# Аннотация

М.А. КРЕТОВА1, Р.А. КОНЧАКОВ1, Н.П. КОБЕЛЕВ2, В.А. ХОНИК1

1Кафедра общей физики ВГПУ, Ленина 86, Воронеж, 394043, Россия

2Институт физики твердого тела РАН, Академика Осипьяна 2, Черноголовка, 142432, Россия

**ДИА- И ПАРАЭЛАСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТЫ В FeNiCrCoCu**

Методом молекулярной статики изучено влияние межузельных атомов и вакансий в высокоэнтропийном сплаве FeNiCrCoCu на упругие модули. Установлено, что межузельные атомы устойчивы только в виде гантелей, ответственных за значительный диаэластический эффект (снижение упругих модулей с ростом концентрации дефектов). В сравнении с вакансиями межузельные гантели вызывают существенно более быстрое снижение модуля сдвига по мере роста концентрации дефектов. Для упругих модулей C11, C12 и B обнаружен параэластический эффект (рост модулей c увеличением концентрации дефектов).

В последнее десятилетие значительно активизировались исследования высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), т.е. систем, состоящих из пяти или более компонентов. ВЭС обладают рядом привлекательных свойств - высокие твердость и прочность, высокотемпературная стабильность, высокая вязкость разрушения при криогенных температурах, коррозионная стойкость, биосовместимость, радиационная устойчивость и др. Как известно, точечные дефекты могут кардинально влиять на физические свойства материалов. Актуальность данной работы обусловлена тем, что в настоящее время сколько-нибудь значимые данные о точечных дефектах в кристаллических ВЭС практически отсутствуют.

|  |
| --- |
|  |
| Рисунок 1. Зависимость нормированных упругих модулей монокристалла  FeNiCrCoCu от концентрации межузельных гантелей (int) и вакансий (vac). |

Нами было выполнено моделирование ВЭС FeNiCrCoCu в кристаллическом состоянии методом молекулярной статики в пакете LAMMPS [1] с межатомным потенциалом типа EAM (метод погруженного атома) из работы [2]. В модельную ГЦК решетку из 32000 атомов (20х20х20 трансляций элементарной ячейки) в случайном порядке помещались атомы Fe, Ni, Cr, Co, Cu с сохранением эквиатомного соотношения компонентов. Упругие модули вычислялись как отношение изменения механических напряжений к соответствующим малым деформациям модельной системы.

При исследовании зависимости упругих модулей от концентрации дефектов межузельные гантели вводились в случайные узлы решетки, но так, чтобы количество дефектов с ориентациями [001], [010] и [100] было одинаковым. Концентрационные зависимости упругих модулей вычислялись путем усреднения результатов, полученных для пяти разных конфигураций дефектов в модельной системе.

Было установлено, что межузельные атомы образуются только в гантельной конфигурации с ориентацией [001], все другие возможные варианты оказываются неустойчивыми.

На рис.1 представлены зависимости нормированных упругих модулей кристалла FeNiCrCoCu от концентрации межузельных гантелей , и вакансий . Нормировка осуществлялась делением упругих модулей на их значения в бездефектном кристалле. Видно, что характер зависимостей упругих модулей от концентрации дефектов принципиально отличается в разных случаях: наблюдается либо линейное снижение упругих модулей с концентрацией (диаэластический эффект), либо их линейное увеличение (параэластический эффект).

Установлено, что межузельные атомы в гантельной конфигурации ответственны за значительный диаэластический эффект. В сравнении с вакансиями межузельные гантели вызывают существенно более быстрое снижение модуля сдвига по мере роста концентрации дефектов.

Если диаэластический эффект хорошо известен в литературе [3], то, насколько нам известно, показанный на рис. 1 параэластический эффект – рост модулей C11, C12 и объемного модуля B c ростом концентрации дефектов – установлен для высокоэнтропийного сплава FeNiCrCoCu впервые.

**Благодарности**

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №20-62-46003).

**Список литературы**

1 J. Plimpton, J. Comput. Phys. 117, 1 (1995).

2 D. Farkas and A. Caro, J. Mater. Res. 33, 3218 (2018).

3 L.E. Rehn, J. Holder, A.V. Granato, R.R. Coltman, and F.W. Young (Jr.), Phys. Rev. B 10, 349 (1974).