

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра физики твёрдого тела и нанотехнологий

КОВАЛЕНКО
Максим Олегович

**ВЛИЯНИЕ СТОКОВ НА СЕГРЕГАЦИЮ ЭЛЕМЕНТОВ В
КОНЦЕНТРИРОВАННОМ ТВЁРДОМ РАСТВОРЕ HfNbZrTi**

Дипломная работа

Научный руководитель:
Профессор кафедры физики твёрдого
тела и нанотехнологий БГУ, доктор
физико-математических наук
В.В. Углов

Допущен к защите

«___» _____ 2026 г.

Зав. кафедрой физики твёрдого тела и нанотехнологий
кандидат физико-математических наук, доцент В.И. Шиманский

Минск, 2026

РЕФЕРАТ

Дипломная работа: 79 с., 19 рис., 54 источника.

Ключевые слова: ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ СПЛАВЫ, ТУГОПЛАВКИЕ СПЛАВЫ, ФАЗОВАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ, СЕГРЕГАЦИЯ, МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНТЕ-КАРЛО, МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ, ДИФфуЗИЯ В ОБЛАСТИ СТОКОВ

Объект исследования –высокоэнтروпийный тугоплавкий сплав HfNbZrTi .

Цель работы – исследование влияния стоков различных типов на процессы сегрегации и фазового распада в сплаве HfNbZrTi методами атомистического моделирования для оценки его структурной стабильности.

Методы исследования: а) проведение моделирования гибридным методом Монте-Карло и молекулярной динамики для исследования сегрегации и фазовой стабильности вблизи стоков; б) анализ взаимодействия точечных дефектов с протяжёнными дефектами с помощью метода молекулярной статики; в) моделирование диффузии дефектов вблизи протяжённых дефектов с помощью метода Монте-Карло с силовыми смещениями по временным меткам; г) визуальный и количественный анализы данных методами программы OVITO.

Результатом являются: установлены закономерности фазового распада однофазного ОЦК твёрдого раствора HfNbZrTi вблизи стоков различного рода. Выявлена ведущая роль сегрегации атомов Hf в формировании гексагональной плотноупакованной (ГПУ) фазы. Определено влияние типа дефектов на интенсивность сегрегации. Получены количественные данные по энергии связи точечных дефектов с краевой дислокацией и дислокационной петлей, существенно превышающие таковые для чистых металлов. Установлена обратная корреляция в пространственном распределении зон притяжения вакансий и междоузельных атомов. Проведено моделирование диффузии вакансий и междоузельных атомов вблизи краевой дислокации.

Область применения: Результаты работы имеют значение для прогнозирования долговременной стабильности и проектирования новых радиационно-стойких материалов на основе высокоэнтропийных сплавов для реакторов нового поколения и других применений в экстремальных условиях.

РЭФЕРАТ

Дыпломная работа: 79 с., 19 рыс., 54 крыніца.

Ключавыя словы: ВЫСОКАЭНТРАПІЙНЫЯ СПЛАВЫ, ЦУГАПЛАВКІЯ СПЛАВЫ, ФАЗАВАЯ СТАБІЛЬНАСЦЬ, СЕГРЭГАЦЫЯ, МАДЭЛЯВАНННЕ МОНТЭ-КАРЛА, МАЛЕКУЛЯРНАЯ ДЫНАМІКА, ДЭФЕКТЫ КРЫСТАЛІЧНАЙ РАШЭТКІ, ДЫФУЗІЯ ПРЫ СТОКАХ

Аб'ект даследавання – высокаэнтрапійны цугаплавкі сплаў HfNbZrTi .

Мэта работы – даследаванне ўплыву стокаў розных тыпаў на працэсы сегрэгацыі і фазавога распаду ў сплаве HfNbZrTi метадамі атамістычнага мадэлявання для ацэнкі яго структурнай стабільнасці.

Метады даследавання: а) правядзенне мадэлявання гібрыдным метадам Монтэ-Карла і малекулярнай дынамікі для даследавання сегрэгацыі і фазавай стабільнасці каля стокаў; б) аналіз узаемадзеяння кропкавых дэфектаў з працяглымі дэфектамі з дапамогай метаду малекулярнай статыкі; в) мадэляванне дыфузіі дэфектаў каля працяглых дэфектаў з дапамогай метаду Монтэ-Карла са сіла-змяшчальнымі зрухамі па часовых метках; г) візуальны і колькасны аналіз даных метадамі праграмы OVITO.

Вынікамі з'яўляюцца: устаноўленыя заканамернасці фазавога распаду аднафазнага ОЦК цвёрдага раствора HfNbZrTi каля стокаў рознага роду. Выяўленая вядучая роля сегрэгацыі атамаў Hf у фарміраванні гексаганальнай шчыльнаўпакованай (ГШУ) фазы. Вызначаны ўплыў тыпу дэфектаў на інтэнсіўнасць сегрэгацыі. Атрыманыя колькасныя дадзеныя па энергіі сувязі кропкавых дэфектаў з краявой дыслакацыяй і дыслакацыйнай пятлёй, якія значна перавышаюць адпаведныя для чыстых металаў. Устаноўленая адваротная карэляцыя ў прасторавым размеркаванні зон прыцягнення вакансій і міжвузельных атамаў. Праведзена мадэляванне дыфузіі вакансій і міжвузельных атамаў каля краявой дыслакацыі.

Вобласць прымянення: Вынікі работы маюць значэнне для прагназавання доўгатэрміновай стабільнасці і праектавання новых радыяцыйна-стрымальных матэрыялаў на аснове высокаэнтрапійных сплаваў для рэактараў новага пакалення і іншых прыкладанняў у экстрэмальных умовах.

ABSTRACT

Thesis: 79 pages, 19 figures, 54 references.

Keywords: HIGH-ENTROPY ALLOYS, REFRACTORY ALLOYS, PHASE STABILITY, SEGREGATION, MONTE CARLO SIMULATION, MOLECULAR DYNAMICS, CRYSTAL LATTICE DEFECTS, DIFFUSION AT SINKS

Research object: The high-entropy refractory alloy HfNbZrTi.

Research goal: To investigate the influence of sinks of various types on segregation and phase decomposition processes in the HfNbZrTi alloy using atomistic modeling methods to evaluate its structural stability.

Research methods: a) Hybrid Monte Carlo/Molecular Dynamics simulation to study segregation and phase stability near sinks; b) Analysis of the interaction between point defects and extended defects using the molecular statics method; c) Modeling of defect diffusion near extended defects using the force-biased timestamp Monte Carlo method; d) Visual and quantitative analysis of data using the OVITO software package.

Results: Regularities of the phase decomposition of the single-phase BCC (body-centered cubic) solid solution HfNbZrTi near various types of sinks have been established. The leading role of Hf atom segregation in the formation of a hexagonal close-packed (HCP) phase has been revealed. The influence of the defect type on the segregation intensity has been determined. Quantitative data on the binding energy of point defects with an edge dislocation and a dislocation loop have been obtained, significantly exceeding those for pure metals. An inverse correlation in the spatial distribution of vacancy and interstitial atom attraction zones has been established. Simulation of vacancy and interstitial atom diffusion near an edge dislocation has been performed.

Area of application: The results are significant for predicting long-term stability and designing novel radiation-resistant materials based on high-entropy alloys for next-generation reactors and other applications under extreme conditions.

ОГЛАВЛЕНИЕ

СПИСОК УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ И СОКРАЩЕНИЙ.....	8
ВВЕДЕНИЕ.....	9
Глава 1. АНАЛИТИЧЕСКИЙ ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ ПО ЭЛЕМЕНТНОЙ СЕГРЕГАЦИИ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ С ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННОЙ КУБИЧЕСКОЙ (ОЦК) РЕШЕТКОЙ, СОДЕРЖАЩИХ ТУГОПЛАВКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И ДАННЫЕ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПО РАССМАТРИВАЕМЫМ ВОПРОСАМ. ВЫЯВЛЕНИЕ НЕИССЛЕДОВАННЫХ АСПЕКТОВ ПРОБЛЕМЫ И ПОСТАНОВКА НЕРЕШЕННЫХ ЗАДАЧ.	12
Глава 2 ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ	23
2.1 Обоснование выбора объекта исследования.....	23
2.2 Моделирование исходных структур	24
2.3 Параметры ближнего порядка для твердых растворов	28
2.4 Классическое молекулярное моделирование с программным пакетом LAMMPS	31
2.5 Анализ и визуализация данных программой OVITO.....	42
Глава 3 РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ	50
3.1. Элементная сегрегация в окрестности стоков	50
3.2 Энергия связи точечных дефектов с дислокационными структурами	55
3.3 Диффузия точечных дефектов в окрестности краевой дислокации	63
3.4 Расчет параметров ближнего порядка	65
3.5 Механизмы радиационно-стимулированной сегрегации.....	67
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	71
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	74