

УДК 669

АТОМИСТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ
ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА КАНТОРА CoCrFeMnNi© 2022 г. И. А. Балякин^{1,2,*}, академик РАН А. А. Ремпель^{1,2}

Поступило 05.10.2021 г.

После доработки 28.12.2021 г.

Принято к публикации 30.12.2021 г.

Методом классической молекулярной динамики рассчитана температура плавления высокоэнтропийного сплава Кантора CoCrFeMnNi. Впервые для такого рода расчетов использовался потенциал межатомного взаимодействия в виде набора искусственных нейронных сетей. Коэффициенты нейронных сетей получены методом машинного обучения по данным *ab initio* молекулярно-динамических расчетов. *Ab initio* молекулярно-динамические расчеты проводились для широкого диапазона температур из одинакового кристаллического состояния. Исходное состояние для *ab initio* расчетов представляло собой специальную квазислучайную структуру, оптимизированную по парам ближайших соседей. Для расчета температуры плавления был использован двухфазный метод, основанный на движении межфазной границы в системе “кристалл–расплав”. Следует отметить, что несмотря на то, что в тренировочный набор не были явно включены двухфазные конфигурации, рассчитанное значение температуры плавления оказалось в достаточно удовлетворительном согласии с экспериментальными данными. Таким образом, не опираясь на эмпирические данные, удалось рассчитать температуру плавления высокоэнтропийного сплава CoCrFeMnNi.

Ключевые слова: высокоэнтропийные сплавы, сплав Кантора, молекулярная динамика, *ab initio* молекулярная динамика, температура плавления, машинное обучение, искусственные нейронные сети

DOI: 10.31857/S2686953522010046

ВВЕДЕНИЕ

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭСы), представляющие собой многокомпонентные неупорядоченные твердые растворы замещения [1], перспективны для использования в ядерной отрасли [2–4], в медицине [5–7], при криогенных температурах [8]. Помимо этого, ВЭСы имеют большие перспективы использования в областях, связанных с эксплуатацией при повышенных температурах. К примеру, в обзоре [9] показано, что высокотемпературные прочностные характеристики некоторых жаропрочных ВЭСов выше, чем у коммерческих сплавов INCONEL и MAR-M247.

Перспективность использования ВЭСов при повышенных температурах поднимает проблему предсказания температуры плавления ВЭСа заданного химического состава. Поскольку компо-

зиционное пространство ВЭСов имеет большую размерность, то систематическое экспериментальное исследование их свойств может быть затруднительным. Помощью эксперименту являются расчетные методы. Так, метод молекулярной динамики (МД) позволяет достаточно точно рассчитать температуру плавления вещества в случае, если используемый потенциал межатомного взаимодействия достаточно адекватен. К примеру, в работе [10] для железа, параметризованного согласно [11], методом МД с использованием модифицированного потенциала погруженного атома [12] удалось рассчитать температуру плавления, с точностью до одного градуса воспроизводящую экспериментальные данные.

Степень согласия МД расчетов с экспериментом в основном определяется выбором потенциала межатомного взаимодействия. Для многокомпонентных систем, в частности для ВЭСов, достаточно затруднительно разработать адекватный потенциал. Решением данной проблемы может служить использование *ab initio* МД, которая не требует задания потенциалов и обладает достаточно высокой точностью. Однако низкая производительность данного метода сильно ограничивает его использование для таких задач, как вычисление температуры плавления материала.

¹Институт металлургии, Уральское отделение Российской академии наук, 620016 Екатеринбург, Россия

²“НАНОТЕХ” центр, Уральский федеральный университет, 620002 Екатеринбург, Россия

*E-mail: i.a.balyakin@gmail.com

Хотя, к примеру, существует возможность оценить температуру плавления из *ab initio* расчетов по косвенным признакам, как это сделано для тройной системы Hf-Ta-C в работе [13].

Таким образом, при попытке произвести атомистический расчет для ВЭС возникает проблема соотношения “производительность–точность”. Решением данной проблемы применительно к рассматриваемой задаче является разработка межатомных потенциалов, полученных методом машинного обучения на основании относительного небольшого набора *ab initio* данных. Применение машинного обучения к созданию межатомных потенциалов подробно описано в обзоре [14].

Еще одной проблемой для моделирования ВЭСов, помимо разработки потенциала межатомного взаимодействия, является задание начальной конфигурации для кристаллического состояния. Ячейки в *ab initio* расчетах (а именно они используются в качестве отправной точки при разработке потенциалов машинного обучения) состоят из нескольких сотен атомов. По этой причине возникает задача моделирования беспорядка, присущего бесконечному неупорядоченному твердому раствору замещения, конечным числом атомов.

Для моделирования возможно использование специальных квазислучайных структур (СКС). Идея СКС, изначально разработанная для бинарных неупорядоченных соединений [15], может быть применена и для многокомпонентных систем. Используя современные стохастические алгоритмы [16], можно создавать СКС для ячеек многокомпонентных систем, состоящих из сотен атомов. В [17, 18] описаны четырехкомпонентные 16-, 24- и 64-атомные гранецентрированные кубические (ГЦК); 16-, 24- и 64-атомные гексагональные плотноупакованные (ГПУ); 64-атомные объемно-центрированные кубические ОЦК СКС, а также пятикомпонентные 20-атомные ГЦК и ГПУ; 125- и 250-атомные ГЦК и ОЦК; 160- и 250-атомные ГПУ СКС.

В рамках МД температура плавления объемной системы может быть вычислена несколькими способами. В обзоре [19] методы расчета температуры плавления делятся на две основные группы. Первая группа – это “прямые” методы: например, метод гистерезиса [20], заключающийся в нагреве объемного кристалла до плавления и охлаждении объемной жидкости до кристалла; метод пустот, основанный на моделировании кристалла с введенными дефектами [21]; методы, основанные на исследовании границы “жидкость–твердое тело” [22]. Вторая группа – методы, основанные на вычислении свободной энергии, являющиеся более сложными, чем “прямые”. Примерами данных методов могут служить методы Гувера и Ри [23], Френкеля и Лэдда [24] и

метод Грохолы [25]. В работе [19] установлено, что применение методов первой группы ограничено для систем с медленной динамикой, например, ионных жидкостей. Однако динамика атомов в расплаве ВЭС не является медленной, значения коэффициентов диффузии в расплавах ВЭС сопоставимы с таковыми для простых металлов [26]. Поэтому к ВЭСам могут быть применены более простые “прямые” методы.

В настоящей работе методом атомистического моделирования произведен расчет температуры плавления хорошо изученного сплава CoCrFeMnNi (сплав Кантора [27]). Обсуждаются способы увеличения точности данного подхода.

МЕТОДЫ

Специальная квазислучайная структура. Для создания исходной конфигурации для *ab initio* расчетов был использован алгоритм получения СКС, реализованный в программном комплексе АТАТ (Alloy Theoretic Automated Toolkit) [28]. В качестве целевой структуры была определена ГЦК сверхъячейка, состоящая из $4 \times 4 \times 4$ ГЦК элементарных ячеек. Использовали простейший вариант построения СКС – по ближайшим соседям, т.е. без учета второй и более атомных координационных сфер, а также без учета угловых корреляций между атомными связями.

Ab initio молекулярная динамика. Для создания потенциала межатомного взаимодействия, полученного методом машинного обучения, необходим тренировочный набор. В качестве тренировочного набора использовали результаты *ab initio* молекулярной динамики. Расчеты выполнены методом теории функционала плотности в программном пакете VASP (Vienna *ab initio* Simulation Package) [29]. Для описания обменно-корреляционного взаимодействия использовали обобщенное градиентное приближение GGA (Generalized Gradient Approximation) с функционалом PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) и PAW (Projector Augmented Wave) PBE псевдопотенциалами [30]. Полуостовные состояния не учитывались для всех химических элементов. Энергия обрезки плоского волнового базиса составляла 450 эВ. Расчет проводился в Γ -точке зоны Бриллюэна, поскольку вычислительная ячейка являлась достаточно большой и содержала 256 атомов.

Расчет *ab initio* МД проводили при температурах от 300 до 2300 К с шагом 500 К и давлении в одну атмосферу в NPT (при постоянном числе частиц N , давлении P и температуре T) ансамбле. При этом исходной конфигурацией всегда являлась кристаллическая (конфигурация, полученная после алгоритма по генерации СКС). Временной шаг *ab initio* МД составлял 2 фс, число шагов для каждой температуры было порядка 2000.

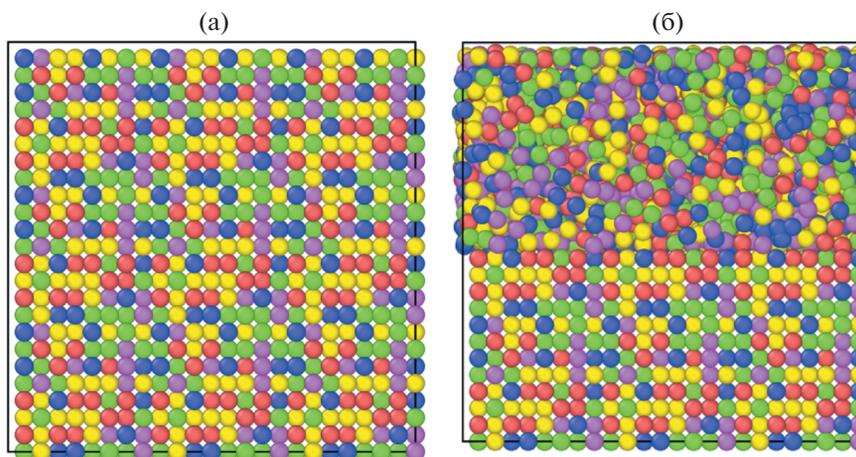


Рис. 1. Исходная ГЦК структура (а), интерфейс “жидкость–твердое тело” (б).

Таким образом, тренировочный набор включал в себя 10000 конфигураций.

Тренировка потенциала. Потенциал межатомного взаимодействия подбирали в виде набора атомных нейронных сетей. Тренировка потенциала осуществлялась в программном пакете DeePMD [31]. Использовали модель с двумя характерными радиусами масштабирования локальных дескрипторов (DeePMD Smooth Edition) [32].

Использовали следующие параметры тренировки: радиус обрезки r_{cut} и радиус сглаживания r_s для радиальных дескрипторов 6.5 и 4.0 Å соответственно; те же величины для угловых дескрипторов 5.0 и 3.0 Å соответственно. Радиальные и угловые нейронные сети погружения имели по три скрытых слоя по 50 и 25 узлов в каждом соответственно. Архитектура атомных нейросетей представляла собой 3 скрытых слоя по 250 узлов. Начальная скорость обучения равна 0.001, а конечная – в сто раз меньше. Начальные и конечные веса по энергиям, силам и вириалам равны 1 и 10, 100 и 1000, 1 и 10 соответственно. Размер пакета обучения равен 1, а количество эпох равно 500000.

Классическая молекулярная динамика. Для приготовления начальной структуры в классическом МД расчете исходная ячейка для *ab initio* расчетов была трижды скопирована в направлениях x , y и z . Таким образом, расчеты проводили для системы, состоящей из $256 \times 3^3 = 6912$ атомов. Далее все атомы с координатой $z < A/2$ (где A – длина ребра сверхъячейки) были “заморожены” и запущен МД расчет при температуре 2300 К. Таким образом, была создана граница раздела “жидкость–твердое тело” (рис. 1).

Для более статистически значимого результата было подготовлено 10 независимых интерфейсов “жидкость–твердое тело”. Для каждого такого

интерфейса проведен МД расчет в NPT ансамбле при различных температурах. Исходными температурами являлись 1600 и 1700 К, каждая последующая точка определялась методом дихотомии. Число шагов МД для каждой независимой траектории было равно 1×10^5 , временной шаг – 1 фс, а давление – 1 атм.

Для классификации систем по признаку наличия или отсутствия в ней кристаллизации использовали процедуру Polyhedral Template Matching, описанную в [33] и реализованную в программном комплексе OVITO (Open Visualization Tool) [34]. Суммарное количество атомов в многогранниках фиксировали при каждом расчете. В случае, если во всех расчетах при данной температуре предельное значение числа атомов в многогранниках стремится к нулю, то данная температура выше температуры плавления. В случае, если во всех расчетах при данной температуре предельное значение числа атомов в многогранниках стремится к числу атомов, то данная температура ниже температуры плавления. В случае, если часть траекторий при данной температуре приводит к кристаллизации, а часть – к плавлению, можно считать, что данная температура достаточно близка к температуре плавления. По достижению такой температуры она будет считаться температурой плавления в случае, если данная температура будет достигнута раньше, чем критерий остановки поиска. Зададим точность определения температуры плавления CoCrFeMnNi, равную $\Delta = \pm 10$ К, тогда критерий остановки поиска будет следующим: между двумя температурами, одна из которых выше температуры плавления, а другая ниже, должен быть интервал не более 20 К.

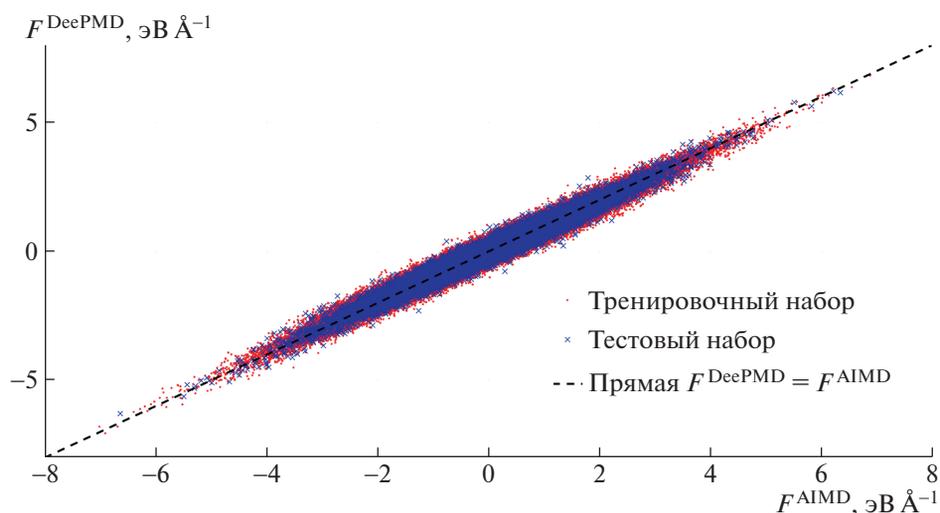


Рис. 2. Корреляция между *ab initio* и DeePMD компонентами сил F для тренировочного и тестового наборов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 приведена зависимость DeePMD компонент сил от *ab initio* компонент, действующих на одни и те же атомы в одних и тех же конфигурациях. Данные приведены для тренировочного и тестового наборов, одинаковый характер обеих зависимостей указывает на то, что модель не переобучена. В идеальном случае все точки данной зависимости должны ложиться на прямую $y = x$. Однако, поскольку в модели присутствуют некоторые ошибки, то множество данных точек группируется возле данной прямой. Степень разброса определяется величиной среднеквадратической ошибки, вычисляемой как

$$\Delta_F = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^3 (F_{ijk}^{\text{AIMD}} - F_{ijk}^{\text{DeePMD}})^2}{3MN}},$$

где F_{ijk} — k -я компонента силы, действующая на i -й атом в j -й конфигурации, N — число атомов в системе, M — число конфигураций.

Для тренировочного и тестового наборов среднеквадратические ошибки по компонентам сил $\Delta_F^{\text{Train}} = 160 \text{ мЭВ } \text{Å}^{-1}$, $\Delta_F^{\text{Test}} = 163 \text{ мЭВ } \text{Å}^{-1}$.

На рис. 3 приведено сравнение полных радиальных функций распределения для системы CoCrFeMnNi, вычисленных для траекторий, полученных методом *ab initio* МД в VASP и методом классической МД при помощи DeePMD-потенциала. Следует отметить существенное различие радиальных функций распределения для температуры 2300 К. Это связано с тем, что в ходе *ab initio* расчета в силу маленькой длины траектории кристалл CoCrFeMnNi не был полностью расплавлен. На рис. 3е приведена полная радиальная функция распределения CoCrFeMnNi при

2300 К, но для траектории той же длительности, что и *ab initio* расчет. Видно, что согласие на этот раз гораздо более удовлетворительное.

На рис. 4 приведена эволюция системы CoCrFeMnNi для одной и той же начальной конфигурации при 1600 и 1700 К на протяжении 20 пс. Рисунок 4 дает наглядное представление процессов кристаллизации и плавления в системе. Однако для количественного анализа кинетики плавления и кристаллизации приведем зависимость числа атомов, принадлежащих тому или иному типу многогранников (рис. 5).

Из рис. 5 видно, что число атомов в ГЦК-кластерах для температур 1600, 1650 и 1675 К со временем стремится к полному числу атомов в системе. В то же время для температур 1688 и 1700 К наблюдается уменьшение числа атомов в ГЦК-кластерах с течением времени. Отсюда можно заключить, что расчетная температура плавления находится в интервале от 1675 до 1688 К. Таким образом, вычисленное значение температуры плавления $T_m^{\text{calc}} = 1681.5 \pm 6.5 \text{ К}$. Согласно экспериментальным данным дифференциальной сканирующей калориметрии температура плавления данного сплава $T_m^{\text{exp}} = 1607 \text{ К}$ [35]. Таким образом, относительная ошибка, с которой рассчитана температура плавления CoCrFeMnNi, составляет примерно 4.6%.

Следует отметить, что сплавы с более чем одним компонентом плавятся в некотором интервале температур (кроме случаев эвтектики и конгруэнтного плавления) — от температуры солидус до температуры ликвидус. Найденная же описанным выше способом температура является некоей эффективной температурой, при этом она может находиться на границах или внутри интерва-

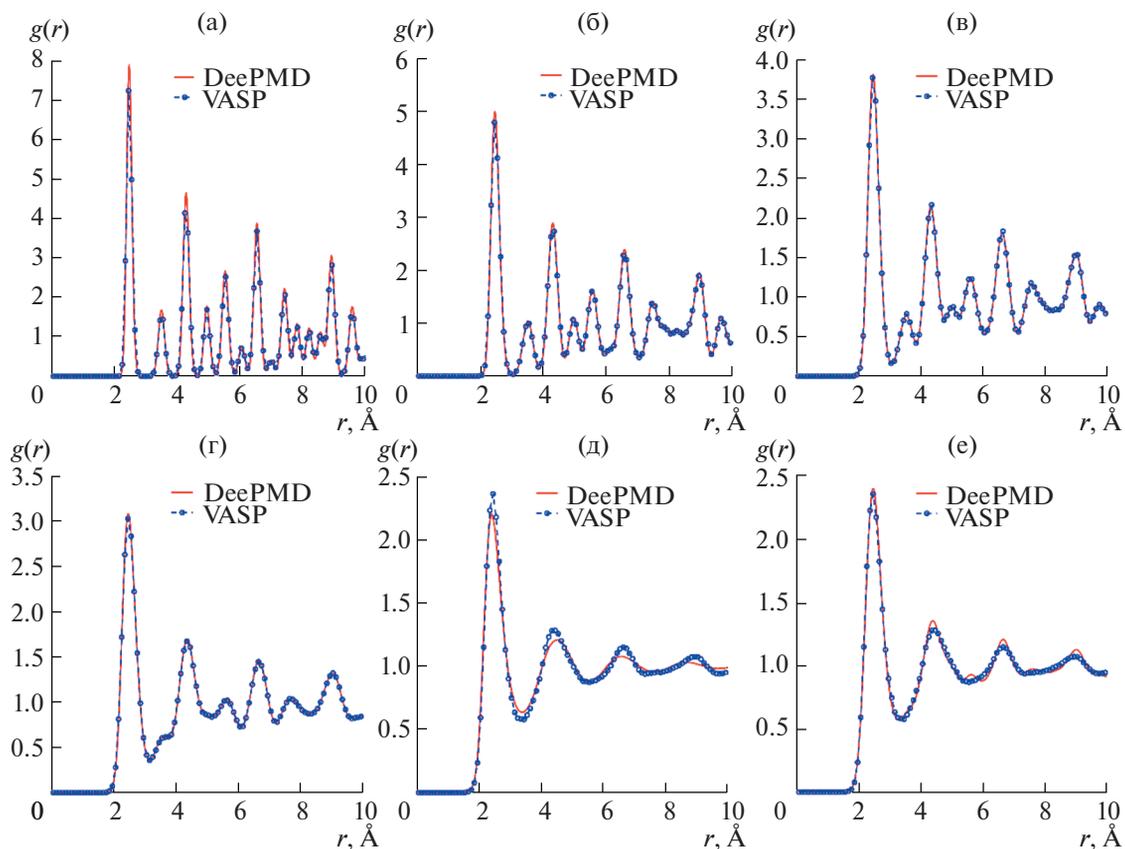


Рис. 3. Сравнение полных радиальных функций распределения, полученных методом *ab initio* МД и классической МД с использованием DeePMD-потенциала: (а) 300 К, (б) 800 К, (в) 1300 К, (г) 1800 К, (д) 2300 К, (е) 2300 К (длина DeePMD-траектории такая же, как для *ab initio* расчета). Несовпадение кривых для температуры 2300 К на графике (д) обусловлено тем, что длины DeePMD-траектории, в отличие от *ab initio* траектории, хватило для того, чтобы полностью расплавить кристалл.

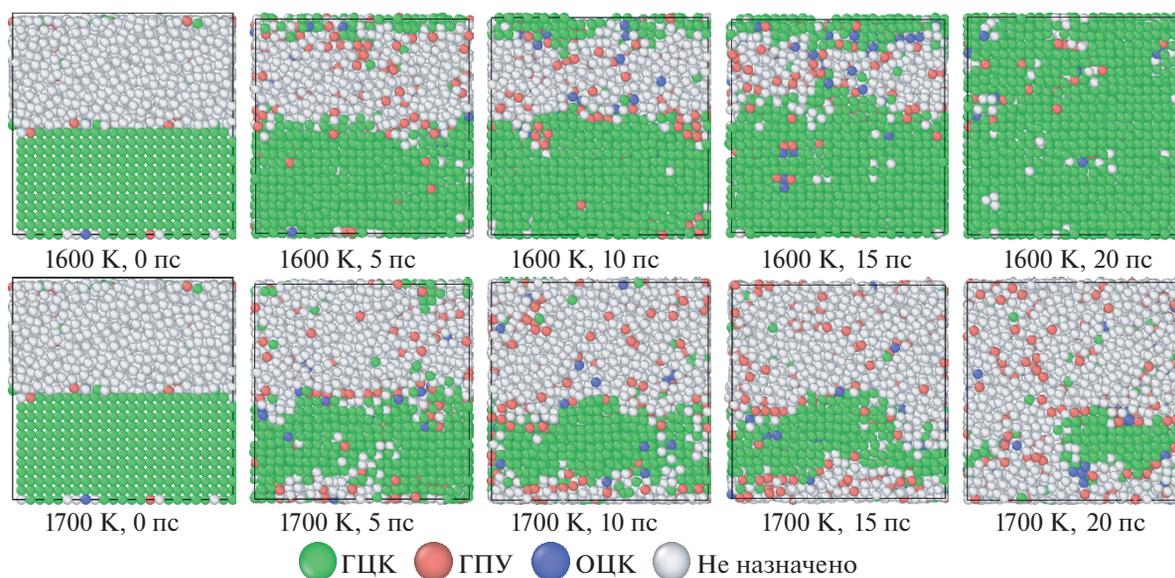


Рис. 4. Эволюция интерфейса “жидкость–твёрдое тело” в системе CoCrFeMnNi при различных температурах.

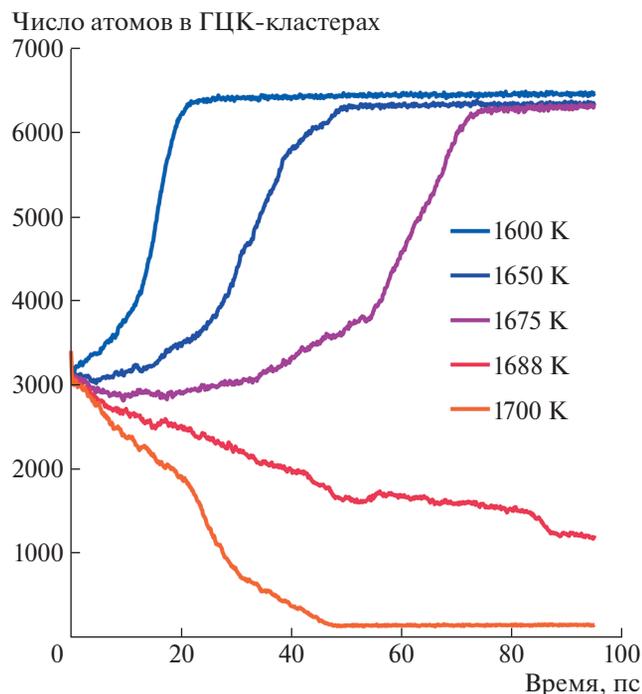


Рис. 5. Зависимость числа атомов в ГЦК-кластерах от времени для различных температур. Показаны усредненные данные для каждой температуры.

ла плавления [36]. Тем не менее сплав Кантора, согласно литературным данным, имеет очень узкий интервал плавления, поэтому применение термина “температура плавления” для этого случая на взгляд авторов оправдано.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе методом *ab initio* МД проведено моделирование системы CoCrFeMnNi при различных температурах. Методом машинного обучения был разработан потенциал межатомного взаимодействия для данной системы в виде набора искусственных нейронных сетей. Полученный потенциал был использован для проведения ряда классических молекулярно-динамических расчетов интерфейса “жидкость–твердый раствор”. На основании данных расчетов была получена температура плавления, отличающаяся от экспериментальной примерно на 4.6%, что является удовлетворительным согласием.

Достаточно интересным результатом явилось и то, что разработанный потенциал позволяет достаточно адекватно описывать интерфейс “жидкость–твердый раствор” несмотря на то, что в тренировочном наборе присутствовали только конфигурации расплава и твердого раствора.

Таким образом, получена модель поверхности потенциальной энергии для системы CoCrFeMnNi, хорошо описывающая как жидкое, так и твердое

состояния. Помимо этого, данная модель описывает границу раздела между жидкостью и кристаллом в исследуемой системе. Точность модели сопоставима с *ab initio* расчетами, при этом производительность расчетов с полученным потенциалом выше примерно на 4 порядка. При разработке потенциала не использовались подгоночные параметры, задаваемые человеком.

Улучшить полученную модель можно, введя в тренировочный набор конфигурации с интерфейсом “жидкость–твердый раствор”. Помимо этого, использование активного обучения вместо пассивного должно также улучшить разрабатываемую модель. Расширение существующего тренировочного набора на большие плотности позволит рассчитывать температуру плавления при различных давлениях.

БЛАГОДАРНОСТИ

При проведении работ был использован суперкомпьютер “Уран” ИММ УрО РАН.

ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-33-90171.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Otto F., Yang Y., Bei H., George E.P. // Acta Mater. 2013. V. 61. № 7. P. 2628–2638. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.01.042>
2. Zhang W., Tang R., Yang Z.B., Liu C.H., Chang H., Yang J.J., Liao J.L., Yang Y.Y., Liu N. // J. Nucl. Mater. 2018. V. 512. P. 15–24. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2018.10.001>
3. Tunes M.A., Vishnyakov V.M., Donnelly S.E. S // Thin Solid Films. 2018. V. 649. P. 115–120. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2018.01.041>
4. Kareer A., Waite J.C., Li B., Couet A., Armstrong D.E.J., Wilkinson A.J. // J. Nucl. Mater. 2019. V. 526. Article no. 151744. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.151744>
5. Popescu G., Ghiban B., Popescu C.A., Rosu L., Truscă R., Carcea I., Soare V., Dumitrescu D., Constantin I., Olaru M.T., Carlan B.A. // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2018. V. 400. № 2. Article no. 022049. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/400/2/022049>
6. Castro D., Jaeger P., Baptista A.C., Oliveira J.P. // Metals. 2021. V. 11. № 4. Article no. 648. <https://doi.org/10.3390/met11040648>
7. Yuan Y., Wu Y., Yang Z., Liang X., Lei Zh., Huang H., Wang H., Liu X., An K., Wu W., Lu Zh. // Mater. Res. Lett. 2019. V. 7. № 6. P. 225–231. <https://doi.org/10.1080/21663831.2019.1584592>

8. *Gludovatz B., Hohenwarter A., Catoor D., Chang E.H., George E.P., Ritchie R.O.* // *Science*. 2014. V. 345. № 6201. P. 1153–1158.
<https://doi.org/10.1126/science.1254581>
9. *Senkov O.N., Miracle D.B., Chaput K.J., Couznie J.-P.* // *J. Mater. Res.* 2018. V. 33. № 19. P. 3092–3128.
<https://doi.org/10.1557/jmr.2018.153>
10. *Li K., Khanna R., Zhang J., Li G., Li H., Jiang C., Sun M., Wang Z., Bu Y., Bouhadja M., Liu Z., Barati M.* // *J. Mol. Liq.* 2019. V. 290. Article no. 111204.
<https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111204>
11. *Etesami S.A., Asadi E.* // *J. Phys. Chem. Solids*. 2018. V. 112. P. 61–72.
<https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2017.09.001>
12. *Baskes M.I.* // *Phys. Rev. Lett.* 1987. Vol. 59. № 23. P. 2666.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.59.2666>
13. *Hong Q.-J., Van De Walle A.* // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 92. Article no. 20104.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.020104>
14. *Mishin Y.* // *Acta Mater.* 2021. V. 214. Article no. 116980.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.116980>
15. *Zunger A., Wei S.-H., Ferreira L.G., Bernard J.E.* // *Phys. Rev. Lett.* 1990. V. 65. № 3. P. 353–356.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.353>
16. *Van De Walle A., Tiwary P., De Jong M., Olmsted D.L., Asta M., Dick A., Shin D., Wang Y., Chen L.-Q., Liu Z.-K.* // *Calphad*. 2013. V. 42. P. 13–18.
<https://doi.org/10.1016/j.calphad.2013.06.006>
17. *Zaddach A.J., Niu C., Koch C.C., Irving D.L.* // *JOM*. 2013. V. 65. № 12. P. 1780–1789.
<https://doi.org/10.1007/s11837-013-0771-4>
18. *Gao M.C., Niu C., Jiang C., Irving D.L.* Applications of special quasi-random structures to high-entropy alloys / In: Gao M., Yeh J.W., Liaw P., Zhang Y. (eds.) *High-entropy alloys*. Springer, Cham., 2016. P. 333–368.
19. *Zhang Y., Maginn E.J.* // *J. Chem. Phys.* 2012. V. 136. № 14. P. 144116.
<https://doi.org/10.1063/1.3702587>
20. *Luo S.-N., Strachan A., Swift D.C.* // *J. Chem. Phys.* 2004. V. 120 № 24. P. 11640–11649.
<https://doi.org/10.1063/1.1755655>
21. *Phillpot S.R., Lutsko J.F., Wolf D., Yip S.* // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 40. № 5. P. 2831.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.2831>
22. *Morris J.R., Wang C.Z., Ho K.M., Chan C.T.* // *Phys. Rev. B*. 1994. V. 49. № 5. Article no. 3109.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.3109>
23. *Hoover W.G., Ree F.H.* // *J. Chem. Phys.* 2004. V. 120. No. 12. P. 4873–4878.
<https://doi.org/10.1063/1.1701730>
24. *Frenkel D., Ladd A.J.C.* // *J. Chem. Phys.* 1998. V. 108. № 7. P. 3188–3193.
<https://doi.org/10.1063/1.448024>
25. *Grochola G.* // *J. Chem. Phys.* 2004. V. 120. № 5. P. 2122–2126.
<https://doi.org/10.1063/1.1637575>
26. *Balyakin I.A., Yuryev A.A., Gelchinski B.R., Rempel A.A.* // *J. Phys. Condens. Matter*. 2020. V. 32. № 21. Article no. 214006.
<https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab6f87>
27. *Cantor B., Chang I.T.H., Knight P., Vincent A.J.B.* // *Mater. Sci. Eng. A*. 2004. V. 375–377. № 1–2 SPEC. ISS. P. 213–218.
<https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>
28. *Van de Walle A., Asta M., Ceder G.* // *Calphad*. 2002. V. 26. № 4. P. 539–553.
[https://doi.org/10.1016/S0364-5916\(02\)80006-2](https://doi.org/10.1016/S0364-5916(02)80006-2)
29. *Kresse G., Furthmüller J.* // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54. № 16. P. 11169.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
30. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. № 18. P. 3865.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
31. *Wang H., Zhang L., Han J., E W.* // *Comput. Phys. Commun.* 2018. V. 228. P. 178–184.
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.03.016>
32. *Zhang L., Han J., Wang H., Saidi W.A., Car R., E W.* // 32nd Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2018), Montréal, Canada. 2018, P. 4441–4451.
33. *Larsen P.M., Schmidt S., Schiøtz J.R.* // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 2016. V. 24. № 5. Article no. 055007.
<https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/5/055007>
34. *Stukowski A.* // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 2009. V. 18. № 1. Article no. 015012.
<https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
35. *Vaidya M., Trubel S., Murty B.S., Wilde G., Divinski S.V.* // *J. Alloys Compd.* 2016. V. 688. P. 994–1001.
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.07.239>
36. *Galvin C.O.T., Grimes R.W., Burr P.A.* // *Comput. Mater. Sci.* 2021. V. 186. P. 110016.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110016>

ATOMISTIC CALCULATION OF THE MELTING TEMPERATURE OF HIGH-ENTROPIC CANTOR ALLOY CoCrFeMnNi

I. A. Balyakin^{a,b,#} and Academician of the RAS A. A. Rempel^{a,b}

^a*Institute of Metallurgy of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, 620016, Yekaterinburg, Russian Federation*

^b*“NANOTECH” Centre, Ural Federal University, 620002 Yekaterinburg, Russian Federation*

[#]*E-mail: i.a.balyakin@gmail.com*

Classical molecular dynamics method was used for calculation of melting point of Cantor high-entropy alloy CoCrFeMnNi. Interatomic potential in a form of set of artificial neural networks was used during the simulation. Neural network coefficients were optimized using machine learning technique on *ab initio* molecular dynamics data obtained by the authors. *Ab initio* molecular dynamics simulation was carried out for wide range of temperatures from the same crystalline initial state. Initial state for *ab initio* simulations was a special quasirandom structure optimized on pairs of the nearest neighbors. Two-phase method was used for the calculation of melting point, this method is based on moving of interphase boundary in a system “crystal–melt”. It should be mentioned, that despite the fact, that training set didn’t contain explicit two-phase configurations, computed melting point appeared to be in a satisfactory agreement with available experimental data. Thus, we were able to compute melting point of CoCrFeMnNi high-entropy alloy, without using any empirical data.

Keywords: high-entropy alloys, Cantor alloy, molecular dynamics, *ab initio* molecular dynamics, melting point, machine learning, artificial neural network