

ВИСОКОЕНТРОПІЙНІ СПЛАВИ

Луцьов І. В.

Доцент кафедри фізики

Національного аерокосмічного університету ім. М. Є. Жуковського «ХАІ»

Багатокомпонентні сплави в промисловості використовуються давно. Але метою створення таких сплавів (в таких сплавах, зазвичай, доля легуючого елемента не перевищувала 5 %) було поліпшення властивостей базового компонента як правило за рахунок модифікації його структури або фіксації метастабільних фаз. Такий підхід розширював функціональні властивості сплавів, інколи значно. Але можливості такого підходу обмежувались базовими властивостями основного компонента.

У 80-х роках минулого сторіччя пошук нових сплавів отримав потужний поштовх. Почалось дослідження високоентропійних сплавів (ВЕС). Високоентропійні сплави – новий клас сплавів, які складаються з не менш п'яти компонентів кількістю від 5 до 35 %. Виявляється що у таких сплавах ентропія змішування має підвищене, порівняно з традиційними сплавами, значення [1].

Класична термодинаміка вважає, що ентропія змішування набуває максимального значення, коли компоненти ВЕС мають однакову атомну концентрацію. Причому, ентропія змішування зростає із збільшенням числа компонентів.

По перше – що таке ентропія? Ентропія – це характеристика фізичної системи, яка описує різноманітність станів цієї системи в даних умовах: чим більше різноманітність станів при даних умовах, тим більше значення ентропії. В природі виконується закон максимуму ентропії. Тобто фізична система еволюціонує в напрямку стану з найбільшою різноманітністю форм. По друге на формування структури сплаву впливає інша термодинамічна характеристика – ентальпія, яка є позитивною, як що утворення стану фізичної системи є екзотермічним процесом і навпаки є негативною, як що процес є ендотермічним. Таким чином зміни ентропії і ентальпії характеризують можливість утворення різних станів в фізичній системі.

І так, якщо взяти систему, яка складається з багатьох компонентів (ВЕС) то ентропія змішування буде максимальною, коли компоненти взяті в однаковій (еквіатомній) пропорції. Високе значення ентропії змішування супроводжується зменшенням вільної енергії системи. Внаслідок сутньо підвищується імовірність реалізації в цих сплавах твердих розчинів заміщення, які мають найпростішу кристалічну ґратку. Так кристалічна

структура багатьох ВЕС-ів сформована однофазними твердими розчинами з найпростішою (найсиметричнішою) кристалічною ґраткою, наприклад ОЦК або ГЦК. Зрозуміло, що кристалічна ґратка багатьох ВЕС-ів, які складаються з елементів з різноманітною електронною будовою й розмірами, значно деформована. Саме тому ВЕС мають багато поліпшених властивостей: поєднання міцності й пластичності, підвищена термостійкість.

Досліди показують, що саме так і відбувається. Але, ця ґратка є базовою, в яку вкраплені кристаліти з іншою структурою. Склад і структура цих кристалітів, макроструктура їх розташування визначається якісним і кількісним складом ВЕС. Таким чином, ми можемо отримати «композиційний матеріал» з точки зору нанопідходу.

Спочатку підвищену цікавість отримали високоентропійні сплави на основі перехідних важкоплавних металів (Ti, V, Cr, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta...). Легкі метали (Ti, V і Cr) використовуються для зменшення густини, а важкоплавні (Nb, Ta и W) відповідають за прочнісні характеристики й термостабільність усього матеріалу. Дослідження характеристик цих сплавів показало високу перспективність їх використання в науці й техніці [2]. Наприклад, для класичного матеріалознавства, відомо, що чим вища твердість матеріалу, тим нижча його пластичність. Створення деяких ВЕС дозволило спростувати цю закономірність [3].

Прогнозування властивостей таких сплавів є складною задачею, яку намагаються вирішити за допомогою квантово-хімічних розрахунків з притягненням першепринципної молекулярної динаміки. То є складна обчислювальна задача, перспективи вирішення якої пов'язують з впровадженням штучного інтелекту.

На цей час досліджуються властивості багатьох ВЕС. Ці дослідження, насамперед, носять науковий характер. Але вже зараз існуючі ВЕС мають характеристики (твердість, жаростійкість, корозійна стійкість, зносостійкість, та ін.), які перевищують характеристики існуючих сплавів.

Використана література

1. Yeh J. W., Chen Y. L., Lin S. J. High-entropy alloys – a new era of exploitation // Materials Science Forum. 2007. 560. 1-9.
2. Табачникова Е.Д., Лактионова М.А., Семеренко Ю.А., Шумилин С.Э., Подольский А.В., Тихоновский М.А., Мишкуф Й., Чах К. Механические свойства высокоэнтропийного сплава $Al_{0.5}CoCrCuFeNi$ в разных структурных состояниях в интервале температур 0,5–300 К // ФНТ. — 2017. — Т. 43, вып. 9. — С. 1381-1395.

3. О.М. Мисливченко та ін. Вплив нікелю на структуру та фазовий склад високоентропійного сплаву VCrMnFeCoNi_x . «Сверхтвердые материалы». Київ, Україна. №3. 2015р. Ст. 52-60.