

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФфуЗИЯ

УДК 539.422.23

БЛИЖНИЙ ПОРЯДОК, ФОРМИРУЮЩИЙСЯ ПРИ ОТЖИГЕ ЭКВИАТОМНОГО СПЛАВА CoNiCrFeMn. АТОМИСТИЧЕСКОЕ МД/МК-МОДЕЛИРОВАНИЕ

© 2023 г. И. Н. Карькин^а, Л. Е. Карькина^а *, Ю. Н. Горностырев^а

^аИнститут физики металлов УрО РАН, ул. С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

*e-mail: lidiakarkina@gmail.com

Поступила в редакцию 13.06.2023 г.

После доработки 07.08.2023 г.

Принята к публикации 09.08.2023 г.

Формирование ближнего порядка в эквиатомном высокоэнтروпийном сплаве (HEA) CoNiCrFeMn при отжиге в области умеренных температур изучено с использованием атомистического МД/МК моделирования, включающего обмен атомов в схеме Монте-Карло (МК) и релаксацию их положений методом молекулярной динамики (МД). Установлено, что в процессе выдержки образуются два типа областей химического ближнего порядка (CSRO). Первые состоят преимущественно из атомов Fe–Co, а вторые представляют собой обогащенные Cr области, на границах которых находятся атомы Ni и Mn. Показано, что формирование ближнего порядка включает несколько этапов, последовательность которых определяется величиной Cr–Cr, Fe–Co и Ni–Mn взаимодействий.

Ключевые слова: высокоэнтропийные сплавы, ближний порядок, атомистическое моделирование, декогеренция

DOI: 10.31857/S0015323023600971, EDN: HRJFZC

ВВЕДЕНИЕ

Высокоэнтропийные сплавы (High Entropy Alloys, HEA), представляющие собой близкий к эквиатомному многокомпонентный твердый раствор, привлекают большое внимание из-за их уникальных свойств и перспектив использования в промышленности [1–3]. HEA характеризуются коррозионной стойкостью, высокими прочностными свойствами, а также способностью сохранять их при высоких температурах. Важным фактором, определяющим перспективы применения HEA, является их фазовая стабильность. Известным примером однофазного HEA является эквиатомный ГЦК-сплав CoNiCrFeMn, впервые предложенный В. Cantor [4]. Он остается в состоянии твердого раствора после отжига при $T = 1100^\circ\text{C}$, однако распадается с образованием различных фаз при длительном отжиге в интервале температур $450 < T < 900^\circ\text{C}$ [5–7].

Распад однородного твердого раствора при отжиге в области умеренных температур является типичным для многих HEA (см. обсуждение в [8]). Это обусловлено уменьшением вклада конфигурационной энтропии, стабилизирующей однородное состояние, при понижении температуры. Распаду сплава предшествует формирование химического ближнего порядка (Chemical Short-Range Order, CSRO), который может существенно

влиять на прочностные свойства HEA [9–12]. Поэтому образование CSRO в процессе отжига HEA вызывает в последние годы значительный интерес и активно исследуется как экспериментально [13, 14], так и теоретически [8, 9, 15–17].

Экспериментальное исследование CSRO в многокомпонентном сплаве является сложной задачей. Поэтому для выяснения закономерностей формирования ближнего порядка в HEA в последние годы активно используются методы атомистического моделирования. В работе [8] с использованием гибридного МД/МК подхода, сочетающего молекулярную динамику (МД) и Монте-Карло (МК) моделирование, исследован процесс распада и формирования CSRO в сплаве HfNbTaTiZr. Показано, что Hf–Zr и Nb–Ta пары атомов преимущественно образуются в ОЦК твердом растворе, и предсказано формирование нового типа CSRO с топологическим порядком B2.

В работе [17] методом МД/МК моделирования показано, что при отжиге модельного средне-энтропийного сплава NiCoCr преимущественно формируется Cr–Cr пары атомов, что существенно влияет на энергию дефектов упаковки и подвижность дислокаций. Низкие значения энергии дефекта упаковки в HEA CoNiCrFeMn являются также причиной ГЦК–ГПУ-превращения, реализующегося в процессе пластической дефор-

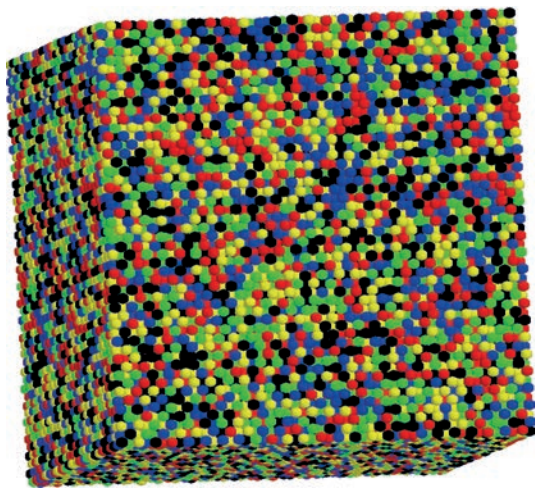


Рис. 1. Распределение атомов в кристаллите эквивалентного сплава CoNiCrFeMn после МД релаксации в течение 3×10^4 шагов при $T = 300$ К. Черным цветом выделены атомы Co, синим – Ni, зеленым – Cr, красным – Fe, желтым – Mn (on line).

мации [18]. Образование ближнего порядка в сплаве CoNiCrFeMn исследовано в [16] с использованием первопринципного МК-моделирования. Показано, что в ферромагнитном состоянии предпочтительным является образование пар атомов Cr–Cr и Cr–Mn в положении вторых соседей; CSRO такого типа должен предшествовать образованию топологического порядка $L1_2$. Однако, вследствие ограничений использованного подхода, в работе [16] не удалось изучить эволюцию CSRO в течение отжига. Поэтому актуальным является исследование CSRO в HEA CoNiCrFeMn методом атомистического МД/МК-моделирования.

Первопринципное моделирование позволяет достаточно надежно описать взаимодействие между атомами в многокомпонентном сплаве. Однако такой подход является весьма ресурсоемким и не может описать поведение большой системы в течение достаточно длительного времени. В настоящей работе с использованием комбинированного МД/МК-моделирования исследовано формирование CSRO в процессе отжига HEA CoNiCrFeMn эквивалентного состава, а также влияние CSRO на прочностные свойства рассматриваемого сплава.

МЕТОД

Моделирование структуры CoNiCrFeMn HEA проводили с использованием гибридного МД/МК-подхода, в котором (как и ранее в [19]) каждому шагу МК предшествовала МД-релаксация (50 МД-шагов), и вероятность атомного скачка определялась с учетом изменения энергии кристаллита при релаксации. Процедура МК проводилась следуя алгоритму Метрополиса, при кото-

ром осуществлялся обмен двух произвольно выбранных атомов сортов А и В. Обмен между атомами А и В выполнялся в последовательности Co–Cr, Co–Fe, Co–Ni, Co–Mn, Cr–Fe, Cr–Ni, Cr–Mn, Fe–Ni, Fe–Mn, Ni–Mn. Выполнялось 5000 обменов для каждой пары атомов данного сорта, после чего процесс повторялся в той же последовательности.

Для моделирования использовался пакет LAMMPS [20] и предложенные в [21] многочастичные MEAM (modified embedded-atom method) потенциалы межатомного взаимодействия. Модельный кристаллит, ограниченный плоскостями {001}, содержал 32×10^3 атомов и имел размер $20 \times 20 \times 20$ параметров решетки ($a = 3.59$ Å). В стартовой конфигурации атомы пяти сортов были случайно распределены по позициям ГЦК-решетки с концентрацией 20 ат. % для каждого элемента сплава. Сначала, для достижения равновесного состояния, осуществлялась МД релаксация при комнатной температуре в течение 50 пс (один шаг релаксации составлял 1 фс). Распределение атомов в кристаллите после МД релаксации показано на рис. 1.

Отжиг проводился при $T = 723$ К, с использованием изотермически–изобарического (NPT) ансамбля. Выбранная температура отжига соответствует использованной в эксперименте [7]. На различных стадиях отжига фиксировалось состояние сплава, анализировались степень CSRO или распада; вычислялась энергия декогеренции сплава. Атомистическое моделирование процесса разрушения осуществлялось в хорошо апробированной методике жесткого сдвига без релаксации и с релаксацией [22].

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В результате МД-релаксации стартовой конфигурации происходит лишь небольшое смещение атомов (менее $0.1 a$) от своего исходного положения. Чтобы охарактеризовать распределение атомов в исходном состоянии сплава были рассчитаны корреляционные функции $g(R)$ для различных пар атомов; некоторые из них приведены на рис. 2а.

Уширение пиков $g(R)$ обусловлено флуктуацией межатомных расстояний между различными парами атомов (R) и является характерной особенностью HEA. Наибольшее уширение пика $g(R)$ для пары Cr–Cr обусловлено, по-видимому, большим атомным радиусом Cr по сравнению с другими элементами. Смещение функции $g(R)$ для пары атомов Co–Mn влево, а пары атомов Ni–Mn вправо коррелирует с равновесными расстояниями для соответствующих бинарных систем, полученными при построении используемых MEAM-потенциалов [21]. На рис. 2 приведена

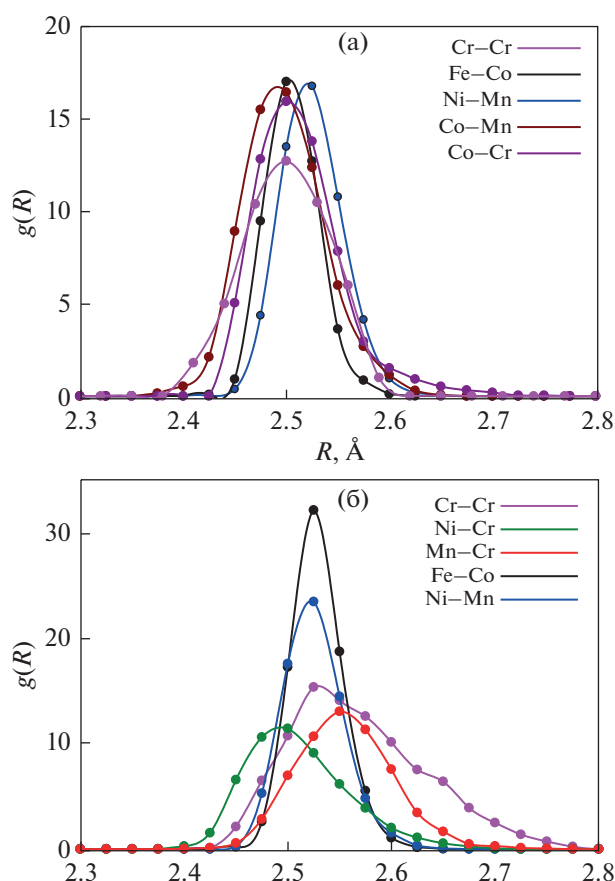


Рис. 2. Парные корреляционные функции $g(R)$ для атомов кристаллита вблизи первой координационной сферы после предварительной МД-релаксации при $T = 300$ К (а) и после завершения МД/МК-процедуры отжига при $T = 723$ К (б).

функция $g(R)$ на расстояниях, соответствующих первым ближайшим соседям; пики $g(R)$ для вторых и третьих соседей выглядят аналогично, но более уширены по сравнению с показанными на рис. 2.

С ростом числа шагов (рис. 3) МД/МК-процедуры, моделирующей процесс отжига сплава, энергия кристаллита понижается вследствие изменения параметров ближнего порядка, последовательные этапы формирования ближнего порядка для различных групп атомов обсуждаются ниже. На зависимости потенциальной энергии кристаллита E_{pot} от числа МД/МК-шагов N можно выделить две стадии: быстрого уменьшения E_{pot} в интервале малых времен отжига (I) и стадию II, на которой энергия $E_{\text{pot}}(N)$ изменяется относительно медленно.

Анализируя особенности распределения атомов в кристаллите в зависимости от времени выдержки, можно сделать вывод, что на стадии I происходит формирование CSRO, в то время как

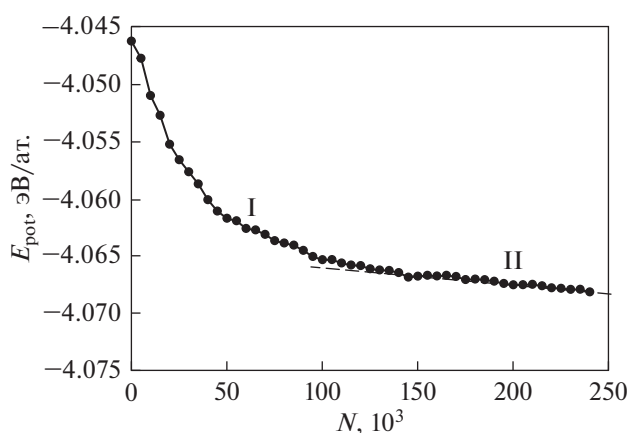


Рис. 3. Зависимость потенциальной энергии от числа МД/МК-шагов, $T = 723$ К.

на стадии II появляются и растут области с преобладанием атомов определенного сорта.

Чтобы охарактеризовать эти процессы мы вычислили параметры ближнего порядка Уоррена-Каули для многокомпонентного сплава [23]:

$$\alpha_i^{A,B} = 1 - \frac{N_i^{A,B}}{N_i C_A C_B}. \quad (1)$$

Здесь i — номер координационной сферы, $N_i^{A,B}$ — число атомов сорта В, находящихся на i -ой координационной сфере атома сорта А, N_i — координационное число, C_A , C_B — концентрация атомов сорта А и В.

На рис. 4 приведены значения параметров ближнего порядка для первой координационной сферы для пар различных и одноименных атомов, вычисленные после завершения стадии I (рис. 3). Отрицательные значения α_1 указывают на склонность к кластеризации вследствие притяжения атомов на первой координационной сфере, в то время как положительные значения α_1 свидетельствуют об отталкивании между атомами. Выраженная склонность к кластеризации ($\alpha_1 < 0$) наблюдается для пар атомов Cr—Cr, Fe—Co и Ni—Mn (рис. 4); противоположное поведение реализуется для пар атомов Co—Cr, Fe—Cr, Mn—Mn, для которых параметр α_1 большой и положительный.

На рис. 5 представлены CSRO параметры на первой координационной сфере в зависимости от числа МД/МК шагов для пар атомов в сплаве, для которых $\alpha_1 < 0$. Видно, что число пар атомов Cr—Cr, Fe—Co и Ni—Mn увеличивается существенно быстрее по сравнению с остальными. При этом величина α_1 для пар атомов Cr—Cr непрерывно уменьшается в течение всего времени моделирования. Это указывает на формирование обогащенных Cr областей, предшествующих образованию выделений.

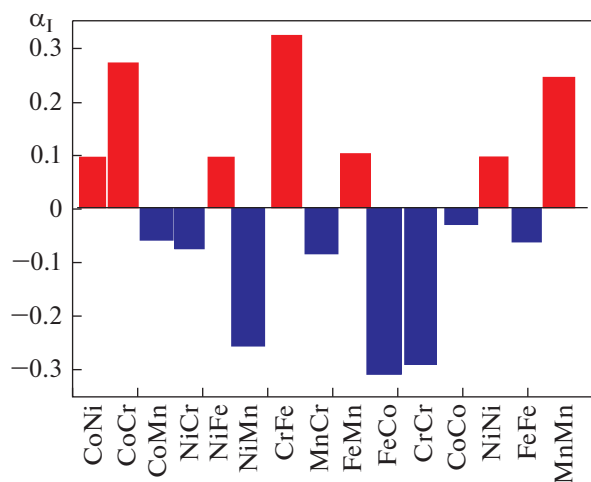


Рис. 4. Параметры ближнего порядка в конце стадии I для первой координационной сферы для различных пар атомов.

Аналогичное поведение демонстрирует параметр α_1 для пар атомов Fe—Co. В то же время для пар Ni—Mn величина α_1 быстро изменяется лишь первые 50×10^3 шагов и далее остается практически постоянной. Таким образом, образование выделений, обогащенных атомами Ni и Mn, является маловероятным.

Парные корреляционные функции $g(R)$ после завершения МД/МК-процедуры отжига для различных пар атомов, участвующих в формировании ближнего порядка, приведены на рис. 2б. Наблюдается существенное уширение пиков $g(R)$ для пар атомов Cr—Cr, Ni—Cr, Mn—Cr. Это свидетельствует о том, что образование CSRO с участием атомов Cr сопровождается увеличением искажений кристаллической решетки.

На рис. 6 показано распределение атомов в сечении кристаллита, толщиной два атомных слоя, в конце первой (а—г) и второй стадии (д—з). Для большей наглядности отдельно показаны группы атомов Cr, Ni—Mn, Ni—Mn—Cr, а также Fe—Co, то есть те, которые демонстрируют предпочтительное расположение на первой координационной сфере относительно друг друга ($\alpha_1 < 0$, рис. 5).

После завершения стадии I, через 75×10^3 МД/МК-шагов (рис. 6а—6г) формируются области с ближним порядком размером 2–4 параметра решетки. В распределении атомов Cr на данной стадии не видны какие-либо компактные области (рис. 6а). Мелкие фрагменты из атомов Ni и Mn (рис. 6б) объединены в более крупные и содержат уже три сорта атомов Ni, Mn и Cr (выделены штриховой линией на рис. 6в). На рис. 6г штриховой линией выделены области с ближним порядком, образованные атомами Fe—Co. Эти области, по-видимому, не связаны с другими, но образуют

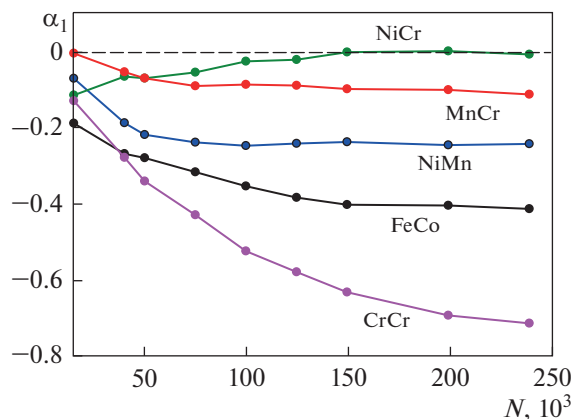


Рис. 5. Зависимость CSRO-параметров от числа МД/МК шагов для пар атомов, для которых $\alpha_1 < 0$.

длинные цепочки связанных между собой фрагментов.

На стадии II (рис. 6д—6з) через 240×10^3 МД/МК-шагов, начинают формироваться предвыделения фаз состава NiMnCr, что видно из образования пространственно выделенных областей, форма которых близка к сферической. На рис. 6ж штриховой линией выделен фрагмент, состоящий из трех сортов атомов Cr, Ni, Mn. Основу такого предвыделения составляют атомы Cr, а атомы Ni и Mn в основном декорируют его границы. Распределение атомов Fe и Co к концу стадии II характеризуется наличием ближнего порядка подобного тому, который наблюдается в конце стадии I.

Полученные результаты показывают, что в процессе отжига HEA CoNiCrFeMn эквиатомного состава в области умеренных температур формируется CSRO и образуются обогащенные Cr предвыделения, на границах которых располагаются атомы Ni и Mn. Появление таких предвыделений сопровождается увеличением искажений кристаллической решетки сплава.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Изменение в распределении атомов в эквиатомном HEA CoNiCrFeMn в процессе отжига исследовано с использованием атомистического МД/МК-подхода, сочетающего молекулярную динамику и Монте-Карло моделирование. Показано, что формирование CSRO происходит уже после относительно коротких времен отжига (стадия I на рис. 3), что сопровождается быстрым изменением параметров Уорена—Каули α_1 (рис. 5, 6а—6г). Увеличение времени отжига (стадия II на рис. 3) приводит к образованию обогащенных Cr предвыделений (рис. 5, 6д—6з).

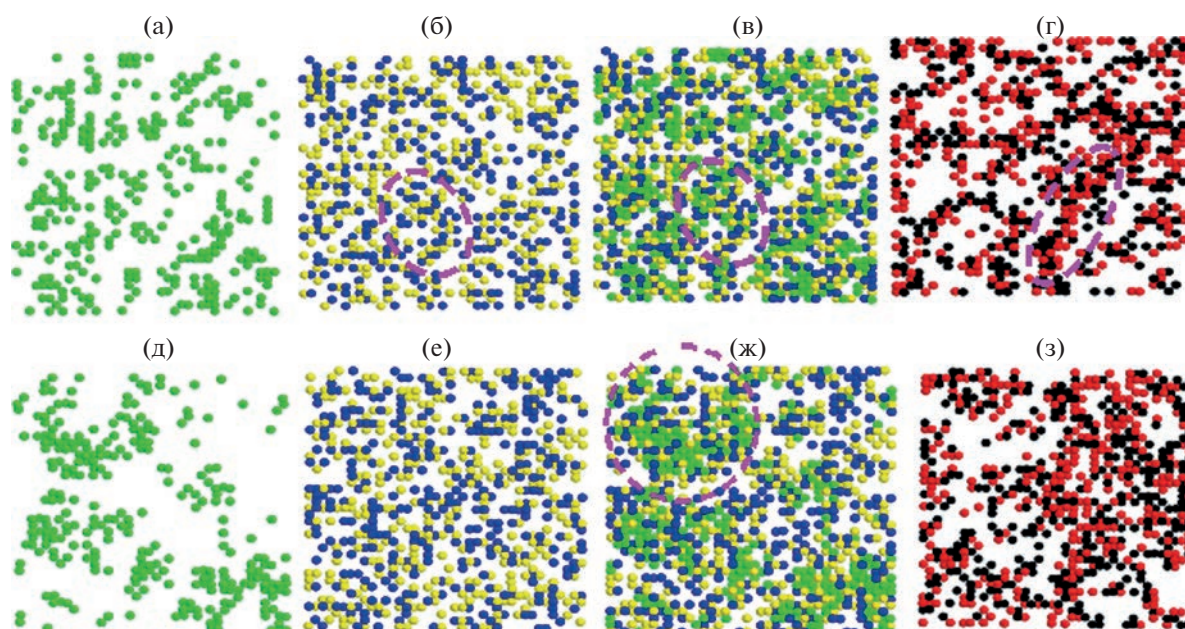


Рис. 6. Распределение атомов в двух слоях кристаллита эквиатомного сплава CoNiCrFeMn после (а–г) 75×10^3 шагов; (д–з) 240×10^3 шагов МД/МК-моделирования. Синие точки – атомы Ni (б, в, е, ж), желтые – Mn (б, в, е, ж), зеленые – Cr (а, в, д, ж), красные – Fe (г, з), черные – Co (г, з).

Параметры порядка на второй и более далеких координационных сферах оказались близкими к нулю в течение всего времени отжига, что свидетельствует об отсутствии тенденции к формированию дальнего порядка в условиях проведенного атомистического моделирования.

Из сопоставления рис. 2–5 видно, что при отжиге формируются области ближнего порядка на основе атомов Fe–Co или Ni–Mn–Cr, причем их образование происходит в значительной степени независимо. Длинные цепочки связанных между собой фрагментов из атомов Fe и Co формируются уже на ранней стадии (рис. 6г), сохраняются в течение всего времени отжига и лишь несколько увеличиваются в размере к концу II стадии (рис. 6з).

Более сложная картина наблюдается для областей, содержащих атомы Cr–Ni–Mn. Для пар атомов Cr–Cr, Ni–Mn, Ni–Cr параметры порядка $\alpha_1 < 0$, что свидетельствует о формировании кластеров, содержащих эти атомы (рис. 6б, 6в). Поскольку энергия Cr–Cr взаимодействия существенно больше, чем Cr–Ni и Cr–Mn, о чем свидетельствует параметр ближнего порядка на рис. 4, с увеличением времени отжига кластеризация атомов Cr становится доминирующей (рис. 5). В результате формируются обогащенные Cr области (рис. 6ж), а атомы Ni–Mn вытесняются на периферию этих областей. Это сопровождается увеличением искажений решетки сплава и приводит к размытию пиков парных корреляционных функций $g(R)$ атомных пар Cr–Cr, Ni–Cr,

Mn–Cr (рис. 2б), формирующих кластер CrNiMn на поздних стадиях отжига.

Полученные результаты согласуются с выводами работы [17], в которой показано, что при отжиге среднеэнтропийного сплава NiCoCr преимущественно формируется Cr–Cr пары атомов. В [16] был сделан вывод, что предпочтительным является образование пар атомов Cr–Cr и Cr–Mn в положении вторых соседей, что обусловлено особенностями магнитного состояния сплава, не учитываемыми в настоящей работе.

Следует отметить, что использованная при МК-моделировании схема Метрополиса не позволяет в полной степени описать кинетику эволюции ближнего порядка. Тем не менее она надежно воспроизводит особенности CSRO (кластеризация Fe–Co и формирование обогащенных Cr предвыделений), появление которых следует ожидать на ранних стадиях отжига. Для выяснения возможности протекания распада в рассматриваемом сплаве требуются гораздо более длительные времена отжига, подобные тем, которые использовались в [8].

С целью оценить влияние CSRO на прочностные свойства, используя метод МД, мы провели расчет энергии декогезии, определяющей работу, необходимую для раскрытия трещины. В результате было установлено, что увеличение CSRO приводит к возрастанию энергии декогезии. Однако ее изменение оказалось невелико (около 3%) и поэтому не следует ожидать заметного воз-

действия CSRO на распространение трещины. Основное влияние CSRO на прочностные свойства HEA CoNiCrFeMn обусловлено, по-видимому, локальным изменением энергии дефекта упаковки [18, 24] и, следовательно, изменением подвижности дислокаций или склонности к двойникованию.

ВЫВОДЫ

Результаты атомистического МД/МК-моделирования эволюции распределения атомов разного сорта в эквиатомном HEA CoNiCrFeMn в процессе отжига при умеренной температуре ($T = 723$ К) и расчета параметров химического ближнего порядка позволяют сделать следующие выводы.

1. Уже на ранней стадии МД/МК-процедуры отжига формируются области ближнего порядка на основе атомов Fe–Co или Ni–Mn–Cr, причем их образование происходит в значительной степени независимо.

2. С увеличением времени отжига доминирующей становится кластеризация атомов Cr, формируются обогащенные Cr области, а атомы Ni–Mn вытесняются на их границы.

3. Цепочки связанных между собой фрагментов из атомов Fe и Co формируются уже на ранней стадии и сохраняются в течение всего времени отжига.

4. Следует ожидать, что формирующийся ближний порядок будет влиять на энергию дефекта упаковки и, тем самым, на прочностные свойства HEA CoNiCrFeMn.

Работа выполнена в рамках государственного задания по темам “Давление” № 122021000032-5 и “Структура” № 122021000033-2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhang Y., Zuo T.T., Tang Z., Gao M.C., Dahmen K.A., Liaw P.K., Lu Z.P. Microstructures and properties of high-entropy alloys // *Prog. Mater. Sci.* 2014. V. 61. P. 1–93.
2. Miracle D.B., Senkov O.N. A critical review of high entropy alloys and related concepts // *Acta Mater.* 2017. V. 122. P. 448–511.
3. Tokarewicz M., Gradzka-Dahlke M. Review of Recent Research on AlCoCrFeNi High-Entropy Alloy // *Metals*. 2021. V. 11. P. 1302–1316.
4. Cantor B., Chang I.T.H., Knight P., Vincent A.J.B. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys // *Mater. Sci. Eng. A*. 2004. V. 375–377. P. 213–218.
5. Otto F., Dlouhý A., Pradeep K.G., Kuběňová M., Raabe D., Eggeler G. Decomposition of the single-phase high-entropy alloy CrMnFeCoNi after prolonged anneals at intermediate temperatures // *Acta Materialia*. 2016. V. 112. P. 40–52.
6. Laurent-Brocq M., Akhatova A., Perrière L., Chebini S., Sauvage X., Leroy E., Champion Y. Insights into the phase diagram of the CrMnFeCoNi high entropy alloy // *Acta Mater.* 2015. V. 88. P. 355–365.
7. Schuh B., Mendez-Martin F., Volker B., George E.P., Clemenb H., Pippan R., Hohenwarter A. Mechanical properties, microstructure and thermal stability of a nanocrystalline CoCrFeMnNi high-entropy alloy after severe plastic deformation // *Acta Mater.* 2015. V. 96. P. 258–268.
8. Huang X., Liu L., Duan X., Liao W., Huang J., Sun H., Yu Y. Atomistic simulation of chemical short-range order in HfNbTaZr high entropy alloy based on a newly-developed interatomic potential // *Mater. Design*. 2021. V. 2021. P. 09560.
9. Antillon E., Woodward C., Rao S.I., Akdim B., Parthasarathy T.A. Chemical short-range order strengthening in a model FCC high entropy alloy // *Acta Mater.* 2020. V. 190. P. 29–42.
10. Jiana W.-R., Xieb Z., Xu S., Su Y., Yao X., Beyerlein I.J. Effects of lattice distortion and chemical short-range order on the mechanisms of deformation in medium entropy alloy CoCrNi // *Acta Mater.* 2020. V. 199. P. 352–369.
11. Xing B., Wang X., Bowman W.J., Cao P. Short-range order localizing diffusion in multi-principal element alloys // *Scripta Mater.* 2022. V. 210. P. 114450.
12. Zhang F.X., Zhao S., Jin K., Xue H., Velisa G., Bei H., Huang R., Ko J.Y.P., Pagan D.C., Neufeld J.C., Weber W.J., Zhang Y. Local Structure and Short-Range Order in a NiCoCr Solid Solution Alloy // *Phys. Rev. Lett.* 2017. V. 118. P. 205501.
13. Lei Z.F., Liu X.J., Wu Y., Qiao S., Zhu Guo-liang, Dong An-ping, Shu Da, Sun Bao-de Enhanced strength and ductility in a high-entropy alloy via ordered oxygen complexes // *Nature*. 2018. V. 563(7732). P. 546–550.
14. Ding Q.Q., Zhang Y., Chen X., Fu X., Chen D., Chen S., Gu L., Wei F., Bei H., Gao Y., Wen M., Li J., Zhang Z., Zhu T., O Ritchie R., Yu Q. Tuning element distribution, structure and properties by composition in high-entropy alloys // *Nature*. 2019. V. 574(7777). P. 223–227.
15. Ma Y., Wang Q., Li C., Santodonato L.J., Feygenson M., Dong C., Liaw P.K. Chemical short-range orders and the induced structural transition in high-entropy alloys // *Scripta Mater.* 2018. V. 144. P. 64–68.
16. Mizuno M., Sugita K., Araki H. Prediction of short-range order in CrMnFeCoNi high-entropy alloy // *Results Phys.* 2022. V. 34. P. 105285.
17. Li Q.-J., Sheng H., Ma E. Strengthening in multi-principal element alloys with local-chemical-order roughened dislocation pathways // *Nature Comm.* 2019. V. 10. P. 3564. 11 p.
18. Hsieh K.-T., Lin Y.-Y., Lu C.-H., Yang J.-R., Liaw P.K., Kuo C.-L. Atomistic simulations of the face-centered-cubic-to-hexagonal-close-packed phase transformation in the equiatomic CoCrFeMnNi high entropy alloy under high compression // *Comp. Mater. Sci.* 2020. V. 184. P. 109864.
19. Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Горностырев Ю. Н. Образование сегрегаций и нанофасетирование асимметричных специальных границ зерен в Al // *ФММ*. 2022. Т. 123. № 10. С. 1079–1084.

20. <http://lammps.sandia.gov/index.html>.
21. Choi W.-M., Kim Y., Seol D., Lee B.-J. Modified embedded-atom method interatomic potentials for the Co–Cr, Co–Fe, Co–Mn, Cr–Mn and Mn–Ni binary systems // *Comp. Mater. Sci.* 2017. V. 130. P. 121–129.
22. Zhang S., Kontsevoi O.Y., Freeman A.J., Olson G.B. First principles investigation of zinc-induced embrittlement in an aluminum grain boundary // *Acta Mater.* 2011. V. 59. P. 6155–6167.
23. de Fontaine D. The number of independent pair-correlation functions in multicomponent systems // *J. Appl. Crystall.* 1971. V. 4. № 1. P. 15–19.
24. Shuang S., Lu S., Zhang Bo, Bao Chen, Kan Q., Kang G., Zhang Xu. Effects of high entropy and twin boundary on the nanoindentation of CoCrNiFeMn high-entropy alloy: A molecular dynamics study // *Comp. Mater. Sci.* 2021. V. 195. P. 110495.

Formation of Chemical Short-Range Order in Equiatomic CoNiCrFeMn High-Entropy Alloy. Atomistic MD/MC Simulation

I. N. Karkin¹, L. E. Karkina¹, and Yu. N. Gornostyrev¹

¹*Mikheev Institute of Metal Physics, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, 620108 Russia*

*e-mail: lidiakarkina@gmail.com

Abstract—The formation of short-range order in the equiatomic high-entropy alloy (HEA) CoNiCrFeMn during annealing at moderate temperatures was studied using atomistic MD/MC simulation, including the exchange of atoms in the Monte Carlo (MC) scheme and the relaxation of its positions by the molecular dynamics (MD) method. It has been found that two types of chemical short range order (CSRO) regions are formed during annealing. One of them consist mainly of Fe and Co atoms, while others are enriched by Cr with Ni and Mn atoms at their boundaries. It is shown that the formation of short-range order includes several stages, the sequence of which is determined by the value of Cr–Cr, Fe–Co and Ni–Mn interatomic interactions.

Keywords: high-entropy alloys, short range order, atomistic modeling, decohesion