**Исследование образования дефектов при внедрении атома ванадия в эквиатомном сплаве WTaNbV с ОЦК структурой**

***Хромушкин К.Д.***

*Аспирант, 2 год обучения*

*НИТУ «МИСИС»,*
*кафедра теоретической физики и квантовых технологий, Москва, Россия*

*E-mail: khromushkin.kd@misis.ru*

В настоящее время активно ведутся исследования поведения внутренних дефектов в высокоэнтропийных сплавах (ВЭС) на основе тугоплавких элементов [1,2]. Данные сплавы по совокупности физико-механических свойств могут стать перспективными материалами для ядерной энергетики, поэтому изучение внутренней структуры на атомном уровне является одной из актуальных задач в физике твердого тела.

Данная работа базируется на прошлых исследованиях, в которых рассматривался сплав W-Ta-Nb-V. Изучение сплава продолжается с использованием пакета программ VASP на суперячейке из 128 атомов, полученной методом SQS. Ранее было показано, что наименьшей энергией в данном сплаве обладают вакансии, образованные на месте ванадия. Учитывая это, было решено, что более вероятным атомом внедрения может оказаться ванадий. Для ОЦК-решетки характерно размещение атомов внедрения внутри октапор. В данной работе было проанализировано 40 различных октапор, где внутри располагался ванадий. Энергия образования такого дефекта была рассчитана по формуле (1), где *Edefect* – энергия решетки с дефектом, эВ, *Emetal* – энергия метала, эВ, *Eperfect* – энергия идеальной бездефектной решетки, эВ.

$E\_{inter}=E\_{defect}-E\_{metal}-E\_{perfect}$ (1)

Было получено, что при внедрении атома ванадия образуются дефекты типа dumbbell в различных комбинациях. Наиболее часто встречаются dumbbell’ы типа ванадий-ванадий, которые выстроены либо вдоль направления <111>, либо <110>. Также получено, что такие дефекты обладают наименьшей энергией образования 2,31 эВ для направления <111>. Все энергии и частота образования дефектов типа dumbbell показаны на рисунке 1.

Также было изучено влияние конфигурации октапоры на энергию, образовавшегося дефекта.

Рис.1. Энергия и частота образования различных dumbbell’ов при внедрении атома ванадия

*Работа выполнена при поддержке гранта РНФ-22-12-00193.*

**Литература**

1. X. Lin-Vines, J.A. Wilson, A. Fraile e.a. Defect behaviour in the MoNbTaVW high entropy alloy (HEA) // Results in Materials. 2022. Vol. 15. pp 4.

2. S. Zhao Defect properties in a VTaCrW equiatomic high entropy alloy (HEA) with the body centered cubic (bcc) structure // Journal of Material Science and Technology. 2020. Vol. 44. p. 133–139.