

6. Berendsen H. J. C, Postma J. P. M., van Gunsteren W. F. Molecular dynamics with coupling to an external bath // *J. Chem. Phys.* – 1984. – Vol. 81, Iss. 8. – pp. 3684 – 3690.
7. Volegov P.S., Gerasimov R.M. Modeling the formation of grain boundaries as a result of two-sided crystallization using molecular dynamics // *Key Engineering Materials.* – 2017. – V. 743. – pp. 181-186.
8. Stukowski A., Bulatov V. V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2012. – Vol. 20, No. 8. – 085007. DOI: <https://doi.org/10.1088/0965-0393/20/8/085007>

NOVEL ENTROPY-STABILIZED ULTRA HIGH TEMPERATURE CERAMICS THIN FILMS PREPARED BY MAGNETRON SPUTTERING

*S. DEMCHENKO**, *D. ZELENTOV**, *S. LINNIK**, *A. GAYDAYCHUK**, *S. ZENKIN**

*Tomsk Polytechnic University, Lenin 30, Tomsk, 634034, Russia

E-mail: stas.dem@mail.ru

Currently, there are many types of high – temperature ceramic coatings based on two– and three – component system. But now, highly entropy ceramic coatings consisting of five or more components have been actively developing. The basis of this class of materials is entropy. The statistical-mechanics definition of entropy was developed by Ludwig Boltzmann in the 1870s: entropy is a thermodynamic property that can be used to determine the energy available for the useful work in a thermodynamic process.

Here we show the new thin film ceramic system (Hf_{1/4}Zr_{1/4}Y_{1/4}Ce_{1/4}) O_{2-δ} which exhibit superior thermal stability up to 1700°C. (Hf_{1/4}Zr_{1/4}Y_{1/4}Ce_{1/4}) O_{2-δ} films were sputtered using a round unbalanced magnetron equipped by Hf/Zr (50 at.%/50 at.%), Mg/AL (50 at.%/50 at.%) and Y/Ce (50 at.%/50 at.%) target. The base pressure p₀ in the evacuated deposition chamber was 8×10^{-4} Pa. We sputtered the (Hf_{1/4}Zr_{1/4}Y_{1/4}Ce_{1/4}) O_{2-δ} films on Si (100) and glass substrates under the following deposition conditions: discharge current I_d = 1 – 2 A with the corresponding voltage U_d = 200–500 V. Substrate temperature T_s = RT.

The structure of the films was characterized by X-ray diffraction (XRD) using a diffractometer (X'Pert PRO; PAN analytical, ALMELLO, the Netherlands) in Bragg-Brentano geometry using CuK α (40 kV, 40 mA) radiation. The elemental composition of films was measured using a wavelength dispersive spectroscopy (WDS) by a scanning electron microscope (SU-70, Hitachi) equipped with WDS detector (Magnaray, Thermo Scientific) using a primary electron energy of 15 keV. The coating absorption coefficient was analyzed by spectrometer (Avantes Fiber Optic Spectrometer AvaSpec-3648 with a grating having 300 lines mm⁻¹). Also, we performed measurements of the roughness on an atomic force microscope. The measurements were carried out at three points on each sample. The hardness of the coatings was measured on nanoindentation hardness tester. Thermal studies were carried out using an acetylene torch. The samples were annealed for 30 seconds at a temperature of 1700 C°.

We shows relationships between sputtering parameters such as magnetron power density, total pressure, gas mixture and properties of produced film. The most important thing in the work is the analysis of the structures obtained. As a result of research, it was found that the resulting three component systems HfZrOx and CeYOx have a monoclinic structure. The five component systems HfZrCeYOx have a cubic structure. Based on the studies, a scheme of the resulting gratings was constructed depending on the number of components in the compound. Optical spectroscopy was used to determine defects and structure homogeneity, figure 1.

As can we see, samples HfZrCeYO (2/1) and (1/1) have monotonous lines. It is the result of absence of characteristic absorption peaks. This peak shows the presence of defects in the structure. And this in turn effects on homogeneous of the samples.

The mechanical properties, namely hardness and roughness, were also studied. Hardness was measured using a nanohardness tester, with a load of 25 mN, the number of measurement points on one sample was 10. The average hardness was 18 GPa. Roughness was measured using an atomic force microscope. Each coating had different roughness values.

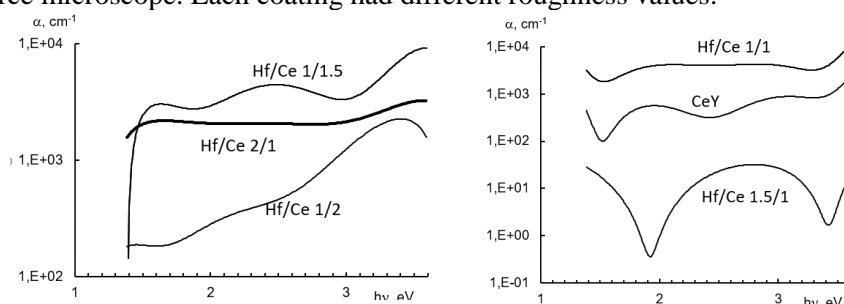


Figure 1 – Optical spectroscopy of coatings

Below are the main conclusions in the work:

1. As a result of research, it was possible to synthesize material without the formation of various binary compounds.
2. The coatings obtained have an amorphous structure, in contrast to binary systems (HfZrO), which have a crystalline structure.
3. The most homogeneous structure has a coating obtained at a ratio of currents 1/1 and 2/1, HfZr / CeY, respectively.
4. With the maximum concentration of cerium and yttrium in the system, the maximum value of the peak displacement is 1.9 – 3 degrees.
5. The average hardness of the coatings obtained is 18 GPa.
6. As a result of thermal testing, a decrease in the thickness of the sample coatings after annealing was revealed. Samples with a content of cerium and yttrium of 60 at% have the minimum value of the mass change after annealing.

References

1. Christina M. Rost, Edward Sachet, Trent Borman, Ali Moballeg, Elizabeth C. Dickey, Dong Hou, Jacob L. Jones, Stefano Curtarolo & Jon-Paul Maria. Entropy-stabilized oxides.
2. V. Braic, Alina Vladescu, M. Balaceanu, C.R. Luculescu, M. Braic. Nanostructured multi-element (TiZrNbHfTa)N and (TiZrNbHfTa)C hard coatings.
3. D.Berardan, A.K.Meena, S.Franger, C.Herrero, N.Dragoe. Controlled Jahn-Teller distortion in (MgCoNiCuZn)O-based high entropy oxides.
4. Ján Dusza, Peter Švec, Vladimír Girman, Richard Sedlák, Elinor G.Castle, Tamás Csanádi, Alexandra Kovalčíková, Michael J.Reeced. Microstructure of (Hf-Ta-Zr-Nb)C high-entropy carbide at micro and nano/atomic level
5. Christina M. Rost, Edward Sachet, Trent Borman, Ali Moballeg, Elizabeth C. Dickey, Dong Hou, Jacob L. Jones, Stefano Curtarolo & Jon-Paul Maria. Entropy-stabilized oxides.
6. M.Braic, M.Balaceanu, A.Vladescu, C.N.Zoita, V.Braic. Deposition and characterization of multi-principal-element (CuSiTiYZr)C coatings.
7. Du-Cheng Tsai, Min-Jen Deng, Zue-Chin Chang, Bing-Hau Kuo, Erh-Chiang Chen, Shou-Yi Chang, Fuh-Sheng Shieu. Oxidation resistance and characterization of (AlCrMoTaTi)-Six-Ncoating deposited via magnetron sputtering.
8. F.Wanga, A.Inoueabcd, F.L.Kong, Y.Hana, S.L.Zhua, E.Shalaanc, F.Al-Maroukic. Formation, thermal stability and mechanical properties of high entropy (Fe, Co, Ni, Cr, Mo)-B amorphous alloys.

9. Xueliang Yan Loic Constantin Yongfeng Lu Jean-François Silvain Michael Nastasi Bai Cui. (Hf_{0.2}Zr_{0.2}Ta_{0.2}Nb_{0.2}Ti_{0.2})C high-entropy ceramics with low thermal conductivity.
10. Weichen Hong, Fei Chen, Qiang Shen, Young-Hwan Han, William G. Fahrenholtz, Lianmeng Zhang. Microstructural evolution and mechanical properties of (Mg,Co,Ni,Cu,Zn)O high-entropy ceramics.

КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ZrC-BN: СТРУКТУРА И СВОЙСТВА

А.Р. ДОБРОВОЛЬСКИЙ¹, Ю.А. МИРОВОЙ^{1,2}, С.П. БУЯКОВА^{1,2}

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

E-mail: artdobrov@mail.ru

Введение. Одной из важнейших задач современного материаловедения является создание материалов для работы в экстремальных условиях при высоких температурах и напряжениях, под воздействием агрессивных сред и других факторов.

В решении этих задач существенная роль принадлежит использованию тугоплавких металлов и их соединений боридов, карбидов, нитридов и силицидов, которые, наряду с высокой твердостью и тугоплавкостью, обладают жаростойкостью и жаропрочностью, специфическими физическими и химическими свойствами. Карбидные соединения имеют достаточно богатую историю, однако, их потенциал остаётся нераскрытым и по сей день.

Среди карбидов тугоплавких металлов высокими эксплуатационными свойствами обладает карбид циркония, что делает его потенциально пригодным для решения многих задач современного материаловедения: в качестве компонентов и легирующих добавок твердых сплавов, разнопрофильных композиционных материалов, для защитных покрытий, поверхностного и объемного модифицирования металлических сплавов и материалов. Примером этому может служить исследование покрытий из карбида циркония, согласно которому дереворежущий инструмент, модифицированный подобным способом, обладает повышенной устойчивостью к объёмному износу на 30% [1]. Благодаря своим высоким показателям износостойкости карбид циркония вызывает большой интерес со стороны научного сообщества.

В качестве объекта исследования выбран композиционный материал на основе карбида циркония ZrC с добавлением графитоподобной модификации нитрида бора.

Материалы и методики. Морфология порошков BN и ZrC, используемых при получении данных композиционных материалов, представлена на рисунке 1. Порошок карбида циркония состоит из мелких частиц размером от 1 до 7 мкм. Порошок нитрида бора состоит из мелких частиц размером от 1 до 10 мкм. Перед производством компактов на аппарате горячего прессования было необходимо подготовить шихту из имеющихся порошков. Производство шихты включает в себя взвешивание и смешивание порошков нитрида бора и карбида циркония в необходимых соотношениях 1, 3, 5, 10 и 15% об. по три представителя каждого состава. Смешивания состава производилось в планетарной мельнице периодического действия АГО-2 с частотой вращения 1290 об/мин в течение 3 минут.

Композиты получены методом горячего прессования по схеме одноосного одностороннего нагружения в графитовой пресс форме. Температура спекания составила около 2000 °С, давление прессования составляло 8 тонн. Синтез проведен в инертной атмосфере аргона.