УДК 530.131.530.12; 539.125/126 https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.036

Еволюція форми лінії дислокації в багатокомпонентному сплаві під навантаженням

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

За допомогою комп'ютерного моделювання досліджено еволюцію форми дислокаційної лінії в багатокомпонентному сплаві CrCoNiFeMn під дією зовнішнього прикладеного зсувного напруження в площині ковзання. Особливості цієї еволюції пояснюються існуванням двох компонент поля зсувних напружень, що створюється в площині ковзання розчиненими атомами. Зростання прикладеного напруження призводить до появи додаткових випуклостей на лінії дислокації. Одна з цих випуклостей в умовах критичного напруження не досягає рівноваги, збільшується в розмірах і видриває дислокацію від точок початкового закріпення, що умовно можна вважати початком пластичної деформації сплаву.

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

Вступ

Твердорозчинне зміцнення дозволяє досягнути високих границь текучості в багатокомпонентних сплавах навіть за високих температур. Такі особливості механічної поведінки цих матеріалів є дуже корисними для застосування в сучасній техниці [1, 2]. Розчинені атоми створюють поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, які призводять до відхилення форми лінії дислокації від прямої. Хвиляста рівноважна форма дислокації утворюється за рахунок урівноваження сил, що діють на окремі сегменти дислокації з боку цього поля, і сил лінійного натягу, які самі, в свою чергу, залежать від форми лінії дислокації. Таким чином, ця форма являє собою сукупність "хвиль" — випуклостей різної довжини і висоти, які характеризують певним чином розподіл стохастичних зсувних напружень в площині ковзання. Ці зсувні напруження в багатокомпонентних сплавах мають статистичний розподіл по нормальному закону, оскільки вони є сумою внесків від багатьох розчинених атомів, і створюють опір руху дислокації в площині ковзання, впливаючи на форму лінії дислокації.

Твердорозчинне зміцнення багатокомпонентних сплавів моделювалося в багатьох роботах [3—23]. Розуміння особливостей цього зміцнення дозволяє прогнозувати ймовірні границі текучості таких матеріалів і може допомогти в розробці нових перспективних сплавів цього класу. Зокрема, дуже важливим є моделювання форми лінії дислокації, параметри якої визначають в великій мірі границю текучості [3—17]. Оскільки ця форма є сукупністю різних випуклостей випадкової довжини і висоти, то суттєвою є оцінка параметрів деякої середньої випуклості на лінії дислокації, що утворюється в умовах заданого розподілу зсувних напружень в площині ковзання. В свою чергу, цей розподіл можна розділити на дві компоненти [23]. Зона впливу розчиненого атому на дислокацію тим більше, чим далі він знаходиться від площини ковзання [24]. Розчинені атоми, що знаходяться в безпосередній близькості до площини ковзання, створюють короткохвильову компоненту з більшою амплітудою і меншою довжиною кореляції поля напружень. В деяких роботах пропонується враховувати тільки цю компоненту [25]. Розчинені атоми, які більш віддалені від площини ковзання, створюють довгохвильову компоненту зі значно меншою амплітудою і більшою довжиною кореляції.

Перший крок для оцінки параметрів середньої випуклості — це визначення її ідеалізованої форми. Однією із таких спроб був розгляд квадратичної параболічної форми такої випуклості [3]. Достатньо розповсюдженим є також використання форми дуги кола [25]. Для випуклостей, в яких висота значно менше довжини, ці обидві ідеалізовані форми дають однакові чисельні результати. Ще однією можливістю є синусоїдальна форма, в якій також висота хвилі значно менша за її довжину. У роботах [5—13] такі синусоїдальні випуклості моделювалися ще більш спрощено однаковими трапецієподібними виступами. Параметри цих виступів визначалися за допомогою розрахунків енергії різних конфігурацій із перших принципів. Такий підхід може зменшити точність оцінки параметрів форми лінії дислокації внаслідок використання дуже спрощеної ідеалізованої форми випуклості і фактичного нехтування стохастичним розподілом зсувних напружень в площині ковзання, що, в свою чергу, може призвести до неточної оцінки границі текучості.

Форма лінії дислокації за нульового навантаження моделювалася в роботі [15] за допомогою метода дискретної дислокаційної динаміки. Це прийнятний спосіб визначення параметрів форми, але результати дуже залежать від способу визначення поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання. В роботі [15] для цього використовувалися випадково розташовані в площині ковзання штучні точки закріплення, кожна з яких створює однаковий заданий розподіл зсувних напружень навколо себе, а сила, що діє на певний сегмент лінії дислокації, визначалася як сума внесків від цих штучних точок. Насправді, в реальному сплаві сила, що діє на певний сегмент лінії дислокації, визначається як сума внесків від багатьох розчинених атомів, які розташовані в вузлах кристалічних граток в об'ємі навколо площини ковзання [22, 23]. Слід зазначити, що саме за такого більш реалістичного підходу розподіл зсувних напружень в площині ковзання і розділяється на дві компоненти — коротко- і довгохвильову. Таким чином, актуальним є моделювання форми лінії дислокації методом дискретної дислокаційної динаміки, але з розрахунком зсувних напружень, що створюються розчиненими атомами. Більш того, оскільки в роботі [15] форма лінії дислокації моделювалася тільки за нульового навантаження, виникає питання про еволюцію цієї форми під дією зовнішнього навантаження. В цій роботі відзначалося також, що для прямого визначення границі текучості за допомогою такого моделювання потрібно знайти таке критичне напруження, за якого форма лінії дислокації перестане бути рівноважною, тобто швидкість всіх сегментів дислокації не буде прямувати до нуля через деякий час після прикладення цього зовнішнього напруження і дислокація не зупиниться, не досягне рівноважної форми. Це вимагає послідовного підвищення зовнішнього напруження від нуля з певним малим кроком і перевірки рівноважності форми лінії дислокації на кожному такому кроці. Тобто з кожним наступним підвищенням напруження сегменти дислокації спочатку починають рухатися, бо їх рівновага порушується, і через деякий час вони можуть зупинитися, що буде означати досягнення рівноважної форми, чи рух сегментів не припиниться і дислокація відірветься від точок початкового закріплення, а це умовно можна вважати початком пластичної деформації.

Мета даної роботи — за допомогою комп'ютерного моделювання методом дискретної дислокаційної динаміки вивчити еволюцію форми лінії дислокації зі зростаючим зовнішнім напруженням з урахуванням коротко- та довгохвильової компонент поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання і уточнити оцінки параметрів середньої випуклості за заданого розподілу зсувних напружень.

Алгоритм розрахунку

Задамо систему координат на площині ковзання. Будемо вважати, що вісь x спрямована в напрямку руху дислокації, а вісь z — в напрямку лінії дислокації. Лінію дислокації в площині ковзання можна представити як ланцюг вузлів, що з'єднані прямими сегментами. Після такої дискретизації лінії дислокації рівняння руху може бути записано для вузла i в наступному вигляді [15, 21]:

$$m\ddot{x}_i + B\dot{x}_i - \Gamma\frac{x_{i-1} - 2x_i + x_{i+1}}{\Delta z^2} = [\tau + \tau_s(x_i, z_i)]b \qquad (1)$$

де m — ефективна маса дислокації на одиницю довжини ($m \approx \rho b^2/2$ [15]); ρ — густина матеріалу; b — вектор Бюргерса; $\ddot{x}_i$ та $\dot{x}_i$ — прискорення та швидкість вузла i ($\dot{x}_i(t+\Delta t) = \dot{x}_i(t) + \ddot{x}_i(t)\Delta t$); Δt — крок за часом; B — коефіцієнт опору руху; Γ — лінійний натяг лінії дислокації; x_i та z_i — координати вузла i в площини ковзання ($x_i(t+\Delta t) = x_i(t) + \dot{x}_i(t+\Delta t)\Delta t$); Δz — відстань між сусідніми вузлами в напрямку z; τ — зовнішнє зсувне напруження, що прикладене до площини ковзання; $\tau_s(x_i, z_i)$ — розподіл внутрішніх зсувних напружень в площині ковзання. Для кожного вузла існує окреме рівняння руху, а всі разом вони утворюють систему рівнянь, яка визначає рух всіх вузлів [15, 21]. Така система вирішується з використанням періодичних граничних умов. В нашому випадку це означає, що останній крайній вузол праворуч вважається сусіднім для першого вузла ліворуч, тобто кожен вузол формально має сусідів ліворуч і праворуч.

В методі дискретної дислокаційної динаміки систему рівнянь руху вузлів вирішують для послідовних моментів часу, що розділені кроком Δt, у цьому випадку визначають відповідні координати вузлів x_i для постійного зовнішнього зсувного напруження τ. Для нульового зовнішнього навантаження ($\tau = 0$) вибирають початкову форму дислокації у вигляді прямої лінії, тобто коли всі вузли мають координату $x_i(0) = 0$ і швидкість $\dot{x}_i(0) = 0$ в момент часу $t = 0$. Розрахунки за умови $\tau = 0$

ведуть до досягнення дислокацією рівноважної форми, тобто до моменту часу $t+\Delta t$, коли максимальною різницею координат вузлів в послідовні моменти часу $\max(|x_i(t+\Delta t)-x_i(t)|)$ можна знехтувати, наприклад вона стає меншою за 10^{-6} нм. Для дослідження еволюції форми лінії дислокації з подальшим підвищенням τ беруть як початкову рівноважну форму лінії дислокації, що розрахована за попереднього меншого τ. Момент прикладання нового більшого напруження вважають за t = 0. Розрахунки за нового $\tau \neq 0$ ведуть до досягнення дислокацією рівноважної форми по згаданому критерію чи до відриву дислокації від точок початкового закріпення. В першому випадку максимальна різниця координат вузлів в послідовні моменти часу спочатку збільшується, після чого зменшується і прямує до нуля. В другому випадку ця різниця не прямує до нуля і рівноважна форма не досягається. Цей випадок реалізується за певного критичного $\tau \neq 0$.

Розподіл внутрішніх зсувних напружень $\tau_s(x_i, z_i)$ в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві може бути розрахований як сума внесків від багатьох розчинених атомів, які розташовані в вузлах кристалічних граток навколо цієї площини, і може бути розрахований як [22, 23]

$$\tau_s(x_i, z_i) = \frac{1}{b\Delta x\Delta z}\sum_h\left(\sum_k\left(\sum_m[W_{hkm}(x_i, z_i) - W_{hkm}(x_i+\Delta x, z_i)]\right)\right), \tag{2}$$

де Δx — малий крок по координаті x в напрямку, що перпендикулярний пробному прямолінійному відрізку дислокації (раціонально прийняти $\Delta x = b/100$ [22]); h, k та m — індекси, що задають розташування вузлів кристалічних граток, в яких присутні розчинені атоми, вздовж осей x, y та z; h — номер площини, що перпендикулярна вектору Бюргерса, в якій знаходиться вузол; k — номер атомного ряду в площині, в якому розташований вузол; m — номер вузла в атомному ряду; $W_{hkm}(x_i, z_i)$ — енергія взаємодії розчиненого атому в вузлі кристалічних граток з координатами x_{hkm}, y_{hkm}, z_{hkm} і прямолінійного відрізка дислокації довжини Δz з центром в точці площини ковзання, яка має координати (x_i, z_i) і де визначається зсувне напруження, що діє на дислокацію з боку розчиненого атому. Ця енергія може бути розрахована для твердого розчину заміщення, як детально описано в роботах [22, 23]. Підсумовування внесків від окремих розчинених атомів в формулі (2) відбувається з урахуванням вимог до індексів h, k та m, що описані в [22]. Крім того, внесками від розчинених атомів, що розташовані в вузлах кристалічних граток, які лежать в області ядра дислокації ($\sqrt{x_{hkm}^2 + y_{hkm}^2} \le r_c$, $|z_{hkm}| \le \Delta z/2$, де $r_c \approx b$ — радіус ядра дислокації для ГЦК граток), можна нехтувати, тобто прирівняти нулю відповідні доданки в формулі (2).

Якщо враховувати в (2) тільки внески від розчинених атомів, які розташовані в двох найближчих атомних площинах з одного боку від площини ковзання і в двох площинах з іншого боку, то можна розрахувати так звану коротнохвильову компоненту поля зсувних напружень $\tau_{s1}(x_i, z_i)$ [23].

Розчинені атоми, які більш віддалені від площини ковзання, створюють так звану довгохвильову компоненту поля зсувних напружень $\tau_{s2}(x_i, z_i)$. Довго- і коротковохвильова компоненти поля зсувних напружень зв'язані між собою рівнянням [23]

$$\tau_{s2}(x_i, z_i) = \tau_s(x_i, z_i) - \tau_{s1}(x_i, z_i). \quad (3)$$

Важливим також є уточнення оцінок параметрів середньої випуклості за заданого розподілу зсувних напружень. Середня випуклість на лінії дислокації звичайно розглядається як частина гладкої кривої, що симетрична відносно своєї середини (рис. 1). Така конфігурація може бути описана різними аналітичними виразами, але головними її параметрами будуть довжина L та висота $2w$ [25]. Відзначимо, що $2w$ дорівнює повній довжині кореляції поля зсувних напружень ξ, тобто середній довжині врівноваження цих напружень, а w — це фактично напівдовжина кореляції, на якій напруження в середньому мають один знак.

Припустимо, що випуклість можна розділити на ціле число сегментів з довжиною Δz. Тоді довжину L за відсутності зовнішнього навантаження можна оцінити із баланса сил лінійного натягу $F_{LT} = 2\Gamma_x$ та сил, що діють на окремі сегменти дислокації з довжиною Δz зі сторони поля зсувних напружень в площині ковзання, $F_s = \sum \Delta F_s$, тобто із рівняння $F_{LT} = F_s$. У випадку, коли висота випуклості набагато менша за її довжину, силу лінійного натягу можна представити як

$$F_{LT} = 2\Gamma_x = 2\Gamma\sin\alpha \approx 2\Gamma\tan\alpha = 2\Gamma \left.\frac{dx(z)}{dz}\right|_{-L/2} = \beta\Gamma\frac{2w}{L}, \quad (4)$$

де β — коефіцієнт, який залежить від конкретної форми випуклості $x(z)$, а середина випуклості відповідає z = 0. Наприклад, для квадратичної параболічної форми та форми дуги кола β = 8, а для синусоїдальної форми форми $x(z) = 2w\cos(\pi z / L)$ — $\beta = 2\pi \approx 6{,}28$. Сила ΔF_s, що діє на окремий сегмент дислокації довжиною Δz, являє собою випадкову величину, яка має нормальний розподіл, математичне очікуваня, що дорівнює нулю, та стандартне відхилення $s(\Delta z)b\Delta z$, де $s(\Delta z)$ — стандартне відхилення

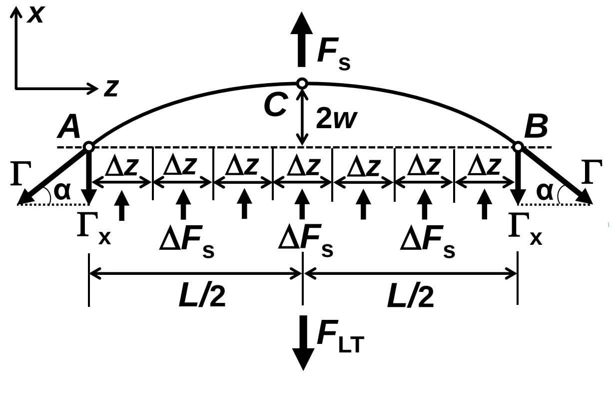

Рис. 1. Схема, що пояснює баланс сил для середньої випуклості.

розподілу зсувних напружень в площині ковзання [22, 23]. Тоді сума цих сил F_s буде мати також нормальний розподіл та математичне очікуваня, що дорівнює нулю, але стандартне відхилення дорівнюватиме $s(\Delta z)b\sqrt{L\Delta z}$. Якщо розглядати тільки F_s, які мають один знак, то в середньому будемо мати $F_s = s(\Delta z)b\sqrt{L\Delta z}$. Таким чином, легко знайти

$$L = \left(\frac{\beta\Gamma}{s(\Delta z)b\sqrt{\Delta z/(2w)}} \right)^{2/3} (2w)^{1/3} . \tag{5}$$

Якщо врахувати, що маємо дві компоненти поля напружень з різними довжинами кореляції $2w_1$ та $2w_2$ для коротко- і довгохвильової компонент відповідно, а також те, що лінія дислокації без зовнішнього навантаження і термічної активації буде мати тільки хвилястість на меншому масштабі $2w_1$ [8], то слід вважати $s(\Delta z) = s_1(\Delta z)$, $w = w_1$ і $L = L_1$. Окреме питання, яке значення Δz приймати у розрахунках. Щоб забезпечити довжину кореляції довгохвильової компоненти поля зсувних напружень вздовж осі z під час моделювання руху дислокації, Δz не може бути менше за w_2. Раціонально прийняти $\Delta z = 2w_2$. Тоді

$$L_1 = \left(\frac{\beta\Gamma}{s_1(2w_2)b\sqrt{w_2/w_1}} \right)^{2/3} (2w_1)^{1/3} \tag{6}$$

і

$$\beta = 2^{-1/2}\Gamma^{-1}L_1^{3/2}s_1(2w_2)bw_1^{-1}w_2^{1/2} . \tag{7}$$

Слід зазначити, що для моделювання методом дискретної дислокаційної динаміки рівноважної форми лінії дислокації в полі зсувних напружень в площині ковзання, які створюються розчиненими атомами, є відомими величини Γ, $s_1(2w_2)$, b, w_1, w_2. Величину L_1 можна оцінити, як запропоновано в роботі [21], визначивши точки перетину рівноважної лінії дислокації і осі z. Цей параметр буде дорівнювати початковій довжині лінії дислокації в напрямку *z*, поділеній на число точок перетину. Далі рівняння (7) дає можливість оцінити коефіцієнт β з результатів чисельного експерименту по моделюванню рівноважної форми лінії дислокації в полі зсувних напружень за відсутності зовнішнього навантаження.

Результати обчислювального експерименту та їх обговорення

Для моделювання методом дискретної дислокаційної динаміки еволюції форми лінії дислокації із зростаючим зовнішнім напруженням з урахуванням коротко- та довгохвильової компонент поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання було обрано багатокомпонентний сплав CrCoNiFeMn з ГЦК гратками. Вихідні параметри для моделювання руху дислокацій в цьому матеріалі наведено в таблиці [21, 23]. Дислокація була представлена як ланцюг з 1000 вузлів, що з'єднані прямими сегментами. Крок за часом дорівнював $2{,}1 \cdot 10^{-14}$ с, що відповідає іншим роботам по дискретній дислокаційній динаміці [15, 21]. Невідповідності атомних розмірів та модулів пружності, що були використані для

Вихідні параметри для моделювання руху дислокації в сплаві CrCoNiFeMn

Модуль зсуву G, ГПа	Модуль об'ємного тиску K, ГПа	Коефіцієнт Пуассона ν	Вектор Бюргерса b, нм	Атомний об'єм V_a, нм^3	Ефективна маса дислокації на одиницю довжини m	Коефіцієнт опору руху B, МПа·с	Лінійний натяг лінії дислокації Γ_o, Н
81	176	0,3	0,25	0,011	$2,5\cdot10^{-16}$	$2\cdot10^{-11}$	$6,23\cdot10^{-10}$

розрахунку поля напружень в площині ковзання в сплаві CrCoNiFeMn, наведено в роботі [23]. Розрахунок поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання за допомогою рівняння (2) дає певні параметри для коротхвильової (w_1 = 0,42 нм) та довгохвильової (w_2 = 1,02 нм) компонент в сплаві CrCoNiFeMn. Раціонально прийняти $\Delta z = 2w_2$ = 2,04 нм. Таким чином, отримуємо $s_1(2w_2)$ = 166—234 МПа та $s_2(2w_2)$ = 63—99 МПа для коротко- та довгохвильової компонент відповідно. Відзначимо, що стандартні відхилення компонент мають значення в певних інтервалах, тобто можливі їх різні значення.

Було проведено моделювання руху дислокації за нульового навантаження (τ = 0) для ряда стандартних відхилень $s_1(2w_2)$ і $s_2(2w_2)$ двох компонент поля зсувних напружень в площині ковзання, які розраховані для сплаву CrCoNiFeMn. Середнє значення коефіцієнта β, розраховане за результатами чисельного експерименту за допомогою (7), було 6,16, а максимальне — 7,71. Довжину L_1, визначену за результатами чисельного експерименту та розраховану за допомогою (6), показано як функцію s_1 на рис. 2. Видно, що всі довжини, визначені за результатами

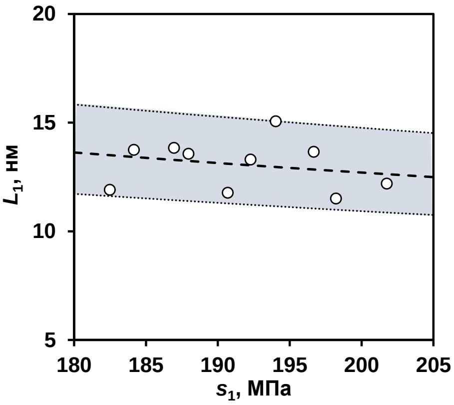

Рис. 2. Довжина середньої випуклості лінії дислокації залежно від стандартного відхилення коротхвильової компоненти поля зсувних напружень в площині ковзання в сплаві CrCoNiFeMn. Білі кола — значення за результатами чисельного експерименту. Пунктирна лінія — залежність, розрахована за допомогою (6) за умови, якщо β = 6,16. Сіра смуга показує розкид даних ±15%.

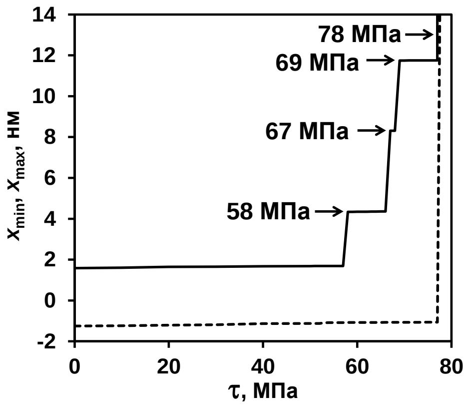

Рис. 3. Мінімальна (пунктирна лінія) та максимальна (суцільна лінія) координати x лінії дислокації залежно від прикладеного зсувного напруження.

чисельного експерименту, попадають в смугу ±15% від з алежності, розрахованої за допомогою (6) за умови яких β = 6,16. Розкид довжин ±15% визначений з урахуванням максимального коефіцієнта β = 7,71. Таким чином, чисельний експеримент показав, що найбільш прийнятна ідеалізована форма середньої випуклості — це синусоїдальна форма, де коефіцієнт β = 6,28. Це також підтверджується відповідними оцінками, які зроблені в роботі [21].

Для рівноважної форми лінії дислокації (τ = 0), що розрахована для розподілу зсувних напружень з $s_1(2w_2)$ = 191 МПа та $s_2(2w_2)$ = 71 МПа, проводили подальше моделювання руху дислокації, послідовно підвищуючи τ з кроком 1 МПа. Мінімальна та максимальна координати x рівноважної лінії дислокації залежно від τ показані на рис. 3. Дислокація втрачає рівноважну форму в умовах критичного напруження 78 МПа. Це показують як мінімальна, так і максимальна координати. Це напруження можна вважати умовно границею текучесті в даному випадку. Мінімальна координата з меншим τ незначно зростає. Це свідчить про те, що до критичного напруження дислокація залишається закріпленою в смузі початкової конфігурації, яка розрахована за умови, якщо τ = 0. Максимальна координата має стрибки за умови, якщо зовнішнє напруження дорівнює 58, 67, 69 та 78 МПа, і незначне підвищення в проміжках між цими напруженнями. Стрибки за умови, якщо зовнішнє напруження дорівнює 58, 67 та 69 МПа, відповідають утворенню нових рівноважних випуклостей на лінії дислокації, коли певні ділянки лінії дислокації долають силові бар'єри від внутрішніх напружень і мають помітне переміщення в напрямку дії зовнішнього напруження. Це є незворотній процес — зі зняттям зовнішнього навантаження випуклості не зникають і лінія дислокації не повертається в початкову конфігурацію. Незначне підвищення між стрибками відповідає малому переміщенню сегментів дислокації без здолання силових бар'єрів, такому, щоб внутрішні напруження і сили лінійного натягу врівноважили зовнішнє навантаження.

Форма лінії дислокації за різних прикладених зсувних напружень показана на рис. 4. Лінія дислокації представлена як ланцюг вузлів, що з'єднані прямими сегментами. Більшість вузлів на рис. 4 знаходяться в рівновазі (тобто нерухомі). Сила, що діє на вузол з боку зовнішнього напруження, у цьому випадку компенсується силою з боку внутрішніх напружень, які створені розчиненими атомами, та силами з боку сусідніх вузлів (силами лінійного натягу). Таким чином, кожний нерухомий за заданого навантаження вузол можна розглядати як своєрідну точку закріплення. Для того щоб визначити, чи можлива кривизна лінії дислокації, що зображена на рис. 4, треба оцінити відповідні радіуси кривизни та напруження, які необхідні, щоб їх підтримувати, і порівняти ці напруження з напруженнями, які діють на дислокацію. Слід також зазначити, що масштаби по осям z і x на рис. 4 суттєво різні. В зв'язку з цим випуклості виглядають сильно витягнутими вздовж осі x і стиснутими вздовж осі z. Таке співвідношення масштабів було обрано для того, щоб підкреслити існування випуклостей. Якщо масштаби по осям z і x

зробити рівними, то випуклості на лінії дислокації будуть виглядати мало вираженими і непомітними, оскільки висота (вздовж осі x) випуклості на лінії дислокації в 15—45 разів менша за ширину (вздовж осі z) цієї випуклості. Порівнюючи найбільше зсувне напруження 68,86 МПа, що необхідне для підтримки найменшого радіуса кривизни 36,17 нм випуклостей, які зображені на рис. 4, та середнє напруження 69,29 МПа, котре діє на них з боку поля стохастичних напружень, можна зробити висновок, що навіть за нульового зовнішнього навантаження саме тільки поле стохастичних зсувних напружень від розчинених атомів може забезпечити необхідні напруження для підтримування відповідних випуклостей на лінії дислокації з урахуванням лінійного натягу. Таким чином, всі випуклості на лінії дислокації (рис. 4) фізично можливі, якщо коректно враховувати їх радіуси кривизни, всі напруження, що діють на дислокацію, та її лінійний натяг. Рівноважна форма лінії дислокації за умови, якщо зовнішнє напруження дорівнює 0 МПа, укладається в смугу шириною $6w_1$ (рис. 4, *а*), що добре корелює з попередніми оцінками стандартного відхилення координати x лінії дислокації від 0, яке дорівнює приблизно w_1, і її максимального відхилення, яке дорівнює приблизно трьом стандартним відхиленням [21]. Очевидно, що хвилястість на масштабі $2w_2$ не проявляється при 0 МПа, в іншому випадку хвиляста лінія укладалася би в смугу шириною $6w_2$. Нові рівноважні випуклості утворюються при 58, 67 та 69 МПа (рис. 4, *б*—*г*). Видно, що на цих нових випуклостях присутні менші випуклості, які співрозмірні швидше з середньою випуклістю *B*, котра відповідає довгохвильовій компоненті поля зсувних напружень, але для даного моделювання цих менших випуклостей дуже мало для статистично обгрунтованих оцінок. Випуклість 4, що з’являється за критичного напруження 78 МПа, — нерівноважна і показана на рис. 4, *д* в певний початковий момент свого розвитку перед злиттям з випуклістю 3.

Форма лінії дислокації в різні моменти часу від початку дії напруження 78 МПа показана на рис. 5, *а*. Видно, що співвідношення довжини і висоти залишається зі зростанням випуклості 4 майже постійним, при цьому висота значно менша за довжину. Випуклість 4 в момент часу 429 пс від початку дії напруження 78 МПа показана окремо на рис. 5, *б*. Лінія дислокації в межах випуклості не є гладкою і демонструє деяку хвилястість. Пунктирні синусоідальні лінії обмежують смугу шириною $6w_2$ в напрямку осі x, в яку ця хвилястість повністю укладається, що свідчить про збільшення масштабу хвилястості лінії дислокації з $2w_1$ за нульового навантаження до $2w_2$ за прикладеного зсувного напруження, коли випуклість зростає. Це підтверджує окрему і послідовну дію двох компонент поля напружень зі збільшенням зовнішнього навантаження. За відсутності навантаження видно дію тільки коротковильової компоненти, а за певного прикладеного напруження активується хвилястість на масштабі, який пов’язаний з довгохвильовою компонентою. Швидкість руху окремих сегментів лінії дислокації для випуклості, яка показана на рис. 5, *б*, наведено на рис. 5, *в*.

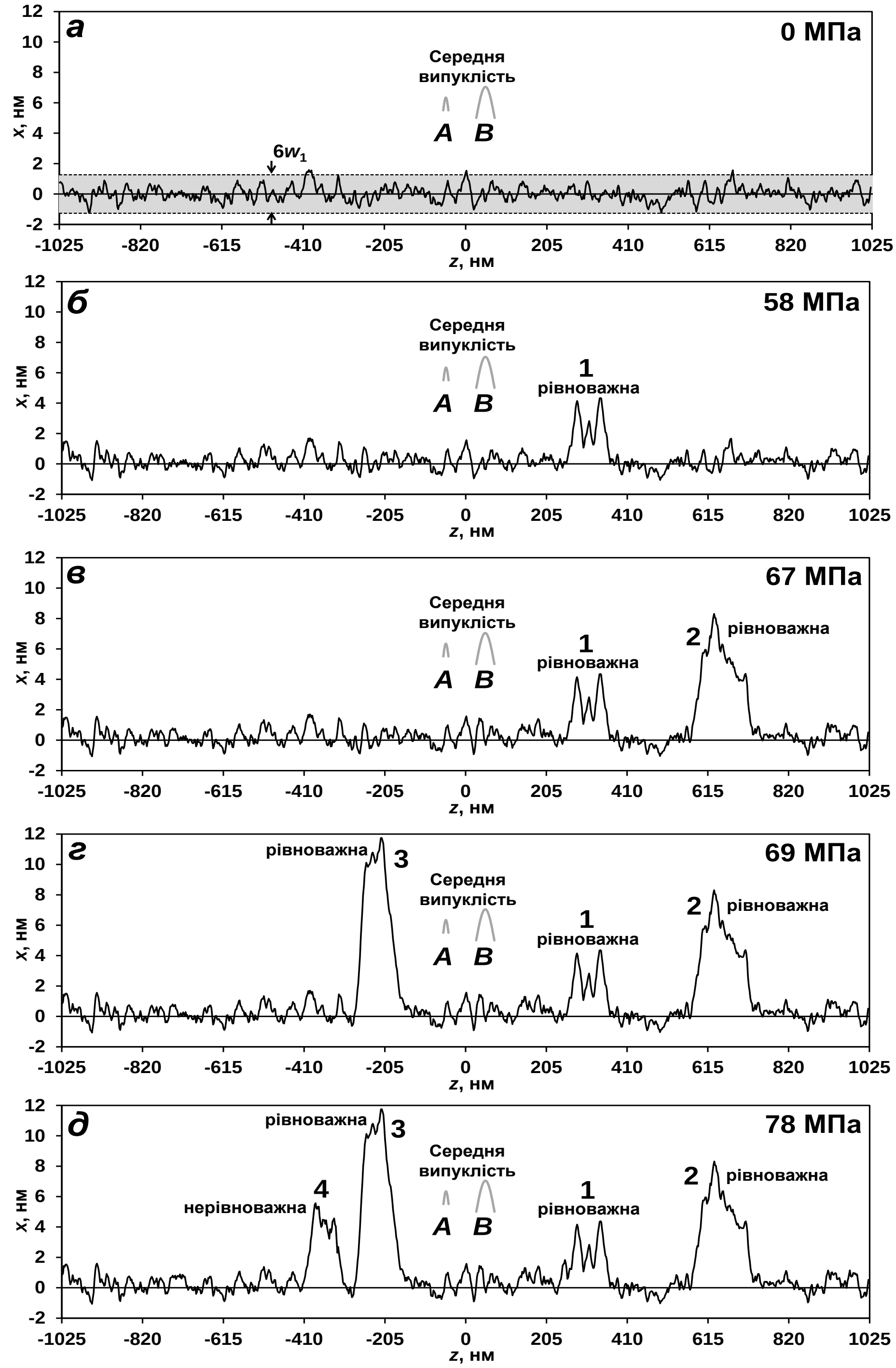

Рис. 4. Форма лінії дислокації в сплаві CrCoNiFeMn за різних зовнішніх прикладених зсувних напружень (МПа): *а* — 0; *б* — 58; *в* — 67; *г* — 69; *д* — 78; 1, 2, 3 — рівноважні випуклості, що з'являються за напруженням 58, 67 та 69 МПа; 4 — нерівноважна випуклість, що з'являється за напруженням 78 МПа. *A*, *B* — середні випуклості, які відповідають коротко- та довгохвильовій компонентам поля зсувних напружень. Пунктирні прямі лінії обмежують смугу шириною $6w_1$ в напрямку осі *x*.

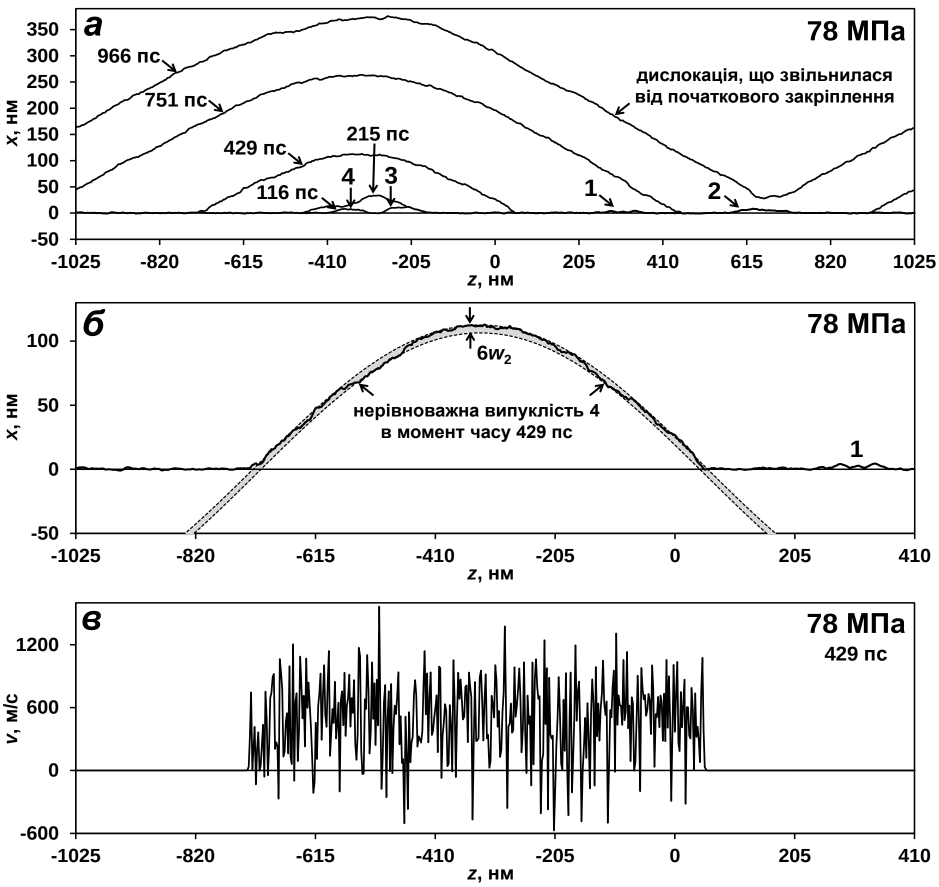

Рис. 5. Особливості еволюції лінії дислокації в сплаві CrCoNiFeMn за критичного зсувного напруження 78 МПа: *а* — форми лінії дислокації в моменти часу 116, 215, 429, 751 та 966 пс від початку дії напруження 78 МПа; *б* — нерівноважна випуклість 4 в момент часу 429 пс від початку дії напруження 78 МПа; *в* — швидкість руху окремих сегментів лінії дислокації в момент часу 429 пс від початку дії напруження 78 МПа. Пунктирні синусоідальні лінії обмежують смугу шириною $6w_2$ в напрямку осі x.

Видно, що рухаються головним чином сегменти, які входять в саму випуклість. Швидкість сегментів зовні випуклості близька до нуля. Сегменти, які рухаються, мають дуже широкий розкид швидкостей, деякі сегменти рухаються навіть в напрямку, протилежному загальному руху дислокації. Середня швидкість сегментів, які складають випуклість, є близько 466 м/с.

Висновки

В чисельному експерименті за методом дискретної дислокаційної динаміки було знайдено, що найкращим наближенням для форми середньої випуклості на лінії дислокації буде синусоідальна форма, а не параболічна чи форма дуги кола. Рівноважна форма дислокації за нульового навантаження добре укладається в смугу шириною три повні довжини кореляції короткохвильової компоненти поля зсувних напружень. Без зовнішнього навантаження хвилястість лінії дислокації на масштабі довжини кореляції довгохвильової компоненти не проявляється. За допомогою комп'ютерного моделювання виявлено, що деякі ділянки дислокації можуть долати силові бар'єри від внутрішніх напружень під дією прикладеного в площині ковзання напруження. Тоді за певних напружень стрибком утворюються нові рівноважні випуклості. Також після зняття зовнішнього навантаження лінія дислокації не повертається в початкову конфігурацію до утворення цих випуклостей, що свідчить про незворотний процес. За критичних напружень якась із таких випуклостей стає нерівноважною, зростає і звільняє дислокацію від початкового закріплення. Прикладене в площині ковзання зовнішнє напруження, яке допомогає здолати сегментам дислокації внутрішні силові бар'єри, може в певній мірі компенсувати короткохвильову компоненту поля зсувних напружень. Тоді, як показує чисельний експеримент, буде активуватися хвилястість лінії дислокації на масштабі, який пов'язаний з довгохвильовою компонентою. Таким чином, дві компоненти поля зсувних напружень впливають на форму лінії дислокації окремо і послідовно зі збільшенням зовнішнього навантаження.

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 streng-thening 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. Engineering: 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: Materials International*. 2021. Vol. 31. P. 95—104. doi: https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.11.006
19. Луговий М.І., Слюняєв В.М., Бродніковський М.П., Фірстов С.О. Розрахунок твердорозчинного зміцнення багатокомпонентних жароміцних сплавів. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. Киев: ИПМ НАН Украины. 2017. Вып. 23. С. 3—9.
20. Луговой Н.И., Слюняєв В.Н., Бродниковский Н.П. Принцип аддитивности термической и атермической компонент твердорастворного упрочнения в многокомпонентных сплавах. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. Киев: ИПМ НАН Украины. 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. Луговий М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Дві компоненти поля зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентних сплавах. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ІПМ НАН України. 2022. Вип. 4/5. С. 12—24. doi: https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.012
24. Gremaud G. Overview on dislocation-point defect interaction: the Brownian picture of dislocation motion. *Mater. Sci. Engineering: A*. 2004. Vol. 370. P. 191—198. doi: https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.04.005
25. Argon A.S. Strengthening Mechanisms in Crystal Plasticity. Oxford: Oxford University Press, 2008. 404 c. 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. Cambridge: Cambridge University Press, pp. 152—188. 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. Engineering: 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: Materials International, 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—4 [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 msterialoznavstva, Kyiv: ІПМ NAN Ukrainy, Vyp. 3, pp. 24—37 [in Ukrainian]. doi: https://doi.org/10.15407/materials2021.03.024
23. Lugovy, M., Verbylo, D. & Brodnikovskyy, M. (2022). Two components of shear stress field in glide plane in multicomponent alloys. Uspihy materialoznavstva, Kyiv: ІПМ NAN Ukrainy, Vyp. 4/5, pp. 12—24 [in Ukrainian]. doi: https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.012
24. 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
25. Argon, A. S. (2008). Strengthening Mechanisms in Crystal Plasticity. Oxford: Oxford University Press. doi: 10.1093/acprof:oso/9780198516002.001.0001

Evolution of dislocation line shape in multicomponent alloys under loading

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

The evolution of the dislocation line shape in a multicomponent alloy CrCoNiFeMn under loading was investigated by the method of discrete dislocation dynamics. It was found in a numerical experiment that the best approximation for the shape of the average bulge of the dislocation line would be a sinusoidal shape rather than a parabolic or arc shape. The equilibrium form of dislocation at zero load fits well into a band with a width of three correlation lengths of the short-wave component of the shear stress field created by dissolved atoms in the glide plane. In this case the dislocation line waviness on the scale of the correlation length of the long-wave component is not observed. It has been found that dislocation segments can overcome internal stress barriers with external applied stress assistance. This is an irreversible process of new equilibrium bulges formation. One of these bulges becomes nonequilibrium, increases and releases the dislocation from the initial fixation at a critical stress, which can be conditionally considered to be the yield strength. The external stress, which assists to the dislocation segments to overcome the internal stress barriers, can to some extent compensate for the short-wave component of the shear stress field. Then, as the numerical experiment shows, the dislocation line waviness on the scale of the correlation length of the long-wave component will be activated. Thus, the two components of the shear stress field affect the shape of the dislocation line separately and sequentially with increasing external load.

Keywords: *shear stresses, solid solution, glide plane, dislocation.*