

01,14

Атомистическое моделирование зернограничного проскальзывания в бикристаллах сплава CoNiCrFeMn

© И.Н. Карькин, Л.Е. Карькина, Ю.Н. Горностырев

Институт физики металлов УрО РАН,

Екатеринбург, Россия

E-mail: lidiakarkina@gmail.com

Поступила в Редакцию 7 июня 2025 г.

В окончательной редакции 19 июля 2025 г.

Принята к публикации 20 июля 2025 г.

Влияние зернограничных сегрегаций в эквивалентном высокоэнтропийном сплаве (HEA) CoNiCrFeMn при отжиге в области умеренных температур на зернограничное проскальзывание изучено с использованием атомистического моделирования. Показано, что в состоянии твердого раствора при зернограничном проскальзывании сплав ведет себя качественно аналогично чистому ГЦК металлу. Формирование сегрегационного слоя на ГЗ в процессе отжига оказывает разнонаправленное влияние на механизмы проскальзывания по специальным ГЗ наклона $\Sigma 5$. Обсуждается влияние отжига HEA на стабильность ансамбля границ зерен.

Ключевые слова: высокоэнтропийные сплавы, сегрегации, границы зерен, атомистическое моделирование, зернограничное проскальзывание.

DOI: 10.61011/FTT.2025.08.61309.159-25

1. Введение

Легирование является одним из важнейших методов увеличения структурной стабильности и улучшения механических свойств металлов. Формирующиеся в процессе термо-механической обработки материалов зернограничные сегрегации могут значительно уменьшать подвижность границ зерен (ГЗ), увеличивая термическую стабильность зеренной структуры. В обзоре [1] рассмотрены основные типы распределения легированных атомов вблизи границ зерен: комплексоны (однослойные, многослойные и аморфные прослойки) [2,3] и упорядоченное распределение примесных атомов вблизи ГЗ — зернограничные сверхструктуры. Тип возникающей зернограничной сверхструктуры определяется многими факторами: типом границы (специальные или общего типа; симметричные или асимметричные), особенностями взаимодействия одного примесного атома с выбранной ГЗ; внешними условиями (температура, концентрация легирующего элемента и др.). При MD/MC моделировании отжига легированных Al сплавов, включающего обмен атомами в схеме Монте-Карло (MC) и релаксацию их положений методом молекулярной динамики (MD), нами была показана возможность реконструкции структуры границ зерен, инициированной формирующейся зернограничной сверхструктурой [4–6].

Другая ситуация реализуется в высокоэнтропийных сплавах (High Entropy Alloys, HEA), представляющих собой близкий к эквивалентному многокомпонентный твердый раствор. Так при MD/MC моделировании HEA бикристалла CoNiCrFeMn обнаружено, что на ранней стадии отжига формируются однородно распределенные в объеме области ближнего порядка, содержащие атомы Fe-Co или Ni-Mn-Cr [7,8]. С увеличением времени

отжига доминирующим становится перераспределение атомов различных сортов между областью ГЗ и объемом зерна. Наблюдается выраженная тенденция к образованию сегрегаций на границах зерен, причем основным сегрегирующим элементом является Cr, концентрация которого на ГЗ достигает 35–45 at.%. В результате, на границах зерен образуются необычно широкие (порядка 20 Å) сегрегации в виде близко расположенных кластеров. В ряде случаев получена структурная реконструкция области вблизи границ зерен, инициированная не формированием зернограничной сверхструктуры, как в слабо легированных сплавах, а значительной концентрационной неоднородностью вблизи ГЗ атомов, образующих HEA.

Проскальзывание по границам зерен (ЗГ проскальзывание) и миграция ГЗ являются процессами, которые наряду с внутризерненным скольжением и процессами аккомодации в тройных стыках, обеспечивают пластическую деформацию поликристаллических материалов. В настоящее время с использованием атомистического моделирования достаточно подробно изучено влияние ЗГ сверхструктуры на механизмы проскальзывания и разрушения по границам зерен, особенно актуальные в нанозеренных материалах. Выявлено несколько специфических механизмов зернограничной деформации для чистых металлов, а именно, комбинированное проскальзывание и миграция ГЗ, определяемое геометрией специальных симметричных границ зерен [9–11]. Для асимметричных специальных границ показана возможность легкого поперечного скольжения решеточных дислокаций в плотно упакованную плоскость, образующую асимметричную ГЗ [10]. Для симметричных ГЗ изучено влияние сегрегаций на изменение механизмов зернограничного проскальзывания [9]. В наших работах [9,10]

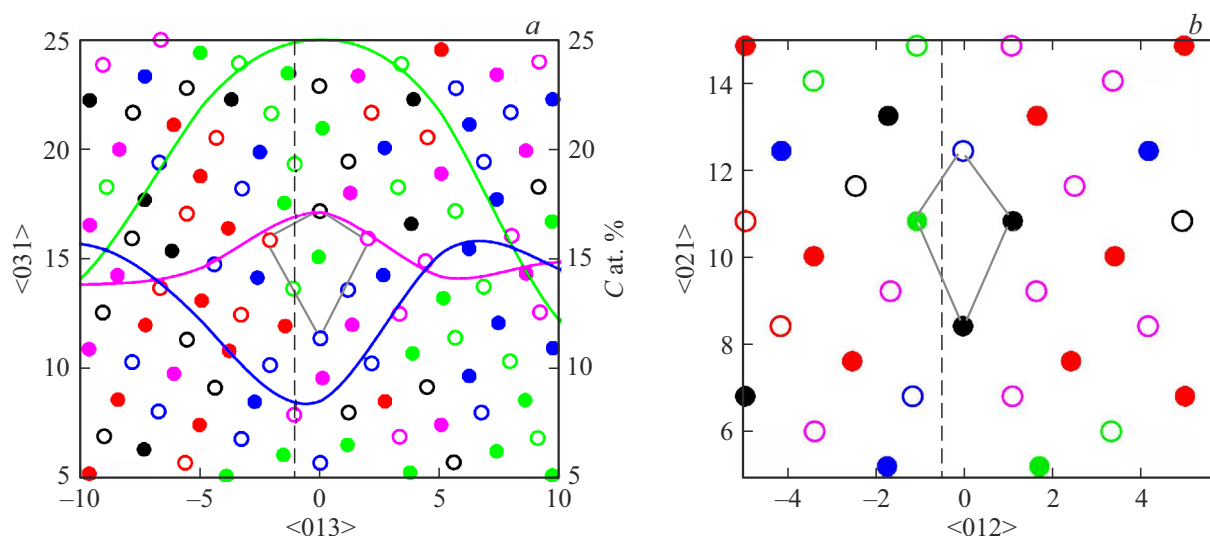


Рис. 1. Фрагменты стартовых конфигураций бикристаллов с ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ (a) и $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ (b). Серые линии показывают структурные единицы, заштрихованные и не заштрихованные кружки — атомы в двух соседних плоскостях $\{100\}$, перпендикулярных оси наклона границ. Тонкие сплошные линии — распределение концентрации после отжига. Черные точки соответствуют Co, синие точки и линии — Ni, зеленые точки и линии — Cr, красные точки — Fe, сиреневые точки и линии — Mn. Расстояния вдоль осей на рис. 1(a,b) и 2(a) даны в Å. На правой вертикальной оси на рис. 1(a) и 2(a) показана концентрация C at.% элементов сплава.

изучено влияние зернограничной сверхструктуры на проскальзывание по границам зерен $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ и $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ в сплавах Al–3 at.% Mg и Al–3 at.% Ni. Показано, что сопротивление проскальзыванию по ГЗ для изученных сплавов существенно возрастает по сравнению с Al. Упорядоченные сегрегации примесных атомов на границах также препятствуют реализации наиболее легкого механизма, включающего проскальзывание и миграцию ГЗ в Al.

В настоящей работе методами атомистического моделирования, мы анализируем энергетические характеристики процесса проскальзывания в бикристаллах HEA CoNiCrFeMn для тех же двух симметричных ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ и $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ с углом разориентировки $\theta = 36.87^\circ$ [12], что и изученные нами ранее в Al сплавах. Для HEA сплава сопоставляются результаты для исходного состояния твердого раствора и после проведения отжига, что сопровождается значительной концентрационной неоднородностью образующих сплав элементов вблизи границ зерен. Показано, что полученные результаты существенно зависят от типа границ, и качественно отличаются от выводов по влиянию на сопротивление проскальзыванию зернограничной сверхструктуры в слабо легированных Al сплавах.

2. Метод моделирования

Энергетический барьер проскальзывания рассчитан для специальных симметричных границ зерен $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ и $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ в HEA CoNiCrFeMn, находящегося в двух состояниях. Первое состояние —

стартовая конфигурация, когда атомы пяти сортов случайно распределены по позициям ГЦК-решетки с концентрацией 20 at.% для каждого элемента сплава. Второе состояние — конфигурация бикристалла после отжига при $T = 723$ К с использованием MD/МС-процедуры [8]. Это состояние характеризуется заметным перераспределением атомов вблизи границ зерен, с формированием обогащенных Cr кластеров, непрерывно распределенных вдоль границ. Отметим, что в обоих случаях вдоль двух направлений в плоскости ГЗ ($\{013\}$ или $\{012\}$) размер блока моделирования был выбран достаточно большим (15 параметров решетки), чтобы обеспечить однородное распределение атомов вдоль границ зерен.

Для моделирования использовался пакет LAMMPS [13] и предложенные в [14] многочастичные MEAM (modified embedded-atom method) потенциалы межатомного взаимодействия.

На рис. 1 показаны фрагменты стартовых конфигураций для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ (a) и $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ (b). Пунктирной линией отмечены сечения, вдоль которых проводился разрез кристаллита при изучении проскальзывания вдоль границ зерен. В работе [8] показано, что после отжига структура ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ существенно не изменяется. Происходит небольшая деформация структурного элемента (структурные элементы выделены серым цветом на рис. 1) и смещение атомов из своих исходных позиций. На рис. 2 показана область бикристалла вблизи ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$, которая испытала структурную реконструкцию в результате перераспределения атомов вблизи ГЗ при MD/МС-моделировании.

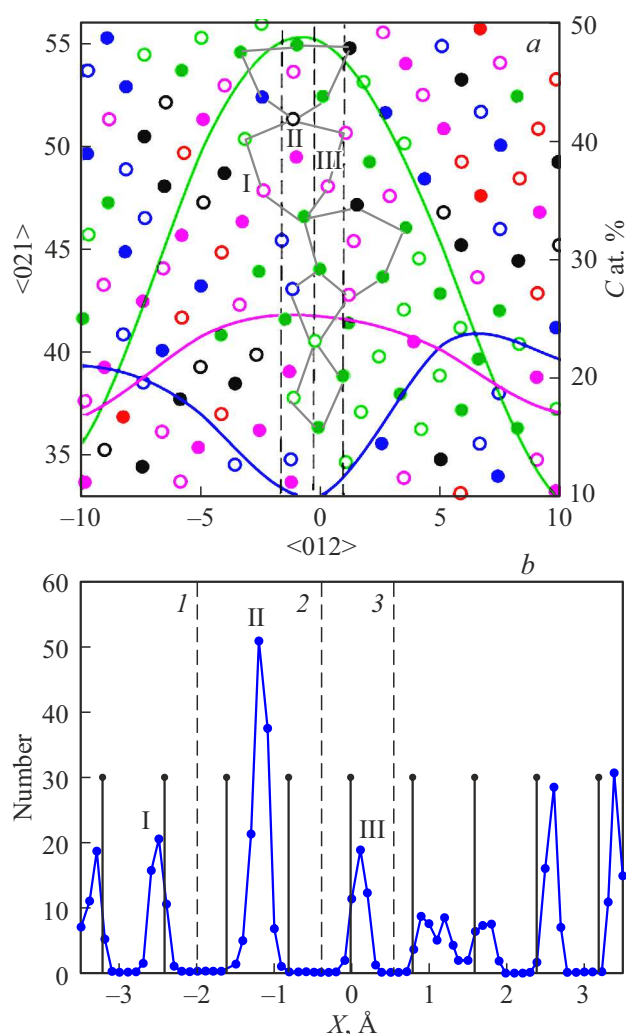


Рис. 2. Фрагмент конфигурации бикристалла с ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ (a) и функция распределения атомов вдоль направления OX вблизи ГЗ (b) после 25×10^4 шагов MD/MC-моделирования [8]. Сплошные кривые на рис. (b) — функция распределения положений атомов кристаллита после завершения MD/MC-моделирования.

Кроме структурных элементов, соответствующих исходной структуре ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ (два структурных элемента, расположенные в нижней части рис. 2, a) слева и справа от стартового положения ГЗ $X = 0$ формируются новые структурные элементы, которые сформировались в процессе реконструкции границы. В результате ширина ГЗ увеличивается, структура усложняется. Число возможных сечений для проскальзывания вдоль границы увеличивается (сечения I–III, помеченные на рис. 2, b)

В процессе MD/MC-моделирования вблизи границ изменяется распределение сортов атомов. Для обоих изученных ГЗ атомы Cr образуют довольно широкие (порядка 20 Å) сегрегации на ГЗ. Анализ показывает [8], что ширина распределения пиков концентрации атомов Cr даже превышает ширину границы, опреде-

ляемой областью вблизи структурных элементов. Для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ концентрация атомов Cr достигает ~ 35 at.%, для ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ — 47 at.%. Атомы Mn также преимущественно располагаются вблизи центра ГЗ, но их концентрация гораздо меньше, чем Cr (~ 25 at.%). На рис. 1, 2 тонкими линиями показано распределение основных элементов Cr, Ni, Mn, образующихся в сегрегационном слое вблизи ГЗ после отжига.

Чтобы охарактеризовать сопротивление зернограничному сдвигу, мы провели расчет энергии обобщенного дефекта упаковки (ЗГДУ) или зернограничной γ -поверхности для плоскости границы, разделяющей два зерна. ЗГДУ-поверхность вычисляли при свободных граничных условиях в направлении OX, перпендикулярном плоскости ГЗ и периодических граничных условиях в плоскости границы. В пределах элементарной ячейки выбирали некоторый вектор сдвига $\mathbf{f}$. Одно зерно сдвигали на этот вектор и вычисляли энергию кристаллита, отвечающую вектору сдвига. Энергию поверхностных дефектов вычисляли как разность между энергией кристаллита с дефектом упаковки и кристаллита без дефекта, отнесенную к площади границы. Полученные таким образом значения энергий в пределах элементарной ячейки на рассматриваемых плоскостях образуют поверхность зернограничных сдвигов ЗГДУ. Анализ ее позволяет сделать выводы о существовании стабильных поверхностных дефектов, определить соответствующие им сдвиги. В точках локальных минимумов ЗГДУ проводили полную релаксацию кристаллита, в других точках, отвечающих обобщенному зернограничному сдвигу $\mathbf{f}$, проводили релаксацию в направлении OX, перпендикулярном плоскости ГЗ.

3. Результаты моделирования

Для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ два взаимно перпендикулярных направления $\langle 100 \rangle$ и $1/2\langle 013 \rangle$ образуют элементарную ячейку на плоскости этой границы. На рис. 3 представлены зависимости энергии ЗГДУ для наиболее легких направлений сдвига для этой границы, полученные с учетом атомной релаксации вдоль направления, перпендикулярного плоскости ГЗ. Такими сдвигами являются: по направлению вдоль оси наклона ГЗ $\langle 100 \rangle$ (рис. 3, a), вдоль направления, перпендикулярного оси наклона (рис. 3, b); вдоль ломаной кривой через точку локального минимума A (рис. 3, c). Векторы сдвига $\mathbf{OO1}$ и $\mathbf{OO2}$ равны векторам трансляции вдоль направлений $\langle 100 \rangle$ и $\langle 013 \rangle$, соответственно, вектор $\mathbf{OA}$ равен $\sim 1/6\langle 326 \rangle$. Форма поверхностей GB-SF для рассматриваемых симметричных ГЗ аналогична приведенным в [11]. Значение энергии ЗГДУ в точке A равно 0.53 J/m^2 для стартовой конфигурации и 1.15 J/m^2 для конфигурации после отжига. На рисунках 3 и 4 кривая 1 соответствует стартовому состоянию твердого раствора HEA CoNiCrFeMn, кривая 2 — сплаву после проведенного старения при $T = 723 \text{ K}$. Видно, что кривые 2 для сплава после отжига

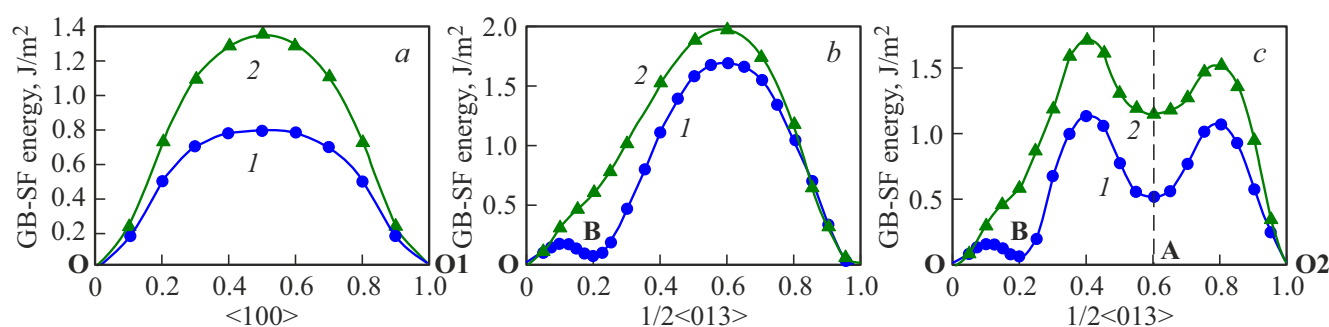


Рис. 3. Изменение энергии ЗГДУ (GB-SF) (с учетом релаксации) при сдвиге вдоль направления $\langle 100 \rangle$ (a); вдоль направления $\langle 013 \rangle$ (b); вдоль комбинированного направления ОАО2 (c) для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$. Кривая 1 соответствует твердому раствору, кривая 2 — сплаву после отжига.

лежат выше, чем для стартового состояния твердого раствора.

На рис. 3, b, c на кривой 1 отмечена точка В, отвечающая локальному минимуму, в которой энергия ЗГДУ близка к нулю ($E_{\text{GB-SF}} = 0.07 \text{ J/m}^2$). Вектор сдвига **ОВ** равен $0.2(1/2\langle 013 \rangle)$ (величина сдвига $0.32a$), где $a = 3.59 \text{ \AA}$ — параметр решетки. Как показано в работе [11], величина сдвига зависит только от типа рассматриваемой ГЗ. В результате сдвига **ОВ** плоскость ГЗ перемещается на величину, равную вектору Бюргерса зернограничных сдвигов b_{gb} (см. подробнее [11]). Если химическое окружение границы эквивалентно начальному, зернограничное проскальзывание может быть продолжено путем осуществления частичного сдвига в следующей, параллельной ГЗ плоскости, соответствующей новому положению ГЗ после миграции. В результате многократного повторения частичного сдвига по последовательной системе параллельных плоскостей, реализуемый процесс зернограничного проскальзывания сопровождается миграцией в направлении, перпендикулярном плоскости ГЗ. После отжига НЕА локальный минимум вблизи точки В отсутствует (рис. 3). Появление сегрегационного зернограничного слоя и изменение химической структуры ГЗ препятствует многократному зернограничному скольжению по последовательной системе параллельных плоскостей. Таким образом, наиболее легкий вариант ЗГДУ для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ становится невозможным.

Из зависимости энергии поверхностного дефекта от величины сдвига (рис. 3) можно получить значение энергии нестабильных дефектов упаковки γ_{us} (максимальное значение энергии вдоль выбранного направления сдвига [3,11]). Чем меньше параметр γ_{us} , тем легче осуществляется сдвиг в плоскости ГЗ в данном направлении при зернограничном проскальзывании. В таблице представлены значения энергии нестабильных ЗГДУ с учетом релаксации вдоль наиболее легких направлений сдвига для НЕА в состоянии твердого раствора (стартовое состояние) и после отжига.

Из рис. 3 и левой части таблицы видно, что для всех направлений зернограничных сдвигов для ГЗ

$\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ значения γ_{us} для НЕА после отжига существенно выше, чем в стартовом состоянии, т.е. появление сегрегационного слоя для этой ГЗ препятствует проскальзыванию по границам зерен. Из таблицы видно, что наиболее легким направлением зернограничного скольжения для сплава в состоянии твердого раствора является зернограничный частичный сдвиг **ОВ**, который характеризуется значением $\gamma_{\text{us}} = 0.17 \text{ J/m}^2$, сопоставимым с самыми низкими энергиями ДУ в металлах с ГЦК-решеткой. После отжига наиболее низким $\gamma_{\text{us}} = 1.35 \text{ J/m}^2$ является значение для направления сдвига вдоль оси наклона $\langle 100 \rangle$.

Совершенно другая ситуация получена для ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$. Зависимость энергии ЗГДУ для этой границы и значения γ_{us} для наиболее низкоэнергетических направлений сдвига даны на рис. 4 и в правой части таблицы (вектор **ОО2** равен сдвигу $\langle 012 \rangle$, **ОО3** — $1/2\langle 112 \rangle$). Из трех возможных после отжига сечений для этой границы (см. рис. 4, a и табл.) самые низкие значения GB-SF реализуются для сечения (sec II). Для этого сечения все значения γ_{us} для НЕА после отжига заметно ниже, чем для сплава в состоянии твердого раствора (рис. 4, b, c), т.е. появление сегрегационного слоя для ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ облегчает проскальзывание по границам зерен. Подобная ситуация нетипична для большинства сегрегаций в слабо легированных сплавах [5,6]. Так же как и ранее для ГЗ $\Sigma 5\{013\}$, существует частичный сдвиг **ОВ** с вектором сдвига равным $0.4\langle 012 \rangle$, который связан с геометрией ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$. Для этой границы локальные минимумы соответствующие частичному сдвигу **ОВ** присутствуют и для исходного состояния сплава и для состояния после отжига. Энергия ЗГДУ для состояния твердого раствора равна $E_{\text{GB-SF}} = 1.47 \text{ J/m}^2$, для отожженного состояния (sec II) $E_{\text{GB-SF}} = 1.35 \text{ J/m}^2$. Отметим, что в обоих случаях энергии достаточно высоки, тогда как барьер, который нужно преодолеть для создания ЗГДУ лишь несколько превышает это значение $\gamma_{\text{us}} = 1.65$ и 1.36 J/m^2 , соответственно. Можно отметить, что и для сдвига вдоль оси наклона $\langle 100 \rangle$ значения γ_{us} для этой границы выше, чем для ГЗ $\Sigma 5\{013\}$.

Энергии нестабильных ДУ (γ_{us} , J/m²) для сдвигов вдоль наиболее легких направлений для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ и ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$

Тип ГЗ	$\Sigma 5\{013\}$			$\Sigma 5\{012\}$		
Сдвиг γ_{us}	$\langle 100 \rangle$	$\langle 013 \rangle$	OA-AO2	$\langle 100 \rangle$	$\langle 012 \rangle$	$\langle 112 \rangle$
Стартовое состояние	0.80	0.17 (OB)	0.17 (OB)	2.04	1.47 (OB)	1.65–1.55
После отжига	1.35	1.96	1.71–1.52	1.77 (sec I)	1.83 (sec I)	1.83–1.75
				1.71 (sec II)	1.36 (OB)	1.36–1.42
				1.83 (sec III)	2.62(sec III)	2.62–2.84

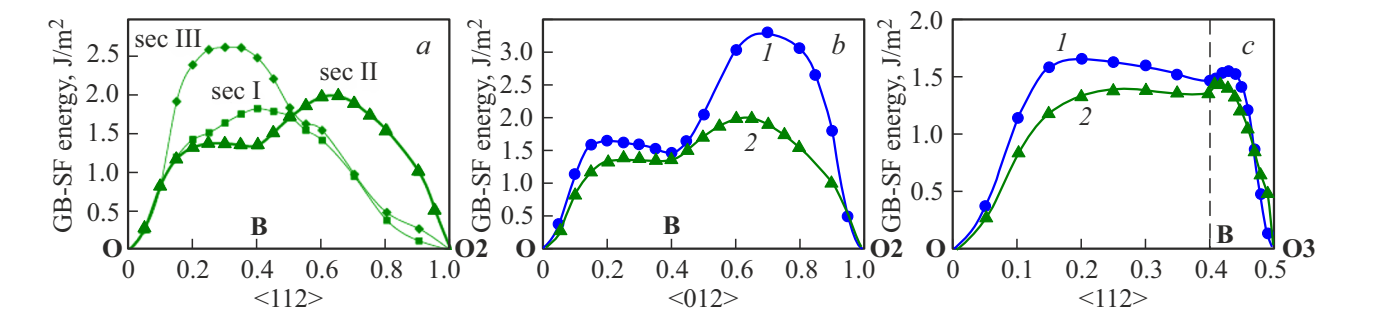


Рис. 4. Изменение энергии ЗГДУ (GB-SF) (с учетом релаксации) при сдвиге вдоль направления $\langle 012 \rangle$ (a, b); вдоль направления $\langle 112 \rangle$ (c) для ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$. Кривая 1 соответствует твердому раствору, кривая 2 — сплаву после отжига.

4. Обсуждение результатов

В последние годы достигнут заметный прогресс в понимании процессов взаимодействия примесных атомов с границами зерен при отжиге бинарных слабо легированных сплавов [1]. Однако, и для слабо легированных сплавов далеко не все процессы ЗГ проскальзывания изучены в настоящее время, например, для границ зерен, декорированных комплексами; для сплавов, в которых формирование сегрегаций на ГЗ контролируются конкуренцией между тенденцией к распаду сплава и тенденцией к сегрегации атомов легированных элементов [15,16].

Еще более сложной представляется ситуация для многокомпонентных сплавов, в частности для НЕА. В настоящей работе для изучения ЗГ проскальзывания в НЕА CoNiCrFeMn с ГЦК решеткой были выбраны симметричные ГЗ $\Sigma 5$. Это дает возможность сопоставления результатов для НЕА с достаточно хорошо изученными слабо легированными сплавами на основе Al [9,15]. Анализ результатов атомистического моделирования НЕА в состоянии твердого раствора (см. рис. 3, 4, табл.) показывает, что часть характеристик механизмов проскальзывания качественно совпадает с теми, которые наблюдаются в слабо легированных сплавах. В первую очередь это реализация зернограничного частичного сдвига **OB**, отвечающего минимуму энергии ЗГДУ. Наиболее ярко эта особенность проявилась для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ (рис. 3, b). И глубина минимума, и высота барьера, которую необходимо преодолеть для попадания

в этот минимум, очень низкие (0.07 и 0.17 J/m²). Для этой ГЗ в состоянии твердого раствора проскальзывание по ГЗ является легким, сопоставимым, в частности с ГЦК металлами. Для ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ и глубина минимума, и высота барьера едва ли не на порядок выше. В целом, все значения энергии ЗГДУ энергии для всех сдвигов для этой ГЗ выше, чем для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ (см. рис. 4). Можно предположить, что концентрационная неоднородность при распределении атомов сплава вблизи ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ из-за меньшего объема, занимаемого границей, приводит к эффекту близкому к твердорастворному упрочнению в этой области. В результате, наиболее выгодным является сдвиг вдоль оси наклона $\langle 100 \rangle$ (табл.). Подобные результаты твердорастворного упрочнения при движении двойников в НЕА обсуждаются в [17–21]. Основным механизмом торможения двойников предполагается упругое взаимодействие двойнивающих дислокаций с растворенными атомами.

Отжиг и, как следствие, перераспределение компонент сплава вблизи границ зерен по-разному влияют на изменение механизмов проскальзывания для двух изученных границ $\Sigma 5$. Для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ структура ГЗ существенно не изменяется. Из рис. 1, a видно, что при формировании зернограничного сдвига атомы, расположенные вблизи выбранного сечения, перемещаются в область со значительным градиентом концентрации основных элементов Cr, Mn, Ni, сегрегирующих на ГЗ в процессе отжига. Химическое взаимодействие атомов вблизи разреза изменяется, увеличивается локальная концентрационная неоднородность. Расчет показывает,

что такое влияние приводит к исчезновению возможности реализации зернограничного частичного сдвига **ОВ**; значения энергии ЗГДУ энергии в целом повышаются; наиболее выгодным становится сдвиг вдоль оси наклона $\langle 100 \rangle$ (см. рис. 3, *b*, таблицу). Все эти изменения в значительной степени эквивалентны влиянию сегрегаций в слабо легированных сплавах на ЗГ подвижность [11].

Иная ситуация получена для ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$. Значения GB-SF энергии для всех зернограничных сдвигов существенно понижаются по сравнению с состоянием твердого раствора (рис. 4, таблица). Сохраняется, и становится наиболее выгодным, зернограничный частичный сдвиг **ОВ**, понижается также барьер (γ_{us}) для формирования этого частичного сдвига. По внешним признакам состояние сплава в области вблизи ГЗ близко к состоянию чистого металла с возможно твердорастворным упрочнением. Как показано в [8], в HEA CoNiCrFeMn после отжига наблюдается выраженная тенденция к образованию преимущественно сегрегаций **Сг** на границах зерен. Ширина пика концентрации для $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ достигает $\sim 20 \text{ \AA}$, высота пика — 47 at.%, причем максимальное значение концентрации **Сг** приходится на sec II, для которого и получены описанные выше особенности ЗГ проскальзывания (рис. 2, *a*). Можно также отметить, что ширина ГЗ (размер структурного элемента в направлении, перпендикулярном плоскости границы) меньше, чем область заметного изменения концентрации сегрегирующих атомов. В этом ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ отличается от $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$. Для других сечений $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ (sec I, sec III, см. рис. 3, *b*), где концентрация **Сг** в среднем существенно ниже, влияние сегрегаций аналогично слабо легированным сплавам (рис. 4, *a*, таблица). Таким образом, присутствие высокой концентрации атомов одного сорта в полосе, определяющей структуру и положение ГЗ, может привести к реализации механизмов проскальзывания, характерных для чистых металлов. Понижение или повышение сопротивлению проскальзыванию будет определяться типом ГЗ и типом сегрегированных атомов. Можно предположить, что похожая ситуация может быть реализована для многослойных комплексонов [1–3] или для других случаев широкого распределения примесных атомов вблизи ГЗ [4].

В экспериментальных работах [17–21] показано, что измельчение зерна однофазных HEA CoNiCrFeMn до размера $\sim 100 \text{ nm}$ позволяет существенно увеличить их прочность, что свидетельствует о важном вкладе зернограничных механизмов упрочнения. Обычно измельчение зерен происходит в результате термомеханической обработки. Наши результаты показывают, процессы упрочнения и проскальзывания по границам зерен существенно зависят от характера развития сегрегационных процессов. Распределение по типам реализуемых в ансамбле зерен может существенно изменяться в процессе перераспределения компонент сплава. Одновременно может существенно изменяться концентрационный состав HEA внутри зерна, что влияет на взаимную зависимость внутризеренной деформации

сплава и деформации по ГЗ. Следует отметить, что рассмотренные выше процессы миграции ГЗ, реализуются для специфического случая симметричных специальных ГЗ наклона. В мелкозернистом поликристалле с преобладанием произвольных ГЗ механизм индуцированной напряжением миграции границ может быть более сложным и включать процессы, обеспечивающие проскальзывание несимметричных ГЗ путем движения уступов [19] и совместность деформации в тройных стыках зерен [20].

Тем не менее, полученные в настоящей работе результаты дают представление о фундаментальных механизмах, определяющих проскальзывание зерен и условиях реализации инициированного напряжением процесса миграции ГЗ в HEA CoNiCrFeMn.

5. Выводы

С целью выяснения особенностей зернограничного проскальзывания в HEA проведено атомистическое моделирование сплава CoNiCrFeMn, содержащего специальные ГЗ наклона $\Sigma 5$. Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы.

1. Показано, что в состоянии твердого раствора с однородным распределением пяти компонент HEA CoNiCrFeMn ведет себя при зернограничном проскальзывании качественно аналогично чистому ГЦК металлу, в том числе включая реализацию наиболее легкого механизма проскальзывания и миграции по границам зерен.

2. Показано, что появление сегрегационного слоя атомов **Сг** в процессе отжига для ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ облегчает проскальзывание по границам зерен, тогда как для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100 \rangle$ проскальзывание затруднено. Несмотря на выраженную тенденцию к образованию сегрегаций на ГЗ, поведение ГЗ $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ при зернограничном проскальзывании сохраняет черты однородного твердого раствора.

3. Разнонаправленное воздействие термо- механической обработки на ГЗ различного типа вследствие существенного перераспределения компонент сплава может оказывать значительное влияние на структуру и стабильность ансамбля границ зерен HEA.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН

Конфликт интересов

Авторы сообщают об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Ch. Hu, R. Dingreville, B.L. Boyce. *Comp. Mat. Sci.* **232**, 112596 (2024).
- [2] P. Lejček. *Grain Boundary Segregation in Metals*, Vol. **136**, Springer Science & Business Media, (2010)
- [3] P.R. Cantwell, M. Tang, S.J. Dillon, J. Luo, G.S. Rohrer, M.P. Harmer. *Acta Mater.* **62**, 1–48 (2014)
- [4] L.E.Karkina, I.N.Karkin, A.R. Kuznetsov, I.K. Razumov, P.A. Korzhavii, Yu.N. Gornostyrev. *Comp. Mat. Sci.* **112**, 18 (2016).
- [5] L.Karkina, I. Karkin, A.Kusnetsov, Yu.Gornostyrev. *Metals.* **9** (12), 1319 (2019).
- [6] A. Kuznetsov, L. Karkina, Yu. Gornostyrev, P. Korzhavii. *Metals.* **11**. 631 (2021).
- [7] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. *ФММ.* **124**, 971 (2023).
- [8] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. *ФММ.* **126**, 38 (2025).
- [9] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. *ФММ.* **121**, 901 (2020).
- [10] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, Ю.Н. Горностырев. *ФММ.* **122**. 1187 (2021).
- [11] Л.Е. Карькина, И.Н. Карькин, А.Р. Кузнецов, Ю.Н. Горностырев. *ФТТ.* **60**. 1974 (2018).
- [12] Р.З. Валиев, А.Н. Вергазов, В.Ю. Герцман. *Кристаллогеометрический анализ межкристаллитных границ*. Наука, М. (1991). 231 с.
- [13] <http://lammmps.sandia.gov/index.html>.
- [14] W.M. Choi, Y. Kim, D. Seol, B.J. Lee. *Comp. Mater. Sci.* **130**, 121 (2017).
- [15] I.N. Karkin, L.E. Karkina, A.R. Kuznetsov, M.V. Petrik, Yu.N. Gornostyrev, P.A. Korzhavii. *Mater. Phys. Mech.* **24**. 201 (2015).
- [16] И.Н. Карькин, Л.Е. Карькина, П.А. Коржавый, Ю.Н. Горностырев. *ФТТ*, **59**. 103 (2017).
- [17] H. Shahmir, T. Mousavi, J.Y. He, Z.P. Lu, M. Kawasaki, T.G. Langdon. *Mater. Sci. Eng. A* **705**, 411 (2017).
- [18] N.D. Stepanov, D.G. Shaysultanov, R.S. Chernichenko, N.Y. Yurchenko, S.V. Zhrebtsov, M.A. Tikhonovsky, G.A. Salishchev. *J. Alloy. Compd.* **693**. 394 (2017).
- [19] R. Hadian, B. Grabowski, C.P. Race, J. Neugebauer. *Phys. Rev. B.* **94**. 165413 (2016).
- [20] M.Yu. Gutkin, K.N. Mikaelyan, I.A. Ovid'ko. *Phys. Sol. State.* **50**. 1266 (2008).
- [21] R.E. Kubilay, W.A. Curtin. *Acta Materialia.* **216**, 117119 (2021).

Редактор Т.Н. Василевская