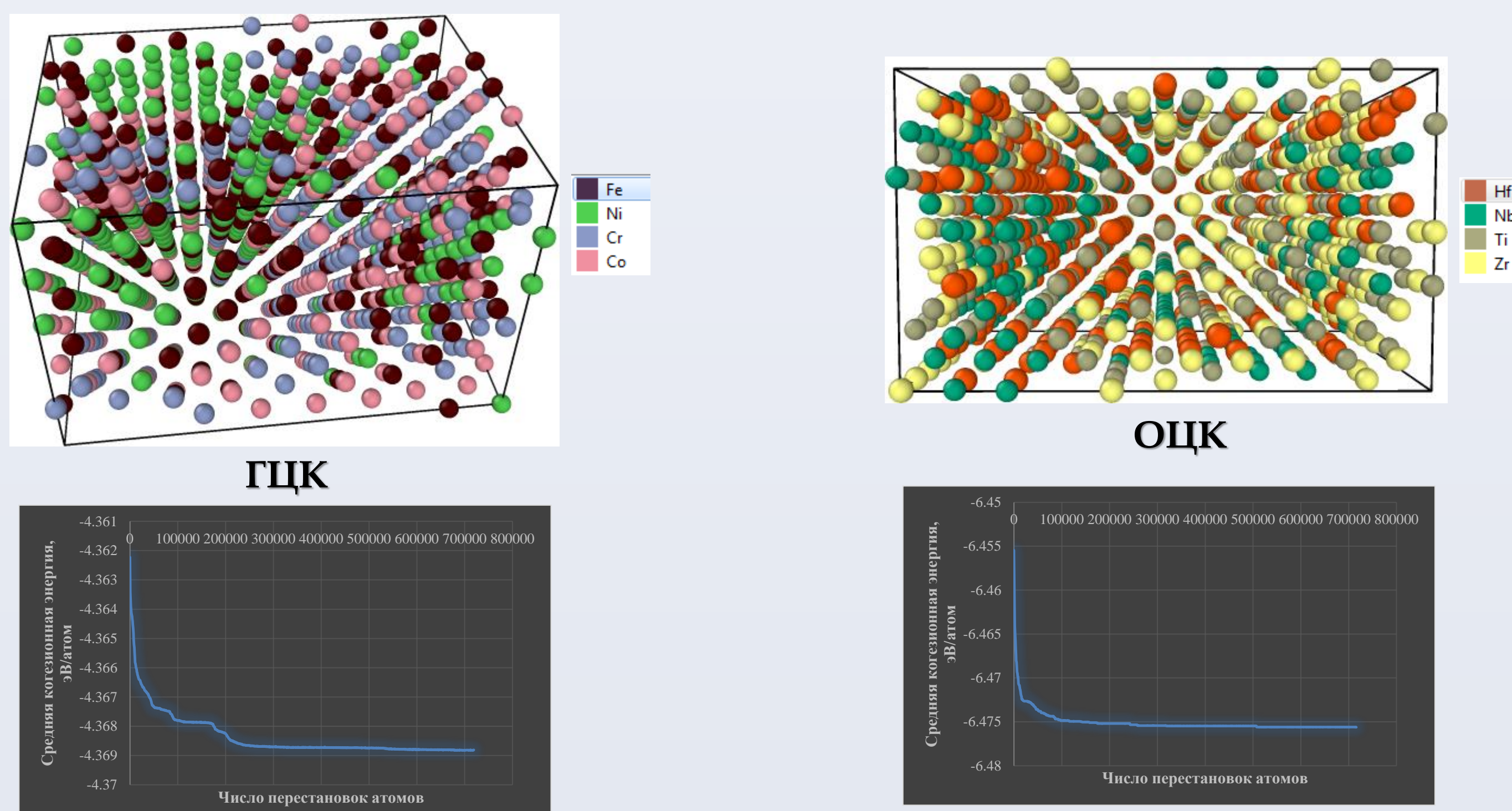
Сегодня однофазные сплавы на основе нескольких основных элементов или концентрированные твердые растворы привлекают все большее внимание благодаря уникальным комбинациям их различных свойств. При определенных комбинациях элементов в этих сплавах возможно достижение высоких показателей сопротивления ползучести, термической стойкости, коррозионной стойкости, радиационной стойкости и др. [1-3]. В отличие от традиционных сплавов в концентрированных твердых растворах элементы содержатся в равных (многокомпонентные эквивалентные сплавы) или почти равных атомных концентрациях [1, 4]. 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) [2-5]. Целью данной работы являлось исследование энергии образования точечных дефектов в CoCrFeNi и HfNbTiZr сплавах.

## МЕТОДИКА

Используемые потенциалы межатомного взаимодействия: EAM и MEAM для CoCrFeNi и HfNbTiZr сплавов, соответственно. Монте-Карло-Молекулярно-Динамическое моделирование (MC-MD) исходных структур выполнялось с помощью пакета LAMMPS при 1 К. Расчеты энергии образования точечных дефектов в однофазных CoCrFeNi (ГЦК) и HfNbTiZr (ОЦК) сплавах проведены по стандартной формуле (без учета температурного эффекта), учитывающей потенциальные энергии исходных структур и структур с дефектом, а также химические потенциалы. Для вычисления химических потенциалов использовалась методика, изложенная в работе [6]. Структурная оптимизация с переменной супер-ячейкой выполнена методом молекулярной статистики, реализованном в пакете LAMMPS.

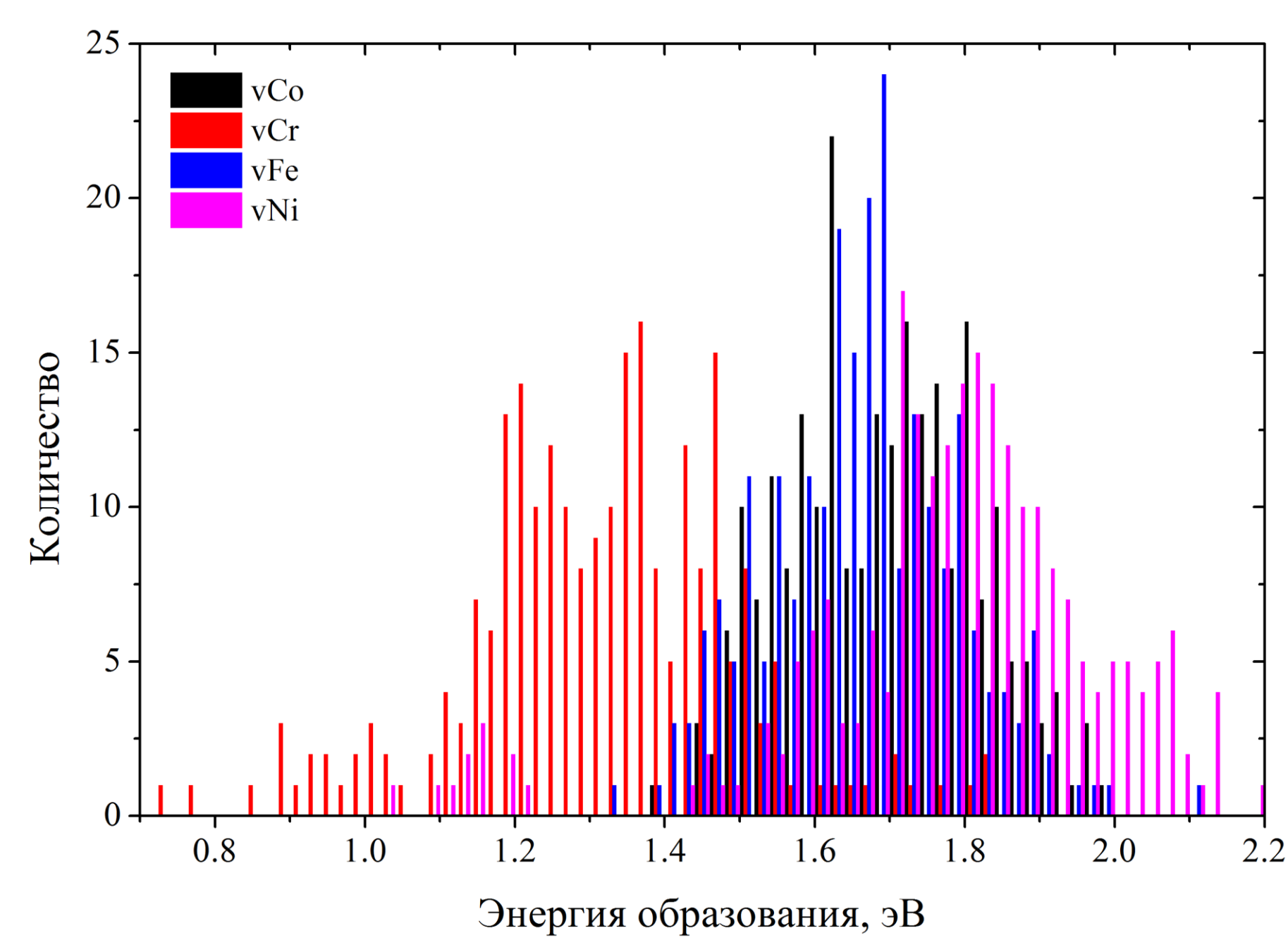
## РЕЗУЛЬТАТЫ

### Структура после MC-MD моделирования



Получение равновесных структур вследствие снижения средней когезионной энергии в сплавах.

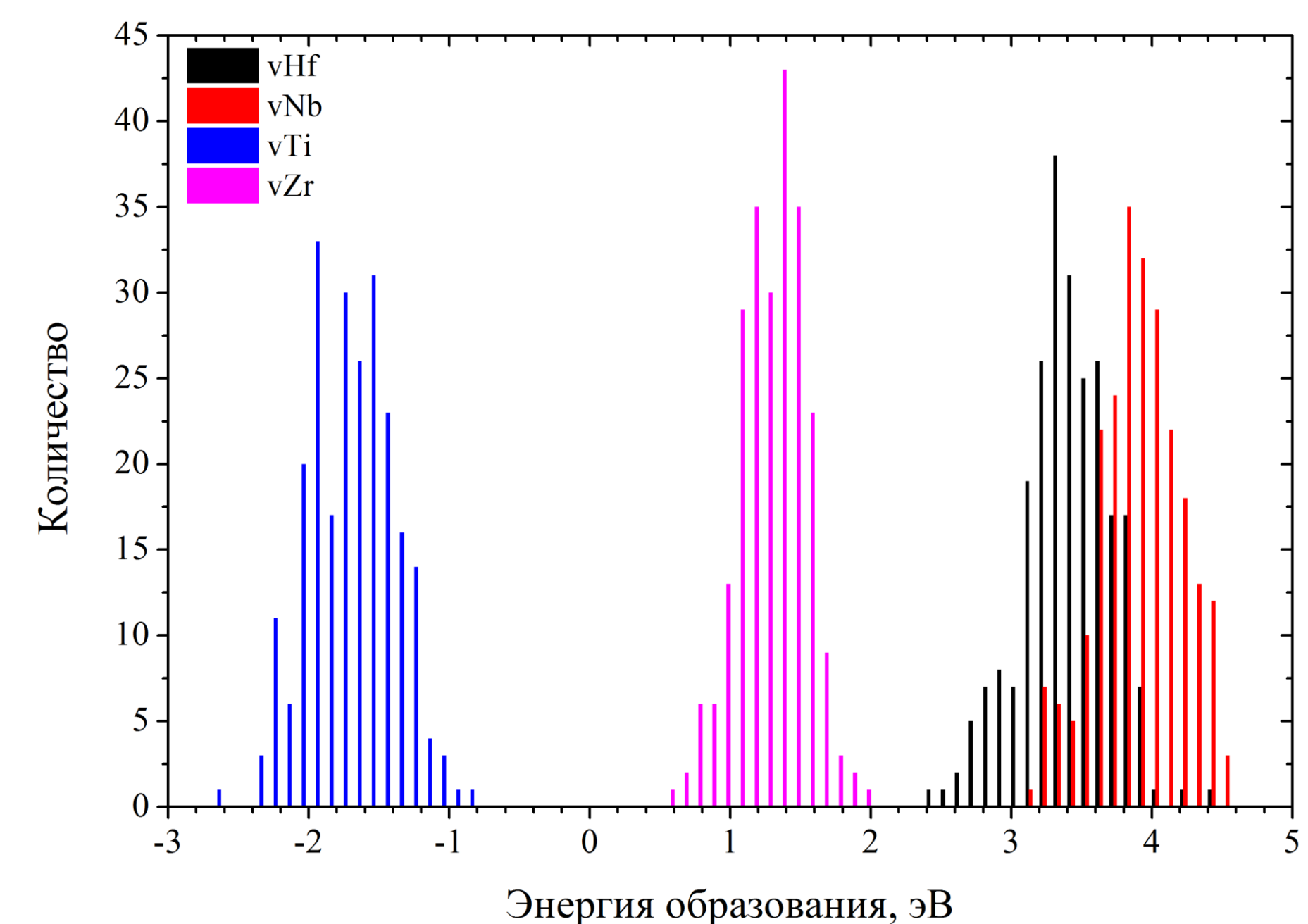
### Вычисление энергии образования точечных дефектов



## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

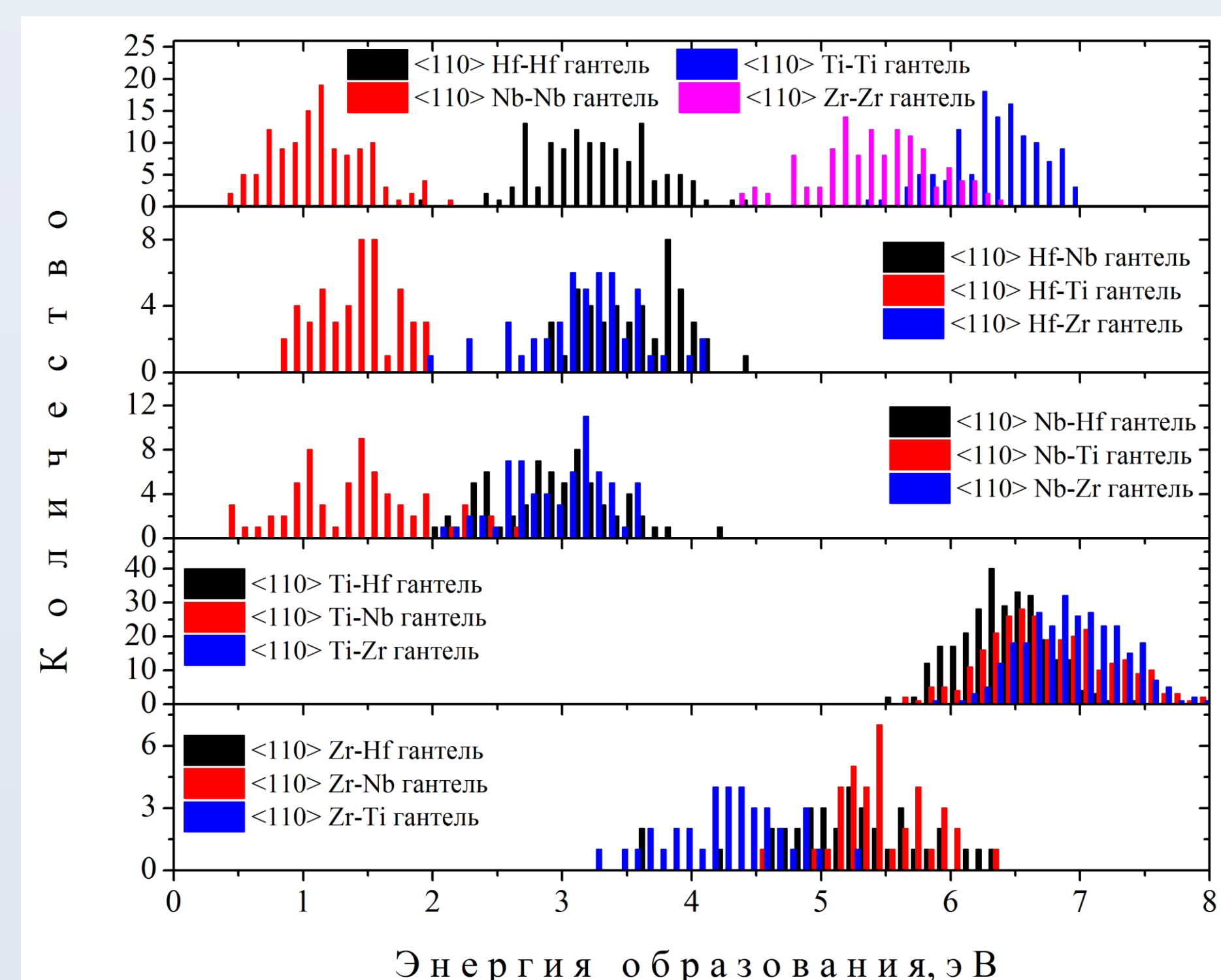
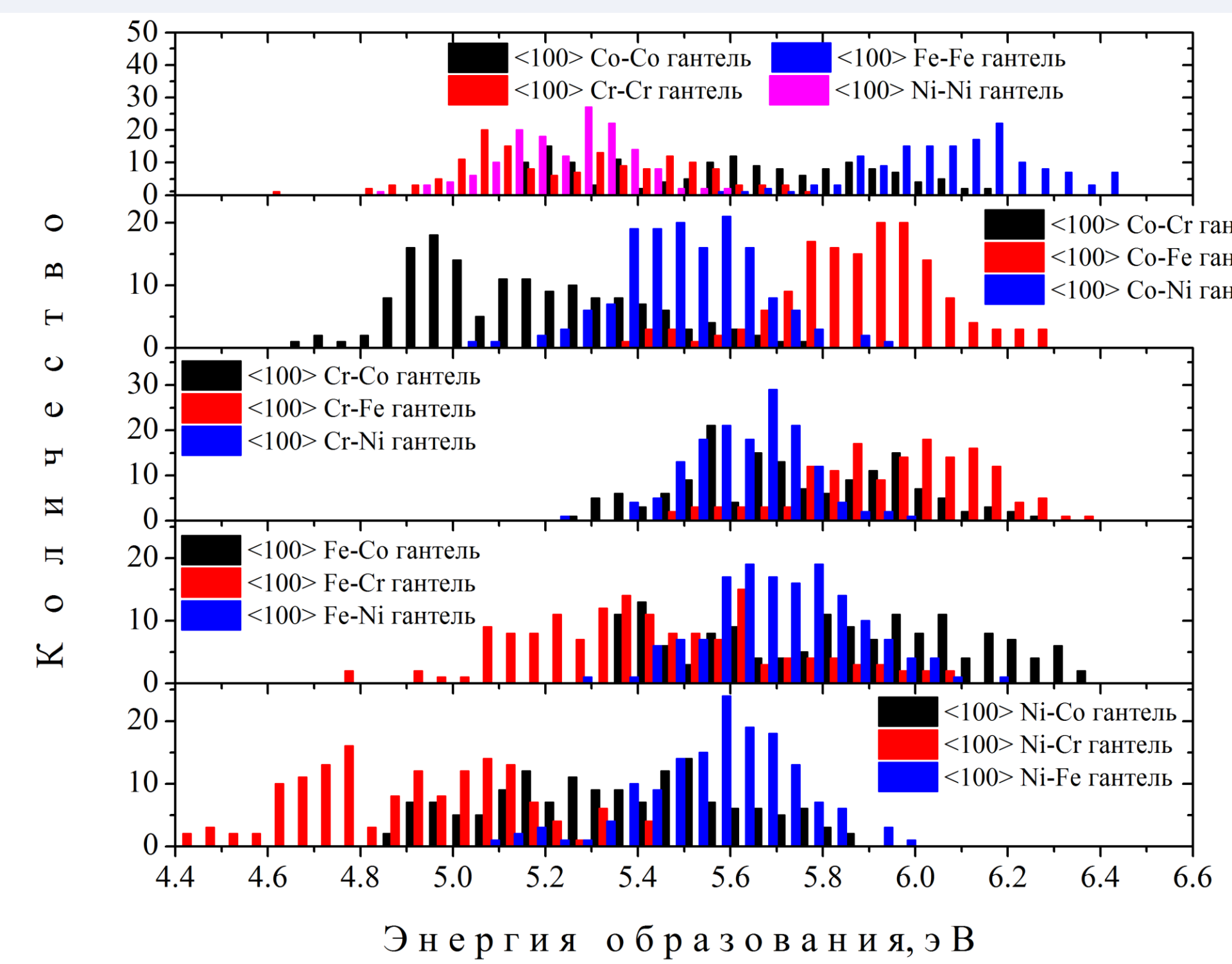
1. J.W. Yeh, Y.L. Chen, S.J. Lin, S.K. Chen. Mater. Sci. Forum 560 (2007) 1-9
2. Y. Zhang, T. T. Zuo, Z. Tang et al. Progress in Materials Science 61 (2014) 1-93.
3. D.B. Miracle, O.N. Senkov. Acta Materialia 122 (2017) 448-511.
4. J.W. Yeh. Chim Sci Mater 31 (2006) 633-48.
5. Cantor B., Chang I.T.H., Knight P. et al. Mater. Sci. Eng. A. 375 (2004) 213-218.
6. S. Zhao, G.M. Stocks, Y. Zhang. Phys. Chem. Chem. Phys. 18 (2016) 24043-24056.

В  
а  
к  
а  
н  
с  
и  
и



- Распределения энергии образования вакансий для HfNbTiZr сплава охватывают существенно больший диапазон энергий, чем для CoCrFeNi сплава: (-2,6; 4,6) против (0,74; 2,2) эВ.
- Для HfNbTiZr сплава характерны отрицательные значения энергии образования вакансий Ti.

М  
е  
ж  
д  
у  
з  
е  
л  
ь  
н  
ы  
е  
а  
т  
о  
м  
ы



- Аналогично, распределения энергии образования междуузельных атомов для HfNbTiZr сплава охватывают существенно больший диапазон энергий, чем для CoCrFeNi сплава: (0,08; 8,1) против (4,2; 6,5) эВ для междуузельных атомов в наиболее стабильных гантельных конфигурациях.
- Наименьшие значения данной величины свойственны <110> Nb-Nb и Nb-Ti гантельным парам в HfNbTiZr сплаве, а в CoCrFeNi сплаве для <100> Co-Cr и Ni-Cr гантельных пар.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- HfNbTiZr сплав может быть подвержен большему радиационному набуханию, чем CoCrFeNi сплав вследствие возникновения термодинамической движущей силы в системе, направленной на уменьшение ее свободной энергии через повышение концентрации вакансий Ti.
- Для обоих сплавов предполагается наличие предпочтительных диффузионных путей, что связано с преимущественным образованием гантельных пар с меньшей энергией (<110> Nb-Nb и Nb-Ti для HfNbTiZr сплава и <100> Co-Cr и Ni-Cr для CoCrFeNi сплава).

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена в рамках проекта БРФФИ № Т20ПТИ-009 (ВИТВЛР2020019). При проведении работ были использованы ресурсы высокопроизводительного вычислительного кластера НИ ТПУ.