

# Обчислювальний експеримент в матеріалознавстві

---

УДК 539.1

<https://doi.org/10.15407/materials2023.06.003>

## Температурні залежності модуля Юнга металів з різними кристалічними ґратками у широкому діапазоні температур

С. О. Фірстов, Ю. Ф. Луговський\*

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

\*E-mail: lugovskoi\_u@ukr.net

*Проаналізовано відомі температурні залежності модуля пружності  $E$  переважно металів з різними типами кристалічних ґраток у координатах  $E/E_0$  від  $T/T_{пл}$  та від  $T/T_{фн}$ , де  $T_{пл}$  та  $T_{фн}$  — температури плавлення та фазового переходу матеріалу відповідно. Показано відмінність форми та нахилу температурних залежностей  $E/E_0$  матеріалів з ОЦК, ГЦК ґратками від матеріалів з ГПУ ґраткою. Побудовано залежність  $E/E_0$  від співвідношення  $c/a$  для ГЦУ металів. Показано зв'язок між залежностями  $E/E_0$  від  $T/T_{пл}$  і коефіцієнтів дифузії від  $T/T_{пл}$  та механізмів деформації за високих температур.*

**Ключові слова:** температурні залежності модуля пружності, параметри кристалічної ґратки.

### Вступ

Модулі пружності, як і температура та теплота плавлення, теплота сублимації, є однією із характеристик рівня міжатомного зв'язку і використовуються для аналізу міцностних характеристик матеріалів. Дуже важливим є і врахування температурних залежностей модулів пружності під час дослідження механічних властивостей у широкому діапазоні температур та для розроблення жароміцних матеріалів тим більше, що з наближенням до температур плавлення або до температур фазових перетворень модуль пружності  $E$  знижується майже вдвічі. Для скорочення викладу нами зроблено огляд тільки залежностей модуля Юнга  $E(T)$  групи металів та сплавів з ГЦК, ОЦК та ГЦУ ґратками, хоча

більш повний аналіз заслуговує на розгляд і залежностей модуля зсуву  $G(T)$ , модуля об'ємного стиснення  $B(T)$ , а також коефіцієнта Пуассона.

### Огляд літератури та постановка завдання

Загальний стан досліджень у галузі залежностей модуля  $E(T)$  представлено у довідниках, підручниках та узагальнюючих статтях [1—15]. Залежно від типу кристалічної ґратки, температур плавлення  $T_{\text{пл}}$ , характеру міжатомного зв'язку спостерігається доволі широкий спектр таких кривих для чистих металів та їх сплавів. Зокрема, у роботі [8] розглядаються причини цих явищ з позиції визначення енергії утворення вакансій  $U \approx 0,2Gb^3$ , де  $G$  — модуль зсуву,  $b$  — вектор Бюргерса матеріалу. Очевидно, що з підвищенням температури головною причиною зниження модуля є термічне розширення ґратки та послаблення міжатомного зв'язку зі збільшенням міжатомних відстаней. Зрозуміло, що матеріали із більшим рівнем міжатомного зв'язку (із більш високими температурами плавлення) зберігають відносно високі значення модуля пружності до більш високих температур, оскільки на емпіричному рівні спостерігається зв'язок коефіцієнтів термічного розширення  $\alpha$ , визначених для кімнатної температури та  $T_{\text{пл}}$ , який приблизно може бути описаний виразом  $\alpha T_{\text{пл}} \approx 0,0254$  [9]. Оскільки із підвищенням температури коефіцієнти термічного розширення теж зростають за рахунок послаблення сил міжатомної взаємодії зі збільшенням міжатомної відстані, то в цілому залежності  $E(T)$  мають спадаючий нелінійний характер, хоча нижче температур  $(0,3—0,6)T_{\text{пл}}$  залежність  $E(T)$  майже лінійна.

Широке розповсюдження для опису впливу температури на модулі пружності від температури дістали емпіричні залежності Варшні

$$E(T) = E_0 - s / (e^{t/T} - 1), \quad (1)$$

де  $E_0$  — модуль Юнга при 0 К;  $s$ ,  $t$  — сталі [16]. В багатьох публікаціях відзначається, що підбором сталих  $s$ ,  $t$  можна досягти хорошого співпадіння з експериментальними даними.

Огляд відомих результатів температурних залежностей модуля пружності  $E$  з ціллю їх використання для аналізу інших властивостей матеріалів за високих температур був метою даної роботи.

### Результати та їх обговорення

Найбільший інтерес для аналізу становлять роботи з дослідження температурних залежностей модуля Юнга, у яких розглядаються результати у широкому температурному діапазоні випробувань від низьких температур до  $T_{\text{пл}}$  у координатах  $E(T)/E_0$  ( $E_0$  — екстрапольована на 0 К величина модуля пружності) та гомологічної температури  $T/T_{\text{пл}}$ . Привертає увагу той факт [4—8], що для ряду чистих металів (Sb, Zn, Mg, Cu, Ag, Au, W, Al, Pb) така температурна залежність описується практично єдиним рівнянням

$$E(T) = E_0 [1 - \varphi(T/T_{\text{пл}}) - \chi(T/T_{\text{пл}})^2], \quad (2)$$

середні значення коефіцієнтів  $\varphi = 0,21$  і  $\chi = 0,3$  якої для металів на підставі даних таблиці отримано у роботі [17].

У роботі [18] наведено теоретичні розрахунки  $E/E_0$  для металів, бінарних та полікомпонентних систем, керамічних матеріалів залежно

від  $T/T_{пл}$  на основі виразів для модуля пружності від внутрішньої енергії матеріалу з урахуванням параметра кристалічної ґратки та енергії коливань електрон-іонної системи, а також відповідний універсальний теоретичний вираз

$$E(T) = E_0 [1 - 0,2(T/T_{пл}) - 0,25(T/T_{пл})^2], \quad (3)$$

сталі якого близькі до  $\phi$  і  $\chi$  з (2). За цих значень коефіцієнтів вираз (2) добре збігається з експериментальною кривою Л. Мороза (рис. 1), наведеною у роботі [6] для шести металів (W, Mo, Ta, Fe, Ni, Al). У цьому випадку апроксимація даних Л. Мороза в координатах  $E/E_0$  та  $T/T_{пл}$  поліномом другого ступеня привела до рівняння  $y = 1 - 0,23x - 0,29x^2$  з коефіцієнтом надійності  $R^2 = 0,9912$ . Додаткові точки, нанесені на відомі дані, майже співпадають.

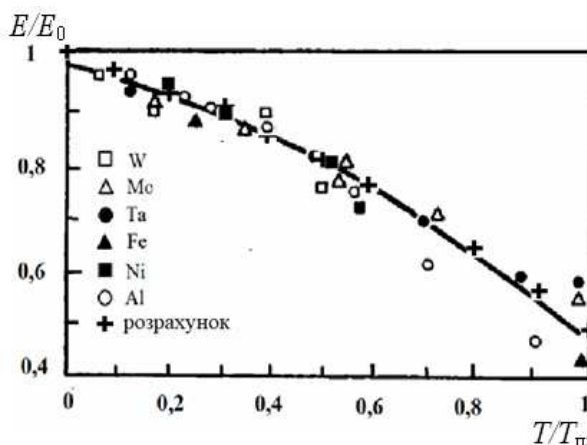
Отримані вирази (2) та (3) добре узгоджуються із експериментальними даними, оскільки дійсно передбачають майже двократне зниження модуля пружності з підвищенням температури до  $T_{пл}$ , а саме  $E(T_{пл}) = (0,45—0,49)E_0$ , та відхилення від лінійної залежності  $E(T)$ , яке в роботах [11, 12] отримало назву “дефект модуля”. Для низьких гомологічних температур другим членом виразів (2) та (3) можна знехтувати, оскільки, наприклад, для  $T = 0,2T_{пл}$  останній член виразу не перевищує 0,01 і залежність  $E(T)$  є лінійною. Згідно з роботами [5, 6], така ситуація спостерігається для чистих металів в основному з ОЦК та ГЦК ґратками, а також для двох металів з ГЦУ ґраткою — Zn та Mg.

У той же час надійно встановлено, що для титану та цирконію і для деяких сплавів на їх основі (сплави титану ВТ1-00, ВТ5 [13]), а також для Zr, сплавів цирकोлом Zr-2, Zr-4 та сплаву Zr—2,5Nb [14] залежності модуля Юнга  $E$  від  $T$  ( $^{\circ}\text{C}$ ) лінійні у дуже широкому діапазоні температур.

#### Коефіцієнти залежності $E/E_0$ від $T/T_{пл}$ для металів

Метал	$\phi$	$\chi$
Mg	0,17	0,33
Pb	0,23	0,33
Au	0,22	0,28
Ag	0,23	0,25
Cu	0,18	0,44
Al	0,16	0,29
Zn	0,1	0,4
Sb	0,3	0,27
W	0,3	0,1
Серед. знач.	0,21	0,3

Рис. 1. Температурні залежності модуля Юнга матеріалів з ОЦК та ГЦК ґратками [6]: + — точки, розраховані за рівнянням  $E/E_0 = 1 - 0,21x - 0,3x^2$ .



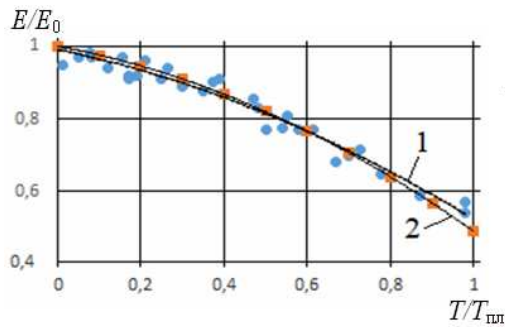


Рис. 2. Температурні залежності модуля Юнга матеріалів з ОЦК кристалічною ґраткою. Крива 1 побудована за точками ОЦК металів Мо, W, Та за даними [5, 6, 10],  $E/E_0 = 1 - 0,27x - 0,2x^2$ ,  $R^2 = 0,9742$ ; крива 2 побудована за залежністю (2).

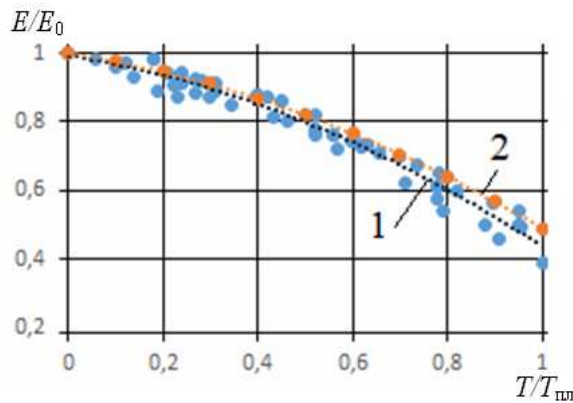


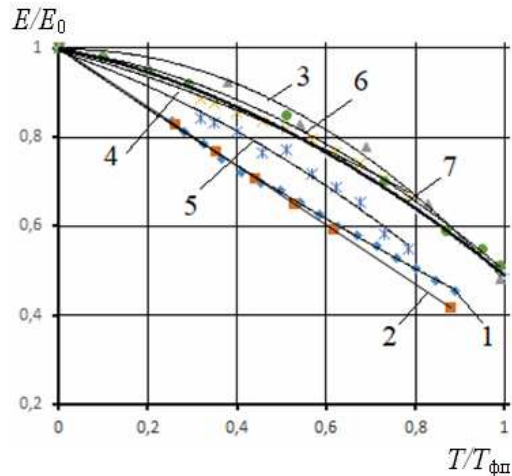
Рис. 3. Температурні залежності модуля Юнга металів з ГЦК кристалічною ґраткою: крива 1 —  $E/E_0 = 1 - 0,245x - 0,315x^2$ ,  $R^2 = 0,96874$ ; крива 2 побудована за рівнянням (2).

На рис. 2—4 наведено залежності нормованого модуля пружності  $E/E_0$  від гомологічної температури окремо для металів з ОЦК, ГЦК та ГЦУ кристалічними ґратками. Порівняння кривих 1 та 2 на рис. 2 показало невелику різницю у коефіцієнтах рівнянь (1) та (2).

На рис. 3 представлено відомі з робіт [5, 6, 12] експериментальні дані металів з ГЦК кристалічною ґраткою. Порівняння кривих 1 і 2 показало, що вони та коефіцієнти їх рівнянь близькі.

На рис. 4, а наведено залежності відносного модуля Юнга металів і сплавів з ГЦУ кристалічною ґраткою на основі Ті, Zr, Mg і Zn від відносної температури фазового переходу  $T/T_{\text{фп}}$ . На необхідність використання для аналізу залежностей  $E$  від  $T_{\text{фп}}$  вказано у роботах [5, 17]. Для Ті температура фазового переходу  $T_{\text{фп}}$  становить 1152 К, а для Zr — 1136 К. Для ГЦУ металів, які не мають фазового переходу ГПУ→ОЦК у твердому стані, під температурою фазового переходу треба розуміти саме температуру плавлення. Порівняння кривих на рис. 4 показало, що криві 1, 2 знаходяться помітно нижче кривих 4—6, тобто  $T/T_{\text{фп}}$  сильніше знижує  $E/E_0$ . Крім того, їх особливістю є лінійна залежність від відносної температури, на відміну від залежностей матеріалів з ОЦК та ГЦК ґратками. Видно також, що при температурі фазового перетворення модуль Юнга знижується приблизно вдвічі у порівнянні із  $E_0$ . Те саме відбувається і для заліза. Це вказує на те, що температурні залежності сплавів з фазовим переходом краще представляти залежно від температури фазового переходу, ніж від температури плавлення. Відносно залежностей сплавів Mg—3Al—1Zn (крива 4) та Mg—6Zn—0,5Zr (крива 5) (рис. 4) зауважимо, що, за даними [15], вони мають відмінності між

Рис. 4. Температурні залежності модуля Юнга матеріалів з ГЦУ кристалічною ґраткою: 1 — ВТ1-00 [13]; 2 — сплав Zr [14]; 3 — Zn [5]; 4 — сплав Mg—3Al—1Zn [15]; 5 — сплав Mg—6Zn—0,5Zr [16]; 6 — Mg [5]; 7 — загальна залежність (2).



температурними залежностями модуля пружності, які вимірювались у трьох ортогональних напрямках досліджуваних заготовок у вигляді плит. Якщо у Mg—3Al—1Zn ці залежності були однакові, то у Mg—6Zn—0,5Zr в одному з напрямків залежність  $E—T$  нижча за інші. Очевидно, це призвело до більш сильного нахилу температурної залежності на рис. 4. Відмітимо, що поруч з кривою 7 (рівняння (2)) (рис. 4) розташовано дані для температурної залежності Mg з роботи [5], а всі температурні залежності для магнію та його сплавів розташовані значно вище, ніж аналогічні залежності для Ti і Zr та його сплавів. Подібна ситуація має місце і для Zn [5], крива якого розташована вище за всі інші криві до  $T/T_{пл} = 0,8$ .

Таким чином, розгляд залежностей  $E/E_0$  від  $T/T_{фп}$  різних матеріалів з ГЦУ кристалічною ґраткою показав їх помітну відмінність у нахилах відносно загальної кривої (2).

Відмінність між кривими на рис. 2—4 можна пояснити відмінністю симетрії ГЦУ від ОЦК та ГЦК кристалічних ґраток. Відомо, що коефіцієнти термічного розширення  $\alpha$  (КТР) ОЦК і ГЦК ґраток ізотропні. При цьому температурні залежності  $\alpha$  обернено пропорційні температурним залежностям модуля пружності  $E$ . Це допомагає при аналізі  $E$  залежно від  $T$ . У матеріалах з ГЦУ ґратками коефіцієнти термічного розширення характеризуються суттєвою анізотропією. Особливості розширення ГЦУ кристалічних ґраток, зокрема титану, досліджено методом рентгенівського вимірювання відстані між атомами вздовж осей  $a$  і  $c$  [19]. Згідно з роботою [20], в діапазоні температур 293—500 К КТР в напрямку осі  $c$  дорівнює  $9,57 \cdot 10^{-6}$ , а перпендикулярно вісі  $c$  —  $9,23 \cdot 10^{-6}$ , тобто з підвищенням температури відношення  $c/a$  зростає. Встановлено, що зі зростанням температури від кімнатної до 800 К анізотропія середньоквадратичних динамічних зміщень атомів та коефіцієнтів термічного розширення вздовж осі  $c$  та перпендикулярно до неї суттєво зменшується і можливо саме цей фактор зумовлює лінійну і навіть вогнуту залежність  $E(T)$  для Ti і Zr [21]. Можливо саме це сприяє збереженню лінійної залежності  $E(T)$  для титана та цирконія до більш високих температур, у той час як залежності для магнія та цинку нагадують залежності для ГЦК та ОЦК ґраток.

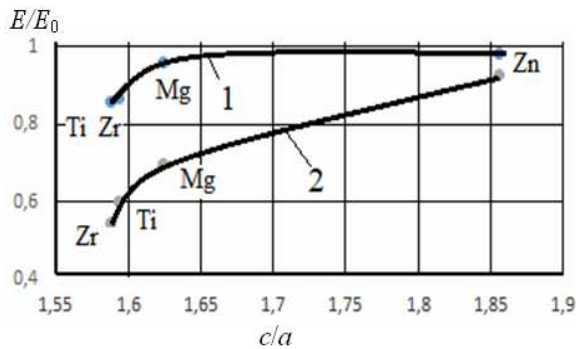


Рис. 5. Залежності  $E/E_0$  матеріалів з ГЦУ кристалічною граткою від параметра структури  $c/a$  для  $T/T_{\text{фп}}$  рівнів гомологічної температури 0,2 (1) та 0,6 (2).

На зміну нахилу лінійної залежності для титану при температурі 606 К вказано у роботі [21]. Зокрема, вище цієї температури відбувається зміна коефіцієнта нахилу лінійної залежності  $E(T)$  у бік її послаблення від величини  $-93,2$  до  $-71,9$  МПа/К. Подібну зміну можна помітити для Ті (крива 1) на рис. 4.

Більш детально зв'язок анізотропії кристалічних ґраток з властивостями ГЦУ матеріалів аналізується через співвідношення відстані між атомами  $a$  і  $c$ . Відомо, що для металів з ГЦУ граткою співвідношення  $c/a$  суттєво впливає на їх властивості під час механічного, термічного та радіаційного навантажень [22]. У цьому випадку ідеальним вважають співвідношення  $c/a = 1,633$ , за якого має місце найбільш щільна укладка атомів. Такій укладці атомів найкраще відповідає Mg ( $c/a = 1,623$ ) та Co ( $c/a = 1,632$ ). Інші ГЦУ метали можна поділити на два класи: 1 — з  $c/a < 1,633$  (Ті —  $c/a = 1,586$ ; Zr —  $c/a = 1,563$ ; Hf, Ве та інші); 2 — з  $c/a > 1,633$  (Zn —  $c/a = 1,856$ ). Залежності величини  $E/E_0$  для двох рівнів гомологічної температури від співвідношення  $c/a$  представлені на рис. 5. Показано, що досліджені залежності розташовані так, як і криві на рис. 4, тобто криві для Ті, Zr розташовані нижче, а для Zn — вище кривої для Mg і, відповідно, розрахованої залежності (2).

З характеру зміни залежностей на рис. 5 слідує, що метали з ГЦУ кристалічною граткою та  $c/a < 1,633$  значно сильніше залежать від  $T/T_{\text{фп}}$ , ніж ті, що мають  $c/a > 1,633$ . З огляду на це метали та їх сплави з параметром  $c/a$  трохи більше 1,633 перспективні для отримання високих характеристик термопружності  $E/E_0$  у порівнянні з іншими. Можна очікувати, що перспективним для підвищення міцності та жароміцності є пошук такого легування сплавів на основі титану та цирконію, яке б привело до збільшення відношення  $c/a$ . Це підтверджено в роботі [23] на прикладі сплавів системи Ті—Al, де із зростанням вмісту алюмінію у сплаві збільшується відношення  $c/a$  та підвищується модуль пружності.

У даному огляді недостатньо уваги приділено аналізу непружних (релаксаційних) явищ у навантажених твердих тілах, які проявляються з підвищенням температури, хоча доволі давно, ще з класичних досліджень Зінера [11], було з'ясовано, що, наприклад, в дослідах по внутрішньому тертю має місце цілий спектр цікавих явищ, а саме амплітудно-залежне внутрішнє тертя, релаксація по границях зерен, атомні перебудови у полях напружень у твердих розчинах, різного роду дислокаційна непружність, які безумовно мають впливати і на вимірювання пружних характеристик.

Зокрема, зверталась увага на різницю у температурній залежності модулів пружності полі- та монокристалів, яка особливо проявляється в температурному інтервалі, коли зростає зерногранична релаксація.

Проте варто відмітити дуже детальне і прецизійне дослідження [12], виконане на високочистому полі- та монокристалічному золоті з використанням ехо-імпульс методики. Головним результатом, на думку автора, є доказ, що з підвищенням температури “дефекти модуля” для полікристалу та “осередненого” полікристалу, отриманого з даних по температурній залежності пружних констант  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  та  $c_{44}$  для монокристалів орієнтацій (100) та (110), практично співпадають. Тобто не виключено, що вплив на дефект модуля зернограничної релаксації не є визначальним під час вимірювання за надмалих амплітуд навантаження і може проявлятися в умовах деформації більше  $10^{-6}$  та високих гомологічних температур.

Цікаві дані отримано нещодавно в роботі [24], виконаній на високоентропійному сплаві  $\text{HfNbTaTiZr}$ , у якій встановлено, що незважаючи на сильне зростання непружних явищ, зокрема коефіцієнта затухання  $Q^{-1}$ , в інтервалі температур 700—1100 K, воно в цілому не впливає на залежність модуля пружності від температури. Тобто найважливішою причиною зниження модуля пружності з підвищенням температури лишається термічне розширення ґратки.

Насамкінець зауважимо, що врахування температурної залежності модуля пружності під час аналізу температурних залежностей механічних властивостей, зокрема межі текучості, дозволяє більш чітко дослідити вплив інших факторів як на температурно-залежну складову, так і на “атермічну” складову критичного спротиву зсуву. Зокрема, у роботі [25] показано роль інших факторів, таких як динамічне деформаційне старіння та зростання із температурою середньоквадратичних зміщень, які “компенсують” зниження модуля пружності та дозволяють формувати протягне “плато” на залежності  $\sigma(T)$ . Зауважимо, що з’ясування можливостей послаблення температурної залежності модуля пружності за рахунок додаткового легування є доволі актуальним завданням для розроблення жароміцних сплавів. У роботі [25] враховано встановлений С. Герцрікеном та І. Дехтярем [26] чіткий лінійний зв’язок між пружними характеристиками та енергією активації дифузії та запропоновано для розрахунку коефіцієнтів дифузії використовувати залежність енергії активації дифузії від температури  $Q(T)$  у вигляді

$$Q(T) = Q_0 [1 - \phi(T/T_{пл}) - \chi(T/T_{пл})^2]. \quad (4)$$

Показано, що відхилення залежності коефіцієнта дифузії від температури від арреніусівської залежності  $D(T)$  зумовлено нелінійним характером зміни сил зв’язку в матеріалі і, відповідно, енергії активації дифузії.

У роботі [27] показано, що легуванням металів та сплавів можна досягти підвищення температури переходу від дислокаційних до дислокаційно-дифузійних процесів деформації. Встановлено, що для чистих металів цей перехід відбувається за температур на рівні  $0,3$ — $0,35T_{пл}$ , а для складнолегованих сплавів, зокрема високоентропійних із негативною ентальпією змішування, — при  $0,5T_{пл}$ , що важливо для розроблення сплавів із підвищеною жароміцністю.

## Висновки

Відмінність температурних залежностей  $E/E_0$  матеріалів з ОЦК та ГЦК кристалічними ґратками від матеріалів з ГЦУ кристалічною ґраткою полягає в тому, що перші можна описати нелінійною залежністю, зокрема поліномом другого ступеня з коефіцієнтами  $\varphi = 0,21$  і  $\chi = 0,3$  чи близькими до цих значень. Для деяких матеріалів з ГЦУ кристалічною ґраткою (титан, цирконій та їх сплави) температурні залежності модуля пружності переважно лінійні та розташовані помітно нижче перших залежно як від  $T/T_{пл}$ , так і від  $T/T_{фп}$  через анізотропні зміни відстані між атомами вздовж  $a$  і  $c$  з підвищенням температури.

Показано, що метали з ГЦУ кристалічною ґраткою та  $c/a < 1,633$  значно сильніше залежать від  $T/T_{пл}$  та  $T/T_{фп}$ , ніж ті, що мають  $c/a > 1,633$ . Температурні залежності пружних характеристик ГЦУ металів без фазових переходів (Mg, Zn та їх сплави) наближаються до таких, які характерні для ОЦК та ГЦК металів. З огляду на це метали та їх сплави з параметром  $c/a$  трохи більше 1,633 перспективні для отримання високих характеристик термopружності  $E/E_0$  у порівнянні з іншими.

Використання температурних залежностей модуля пружності під час аналізу температурних залежностей фізичних (коефіцієнтів дифузії) і механічних характеристик дислокаційної природи дозволяє побачити аналогії між ними та більш детально дослідити механізми, що лежать у їх основі.

## Список літератури

1. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов / Под ред. И. Н. Францевича. К.: Наук. думка, 1982. 288 с.
2. Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М., Григорьев И.С., Мейлихов Е.З. / Под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. Физические величины: (Справ.). Москва: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
3. Handbook of Elastic Properties of Solids, Liquids, and Gases, Four-Volume Set. <https://books.google.com.ua/books?id=aPmGAwAAQBAJ&pg=RA5-PA30&lpg=RA5-PA30&dq=handbook+on+temperature+dependences+of+elastic+moduli+at+high+temperatures&source=bl&ots=6HoKc90m60&sig=ACfU3U3hM-FfdMB5AsdwD7jGEwfwWYEMw&hl=ru&sa=X&ved=2ahUKEwjt6qKywabxAhWDgf0HNUjNBxEQ6AEwB3oECAsQAw#v=twopage&q=handbook%20on%20temperature%20dependences%20of%20elastic%20moduli%20at%20high%20temperatures&f=false>
4. Ledbetter H.M. Temperature behaviour of Young's moduli of forty engineering alloys. *Cryogenics*. 1982. P. 653—656. [https://doi.org/10.1016/0011-2275\(82\)90072-8](https://doi.org/10.1016/0011-2275(82)90072-8)
5. Драпкин Д.М., Кононенко В.К., Безъязычный В.Ф. Свойства сплавов в экстремальном состоянии. Москва: Машиностроение, 2004. 256 с.
6. Золоторевский В.С. Механические свойства металлов. Учебник для вузов. Москва: МИСИС, 1998. 400 с.



7. Hill W.H.I., Shimmin K.E. Elevated temperature dynamic elastic moduli of various metallic materials. *Mater. Central. WADD TECHNICAL REPORT 60-13874*. March 1961.
8. Инденбом В.Л., Орлов А.Н. Физическая теория прочности и пластичности. *Успехи физ. наук*. 1962. Т. 76, вып. 3. С. 557—591.
9. Granato V., Joncich D.M., Khonik V.A. Melting, thermal expansion, and the Lindemann rule for elemental substances. *Appl. Phys. Lett.* 2010. Vol. 97. P. 171911.
10. Skoroa G.P., Bennettb J.R.J., Edgecockb T.R., Grayb S.A., McFarlandb A.J., Bootha C.N., Rodgersb K.J., Bac J.J. Dynamic Young's moduli of tungsten and tantalum at high temperature and stress. Preprint submitted to *J. Nuclear Mater.* December 15, 2010.
11. Зинер К. Упругость и неупругость металлов. Пер. Л. А. Шубиной / Под ред. С. В. Вонсовского. Москва: ИЛ, 1954.
12. Collard S.M. High-temperature dependence elastic constants of gold single – crystals. A thesis submitted for the degree doctor of philosophy. Houston, Texas, 1991. 135 p. Name: 9136015.PDF
13. Национальный стандарт Российской Федерации. ГОСТ Р8.982—2019. Стандартные справочные данные. Титановые сплавы марки ВТ. Скорость звука, относительное температурное расширение, плотность и модуль Юнга в диапазоне температур от 20 до 800 °С.
14. Rosinger H.E., Ritchie I.G., Shillinglaw A.J. Young's modulus of crystal bar zirconium and zirconium alloys (zircaloy-2, zircaloy-4, zirconium—2,5% (wt.) niobium) to 1000 K. *Whiteshell Nuclear Research Establishment Pinawa, Manitob.* ROE 1L0 September 1975. P. 1—20.
15. Garlea E., Radovic M., Liaw P.K. High-temperature dependency of elastic mechanical behavior of two wrought magnesium alloys AZ31B and ZK60A studied by resonant ultrasound spectroscopy. *Mater. Sci. Engineering: A* (IF 4.652). 2019-05-03. doi: 10.1016/j.
16. Varshni Y.P. Temperature dependence of the elastic constants. *Phys. Rev.* 1970. Vol. 2, No. 10.
17. Фирстов С.А., Саржан Г.Ф. О температурной зависимости коэффициента диффузии. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. К.: Ін-т пробл. матеріалознавства НАН України. 2014. Вып. 20. С. 71—75.
18. Zakarian D., Khachatryan A., Firstov S. Universal temperature dependence of Young's modulus. *Metal Powder Report*. 2019. Vol. 74, No. 4. P. 204—206. <https://doi.org/10.1016/j.mprp.2018.12.079>
19. Sirota N.N., Zhabko T.E. X-ray study of the anisotropy of thermal properties in titanium. *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1981. K211—215. <https://doi.org/10.1002/pssa.2210630266>
20. Russell A.M., Cook B.A. Coefficient of thermal expansion anisotropy and texture effects in ultra-thin titanium sheet. *Scripta Mater.* 1997. Vol. 37, is. 10. P. 1461—1467.
21. Trojanova Z., Maksimiyu P.A., Lukac P. Temperature dependence of Young's modulus of  $\alpha$ -titanium polycrystals. *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1994. Vol. 143. K75.
22. Черняева Т.П., Грицина В.М. Характеристики ГПУ-металлов, определяющие их поведение при механическом, термическом и

- радиационном воздействии. *Вопросы атомной науки и техники*. 2008. № 2. С. 15—27.
23. Илларионов А.Г., Попов А.А. Технологические и эксплуатационные свойства титановых сплавов. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2014. 137 с.
  24. Laplanche G., Gadaud P., Perriere L., Guillot I., Couzini J.P. Temperature dependence of elastic moduli in a refractory HfNbTaTiZr high-entropy alloy. *J. Alloys Comp.* 2019. Vol. 799. P. 538—545.
  25. 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, N 1. С. 127—140.
  26. Герцрикен С.Д., Дехтяр И.Я. Диффузия в металлах и сплавах в твердой фазе. Москва, 1960. 564 с.
  27. Фирстов С.А., Горбань В.Ф., Крапивка Н.А., Печковский Э.П., Еременко А.Л. Определение температуры перехода к диффузионным механизмам деформации в однофазных ОЦК-высокоэнтропийных сплавах эквиатомного состава. *Композиты и наноструктуры*. 2014. Т. 6, № 3. С. 125—136.

### References

1. Frantsevich, I. M., Voronov, F. F., Bakuta, S. A. (1982). Uprugie postoyannyye i moduli uprugosti metallov i nemetallov / Pod red. I. M. Frantsevicha. K.: Nauk. dumka. 288 p. [in Russian].
2. Babichev, A. P., Babushkina, N. A., Bratkovsky, A. M., Grigoriev, I. S., Meilikhov, E. Z., Grigorieva, I. S., Meilikhova, E. Z. (1991). Fizicheskie velichiny: (Sprav.). M.: Energoatomizdat, 1232 p. [in Russian].
3. Handbook of Elastic Properties of Solids, Liquids, and Gases, Four-Volume Set. <https://books.google.com.ua/books?id=aPmGAwAAQBAJ&pg=RA5-PA30&lpg=RA5-PA30&dq=handbook+on+temperature+dependences+of+elastic+moduli+at+high+temperatures&source=bl&ots=6HoKc90m60&sig=ACfU3U3hM-FfdMB5AsdwD7jGEwfwWYEMw&hl=ru&sa=X&ved=2ahUKEwjt6qKywabxAhWDgF0HHUjNBxEQ6AEwB3oECAsQAw#v=twopage&q=handbook%20on%20temperature%20dependences%20of%20elastic%20moduli%20at%20high%20temperatures&f=false>
4. Ledbetter, H. M. (1982). Temperature behaviour of Young's moduli of forty engineering alloys. *Cryogenics*, pp. 653—656. [https://doi.org/10.1016/0011-2275\(82\)90072-8](https://doi.org/10.1016/0011-2275(82)90072-8)
5. Drapkin, D. M., Kononenko, V. K., Bez'yazyichnyiy, V. F. (2004). Svoystva splavov v ekstremalnom sostoyanii. Moscow: Mashinostroenie, 256 s. [in Russian].
6. Zolotarevskiy, V. S. (1998). Mehanicheskie svoystva metallov. Uchebnik dlya vuzov. 3-e izd. Moscow: MISIS. 400 s. [in Russian].
7. Hil, W. Hl., Shimmin, K. E. (1961). Elevated temperature dynamic elastic moduli of various metallic materials. Mater. Central. WADD TECINICAL REPORT 60-13874. March.

8. Indenbom, V. L., Orlov, A. N. (1962). Fizicheskaya teoriya prochnosti i plastichnosti. *Uspehi fiz. nauk*, Vol. 76, vyp. 3, pp. 557—591 [in Russian].
9. Granato, A. V., Joncich, D. M., Khonik, V. A. (2010). Melting, thermal expansion, and the Lindemann rule for elemental substances. *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 97, pp. 171911.
10. Skoroa, G. P., Bennettb, J. R. J., Edgecockb, T. R., Grayb, S. A., McFarlandb, A. J., Bootha, C. N., Rodgersb, K. J., Bac, J. J. (2010). Dynamic Young's moduli of tungsten and tantalum at high temperature and stress. Preprint submitted to *J. of Nuclear Materials*, December 15.
11. Ziner, K. (1954). *Uprugost i neuprugost metallov*. Perv. L. A. Shubinoy/ Pod red. S. V. Vonsovskogo. Moscow: IL [in Russian].
12. Collard, S. M. (1991). High-temperature dependency elastic constants of gold single – crystals. A thesis submitted for the degree doctor of philosophy. Houston, Texas, 135 p. Name: 9136015.PDF
13. Natsionalnyiy standart Rossiyskoy Federatsii. GOST R8.982—2019. Standartnyie spravochnyie dannyye. Titanovyye splavyi marki VT. Skorost zvuka, odnositelnoe temperaturnoe rasshirenie, plotnost i modul Yunga v diapazone temperatur ot 20 do 800 °S [in Russian].
14. Rosinger, H. E., Ritchie, I. G., Shillinglaw, A. J. (1975). Young's modulus of crystal bar zirconium and zirconium alloys (zircaloy-2, zircaloy-4, zirconium—2.5wt% niobium) to 1000 K. Whiteshell Nuclear Research Establishment Pinawa, Manitoba, ROE 1L0 September, pp. 1—20.
15. Garlea, E., Radovic, M., Liaw, P. K. (2019). High-temperature dependency of elastic mechanical behavior of two wrought magnesium alloys AZ31B and ZK60A studied by resonant ultrasound spectroscopy. *Mater. Sci. Engineering: A (IF 4.652 ) -05-03*. doi: 10.1016/j.
16. Varshni, Y. P. (1970). Temperature dependence of the elastic constants. *Phys. Rev.*, Vol. 2, No. 10.
17. Firstov, S. O., Sarzhan, G. F. (2014). Temperature dependence of diffusion constant. *Elektronnaya mikroskopiya i prochnost materialov*, Vyp. 20, pp. 71—75 [in Russian].
18. Zakarian, D., Khachatrian, A., Firstov, S. (2019). Universal temperature dependence of Young's modulus. *Metal Powder Report*, Vol. 74, No. 4, pp. 204—206. <https://doi.org/10.1016/j.mprp.2018.12.079>
19. Sirota, N. N., Zhabko, T. E. (1981). X-Ray study of the anisotropy of thermal properties in titanium. *Phys. Stat. Sol. (a)*, pp. K211—215. <https://doi.org/10.1002/pssa.2210630266>
20. Russell, A. M., Cook, B. A. (1997). Coefficient of thermal expansion anisotropy and texture effects in ultra-thin titanium sheet. *Scripta Materialia*, Vol. 37, is. 10, pp. 1461—1467.
21. Trojanova, Z., Maksimiyu, P. A., Lukas, P. (1994). Temperature dependence of Young's modulus of  $\alpha$ -titanium polycrystals. *Phys. Stat. Sol. (a)*, Vol. 143, pp. K75.
22. Chernyaeva, T. P., Gritsina, V. M. (2008). Characteristics of HCP metals determining their behavior under mechanical, thermal and radiation exposure. *Voprosyi atomnoy nauki i tehniki*, № 2, pp. 15—27 [in Russian]. URI: <http://dspace.nbu.gov.ua/handle/123456789/111096>

23. Illarionov, A. G., Popov, A. A. (2014). Tehnologicheskie i ekspluatatsionnyie svoystva titanovyih splavov. Ekaterinburg: Izd-vo Ural. un-ta, 137 p. [in Russian].
24. Laplanche, G., Gadaud, P., Perriere, L., Guillot, I., Couzini, J. P. (2019). Temperature dependence of elastic moduli in a refractory HfNbTaTiZr high-entropy alloy. *J. Alloys Comp.*, Vol. 799, pp. 538—545.
25. Firstov, S. O., Rogul, T. G. (2022). “Plateau“ on temperature dependence of the critical shear stress in binary and multicomponent solid solution and pure metals. *Metallofiz. Noveishie Tekhnologii*, Vol. 44, No. 1, pp. 127—140 [in Russian]. <https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127>.
26. Gertsriken, S. D., Dehtyar, I. Ya. (1960). Diffuziya v metallah i splavah v tverdoe faze. Moscow, 564 p. [in Russian].
27. Firstov, S. O., Gorban, V. F., Krapivka, N. A., Pechkovskiy, E. P., Eremenko, A. L. (2014). Estimation of transition temperature to diffusion deformation mechanisms in single-phase BCC high entropy alloys of equiatomic composition. *Kompozity i nanostruktury*, Vol. 6, No. 3, pp. 125—136 [in Russian].

## **Temperature dependence of the Young's modulus of metals with different crystal lattices in a wide temperature range**

S. O. Firstov, Yu. F. Lugovskiy\*

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

\*E-mail: lugovskoi\_u@ukr.net

*The known temperature dependences of the modulus of normal elasticity  $E$ , mainly of metals with different types of crystal lattices, were analyzed. The dependences of  $E/E_0$  on  $T/T_m$  and on  $T/T_{pt}$  are considered, where  $E_0$  is the modulus of elasticity extrapolated to 0 K, and  $T_m$  and  $T_{pt}$  are the melting and phase transition temperatures of the material, respectively. The difference in shape and slope of temperature dependences  $E/E_0$  of materials with bcc and fcc crystal lattices from materials with hcp crystal lattice is shown. If for the first two types of lattices, the dependences can be described by a second degree polynomial with coefficients close to 0,21 and 0,3, then the temperature dependences of the modulus of elasticity of titanium, zirconium, and its alloys are mostly linear and are significantly lower than the first ones due to the anisotropy of temperature changes of the lattice parameters  $a$  and  $c$ . The dependence of  $E/E_0$  on the  $c/a$  ratio is plotted for a number of hcp metals for two levels of  $T/T_{pt}$ , and the area of the best  $c/a$  values for creating materials with increased thermal elasticity is shown. The relationship between the dependences of  $E/E_0$  on  $E/E_0$  and the ratio of diffusion coefficients on  $E/E_0$  and examples of their use for the analysis of deformation mechanisms at high temperatures are shown.*

**Keywords:** temperature dependence of the modulus of elasticity, crystal lattice parameters.