ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии»

6–10 сентября 2021 г.
Томск, Россия

Томск – 2021
Издательство ТГУ

DOI: 10.17223/978-5-907442-03-0-2021-107

ФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ, СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА AlCoFeCrNi НЕЭКВИАТОМНОГО СОСТАВА

[1]Иванов Ю.Ф., [2]Абзаев Ю.А., [3]Громов В.Е., [4]Коновалов С.В., [2]Клопотов А.А.

[1]Институт сильноточной электроники СО РАН, Томск

[2]Томский государственный архитектурно-строительный университет, Томск

[3]Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк

[4]Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, Самара

В высокоэнтропийных сплавах AlCoFeCrNi, вследствие высокой энтропии, низкой атомной диффузии, искажений решеток формируются структуры на основе простых кубических решеток (ГЦК, ОЦК). Представляет определенный интерес исследование количественного содержания фаз структурное состояние, стабильность, термодинамические, механические характеристики обнаруженных фаз в сплаве $Al_{34}Co_5Fe_{16}Cr_8Ni_{37}$, выявленные первопринципными методами. Детальное исследование возможного распада сплава $Al_{34}Co_5Fe_{16}Cr_8Ni_{37}$ в базах данных AFLOW, Material Project [1] показало, что наиболее вероятный распад может быть описан следующей реакцией: $Al_{34}Co_5Fe_{16}Cr_8Ni_{37} \rightarrow 2.75Al_3Ni_5+2.5AlFeCo_2+23.25AlNi+13.5Fe+8Cr$, которое реализуется для закрытых систем. В открытых и экстремальных условиях приготовления сплава содержание фаз может отличаться. Первопринципные расчеты показали также, что к стабильному соединению может быть отнесен сплав Cr_4Fe_5. Было установлено, что энергия Cr_4Fe_5, приходящая на атом, равна -3761.22 эВ, а энергия чистых элементов Fe, Cr равна – 9.52, – 10.63 эВ на атом соответственно. Обнаруженный список сплавов Al_3Ni_5, $AlFeCo_2$, Cr_4Fe_5 был использован для определения количественного содержания фаз в высокоэнтропийном сплаве $Al_{34}Co_5Fe_{16}Cr_8Ni_{37}$. Содержание фаз определяли методом Ритвельда; было использовано максимально возможное число уточняемых профильных, инструментальных параметров. Экспериментальная дифрактограмма $Al_{34}Co_5Fe_{16}Cr_8Ni_{37}$ была получена на дифрактометре Шимадзу, в угловом диапазоне 20 – 110 градусов, с шагом 0.03 и экспозицией в точке 0,5 сек., при напряжении 40 кВ. Результаты фазового анализа приведены на рис. 1.

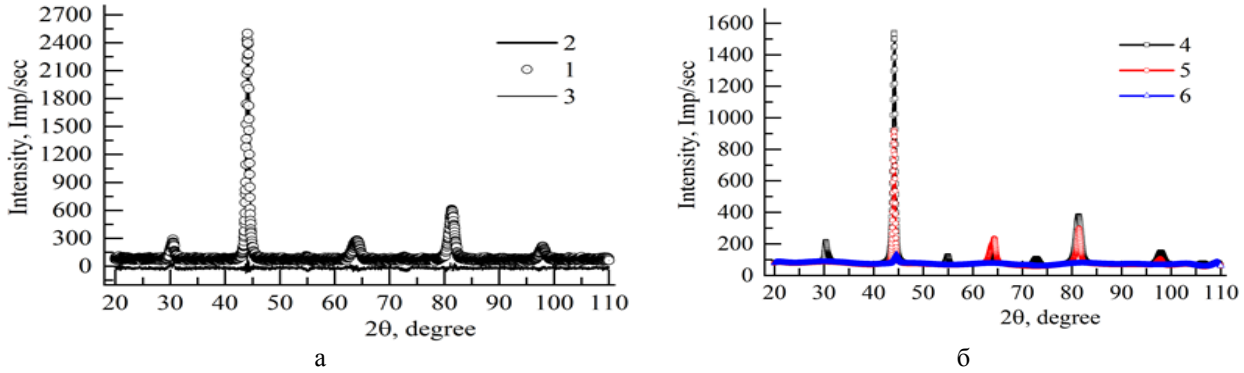

Рис. 1. Дифрактограмма сплава $Al_{34}Co_5Fe_{16}Cr_8Ni_{37}$ (а) 1 – эксперимент, 2 – интегральная расчетная интенсивность, 3 – разность интенсивностей; (б) дифрактограммы отдельных фаз: 4– AlNi, 5 – Cr_4Fe_5, 6 – $AlFeCo_2$

С высокой степенью сходимости было установлено, что сплавы AlNi, Cr_4Fe_5, $AlFeCo_2$ составляют долю 0.62; 30.2 и 3.65 в интегральной интенсивности, соответственно. Разность между экспериментальной и интегральной интенсивностями (рис. 1а, кривая 3) незначительна. Для обнаруженных фаз известна полная структурная информация после уточнения по методике Ритвельда, что позволяет провести оценки механических и термодинамических характеристик. Установлено, что для сплавов AlNi, $AlFeCo_2$ модуль сдвига равен 60.4, 88.9 ГПа соответственно. Объемный модуль – 161.3; 188.33 ГПа. Модуль Юнга – 161.09; 230.5 ГПа.

1. Электронный доступ: https://materialsproject.org, http://www.aflowlib.org/