

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

ФІЗИКА, ЕЛЕКТРОНІКА,
ЕЛЕКТРОТЕХНІКА

ФЕЕ :: 2017

**МАТЕРІАЛИ
та програма**

НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

(Суми, 17–21 квітня 2017 року)



Суми
Сумський державний університет
2017

**Дослідження процесу кристалізації нанодроту із
високоентропійного сплаву AlCoCuFeNi методом класичної
молекулярної динаміки**

Кушнерьов О.І., доцент

Дніпровський національний університет ім. О. Гончара, м. Дніпро

Високоентропійні багатокомпонентні сплави (ВЕС) являють собою новий клас матеріалів, які характеризуються унікальною структурою і цілим комплексом високих експлуатаційних характеристик, таких як твердість, зносостійкість, стійкість до окислення, корозії і іонізуючих випромінювань, висока термічна стабільність, добра біологічна сумісність із живими тканинами. В даній роботі із використанням програмного пакету для класичної молекулярної динаміки LAMMPS досліджено кристалізацію нанодроту ВЕС AlCoCuFeNi. Моделювання проводилося з використанням моделі зануреного атому (EAM) і NVT ансамблю атомів. Моделюваний нанодріт складався з 50000 атомів (Al, Co, Cu, Fe, Ni у еквіатомному співвідношенні), його довжина становила 180 нм, діаметр 60 нм. У напрямку, перпендикулярному осі нанодроту використані періодичні граничні умови. Нанодріт був розігрітий до температури 2300 К, та відпалений при цій температурі впродовж 1 нс. Після цього його охолоджували із розплавленого стану зі швидкістю 1×10^{11} К/с до температури 300 К. Після охолодження для визначення характеристик кристалічних структур, що утворилися у наночастинці була обчислена функція радіального розподілу (RDF). Крім того, для визначення фазового складу зразка було застосовано метод аналізу спільних сусідів атомів (CNA). За результатами дослідження було встановлено, що модельована наночастинка містить гранецентровану кубічну (ГЦК) фазу (вміст 56,6 %), об'ємно центровану кубічну (ОЦК) фазу (вміст 0,2 %), гексагональну щільно упаковану (ГЩУ) фазу (вміст 26,8 %) і невизначену фазу (вміст 16,5 %), яка, відповідно до аналізу функції радіального розподілу атомів має аморфну структуру. Параметр решітки ГЦК $a = 0,3665$ нм. Характер розташування атомів ГЩУ фази дозволяє зробити висновок, що вони являють собою дефекти пакування (порушення розташування шарів атомів) на граничних ділянках між окремими кристалітами ГЦК фази.