

Дві компоненти поля зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентних сплавах

М. І. Луговий*, Д. Г. Вербило, М. П. Бродніковський

Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України
Україна, 03142, Київ, вул. Кржижановського, 3

*E-mail: nil2903@gmail.com

Виявлено, що поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві може бути розділено на дві компоненти. Одна компонента з більшою амплітудою і коротшою довжиною кореляції поля напружень створюється розчиненими атомами, що знаходяться в непосредній близькості до площини ковзання. Друга компонента з меншою амплітудою і більшою довжиною кореляції створюється атомами, які більш віддалені від площини ковзання. За допомогою комп'ютерного моделювання досліджено ці дві компоненти поля напружень в багатокомпонентному сплаві CrCoNiFeMn. Дві компоненти поля напружень дозволяють пояснити термічну і атермічну компоненти твердорозчинного зміцнення багатокомпонентних сплавів.

Ключові слова: зсувні напруження, твердий розчин, площина ковзання.

Вступ

Унікальні властивості багатокомпонентних сплавів, зокрема механічні, роблять ці матеріали перспективними для багатьох технічних застосувань [1, 2]. Такі сплави в більшості випадків являють собою тверді розчини заміщення і їх границя плинності суттєво залежить від твердорозчинного зміцнення. Розчинені атоми, які мають невідповідність розмірів та модулів пружності в порівнянні з матрицею-розчинником, створюють дисторсію кристалічних ґраток. Дисторсія ґраток, яка змінюється випадковим чином в просторі, призводить до виникнення зсувних напружень в площині ковзання дислокації. Стохастичні зсувні напруження в площині ковзання, що є сумою внесків від багатьох розчинених атомів, мають статистичний розподіл за нормальним законом в багатокомпонентних сплавах без домінуючого елемента. Цей статистичний розподіл має нульове математичне очікування внаслідок нульового балансу сил в площині ковзання. Ці зсувні напруження створюють опір руху дислокації в площині ковзання, впливаючи на форму лінії дислокації і на її відхилення від прямої лінії.

Моделювання твердорозчинного зміцнення багатокомпонентних сплавів дає розуміння їх ймовірних границь плинності і окреслює перспективи розробки нових матеріалів [3—26]. Відхилення форми лінії дислокації від прямої лінії в полі стохастичних напружень суттєво впливає на границю плинності сплаву [3—17]. В деяких моделях розглядається тільки спрощена одновимірна синусоїдальна залежність внутрішнього зсувного напруження від координати вздовж напрямку руху дислокації [5—13]. Точність розрахунку границі плинності матеріала в таких моделях залежить від точності визначення форми лінії дислокації, яка, в свою

чергу, визначається розподілом внутрішніх напружень в площині ковзання. Тому нехтування стохастичним розподілом зсувних напружень в площині ковзання може призвести до неточної оцінки границі плинності.

Зсувне напруження, що діє на крайову дислокацію в площині ковзання з боку окремого розчиненого атома, може бути розраховано за допомогою енергії взаємодії такого атома і пробного прямолінійного відрізка дислокації [22]. Слід зазначити, що кожний атом в твердому розчині заміщення можна розглядати як точковий дефект в середовищі ефективної усередненої матриці-розчинника [9, 10, 18—20]. Зона впливу такого дефекта на дислокацію в площині ковзання тим більше, чим далі від площини він знаходиться, але сила взаємодії у цьому разі зменшується [27]. Таким чином, сумарне поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, яке створено розчиненими атомами в багатокомпонентному сплаві, може бути розділено на дві компоненти. Короткохвильова компонента з більшою амплітудою і коротшою довжиною кореляції поля напружень створюється розчиненими атомами, що знаходяться в непосредній близькості до площини ковзання. Наприклад, у роботі [28] пропонується враховувати вплив на рух дислокації тільки цих атомів. Довгохвильова компонента зі значно меншою амплітудою і більшою довжиною кореляції створюється атомами, які більш віддалені від площини ковзання. Зазвичай цією компонентою нехтують, але вона може бути досить значущою. Короткохвильова компонента поля внутрішніх зсувних напружень, очевидно, пов'язана з термічною компонентою твердорозчинного зміцнення багатокомпонентних сплавів, а довгохвильову можна спробувати пов'язати з атермічною компонентою цього зміцнення, тому що суттєво більша її довжина кореляції може перешкоджати термічно активованому подоланню енергетичних бар'єрів, що з нею пов'язані [27].

Мета даної роботи — за допомогою комп'ютерного моделювання дослідити, як розчинені атоми в багатокомпонентному сплаві створюють коротко- та довгохвильову компоненти поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, визначити стандартне відхилення та довжину кореляції цих компонент і виявити вплив довжини пробного прямолінійного відрізка дислокації на ці характеристики.

Алгоритм розрахунку

Зсувне напруження в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві являє собою суму внесків від багатьох розчинених атомів (точкових дефектів в середовищі ефективної усередненої матриці-розчинника), які розташовані в вузлах кристалічних ґраток навколо цієї площини, і може бути розраховане як [22]

$$\tau_s(x_u, z_u) = \frac{1}{b\Delta x\Delta z} \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m [W_{hkm}(x_u, z_u) - W_{hkm}(x_u + \Delta x, z_u)] \right) \right), \quad (1)$$

де b — вектор Бюргерса; Δx — малий крок по координаті x в напрямку, що перпендикулярний пробному прямолінійному відрізку дислокації (раціонально прийняти $\Delta x = b/100$ [22]); Δz — довжина пробного відрізка дислокації; h , k та m — індекси, що задають розташування

вузлів, в яких знаходяться розчинені атоми, вздовж осей x , y та z ; h — номер площини, що перпендикулярна вектору Бюргерса, в якій розташований вузол; k — номер атомного ряду в площині, в якому розташований вузол; m — номер вузла в атомному ряду; $W_{hkm}(x_u, z_u)$ — енергія взаємодії точкового дефекта (розчиненого атома) в вузлі з координатами x_{hkm} , y_{hkm} , z_{hkm} і прямолінійного відрізка дислокації з центром в (x_u, z_u) (точка в площині ковзання, де визначається зсувне напруження, що діє на дислокацію з боку розчиненого атома). Ця енергія може бути розрахована для твердого розчину заміщення з випадковим розташуванням атомів за формулою [22]

$$W_{hkm}(x_u, z_u) = \sum_i \zeta_{hkm}^{(i)} W_i, \quad (2)$$

де i — індекс, що показує номер компонента сплава; $\zeta_{hkm}^{(i)} = 1$, якщо

$$\sum_{j=1}^{i-1} X_j < r_{hkm} \leq \sum_{j=1}^i X_j; \quad \zeta_{hkm}^{(i)} = 0, \text{ якщо } r_{hkm} \text{ не попадає в наведений інтервал;}$$

r_{hkm} — випадкова величина, що рівномірно розподілена на інтервалі; X_j —

атомна частка компонента сплава j ($\sum_{j=1}^N X_j = 1$); N — кількість

компонентів у сплаві. Енергія взаємодії W_i розчиненого атома компонента i в вузлі з координатами x_{hkm} , y_{hkm} , z_{hkm} і прямолінійного відрізка дислокації з центром в точці з координатами x_u та z_u , як і координати x_{hkm} , y_{hkm} , z_{hkm} для ГЦК і ОЦК ґраток, може бути розрахована за методами, які детально описані в роботі [22]. Схема розташування окремого розчиненого атома (точкового дефекта) відносно площини ковзання показана на рис. 1, а. Зона впливу дефекта на дислокацію на цій площині тим більше, чим далі від площини знаходиться дефект [27]. Припускається, що дислокація лежить вздовж осі z . Якщо дефект створює дисторсію, яка пов'язана з більшим розміром розчиненого атома в порівнянні з віртуальними атомами ефективної усередненої матриці-розчинника, і розташований в полі стискаючих напружень дислокації, то такий дефект відштовхує дислокацію від себе. Схематично поле зсувних напружень, створене таким дефектом, показано на рис. 1, б. Поза зоною впливу напруження прямують до нуля і їми можна знехтувати. В зоні впливу перед проекцією дефекта на площину ковзання розташовано область зсувних напружень, що спрямовані вздовж x в напрямку від дефекта. Максимум напружень в цій області знаходиться на деякій відстані від проекції. З другого боку від проекції розташовано область протилежних по знаку напружень, що також відштовхують дислокацію від дефекта. Підсумовування внесків від окремих розчинених атомів в формулі (1) відбувається з урахуванням вимог до індексів h , k та m , що описані в роботі [22].

Слід враховувати також область ядра дислокації, в якому порушується пружна поведінка матеріалу. Це означає, що внесками від точкових

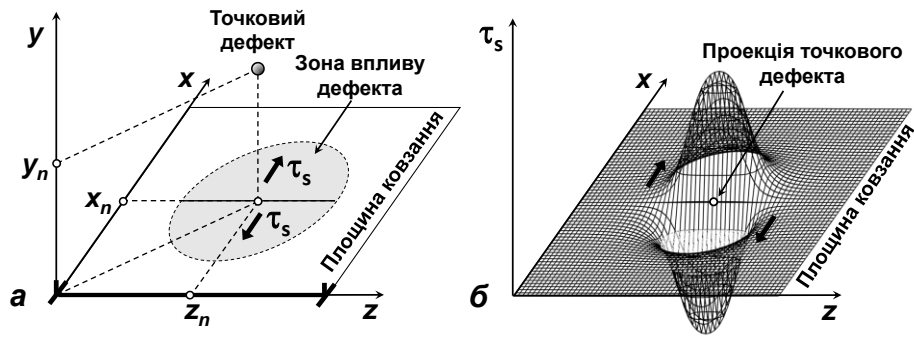


Рис. 1. Схема розташування точкового дефекта (розчиненого атома) відносно площини ковзання і зона впливу дефекта на цій площині (а); поле зсувних напружень в площині ковзання, що створює такий дефект в процесі взаємодії з крайовою дислокацією (б).

дефектів, які лежать в області ядра ($\sqrt{x_{hkm}^2 + y_{hkm}^2} \leq r_c$, $|z_{hkm}| \leq \Delta z/2$, де $r_c \approx b$ — радіус ядра дислокації для ГЦК ґраток), в зсувне напруження в площині ковзання можна знехтувати, тобто прирівняти нулю відповідні доданки в формулі (1).

Можна розрахувати зсувне напруження в площині ковзання, враховуючи тільки розчинені атоми в найближчих до цієї площини атомних рядах. Це буде так звана короткохвильова компонента поля зсувних напружень τ_{s1} . У роботі [28] пропонується, наприклад, враховувати вплив на рух дислокації тільки розчинених атомів, які розташовані в двох найближчих атомних площинах з кожного боку площини ковзання. Схему такого розташування атомних рядів відносно площини ковзання в ГЦК ґратках, де показано атомні ряди, розчинені атоми в яких створюють короткохвильову компоненту поля напружень, наведено на рис. 2. Більш віддалені від площини ковзання розчинені атоми створюють довгохвильову компоненту поля зсувних напружень. Короткохвильова компонента τ_{s1} може бути розрахована також за допомогою формули (1), якщо прирівняти нулю всі внески від розчинених атомів, які мають $|y_{hkm}|$ більше за задане значення y_s . Очевидно, що у відповідності до схеми на

Рис. 2. Схема розташування атомних рядів відносно площини ковзання в ГЦК ґратках. Чорними колами позначено атомні ряди, які розташовані близько до площини ковзання і створюють короткохвильову компоненту поля напружень, світлими — атомні ряди, які розташовані далі від площини ковзання і створюють його довгохвильову компоненту.

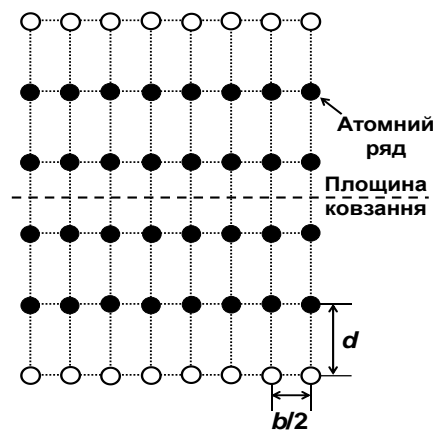


рис. 2 маємо $y_s = 1,5d$, де d — відстань між атомними площинами, які паралельні площині ковзання. Довгохвильова компонента поля зсувних напружень τ_{s2} тоді легко розраховується із виразу

$$\tau_{s2} = \tau_s - \tau_{s1} \quad (3)$$

Мається на увазі, що всі три значення τ_s , τ_{s1} та τ_{s2} в формулі (3) відповідають одній тій самій точці в площині ковзання.

Результати обчислювального експерименту та їх обговорення

Для моделювання двох компонент поля зсувних напружень в площині ковзання і дослідження впливу довжини пробного прямолінійного відрізка дислокації на їх стандартні відхилення та довжини кореляції було обрано багатокомпонентний сплав CrCoNiFeMn. Цей сплав має ГЦК кристалічні ґратки. Вихідні параметри для моделювання поля зсувних напружень в цьому матеріалі наступні: модуль зсуву $G = 81$ ГПа; модуль об'ємного стиску $K = 176$ ГПа; коефіцієнт Пуассона $\nu = 0,3$; вектор Бюргерса $b = 0,25$ нм; атомний об'єм $V_a = 0,011$ нм³. Невідповідності атомних розмірів та модулів пружності були розраховані за допомогою методів і даних, які представлені в роботі [18] (табл. 1). Радіус зони впливу розчиненого атому (точкового дефекта) на площині ковзання можна прийняти таким, що дорівнює приблизно 4,75 нм для кристалічних ґраток з вектором Бюргерса 0,25 нм, якщо відраховувати цей радіус від проекції дефекта на цю площину [22]. Отже, якщо розраховувати зсувні напруження від багатьох дефектів в певній точці площини ковзання вздовж осі x ($z_u = 0$), достатньо розглядати тільки вплив дефектів, які знаходяться на відстані від цієї осі, що менше чи дорівнює 4,75 нм. Відстань між атомними площинами, які паралельні площині ковзання в сплаві CrCoNiFeMn, дорівнює $d = 0,204$ нм, тобто $y_s = 0,306$ нм.

Зсувні напруження розраховували вздовж осі x в точках з $z_u = 0$ та змінним x_u з кроком $\Delta x_u = 0,125$ нм для різних значень Δz в діапазоні 0,01—2,3 нм, якщо задати $r_c = b = 0,25$ нм. Приклади розподілів зсувних напружень, коротко- та довгохвильової компонент поля напружень, що розраховані для довжини пробного відрізка дислокації $\Delta z = 0,78$ нм, показано на рис. 3. Добре видно, що повний розподіл зсувних напружень

Т а б л и ц я 1. Невідповідності атомних розмірів δ_i та модулів пружності η_i , що були використані для моделювання поля напружень в сплаві CrCoNiFeMn

Компонент	i	X_i	δ_i	η_i
Cr	1	0,2	0,010077	0,290837
Co	2	0,2	0,001747	-0,13433
Ni	3	0,2	0,004622	-0,12114
Fe	4	0,2	0,004674	-0,04529
Mn	5	0,2	-0,02244	-0,05755

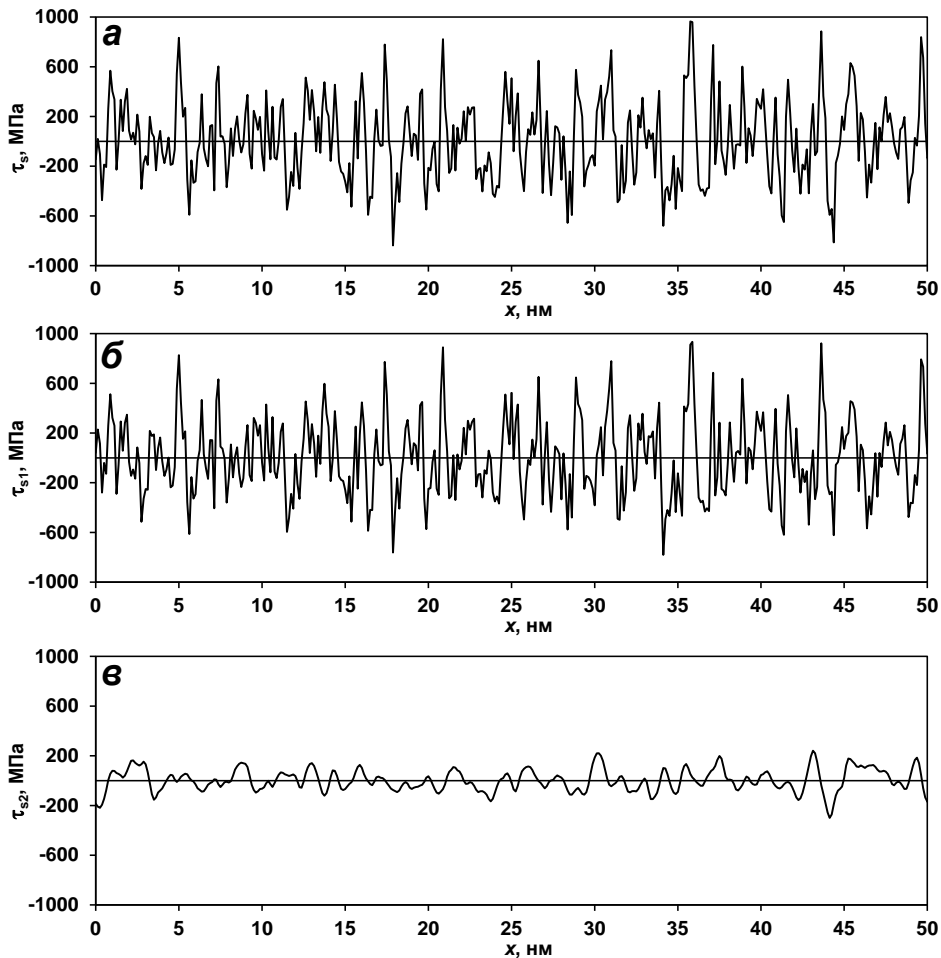


Рис. 3. Розподіли зсувних напружень (*a*), коротко- та довгохвильової компонент поля напружень (*б*, *в*), що розраховані для довжини пробного відрізка дислокації $\Delta z = 0,78$ нм в сплавi CrCoNiFeMn.

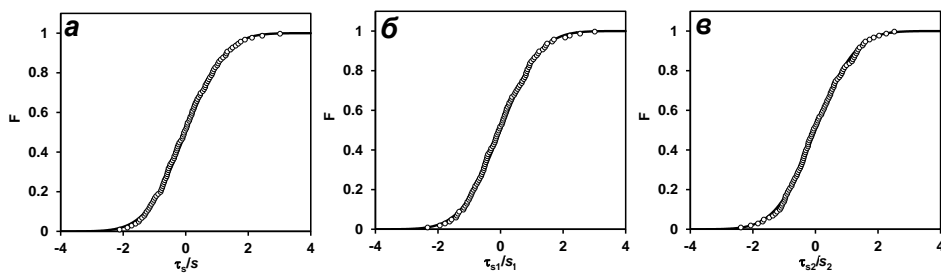


Рис. 4. Функції розподілів нормалізованих зсувних напружень (*a*), нормалізованих коротко- та довгохвильової компонент поля напружень (*б*, *в*) в сплавi CrCoNiFeMn ($\Delta z = 0,78$ нм). Кола відповідають розрахованій функції розподілу, лінія — стандартній функції нормального розподілу.

(рис. 3, *a*) є дуже подібним до розподілу короткохвильової компоненти поля напружень (рис. 3, *б*). В той же час розподіл довгохвильової компоненти має помітно менші амплітуди і явно більшу довжину “хвилі”

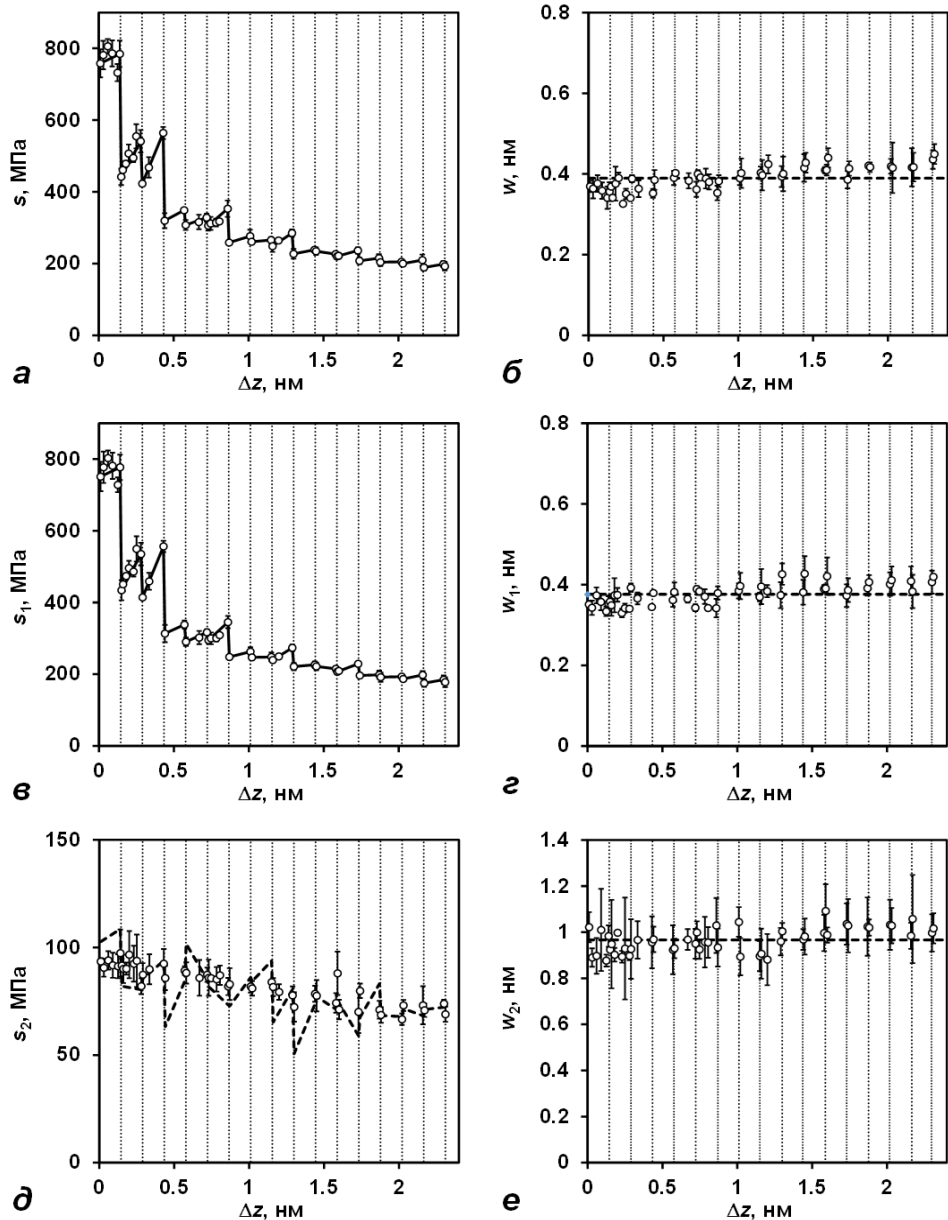


Рис. 5. Залежності стандартних відхилень розподілів зсувних напружень (а), коротко- та довгохвильової компонент поля напружень (в, д), а також довжини кореляції поля напружень (б), його коротко- та довгохвильової компонент (з, е) від довжини пробного відрізка дислокації Δz в сплавi CrCoNiFeMn.

(рис. 3, в). Очевидно також, що амплітудами довгохвильової компоненти тим не менш не можна знехтувати. Тобто внесок від розчинених атомів, які більш віддалені від площини ковзання, досить помітний. Зсувні напруження, коротко- та довгохвильова компоненти поля напружень можуть бути нормалізовані на стандартні відхилення s , s_1 та s_2 відповідних розподілів. Функції розподілу нормалізованих зсувних напружень, нормалізованих коротко- та довгохвильової компонент поля напружень

наведено на рис. 4. Всі вони добре співпадають зі стандартною функцією нормального розподілу. Тобто обидві компоненти поля зсувних напружень мають нормальні статистичні розподіли.

Залежності стандартного відхилення розподілу зсувних напружень s , коротко- та довгохвильової компонент поля напружень s_1, s_2 , а також довжини кореляції поля напружень w , його короткохвильової w_1 та довгохвильової w_2 компонент від довжини пробного відрізка дислокації Δz в сплавi CrCoNiFeMn показано на рис. 5. Довжини кореляції w , w_1 та w_2 були визначені як середні довжини відрізків вздовж відповідних розподілів, де напруження мали один знак, тобто були позитивними або негативними в границях одного відрізка [21]. Слід зазначити, що довжина кореляції, на жаль, не має точного визначення і описане вище визначення є лише одним з можливих. Ймовірно, більш точно довжину кореляції поля напружень можна визначити як середню довжину відрізків вздовж розподілу, де напруження врівноважують самі себе, тобто кожен такий відрізок включає в себе один відрізок з позитивними напруженнями і один відрізок з негативними. Очевидно, що співвідношення між такими довжинами кореляції буде $\xi = 2w$, де ξ — повна довжина кореляції, середня довжина врівноваження напружень; w — фактично напівдовжина кореляції, де напруження в середньому мають один знак.

Стандартні відхилення розподілу зсувних напружень, коротко- і довгохвильової компонент поля напружень є складними функціями довжини пробного відрізка дислокації, тобто $s = s(\Delta z)$, $s_1 = s_1(\Delta z)$ і $s_2 = s_2(\Delta z)$ (рис. 5). Ці залежності мають стрибки, якщо $\Delta z = (\sqrt{3}b/6)p$, де $p = 1, 2, 3, \dots$. Ці значення показані вертикальними пунктирними лініями на рис. 5. Видно, що між характерними значеннями Δz стандартні відхилення зростають зі збільшенням Δz , а за самих характерних значень мають стрибок вниз. Ці зростання і стрибки більш помітні за малих значень Δz , особливо для s та s_1 . Зі збільшенням Δz зростання і стрибки стають менш виразними. Ці стрибки вниз пов'язані з тим, що зі збільшенням Δz за певних значень нові розчинені атоми потрапляють в зону ядра пробного відрізка дислокації і внесок від них в поле напружень скасовується, це призводить до різкого падіння амплітуди розподілу напружень. Чим більше Δz , тим далі від точки розрахунку напружень лежать ці нові атоми і внесок від них стає меншим, що веде до зменшення стрибків. В цілому стандартні відхилення зменшуються зі збільшенням довжини пробного відрізка дислокації. У цьому разі s та s_1 зменшуються

Т а б л и ц я 2. Стандартні відхилення розподілу s , s_1 та s_2 , а також довжини кореляції w , w_1 та w_2 в сплавi CrCoNiFeMn ($\Delta z = 1,6—2,3$ нм)

Відхилення	s , МПа	s_1 , МПа	s_2 , МПа	w , нм	w_1 , нм	w_2 , нм
Середнє	204	191	72	0,39	0,38	0,97
Мінімальне	181	166	63	0,31	0,32	0,76
Максимальне	243	234	99	0,48	0,48	1,28

сильніше, ніж s_2 , особливо за малих значень Δz . Таким чином, довгохвильова компонента стає більш помітною в порівнянні з короткохвильовою за більших значень Δz . Довжини кореляції w , w_1 та w_2 , напроти, майже постійні зі збільшенням Δz . Слід зазначити, що напруження, які розраховані за певного Δz , фактично є усередненими по пробному відрізку напруженнями.

На перший погляд залежності $s = s(\Delta z)$ та $s_1 = s_1(\Delta z)$ майже однакові, але враховуючи, що повний розподіл є сумою коротко- і довгохвильової компоненти і всі розподіли підкоряються нормальному статистичному розподілу, можна визначити, що повинно виконуватись

$$s_2 = \sqrt{s^2 - s_1^2}. \quad (4)$$

Стандартне відхилення s_2 , що розраховане за формулою (4), показано на рис. 5, δ пунктирною лінією. Видно, що воно добре корелює зі змодельованим стандартним відхиленням довгохвильової компоненти поля напружень.

Стандартні відхилення s , s_1 та s_2 , а також довжини кореляції w , w_1 та w_2 для великих довжин пробного відрізка дислокації наведено в табл. 2. Значення $\Delta z = 1,6\text{—}2,3$ нм відповідають можливим значенням повної довжини кореляції довгохвильової компоненти $2w_2$, якщо враховувати мінімальні і максимальні значення w_2 .

Висновки

Виявлено, що розчинені атоми в двох найближчих атомних площинах з кожного боку від площини ковзання в багатокомпонентному сплаві CrCoNiFeMn створюють короткохвильову компоненту поля зсувних напружень в площині ковзання, яка характеризується більшим стандартним відхиленням і коротшою довжиною кореляції в порівнянні з довгохвильовою компонентою. Довгохвильова компонента поля напружень створюється розчиненими атомами, які розташовані далі від площини ковзання, і має відповідно менше стандартне відхилення і більшу довжину кореляції, ніж короткохвильова. Обидві компоненти залежать від довжини пробного відрізка дислокації. Напруження, які розраховані за певної довжини пробного відрізка, фактично є усередненими по цьому відрізку. Стандартні відхилення коротко- і довгохвильової компонент поля напружень є складними функціями довжини пробного відрізка і в цілому зменшуються з його збільшенням. Зменшення короткохвильової компоненти особливо помітне за малих довжин пробного відрізка. Довжини кореляції, напроти, майже не залежать від довжини пробного відрізка. Співвідношення між стандартними відхиленнями коротко- та довгохвильової компонент за великої довжини пробного відрізка, коли вона приблизно дорівнює повній довжині кореляції довгохвильової компоненти, стає таким, що не дозволяє нехтувати довгохвильовою компонентою. Дві компоненти поля напружень можуть допомогти в поясненні термічної і атермічної компонент твердорозчинного зміцнення багатокомпонентних сплавів.

Список літератури

1. Miracle D.B., Senkov O.N. A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Mater.* 2017. Vol. 122. P. 448—511. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>

2. George E.P., Curtin W.A., Tasan C.C. High entropy alloys: A focused review of mechanical properties and deformation mechanisms. *Acta Mater.* 2020. Vol. 188. P. 435—474. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.12.015>
3. Nabarro F. Solution and precipitation hardening. In P. Hirsch (Author), *The Physics of Metals*. Cambridge: Cambridge University Press, 1976. P. 152—188. doi: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511760020.007>
4. Labusch R. Physical aspects of precipitation- and solid solution-hardening. *Czech. J. Phys.* 1981. Vol. 31. P. 165—176. doi: <https://doi.org/10.1007/BF01959439>
5. Leyson G., Curtin W., Hector L., Woodward C.F. Quantitative prediction of solute strengthening in aluminium alloys. *Nature Mater.* 2010. Vol. 9. P. 750—755. doi: <https://doi.org/10.1038/nmat2813>
6. Leyson G.P.M., Hector L.G., Curtin W.A. Solute strengthening from first principles and application to aluminum alloys. *Acta Mater.* 2012. Vol. 60, No. 9. P. 3873—3884. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.03.037>
7. Leyson G.P.M., Curtin W.A. Friedel vs. Labusch: the strong/weak pinning transition in solute strengthened metals. *Philos Mag.* 2013. Vol. 93, No. 19. P. 2428—2444. doi: <https://doi.org/10.1080/14786435.2013.776718>
8. Leyson G.P.M., Curtin W.A. Solute strengthening at high temperatures, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2016. Vol. 24. P. 065005. doi: <https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/6/065005>
9. Varvenne C., Luque A., Curtin W.A. Theory of strengthening in fcc high entropy alloys. *Acta Mater.* 2016. Vol. 118. P. 164—176. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.07.040>
10. Varvenne C., Leyson G.P.M., Ghazisaeidi M., Curtin W.A. Solute strengthening in random alloys. *Acta Mater.* 2017. Vol. 124. P. 660—683. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.046>
11. Nöhring W.G., Curtin W.A. Correlation of microdistortions with misfit volumes in High Entropy Alloys. *Scripta Mater.* 2019. Vol. 168. P. 119—123. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.04.012>
12. Bracq G., Laurent-Brocq M., Varvenne C., Perrière L., Curtin W.A., Joubert J.-M., Guillot I. Combining experiments and modeling to explore the solid solution strengthening of high and medium entropy alloys. *Acta Mater.* 2019. Vol. 177. P. 266—279. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.050>
13. Hu Y., Szajewski B.A., Rodney D., Curtin W.A. Atomistic dislocation core energies and calibration of non-singular discrete dislocation dynamics. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2020. Vol. 28. P. 015005. doi: <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab5489>
14. Zaiser M. Dislocation motion in a random solid solution. *Philos. Mag. A.* 2002. Vol. 82, No. 15. P. 2869—2883. doi: <https://doi.org/10.1080/01418610208240071>
15. Zhai J.-H., Zaiser M. Properties of dislocation lines in crystals with strong atomic-scale disorder. *Mater. Sci. Eng.: A.* 2019. Vol. 740—741. P. 285—294. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010>
16. Péterffy G., Ispánovity P.D., Foster M.E., Zhou X., Sills R.B. Length scales and scale-free dynamics of dislocations in dense solid solutions. *Mater. Theory.* 2020. Vol. 4, Article No. 6. doi: <https://doi.org/10.1186/s41313-020-00023-z>
17. Pasianot R., Farkas D. Atomistic modeling of dislocations in a random quinary high-entropy alloy. *Comp. Mater. Sci.* 2020. Vol. 173. P. 109366. doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109366>
18. Lugovy M., Slyunyayev V., Brodnikovskyy M. Solid solution strengthening in multicomponent fcc and bcc alloys: Analytical approach. *Progress in Natural Science: Mater. Int.* 2021. Vol. 31. P. 95—104. doi: <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.11.006>
19. Луговой М.І., Слюняев В.М., Бродниковський М.П., Фірстов С.О. Розрахунок твердорозчинного зміцнення багатокомпонентних жароміцних сплавів. *Електронна мікроскопія і прочність матеріалів*. Київ: ИПМ НАН України. 2017. Вып. 23. С. 3—9.
20. Луговой Н.И., Слюняев В.Н., Бродниковський Н.П. Принцип аддитивности термической и атермической компонент твердорастворного упрочнения в многокомпонентных сплавах. *Електронна мікроскопія і прочність матеріалів*. Київ: ИПМ НАН України. 2019. Вып. 25. С. 26—34.

21. Луговий М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Форма лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ІПМ НАН України. 2021. Вип. 2. С. 19—34. doi: <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
22. Луговий М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Моделювання поля зсувних напружень в площині ковзання в твердому розчині заміщення. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ІПМ НАН України. 2021. Вип. 3. С. 24—37. doi: <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.024>
23. Фірстов С.О., Рогуль Т.Г. “Плато” на температурній залежності критичного напруження зсуву в бінарних і полікомпонентних твердих розчинах та в чистих металах. *Металофіз. новітні технології*. 2022. Т. 44. С. 127—140. doi: <https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127>
24. Podolskiy A.V., Tabachnikova E.D., Voloschuk V.V., Gorban V.F., Krapivka N.A., Firstov S.O. Mechanical properties and thermally activated plasticity of the $Ti_{30}Zr_{25}Hf_{15}Nb_{20}Ta_{10}$ high entropy alloy at temperatures 4.2—350 K. *Mater. Sci. Eng.: A*. 2018. Vol. 710. P. 136—141. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.10.073>
25. Фірстов С.А., Рогуль Т.Г., Крапивка Н.А., Чугунова С.И. Термоактивационный анализ температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ОЦК решеткой. *Металофіз. новітні технології*. 2018. Т. 40. С. 219—234. doi: <https://doi.org/10.15407/mfint.40.02.0219>
26. Фірстов С.А., Рогуль Т.Г. Термоактивационный анализ температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ГЦК решеткой. *Металофіз. новітні технології*. 2017. Т. 39. С. 33—48. doi: <https://doi.org/10.15407/mfint.39.01.0033>
27. Gremaud G. Overview on dislocation-point defect interaction: the Brownian picture of dislocation motion. *Mater. Sci. Eng.: A*. 2004. Vol. 370. P. 191—198. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.04.005>
28. Argon A.S. Strengthening mechanisms in crystal plasticity. Oxford: Oxford University Press, 2008. 404 p. doi: 10.1093/acprof:oso/9780198516002.001.0001

References

1. Miracle, D. B. & Senkov, O. N. (2017). A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Mater.*, Vol. 122, pp. 448—511. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
2. George, E. P., Curtin, W. A. & Tasan, C. C. (2020). High entropy alloys: A focused review of mechanical properties and deformation mechanisms. *Acta Mater.*, Vol. 188, pp. 435—474. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.12.015>
3. Nabarro, F. (1976). Solution and precipitation hardening. In P. Hirsch (Author), *The Physics of Metals* (pp. 152—188). Cambridge: Cambridge University Press. doi: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511760020.007>
4. Labusch, R. (1981). Physical aspects of precipitation- and solid solution-hardening. *Czech. J. Phys.*, Vol. 31, pp. 165—176. doi: <https://doi.org/10.1007/BF01959439>
5. Leyson, G., Curtin, W., Hector, L. & Woodward, C. F. (2010). Quantitative prediction of solute strengthening in aluminium alloys. *Nature Mater.*, Vol. 9, pp. 750—755. doi: <https://doi.org/10.1038/nmat2813>
6. Leyson, G. P. M., Hector, L. G. & Curtin, W. A. (2012). Solute strengthening from first principles and application to aluminum alloys. *Acta Mater.*, Vol. 60, No. 9, pp. 3873—3884. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.03.037>
7. Leyson, G. P. M. & Curtin, W. A. (2013). Friedel vs. Labusch: the strong/weak pinning transition in solute strengthened metals. *Philos. Mag.*, Vol. 93, No. 19, pp. 2428—2444. doi: <https://doi.org/10.1080/14786435.2013.776718>
8. Leyson, G. P. M. & Curtin, W. A. (2016). Solute strengthening at high temperatures, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 24, pp. 065005. doi: <https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/6/065005>
9. Varvenne, C., Luque, A. & Curtin, W. A. (2016). Theory of strengthening in fcc high entropy alloys. *Acta Mater.*, Vol. 118, pp. 164—176. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.07.040>

10. Varvenne, C., Leyson, G. P. M., Ghazisaeidi, M. & Curtin, W. A. (2017). Solute strengthening in random alloys. *Acta Mater.*, Vol. 124, pp. 660—683. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.046>
11. Nöhring, W. G., & Curtin, W. A. (2019). Correlation of microdistortions with misfit volumes in High Entropy Alloys. *Scripta Mater.*, Vol. 168, pp. 119—123. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.04.012>
12. Bracq, G., Laurent-Brocq, M., Varvenne, C., Perrière, L., Curtin, W. A., Joubert, J. - M. & Guillot, I. (2019). Combining experiments and modeling to explore the solid solution strengthening of high and medium entropy alloys. *Acta Mater.*, Vol. 177, pp. 266—279. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.050>
13. Hu, Y., Szajewski, B. A., Rodney, D. & Curtin, W. A. (2020). Atomistic dislocation core energies and calibration of non-singular discrete dislocation dynamics. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 28, pp. 015005. doi: <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab5489>
14. Zaiser, M. (2002). Dislocation motion in a random solid solution. *Philos. Mag. A*, Vol. 82, No. 15, pp. 2869—2883. doi: <https://doi.org/10.1080/01418610208240071>
15. Zhai, J. - H. & Zaiser, M. (2019). Properties of dislocation lines in crystals with strong atomic-scale disorder. *Mater. Sci. Eng.: A*, Vol. 740—741, pp. 285—294. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010>
16. Péterffy, G., Ispánovity, P. D., Foster, M. E., Zhou, X. & Sills, R. B. (2020). Length scales and scale-free dynamics of dislocations in dense solid solutions. *Mater. Theory*, Vol. 4, Article No. 6. doi: <https://doi.org/10.1186/s41313-020-00023-z>
17. Pasianot, R. & Farkas, D. (2020). Atomistic modeling of dislocations in a random quinary high-entropy alloy. *Comp. Mater. Sci.*, Vol. 173, pp. 109366. doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109366>
18. Lugovy, M., Slyunyayev, V. & Brodnikovskyy, M. (2021). Solid solution strengthening in multicomponent fcc and bcc alloys: Analytical approach. *Progress in Natural Science: Mater. Int.*, Vol. 31, pp. 95—104. doi: <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.11.006>
19. Lugovy, M., Slyunyayev, V., Brodnikovskyy, M. & Firstov, S. O. (2017). Calculation of solid solution strengthening in multicomponent high temperature alloys. *Elektronnaya mikroskopiya i prochnost materialov*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, Vyp. 23, pp. 3—9 [in Ukrainian].
20. Lugovy, M., Slyunyayev, V. & Brodnikovskyy, M. (2019). Additivity principle for thermal and athermal components of solid solution strengthening in multicomponent alloys. *Elektronnaya mikroskopiya i prochnost materialov*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, Vyp. 25, pp. 26—34 [in Russian].
21. Lugovy, M., Verbylo, D. & Brodnikovskyy, M. (2021). Shape of dislocation line in stochastic shear stress field. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, Vyp. 2, pp. 19—34 [in Ukrainian]. doi: <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
22. Lugovy, M., Verbylo, D. & Brodnikovskyy, M. (2021). Modelling of shear stress field in glide plane in substitutional solid solutions. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, Vyp. 3, pp. 24—37 [in Ukrainian]. doi: <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.024>
23. Firstov, S. O. & Rogul, T. G. (2022). “Plateau” on temperature dependence of the critical shear stress in binary and multicomponent solid solutions and in pure metals. *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, Vol. 44, pp. 127—140 [in Ukrainian]. doi: <https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127>
24. Podolskiy, A. V., Tabachnikova, E. D., Voloschuk, V. V., Gorban, V. F., Krapivka, N. A., & Firstov, S. O. (2018). Mechanical properties and thermally activated plasticity of the $\text{Ti}_{30}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{15}\text{Nb}_{20}\text{Ta}_{10}$ high entropy alloy at temperatures 4.2—350 K. *Mater. Sci. Eng.: A*, Vol. 710, pp. 136—141. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.10.073>
25. Firstov, S. O., Rogul, T. G., Krapivka, N. A., & Chugunova, S. I. (2018). Thermoactivation analysis of temperature dependence of a flow stress in solid solutions with a B.C.C. lattice. *Metallofiz. Noveishie Tekhnologii*, Vol. 40, pp. 219—234 [in Russian]. doi: <https://doi.org/10.15407/mfint.40.02.0219>
26. Firstov, S. O. & Rogul, T. G. (2017). Thermoactivation analysis of the flow-stress–temperature dependence in the F.C.C. solid solutions. *Metallofiz. Noveishie*

- Tekhnologii, Vol. 39, pp. 33—48 [in Russian]. doi: <https://doi.org/10.15407/mfint.39.01.0033>
27. Gremaud, G. (2004). Overview on dislocation-point defect interaction: the brownian picture of dislocation motion. Mater. Sci. Eng.: A, Vol. 370, pp. 191—198. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.04.005>
28. Argon, A. S. (2008). Strengthening mechanisms in crystal plasticity. Oxford: Oxford University Press. doi: [10.1093/acprof:oso/9780198516002.001.0001](https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780198516002.001.0001)

Two components of shear stress field in glide plane in multicomponent alloys

M. I. Lugovy*, D. G. Verbylo, M. P. Brodnikovskyy

I. M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NAS of Ukraine, Kyiv

*E-mail: nil2903@gmail.com

It was found that dissolved atoms in the two nearest atomic planes on each side of the glide plane in the multicomponent alloy CrCoNiFeMn create a short-wave component of the shear stress field in the glide plane. This component is characterized by greater standard deviation and shorter correlation length in comparison with the long-wave component. The long-wave component of the stress field is created by dissolved atoms that are located farther from the glide plane. This component has a correspondingly smaller standard deviation and longer correlation length than the short-wave one. Both components depend on the test segment length of dislocation. The stress calculated for a certain test segment length is actually averaged over this segment. The standard deviations of the short-wave and long-wave components of the stress field are complex functions of the test segment length. They generally decrease with increasing this length. The reduction of the short-wave component is especially noticeable at short test segment lengths. The correlation lengths opposite almost do not depend on the test segment length. The ratio between the standard deviations of the short-wave and long-wave components becomes such that it does not allow to neglect the long-wave one, when the test segment length is approximately equal to the full correlation length of the long-wave component. Two components of the shear stress field could explain the thermal and athermic components of the solid solution strengthening of multicomponent alloy.

Keywords: shear stresses, solid solution, glide plane.