

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПОДСИСТЕМЫ ДЕФЕКТОВ В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОМ АМОРФНОМ СПЛАВЕ FeNiCrCoCu

¹Кончаков Р.А., ¹Макаров А.С., ^{1,2}Аронин А.С., ²Кобелев Н.П., ¹Хоник В.А.

¹Воронежский государственный педагогический университет, Воронеж, Россия

²Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

konchakov.roman@gmail.com

Методом классической молекулярной динамики выделена подсистема дефектов в высокоэнтропийном аморфном сплаве (ВЭАС) FeNiCrCoCu. Модельные расчеты выполнены в пакете LAMMPS [1] с межатомным EAM потенциалом [2]. Было использовано представление о дефектах в стекле как об упругих диполях. Методика выделения дефектной подсистемы основана на сопоставлении каждому m -му атому стекла дипольного тензора $P_{ij}^m = V_0 (\sigma_{ij}^{initial} - \sigma_{ij}^m)$, где V_0 – объем системы, $\sigma_{ij}^{initial}$ – тензор напряжений в исходной системе, σ_{ij}^m – тензор напряжений после удаления из системы m -го атома. Более детально методика моделирования описана в работе [3].

На рис.1 показаны гистограммы распределения максимальных значений девиаторных и шаровых компонент тензора P_{ij}^m . Распределение для сферических компонент близко к нормальному, а девиаторных – к логнормальному. Мы предположили, что атомы с большими девиаторными компонентами дипольных тензоров упругих диполей формируют дефектную подсистему стекла. Для проверки этой гипотезы мы вычислили в гармоническом приближении спектры колебательной плотности состояний $g(\nu)$ для всей модельной системы и для дефектной подсистемы (см. рис.2).

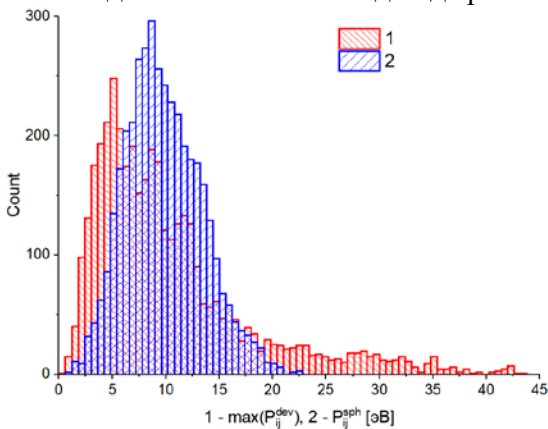


Рис. 1. Распределение максимальных девиаторных (1) и сферических (2) компонент дипольных тензоров P_{ij}^m в ВЭАС FeNiCrCoCu.

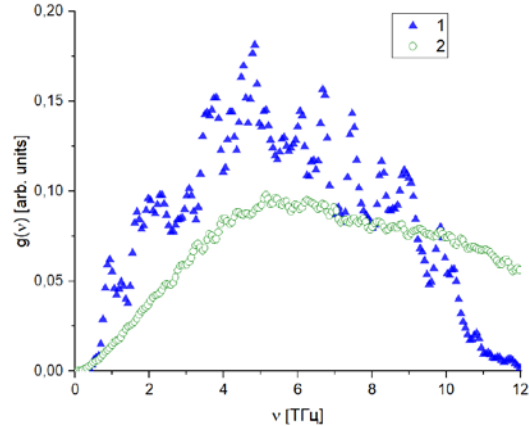


Рис. 2. Спектры колебательной плотности состояний ВЭАС FeNiCrCoCu для подсистемы дефектов (1) и для всей системы (2).

Кривая $g(\nu)$ для атомов с большими значениями девиаторных компонент дипольных тензоров, имеет выраженные пики в области низких частот. Это может служить подтверждением нашей гипотезы, так как именно низкочастотные особенности колебательного спектра являются характерным свойством упругих диполей.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда №20-62-46003.

1. J. Plimpton, J. Comput. Phys. 117, 1 (1995).
2. D. Farkas and A. Caro, J. Mater. Res. 33, 3218 (2018).
3. Р.А. Кончаков, А.С. Макаров, А.С. Аронин, Н.П. Кобелев, В.А. Хоник, Письма в ЖЭТФ 115, 308 (2022).