
ФИЗИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 538.9

<https://doi.org/10.25587/2222-5404-2025-22-3-23-36>

Оригинальная научная статья

Анализ влияния ближнего порядка на механизмы деформации при сдвиге высокоэнтропийных сплавов TiNbZrV и TiNbZrHf

А. А. Давлетбаков¹, Р. И. Бабичева^{1,2}, М. Н. Семёнова³✉, Е. А. Корзникова^{1,3,4}

¹Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация

²Институт физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, г. Уфа, Российская Федерация

³Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова, г. Мирный, Российская Федерация

⁴Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, г. Уфа, Российская Федерация

✉ mariya_semyonova86@mail.ru

Аннотация

В работе проведено комплексное моделирование влияния ближнего порядка на механические свойства объемно-центрированных кубических высокоэнтропийных сплавов ZrTiNbV и ZrTiNbHf при сдвиговой деформации с использованием гибридного подхода молекулярной динамики и Монте-Карло. Высокоэнтропийные сплавы представляют собой новый класс материалов, получаемых путем смешивания четырех и более элементов в примерно равных долях, что обеспечивает уникальное сочетание свойств и расширяет возможности традиционного материаловедения. В последние годы особое внимание уделяется механическим свойствам и деформационным механизмам высокоэнтропийных сплавов именно с ОЦК решеткой, где ключевую роль играют винтовые дислокации, взаимодействие с атомами различных элементов и формирование ближнего порядка, способствующего упрочнению материала. Построены бикристаллические модели с различной степенью атомного упорядочения, полученной в результате МД/МК-релаксации, что позволило реализовать как хаотическое, так и кластеризованное распределение элементов. Проведен сравнительный анализ структурных изменений, эволюции дефектов и механических характеристик (в частности, предела текучести) при сдвиге. Установлено, что в сплаве ZrTiNbV формирование кластеров Nb инициирует локальные фазовые превращения ОЦК → ГПУ и снижает предел текучести, тогда как для ZrTiNbHf образование сегрегаций и нанокластеров эффективно препятствует миграции границ зерен и фазовым превращениям, что приводит к значительному повышению прочности. Полученные результаты согласуются с современными представлениями о роли ближнего порядка в упрочнении высокоэнтропийных материалов и демонстрируют, что целенаправленное управление

© Давлетбаков А. А., Бабичева Р. И., Семёнова М. Н., Корзникова Е. А., 2025

химическим упорядочением и структурой границ зерен может быть эффективным инструментом для оптимизации механических свойств высокоэнтропийных сплавов. Работа расширяет фундаментальные знания о механизмах пластичности и разрушения в многокомпонентных сплавах, а также открывает новые перспективы для их применения в условиях высоких механических нагрузок и агрессивных сред.

Ключевые слова: высокоэнтропийные сплавы, ближний порядок, объемно-центрированные кубические решетки, гексагональные плотноупакованные решетки, ZrTiNbV, ZrTiNbHf, молекулярно-динамическое моделирование, метод Монте-Карло, сдвиговая деформация, механические свойства, LAMMPS

Финансирование. Семёнова М. Н. благодарит за финансовую поддержку исследования (проведение исследования, создание черновика рукописи) Российский научный фонд, грант № 24-22-00092.

Для цитирования: Давлетбаков А. А., Бабичева Р. И., Семёнова М. Н., Корзникова Е. А. Анализ влияния ближнего порядка на механизмы деформации при сдвиге высокоэнтропийных сплавов TiNbZrV и TiNbZrHf. *Вестник СВФУ*. 2025, Т. 22, № 3. С. 23–36. DOI: 10.25587/2222-5404-2025-22-3-23-36

Original article

Analysis of short-range ordering effect on shear deformation mechanisms of high-entropy alloys TiNbZrV and TiNbZrHf

Arslan A. Davletbakov¹, Rita I. Babicheva^{1,2}, Maria N. Semyonova³✉, Elena A. Korznikova^{1,3,4}

¹Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation

²Institute of Molecule and Crystal Physics, Ufa Federal Research Center
of the Russian Academy of Sciences, Ufa, Russian Federation

³Mirny Polytechnic Institute (branch) of the M.K. Ammosov North-Eastern Federal University,
Mirny, Russian Federation

⁴Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences, Ufa,
Russian Federation

✉ mariya_semyonova86@mail.ru

Abstract

In this work, a comprehensive modeling of the influence of short-range order on the mechanical properties of body-centered cubic high-entropy ZrTiNbV and ZrTiNbHf alloys under shear deformation using a hybrid molecular dynamics (MD) and Monte Carlo (MC) approach has been carried out. High-entropy alloys (HEA) are a new class of materials produced by mixing four or more elements in approximately equal proportions, providing a unique combination of properties and expanding the capabilities of traditional materials science. In recent years, special attention has been paid to the mechanical properties and deformation mechanisms of high-entropy alloys with a bcc lattice, where screw dislocations, interaction with atoms of various elements and the formation of short-range order, which contributes to the strengthening of the material, play a key role. Bicrystalline models with different degrees of atomic ordering resulting from MD/MC relaxation have been constructed, allowing for both chaotic and clustered elemental distributions. A comparative analysis of structural changes, defect evolution and mechanical properties (in particular, yield strength) under shear has been carried out. It was found that in ZrTiNbV alloy the formation of Nb clusters initiates local phase transformations BCC → HCP and reduces yield strength, whereas for ZrTiNbHf the formation of segregations and nanoclusters

effectively prevents grain boundary migration and phase transformations, which leads to a significant increase in strength. The results are consistent with the current understanding of the role of near-order in the hardening of high-entropy materials and demonstrate that targeted control of chemical ordering and grain boundary structure can be an effective tool for optimizing the mechanical properties of high-entropy alloys. The work extends fundamental knowledge of plasticity and fracture mechanisms in multicomponent alloys and opens new perspectives for their application under high mechanical loads and aggressive environments.

Keywords: high-entropy alloys, near-order, BCC lattice, HCP lattices ZrTiNbV, ZrTiNbHf, molecular dynamic modeling, Monte Carlo method, shear deformation, mechanical properties, LAMMPS

Funding. Maria N. Semyonova thanks the Russian Science Foundation, grant No. 24-22-00092, for financial support of the research (conducting the research, creating a draft manuscript).

For citation: A. A. Davletbakov, Babicheva R. I., Semyonova M. N., Korznikova E. A. Analysis of short-range ordering effect on shear deformation mechanisms of high-entropy alloys TiNbZrV and TiNbZrHf. *Vestnik of NEFU*. 2025, Vol. 22, No. 3. Pp. 23–36. DOI: 10.25587/2222-5404-2025-22-3-23-36

Введение

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) представляют собой новый класс материалов, получаемых путем смешивания четырех и более элементов в примерно равных долях, что обеспечивает уникальное сочетание свойств и расширяет возможности традиционного материаловедения [1–6]. Благодаря высокой прочности, отличной коррозионной стойкости и трещиностойкости, ВЭС привлекают значительное внимание исследователей, а их широкое композиционное пространство открывает перспективы для создания новых материалов с заданными характеристиками [7–9]. Особый интерес вызывают объемно-центрированные кубические (ОЦК) ВЭС, такие как системы на основе ZrTiNb, которые демонстрируют высокую прочность и пластичность даже при криогенных температурах, а также обладают превосходной биосовместимостью и устойчивостью к агрессивным средам, что подтверждается как экспериментальными, так и теоретическими исследованиями [10–18].

В последние годы особое внимание уделяется механическим свойствам и деформационным механизмам ОЦК ВЭС, где ключевую роль играют винтовые дислокации, взаимодействие с атомами различных элементов и формирование ближнего порядка (short-range order, SRO), способствующего упрочнению материала [19–23]. Исследования показывают, что введение дополнительных компонентов, таких как кислород (O₂) или алюминий (Al), а также управление метастабильностью фаз (TRIP/TWIP-эффекты) позволяют существенно повысить предел текучести и пластичность сплавов за счет активации новых механизмов деформации, таких как двойникование и фазовые превращения [24–29]. Подобные эффекты были зафиксированы в ряде работ, где отмечено, что формирование кластеров и сегрегаций на границах зерен дополнительно стабилизирует структуру и способствует росту механической прочности [30–32].

Ярким примером подобных исследований является работа Lee S., Kim H., Lee B.J. «Atomistic modeling of short-range order effects in ZrTiNbV high-entropy alloys» [10], в которой с помощью молекулярно-динамического моделирования было показано, что наличие выраженного ближнего порядка в ОЦК сплаве ZrTiNbV приводит к увеличению предела текучести и более равномерному распределению напряжений при деформации. В ходе работы моделировались структуры с разной степенью химического упорядочения, и анализировалось

их поведение при растяжении. Было установлено, что SRO способствует формированию устойчивых дислокационных структур и снижает склонность к локализованному разрушению, что в целом повышает эксплуатационную надежность материала.

Помимо растяжения, важное значение для понимания пластичности и разрушения ВЭС имеет исследование их поведения при сдвиговой деформации. Сдвиговые нагрузки часто моделируются для выявления особенностей зарождения и движения дислокаций, формирования полос сдвига и оценки устойчивости к локализованному сдвигу. В ряде работ показано, что для сплавов ZrTiNbV и ZrTiNbHf наличие ближнего порядка может существенно влиять на механизмы сдвиговой деформации, повышая сопротивление образованию сдвиговых полос и замедляя распространение дефектов [2, 22], из сдвиговой деформации с использованием молекулярно-динамического моделирования позволяет выявить закономерности распределения напряжений, взаимодействия дислокаций и формирования новых дефектных областей, что имеет ключевое значение для повышения эксплуатационной надежности и долговечности высокоэнтропийных материалов.

Современные методы атомистического моделирования, включая гибридные подходы молекулярной динамики (МД) и Монте-Карло (МК), позволяют глубоко анализировать влияние химического упорядочения и ближнего порядка на деформационное поведение ВЭС, включая как растяжение, так и сдвиговые нагрузки [33–36]. Для систем на основе ZrTiNbV и ZrTiNbHf такие подходы обеспечивают детальное изучение влияния SRO на механические свойства при холодной деформации, включая особенности зарождения дислокаций, формирования полос сдвига и распределения напряжений. Настоящая работа частично посвящена исследованию сдвиговой деформации и направлена на анализ влияния ближнего порядка на механическое поведение этих двух высокоэнтропийных сплавов при комнатной температуре. Полученные результаты сопоставляются с литературными данными для аналогичных материалов с различной степенью атомного упорядочения, что позволяет выявить универсальные закономерности и композиционные ограничения [37–40].

Материалы и методы

Материалы исследования

Рассматриваются высокоэнтропийные сплавы двух типов: ZrTiNbV и ZrTiNbHf. Молекулярно-динамическое моделирование проводилось для бикристаллической модели (рис. 1), случайно заполненной 25 920 атомами соответствующих элементов, формирующих структуру бикристалла. При этом модели с разным атомным составом обозначаются как B1r и B2r. Размеры бикристаллов составляют примерно 18,0×20,0×2,8 нм по осям x , y и z соответственно.

Для формирования бикристалла применён стандартный метод создания границ зёрен (ГЗ) с совпадающей узловой решёткой. В исходный бездефектный бикристаллический образец внедрены две низкоэнергетические симметричные наклонные границы $\Sigma 3$ (1–12) [110] с кристаллографическими направлениями [111], [1–12] и [110], где кристаллографические направления совпадают с осями x , y и z соответственно. Верхняя часть образца повернута на 70,53° вокруг оси относительно нижней части для формирования ГЗ. Одна граница расположена в центре структуры, а вторая формируется верхней/нижней гранями вдоль оси y благодаря периодическим граничным условиям в этом направлении (рис. 1).

Процедура релаксации методом МК/МД

Для получения установившегося состояния рассматриваемых ВЭС для сплавов B1r и B2r проводится гибридное МД/МК-моделирование. Эта процедура

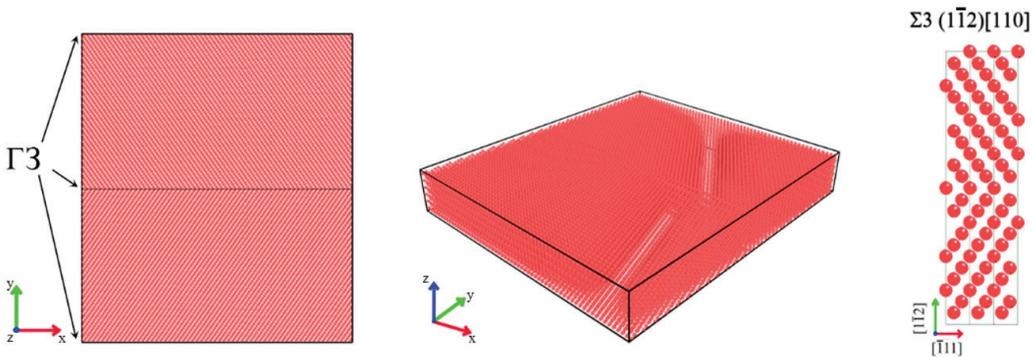


Рис. 1. Исходная конфигурация бикристалла с границами зёрен $\Sigma 3$ (1-12) [110]
Fig. 1. Initial configuration of the bicrystal with grain boundaries $\Sigma 3$ (1-12) [110]

релаксации материала включает в себя одновременное переключение атомов в соответствии с подходом Монте-Карло, описанным ниже, и МД-термолизацию путем интегрирования классических уравнений движения.

Перед началом МД/МК моделирования бикристаллы В1г и В2г подвергаются минимизации энергии методом сопряженного градиента и далее уравниваются в течение 40 пс, поддерживая все компоненты давления на уровне 0 Па и температуру на уровне 300 К (ансамбль NPT). Как и в последующих МК с заменой атомов, временной шаг здесь установлен на 1 фс, а периодические граничные условия наложены вдоль осей x , y и z .

Замена атомов одного типа на атомы другого типа осуществляется с помощью широко распространенной процедуры МК, которая следует критерию принятия Метрополиса, определяющему вероятность замены при выбранной температуре. Согласно этому подходу, обмен происходит, если энергия сплава после обмена ($i+1$) атомов меньше энергии при предыдущей попытке i . В обратной ситуации обмен принимается с вероятностью, определяемой согласно уравнению (1):

$$P = e^{\left(\frac{-E_{i+1}-E_i}{k \cdot T}\right)}, \quad (1)$$

где e – экспонента, T – заданная температура, k – постоянная Больцмана; за один временной интервал осуществляется только один обмен атомами, при этом кинетическая энергия системы до и после обмена остается неизменной. Для каждой атомной пары в моделируемых материалах проводится 100 000 обменов в течение 50 циклов МД/МК, причем после каждого цикла обмена в Монте-Карло выполняется процедура МД-релаксации в течение 20 пс в ансамбле NPT. После завершения такой процедуры МД/МК-релаксации сплавы ZrTiNbV и ZrTiNbHf далее могут обозначаться как В1о и В2о соответственно, что отражает их равновесное структурное состояние.

Химическое сродство элементов, входящих в состав сплавов, подвергнутых релаксации методом МК/МД, (В1о и В2о) может быть оценено путем расчета параметра Уоррена-Каули (α) для различных атомных пар первой координационной сферы с использованием уравнения (2):

$$\alpha = 1 - \frac{Z_{mn}}{\chi_n \cdot Z_m}, \quad (2)$$

где Z_{mn} – число атомов n -типа вокруг атомов m -типа, Z_m – общее число атомов вокруг атомов m -типа, а χ_n – атомная доля атомов n -типа в ВЭСе. Когда α равно

0, m-n атомные пары распределяются случайным образом без какого-либо упорядочения. Если α больше 0, такие пары могут встречаться в материале реже, чем при случайном распределении; когда же α меньше 0, то химическая связь между атомами n- и m-типа более благоприятна.

Моделирование сдвиговой деформации

Сдвиговая деформация для бикристаллов B1r, B2r, B1o и B2o моделируется при комнатной температуре (300 K) и скорости деформации $1.0 \times 10^8 \text{ с}^{-1}$ с использованием ансамбля NPT, где все компоненты напряжений, кроме σ_{xy} , поддерживаются равными нулю. Сдвиговое нагружение реализуется вдоль плоскости xu до достижения относительной деформации $\varepsilon_{xy} = 0,20$, что позволяет исследовать механизмы пластичности, связанные с движением и взаимодействием дислокаций под действием касательных напряжений. Для расчетов применяется программный пакет LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator), который обеспечивает высокоэффективное моделирование атомистических процессов в многокомпонентных системах и позволяет учитывать сложную динамику дефектов и перестроек кристаллической решетки.

Межатомные взаимодействия в сплавах ZrTiNbV и ZrTiNbHf описываются многоатомными потенциалами, основанными на модифицированном методе встроенных атомов (modified embedded-atom method, MEAM), что позволяет корректно воспроизводить особенности поведения многокомпонентных твердых растворов при сдвиге. Несмотря на определенные ограничения точности для сложных сплавов, такие потенциалы обеспечивают адекватное описание основных деформационных процессов. Для анализа эволюции атомной структуры и дефектов, возникающих в процессе сдвиговой деформации, используется программный комплекс OVITO (Open Visualization Tool), позволяющий визуализировать распределение напряжений, движение дислокаций и формирование новых дефектных областей в трёхмерном пространстве.

Результаты и обсуждение

Упорядочение при релаксации методом МК/МД

В процессе релаксации исходных материалов (B1r и B2r) их энергия, как правило, должна уменьшаться. Действительно, из рис. 2(a) видно, что средняя энергия на один атом, Eatom, для исходных структур уменьшается с циклами МК/МД релаксации. Как видно, B1r со случайным распределением атомов имеет более высокую энергию, чем в случае B2r (-6,010 эВ и -6,374 эВ соответственно). В процессе релаксации энергия бикристалла B1r значительно падает в течение первых 10 циклов. После 50 циклов энергия упорядоченных M1o и M3o составляет около -6,125 эВ и -6,396 эВ соответственно. В отличие от ZrTiNbV, энергия ZrTiNbHf снижается незначительно.

На рис. 2(b) приведены диаграммы значений параметра Уоррена Каули, α для возможных атомных пар в релаксированных ВЭС B1o и B2o, рассчитанных с использованием метода МК/МД. Видно, что в B1o МК/МД релаксация приводит к образованию кластеров Nb, Zr и V-Ti. В то же время атомы V не склонны к образованию химических связей друг с другом, то же самое можно сказать и об атомных парах Nb-Ti и Nb-Zr. Остальные атомные комбинации в этом сплаве распределены в структуре практически случайным образом. Что касается ВЭС B2o, то в нем происходит упорядочение атомов Zr и особенно Nb, и, согласно рассчитанным значениям WCP, отдельные конгломераты этих элементов имеют тенденцию располагаться удаленно друг от друга. Кроме того, здесь можно обнаружить некоторую кластеризацию атомов Hf.

На рис. 3 показано распределение атомов в ВЭС после циклов МК/МД релаксации. Представленные атомные структуры находятся в хорошем согласии с

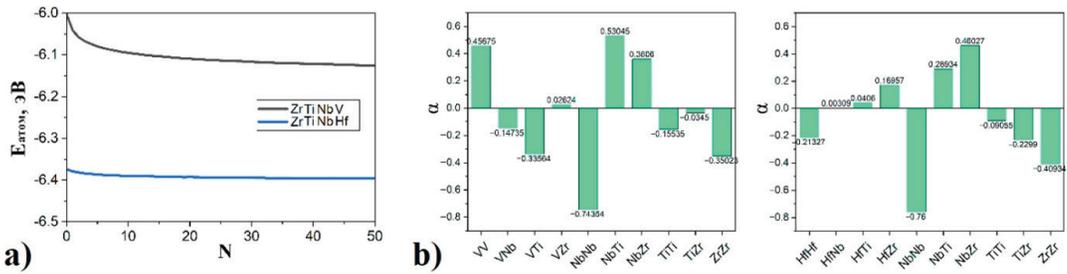


Рис. 2. Зависимость средней энергии на атом от числа циклов релаксации (а); значения параметра Уоррена Каули (б) для различных атомных пар ВЭС В1о (слева) и В2о (справа), полученных после 50 циклов релаксации
Fig. 2. Dependence of the average energy per atom on the number of relaxation cycles (a); values of the Warren Cowley parameter (b) for different atomic pairs of B1o (left) and B2o (right) HEA obtained after 50 relaxation cycles

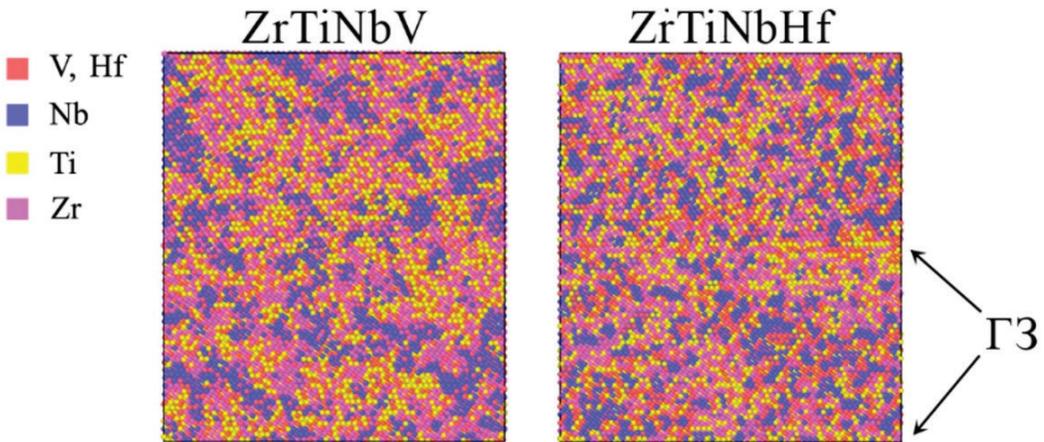


Рис. 3. Атомные структуры ВЭС после МК/МД релаксации (В1о и В2о)
Fig. 3. Atomic structures of HEA after MC/MD relaxation (B1o and B2o)

расчетными значениями WCP (рис. 2). Для обоих материалов наблюдается образование упорядоченных кластеров. Как В1о, так и В2о содержат хаотично распределенные кластеры атомов Nb и Zr, однако их размер в В2о меньше. Кроме того, в В1о видны участки с упорядоченной структурой V-Ti.

Следует отметить, что в В2о наблюдается образование ЗГ сегрегаций. Горизонтальные линии атомов Ti и Zr, окрашенные в желтый и розовый цвета соответственно, занимают атомные позиции в ГЗ, а относительно небольшие кластеры Nb расположены предпочтительно внутри зерен. В В1о сегрегации по ГЗ отсутствуют.

Сдвиговая деформация

С целью выявления влияния ближнего порядка на деформационное поведение рассматриваемых сплавов было проведено МД моделирование сдвиговой деформации ВЭС. Результаты, полученные для релаксированных ВЭС В1о и В2о, сравниваются с соответствующими результатами для сплавов без предварительной МК/МД релаксации (В1г и В2г). На рис. 4 представлены кривые зависимости напряжения от деформации, полученные при сдвиге бикристаллов В1г, В2г,

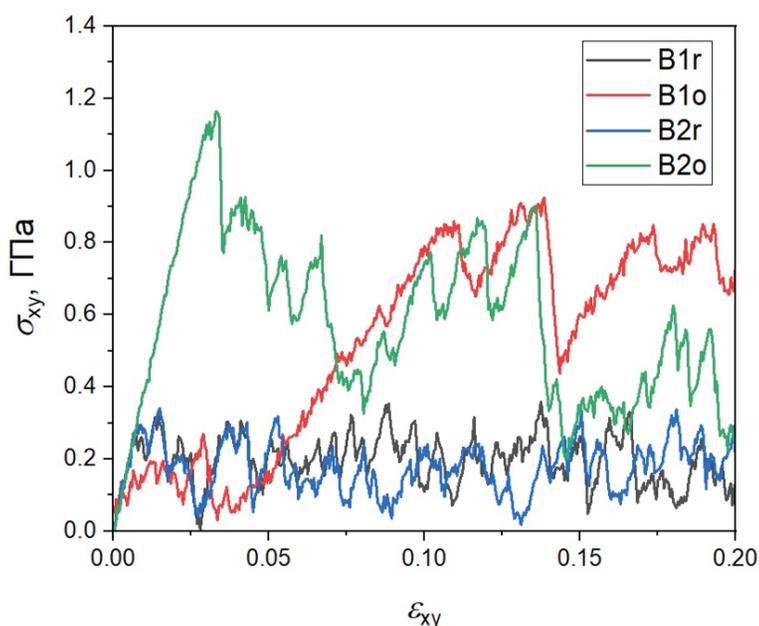


Рис. 4. Зависимость напряжения от деформации при сдвиге ВЭС

Fig. 4. Stress-strain dependence of shear HEA

B1o и B2o при температуре 300 К. Заметно, что напряжения нестабильны при деформировании всех четырех образцов и демонстрируют существенную осцилляцию после достижения предела текучести (табл.). Стоит отметить, что в случае случайного распределения атомов (сплавы B1r и B2r), кривые на всем интервале деформирования осциллируют на уровне $\sigma_{xy} = 0,1 \div 0,2$ ГПа, в то время как после релаксации соответствующие сплавы демонстрируют резкие перепады напряжений.

Химический состав и распределение атомов в материале существенно влияют на деформацию ВЭС. Если при случайном распределении атомов предел текучести сплава ZrTiNbV выше, чем у релаксированного сплава B1o (0,269 ГПа и 0,136 ГПа соответственно), то в случае ZrTiNbHf наблюдается обратная картина: предел текучести B2o значительно превышает значение, полученное для B2r (1,098 ГПа и 0,293 ГПа соответственно).

Таблица

Предел текучести и соответствующая деформация

Table

Yield strength and corresponding strain

ВЭС / HEA	B1r	B2r	B1o	B2o
σ_y , ГПа	0,268914	0,293485	0,135794	1,09769
ϵ_y	0,0065	0,009	0,0025	0,029

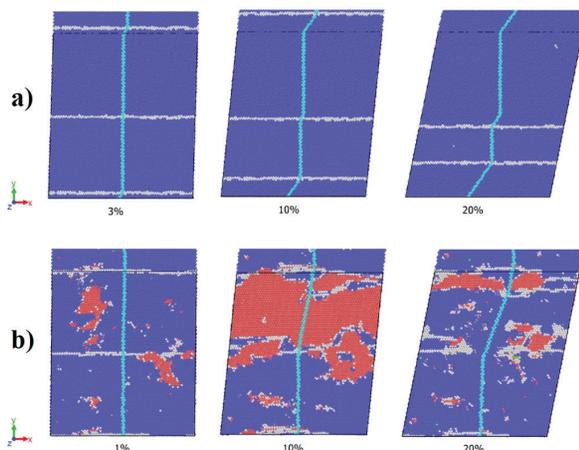


Рис. 5. Эволюция структуры бикристаллов B1r (a) и B1o (b) при сдвиге. Атомы ОЦК, ГПУ и неупорядоченной структур показаны синим, красным и серым цветами, соответственно. Линии меченых атомов, введенные перпендикулярно плоскости ГЗ, показаны голубым цветом

Fig. 5. Structure evolution of B1r (a) and B1o (b) bicrystals under shear. Atoms of the BCC, HCP, and disordered structures are shown in blue, red, and gray, respectively. The lines of labeled atoms introduced perpendicular to the GZ plane are shown in blue

Обсуждение результатов

Упрочнение или релаксация в процессе деформации материала всегда сопровождается изменением его структуры. Поэтому, чтобы выяснить каков вклад атомного упорядочения в процессе релаксации, далее проводится анализ эволюции структуры рассматриваемых ВЭС при их деформировании.

На рис. 5 приведены структуры сплава ZrTiNbV со случайным распределением атомов (a) и полученного после МК/МД релаксации (b) при различных степенях деформации. Атомы ОЦК, ГПУ и дефектной структур показаны здесь синим, красным и серым цветами соответственно. В исходном состоянии, до деформации, вводятся вертикальные линии меченых атомов с целью отслеживания смещения атомов и выявления механизмов деформации.

Из рис. 5(a) видно, что основным механизмом деформации в бикристалле B1r является миграция ГЗ. Постепенное движение нижней ГЗ, образованной гранями бикристалла, к ГЗ, расположенной в середине образца, наблюдается уже на ранних этапах деформирования. Вплоть до 20% деформации здесь работает этот механизм деформации. Дальнейшая деформация, очевидно, привела бы к исчезновению границ и образованию монокристалла.

В случае упорядоченного сплава (B1o) на рис. 5(b) картина выглядит иначе. Уже при сдвиге образца на 1% в некоторых областях структуры, где отсутствуют кластеры Nb, наблюдается переход исходной ОЦК структуры в ГПУ фазу. Это в свою очередь сопровождается релаксацией материала, чем и обусловлен такой низкий предел текучести ВЭС B1o (табл.). Очевидно, это обусловлено неоднородным распределением атомов Nb, который выступает стабилизатором ОЦК структуры. Кластеризация Nb в процессе МК/МД релаксации приводит к появлению участков, обедненных атомами Nb, что способствует фазовому переходу в них. Дальнейшая деформация однако приводит к упрочнению материала (рис. 4), что вызвано ростом плотности границ в структуре, задерживающих движение дислокаций. Резкое уменьшение напряжений при степенях деформации

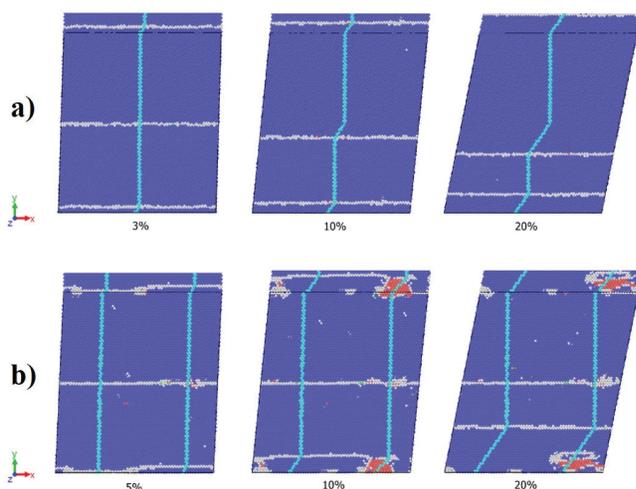


Рис. 6. Эволюция структуры бикристаллов B2r (a) и B2o (b) при сдвиге. Атомы ОЦК, ГПУ и неупорядоченной структур показаны синим, красным и серым цветами, соответственно. Линии меченых атомов, введенные перпендикулярно плоскости ГЗ, показаны голубым цветом

Fig. 6. Evolution of the structure of B2r (a) and B2o (b) bicrystals under shear. Atoms of the BCC, HCP, and disordered structures are shown in blue, red, and gray, respectively. The lines of labeled atoms introduced perpendicular to the GZ plane are shown in blue

больше ~13 % связано с обратным переходом ГПУ фазы в ОЦК фазу. При этом кристаллографическая ориентация вновь образованной ОЦК фазы совпадает с ориентацией соседнего исходного зерна. Таким образом, в отличие от B1r, в данном случае деформация сопровождается фазовыми переходами.

На рис. 6 приведены изображения соответствующих структур для бикристаллов B2r (a) и B2o (b). Подобно предыдущему случаю, когда атомы в структуре сплава распределены случайным образом (B2r), деформация сопровождается миграцией ГЗ. Однако деформационное поведение сплава B2o, подвергнутого предварительной релаксации методом МК/МД, отличается.

Высокий предел текучести B2o (рис. 3) обусловлен наличием ЗГ сегрегаций, тормозящих миграцию ГЗ, а также более равномерным распределением нанокластеров Nb меньшего размера чем у B1o (рис. 3). Эти кластеры, во-первых, подавляют преждевременный фазовый переход ОЦК фазы в ГПУ фазу, и во-вторых, приводят к дисперсионному упрочнению. При достижении критического значения напряжения ГЗ преодолевает тормозящий барьер, вызванный сегрегациями, и начинает мигрировать. Однако, в отличие от сплавов со случайным распределением атомов, здесь мигрирует лишь одна граница, в то время как вторая остается закрепленной сегрегацией атомов.

Заключение

Проведенное моделирование и анализ структуры ВЭС ZrTiNbV и ZrTiNbHf позволили выявить ключевые закономерности влияния ближнего порядка и атомного распределения на механические свойства при сдвиговой деформации. Было установлено, что релаксация методом МК/МД приводит к формированию кластеров и сегрегаций отдельных элементов, что существенно изменяет характер деформационного поведения по сравнению со сплавами со случайным распределением атомов.

Для сплава ZrTiNbV (B1o) обнаружено, что кластеризация Nb и образование участков, обедненных этим элементом, способствуют локальным фазовым превращениям из ОЦК в ГПУ структуру уже на ранних стадиях деформации. Это приводит к снижению предела текучести, однако дальнейшее увеличение деформации сопровождается упрочнением за счет роста плотности границ и обратного фазового перехода. В отличие от этого, в сплаве со случайным распределением атомов (B1r) основным механизмом деформации является миграция границ зерен, что обеспечивает более стабильное напряженное состояние до достижения монокристаллической структуры.

В случае сплава ZrTiNbHf (B2o) выявлено, что наличие ГЗ сегрегаций и равномерно распределенных нанокластеров Nb обеспечивает значительное повышение предела текучести по сравнению с исходной структурой (B2r). Сегрегации эффективно тормозят миграцию границ зерен и подавляют преждевременные фазовые переходы, что приводит к дисперсионному упрочнению материала. Только при достижении критических напряжений граница зерна преодолевает барьер, обусловленный сегрегациями, что свидетельствует о более сложном и устойчивом механизме пластичности.

Таким образом, степень химического упорядочения и особенности распределения элементов оказывают ключевое воздействие на механические свойства и механизмы деформации ВЭС. Полученные результаты подчеркивают, что целенаправленное управление ближним порядком и структурой границ зерен может быть эффективным инструментом для оптимизации прочностных и пластических характеристик ВЭС, что открывает новые возможности для их применения в условиях высоких механических нагрузок и агрессивных сред.

Л и т е р а т у р а / R e f e r e n c e s

1. Kamal MV, Ragunath S, Hema Sagar Reddy M, et al. Recent Advancements in Lightweight High Entropy Alloys - A Comprehensive Review. *International Journal of Lightweight Materials and Manufacture*. 2024;7:699-720. DOI: 10.1016/j.ijlmm.2024.06.001 (in English).
2. Babicheva RI, Semyonov AS, Izosimov AA, Korznikova EA. Analysis of Short-Range Ordering Effect on Tensile Deformation Behavior of Equiatomic High-Entropy Alloys TiNbZrV, TiNbZrTa and TiNbZrHf Based on Atomistic Simulations. *Modelling*. 2024;5(4):1853-1864. DOI: 10.3390/modelling5040096 (in English).
3. Sobieraj D, Wróbel JS, Rygier T, et al. Chemical short-range order in derivative Cr–Ta–Ti–V–W high entropy alloys from the first-principles thermodynamic study. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2020;22(46):23929-23951. DOI: 10.1039/D0CP03764H (in English).
4. Kozhakhmetov Ye, Skakov M, Kurbanbekov S, et al. High-Entropy Alloys: Innovative Materials with Unique Properties for Hydrogen Storage and Technologies for Their Production. *Metals*. 2025;15(2):100. DOI: 10.3390/met15020100 (in English).
5. Wang Q, Yao Y. Harnessing machine learning for high-entropy alloy catalysis: a focus on adsorption energy prediction. *npj Computational Materials*. 2025;11:91. DOI: 10.1038/s41524-025-01579-5 (in English).
6. Xi R, Li Y. Recent Advances in the Performance and Mechanisms of High-Entropy Alloys Under Low- and High-Temperature Conditions. *Coatings*. 2025;15(1):92. DOI: 10.3390/coatings15010092 (in English).
7. Zhuo L, Xie Y, Chen B. A review on recent progress of refractory high entropy alloys: From fundamental research to engineering applications. *Journal of Materials Research and Technology*. 2024;33:1097-1129. DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.09.131 (in English).
8. Straumal B, Korneva A, Kuzmin A, et al. High Entropy Alloys for Energy Conversion and Storage: A Review of Grain Boundary Wetting Phenomena. *Energies*. 2022;15(19):7130. DOI: 10.3390/en15197130 (in English).
9. Dada M, Popoola P, Mathe N, et al. Recent Advances of High Entropy Alloys: High Entropy Superalloys. *IntechOpen*. 2021. DOI: 10.5772/intechopen.96661 (in English).

10. Ivanov YuF, Krysina OV, Petrikova EA, et al. Cermet coatings produced by vacuum-arc evaporation of a high-entropy alloy. *Materials. Technologies. Design.* 2023;5(5):29-42. DOI: 10.54708/26587572_2023_551529 (in English).

11. Nafikov RK, Ganeev AV, Valiev RZ, et al. Investigation of nano-scale precipitates in the CoCrFeMnNi high-entropy alloy processed by high-pressure torsion. *Materials. Technologies. Design.* 2024;6(1):47-58. DOI: 10.54708/26587572_2024_611647 (in Russian).

12. Savina YN, Valiev RR, Nazarov AYu, et al. Formation of high-entropy TiZrVCrAl coating on the surface of the Ti-6Al-4V titanium alloy at different technological parameters. *Materials. Technologies. Design.* 2024;6(2):81-91. DOI: 10.54708/26587572_2024_621781 (in Russian).

13. Abuayash AM, Islamgaliev RK, Nesterov KM, et al. Structure and mechanical properties of high-entropy Fe-Ni-Mn-Cr alloy subjected to HPT. *Materials. Technologies. Design.* 2024;6(4):29-40. DOI: 10.54708/26587572_2024_641929 (in Russian).

14. Kalinenko A, Zuiko I, Bodyakova A, Kaibyshev P. Effect of intermediate deformation and artificial ageing on the mechanical properties of a Al-Cu-Mg alloy. *Materials. Technologies. Design.* 2024;6(4):67-78. DOI: 10.54708/26587572_2024_641967 (in Russian).

15. Bryzgalov VA, Morkina AYu, Abdullina DU, et al. High-density pulsed current: a review of its role in healing macrocracks in metals. *Materials. Technologies. Design.* 2024;6(2):38-58. DOI: 10.54708/26587572_2024_621738 (in Russian).

16. Kosarev IV, Kistanov AA, Ibragimov MR, et al. Consideration of linear topological defects in silicene through molecular dynamics and ab-initio calculations. *Materials. Technologies. Design.* 2024;6(1):13-21. DOI: 10.54708/26587572_2024_611613 (in Russian).

17. Solovyov AV, Pesterev EA, Yakovlev EV, et al. Computer simulation of thermal fields of the Cr-Mo-Zr system for coating formation using a low-energy high-current electron beam. *Materials. Technologies. Design.* 2023;5(5):122-128. DOI: 10.54708/26587572_2023_5515122 (in Russian).

18. Timiryayev RR, Nazarov KS, Korznikova GF, et al. Mechanical tensile properties of an Al-Nb composite obtained by deformation of shear under pressure. *Materials. Technologies. Design.* 2021;3(2):5-12. DOI: 10.54708/26587572_2021_3245 (in Russian).

19. Zhang Yong, Zuo Ting Ting, Tang Z, et al. Microstructures and properties of high-entropy alloys. *Progress in Materials Science.* 2014;61:1-93. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2013.10.001 (in English).

20. Gludovatz B, Hohenwarter A, Catoor D, et al. A fracture-resistant high-entropy alloy for cryogenic applications. *Science.* 2018;345(6201):1153-1158. DOI: 10.1126/science.1254581 (in English).

21. Li Z, Pradeep KG, Deng Yu, et al. Metastable high-entropy dual-phase alloys overcome the strength-ductility trade-off. *Nature.* 2016;534:227-230. DOI: 10.1038/nature17981 (in English).

22. Wang SD, Liu XJ, Lei ZF, et al. Chemical short-range ordering and its strengthening effect in refractory high-entropy alloys. *Physical Review B.* 2018;103:104107. DOI: 10.1103/PhysRevB.103.104107 (in English).

23. Ding Jun, Qin Yu, Mark Asta, et al. Tunable stacking fault energies by tailoring local chemical order in CrCoNi medium-entropy alloys. *PNAS.* 2018;115:8919-8924. DOI: 10.1073/pnas.1808660115 (in English).

24. Li L, Kamachali RD, Li Z, Zhang Z. Grain boundary energy effect on grain boundary segregation in an equiatomic high-entropy alloy. *Physical Review Materials.* 2020;34:053603. DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.4.053603 (in English).

25. Yurchenko N, Panina E, Salishchev G, Stepanov N. Structure and mechanical properties of near-eutectic refractory Al-Cr-Nb-Ti-Zr high entropy alloys. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* 2021;1014:012058. DOI: 10.1088/1757-899X/1014/1/012058 (in English).

26. Vakili SM, Zarei-Hanzaki A, Anoushe AS, et al. Reversible dislocation movement, martensitic transformation and nano-twinning during elastic cyclic loading of a metastable high entropy alloy. *Acta Materialia.* 2020;185:474-492. DOI: 10.1016/j.actamat.2019.12.040 (in English).

27. Soumyadipta M, Walter S. Phase stability, local chemical disorder and its effect on the mechanical properties of refractory high-entropy alloys. *arXiv.* 2016;1601.06015. DOI: 10.48550/arXiv.1601.06015 (in English).

28. Strother JD, Hargather CZ. Stacking fault energies on {112} planes of an AlNbTaTiV BCC

high-entropy alloy from first-principles calculations, analyzed with inferential statistics. *Materialia*. 2020;14:100927. DOI: 10.1016/j.mtla.2020.100927 (in English).

29. Wu Yu, Zhang F, Yuan X, et al. Short-range ordering and its effects on mechanical properties of high-entropy alloys. *Journal of Materials Science & Technology*. 2021;62:214-220. DOI: 10.1016/j.jmst.2020.06.018 (in English).

30. Chen Sh, Aitken ZH, Pattamatta S, et al. Simultaneously enhancing the ultimate strength and ductility of high-entropy alloys via short-range ordering. *Nature Communications*. 2021;12:4953. DOI: 10.1038/s41467-021-25264-5 (in English).

31. He T, Qi Yu, Ji Y, Feng M. Grain boundary segregation-induced strengthening-weakening transition and its ideal maximum strength in nanopolycrystalline FeNiCrCoCu high-entropy alloys. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2023;238:107828. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2022.107828 (in English).

32. Fernández-Caballero A, Wróbel JS, Mummery PM, Nguyen-Manh D. Short-Range Order in High Entropy Alloys: Theoretical Formulation and Application to Mo-Nb-Ta-V-W System. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2017;38:391-403. DOI: 10.1007/s11669-017-0582-3 (in English).

33. Sahlberg M, Karlsson D, Zlotea C, Jansson U. Superior hydrogen storage in high entropy alloys. *Scientific Reports*. 2016;6:36770. DOI: 10.1038/srep36770 (in English).

34. Lee Ch, Xie D, Li J, et al. Dynamic Deformation Behaviors in Single Body-Centered-Cubic (BCC) phase Refractory High-entropy Alloys. *Research Square*. 2022:1-36. DOI: 10.21203/rs.3.rs-3471175/v1 (in English).

35. Kube SA, Schroers J. Metastability in high entropy alloys. *Scripta Materialia*. 2020;186:392-400. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2020.05.049 (in English).

36. Mora-Barzaga G, Urbassek HM, Deluigi OR, et al. Chemical short-range order increases the phonon heat conductivity in a refractory high-entropy alloy. *Scientific Reports*. 2024;14:20628. DOI: 10.1038/s41598-024-70500-9 (in English).

37. Xun K, Zhang B, Wang Q, et al. Local chemical inhomogeneities in TiZrNb-based refractory high-entropy alloys. *Journal of Materials Science & Technology*. 2023;135:221-230. DOI: 10.1016/j.jmst.2022.06.047 (in English).

38. Yu B, Ren Y, Zeng Yi, et al. Recent progress in high-entropy alloys: A focused review of preparation processes and properties. *Journal of Materials Research and Technology*. 2024;29:2689-2719. DOI: 10.1016/j.jmrt.2024.01.246 (in English).

39. Li Zh, Raabe D. Strong and Ductile Non-equiatomic High-Entropy Alloys: Design, Processing, Microstructure, and Mechanical Properties. *JOM*. 2019;69:2099-2106. DOI: 10.1007/s11837-017-2540-2 (in English).

40. Arun S, Radhika N, Saleh B. Exploring the Potential of High Entropy Alloys: A Comprehensive Review on Microstructure, Properties and Applications. *Johnson Matthey Technology Review*. 2024;68(4):549-566. DOI: 10.1595/205651324X17028969538851 (in English).

Сведения об авторах

ДАВЛЕТБАКОВ Арслан Асхатович – инженер молодежной лаборатории «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях», ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», г. Уфа, ORCID: 0000-0003-4760-5747, SPIN: 7420-7556, e-mail: davletbakov.arслан@mail.ru

БАБИЧЕВА Рита Исмагиловна – к. ф.-м. н., с. н. с. молодежной лаборатории «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях», ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», г. Уфа; научный сотрудник, Институт физики молекул и кристаллов ФГБНУ «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук», г. Уфа, Российская Федерация; ORCID: 0000-0001-5388-3466, ResearcherID: AAT-6126-2021, Scopus ID: 36547494300, SPIN: 9978-9563, e-mail: ri.babicheva@gmail.com

СЕМЁНОВА Мария Николаевна – к. ф.-м. н., доц. каф. ФиПМ, Политехнический институт (филиал) ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова», г. Мирный, Российская Федерация, ORCID: 0000-0002-7298-0226, Researcher ID: AAD-2973-

2020, Scopus ID: 57204979109, SPIN: 2091-9681, e-mail: mariya_semyonova86@mail.ru

КОРЗНИКОВА Елена Александровна – д. ф.-м. н., доцент, зав. молодежной лабораторией «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях», ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий», г. Уфа, Российская Федерация; проф. каф. ЭиАПП, Политехнический институт (филиал) ФГАОУ ВО «Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова» г. Мирном; г. Мирный, Российская Федерация, в. н. с. ФГБНУ «Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук», г. Уфа, Российская Федерация; ORCID: 0000-0002-5975-4849, Researcher ID: H-7922-2016, Scopus ID: 9939896100, SPIN: 9908-3698, e-mail: elena.a.korznikova@gmail.com

About the authors

Arslan A. DAVLETBAKOV – Engineer of Youth Research Laboratory “Metals and Alloys under Extreme Effects”, Ufa University of Science and Technology, Ufa, ORCID: 0000-0003-4760-5747, SPIN: 7420-7556, e-mail: davletbakov.arslan@mail.ru

Rita I. BABICHEVA – Cand. Sci. (Phys. and Math.), Senior Researcher of Youth Research Laboratory “Metals and Alloys under Extreme Effects”, Ufa University of Science and Technology, Ufa; Researcher, Institute of Molecule and Crystal Physics of the Ufa Federal Research Center RAS, Ufa; ORCID: 0000-0001-5388-3466, Researcher ID: AAT-6126-2021, Scopus ID: 36547494300, SPIN: 9978-9563, e-mail: ri.babicheva@gmail.com

Maria N. SEMYONOVA – Cand. Sci. (Phys. and Math.), Associate Professor, Mirny Polytechnic Institute (branch) of the M.K. Ammosov North-Eastern Federal University, ORCID: 0000-0002-7298-0226, Researcher ID: AAD-2973-2020, Scopus ID: 57204979109, SPIN: 2091-9681, e-mail: mariya_semyonova86@mail.ru

Elena A. KORZNIKOVA – Dr. Sci. (Phys. and Math.), Associate Professor, Head of Youth Research Laboratory “Metals and Alloys under Extreme Effects”, Ufa University of Science and Technology, Ufa; Professor of Mirny Polytechnic Institute (branch) of the M.K. Ammosov North-Eastern Federal University; Leading Researcher, Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences, Ufa; ORCID: 0000-0002-5975-4849, Researcher ID: H-7922-2016, Scopus ID: 9939896100, SPIN: 9908-3698, e-mail: elena.a.korznikova@gmail.com

Вклад авторов

Давлетбаков А. А. – визуализация, ресурсное обеспечение исследования

Бабичева Р. И. – методология, программное обеспечение, администрирование данных

Семёнова М. Н. – проведение исследования, создание черновика рукописи

Корзникова Е. А. – разработка концепции, верификация данных, редактирование рукописи

Authors' contribution

Arslan A. Davletbakov – visualization, resources

Rita I. Babicheva – methodology, software, data curation

Maria N. Semyonova – investigation, writing-original draft

Elena A. Korznikova – conceptualization, validation, writing-review & editing.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов

Conflict of interests

The authors declare no relevant conflict of interests

Поступила в редакцию / Submitted 31.05.25

Принята к публикации / Accepted 23.06.25