

Температурна залежність границі плинності в термінах двох компонент поля зсувних напружень в площині ковзання в сплавi CrCoNiFeMn

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 температурну залежність границі плинності в багатокомпонентному сплавi CrCoNiFeMn з урахуванням коротко- і довгохвильової компонент поля зсувних напружень в площині ковзання. Короткохвильова компонента створює бар'єри, які дислокація може долати за допомогою термічної активації. Довгохвильова компонента створює додатковий опір руху дислокації, який може бути подоланий тільки атермічно шляхом прикладання додаткового механічного напруження. Таким чином температурна залежність границі плинності в багатокомпонентному сплавi може бути добре описана за низьких температур і в області високо-температурного "плато".

Ключові слова: температурна залежність, багатокомпонентний сплав, площина ковзання, дислокація.

Вступ

Багатокомпонентні сплави є перспективними матеріалами для застосування як за кімнатної температури, так і в діапазоні високих температур [1, 2]. Температурна залежність границі плинності цих матеріалів, що визначається твердорозчинним зміцненням, являє собою особливий інтерес з цієї точки зору. Розчинені атоми, які мають невідповідності атомних розмірів та модулів пружності відносно матриці-розчинника і розташовані навколо площини ковзання, створюють опір руху дислокації шляхом генерації поля зсувних напружень в цій площині. Це зсувне напруження в кожній точці площини ковзання являє собою нормально розподілену випадкову величину, оскільки воно є сумою багатьох випадкових внесків від різних розчинених атомів. Математичне очікування такої величини дорівнює нулю, тому що має виконуватися умова балансу сил. Розподіл таких напружень на площині являє собою чергування ділянок з напруженнями різних знаків.

Багато робіт було присвячено теоретичному опису твердорозчинного зміцнення і відповідному формуванню температурної залежності границі плинності [3—26]. У роботі [3] розглядається критичне напруження, необхідне для руху дислокації в полі стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, по суті границя плинності. Важливими є амплітуда зсувних напружень, середній лінійний розмір ділянки, де стохастичні напруження мають один знак, і довжина сегмента дислокації, на якій відбувається елементарний процес ковзання, тобто довжина середньої випуклості на лінії дислокації. У роботі [4] розглянута взаємодія дислокації, що рухається, з перешкодами в площині ковзання, які створені

розчиненими атомами, котрі знаходяться в безпосередній близькості від цієї площини. Обговорюється формування границі плинності в умовах, коли перешкоди мають скінченний діапазон взаємодії з дислокацією.

Нова теорія розрахунку границі плинності неупорядкованих твердих розчинів з довільною кількістю компонентів і довільним складом, що побудована на моделі Лабуша, запропонована в роботах [5—9]. Ця теорія використовує розраховані із перших принципів енергії взаємодії розчинених атомів з дислокацією як вхідні дані, з яких далі визначають границю плинності і активаційний об'єм як функції складу, температури та швидкості деформації. Моделювання руху дислокації в неупорядкованому твердому розчині з метою оцінки границі плинності було зроблено також в роботах [10, 11]. Різні аспекти термоактиваційного аналізу температурної залежності границі плинності в бінарних та полікомпонентних твердих розчинах, зокрема в високоентропійних сплавах, було розглянуто в роботах [12—15]. Одна з розглянутих проблем — це існування “плато” на температурній залежності критичного напруження зсуву за високих температур. Зокрема, для існування “плато” падіння модуля зсуву має компенсуватися збільшенням дисторсії кристалічних ґраток з підвищенням температури.

Деякі питання визначення дисторсії ґраток та границі плинності в багатокомпонентних сплавах були обговорені в роботах [16—18]. Моделювання руху дислокації методом дискретної дислокаційної динаміки і розрахунок поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання шляхом прямого сумування внесків від окремих розчинених атомів, які розташовані в вузлах кристалічних ґраток в об'ємі навколо цієї площини, розглядаються в роботах [19—22]. За такого підходу розподіл зсувних напружень в площині ковзання розділяється на дві компоненти — коротко- та довгохвильову. Короткохвильова компонента поля зсувних напружень створюється розчиненими атомами, що розташовані в безпосередній близькості від площини ковзання — в двох атомних площинах з кожного боку від площини ковзання, і характеризується більшим стандартним відхиленням та меншим середнім лінійним розміром ділянки, де стохастичні напруження мають один знак, відносно довгохвильової компоненти. Довгохвильова компонента поля зсувних напружень створюється розчиненими атомами, що розташовані, навпаки, далі від площини ковзання, і має менше стандартне відхилення та більший середній лінійний розмір ділянки, де стохастичні напруження мають один знак. Таким чином, актуальною є спроба визначення температурної залежності границі плинності багатокомпонентного сплаву на базі прямого розрахунку зсувних напружень в площині ковзання [20, 21], що створюються розчиненими атомами, і результатів моделювання руху дислокації методом дискретної дислокаційної динаміки [19, 22].

Мета даної роботи — за допомогою комп'ютерного моделювання вивчити формування температурної залежності границі плинності в багатокомпонентному сплаві CrCoNiFeMn з урахуванням коротко- та довгохвильової компонент поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання.

Алгоритм розрахунку

На базі концепції віртуальної матриці-розчинника (умовного матеріалу, який складається з “середніх” атомів [8]) границя плинності концентрованого твердого розчину в термінах нормальних напружень, за вирахуванням внеску зернограничного зміцнення, може бути виражена як [18]

$$\sigma_y = \bar{\sigma}^* + \bar{\sigma}_\mu + \Delta\sigma^* + \Delta\sigma_\mu, \quad (1)$$

де $\bar{\sigma}^*$ та $\bar{\sigma}_\mu$ — термічна і атермічна компоненти границі плинності віртуальної матриці-розчинника; $\Delta\sigma^*$ та $\Delta\sigma_\mu$ — термічна і атермічна компоненти твердорозчинного зміцнення. Оскільки віртуальна матриця-розчинник певним чином є ідеальним матеріалом, то в ній відсутні джерела далекодійних напружень і можна прийняти, що $\bar{\sigma}_\mu = 0$. Тоді (1) можна переписати в термінах зсувних напружень:

$$\tau_y = \tau_p + \tau^* + \tau_\mu, \quad (2)$$

де $\tau_y = \sigma_y / M$ — критичне напруження зсуву (границя плинності в термінах зсувних напружень); $\tau_p = \bar{\sigma}^* / M$ — напруження Пайерлса—Набарро (напруження тертя ґраток віртуальної матриці-розчинника, яке для матеріалу з ГЦК ґратками дорівнює зазвичай одиницям мегапаскалів); $\tau^* = \Delta\sigma^* / M$ — термічна компонента критичного напруження зсуву; $\tau_\mu = \Delta\sigma_\mu / M$ — атермічна компонента критичного напруження зсуву; M — фактор Тейлора ($M = 3,06$ для матеріалу з ГЦК ґратками).

В той же час в багатокомпонентному сплаві у вигляді концентрованого твердого розчину, якщо його розглядати без дії границь зерен, можна виділити три фактори, що впливають на рух дислокації: періодичний потенціал кристалічних ґраток, який відповідає за напруження Пайерлса—Набарро; коротко- та довгохвильова компоненти поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, які створюються розчиненими атомами. Потенціал ґраток створює періодичний розподіл напружень в напрямку руху дислокації, який призводить до певного опору цьому руху. Амплітуда такого розподілу для матеріалу з ГЦК ґратками достатньо мала, а відстань в напрямку руху дислокації, на якій ці напруження врівноважуються, приблизно дорівнює модулю вектора Бюргерса b . Короткохвильова компонента поля зсувних напружень в площині ковзання, як нормально розподілена випадкова величина, має математичне очікування, яке дорівнює нулю, і стандартне відхилення $s_1(\Delta z)$, що залежить від довжини пробного відрізка дислокації Δz , який використаний для розрахунку розподілу напружень. Середній лінійний розмір ділянки, де стохастичні напруження мають один знак, для цієї компоненти буде w_1 , а довжина кореляції, розмір ділянки, де напруження врівноважують самі себе, $2w_1$ [21]. Довгохвильова компонента має також

нульове математичне очікування і стандартне відхилення $s_2(\Delta z)$ з довжиною кореляції $2w_2$. Параметр Δz можна оцінити з умови забезпечення довжини кореляції довгохвильової компоненти поля зсувних напружень вздовж лінії дислокації, за якої Δz не може бути меншим за w_2 . Тому в розрахунках можна прийняти $\Delta z = 2w_2$ [22].

Кожен з описаних факторів може створювати силові бар'єри для руху дислокації. Ширина цих бар'єрів буде співвимірною з вектором Бюргера для періодичного потенціалу ґраток і з w_1 та w_2 для коротко- та довгохвильової компонент поля зсувних напружень відповідно. Тобто самий вузький силовий бар'єр може бути від періодичного потенціалу ґраток, а самий широкий — від довгохвильової компоненти поля зсувних напружень. Напруження від періодичного потенціалу ґраток врівноважуються на відстані меншій, ніж середній лінійний розмір ділянки, де стохастичні напруження мають один знак, для короткохвильової компоненти. Напруження короткохвильової компоненти, в свою чергу, врівноважуються на відстані меншій, ніж середній лінійний розмір ділянки, де довгохвильова компонента має один знак. Такий висновок можна зробити з результатів розрахунків w_1 та w_2 для деяких сплавів [21]. Висота цих силових бар'єрів буде в іншому співвідношенні. Самим високим буде силовий бар'єр від короткохвильової компоненти, в той час як бар'єри від двох інших факторів будуть суттєво нижчі. Таким чином, бар'єри від короткохвильової компоненти будуть домінувати. Подолання такого бар'єра дислокацією за допомогою зовнішнього прикладеного напруження і термічної активації буде критичною подією для початку її руху. Напруження, яке необхідне для подолання бар'єра від короткохвильової компоненти, буде визначати доданок τ^* в (2). Бар'єри від періодичного потенціалу ґраток, які значно нижчі в порівнянні з бар'єрами від короткохвильової компоненти, будуть пригнічуватись останніми, оскільки обидва види бар'єрів накладені один на одного. Тому бар'єри від періодичного потенціалу ґраток можуть бути враховані простим додаванням постійного напруження τ_p до того напруження, яке необхідне для подолання бар'єра від короткохвильової компоненти. Бар'єр від довгохвильової компоненти суттєво ширше в просторовому вимірі, ніжче в силовому вимірі і вище в енергетичному сенсі, ніж бар'єр від короткохвильової компоненти. Тому такий бар'єр, до того ж ще й накладений на бар'єри від короткохвильової компоненти, може бути подоланий лише атермічним шляхом, без термічної активації. Як і у випадку з бар'єрами від періодичного потенціалу ґраток, бар'єри від довгохвильової компоненти можуть бути враховані додаванням постійного напруження, що потрібне для їх атермічного подолання, до напруження для подолання бар'єрів від короткохвильової компоненти. Напруження, яке необхідне для подолання бар'єра від довгохвильової компоненти, буде визначати доданок τ_μ в (2).

Дислокація в полі стохастичних зсувних напружень під дією зовнішнього навантаження не буде рухатися як єдине ціле. Швидше вона буде просуватися поетапно на окремих ділянках скінченної довжини

шляхом утворення відповідних випуклостей. Можна ввести поняття довжини середньої випуклості чи критичного сегмента дислокації [22], яка для короткохвильової компоненти поля зсувних напружень буде

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

де β — коефіцієнт, який залежить від конкретної форми випуклості (для синусоїдальної форми, яка підтверджується моделюванням, що проведене в роботі [22], $\beta = 2\pi \approx 6,28$); Γ — лінійний натяг лінії дислокації ($\Gamma = \alpha G b^2$, де α — коефіцієнт, менший за $1/2$; G — модуль зсуву). Критичне зовнішнє напруження, необхідне для початку руху дислокації в такому полі стохастичних напружень без термічної активації, буде дорівнювати напруженню, що діє усереднено з боку поля на критичний сегмент дислокації довжиною L_1 [3, 11]:

$$\tau_{y1} = s_1 (2w_2) \sqrt{\frac{w_2}{w_1}} \sqrt{\frac{2w_1}{L_1}} = G \left(\frac{2}{\alpha \beta} \frac{w_1}{b} \right)^{1/3} \left(\frac{s_1 (2w_2) \sqrt{w_2 / w_1}}{G} \right)^{4/3}. \quad (4)$$

Для того щоб провести термоактиваційний аналіз руху дислокації через бар'єр, розглянемо прийнятну синусоїдальну залежність напруження, яке діє на критичний сегмент в площині ковзання, від усередненого просування цього сегмента x [25]

$$\tau_1(x) = \tau_{y1} \sin\left(\frac{\pi x}{2\tilde{x}}\right), \quad (5)$$

де $\tilde{x} = 4w_1/3$ — усереднене просування критичного сегмента, за якого досягається максимальне напруження τ_{y1} . Ця залежність схематично показана на рис. 1. Критичний сегмент може пересуватися тільки, коли випуклість, що існує на ньому, спочатку випрямляється під дією зовнішнього напруження, а далі утворюється нова випуклість і процес повторюється. Схематично цей процес в ідеалізованій формі показано на рис. 2. Спочатку існує випуклість 1 з довжиною L_1 і висотою $2w_1$ при нульовому зовнішньому напруженні і їй можна приписати усереднену координату $x = 0$. Далі при зовнішньому напруженні, що дорівнює τ_{y1} , випуклість 1 випрямляється до стану 2 і їй можна приписати усереднену координату $x = 4w_1/3$. На наступному кроці випуклість приймає форму 3 і їй можна приписати усереднену координату $x = 8w_1/3$. Далі випуклість послідовно переходить в форму 4 і форму 5 і процес повторюється.

Залежність (5) можна розглянути в термінах сили F , що діє на критичний сегмент (рис. 3). Тоді площа під кривою буде мати енергетичний вимір. Точка 1 при нульовому зовнішньому напруженні на рис. 3 відповідає стану 1 на рис. 2, точка 2 — стану 2 і так далі відповідно. За умови прикладання зовнішнього напруження τ критичний сегмент

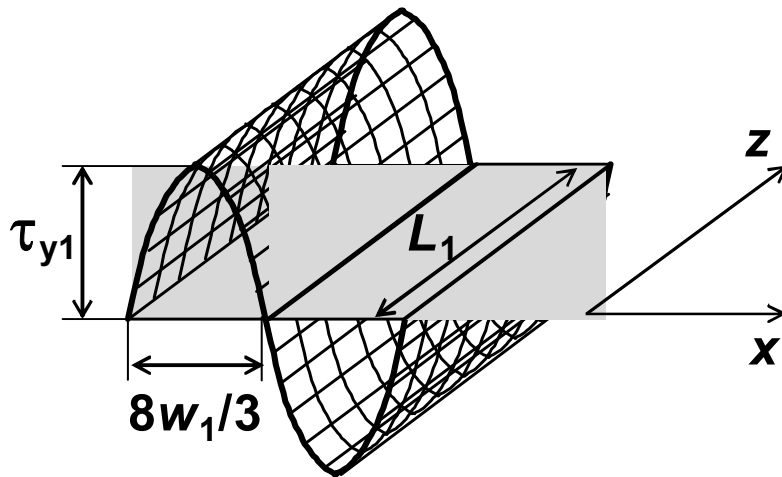


Рис. 1. Схема, що показує залежність напруження, яке діє на критичний сегмент, від усередненого просування цього сегмента x .

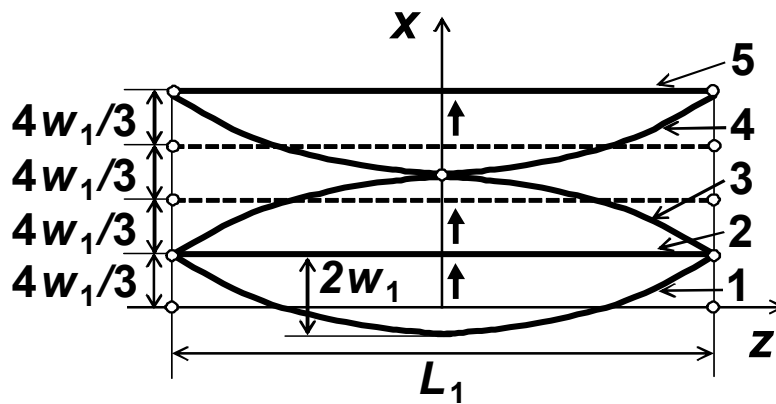


Рис. 2. Ідеалізований процес пересування критичного сегмента.

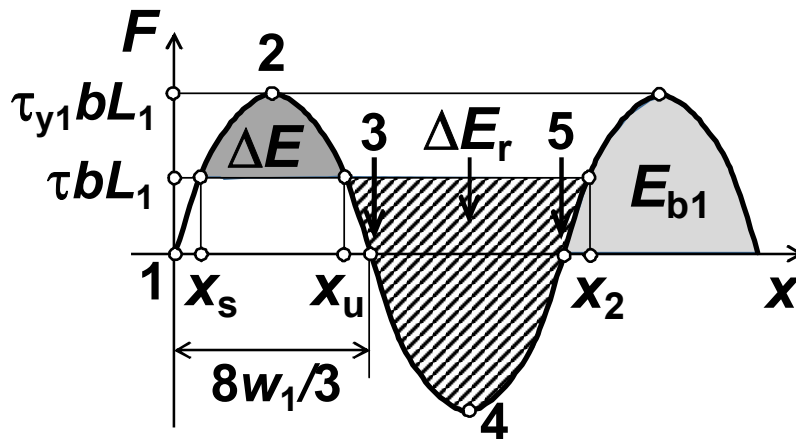


Рис. 3. Залежність сили, яка діє на критичний сегмент з боку поля стохастичних зсувних напружень, від усередненого просування цього сегмента x .

переходить до стану з $x = x_s$. Для того щоб перейти через максимум силового бар'єру (точку 2), необхідно витратити енергію ΔE , яка є функцією τ . Ця енергія може бути отримана за допомогою термічної активації за рахунок теплових флуктуацій. Ймовірність цієї події — прямого стрибка — буде залежати від енергії ΔE та температури T . У цьому випадку критичний сегмент перейде до стану з $x = x_u$. Це стан нестійкої рівноваги і сегмент швидко просунеться далі та опиниться в стані з $x = x_2$. Можливий також зворотній стрибок з точки з $x = x_2$ в точку з $x = x_u$ і далі в точку з $x = x_s$. Для зворотнього стрибка необхідно отримати за допомогою термічної активації енергію ΔE_r , і його ймовірність буде визначатися цією енергією та температурою T . Взагалі для швидкості деформації можна написати рівняння з урахуванням ймовірностей прямих та зворотніх стрибків [25]

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \left\{ \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta E_r}{k_B T}\right) \right\}, \quad (6)$$

де $\dot{\epsilon}_0$ — передекспоненційний фактор; k_B — стала Больцмана. Слід зазначити, що для синусоїдальної залежності, як на рис. 3, було отримано [25]

$$\Delta E = E_{b1} \left(1 - \frac{\tau}{\tau_{y1}}\right)^{3/2}, \quad (7)$$

де висота бар'єра в енергетичному вимірі

$$E_{b1} = \frac{16}{3\pi} b w_1 L_1 \tau_{y1} = \frac{25.398}{3\pi} (\beta \Gamma)^{1/3} b^{2/3} w_1^{4/3} w_2^{1/3} [s_1 (2w_2)]^{2/3}. \quad (8)$$

Детальний аналіз співвідношення площ на рис. 3 показав, що

$$\Delta E_r = \Delta E + \pi E_{b1} \frac{\tau}{\tau_{y1}}. \quad (9)$$

Тоді з (6), (7) і (9) можна отримати рівняння

$$\theta = (1 - \gamma)^{3/2} - \frac{\theta}{\lambda} \ln \left(1 - \exp\left(-\pi \lambda \frac{\gamma}{\theta}\right) \right), \quad (10)$$

де $\theta = T/T_0$; $\gamma = \tau/\tau_{y1}$; $\lambda = \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon})$ і

$$T_0 = \frac{E_{b1}}{k_B \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon})}. \quad (11)$$

Рівняння (10) вирішується чисельно, щоб отримати залежність $\gamma(\theta)$. Якщо взяти прийнятні значення $\dot{\epsilon}_0 \approx 10^4 \text{ c}^{-1}$ та $\dot{\epsilon} \approx 10^{-3} \text{ c}^{-1}$ [8], то $\lambda = \ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon}) \approx 16$ і рівняння (10) дає

$$\begin{aligned} \gamma &= 1 - \theta^{2/3}, \quad 0 \leq \theta \leq 0,9, \\ \gamma &= 4630 \exp(-12,35\theta), \quad 0,9 < \theta. \end{aligned} \quad (12)$$

Цей результат несуттєво залежить від значень $\dot{\epsilon}_0$ та $\dot{\epsilon}$, якщо відношення $\dot{\epsilon}_0 / \dot{\epsilon}$ змінюється на порядок в той чи інший бік, оскільки воно стоїть під логарифмом. Значення γ при $\theta > 0,9$ швидко прямують до нуля і при $\theta = 1,25$ практично $\gamma = 0$. Нагадаємо, що у цьому аналізі τ — це прикладене зовнішнє напруження, за якого термічна активація може забезпечити подолання бар'єрів від короткохвильової компоненти поля зсувних напружень з заданою швидкістю за заданої температури, по суті $\tau^* = \tau$.

Існування довгохвильової компоненти поля зсувних напружень, розрахунок якої показано в роботі [21], доведено моделюванням руху дислокації в роботі [22]. Довжина критичного сегмента дислокації для довгохвильової компоненти поля зсувних напружень може бути визначена аналогічно, як для короткохвильової компоненти [22]:

$$L_2 = \left(\frac{\beta\Gamma}{s_2(2w_2)b} \right)^{2/3} (2w_2)^{1/3}. \quad (13)$$

Напруження, яке необхідне для атермічного подолання бар'єра від довгохвильової компоненти поля напружень, усереднене по L_2 , буде

$$\tau_{y2} = s_2(2w_2) \sqrt{\frac{2w_2}{L_2}} = G \left(\frac{2}{\alpha\beta} \frac{w_2}{b} \right)^{1/3} \left(\frac{s_2(2w_2)}{G} \right)^{4/3}. \quad (14)$$

Тепер можна прийняти $\tau_\mu = \tau_{y2}$. Висоту бар'єра від довгохвильової компоненти в енергетичному вимірі можна визначити аналогічно, як для короткохвильової компоненти за формулою (8), якщо зробити необхідні заміни:

$$E_{b2} = \frac{16}{3\pi} b w_2 L_2 \tau_{y2} = \frac{25.398}{3\pi} (\beta\Gamma)^{1/3} b^{2/3} w_2^{5/3} [s_2(2w_2)]^{2/3}. \quad (15)$$

Тепер маємо можливість визначити температурну залежність границі плинності багатокомпонентного сплаву з урахуванням двох компонент поля зсувних напружень в площині ковзання, які можуть бути розраховані прямим сумуванням внесків від окремих розчинених атомів. Але нам слід зробити ще додаткове припущення, що τ_{y1} та τ_{y2} не залежать від температури внаслідок температурної залежності модуля зсуву G . Насправді таке припущення може бути зроблено завдяки існуванню “плато” на температурній залежності критичного напруження зсуву за високих температур. Для існування “плато” падіння модуля зсуву має компенсуватися збільшенням дисторсії кристалічних ґраток з підвищенням температури [12]. Тобто падіння модуля зсуву фактично повинно компенсуватися зростанням $s_1(2w_2)$ та $s_2(2w_2)$, які залежать від

дисторсії ґраток. Існування “плато” і, відповідно, такої компенсації дозволяє припустити, що добутки модуля зсуву і множників, які пов’язані з $s_1(2w_2)$ та $s_2(2w_2)$ в (4) і (14), не залежать від температури і достатньо розрахувати їх при якійсь одній температурі. Таким чином, за допомогою (12) можна визначити температурну залежність границі плинності багатоконцентного сплаву в термінах нормальних напружень без урахування зернограничного зміцнення:

$$\sigma_y = M \left\{ \tau_p + \tau_{y1} \left[1 - \left(\frac{T}{T_0} \right)^{2/3} \right] + \tau_{y2} \right\}, \quad 0 \leq T \leq 0,9T_0, \quad (16)$$

$$\sigma_y = M \left\{ \tau_p + 463\alpha_{y1} \exp\left(-12,35 \frac{T}{T_0}\right) + \tau_{y2} \right\}, \quad T > 0,9T_0.$$

Результати обчислювального експерименту

Для моделювання температурної залежності границі плинності з урахуванням коротко- та довгохвильової компонент поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання було обрано багатоконцентний сплав CrCoNiFeMn з ГЦК ґратками. Для проведення розрахунків необхідно задати модуль зсуву $G = 81$ ГПа та вектор Бюргерса $b = 0,25$ нм сплаву [21, 22]. Також важливим параметром є коефіцієнт $\alpha = 0,123$, який визначає лінійний натяг лінії дислокації в сплаві CrCoNiFeMn [8]. Напруження Пайерлса—Набарро, тобто напруження тертя ґраток віртуальної матриці-розчинника, можна оцінити як для металів з ГЦК ґратками і прийняти наближено $\tau_p = 3$ МПа [25]. Дві компоненти поля зсувних напружень в площині ковзання для сплаву CrCoNiFeMn були розраховані прямим сумуванням внесків від окремих розчинених атомів [21]. Визначено, що зсувні напруження, як випадкові величини, мають математичне очікування, яке дорівнює нулю, а стандартні відхилення і середні лінійні розміри ділянок, де стохастичні напруження мають один знак, дорівнюють $s_1(2w_2) = 191$ МПа та $w_1 = 0,38$ нм для короткохвильової компоненти і $s_2(2w_2) = 72$ МПа та $w_2 = 0,97$ нм — для довгохвильової. Вихідні параметри для моделювання температурної залежності границі плинності в сплаві CrCoNiFeMn наведено також в таблиці. Температурну залежність границі плинності в цьому матеріалі без урахування зернограничного зміцнення показано на рис. 4. Експериментальні значення з різних джерел непогано корелюють між собою і з змодельованою залежністю. При температурах приблизно вище 650 К чітко фіксується “плато”. Теоретична залежність плавно переходить на це “плато”. В області дуже низьких температур спостерігається відхилення розрахованої залежності від експериментальних значень.

Вихідні і розраховані параметри моделювання температурної залежності границі плинності в сплавi CrCoNiFeMn

G , ГПа	81	$s_1(2w_2)$, МПа	191	$s_2(2w_2)$, МПа	72
α	0,123	w_1 , нм	0,38	w_2 , нм	0,97
τ_p , МПа	3	L_1 , нм	12,59	L_2 , нм	45,07
b , нм	0,25	τ_{y1} , МПа	74,97	τ_{y2} , МПа	14,94
T_0 , К	684	E_{b1} , еВ	0,95	E_{b2} , еВ	1,73

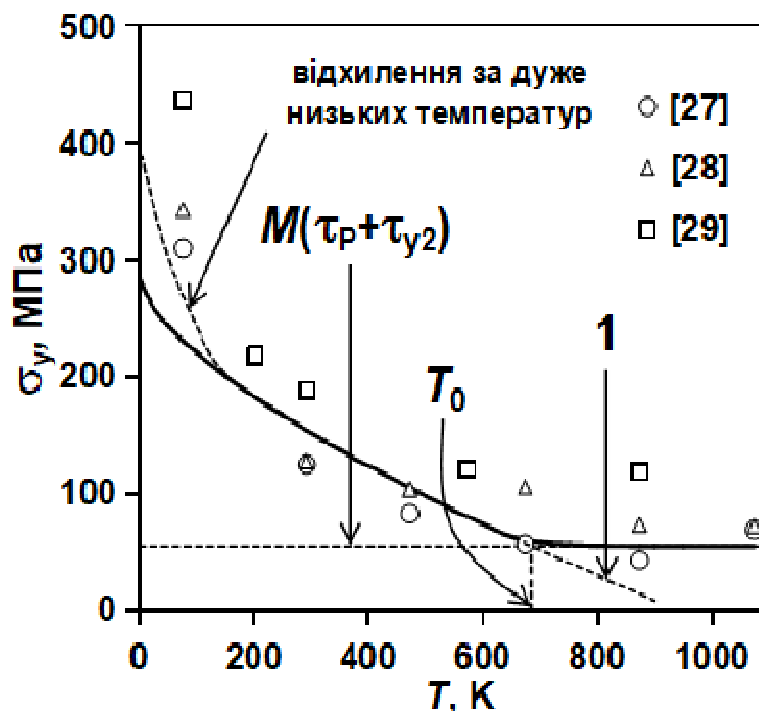


Рис. 4. Температурна залежність границі плинності в сплавi CrCoNiFeMn без урахування зернограничного зміцнення. Суцільна лінія — розрахунок по формулах (16). Кола, трикутники та квадрати — експериментальні значення, які взяті з літератури [27—29]; 1 — продовження залежності для $T < 0,9T_0$ на більш високі температури.

Обговорення результатів розрахунків

У роботі [8] подібно до нашої розглядався силовий бар'єр синусоїдального профілю, як запропоновано в роботі [25], який перешкоджає руху дислокацій. На основі розрахованих із перших принципів енергій взаємодії розчинених атомів з дислокацією в цій роботі визначалася висота цього бар'єра і, відповідно, температурна залежність границі плинності сплаву CrCoNiFeMn. Поле стохастичних зсувних

напружень в площині ковзання у цьому випадку не розраховувалось і, відповідно, не визначалися його коротко- та довгохвильова компоненти. Тому атермічна складова границі плинності, що пов'язана з твердорозчинним зміцненням і асоційована в нашій роботі з довгохвильовою компонентою, взагалі не розглядалася в роботі [8]. Тобто температурна залежність з роботи [8] не має “плато”, а плавно прямує до нуля. Можливо саме тому теоретична температурна залежність і експериментальні дані з [27] порівнюються в [8] тільки до температури 673 К, а це тільки самий початок “плато” для сплаву CrCoNiFeMn. Існування же “плато” добре підтверджується експериментальними даними з [27—29] принаймні до 1073 К. Крім того, теоретична температурна залежність з [8] при 673 К лежить трохи нижче експериментального значення і очевидно за більш високих температур, коли експериментальні дані демонструють “плато”, проходить ще нижче. Проте ця залежність практично збігається з експериментальним значенням з роботи [27] при 293 К, але лежить нижче значення з [29] за цієї температури. Натомість теоретична температурна залежність границі плинності сплаву CrCoNiFeMn, яка розрахована в цій роботі, лежить вище аналогічної залежності з роботи [8], що краще корелює зі всією сукупністю експериментальних даних з робіт [27—29], окрім області дуже низьких температур. У роботі [8] це пояснюється можливою зміною лінійного натягу лінії дислокації за таких температур, але це припущення потребує подальших досліджень. Головна перевага нашого підходу полягає в тому, що нами враховується атермічна складова границі плинності, що пов'язана з твердорозчинним зміцненням. Якщо пов'язати цю складову з довгохвильовою компонентою поля стохастичних напружень, то можна практично точно передбачити напруження “плато”. В той же час силовий бар'єр для руху дислокацій, який пов'язаний з короткохвильовою компонентою, дозволяє досить точно спрогнозувати температуру початку “плато” T_0 . Це неможливо зробити в рамках моделі з роботи [8]. Активаційний об'єм при 293 К, що розрахований з нашої температурної залежності за методикою з [9], дорівнює $V = 147b^3$. Це добре корелює з величиною $2w_1L_1b \approx 153b^3$, яка отримана з геометричних параметрів середньої випуклості на дислокації, і має один порядок величини зі значенням $\sim 350b^3$ для сплаву CrCoNiFeMn, що визначено експериментальним методом в роботі [30].

Висновки

Границю плинності багатокomпонентного сплаву CrCoNiFeMn без урахування зернограничного зміцнення визначають три фактори: періодичний потенціал ґраток, коротко- та довгохвильова компоненти поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, які створюються розчиненими атомами. Силкові бар'єри від короткохвильової компоненти будуть домінувати. Подолання їх дислокацією за допомогою зовнішнього прикладеного напруження і термічної активації буде критичною подією для початку її руху. Бар'єри від періодичного потенціалу ґраток і довгохвильової компоненти будуть маловиразними на фоні короткохвильової компоненти і їх вплив на границю плинності може

бути врахований доданками, які не залежать від температури. Термоактиваційний аналіз подолання бар'єрів від короткохвильової компоненти з урахуванням ймовірності прямих та зворотніх стрибків через бар'єр дає нам можливість описати температурну залежність границі плинності багатокomпонентного сплаву в широкому діапазоні температур, в тому числі і в області високотемпературного "плато". Розрахована таким чином для сплаву CrCoNiFeMn залежність границі плинності добре корелює з відповідними експериментальними даними.

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. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
2. George E.P., Curtin W.A., Tazan C.C. High entropy alloys: A focused review of mechanical properties and deformation mechanisms. *Acta Mater.* 2020. Vol. 188. P. 435—474. <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. <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. <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. <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. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.03.037>
7. Leyson G.P.M., Curtin W.A. Solute strengthening at high temperatures. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2016. Vol. 24. P. 065005. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/6/065005>
8. Varvenne C., Luque A., Curtin W.A. Theory of strengthening in fcc high entropy alloys. *Acta Mater.* 2016. Vol. 118. P. 164—176. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.07.040>
9. Varvenne C., Leyson G.P.M., Ghazisaeidi M., Curtin W.A. Solute strengthening in random alloys. *Acta Mater.* 2017. Vol. 124. P. 660—683. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.046>
10. Zaiser M. Dislocation motion in a random solid solution. *Philos. Mag. A.* 2002. Vol. 82, No. 15. P. 2869—2883. <https://doi.org/10.1080/01418610208240071>
11. 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. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010>
12. 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. <https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127>

13. 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. Engineering: A*. 2018. Vol. 710. P. 136—141. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.10.073>
14. Фирстов С.А., Рогуль Т.Г., Крапивка Н.А., Чугунова С.И. Термоактивационный анализ температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ОЦК решеткой. *Металлофіз. новітні технології*. 2018. Т. 40. С. 219—234. <https://doi.org/10.15407/mfint.40.02.0219>
15. Фирстов С.А., Рогуль Т.Г. Термоактивационный анализ температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ГЦК решеткой. *Металлофіз. новітні технології*. 2017. Т. 39. С. 33—48. <https://doi.org/10.15407/mfint.39.01.0033>
16. Lugovy M., Slyunyaev V., Brodnikovskyy M. Solid solution strengthening in multicomponent fcc and bcc alloys: Analytical approach. *Progress in Natural Sci: Mater. Int.* 2021. Vol. 31. P. 95—104. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.11.006>
17. Луговой М.І., Слюняев В.М., Бродніковський 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.
18. Луговой Н.И., Слюняев В.Н., Бродниковский 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.
19. Луговой М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Форма лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ИПМ НАН України. 2021. Вып. 2. С. 19—34. <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
20. Луговой М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Моделювання поля зсувних напружень в площині ковзання в твердому розчині заміщення. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ИПМ НАН України. 2021. Вып. 3. С. 24—37. <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.024>
21. Луговой М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Дві компоненти поля зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентних сплавах. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ИПМ НАН України. 2022. Вып. 4/5. С. 12—24. <https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.012>
22. Луговой М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Еволюція форми лінії дислокації в багатокомпонентному сплаві під навантаженням. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ИПМ НАН України. 2022. Вып. 4/5. С. 36—50. <https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.036>
23. Gypen L.A., Deruyttere A. Multi-component solid solution hardening. Part 1. Proposed model. *J. Mater. Sci.* 1977. Vol. 12 (5). P. 1028—1033. <https://doi.org/10.1007/BF00540987>

24. Toda-Caraballo I. A general formulation for solid solution hardening effect in multicomponent alloys. *Acta Mater.* 2017. Vol. 127. P. 113—117. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.09.009>
25. Argon A.S. *Strengthening mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Oxford University Press., 2008. 404 p. doi: 10.1093/acprof:oso/9780198516002.001.0001
26. Kocks U.F., Argon A.S., Ashby M.F. Thermal activation. *Prog. Mater. Sci.* 1975. Vol. 19. P. 110—170. [https://doi.org/10.1016/0079-6425\(75\)90008-0](https://doi.org/10.1016/0079-6425(75)90008-0)
27. Otto F., Dlouhy A., Somsen C., Bei H., Eggeler G., George E.P. The influences of temperature and microstructure on the tensile properties of a CoCrFeMnNi high-entropy alloy. *Acta Mater.* 2013. Vol. 61 (15). P. 5743—5755. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.06.018>
28. Gali A., George E.P. Tensile properties of high- and medium-entropy alloys. *Intermetallics.* 2013. Vol. 39. P. 74—78. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2013.03.018>
29. Sun S.J., Tian Y.Z., Lin H.R., Dong X.G., Wang Y.H., Wang Z.J., Zhang Z.F. Temperature dependence of the Hall–Petch relationship in CoCrFeMnNi high-entropy alloy. *J. Alloys Comp.* 2019. Vol. 806. P. 992—998. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.07.357>
30. Laplanche G., Bonneville J., Varvenne C., Curtin W.A., George E.P. Thermal activation parameters of plastic flow reveal deformation mechanisms in the CrMnFeCoNi high-entropy alloy. *Acta Mater.* 2018. Vol. 143. P. 257—264. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.10.014>

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. <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. <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. <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. <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. <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. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.03.037>

7. Leyson, G. P. M. & Curtin, W. A. (2016). Solute strengthening at high temperatures, *Modelling simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 24, pp. 065005. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/6/065005>
8. Varvenne, C., Luque, A. & Curtin, W. A. (2016). Theory of strengthening in fcc high entropy alloys. *Acta Mater.*, Vol. 118, pp. 164—176. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.07.040>
9. Varvenne, C., Leyson, G. P. M., Ghazisaeidi, M. & Curtin, W. A. (2017). Solute strengthening in random alloys. *Acta Mater.*, Vol. 124, pp. 660—683. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.046>
10. Zaiser, M. (2002). Dislocation motion in a random solid solution. *Philos. Mag. A*, Vol. 82, No. 15, pp. 2869—2883. <https://doi.org/10.1080/01418610208240071>
11. 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. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010>
12. 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 Tekhnologii*, Vol. 44, pp. 127—140 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127>
13. Podolskiy, A. V., Tabachnikova, E. D., Voloschuk, V. V., Gorban, V. F., Krapivka, M. 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. Engineering: A*, Vol. 710, pp. 136—141. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.10.073>
14. Firstov, S. O., Rogul, T. G., Krapivka, M. 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]. <https://doi.org/10.15407/mfint.40.02.0219>
15. 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]. <https://doi.org/10.15407/mfint.39.01.0033>
16. 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. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.11.006>
17. 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].
18. 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].
19. Lugovy, M., Verbylo, D. & Brodnikovskyy, M. (2021). Shape of dislocation line in stochastic shear stress field. *Uspihy materialoznavstva*,

- Kyiv: IIM NAN Ukrainy, Vyp. 2, pp. 19—34 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
20. Lugovy, M., Verbylo, D. & Brodnikovskyy, M. (2021). Modelling of shear stress field in glide plane in substitutional solid solutions. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IIM NAN Ukrainy, Vyp. 3, pp. 24—37 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.024>
 21. Lugovy, M., Verbylo, D. & Brodnikovskyy, M. (2022). Two components of shear stress field in glide plane in multicomponent alloys. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IIM NAN Ukrainy, Vyp. 4/5, pp. 12—24 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.012>
 22. Lugovy, M., Verbylo, D. & Brodnikovskyy, M. (2022). Evolution of dislocation line shape in multicomponent alloys under loading. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IIM NAN Ukrainy, Vyp. 4/5, pp. 36—50 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.036>
 23. Gypen, L. A. & Deruyttere, A. (1977). Multi-component solid solution hardening. Part 1. Proposed model. *J. Mater. Sci.*, Vol. 12 (5), pp. 1028—1033. <https://doi.org/10.1007/BF00540987>
 24. Toda-Caraballo, I. (2017). A general formulation for solid solution hardening effect in multicomponent alloys. *Scripta Mater.*, Vol. 127, pp. 113—117. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2016.09.009>
 25. Argon, A. S. (2008). *Strengthening mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Oxford University Press. doi: 10.1093/acprof:oso/9780198516002.001.0001
 26. Kocks, U. F., Argon, A. S., & Ashby, M. F. (1975). Thermal activation. *Prog. Mater. Sci.*, Vol. 19, pp. 110—170. [https://doi.org/10.1016/0079-6425\(75\)90008-0](https://doi.org/10.1016/0079-6425(75)90008-0)
 27. Otto, F., Dlouhy, A., Somsen, C., Bei, H., Eggeler, G., & George, E. P. (2013). The influences of temperature and microstructure on the tensile properties of a CoCrFeMnNi high-entropy alloy. *Acta Mater.*, Vol. 61 (15), pp. 5743—5755. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.06.018>
 28. Gali, A. & George, E. P. (2013). Tensile properties of high- and medium-entropy alloys. *Intermetallics*, Vol. 39, pp. 74—78. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2013.03.018>
 29. Sun, S. J., Tian, Y. Z., Lin, H. R., Dong, X. G., Wang, Y. H., Wang, Z. J., & Zhang, Z. F. (2019). Temperature dependence of the Hall–Petch relationship in CoCrFeMnNi high-entropy alloy. *J. Alloys Comp.*, Vol. 806, pp. 992—998. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.07.357>
 30. Laplanche, G., Bonneville, J., Varvenne, C., Curtin, W. A., George, E. P. (2018). Thermal activation parameters of plastic flow reveal deformation mechanisms in the CrMnFeCoNi high-entropy alloy. *Acta Mater.*, Vol. 143, pp. 257—264. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.10.014>

Temperature dependence of yield strength in terms of two components of stochastic shear stress field in glide plane in CrCoNiFeMn alloy

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 temperature dependence of the yield strength in the multicomponent CrCoNiFeMn alloy was investigated, using computer modelling and taking into account the short-wave and long-wave components of the shear stress field in the glide plane. The yield strength of a multicomponent alloy in the form of a concentrated solid solution without taking into account grain boundary strengthening is determined by three factors: the periodic lattice potential, the short-wave and long-wave components of the field of stochastic shear stresses in the glide plane, which are created by dissolved atoms. The force barriers resulting from the short-wave component will dominate. Overcoming them by dislocation with the assistance of applied stress and thermal activation will be a critical event to start dislocation movement. Barriers resulting from the periodic lattice potential and the long-wave component will be insignificant against the background of the short-wave component. Their effect on the yield strength can be taken into account by terms that do not depend on temperature. Thermal activation analysis of overcoming barriers resulting from a short-wave component, taking into account the probability of direct and reverse jumps through the barrier, gives the opportunity to describe the temperature dependence of the yield strength of a multicomponent alloy in a wide range of temperatures, including in the region of the high-temperature “plateau”. The dependence of the yield strength calculated in this way for the CrCoNiFeMn alloy correlates well with the corresponding experimental data.

Keywords: *temperature dependence, multicomponent alloy, glide plane, dislocation.*