

Моделювання поля зсувних напружень в площині ковзання в твердих розчинах заміщення

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

Інститут проблем матеріалознавства імені І. М. Францевича НАН України
Україна, 03142, Київ, вул. Кржижановського, 3
*E-mail: nil2903@gmail.com

За допомогою комп'ютерного моделювання досліджено формування поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, що діють на дислокацію з боку розчинених атомів у твердому розчині заміщення. Виявлено зв'язок між дисторсіями, що створюються окремими розчиненими атомами, і статистичним розподілом таких зсувних напружень. Встановлено особливості поля зсувних напружень в сплавах з ГЦК та ОЦК кристалічними ґратками. Розподіл стохастичних зсувних напружень в площині ковзання впливає на границю плинності матеріалу.

Ключові слова: дислокація, дисторсія, зсувні напруження.

Вступ

Багатокомпонентні сплави — це перспективні матеріали, що демонструють багато унікальних властивостей, зокрема дуже високі границі плинності [1, 2]. Границя плинності таких сплавів, які в більшості своїй являють собою тверді розчини заміщення, залежить від розподілу внутрішніх напружень в матеріалі. Невідповідність розмірів та модулів пружності розчинених атомів та матриці-розчинника призводить до дисторсії кристалічних ґраток, що змінюється випадковим чином в просторі. Дисторсія кристалічних ґраток, що створена присутністю розчинених атомів, призводить до виникнення стохастичних зсувних напружень в площині ковзання дислокації. Ці напруження в певній точці площини ковзання є випадковою величиною, котра зазвичай підкоряється нормальному розподілу ймовірностей для концентрованих сплавів, в яких немає одного домінуючого компонента, бо ці напруження є сумою внесків від багатьох розчинених атомів, що розташовані навколо площини ковзання. Розподіл таких напружень повинен підкорятися правилу нульового балансу, тобто сума напружень в площині ковзання має дорівнювати нулю. Ці напруження призводять до виникнення сил, що діють на дислокацію, впливають на її форму, а також створюють опір її руху.

Для розробки нових багатокомпонентних сплавів є важливим моделювання їх твердорозчинного зміцнення [3—21]. Форма лінії дислокації в полі зсувних напружень в площині ковзання впливає на границю плинності матеріалу [3—17]. В роботах [5—13] розподіл зсувних напружень та форма лінії дислокації моделювалися в спрощеному вигляді. Зокрема, розглядалась тільки одновимірна синусоїдальна залежність напружень від координати вздовж напрямку руху дислокації. Нехтування реальним двовимірним стохастичним розподілом зсувних напружень в площині ковзання може призвести до суттєвих помилок в визначенні форми лінії дислокації і границі плинності матеріалу.

Розподіл зсувних напружень в площині ковзання моделювався спеціальним методом в роботі [15]. За цим методом, сила, що діє з боку поля зсувних напружень на певний сегмент дислокації, визначалась як суперпозиція сил від випадково розташованих в площині ковзання точок закріплення, кожна з яких створювала однаковий гауссовий потенціал для закріплення навколо себе. Недоліками такого способу є те, що в цьому випадку погано задається дисперсія нормального розподілу, оскільки вона залежить від числа точок закріплення, які попадають в зону впливу навколо певної точки на лінії дислокації. Крім того, точки закріплення, які дають свій внесок в силу, що діє на певну точку на лінії дислокації, розташовуються тільки в площині ковзання. Але центри дисторсії в реальному сплаві, які будуть давати внесок в поле стохастичних зсувних напружень, розташовані в об'ємі над і під площиною ковзання. В роботі [15] також не розглядається зв'язок між величиною дисторсії кристалічних ґраток та параметрами статистичного розподілу зсувних напружень.

Мета даної роботи — за допомогою комп'ютерного моделювання дослідити формування поля стохастичних зсувних напружень, що діють на дислокацію в площині ковзання з боку розчинених атомів у твердому розчині заміщення з ГЦК та ОЦК кристалічними ґратками, та виявити зв'язок між дисторсіями, які створюються окремими розчиненими атомами, і статистичним розподілом зсувних напружень.

Алгоритм розрахунку

Зсувне напруження τ_s , що діє на крайову дислокацію в площині ковзання в напрямку її руху з боку окремого точкового дефекту (наприклад, розчиненого атома в твердому розчині заміщення), може бути розраховано за допомогою енергії взаємодії W_i такого дефекту і прямолінійного відрізка дислокації:

$$\tau_s = -\frac{1}{b\Delta z} \frac{\partial W_i}{\partial x}, \quad (1)$$

де b — вектор Бюргерса; x — координата в напрямку руху дислокації; z — координата в напрямку лінії дислокації; xOz — площина ковзання дислокації; Δz — довжина прямолінійного відрізка дислокації. Слід зазначити, що кожний атом у твердому розчині заміщення можна розглядати як точковий дефект в середовищі віртуального розчинника (“середнього” матеріалу, ефективної усередненої матриці-розчинника) [9, 10, 18—20]. Зона впливу дефекту на дислокацію на площині ковзання тим більше, чим далі від площини знаходиться дефект [22]. Якщо дефект створює дисторсію, яка пов'язана з більшим розміром розчиненого атома в порівнянні з віртуальними атомами ефективної усередненої матриці-розчинника, і розташований в полі стискаючих напружень дислокації, то такий дефект відштовхує дислокацію від себе. Поза зоною впливу напруження прямують до нуля і ними можна знехтувати.

Енергія взаємодії точкового дефекту (в випадку твердого розчину заміщення — це розчинений атом компонента i в вузлі кристалічних ґраток матриці-розчинника) і прямолінійного відрізка крайової дислокації включає в себе дві складові:

$$W_i = W_i^{(s)} + W_i^{(m)}, \quad (2)$$

де складова, що пов'язана з невідповідністю розмірів атомів, може бути розрахована як [23]

$$W_i^{(s)} = p\Delta V_i = 3\delta_i V_a p, \quad (3)$$

де $p = -\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3}$ — тиск, що створює відрізок дислокації в точці знаходження дефекту; $\Delta V_i = 3\delta_i V_a$ — невідповідність об'єму розчиненого атома компонента i в порівнянні з атомами матриці-розчинника; σ_{xx} , σ_{yy} та σ_{zz} — компоненти тензора напружень, що створює відрізок дислокації в точці знаходження дефекту; $\delta_i = \frac{1}{s_{lat}} \frac{ds_{lat}}{dX_i}$ — невідповідність розмірів атомів компонента i в порівнянні з атомами матриці-розчинника; s_{lat} — середня відстань між найближчими атомами в сплаві; X_i — атомна частка компонента i ; V_a — об'єм на один атом в сплаві.

Складова енергії взаємодії, що пов'язана з невідповідністю модулів пружності розчиненого атома і атомів матриці-розчинника, може бути розрахована як [23]

$$W_i^{(m)} = \left(\frac{p^2}{2K} + \frac{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2}{2G} \right) \eta'_i G V_a, \quad (4)$$

де K — модуль об'ємного стискування сплаву; G — модуль зсуву сплаву; σ_{xy} , σ_{xz} та σ_{yz} — компоненти тензора напружень, що створює відрізок дислокації в точці знаходження дефекту; $\eta'_i = \frac{\eta_i}{1 + 0.5|\eta_i|}$,

$\eta_i = \frac{1}{G} \frac{dG}{dX_i}$ — невідповідність модулів пружності атомів компонента i в порівнянні з атомами матриці-розчинника [18].

Схему, що пояснює розрахунок поля напружень, яке створюється прямолінійним відрізком крайової дислокації в точці знаходження точкового дефекту, наведено на рис. 1. Компоненти тензора напружень в цій точці можуть бути розраховані як [24]

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(2)} - \sigma_{ij}^{(1)}, \quad (5)$$

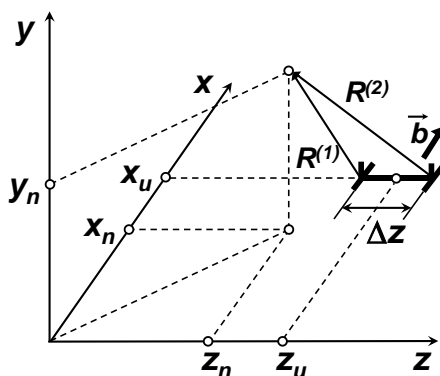


Рис. 1. Схему, що пояснює розрахунок поля напружень навколо прямолінійного відрізка крайової дислокації.

де

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx}^{(k)} &= \sigma_0 b \frac{y_n}{R^{(k)}(R^{(k)} + \lambda^{(k)})} \left[1 + \left(\frac{x_n - x_u}{R^{(k)}} \right)^2 + \frac{(x_n - x_u)^2}{R^{(k)}(R^{(k)} + \lambda^{(k)})} \right], \\
 \sigma_{yy}^{(k)} &= -\sigma_0 b \frac{y_n}{R^{(k)}(R^{(k)} + \lambda^{(k)})} \left[1 - \left(\frac{y_n}{R^{(k)}} \right)^2 - \frac{y_n^2}{R^{(k)}(R^{(k)} + \lambda^{(k)})} \right], \\
 \sigma_{zz}^{(k)} &= \sigma_0 b \left[\frac{2\nu y_n}{R^{(k)}(R^{(k)} + \lambda^{(k)})} + \frac{y_n \lambda^{(k)}}{R^{(k)^3}} \right], \\
 \sigma_{xy}^{(k)} &= -\sigma_0 b \frac{x_n - x_u}{R^{(k)}(R^{(k)} + \lambda^{(k)})} \left[1 - \left(\frac{y_n}{R^{(k)}} \right)^2 - \frac{y_n^2}{R^{(k)}(R^{(k)} + \lambda^{(k)})} \right], \\
 \sigma_{xz}^{(k)} &= -\sigma_0 b \frac{(x_n - x_u)y_n}{R^{(k)^3}}, \\
 \sigma_{yz}^{(k)} &= \sigma_0 b \left[\frac{\nu}{R^{(k)}} + \frac{y_n^2}{R^{(k)^3}} \right],
 \end{aligned} \tag{6}$$

де ν — коефіцієнт Пуасона; x_n , y_n та z_n — координати точкового дефекту; x_u та z_u — координати центра прямолінійного відрізка дислокації, тобто точки, де визначається зсувне напруження, що діє на дислокацію з боку дефекту; $R^{(1)} = \sqrt{(x_n - x_u)^2 + y_n^2 + (z_n - z_u + \Delta z / 2)^2}$, $\lambda^{(1)} = z_u - \Delta z / 2 - z_n$; $R^{(2)} = \sqrt{(x_n - x_u)^2 + y_n^2 + (z_n - z_u - \Delta z / 2)^2}$, $\lambda^{(2)} = z_u + \Delta z / 2 - z_n$, $k = 1, 2$ і

$$\sigma_0 = \frac{G}{4\pi(1-\nu)}. \tag{7}$$

Вище наведено алгоритм, як розрахувати зсувне напруження, що діє на пробний прямолінійний відрізок крайової дислокації в площині ковзання з боку одного окремого точкового дефекту з заданими невідповідностями розмірів атомів і модулів пружності. В твердому розчині заміщення таких дефектів може бути досить багато навколо певної точки на площині ковзання. З практичних міркувань слід брати до уваги всі дефекти, в зону впливу яких на площині ковзання потрапляє ця точка. Необхідно зазначити, що дефекти, які розташовані безпосередньо в площині ковзання, практично не створюють зсувних напружень для дислокації тому, що крайова дислокація не створює в цій площині тиску і складова енергії взаємодії, яка пов'язана з невідповідністю розмірів атомів, дорівнює нулю. Тому ключовими будуть дефекти, що розташовані на деякій відстані від площини ковзання. Ще раз нагадаємо, що нами розглядаються розчинені атоми з невідповідностями їх розмірів і модулів пружності в порівнянні з матрицею-розчинником твердого розчину заміщення як точкові дефекти. Ці розчинені атоми розташовані в вузлах кристалічних ґраток. Координати вузлів кристалічних ґраток в обраній системі координат підкоряються певним циклічним співвідношенням. Такі співвідношення є різними для ГЦК та ОЦК ґраток. В концентрованих багатокомпонентних твердих розчинах як матриця-розчинник буде

виступати віртуальний розчинник [9, 10, 18, 20] — “середній матеріал”, відносно якого будь-який компонент i сплава буде мати невідповідність розмірів атомів і модулів пружності. В цьому випадку жоден з компонентів не можна розглядати як матрицю-розчинник. Розчинником виступає деякий “середній матеріал”.

З точки зору розрахунку зсувних напружень в площині ковзання більш зручно розглядати площини, які перпендикулярні вектору Бюргерса. Для ГЦК ґраток будемо мати чергування двох видів площин, в яких розташування вузлів зміщено один щодо одного. У цьому випадку в кожній такій площині чергуються три види атомних рядів, паралельних осі z , в яких вузли також зміщені один щодо одного. Для ОЦК ґраток будемо мати чергування трьох видів площин, в яких розташування вузлів зміщено один щодо одного. В кожній такій площині чергуються два види атомних рядів, паралельних осі z . Координати вузлів в площинах, які перпендикулярні вектору Бюргерса (площини, паралельні площинам uOz), в матеріалі з ГЦК і ОЦК ґратками будуть

$$x_{hkm} = (h - N_x - 1)b/p, \quad y_{hkm} = (k - N_y - 0.5)d, \quad z_{hkm} = (m - N_z - q)l, \quad (8)$$

де h , k та m — індекси, що задають розташування вузлів вздовж осей x , y та z ; h — номер площини, що перпендикулярна вектору Бюргерса, в якій розташований вузол ($h \leq 2N_x + 1$); k — номер атомного ряду в площині, в якому розташований вузол ($k \leq 2N_y$); m — номер вузла в атомному ряду ($m = j \leq 2N_z$); N_x — число площин, що розглядаються; N_y — число атомних рядів в площині, що розглядаються; N_z — число вузлів в атомному ряду, які розглядаються; j — вільний допоміжний індекс, що взятий для зручності ($j = 1, 2, 3, \dots$); $p = 2$ для ГЦК ґраток і $p = 3$ для ОЦК ґраток; $q = 1/6$, якщо $h = 2j$, $k = 3j$ для ГЦК ґраток і $h = 3j - 1$, $k = 2j$ для ОЦК ґраток; $q = 1/3$, якщо $h = 2j - 1$, $k = 3j - 1$ для ГЦК ґраток і $h = 3j$, $k = 2j - 1$ для ОЦК ґраток; $q = 1/2$, якщо $h = 2j$, $k = 3j - 2$ для ГЦК ґраток і $h = 3j - 2$, $k = 2j$ для ОЦК ґраток; $q = 2/3$, якщо $h = 2j - 1$, $k = 3j$ для ГЦК ґраток і $h = 3j - 1$, $k = 2j - 1$ для ОЦК ґраток; $q = 5/6$, якщо $h = 2j$, $k = 3j - 1$ для ГЦК ґраток і $h = 3j$, $k = 2j$ для ОЦК ґраток; $q = 1$, якщо $h = 2j - 1$, $k = 3j - 2$ для ГЦК ґраток і $h = 3j - 2$, $k = 2j - 1$ для ОЦК ґраток; l — відстань між вузлами вздовж атомного ряду ($l = \sqrt{3}b$ для ГЦК ґраток і $l = 2\sqrt{2}b$ для ОЦК ґраток); d — відстань між площинами ковзання ($d = \sqrt{2/3}b$ для ГЦК і ОЦК ґраток). Числа площин, атомних рядів в площині та вузлів в атомному ряду, які розглядаються, залежать від розміру зони впливу точкових дефектів. Цей розмір треба визначати окремо, обравши значення зсувного напруження, яким можна знехтувати.

Зсувне напруження в площині ковзання, що визване багатьма точковими дефектами (розчиненими атомами), які розташовані в вузлах кристалічних ґраток навколо цієї площини, може бути розраховано з використанням чисельного диференціювання формули (1):

$$\tau_s(x_u, z_u) = \frac{1}{b\Delta x\Delta z} \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m [W_{hkm}(x_u, z_u) - W_{hkm}(x_u + \Delta x, z_u)] \right) \right), \quad (9)$$

де Δx — малий крок по координаті x ($\Delta x = b/100$); $W_{hkm}(x_u, z_u)$ — енергія взаємодії точкового дефекту в вузлі з координатами x_{hkm} , y_{hkm} , z_{hkm} і прямолінійного відрізка дислокації з центром в (x_u, z_u) (точка в площині ковзання, де визначається зсувне напруження, що діє на дислокацію з боку дефекту; з міркувань симетрії кристалічних ґраток найбільш зручно розраховувати зсувне напруження в точках, які співпадають з перетинами атомних площин, що перпендикулярні вектору Бюргерса, і площини ковзання). Ця енергія може бути розрахована для твердого розчину заміщення з випадковим розташуванням атомів за формулою

$$W_{hkm}(x_u, z_u) = \sum_i \zeta_{hkm}^{(i)} W_i, \quad (10)$$

де i — індекс, що показує номер компонента сплава; $\zeta_{hkm}^{(i)} = 1$, якщо $\sum_{j=1}^{i-1} X_j < r_{hkm} \leq \sum_{j=1}^i X_j$; $\zeta_{hkm}^{(i)} = 0$, якщо r_{hkm} не попадає в наведений інтервал; r_{hkm} — випадкова величина, що рівномірно розподілена на інтервалі; X_j — атомна частка компонента сплава j ($\sum_{j=1}^N X_j = 1$); N — кількість

компонентів в сплаві. Енергія взаємодії точкового дефекту W_i може бути розрахована за формулами (2)—(7), якщо прийняти $x_n = x_u + x_{hkm}$, $y_n = y_{hkm}$, $z_n = z_u + z_{hkm}$. Підсумовування відбувається з урахуванням вимог до індексів h , k та m , що вже описані. Точка з координатами x_u та z_u виступає як початок координат для формул (8). Слід зазначити, що необхідно брати до уваги існування ядра дислокації, в якому порушується пружна поведінка матеріалу. Це означає, що внесками від точкових дефектів, які лежать в області ядра ($\sqrt{x_{hkm}^2 + y_{hkm}^2} \leq r_c$, $|z_{hkm}| \leq \Delta z/2$, де $r_c \sim b$ — радіус ядра дислокації), в зсувне напруження в площині ковзання можна знехтувати, тобто прирівняти нулю відповідні доданки в формулі (9).

Результати обчислювального експерименту та їх обговорення

Для моделювання поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання необхідно задати певні вихідні параметри. Також навколо точки, де розраховується зсувне напруження, слід визначити число площин, перпендикулярних вектору Бюргерса, число атомних рядів в площині та число вузлів в атомному ряду, точкові дефекти в яких роблять такий внесок в це напруження, що ним не можна знехтувати. Ці параметри залежать від розміру зони впливу точкового дефекту. Цей розмір можна визначити, якщо розташувати дефект, наприклад, в точці з координатами $x_n = 0$, $y_n > 0$, $z_n = 0$ і розраховувати зсувне напруження в точках з $z_u = 0$

Т а б л и ц я 1. Вихідні параметри для моделювання

| G , ГПа | K , ГПа | ν | b , нм | V_a , нм ³ | δ_i | η'_i |
|-----------|-----------|-------|----------|-------------------------|------------|-----------|
| 81 | 176 | 0,3 | 0,25 | 0,011 | 0,01 | 0,01 |

та змінним x_u і в точках з $x_u = y_u / \sqrt{3}$ та змінним z_u . В цьому випадку раціонально задати $\Delta x = 0,0025$ нм та $\Delta z = 1,37$ нм [21]. Інші вихідні параметри для розрахунків розміру зони впливу були задані, виходячи з міркувань реалістичності з використанням ряду робіт, в яких моделювалися реальні багатокомпонентні сплави [9, 10, 15]. Ці вихідні параметри наведено в табл. 1.

Якщо проаналізувати розраховані залежності і обрати значення зсувного напруження, яким можна знехтувати (0,02 МПа), то радіус зони впливу приблизно дорівнює 4,75 нм за умови відрахування його від проекції точкового дефекту на площині ковзання. Отже, для розрахування зсувних напружень від багатьох дефектів, що розташовані в вузлах кристалічних ґраток, вздовж осі x ($z_u = 0$), достатньо розглядати тільки вплив дефектів, які знаходяться на відстані від цієї осі $\leq 4,75$ нм. Тоді якщо поділити 4,75 нм на $b/2$ (для ГЦК), $b/3$ (для ОЦК), d та l , то отримаємо $N_x = 38$, $N_y = 24$ та $N_z = 11$ для ГЦК ґраток і $N_x = 57$, $N_y = 24$ та $N_z = 7$ для ОЦК ґраток відповідно.

В загальному випадку величина Δz має дорівнювати довжині кореляції поля напружень w_c [21]. Для того щоб визначити довжину кореляції поля зсувних напружень, зсувне напруження в площині ковзання, що визване багатьма точковими дефектами, які розташовані в вузлах ГЦК і ОЦК кристалічних ґраток навколо цієї площини, розраховувалось в точках з $z_u = 0$ та змінним x_u з різним кроком Δx_u . Для цього використовувалися вихідні параметри G , K , ν , b , V_a , що наведені в табл. 1, і невідповідності атомних розмірів та модулів пружності, які наведені в табл. 2 для модельного сплаву 1. Всі невідповідності для модельних сплавів в табл. 2 були розраховані за допомогою методів і даних, які представлені в роботі [18]. Довжина кореляції поля зсувних напружень була визначена за допомогою методик, що описані в роботі [21]. Збільшення кроку Δx_u призводить до зростання w_c . Довжина кореляції поля напружень для більших кроків Δx_u приблизно дорівнює двом таким крокам. Це суто технічний обчислювальний ефект. Але зі зменшенням кроку розрахунку ця залежність порушується і довжина кореляції стає приблизно рівною 0,25 нм, тобто величині вектора Бюргерса. Це не випадковий результат, а наслідок дискретності структури кристалічних ґраток, характерний розмір якої 0,25 нм. Таким чином, для розташування вузлів кристалічних ґраток, яке розглядається, слід використовувати $\Delta z = 0,25$ нм.

Приклади розподілу зсувних напружень для сплавів 1—3 показано на рис. 2, якщо задати $r_c = b = 0,25$ нм, $\Delta x_u = 0,125$ нм для ГЦК структури і $r_c = b/3 = 0,083$ нм, $\Delta x_u = 0,083$ нм для ОЦК структури. У цьому випадку сплави 1 і 2 вважалися з ГЦК ґратками, а сплав 3 — з ОЦК ґратками. Добре

Т а б л и ц я 2. Невідповідності атомних розмірів та модулів пружності, що були використані для моделювання поля напружень в багатокomпонентних сплавах

| Сплав | i | X_i | δ_i | η_i |
|-------|-----|--------|------------|----------|
| 1 | 1 | 0,2 | 0,010077 | 0,290837 |
| | 2 | 0,2 | 0,001747 | -0,13433 |
| | 3 | 0,2 | 0,004622 | -0,12114 |
| | 4 | 0,2 | 0,004674 | -0,04529 |
| | 5 | 0,2 | -0,02244 | -0,05755 |
| 2 | 1 | 0,5 | 0,004959 | 0,172373 |
| | 2 | 0,125 | -0,00277 | -0,25328 |
| | 3 | 0,125 | -0,00248 | -0,24023 |
| | 4 | 0,125 | -0,00317 | -0,16503 |
| | 5 | 0,125 | -0,01873 | -0,17722 |
| 3 | 1 | 0,96 | 0,000023 | 0,012777 |
| | 2 | 0,01 | -0,00063 | -0,40883 |
| | 3 | 0,01 | -0,00074 | -0,39612 |
| | 4 | 0,01 | -0,0009 | -0,32259 |
| | 5 | 0,01 | -0,00197 | -0,33453 |
| 4 | 1 | 0,25 | 0,00354 | 0,277228 |
| | 2 | 0,25 | -0,000049 | -0,14815 |
| | 3 | 0,25 | -0,00085 | -0,13497 |
| | 4 | 0,25 | -0,00269 | -0,05917 |
| 5 | 1 | 0,25 | 0,014807 | 0,28005 |
| | 2 | 0,25 | 0,003049 | -0,14529 |
| | 3 | 0,25 | 0,007775 | -0,1321 |
| | 4 | 0,25 | -0,02717 | -0,06855 |
| 6 | 1 | 0,3333 | 0,000518 | -0,03493 |
| | 2 | 0,3333 | 0,000728 | -0,02169 |
| | 3 | 0,3333 | -0,00105 | 0,05428 |
| 7 | 1 | 0,3333 | 0,008082 | -0,03063 |
| | 2 | 0,3333 | 0,02069 | -0,01739 |
| | 3 | 0,3333 | -0,02824 | 0,046316 |

видно, що в еквіатомному сплаві 1 маємо простий випадковий розподіл напружень. Це підтверджується функцією розподілу нормалізованих напружень, якщо нормалізувати напруження за допомогою їх стандартного відхилення $\hat{\tau}$. Розрахована функція досить добре співпадає зі стандартною функцією нормального розподілу (рис. 3). Приблизно такий самий розподіл маємо для сплаву 2, де один з п'яти компонентів має атомну частку 0,5, тобто сплав ще достатньо концентрований. Але коли атомна частка одного з компонентів стає повністю домінантною, як для сплаву 3 — 0,96, і сплав є розбавленим твердим розчином, то розподіл напружень суттєво змінюється. З'являються широкі області з відносно маленькими (близькими до нуля) напруженнями, які розділяються досить високими і вузькими піками. Очевидно, що ці піки відповідають дискретним перешкодам для руху дислокацій. Слід зауважити, що сплав має п'ять

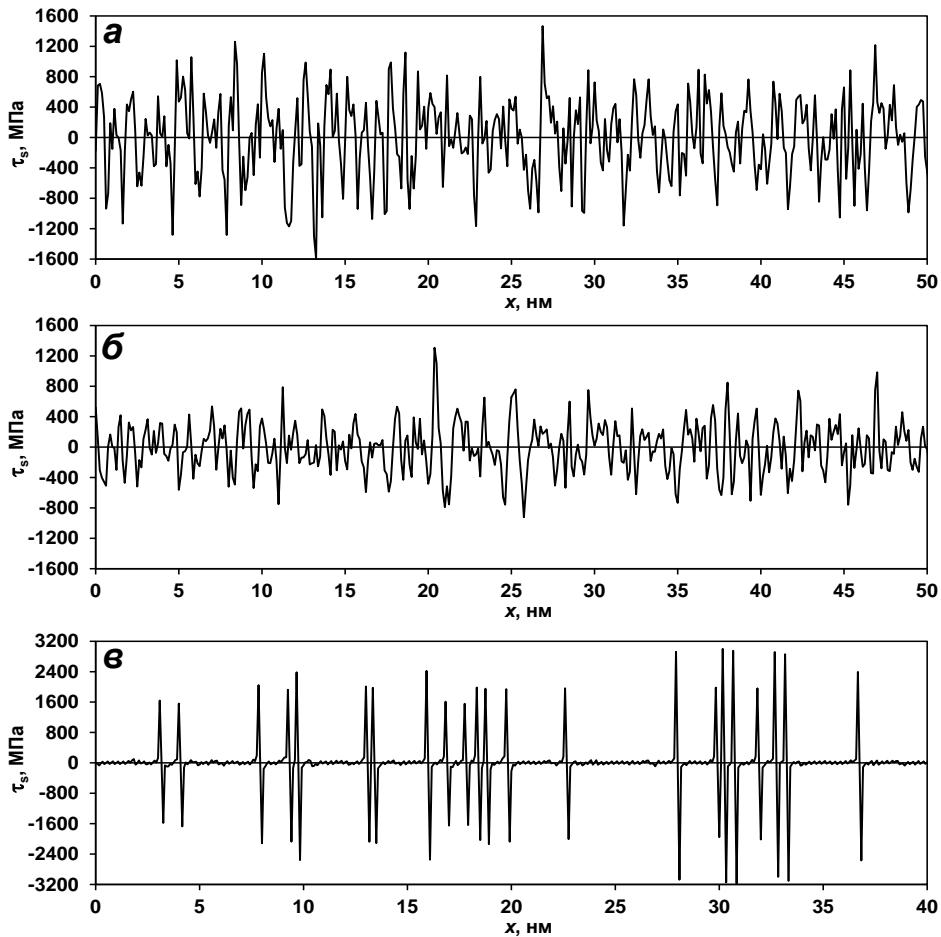


Рис. 2. Розподіли зсувних напружень в сплавах 1 (а), 2 (б) і 3 (в).

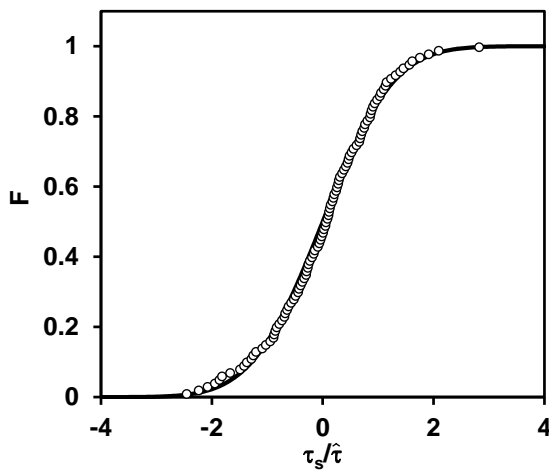
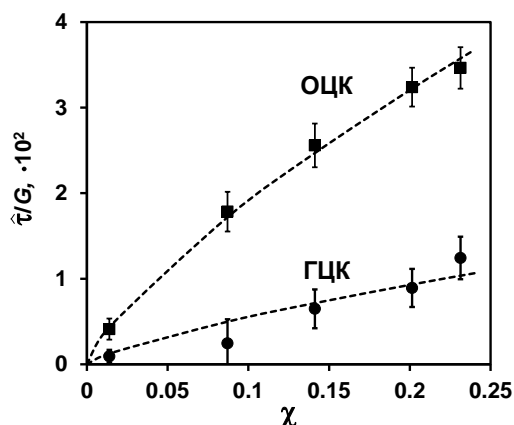


Рис. 3. Функція розподілу нормалізованих зсувних напружень в сплаві 1. Кола відповідають розрахованій функції розподілу, лінія — стандартній функції нормального розподілу.

компонентів, з яких один переважає. Але розподіл напружень якісно демонструє картину як для бінарного сплаву, тобто чотири компоненти, яких мало, виступають практично як один ефективний компонент, що створює дискретні перешкоди для дислокацій. В цьому випадку розподіл напружень не є нормальним внаслідок існування широких областей з дуже

Рис. 4. Нормалізоване стандартне відхилення $\hat{\tau}/G$ розрахованих розподілів напружень в модельних сплавах як функція їх дисторсії χ .



малими напруженнями. Але якщо розглядати тільки статистику великих піків, то розподіл напружень можна вважати приблизно нормальним. Відстань між великими піками в нашому прикладі дорівнює в середньому 1,67 нм, що корелює з оцінками середньої відстані в площині між атомами тих чотирьох компонентів, яких мало, якщо враховувати їх сумарну атомну частку, $b/(X_2 + X_3 + X_4 + X_5)^{0.5}$.

Розподіли зсувних напружень були розраховані для модельних сплавів 1, 4—7 з використанням параметрів G , K , ν , b , V_a , що наведені в табл. 1, і невідповідностей атомних розмірів та модулів пружності, що наведені в табл. 2. Також було задано $\Delta z = 0,25$ нм, а $r_c = b$ для випадку, коли модельний сплав розглядався як сплав з ГЦК структурою, і $r_c = b/3$ для випадку, коли модельний сплав розглядався як сплав з ОЦК структурою. Радіус ядра дислокації — відносна характеристика, величина якої залежно від обраного критерію лежить в інтервалі $0.3b < r_c < 3b$ [25]. На жаль, точний критерій з точки зору розрахунку зсувних напружень в площині ковзання невідомий. Радіус ядра, який дорівнює одному вектору Бюргерса для ГЦК структур, був підібраний як той, що дає реалістичні амплітуди поля зсувних напружень. Радіус ядра, який дорівнює одній третій вектора Бюргерса для ОЦК структур, був обраний як один із можливих варіантів — це значення близьке до нижньої границі інтервалу значень цього параметра. Одне з можливих пояснень більшого ефективного радіуса ядра в ГЦК структурах — це розщеплення повної дислокації на часткові, що поширене в цих структурах.

Твердорозчинне зміцнення в багатокомпонентному сплаві в загальному виді може бути описане як [18, 26, 27]

$$\Delta\sigma_{SS} = AG \left[\sum_i \varepsilon_i^2 X_i \right]^{2/3}, \quad (11)$$

де A — емпірична константа; $\varepsilon_i = (\eta_i^2 + \alpha^2 \delta_i^2)^{0.5}$; α — константа, яка залежить від типу дислокацій (для крайових дислокацій $\alpha = 16$). Тоді параметр

$$\chi = \left[\sum_i \varepsilon_i^2 X_i \right]^{2/3} \quad (12)$$

можна розглядати як міру середньої дисторсії кристалічних ґраток сплаву (твердого розчину заміщення) або спрощено просто як дисторсію сплаву.

Нормалізоване стандартне відхилення $\hat{\tau}/G$ розрахованих розподілів напружень в модельних сплавах 1, 4—7 показане на рис. 4 як функція їх дисторсії χ . Залежності нормалізованого стандартного відхилення від дисторсії як для ГЦК, так і для ОЦК структур можна наближено описати виразом

$$\frac{\hat{\tau}}{G} = C\chi^{3/4}. \quad (13)$$

Ці залежності для підібраних належним чином значень C показані на рис. 4 пунктирними лініями. Стандартні відхилення для ОЦК структур більші приблизно в чотири рази, ніж відхилення для ГЦК структур за рівної дисторсії. Це пояснюється меншим радіусом ядра дислокації, прийнятим для розрахунків. Таке співвідношення відхилень розподілів напружень добре корелює з тим фактом, що насправді спостерігається більше твердо-розчинне зміцнення в ОЦК сплавах в порівнянні з ГЦК сплавами за приблизно рівних невідповідностей атомних розмірів і модулів пружності компонентів [27].

Висновки

Якщо розглядати атоми в вузлах кристалічних ґраток твердого розчину заміщення як своєрідні точкові дефекти в середовищі з властивостями “середнього” матеріалу (віртуального розчинника), то можна розрахувати розподіл зсувних напружень в площині ковзання, виходячи із взаємодії крайової дислокації з такими дефектами. Для концентрованих твердих розчинів, в яких немає компонента, вміст якого значно переважав би вміст інших компонентів, зсувні напруження будуть нормально розподіленою випадковою величиною з нульовим математичним очікуванням, тобто напруження з різними знаками будуть з’являтися з рівною ймовірністю. Стандартне відхилення такого розподілу буде тим більше, чим більша дисторсія сплаву, яку можна розрахувати як певне осереднення невідповідностей атомних розмірів і модулів пружності компонентів по відношенню до “середнього” віртуального розчинника. У випадку, коли один із компонентів має переважний вміст, моделювання дає розподіл зсувних напружень в площині ковзання, в якому великі піки відокремлюються один від одного широкими областями близьких до нуля напружень. Таким чином, в розбавлених твердих розчинах для крайової дислокації в площині ковзання існують окремі дискретні перешкоди у вигляді великих піків напружень, а простір між піками є практично вільним від напружень. Середня відстань між великими піками корелює з середньою відстанню між атомами тих компонентів, яких в розчині мало, якщо враховувати їх сумарний вміст. Отже, запропоноване моделювання дає досить реалістичні розподіли зсувних напружень в площині ковзання для концентрованих і розбавлених твердих розчинів заміщення з ГЦК і ОЦК структурами, що може бути корисним для подальшого моделювання границі плинності в багатокомпонентних сплавах.

Цитована література

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. *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. Nöhning W.G., Curtin W.A. Correlation of microdistortions with misfit volumes in High Entropy Alloys. *Scripta Mater.* 2019. Vol. 168. P. 119—123. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.04.012>
12. Bracq G., Laurent-Brocq M., Varvenne C., Perrière L., Curtin W.A., Joubert J.-M., Guillot I. Combining experiments and modeling to explore the solid solution strengthening of high and medium entropy alloys. *Acta Mater.* 2019. Vol. 177. P. 266—279. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.050>
13. Hu Y., Szajewski B.A., Rodney D., Curtin W.A. Atomistic dislocation core energies and calibration of non-singular discrete dislocation dynamics. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2020. Vol. 28. P. 015005. doi: <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab5489>
14. Zaiser M. Dislocation motion in a random solid solution. *Philos. Mag. A.* 2002. Vol. 82, No. 15. P. 2869—2883. doi: <https://doi.org/10.1080/01418610208240071>
15. Zhai J.-H., Zaiser M. Properties of dislocation lines in crystals with strong atomic-scale disorder. *Mater. Sci. Eng.: A.* 2019. Vol. 740—741. P. 285—294. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010>
16. Péterffy G., Ispánovity P.D., Foster M.E., Zhou X., Sills R.B. Length scales and scale-free dynamics of dislocations in dense solid solutions. *Mater. Theory.* 2020. Vol. 4, Article No. 6. doi: <https://doi.org/10.1186/s41313-020-00023-z>
17. Pasianot R., Farkas D. Atomistic modeling of dislocations in a random quinary high-entropy alloy. *Comp. Mater. Sci.* 2020. Vol. 173. P. 109366. doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109366>
18. Lugovy M., Slyunyaev V., Brodnikovskyy M. Solid solution strengthening in multicomponent fcc and bcc alloys: Analytical approach. *Progress in Natural Science: Mater. Internat.* 2021. Vol. 31. P. 95—104. doi: <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.11.006>
19. Луговой М.І., Слюняев В.М., Бродниковський М.П., Фірстов С.О. Розрахунок твердорозчинного зміцнення багатоконцентних жароміцних сплавів. *Електронна мікроскопія і прочність матеріалів*. Київ: ИПМ НАН України. 2017. Вып. 23. С. 3—9.
20. 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.

21. Луговий М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Форма лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ПІМ НАН України. 2021. Вип. 2. С. 19—34. doi: <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
22. Gremaud G. Overview on dislocation-point defect interaction: the Brownian picture of dislocation motion. *Mater. Sci. Eng.: A*. 2004. Vol. 370. P. 191—198. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.04.005>
23. Argon A.S. Strengthening mechanisms in crystal plasticity. Oxford: Oxford University Press. 2008. 404 p. doi: 10.1093/acprof:oso/9780198516002.001.0001
24. Hirth J.P., Lothe J. Theory of dislocations. New York: Wiley, 1982. 857 p.
25. Messerschmidt U. Dislocation dynamics during plastic deformation. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2010. 503 p. doi: 10.1007/978-3-642-03177-9
26. Stepanov N.D., Shaysultanov D.G., Tikhonovsky M.A., Salishchev G.A. Tensile properties of the Cr—Fe—Ni—Mn non-equiatomic multicomponent alloys with different Cr contents. *Mater. Des.* 2015. Vol. 87. P. 60—65. doi: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2015.08.007>
27. Toda-Caraballo I., Rivera-Diaz-del-Castillo P.E. Modelling solid solution hardening in high entropy alloys. *Acta Mater.* 2015. Vol. 85. P. 14—23. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.11.014>

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. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
2. George, E. P., Curtin, W. A. & Tazan, 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. *The Physics of Metals* (pp. 152—188), Cambridge: Cambridge University Press. doi: <https://doi.org/10.1017/CBO9780511760020.007>
4. Labusch, R. (1981). Physical aspects of precipitation- and solid solution-hardening. *Czech. J. Phys.*, Vol. 31, pp. 165—176. doi: <https://doi.org/10.1007/BF01959439>
5. Leyson, G., Curtin, W., Hector, L. & Woodward, C. F. (2010). Quantitative prediction of solute strengthening in aluminium alloys. *Nature Mater.*, Vol. 9, pp. 750—755. doi: <https://doi.org/10.1038/nmat2813>
6. Leyson, G. P. M., Hector, L. G. & Curtin, W. A. (2012). Solute strengthening from first principles and application to aluminum alloys. *Acta Mater.*, Vol. 60, No. 9, pp. 3873—3884. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.03.037>
7. Leyson, G. P. M. & Curtin, W. A. (2013). Friedel vs. Labusch: the strong/weak pinning transition in solute strengthened metals. *Philos. Mag.*, Vol. 93, No. 19, pp. 2428—2444. doi: <https://doi.org/10.1080/14786435.2013.776718>
8. Leyson, G. P. M. & Curtin, W. A. (2016). Solute strengthening at high temperatures, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 24, pp. 065005. doi: <https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/6/065005>
9. Varvenne, C., Luque, A. & Curtin, W. A. (2016). Theory of strengthening in fcc high entropy alloys. *Acta Mater.*, Vol. 118, pp. 164—176. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.07.040>
10. Varvenne, C., Leyson, G. P. M., Ghazisaeidi, M. & Curtin, W. A. (2017). Solute strengthening in random alloys. *Acta Mater.*, Vol. 124, pp. 660—683. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.046>
11. Nöhring, W. G., & Curtin, W. A. (2019). Correlation of microdistortions with misfit volumes in High Entropy Alloys. *Scripta Mater.*, Vol. 168, pp. 119—123. doi: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.04.012>
12. Bracq, G., Laurent-Brocq, M., Varvenne, C., Perrière, L., Curtin, W. A., Joubert, J. - M. & Guillot, I. (2019). Combining experiments and modeling to explore the solid solution strengthening of high and medium entropy alloys. *Acta Mater.*, Vol. 177, pp. 266—279. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.050>
13. Hu, Y., Szajewski, B. A., Rodney, D. & Curtin, W. A. (2020). Atomistic dislocation core energies and calibration of non-singular discrete dislocation dynamics. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, Vol. 28, pp. 015005. doi: <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab5489>
14. Zaiser, M. (2002). Dislocation motion in a random solid solution. *Philos. Mag. A*, Vol. 82, No. 15, pp. 2869—2883. doi: <https://doi.org/10.1080/01418610208240071>

15. Zhai, J. - H. & Zaiser, M. (2019). Properties of dislocation lines in crystals with strong atomic-scale disorder. *Mater. Sci. Eng.: A*, Vol. 740—741, pp. 285—294. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010>
16. Péterffy, G., Ispánovity, P. D., Foster, M. E., Zhou, X. & Sills, R. B. (2020). Length scales and scale-free dynamics of dislocations in dense solid solutions. *Mater. Theory*, Vol. 4, Article No. 6. doi: <https://doi.org/10.1186/s41313-020-00023-z>
17. Pasianot, R. & Farkas, D. (2020). Atomistic modeling of dislocations in a random quinary high-entropy alloy. *Comp. Mater. Sci.*, Vol. 173, pp. 109366. doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109366>
18. Lugovy, M., Slyunyayev, V. & Brodnikovskyy, M. (2021). Solid solution strengthening in multicomponent fcc and bcc alloys: Analytical Approach. *Progress in Natural Science: 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—34 [in Russian].
21. Lugovy, M., Verbylo, D. & Brodnikovskyy, M. (2021). Shape of dislocation line in stochastic shear stress field. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, Vyp. 2, pp. 19—34 [in Ukrainian]. doi: <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
22. 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>
23. Argon, A. S. (2008). *Strengthening mechanisms in crystal plasticity*. Oxford: Oxford University Press. doi: <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780198516002.001.0001>
24. Hirth, J. P. & Lothe, J. (1982). *Theory of dislocations*, New York: Wiley.
25. Messerschmidt, U. (2010). *Dislocation dynamics during plastic deformation*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag. doi: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-03177-9>
26. Stepanov, N. D., Shaysultanov, D. G., Tikhonovsky, M. A., Salishchev, G. A. (2015). Tensile properties of the Cr—Fe—Ni—Mn non-equiatomic multicomponent alloys with different Cr contents. *Mater. Des.*, Vol. 87, pp. 60—65. doi: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2015.08.007>
27. Toda-Caraballo, I. & Rivera-Diaz-del-Castillo, P.E. (2015). Modelling solid solution hardening in high entropy alloys. *Acta Mater.*, Vol. 85, pp. 14—23. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.11.014>

Modelling of shear stress field in glide plane in substitutional solid solutions

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

I. M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of the NAS of Ukraine,
*E-mail: nil2903@gmail.com

The formation of stochastic shear stress field in the glide plane in the substitutional solid solution was investigated by computer simulation. If the atoms in the crystal lattice nodes of the substitutional solid solution are considered as a kind of point defects in the virtual solvent medium, the shear stress distribution in the glide plane can be calculated based on the interaction of edge dislocation and such defects. For concentrated solid solutions, the shear stress will be a normally distributed random value with zero mathematical expectation. The standard deviation of this distribution will be the greater the greater the effective distortion of crystalline lattice of the alloy. In the case of dilute solid solution, where one of the components has a predominant content, the simulation gives shear stress distribution in the glide plane, where large peaks are separated from each other by wide areas of near-zero stresses. Thus, there are separate discrete obstacles in the form of large stress peaks for the edge dislocation in the glide plane in dilute solid solution, and the space between the peaks is practically stress-free. The average distance between large peaks correlates with the average distance between the atoms of those components that are few in solution, if total atomic fraction of these components is considered. Thus, the proposed modeling gives a very realistic shear stress distribution in the glide plane for concentrated and dilute substitutional solid solutions with fcc and bcc structures. This can be useful in further modeling the yield strength in multicomponent alloys.

Keywords: dislocation, distortion, shear stresses.