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 эквиатомном 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 сверхстуктуры 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 эквиатомному 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 внутризеренным 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]

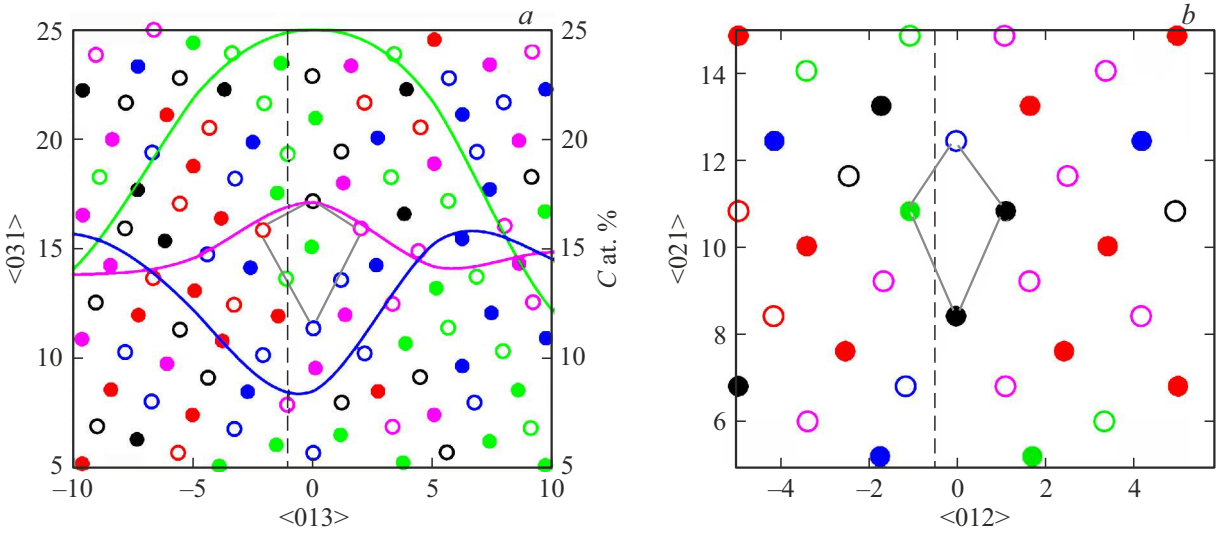

Рис. 1. Фрагменты стартовых конфигураций бикристаллов с ГЗ $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ (a) и $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ (b). Серые линии показывают структурные единицы, заштрихованные и не заштрихованные кружки — атомы в двух соседних плоскостях $\{100\}$, перпендикулярных оси наклона границ. 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 $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ и $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ 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 $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ и $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ 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 $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ и $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ 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 $T = 723$ K с использованием MD/MC-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 $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ (a) и $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ (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 $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ существенно не изменяется. Происходит небольшая деформация структурного элемента (структурные элементы выделены серым цветомна рис. 1) и смещение атомов из своих исходных позиций. На рис. 2 показана область бикристалла вблизи ГЗ $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$, которая испытала структурную реконструкцию в результате перераспределения атомов вблизи ГЗ при MD/MC-моделировании.

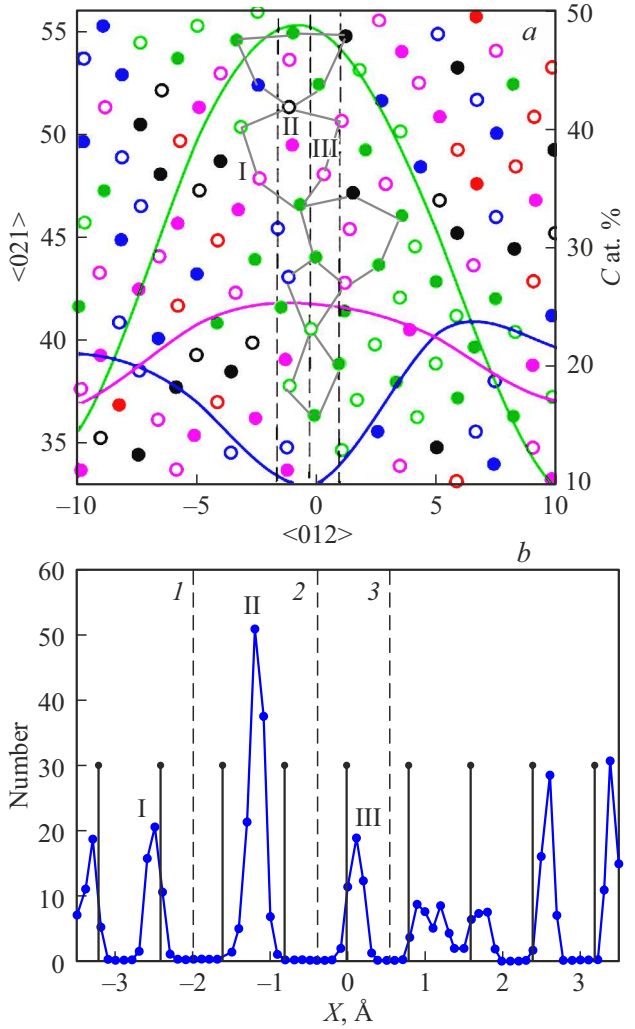

Рис. 2. Фрагмент конфигурации бикристалла с ГЗ $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ (a) и функция распределения атомов вдоль направления OX вблизи ГЗ (b) после 25×10^4 шагов MD/MC-моделирования [8]. Сплошные кривые на рис. (b) — функция распределения положений атомов кристаллита после завершения MD/MC-моделирования.

Кроме структурных элементов, соответствующих исходной структуре ГЗ $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ (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 обеих 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, определяемой областью вблизи структурных элементов. Для ГЗ $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ концентрация атомов Cr достигает ~ 35 at.%, для ГЗ $\Sigma5\{012\}\langle100\rangle$ — 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 **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 **f**, проводили релаксацию в направлении OX, перпендикулярном плоскости ГЗ.

3. Результаты моделирования

Для ГЗ $\Sigma5\{013\}\langle100\rangle$ два взаимно перпендикулярных направления $\langle100\rangle$ и $1/2\langle013\rangle$ 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 $\langle100\rangle$ (рис. 3, a), вдоль направления, перпендикулярного оси наклона (рис. 3, b); вдоль ломаной кривой через точку локального минимума **A** (рис. 3, c). Векторы сдвига **OO1** и **OO2** равны векторам трансляции вдоль направлений $\langle100\rangle$ и $\langle013\rangle$, соответственно, вектор **OA** равен $\sim 1/6\langle326\rangle$. 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 $T = 723$ K. Видно, что кривые *2* для сплава после отжига

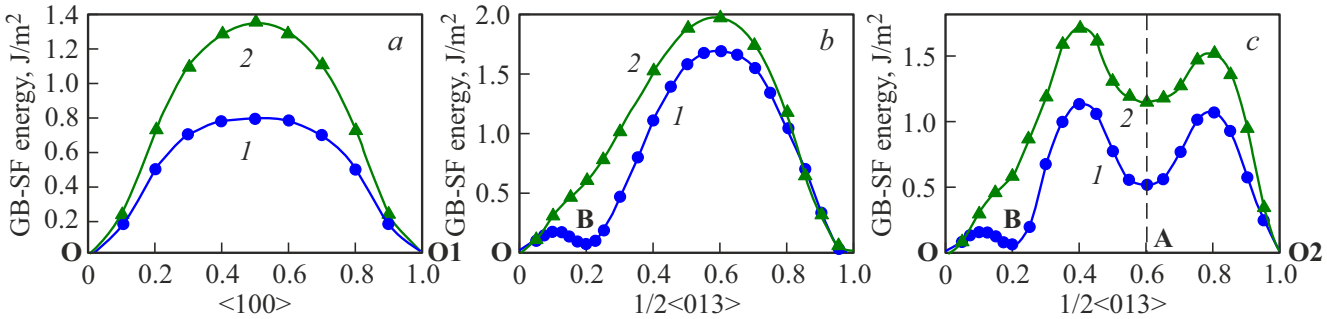

Рис. 3. Изменение энергии ЗГДУ (GB-SF) (с учетом релаксации) при сдвиге вдоль направления $\langle 100\rangle$ (*a*); вдоль направления $\langle 013\rangle$ (*b*); вдоль комбинированного направления OAO2 (*c*) для ГЗ $\Sigma 5\{013\}\langle 100\rangle$. Кривая *1* соответствует твердому раствору, кривая *2* — сплаву после отжига.

лежат выше, чем для стартового состояния твердого раствора.

На рис. 3, *b, c* на кривой *1* отмечена точка **B**, отвечающая локальному минимуму, в которой энергия ЗГДУ близка к нулю ($E_{\text{GB-SF}} = 0.07\,\text{J/m}^2$). Вектор сдвига **OB** равен $0.2\,(1/2\,\langle 013\rangle)$ (величина сдвига $0.32a$), где $a = 3.59$ Å — параметр решетки. Как показано в работе [11], величина сдвига зависит только от типа рассматриваемой ГЗ. В результате сдвига **OB** плоскость ГЗ перемещается на величину, равную вектору Бюргерса зернограничных сдвигов $\mathbf{b}_{\text{gb}}$ (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 **B** 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 **OB**, 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 **OO2** равен сдвигу $\langle 012\rangle$, **OO3** — $1/2\langle 112\rangle$). 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 **OB** 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 **OB** 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 $1.36\,\text{J/m}^2$, 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/m^2) для сдвигов вдоль наиболее легких направлений для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ и ГЗ Σ5{012}⟨100⟩

Тип ГЗ	Σ5{013}			Σ5{012}		
Сдвиг γ_{us}	⟨100⟩	⟨013⟩	**OA-AO2**	⟨100⟩	⟨012⟩	⟨112⟩
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

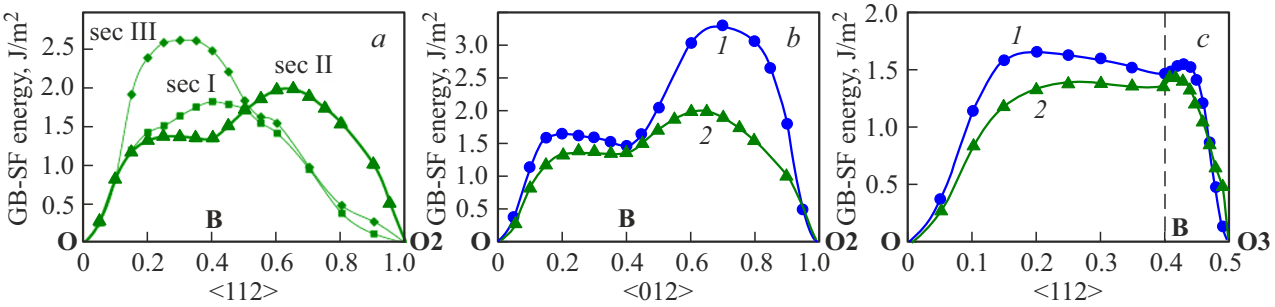

Рис. 4. Изменение энергии ЗГДУ (GB-SF) (с учетом релаксации) при сдвиге вдоль направления ⟨012⟩ (*a, b*); вдоль направления ⟨112⟩ (*c*) для ГЗ Σ5{012}⟨100⟩. Кривая *1* соответствует твердому раствору, кривая *2* — сплаву после отжига.

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 комплексонами; 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 HEA. В настоящей работе для изучения ЗГ проскальзывания в HEA CoNiCrFeMn с ГЦК решеткой были выбраны симметричные ГЗ Σ5. Это дает возможность сопоставления результатов для HEA с достаточно хорошо изученными слабо легированными сплавами на основе Al [9,15]. Анализ результатов атомистического моделирования HEA 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 Σ5{013}⟨100⟩ (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/m^2). Для этой ГЗ в состоянии твердого раствора проскальзывание по ГЗ является легким, сопоставимым, в частности с ГЦК металлами. Для ГЗ Σ5{012}⟨100⟩ 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 Σ5{013}⟨100⟩ (см. рис. 4). Можно предположить, что концентрационная неоднородность при распределении атомов сплава вблизи ГЗ Σ5{012}⟨100⟩ 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 ⟨100⟩ (табл.). Подобные результаты твердорастворного упрочнения при движении двойников в HEA обсуждаются в [17–21]. Основным механизмом торможения двойников предполагается упругое взаимодействие двойникующих 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 Σ5. Для ГЗ Σ5{013}⟨100⟩ 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 **OB**; 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 OB, 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 Cr на границах зерен. Ширина пика концентрации для $\Sigma 5\{012\}\langle 100 \rangle$ достигает ~ 20 Å, высота пика — 47 at.%, причем максимальное значение концентрации Cr 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 Cr 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 ~ 100 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 Cr 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 тенденция 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. Korzhavyi, 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. Korzhavyi. 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://lammps.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. Korzhavyi. 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. Zherebtsov, 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