

УДК 544.228

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО КАРБИДА ($\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}$)C С ПРИМЕНЕНИЕМ ПОТЕНЦИАЛА МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

© 2024 г. Н. С. Пикалова¹, И. А. Балякин^{1,2}, А. А. Юрьев¹, академик А. А. Ремпель^{1,*}Поступило 01.08.2023 г.
После доработки 16.02.2024 г.
Принято к публикации 19.02.2024 г.

Изучен шестикомпонентный высокоэнтропийный карбид (ВЭК) ($\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}$)C. Электронная структура рассчитывалась *ab initio* с помощью пакета VASP для суперячейки из 512 атомов, построенной с применением специальных квазислучайных структур. Путем глубокого машинного обучения получен потенциал искусственных нейронных сетей (ИНС-потенциал), качество которого оценивалось по величине среднеквадратичных отклонений энергий, сил и вириалов. Сгенерированный ИНС-потенциал использовался в пакете классической молекулярной динамики LAMMPS для анализа как бездефектной модели указанного сплава, состоящей из 4096 атомов, так и впервые для модели поликристаллического ВЭК, состоящей из 4603 атомов. Было проведено моделирование одноосного растяжения ячейки, определены коэффициенты упругости, модуль всестороннего сжатия, модуль упругости и коэффициент Пуассона. Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными и расчетными данными, что говорит о хорошей предсказательной способности сгенерированного потенциала.

Ключевые слова: высокоэнтропийная керамика, *ab initio* молекулярная динамика, потенциал машинного обучения, механические свойства

DOI: 10.31857/S2686953524010073

ВВЕДЕНИЕ

Разработка и получение материалов с заданными свойствами является одной из основных проблем современной химии. Традиционный метод решения этой задачи для металлических сплавов состоит в выборе основного элемента и последующем его легировании. Однако в начале 2000-х гг. появилась и начала развиваться идея создания сплавов, состоящих из пяти и более основных элементов, взятых в примерно равных атомных концентрациях. Почти одновременно несколькими независимыми группами исследователей был разработан новый тип материалов, получивший название высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) [1, 2].

Открытие высокоэнтропийных сплавов, состоящих из металлов, поспособствовало появ-

лению интереса к разработке и других материалов, в частности, высокоэнтропийных керамик, состоящих из неупорядоченных катионных подрешеток металлов в сочетании с анионными подрешетками оксидов, нитридов, силицидов, сульфидов, боридов или карбидов. Такие материалы обладают превосходными термомеханическими свойствами, термодинамической стабильностью и высокой устойчивостью к окислению [3, 4]. Керамики из высокоэнтропийных карбидов металлов (ВЭК) кажутся особо привлекательными за счет их стойкости к экстремальным температурам, окислению и износу, что делает их перспективным высокотемпературным материалом для создания защитных покрытий в аэрокосмической промышленности, а также высокопрочных сверл и режущих инструментов, использующихся в горнодобывающей промышленности [5, 6]. Теоретических работ по описанию их свойств в литературе достаточно мало.

В настоящее время с увеличением вычислительных мощностей современных компьютеров и развитием электронной теории стало возможно качественное и количественное прогнозирование различных свойств многокомпонентных

¹ Институт металлургии Уральского Отделения
Российской академии наук, 620016
Екатеринбург, Россия

² НОЦ НАНОТЕХ, Уральский федеральный
университет им. Б.Н. Ельцина, 620002
Екатеринбург, Россия

* E-mail: rempel.imet@mail.ru

систем из первых принципов [7]. Это особенно актуально для ВЭС, учитывая большое количество комбинаций элементов, которые невозможно исследовать экспериментально в полном объеме. К настоящему времени разработаны методы расчета электронной структуры для кристаллических материалов с дальним порядком, имеющих элементарную ячейку с относительно небольшим числом атомов. Самым используемым подходом в настоящее время является теория функционала плотности (DFT, *density functional theory*) [8, 9]. Расчеты на основе DFT дают достаточно точные значения энергии системы, учитывая химическую сложность многокомпонентных материалов. Однако у высокоэнтропийных материалов нет дальнего порядка, поэтому для данных систем нельзя выделить элементарную ячейку. Приходится использовать суперячейки с большим числом атомов, что резко увеличивает время вычислений. Решением проблем с расчетом электронной структуры ВЭС может являться использование специальных квазислучайных структур (СКС) [10] — особого способа расположения конечного числа атомов для имитации бесконечного неупорядоченного твердого раствора. СКС являются лучшей для ВЭС альтернативой распределения атомов с использованием генератора случайных чисел, которое, в свою очередь, создает искусственный ближний порядок в атомном расположении, что нежелательно при моделировании полностью неупорядоченных систем.

Используя данные об электронной и ядерной подсистемах, полученные в рамках DFT, применяя теорему Гельмана–Фейнмана, можно найти силы, действующие на ядра. Затем через решение уравнений движения Ньютона вычисляются траектории ядер. В этом состоит суть метода *ab initio* молекулярной динамики (AIMD, *ab initio molecular dynamics*) [11]. Однако в силу ограниченной производительности моделирование динамики конденсированных тел данным методом затруднено, поскольку времена релаксации для них достаточно велики. Расчет методом классической молекулярной динамики (МД) [12] освобождает от необходимости проводить DFT-расчет при каждом новом положении атомов. В силу этого метод классической МД обладает существенно более высокой производительностью. Главная сложность данного метода заключается в выборе подходящего потенциала взаимодействия между атомами или, что то же

самое, в задании поверхности потенциальной энергии (ППЭ).

В последние годы активно развиваются подходы к созданию многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия с использованием машинного обучения (МО) и искусственных нейронных сетей (ИНС) [13]. Результаты *ab initio* расчетов могут применяться для обучения ИНС-потенциалов, используемых в классической молекулярной динамике. Такое сочетание методов *ab initio*, машинного обучения и классической МД позволяет проводить моделирование системы за время, сравнимое со временем расчетов в классической МД, но с точностью, сравнимой с DFT-расчетами.

В данной работе вышеописанные подходы впервые применены для прогнозирования широкого круга механических свойств шестикомпонентного высокоэнтропийного карбида $(\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})\text{C}$, имеющего структуру типа B1, состоящего из двух подрешеток — металлической и углеродной. Была создана модель карбида, проведены расчеты электронной структуры методом функционала плотности, на основе которых с использованием машинного обучения и искусственных нейронных сетей был создан потенциал межатомного взаимодействия (ИНС-потенциал). Полученный потенциал затем использовался в моделировании методом классической молекулярной динамики.

МЕТОДЫ

Металлическая подрешетка высокоэнтропийного карбида, состоящая из 256 атомов, создавалась с использованием специальных квазислучайных структур, сгенерированных в программе ATAT [14]. Полученная структура расширялась до 512 атомов путем добавления углеродной подрешетки. Для *ab initio* расчетов электронной структуры ВЭС использовался программный пакет VASP (*Vienna Abinitio Simulation Package*) [15]. Была исследована неопределенность энергии системы в зависимости от всевозможных $5! = 120$ перестановок типов атомов в СКС-металлической подрешетке. Разброс значений полной энергии на один атом составляет ± 0.00251 эВ/атом, среднее значение составляет -10.18754 эВ/атом, что ниже среднего значения энергии для случайного расположения атомов (рис. 1). Видно, что энергия рассматриваемой системы слабо зависит от атомной конфигура-

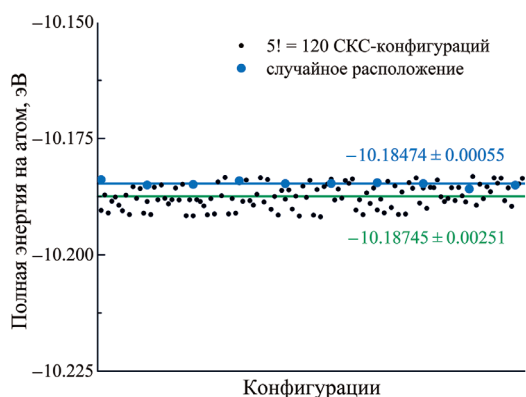


Рис. 1. Значение полной энергии системы на один атом для разных СКС-конфигураций (черные точки) и случайных конфигураций (синие точки) и их средние значения.

ции, поэтому для исследования свойств карбида можно использовать любое из его начальных СКС-состояний.

В работе использовался ИНС-потенциал, полученный с помощью программы DeePMD [16]. Для создания межатомного потенциала МО требуется сформировать обучающий набор данных, т.е. поставить в соответствие каждой атомной конфигурации потенциальную энергию, силы и вириалы, которые рассчитаны в рамках DFT с использованием VASP. Обменно-корреляционное взаимодействие описывалось с использованием приближения обобщенного градиента (GGA, *general gradient approximation*) с функционалом PBE (*Perdew–Burke–Ernzerhof*) и псевдопотенциалов проекционных плоских волн (PAW, *projector augmented wave*) [17]. Следует отметить, что для элементов переходных металлов IV–VI групп важно использовать псевдопотенциалы с размороженными полуостовными состояниями (что и было сделано в данной работе), поскольку для этих металлов *s*- и *p*-состояния не экранированы достаточно для того, чтобы считать их замороженными. Для C, Ti, Zr, Hf, Nb, Ta использовались 4, 12, 12, 10, 13, 11 валентных электронов соответственно. Критерий сходимости самосогласованного расчета по энергии был выбран равным 10^{-5} эВ. Расчет проводился в Γ -точке (в центре) зоны Бриллюэна. Энергия отсечки базиса плоских волн составляла 400 эВ.

Ab initio молекулярно-динамический расчет проводился при температуре 1000 К и давлении 1 атм в каноническом ансамбле NPT (при постоянном числе частиц N , давлении P и температуре T) с термостатом Нозе–Гувера и учетом

периодических граничных условий. Исходная конфигурация из 512 атомов соответствовала бездефектной кристаллической, полученной алгоритмом генерации СКС, количество шагов *ab initio* МД составляло 5000, временной шаг 2 фс. Таким образом, обучающая выборка состояла из 5000 конфигураций.

Ключевой проблемой любого метода разработки межатомных потенциалов МО является преобразование атомных координат в набор структурных дескрипторов, сохраняющих трансляционную, вращательную и перестановочную симметрии. В данной работе использовалась гладкая версия (DeepPot-SE) [18] пакета DeePMD, где это преобразование выполняется с использованием гладкой и непрерывной сети погружения. Полученные на предыдущем этапе потенциальные энергии, силы и вириалы с весами 5, 500 и 5 соответственно использовались для установления параметров функции потерь модели. Радиус сглаживания дескрипторов и радиус отсечки взаимодействия составляли 4 и 7 Å соответственно. Нами были выбраны следующие архитектуры ИНС: нейронная сеть погружения имела два скрытых слоя по 25 и 50 узлов, а атомная нейронная сеть представляла собой три скрытых слоя по 250 узлов каждый. Начальная скорость обучения составляла 0.001, конечная скорость была в 100 раз ниже. Количество эпох обучения составляло 100000, размер обучающего пакета был равен 1.

Качество полученного ИНС-потенциала оценивалось с помощью среднеквадратичных отклонений (СКО) для энергий и сил, рассчитанных с помощью данного потенциала, по сравнению с результатами *ab initio* расчетов. Среднеквадратичное отклонение для энергии состав-

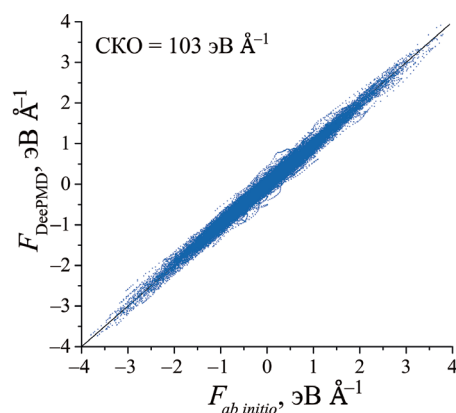


Рис. 2. Корреляции между DeePMD и *ab initio* силами.

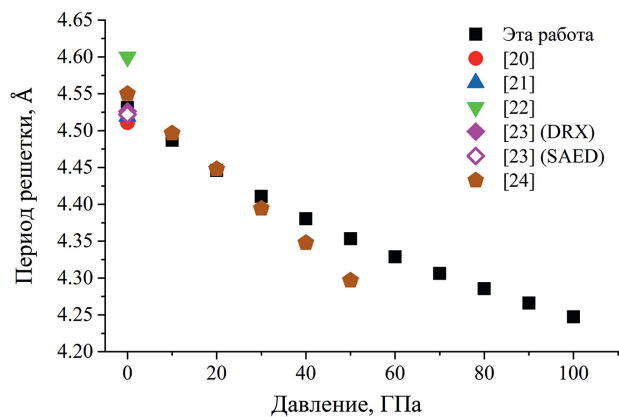


Рис. 3. Периоды решетки $(\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})\text{C}$ для различных давлений системы в сравнении с данными работ других авторов: [21–23] (эксперимент), [20, 24] (расчет).

ляло порядка 10^{-3} эВ/атом. СКО для сил вносит основной вклад в функцию потерь и составляет $103 \text{ мэВ } \text{\AA}^{-1}$ (рис. 2), а значит, полученный потенциал хорошо воспроизводит *ab initio* данные.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

С использованием полученного ИНС-потенциала методом классической молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS [19] исследовались структурные характеристики бездефектной модели указанного сплава, состоящей из 4096 атомов, при давлениях от 1 до 100 ГПа и температуре 300 К в ансамбле NPT при периодических граничных условиях. Временной отрезок атомных траекторий был равен 100 пс (50000 шагов). Рассчитанное уравнение состояния (зависимость периода решетки от давления) в сравнении с данными работ других авторов приведено на рис. 3. В целом период решетки при нулевом давлении совпадает с экспериментальными [21–23] и расчетными [20, 24] данны-

ми других авторов. Полученная зависимость периода решетки от давления в данной работе имеет экспоненциальный характер, тогда как в работе [24] только с применением метода DFT и суперячейки, состоящей из 64 атомов, получился линейный характер. Кроме того, в [24] не учитывались полустовные состояния, и наши данные представляются более точными и физическими, так как параметр решетки не может меняться линейно вплоть до сверхвысоких давлений.

Коэффициенты упругости были получены путем деформации ячейки моделирования в каждом из шести направлений при давлении 1 атм и температуре 300 К и расчета изменения тензора напряжений с использованием готового сценария LAMMPS. С помощью полученных коэффициентов в приближении Фойгта–Ройсса–Хилла [25] были вычислены модуль всестороннего сжатия K , модуль сдвига G , модуль упругости E и коэффициент Пуассона μ и сравнены с расчетными и экспериментальными данными других авторов (табл. 1).

Из табл. 1 видно, что полученные значения хорошо согласуются как с экспериментальными [26, 27], так и с расчетными данными [20, 24, 28].

В рассмотренных работах моделируется бездефектный кристалл, однако экспериментально получаются, как правило, поликристаллы. Поэтому представляет интерес моделирование и изучение свойств поликристаллического высокоэнтропийного карбида.

Моделирование поликристалла. Для создания модели поликристалла использовался алгоритм построения мозаики Вороного, реализованный в программном пакете AtomsK [29]. Была сгенерирована ячейка, состоящая из 10 зерен со средним линейным размером 2 нм. Общее число атомов было 4603.

Таблица 1. Коэффициенты и модули упругости $(\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})\text{C}$

Источник	C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа	C_{44} , ГПа	K , ГПа	G , ГПа	E , ГПа	μ , ГПа
Эта работа	469.4	129.3	194.1	250.8	186.7	448.7	0.202
Эксп. [26]						445	
Эксп. [27]						473 ± 37	
Расч. [20]				254	186	479	
Расч. [24]	560.7	116.2	168.2	264.4	188.1	456.1	0.2
Расч. [28]	498	139	178	259	180	438	

Исследование поликристаллического ВЭК потребовало дообучения ИНС-потенциала, т.к. из-за разного поворота и наличия границ зерен возникли такие конфигурации, в которых атомы располагались далеко от состояний, используемых при обучении и описании межатомных взаимодействий. Для расширения обучающего набора данных ИНС-потенциала использовался метод активного обучения, реализованный в ПО DP-GEN [30]. Были добавлены конфигурации исходно кристаллического ВЭК, нагретого до температуры 4000 К, конфигурации жидкостей, полученные методом МД-моделирования с помощью потенциала Леннарда–Джонса [31], а также конфигурации монокарбидов и углерода. Нужно заметить, что стабильная работа ИНС-потенциала в модели поликристалла была достигнута только после добавления в обучающий набор конфигураций монокарбидов.

Было проведено сравнительное МД-моделирование одноосного растяжения в направлении $\langle 100 \rangle$ бездефектного бесконечного и поликристаллического высокоэнтропийного карбида $(\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})\text{C}$ (рис. 4).

Для высокоэнтропийного карбида с наноразмерными зернами с одной стороны предсказан более низкий предел прочности, а с другой — увеличение предельной деформации. Модуль Юнга, полученный как тангенс угла наклона на начальном линейном участке, для бездефектного кристалла равняется 432.3 ГПа, а для поликристаллического — 204.5 ГПа. Подобный размерный эффект, связанный с наноразмерными зернами поликристалла, наблюдался в работе [32].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе искусственных нейронных сетей был сгенерирован потенциал машинного обучения, проверена его точность и определена минимальная обучающая выборка для решения различных задач. Показано, что для прогнозирования структурных и механических свойств высокоэнтропийных карбидов с использованием бездефектного бесконечного кристалла достаточно использовать при обучении расчеты *ab initio*, проведенные при 1000 К и 1 атм. Для моделирования и исследования более сложной конфигурации, имеющей дислокации, границы зерен и другие дефекты, необходимо включать в обучающий набор жидкости и монокарбиды.

С использованием разработанного ИНС-потенциала были определены структурные и меха-

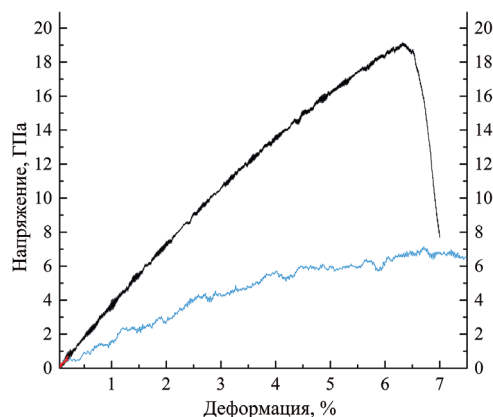


Рис. 4. График зависимости давления поликристаллической системы от относительного удлинения (синяя линия) в сравнении с монокристаллической (черная линия).

нические характеристики высокоэнтропийного карбида $(\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})\text{C}$, которые хорошо соотносятся с экспериментальными и расчетными данными других авторов.

Проведено сравнительное растяжение бездефектной бесконечной модели карбида и модели, имеющей поликристаллическую структуру, состоящую из зерен карбида с линейным размером порядка 2 нм. Получен эффект наноразмерных систем, который проявляется в сильной зависимости предела прочности и предельной деформации от размера зерен в нанометровом диапазоне.

Разработанный потенциал машинного обучения на основе нейронных сетей в дальнейшем может быть использован для изучения механизма зарождения дислокаций в шестикомпонентном высокоэнтропийном карбиде $(\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})\text{C}$. Также возможно дальнейшее изучение влияния размера зерен на характеристики ВЭК. Подобная методика моделирования высокоэнтропийных карбидов и отбора конфигураций для обучения ИНС-потенциалов может применяться для исследования структуры и свойств малоизученных ВЭК.

БЛАГОДАРНОСТИ

Расчеты проведены на суперкомпьютере “Уран” ИММ УрО РАН.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИМЕТ УрО РАН.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Yeh J.-W., Chen S.-K., Lin S.-J., Gan J.-Y., Chin T.-S., Shun T.-T., Tsau C.-H., Chang S.-Y. // *Adv. Eng. Mater.* 2004. V. 6. № 5. P. 299–303.
<https://doi.org/10.1002/adem.200300567>
2. Cantor B., Chang I.T.H., Knight P., Vincent A.J.B. // *Mater. Sci. Eng., A.* 2004. V. 375. P. 213–218.
<https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>
3. Rost C.M., Sachet E., Borman T., Moballeghe A., Dickey E.C., Hou D., Jones J.L., Curtarolo S., Maria J.-P. // *Nat. Commun.* 2015. V. 6. P. 8485–8492.
<https://doi.org/10.1038/ncomms9485>
4. Gild J., Zhang Y., Harrington T., Jiang S., Hu T., Quinn M.C., Mellor W.M., Zhou N., Vecchio K., Luo J. // *Sci. Rep.* 2016. V. 6. P. 37946.
<https://doi.org/10.1038/srep37946>
5. Han X., Girman V., Sedláč R., Dusza J., Castle E., Wang Y., Reece M., Zhang C. // *J. Eur. Ceram. Soc.* 2020. V. 40. № 7. P. 2709–2715.
<https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2019.12.036>
6. Sarker P., Harrington T., Toher C., Oses C., Samiee M., Maria J.-P., Brenner D.W., Vecchio K.S., Curtarolo S. // *Nat. Commun.* 2018. V. 9. P. 4980.
<https://doi.org/10.1038/s41467-018-07160-7>
7. Gelchinski B.R., Balyakin I.A., Yuryev A.A., Rempel A.A. // *Russ. Chem. Rev.* 2022. V. 91. № 6. P. RCR5023.
<https://doi.org/10.1070/RCR5023>
8. Hohenberg P., Kohn W. // *Phys. Rev.* 1964. V. 136. № 3B. P. B864.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
9. Kohn W., Sham L.J. // *Phys. Rev.* 1965. V. 140. № 4A. P. A1133.
<https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
10. 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>
11. Гельчинский Б.Р., Мирзоев А.А., Воронцов А.Г. Вычислительные методы микроскопической теории металлических расплавов и нанокластеров. М.: Физматлит, 2011. 200 с.
12. Alder B.J., Wainwright T.E. // *J. Chem. Phys.* 1957. V. 27. P. 1208–1209.
<https://doi.org/10.1063/1.1743957>
13. Mishin Y. // *Acta Mater.* 2021. V. 214. P. 116980.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.116980>
14. Alloy Theoretic Automated Toolkit (ATAT) // <https://www.brown.edu/Departments/Engineering/Labs/avdw/atat/> (ссылка активна на 16.02.2024).
15. The Vienna *Ab initio* Simulation Package: atomic scale materials modelling from first principles // <https://www.vasp.at/> (ссылка активна на 16.02.2024).
16. 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>
17. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. № 18. P. 3865–3868.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
18. Zhang L., Han J., Wang H., Saidi W.A., Car R., E W. End-to-End Symmetry Preserving Inter-Atomic Potential Energy Model for Finite and Extended Systems. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*. V. 31. Curran Associates, Inc., 2018. Montréal, Canada. P. 4436–4446.
19. Thompson A.P., Aktulga H.M., Berger R., Bolintineanu D.S., Brown W.M., Crozier P.S., In 'T Veld P.J., Kohlmeyer A., Moore S.G., Nguyen T.D., Shan R., Stevens M.J., Tranchida J., Trott C., Plimpton S.J. // *Comput. Phys. Commun.* 2022. V. 271. P. 10817.
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
20. Zhang Q., Zhang J., Li N., Chen W. // *J. Appl. Phys.* 2019. V. 126. P. 025101.
<https://doi.org/10.1063/1.5094580>
21. Ge H., Cui C., Song H., Tian F. // *Metals*. 2021. V. 11. № 9. P. 1399.
<https://doi.org/10.3390/met11091399>
22. Braic V., Vladescu A., Balaceanu M., Luculescu C., Braic M. // *Surf. Coat. Technol.* 2012. V. 211. P. 117–121.
<https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2011.09.033>
23. Chicardi E., García-Garrido C., Hernández-Saz J., Gotor F.J. // *Ceram. Int.* 2020. V. 46. № 13. P. 21421–21430.
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.05.240>
24. Yang Y., Wang W., Gan G.-Y., Shi X.-F., Tang B.-Y. // *Physica B: Condens. Matter*. 2018. V. 550. P. 163–170.
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.09.014>
25. Akrami S., Edalati P., Fuji M., Edalati K. // *Mater. Sci. Eng., R.* 2021. V. 146. P. 100644.
<https://doi.org/10.1016/j.mser.2021.100644>
26. Harrington T., Gild J., Sarker P., Toher C., Rost C., Dippo O., McElfresh C., Kaufmann K., Marin E., Borowski L., Hopkins P., Luo J., Curtarolo S., Brenner D., Vecchio K. // *Acta Mater.* 2019. V. 166. P. 271–280.
<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.12.054>
27. Moskovskikh D.O., Vorotilo S., Sedegov, A.S., Kuskov K.V., Bardasova K.V., Kiryukhantsev-Korneev P.V., Zhukovskiy M., Mukasyan A.S. // *Ceram. Int.* 2020. V. 46. P. 19008–19014.
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2020.04.230>
28. Dai F.-Z., Wen B., Sun Y., Xiang H., Zhou Y. // *J. Mater. Sci. Technol.* 2020. V. 43. P. 168–174.
<https://doi.org/10.1016/j.jmst.2020.01.005>
29. Hirel P. // *Comput. Phys. Commun.* 2015. V. 197. P. 212–219.
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012>
30. Zhang Y., Wang H., Chen W., Zeng J., Zhang L., Wang H., E W. // *Comput. Phys. Commun.* 2020. V. 253. P. 107206.
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107206>

31. *Lennard-Jones J.E.* // Proc. Phys. Soc. 1931. V. 43. № 5. P. 461–482.
<https://doi.org/10.1088/0959-5309/43/5/301>
32. *Becton M., Wang X.* // Phys. Chem. Chem. Phys. 2015. V. 17. P. 21894–21901.
<https://doi.org/10.1039/c5cp03460d>

HIGH-ENTROPY CARBIDE ($\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}$)C MECHANICAL PROPERTIES PREDICTION WITH THE USE OF MACHINE LEARNING POTENTIAL

N. S. Pikalova^a, I. A. Balyakin^{a,b}, A. A. Yuryev^a, Academician of the RAS A. A. Rempel^{a,#}

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

^b*NANOTECH Centre, Ural Federal University, 620002 Ekaterinburg, Russian Federation*

[#]*E-mail: rempel.imet@mail.ru*

The six-component high-entropy carbide (HEC) ($\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}$)C has been studied. The electronic structure was calculated by using the *ab initio* package VASP for a supercell with 512 atoms constructed by using special quasi-random structures. The artificial neural networks potential (ANN-potential) was obtained by deep machine learning. The quality of the ANN-potential was estimated by the value of the energies, forces, and virials standard deviations. The generated ANN-potential was used to analyze both a defect-free model of the specified alloy, with 4096 atoms, and for the first time a polycrystalline HEC model, with 4603 atoms, by using the LAMMPS classical molecular dynamics package. The simulation of uniaxial cell tension was carried out, the elasticity coefficients, the all-round compression modulus, the elasticity modulus, and Poisson's ratio were determined. The obtained values are in good agreement with the experimental and calculated data, which indicates a good predictive ability of the generated ANN-potential.

Keywords: high-entropy ceramics, *ab initio* molecular dynamics, machine learning potential, mechanical properties