



Краткое сообщение

УДК 669:541.1

DOI 10.17073/0368-0797-2021-3-214-216



ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ СПЛАВЫ И ПЕРИОДИЧЕСКАЯ ТАБЛИЦА ЭЛЕМЕНТОВ Д.И. МЕНДЕЛЕЕВА

Е. Г. Винокуров^{1,2}, В. В. Фарафонов², В. П. Мешалкин^{1,3}

¹ Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева (Россия, 125047, Москва, Миусская пл., 9)

² Всероссийский институт научной и технической информации РАН (Россия, 125190, Москва, ул. Усиевича, 20)

³ Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН (Россия, 119991, Москва, Ленинский пр., 31)

Аннотация. Показано, что для решения задачи выбора составов высокоэнтропийных сплавов (ВЭС), состоящих из пяти и более элементов, необходимо использовать методы, учитывающие множество переменных и сложность оценки взаимосвязей между ними. На основе химико-информационных подходов к анализу баз данных Web of Science получены сведения о частоте применения химических элементов в описанных ВЭС, которые позволяют определить тренды в исследовании и разработке новых материалов.

Ключевые слова: высокоэнтропийные сплавы, состав, химические элементы, частота применения, базы данных Web of Science, химико-информационный анализ

Для цитирования: Винокуров Е.Г., Фарафонов В.В., Мешалкин В.П. Высокоэнтропийные сплавы и периодическая таблица элементов Д.И. Менделеева // Известия вузов. Черная металлургия. 2021. Т. 64. № 3. С. 214–216. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2021-3-214-216>

Short report

HIGH-ENTROPY ALLOYS AND THE PERIODIC TABLE OF ELEMENTS

E. G. Vinokurov^{1,2}, V. V. Farafonov², V. P. Meshalkin^{1,3}

¹ D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (9 Miusskaya Sqr., Moscow 125047, Russian Federation)

² Institute of Scientific and Technical Information, Russian Academy of Sciences (20 Usievicha Str., Moscow 125190, Russian Federation)

³ Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry, Russian Academy of Sciences (31 Leninskii Ave., Moscow 119991, Russian Federation)

Abstract. To select the compositions of high-entropy alloys (HEA) consisting of five or more elements, it is necessary to use methods that take into account many variables and the complexity of assessing the relationships between them. Based on chemical information approaches to the analysis of Web of Science databases, data on the frequency of use of chemical elements in the described HEAs were obtained, which allow us to determine trends in the research and development of new materials.

Keywords: high-entropy alloys, composition, chemical elements, frequency of application, Web of Science databases, chemical information analysis

For citation: Vinokurov E.G., Farafonov V.V., Meshalkin V.P. High-entropy alloys and the periodic table of elements. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2021, vol. 64, no. 3, pp. 214–216. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2021-3-214-216>

Определенным успехом в создании конструкционных материалов стала разработка нового типа сплава, обозначенного как «High-Entropy Alloys» (HEA) [1] (высокоэнтропийные сплавы (ВЭС)), содержащего пять и более элементов в относительно эквимолярном соотношении.

По данным Scopus рост числа публикаций, связанных с HEA, стремительно растет: в 2015 г. опубликовано 289 работ, а за 10 месяцев 2020 г. их число составило 1393. После расширения концепции высокоэнтропийных сплавов и появления нового понятия высокоэнтропийные материалы (ВЭМ) число публикаций многократно увеличилось [2].

В работе [3] при обсуждении перспективы улучшения только одного свойства (коррозионная стойкость) отмечено наличие большого количества комбинаторных возможностей в ВЭС, поэтому для решения задачи выбора составов с конкретными свойствами потребуются применение информатики, учитывая множество переменных и сложность оценки всех взаимосвязей.

Химико-информационный подход и его применение к изучению различных сложных систем описан в ряде работ [3 – 7], в том числе при изучении термодинамических характеристик для описания принципов формирования структур ВЭС с необходимыми функциональными характеристиками [8].

В настоящем сообщении рассматривается частота применения различных химических элементов в составе ВЭС. Для анализа использованы все базы данных Web of Science, в которых 01.01.2021 формировался запрос «high entropy alloy» и, таким образом, была получена проблемно-ориентированная база (ПОБ), содержащая 13 426 записей. В данном массиве записей проведен анализ встречаемости химических элементов в составе известных ВЭС, для чего выделены записи, содержащие название химического элемента таблицы Д.И. Менделеева и определены: N – количество записей, соответствующих данному элементу в общем массиве; i – количество информации, равное $\log_2 N$.

На рис. 1 представлена зависимость количества информации (i) по каждому химическому элементу от его порядкового номера (Z) в таблице Д.И. Менделеева.

Несмотря на периодическое изменение i с увеличением порядкового номера элемента, что характерно для многих свойств элементов и отражено в фундаментальном законе Д.И. Менделеева о периодическом изменении свойств в зависимости от величины зарядов ядер их атомов, в целом наблюдается уменьшение частоты использования в ВЭС элементов с увеличением их порядкового номера в таблице Д.И. Менделеева. Экспериментальное значение коэффициента линейной корреляции (r) зависимости $i = f(Z)$, равное по абсолютной величине 0,609, превышает критическое значение 0,28 для доверительной вероятности 0,99 и числа степеней свободы 82. Это свидетельствует о достоверности уменьшения частоты использования в ВЭС элементов с увеличением их порядкового номера в таблице Д.И. Менделеева.

Выделение точек над и под линией тренда $i = f(Z)$ позволяет построить ряды наиболее и наименее часто используемых элементов в составе ВЭС и может быть

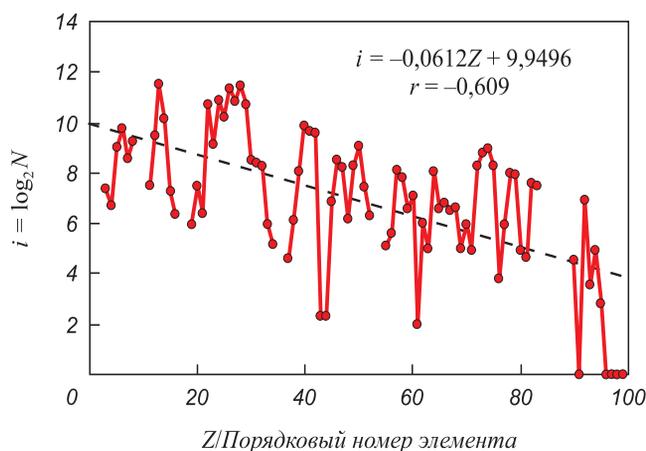


Рис. 1. Зависимость количества информации по элементам таблицы Д.И. Менделеева, используемым в составе ВЭС (данные на 01.01.2021 в базе данных Web of Science)

Fig. 1. Dependence of amount of information on elements of the periodic table used as part of HEA (data as of 01.01.2021 in Web of Science database)

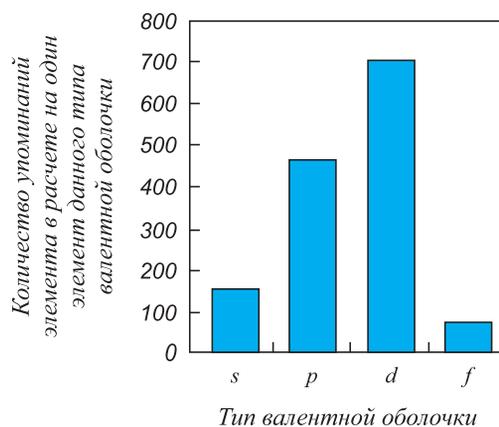
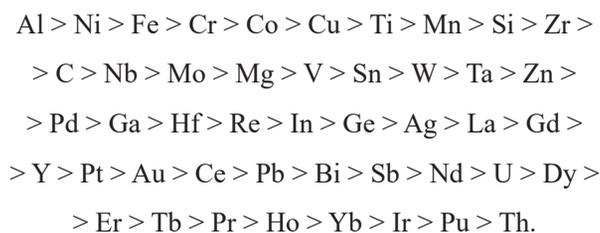


Рис. 2. Влияние типа валентной оболочки химического элемента на частоту его применения в составе ВЭС

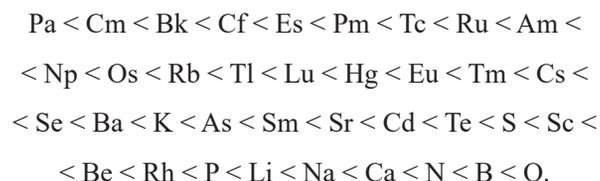
Fig. 2. Influence of the type of chemical element valence shell on frequency of its use as part of HEA

учтено исследователями в подборе компонентов ВЭС.

Наиболее часто встречаемые элементы в составе ВЭС (данные над линией тренда) можно расположить в ряд в порядке уменьшения i :



Наименее часто встречаемые элементы в составе ВЭС (данные под линией тренда) в порядке возрастания i располагаются следующим образом:



Среди всех рассмотренных элементов наиболее часто в составе ВЭС упоминаются d -элементы, затем p -элементы и значительно меньше s - и f -элементы (рис. 2).

Таким образом, полученные данные в наглядной форме указывают на наличие определенных трендов в развитии исследований новых материалов и перспективность предложенного химико-информационного подхода для анализа связей между химическими элементами и свойствами ВЭС. Полученные данные позволяют ограничить число объектов для исследования, что важно, в частности, при разработке моделей, направленных на прогнозирование свойств.

Выводы

Предложенный подход к анализу больших массивов экспериментальных результатов в приложении к слож-

ным многокомпонентным системам, в частности ВЭС, имеет теоретическое и практическое значение и направлен на разработку сплавов с заданным комплексом эксплуатационных характеристик.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

REFERENCES

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. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes // *Advanced Engineering Materials*. 2004. Vol. 6. No. 5. P. 299–303. <http://doi.org/10.1002/adem.200300567>
2. Yeh J.-W., Lin S.-J. Breakthrough applications of high-entropy materials // *Journal of Materials Research*. 2018. Vol. 33. No. 19. P. 3129–3137. <http://doi.org/10.1557/jmr.2018.283>
3. Gerard A.Y., Lutton K., Lucente A., Frankel G.S., Scully J.R. Progress in understanding the origins of excellent corrosion resistance in metallic alloys: from binary polycrystalline alloys to metallic glasses and high entropy alloys // *Corrosion*. 2020. Vol. 76. No. 5. P. 485–499. <https://doi.org/10.5006/3513>
4. Vinokurov E.G., Bondar' V.V. Logistic model for choosing ligands for alloy electrodeposition // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2007. Vol. 41. No. 4. P. 384–391. <http://doi.org/10.1134/S0040579507040070>
5. Semenova A.A., Tarasov A.B., Goodilin E.A. Periodic table of elements and nanotechnology // *Mendelev Communications*. 2019. Vol. 29. No. 5. P. 479–485. <http://doi.org/10.1016/j.mencom.2019.09.001>
6. Винокуров Е.Г., Марголин Л.Н., Фарафонов В.В. Электроосаждение композиционных покрытий // *Известия вузов. Химия и химическая технология*. 2020. Т. 63. № 8. С. 4–38. <http://doi.org/10.6060/ivkkt.20206308.6212>
7. Бурухина Т.Ф., Винокуров Е.Г., Напеденина Е.Ю. Анализ распределения и критерии ресурсоемкости электролитов по суммарной концентрации компонентов // *Гальванотехника и обработка поверхности*. 2019. Т. 27. № 1. С. 43–48. http://doi.org/10.47188/0869-5326_2019_27_1_43
8. Ремпель А.А., Гельчинский Б.Р. Высокоэнтропийные сплавы: Получение, свойства, практическое применение // *Известия вузов. Черная металлургия*. 2020. Т. 63. № 3-4. С. 248–253. <http://doi.org/10.17073/0368-0797-2020-3-4-248-253>
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. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials*. 2004, vol. 6, no. 5, pp. 299–303. <http://doi.org/10.1002/adem.200300567>
2. Yeh J.-W., Lin S.-J. Breakthrough applications of high-entropy materials. *Journal of Materials Research*. 2018, vol. 33, no. 19, pp. 3129–3137. <http://doi.org/10.1557/jmr.2018.283>
3. Gerard A.Y., Lutton K., Lucente A., Frankel G.S., Scully J.R. Progress in understanding the origins of excellent corrosion resistance in metallic alloys: from binary polycrystalline alloys to metallic glasses and high entropy alloys. *Corrosion*. 2020, vol. 76, no. 5, pp. 485–499. <https://doi.org/10.5006/3513>
4. Vinokurov E.G., Bondar' V.V. Logistic model for choosing ligands for alloy electrodeposition. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2007, vol. 41, no. 4, pp. 384–391. <http://doi.org/10.1134/S0040579507040070>
5. Semenova A.A., Tarasov A.B., Goodilin E.A. Periodic table of elements and nanotechnology. *Mendelev Communications*. 2019, vol. 29, no. 5, pp. 479–485. <http://doi.org/10.1016/j.mencom.2019.09.001>
6. Vinokurov E.G., Margolin L.N., Farafonov V.V. Electrodeposition of composite coatings. *Izvestiya Vuzov. Khimiya i Khimicheskaya Tekhnologiya*. 2020, vol. 63, no. 8, pp. 4–38. <http://doi.org/10.6060/ivkkt.20206308.6212>
7. Burukhina T.F., Vinokurov E.G., Napedenina E.Yu. Analysis of distribution and electrolytes resource intensity criteria by the total components concentration. *Gal'vanotekhnika i obrabotka poverkhnosti*. 2019, vol. 27, no. 1, pp. 43–48. http://doi.org/10.47188/0869-5326_2019_27_1_43
8. Rempel A.A., Gel'chinskii B.R. High-entropy alloys: Preparation, properties and practical application. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2020, vol. 63, no. 3-4, pp. 248–253. <http://doi.org/10.17073/0368-0797-2020-3-4-248-253>

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Евгений Геннадьевич Винокуров, д.х.н., профессор кафедры аналитической химии, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Всероссийский институт научной и технической информации РАН

ORCID: 0000-0002-5376-0586

E-mail: vin-62@mail.ru

Владимир Викторович Фарафонов, к.х.н., старший научный сотрудник, Всероссийский институт научной и технической информации РАН

Валерий Павлович Мешалкин, академик РАН, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой логистики и экономической информатики, Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, главный научный сотрудник, Институт общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова РАН

Evgenii G. Vinokurov, Dr. Sci. (Chem.), Prof. of the Chair of Analytical Chemistry, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Institute of Scientific and Technical Information, RAS

ORCID: 0000-0002-5376-0586

E-mail: vin-62@mail.ru

Vladimir V. Farafonov, Cand. Sci. (Chem.), Senior Researcher, Institute of Scientific and Technical Information, RAS

Valerii P. Meshalkin, Academician, Dr. Sci. (Chem.), Prof., Head of the Chair of Logistics and Economical Information, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Chief Researcher, Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry

Поступила в редакцию 11.01.2021

После доработки 26.01.2021

Принята к публикации 01.03.2021

Received 11.01.2021

Revised 26.01.2021

Accepted 01.03.2021