

Обчислювальний експеримент в матеріалознавстві

УДК 530.131.530.12; 539.125/126 <https://doi.org/10.15407/materials2023.07.001>

Статистичний метод визначення параметрів поля зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві

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

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

Розроблено метод, за яким невідповідності атомних розмірів та модулів пружності в вузлах кристалічних ґраток розглядаються як дискретні випадкові величини і визначення їх дисперсії дозволяє отримати аналітичні вирази для стандартних відхилень та довжин кореляції двох компонент поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві, що створюються розчиненими атомами навколо неї. Виявлено зв'язок між дисторсією кристалічних ґраток багатокомпонентного сплаву і параметрами розподілу таких зсувних напружень. Параметри поля зсувних напружень, які розраховані запропонованим методом для сплаву CrCoNiFeMn, добре корелюють зі значеннями, що визначені з розподілів зсувних напружень, котрі розраховані прямим сумуванням внесків від окремих розчинених атомів.

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

Вступ

Концепція твердорозчинного зміцнення в високоентропійних і інших багатокомпонентних сплавах дозволяє отримати матеріали з унікальними властивостями для застосування у широкому діапазоні температур [1]. Твердорозчинне зміцнення визначає границю плинності таких сплавів, яка являє собою особливий інтерес з точки зору технічного застосування матеріалу. При зміцненні розчинені атоми створюють поле зсувних напружень в площині ковзання, яке призводить до опору руху дислокації. Зсувне напруження в кожній точці площини ковзання є сумою багатьох випадкових

внесків від різних розчинених атомів і тому являє собою випадкову величину, яка має нормальний розподіл з математичним очікуванням, що дорівнює нулю, і певним стандартним відхиленням. Ділянки з напруженнями різних знаків чергуються між собою на площині ковзання, що в результаті створює нульовий баланс сил. Середній розмір ділянки, де напруження мають один знак, є важливою характеристикою поля стохастичних зсувних напружень, яка визначає його довжину кореляції.

Різні аспекти твердорозчинного зміцнення досліджували в багатьох роботах [2—16]. Зазвичай розглядають опір руху дислокації, що створюється розчиненими атомами, які знаходяться в безпосередній близькості від площини ковзання. Виділяють два випадки взаємодії дислокації з перешкодами в площині ковзання. Перший випадок, коли ці перешкоди можна розглядати як точкові, що справедливо для дуже розведених твердих розчинів, в яких мало розчинених атомів, що розташовані на великій відстані один від одного [2]. Другий випадок, коли перешкоди мають скінченний діапазон взаємодії з дислокацією, тобто певний розмір у напрямку руху дислокації, і статистика взаємодії дислокації з такими перешкодами інша, ніж у першому випадку [3]. Якщо розрахувати з перших принципів енергії взаємодії розчинених атомів з дислокацією, то можливо далі визначити границю плинності і активаційний об'єм неупорядкованих твердих розчинів з довільними кількістю компонентів та їх складом [4]. Термоактиваційний аналіз формування границі плинності в бінарних та полікомпонентних твердих розчинах, зокрема в високоентропійних сплавах, було проведено в роботах [6—8]. У роботах [9—11] розглянуто різні способи визначення дисторсії ґраток та границі плинності в багатокомпонентних сплавах.

У роботах [13, 14] поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві розраховано прямим сумуванням внесків від окремих розчинених атомів, які розташовані в вузлах кристалічних ґраток навколо цієї площини. За таким методом зсувні напруження розраховуються у багатьох точках вздовж прямої, яка паралельна напрямку руху дислокації в площині ковзання. Зазначимо, що у цьому випадку задається розташування великої кількості вузлів кристалічних ґраток відносно площини ковзання і цієї прямої. Кожному вузлу випадковим чином присвоюється конкретний вид розчиненого атому залежно від їх концентрації у твердому розчині. Тобто кожен вузол кристалічних ґраток отримує певні невідповідності атомних розмірів та модулів пружності відносно “середнього” матеріалу — віртуальної матриці-розчинника і може робити свій внесок в зсувні напруження в різних точках площини ковзання. Оскільки розчинені атоми в цьому моделюванні розташовані випадково, то можливими є багато реалізацій такого розташування. Слід зазначити також, що для визначення основних параметрів, стандартного відхилення і довжини кореляції, поля стохастичних зсувних напружень треба розрахувати для подальшого аналізу зсувні напруження в достатній кількості точок на площині ковзання для достатньої кількості реалізацій. Крім того, слід зазначити, що стандартне відхилення і довжину кореляції потрібно окремо визначити для коротко- і довгохвильової компонент поля. Тобто основними є

чотири параметри — два стандартних відхилення і дві довжини кореляції. Це призводить до того, що метод прямого сумування внесків від окремих розчинених атомів є трудомістким і потребує великих витрат часу. Таким чином, актуальною є спроба розробки іншого, більш швидкого і економного, методу визначення основних параметрів розподілу випадкових зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві.

Мета даної роботи — розробити статистичний метод визначення стандартних відхилень та довжин кореляції коротко- і довгохвильової компонент поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві і за допомогою комп'ютерного моделювання провести верифікацію запропонованого методу шляхом його застосування до реального багатокомпонентного сплаву, який являє собою твердий розчин заміщення.

Алгоритм розрахунку

Зсувне напруження, що діє на прямолінійний відрізок крайової дислокації з координатами центра x_u та z_u (локальна точка в площині ковзання, де визначається зсувне напруження) з боку розчинених атомів у багатокомпонентному сплаві, і його градієнт вздовж осі x в цій же точці можуть бути розраховані прямим сумуванням внесків від атомів, які розташовані в вузлах кристалічних ґраток з координатами x_{hkm} , y_{hkm} , z_{hkm} навколо цієї точки [13, 14]. З урахуванням деталей розрахунків зсувного напруження, що наведені в роботах [13, 14], зсувне напруження τ_s і його градієнт g_x можуть бути представлені у вигляді

$$\tau_s = \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m \left[\frac{Gp'_{hkm} V_a}{b\Delta z} \Delta + \frac{Gq'_{hkm} V_a}{b\Delta z} \mathbf{H} \right] \right) \right), \quad (1)$$

$$g_x = \frac{\partial \tau_s}{\partial x} = \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m \left[\frac{Gp''_{hkm} V_a}{b\Delta z} \Delta + \frac{Gq''_{hkm} V_a}{b\Delta z} \mathbf{H} \right] \right) \right),$$

де G — модуль зсуву сплаву; b — модуль вектора Бюргерса; V_a — об'єм, який займає один атом в сплаві ($V_a = b^3 / \sqrt{2}$ для сплаву з ГЦК ґратками, $V_a = 4b^3 / (3\sqrt{3})$ для сплаву з ОЦК ґратками); Δz — довжина пробного відрізка крайової дислокації; h , k та m — індекси, що задають координати вузлів, в яких розташовані розчинені атоми, вздовж осей x (в площині ковзання в напрямку руху дислокації), y (перпендикулярно площині ковзання) та z (в площині ковзання вздовж дислокації) [13]; h — номер площини, що перпендикулярна вектору Бюргерса, в якій розташований вузол; k — номер атомного ряду в площині, в якому розташований вузол; m — номер вузла в атомному ряду, і

$$p'_{hkm} = 3 \frac{p_{hkm}^{(1)} - p_{hkm}^{(2)}}{G\Delta x}, \quad (2)$$

$$q'_{hkm} = \frac{q_{hkm}^{(1)} - q_{hkm}^{(2)}}{G\Delta x},$$

$$p''_{hkm} = \frac{6 p_{hkm}^{(1)} - 3(p_{hkm}^{(2)} + p_{hkm}^{(3)})}{G \Delta x^2},$$

$$q''_{hkm} = \frac{2q_{hkm}^{(1)} - q_{hkm}^{(2)} - q_{hkm}^{(3)}}{G\Delta x^2},$$

де Δx — малий крок по координаті x в напрямку, що перпендикулярний пробному прямолінійному відрізку крайової дислокації (раціонально прийняти $\Delta x = b/100$ [13, 14]); $p_{hkm}^{(j)}$ — тиск, що створює пробний відрізок крайової дислокації з координатами центра z_u та x_u ($j = 1$); $x_u + \Delta x$ ($j = 2$), $x_u - \Delta x$ ($j = 3$) в точці з координатами x_{hkm} , y_{hkm} , z_{hkm} та $q_{hkm}^{(j)}$ — густина енергії пружних деформацій в цій точці. Тиск та густина виражаються наступними співвідношеннями [13]:

$$p_{hkm}^{(j)} = -\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3},$$

$$q_{hkm}^{(j)} = \frac{(p_{hkm}^{(j)})^2}{2K} + \frac{\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2}{2G},$$
(3)

де σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz} — компоненти тензора напружень, що створюються пробним відрізком крайової дислокації в точці знаходження розчиненого атому (деталі розрахунку компонент тензору напружень наведено в роботі [13]); K — модуль об'ємного стиску сплаву; Δ та \mathbf{H} — дискретні випадкові величини, які визначають невідповідності атомних розмірів та модулів пружності розчиненого атому в вузлі кристалічних ґраток в порівнянні з атомами віртуальної матриці-розчинника відповідно. Оскільки в даному вузлі з певною ймовірністю може знаходитися атом будь-якого компонента, то для кожного вузла ці величини приймають своє значення.

Якщо сумувати в (1) тільки внески від розчинених атомів у двох найближчих до площини ковзання атомних площинах з кожного боку, тоді це буде так звана короткохвильова компонента поля зсувних напружень τ_{s1} і її градієнт g_{x1} . Довгохвильова компонента поля зсувних напружень τ_{s2} і її градієнт g_{x2} у цьому випадку легко розраховуються з рівнянь

$$\tau_{s2} = \tau_s - \tau_{s1} \quad \text{і} \quad g_{x2} = g_x - g_{x1}. \quad (4)$$

Слід враховувати також область ядра дислокації, в якому порушується пружна поведінка матеріалу. Це означає, що внесками від розчинених атомів, які лежать в області ядра ($\sqrt{(x_{hkm} - x_u)^2 + y_{hkm}^2} \leq r_c$, $|z_{hkm} - z_u| \leq \Delta z/2$, де r_c — радіус ядра дислокації; $r_c \approx b$ для ГЦК ґраток), в зсувне напруження в площині ковзання і в його градієнт можна знехтувати, тобто прирівняти нулю відповідні доданки в формулах (1). Внески від розчинених атомів, що достатньо віддалені від точки визначення зсувних напружень на відстань, більшу за деяку критичну, стають дуже малими і ними можна також

знехтувати. Таким чином, сумування слід вести, враховуючи тільки вузли, що знаходяться на відстані, яка менше за критичну [14].

Величини Δ і \mathbf{H} можуть приймати відповідно значення δ_i і η'_i з ймовірністю, яка дорівнює X_i , де $\delta_i = (1/s_{lat})(ds_{lat}/dX_i)$ — невідповідність розмірів атомів компонента i в порівнянні з атомами віртуальної матриці-розчинника; s_{lat} — середня відстань між найближчими атомами в сплаві ($s_{lat} = b$); ($\eta'_i = \eta_i/(1+0,5|\eta_i|)$); $\eta_i = (1/G)(dG/dX_i)$ — невідповідність модулів пружності атомів компонента i в порівнянні з атомами матриці-розчинника [13, 14]; X_i — атомна частинка компонента i (зазначимо, що сума атомних частинок всіх компонентів дорівнює одиниці). Математичні очікування дискретних випадкових величин Δ і \mathbf{H} будуть з міркувань балансу позитивних і негативних невідповідностей дорівнювати нулю: $E(\Delta) = \sum_{i=1}^N \delta_i X_i = 0$ і $E(\mathbf{H}) = \sum_{i=1}^N \eta'_i X_i = 0$. Дисперсії величин Δ і \mathbf{H} будуть у цьому випадку $D(\Delta) = \sum_{i=1}^N \delta_i^2 X_i$ і $D(\mathbf{H}) = \sum_{i=1}^N \eta_i'^2 X_i$.

Зсувне напруження в локальній точці площини ковзання і його градієнт у багатокомпонентному сплаві будуть нормально розподіленими випадковими величинами тому, що у відповідності до (1) вони будуть сумами великої кількості випадкових величин Δ та \mathbf{H} , кожна з яких помножена на відповідну константу. Для зсувного напруження це підтверджено при його розрахунку прямим сумуванням внесків від окремих розчинених атомів [13]. Математичні очікування і дисперсії таких нормально розподілених величин будуть дорівнювати відповідно сумам математичних очікувань і дисперсій підсумованих випадкових величин, які помножені на певні коефіцієнти. Математичні очікування зсувного напруження і його градієнта будуть дорівнювати нулю в силу того, що $E(\Delta) = 0$ і $E(\mathbf{H}) = 0$, тобто всі складові математичного очікування і їх сума в тому числі дорівнюють нулю. Для зсувного напруження це також підтверджено прямим сумуванням внесків і відповідає умові нульового балансу зсувних напружень в площині ковзання [13]. Дисперсії зсувного напруження і його градієнта будуть відповідно

$$D(\tau_s) = s^2 = \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m \left[\left(\frac{Gp'_{hkm} V_a}{b\Delta z} \right)^2 D(\Delta) + \left(\frac{Gq'_{hkm} V_a}{b\Delta z} \right)^2 D(\mathbf{H}) \right] \right) \right), \quad (5)$$

$$D(g_x) = s_g^2 = \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m \left[\left(\frac{Gp''_{hkm} V_a}{b\Delta z} \right)^2 D(\Delta) + \left(\frac{Gq''_{hkm} V_a}{b\Delta z} \right)^2 D(\mathbf{H}) \right] \right) \right),$$

де S і S_g — стандартні відхилення зсувного напруження і його градієнта відповідно. Ці відхилення, а також по аналогії відповідні відхилення для коротко- та довгохвильової компонент та їх градієнтів, s_1, s_{g1}, s_2, s_{g2}

можна виразити з (5) після деяких перетворень з урахуванням визначення $D(\Delta)$ і $D(\mathbf{H})$ у вигляді

$$\begin{aligned}
 s &= \frac{GV_a}{b\Delta z} Q^{0.5} \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_s^2 \delta_i^2) X_i \right]^{0.5}, \\
 s_g &= \frac{GV_a}{b\Delta z} Q^{0.5} \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_g^2 \delta_i^2) X_i \right]^{0.5}, \\
 s_1 &= \frac{GV_a}{b\Delta z} Q_1^{0.5} \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_{s1}^2 \delta_i^2) X_i \right]^{0.5}, \\
 s_{g1} &= \frac{GV_a}{b\Delta z} Q_1^{0.5} \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_{g1}^2 \delta_i^2) X_i \right]^{0.5}, \\
 s_2 &= \frac{GV_a}{b\Delta z} Q_2^{0.5} \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_{s2}^2 \delta_i^2) X_i \right]^{0.5}, \\
 s_{g2} &= \frac{GV_a}{b\Delta z} Q_2^{0.5} \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_{g2}^2 \delta_i^2) X_i \right]^{0.5},
 \end{aligned} \tag{6}$$

де

$$\begin{aligned}
 \alpha_s &= (P' / Q')^{0.5} \text{ та } \alpha_g = (P'' / Q'')^{0.5}, \\
 \alpha_{s1} &= (P'_1 / Q'_1)^{0.5} \text{ та } \alpha_{g1} = (P''_1 / Q''_1)^{0.5}, \\
 \alpha_{s2} &= (P'_2 / Q'_2)^{0.5} \text{ та } \alpha_{g2} = (P''_2 / Q''_2)^{0.5},
 \end{aligned} \tag{7}$$

$$P' = \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m (p'_{hkm})^2 \right) \right) \text{ та } P'' = \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m (p''_{hkm})^2 \right) \right), \tag{8}$$

і

$$Q' = \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m (q'_{hkm})^2 \right) \right) \text{ та } Q'' = \sum_h \left(\sum_k \left(\sum_m (q''_{hkm})^2 \right) \right). \tag{9}$$

Параметри P'_1 , Q'_1 , P''_1 та Q''_1 для короткохвильової компоненти можна отримати, якщо в формулах (8) і (9) підсумовувати, враховуючи тільки розчинені атоми у двох найближчих до площини ковзання атомних площинах з кожного боку. Параметри для довгохвильової компоненти розраховують як $P'_2 = P' - P'_1$, $Q'_2 = Q' - Q'_1$, $P''_2 = P'' - P''_1$ та $Q''_2 = Q'' - Q''_1$.

Щоб повністю охарактеризувати поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, слід також визначити довжини кореляції короткохвильової w_1 та довгохвильової w_2 його компонент, тобто середні лінійні розміри ділянки, де короткохвильова компонента має один знак, і ділянки, де довгохвильова компонента має один знак. Для цього

розглянемо розподіл позитивних зсувних напружень вздовж осі x в середині такої ділянки незалежно від компоненти. Схематично дві окремих реалізації такого розподілу зсувних напружень як випадкових величин показано на рис. 1, а. Для аналізу середні точки ділянок (точки, які розташовані точно посередині між кінцевими точками ділянок) суміщені і цю точку вибрано за початок координат. По-перше, для цих реалізацій, а також всіх подібних інших, в кінцевих точках зсувні напруження завжди дорівнюють нулю. По-друге, для різних реалізацій розмір ділянок і максимальні напруження на ділянках можуть бути різними. По-третє, різні реалізації можуть мати декілька локальних максимумів і бути абсолютно несиметричними. Але можна визначити усереднений розподіл напружень на таких ділянках. Розмір ділянки такого усередненого розподілу буде за визначенням дорівнювати середньому лінійному розміру ділянки, де напруження позитивні, тобто довжині кореляції $w = \langle l_j \rangle$, де l_j — розмір ділянки j -ї реалізації. Якщо зсувні напруження, як випадкові величини, мають нормальний розподіл з нульовим математичним очікуванням і стандартним відхиленням s , то вибірка тільки позитивних значень з них має середнє значення, яке і буде середнім значенням напруження для нашого усередненого розподілу, $m_s = \langle \tau_j \rangle = s\sqrt{2/\pi}$. Якщо ввести приведені координати $(x_j/l_j)w$ в кожній реалізації, то точки всіх реалізацій будуть відображені на ділянку середнього розміру w . Далі можна зробити усереднення напружень по всіх реалізаціях для кожної координати $(x_j/l_j)w$ і отримати усереднений розподіл позитивних напружень на ділянці розміром w (рис. 1, б). У кінцевих точках ділянки напруження усередненого розподілу будуть дорівнювати нулю, а далі від кожної кінцевої точки напруження мають підвищуватися в бік середини ділянки, оскільки середнє значення напруження для усередненого розподілу більше нуля. Це підвищення буде симетричним відносно середньої точки ділянки тому, що частини ділянки з обох боків середньої точки абсолютно рівноправні і не мають ніяких переваг одна перед одною в силу однорідності статистичного розподілу напружень на площині ковзання. Таким чином, усереднений розподіл буде гладкою кривою, симетричною відносно максимуму в середній точці ділянки. Зазначимо, що середнє значення градієнта для усередненого розподілу буде дорівнювати нулю, тому що напруження мають піднятися від нуля в одній кінцевій точці і опуститися до нуля в іншій. Зміну градієнта вздовж ділянки усередненого розподілу показано на рис. 1, в. Якщо усереднити тільки позитивні значення градієнта, то аналогічно до напружень будемо мати середнє значення $m_g = s_g\sqrt{2/\pi}$. Усереднений розподіл можна апроксимувати прийнятною функцією, наприклад $\tau_s = A_s \cos(\pi x/w)$ чи $\tau_s = A_s(1 - |2x/w|^n)$, де показник $n > 1$. Для цих функцій маємо $A_s = \pi m_s/2$ та $A_s = (n+1)m_s/n$ відповідно (рис. 1, б). Якщо порахувати градієнт для цих функцій і усереднити на ділянці, де він

позитивний, то отримуємо єдиний результат $m_g = 2A_s / w$ (рис. 1, в), звідки легко отримати вирази для w і, по аналогії, для w_1 і w_2 для обох функцій апроксимації:

$$\begin{aligned} w &= \pi s / s_g, \quad w = 2(n+1)s / (ns_g), \\ w_1 &= \pi s_1 / s_{g1}, \quad w_1 = 2(n+1)s_1 / (ns_{g1}), \\ w_2 &= \pi s_2 / s_{g2}, \quad w_2 = 2(n+1)s_2 / (ns_{g2}). \end{aligned} \quad (10)$$

Слід зазначити, що для $n = 2$ обидві функції дають дуже близькі результати. Зазначимо також, що параметри s_1 , s_{g1} , s_2 та s_{g2} залежать від Δz . Окрім цього, знайдено, що повинно виконуватись $\Delta z = 2w_2$ [15, 16]. Якщо врахувати формули (10), то можна, зокрема, отримати рівняння $w_2 = \pi s_2 (2w_2) / s_{g2} (2w_2)$, яке дозволяє визначити значення Δz та w_2 .

Параметри поля напружень можуть залежати також від координат x_u та z_u . У цьому випадку слід врахувати, що початок координат для зручності можна вибрати так, щоб він лежав у площині ковзання і прямо над ним (у позитивному напрямку осі y) знаходився найближчий вузол кристалічних ґраток. Згідно з періодичністю кристалічних ґраток результати будуть повторюватись з періодом b (відстань між вузлами ґраток у напрямку руху дислокації) для x_u і з періодами $\sqrt{3}b$ чи $2\sqrt{2}b$

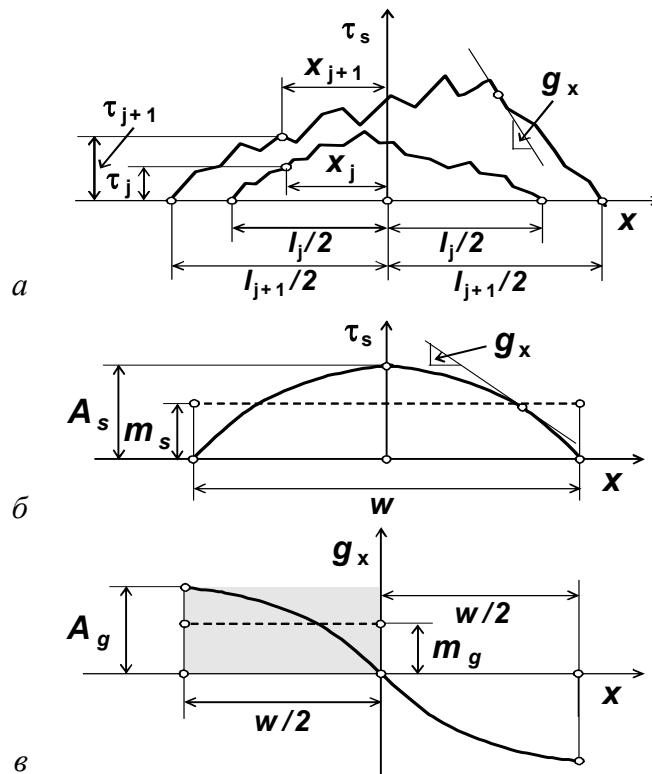


Рис. 1. Схеми, що показують дві окремі реалізації розподілу позитивних зсувних напружень як випадкових величин (а), усереднений розподіл (б) і градієнт усередненого розподілу (в).

(відстань між вузлами вздовж дислокації для ГЦК та ОЦК ґраток відповідно) для z_u . Тому достатньо провести усереднення основних параметрів поля зсувних напружень в локальній області площини ковзання, де $0 \leq x_u \leq b$ і $0 \leq z_u \leq \sqrt{3}b$ чи $0 \leq z_u \leq 2\sqrt{2}b$, щоб отримати усереднений результат для всієї площини.

Результати статистичного методу визначення параметрів поля зсувних напружень, що описані, можна застосувати до складових границі плинності багатоконпонентного сплаву. Напруження, які необхідні для атермічного подолання бар'єрів від коротко- та довгохвильової компонент поля зсувних напружень з урахуванням результатів [16] і формул (6), якщо прийняти $\Delta z = 2w_2$ [15, 16], будуть, відповідно,

$$\begin{aligned} \tau_{y1} &= G \left(\frac{2w_1}{\alpha\beta b} \right)^{1/3} \left(\frac{s_1(2w_2)}{G} \sqrt{\frac{w_2}{w_1}} \right)^{4/3} = A_1 G \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_{s1}^2 \delta_i^2) X_i \right]^{2/3}, \\ \tau_{y2} &= G \left(\frac{2w_2}{\alpha\beta b} \right)^{1/3} \left(\frac{s_2(2w_2)}{G} \right)^{4/3} = A_2 G \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_{s2}^2 \delta_i^2) X_i \right]^{2/3}, \end{aligned} \quad (11)$$

де

$$A_1 = \left(\frac{b^7 Q_1'^2}{32 \alpha\beta w_1 w_2^2} \right)^{1/3} \quad \text{та} \quad A_2 = \left(\frac{b^7 Q_2'^2}{32 \alpha\beta w_2^3} \right)^{1/3} \quad (12)$$

для сплаву з ГЦК ґратками і

$$A_1 = \left(\frac{b^7 Q_1'^2}{22.78 \alpha\beta w_1 w_2^2} \right)^{1/3} \quad \text{та} \quad A_2 = \left(\frac{b^7 Q_2'^2}{22.78 \alpha\beta w_2^3} \right)^{1/3} \quad (13)$$

для сплаву з ОЦК ґратками; α — коефіцієнт, менший за 1/2, який визначає лінійний натяг лінії дислокації ($\alpha = 0,123$ для сплаву CrCoNiFeMn [4]); β — коефіцієнт, який залежить від конкретної форми випуклості на лінії дислокації (для синусоїдальної форми, яка підтверджується моделюванням, $\beta = 2\pi \approx 6,28$ [15]).

Результати обчислювального експерименту та їх обговорення

Для верифікації статистичний метод визначення стандартних відхилень та довжин кореляції коротко- і довгохвильової компонент поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання було застосовано до багатоконпонентного сплаву CrCoNiFeMn, який є твердим розчином заміщення, що має ГЦК ґратки. Зокрема, цей сплав було обрано тому, що для нього параметри s_1 , w_1 , s_2 та w_2 були визначені в роботі [14] із аналізу розподілів зсувних напружень в площині ковзання, які розраховані методом прямого сумування внесків від розчинених атомів. З метою верифікації запропонованого в цій роботі методу вибрано вихідні параметри для проведення розрахунків як у роботі [14]: модуль зсуву $G = 81$ ГПа,

модуль об'ємного стиску $K = 176$ МПа, коефіцієнт Пуассона $\nu = 0,3$, вектор Бюргерса $b = 0,25$ нм, атомний об'єм $V_a = 0,011$ нм³. Невідповідності атомних розмірів та модулів пружності наведено у таблиці [14].

Невідповідності атомних розмірів δ_i та модулів пружності η_i , що були використані для визначення основних параметрів поля зсувних напружень в сплаві CrCoNiFeMn

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

Критична відстань, на якій ще слід враховувати внесок в зсувне напруження від розчиненого атому, була визначена рівною приблизно 4,75 нм [13, 14]. Отже, якщо розраховувати зсувні напруження від багатьох розчинених атомів в певній точці площини ковзання, достатньо розглядати тільки вплив атомів, які знаходяться на відстані $\leq 4,75$ нм від цієї точки. Суми $P_1', Q_1', P_1'', Q_1'', P_2', Q_2', P_2''$ та Q_2'' слід розраховувати також з такими обмеженнями.

Залежності параметрів s_1, w_1, s_2 та w_2 від координати x_u в діапазоні $0 \leq x_u \leq b$ були визначені за формулами (6) та (10) при $\Delta z = 1,94$ нм [14, 16] для різних характерних значень координати z_u із діапазону $0 \leq z_u \leq \sqrt{3}b$ (рис. 2). Залежності s_1 та w_1 симетричні відносно $x_u = 0,125$ нм (рис. 2, а, б), тому що така відстань є між атомними площинами, які перпендикулярні вектору Бюргерса, в ГЦК ґратках в обраному нами сплаві. Самі атоми вздовж прямої, паралельної вектору Бюргерса, йдуть з кроком, що дорівнює модулю цього вектора, тобто 0,25 нм. Стрибкоподібні зміни параметрів за деяких значень x_u пояснюються тим, що певні вузли кристалічних ґраток входять чи виходять з зони ядра дислокації, а їх внески враховуються чи не враховуються в сумах при зміні розташування точки, де розраховуються зсувні напруження, відносно кристалічних ґраток. Усереднені по x_u і z_u параметри $s_1 = 180$ МПа та $w_1 = 0,38$ нм добре корелюють з середніми значеннями $s_1 = 191$ МПа та $w_1 = 0,38$ нм, що визначені в роботі [14] із аналізу розподілів зсувних напружень в площині ковзання, які розраховані методом прямого сумування внесків від розчинених атомів. Слід також зазначити, що діапазони мінімальне—максимальне значення для s_1 165—208 МПа і для w_1 0,21—0,54 нм в запропонованому методі також непогано корелюють з аналогічними діапазонами 166—234 МПа і 0,32—0,48 нм у роботі [14]. Співвідношення для s_2 та w_2 демонструють практичну незалежність цих параметрів від x_u і z_u (рис. 2, в, г). Це пояснюється тим, що s_2 та w_2

визначаються більш віддаленими від площини ковзання і від ядра дислокації атомами. Усереднені параметри $s_2 = 71$ МПа та $w_2 = 1$ нм також добре корелюють з середніми значеннями $s_2 = 72$ МПа та $w_2 = 0,97$ нм, що були визначені у роботі [14].

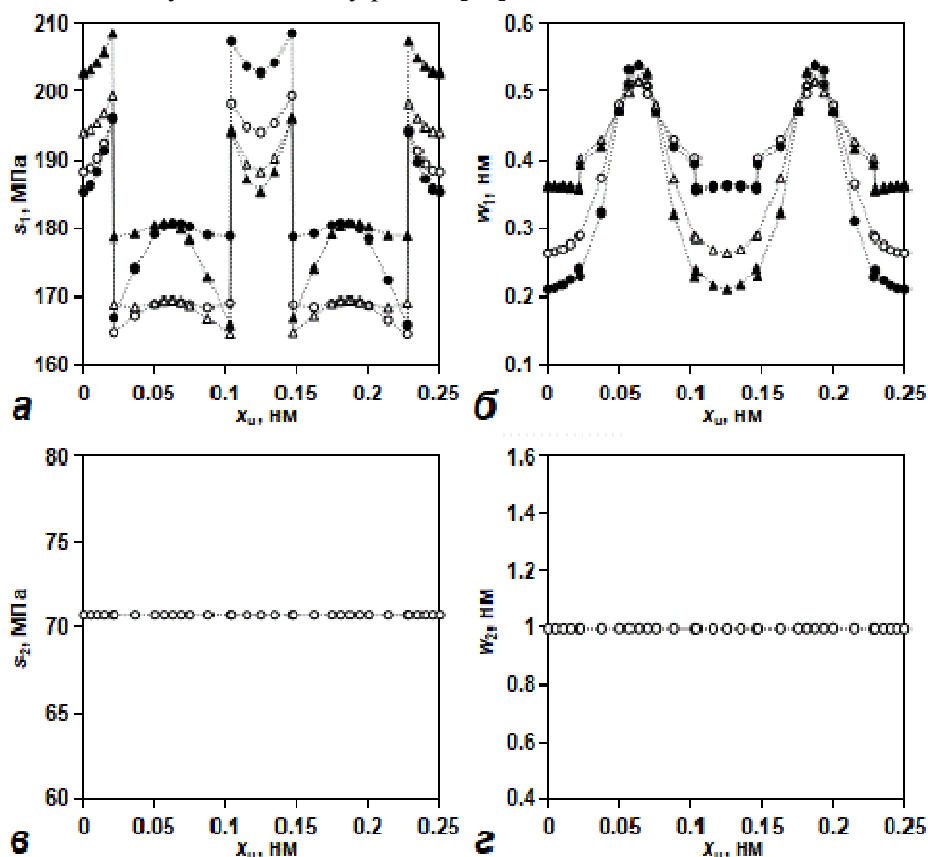


Рис. 2. Залежності стандартних відхилень коротко- (а) і довгохвильової (б) компонент поля зсувних напружень, а також їх довжин кореляції (б, г) від координати точки x_u в площині ковзання, де визначається зсувне напруження.

Пусті кола відповідають $z_u = 0$ нм, чорні — $z_u = 0,14$ нм, пусті трикутники — $z_u = 0,22$ нм, чорні — $z_u = 0,36$ нм.

Зазначимо, що в (11) є об'єднання невідповідностей атомних розмірів і модулів пружності у спосіб, подібний до того, що запропонований в [3], але іншим шляхом, ніж у тій роботі. У роботі [3] використовується певна комбінація цих невідповідностей, яка в [13] названа середньою дисторсією кристалічних ґраток

$$\chi = \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_0^2 \delta_i^2) X_i \right]^{2/3}, \quad (14)$$

де α_0 — константа, яка для крайових дислокацій дорівнює 16 [3, 5, 9, 13]. У формулах (11) маємо подібні комбінації, які можна назвати відповідно

ефективними дисторсіями ґраток для коротко- та довгохвильової компонент:

$$\chi_{s1} = \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_{s1}^2 \delta_i^2) X_i \right]^{2/3} \text{ та } \chi_{s2} = \left[\sum_{i=1}^N (\eta_i'^2 + \alpha_{s2}^2 \delta_i^2) X_i \right]^{2/3}. \quad (15)$$

Формули (15) відрізняються від (14) тим, що в них замість α_0 стоять α_{s1} і α_{s2} , які можуть бути розраховані за формулами (7). Усереднені по характерній області $0 \leq x_u \leq b$ і $0 \leq z_u \leq \sqrt{3}b$ ці параметри будуть $\alpha_{s1} = 39$ і $\alpha_{s2} = 107$, а відповідні їм $\chi_{s1} = 0,36$ і $\chi_{s2} = 1,32$ для сплаву CrCoNiFeMn. Зазначимо, що в цьому випадку $\chi = 0,14$. Константа α_0 визначається як відношення сили взаємодії дислокації з розчиненим атомом, що викликана невідповідністю атомних розмірів, до сили взаємодії, що викликана невідповідністю модулів пружності [2]. У роботі [2] знайдено, що чим далі розчинений атом розташований від площини ковзання, тим більше це відношення, тому що сила взаємодії, яка викликана невідповідністю модулів пружності, зменшується з відстанню від площини ковзання швидше, ніж сила, яка викликана невідповідністю атомних розмірів. Якщо брати до уваги тільки найближчі до площини ковзання розчинені атоми, то це відношення не може бути менше 16 для крайової дислокації, що і визначає α_0 в роботах [3, 5, 9, 13]. Параметри α_{s1} і α_{s2} мають той же самий сенс, що й α_0 , а їх значно більші значення зумовлені тим, що для розрахунку беруть більш віддалені від площини ковзання розчинені атоми, ніж для розрахунку α_0 . У цьому випадку α_{s2} помітно більше α_{s1} , тому що для формування довгохвильової компоненти поля напружень приймають участь більш віддалені від площини ковзання атоми, ніж для формування короткохвильової компоненти. Таким чином, запропонований у цій роботі метод виявляє існування різних ефективних дисторсій ґраток для коротко- та довгохвильової компонент поля зсувних напружень.

Атермічна компонента твердорозчинного зміцнення розглядалася в роботі [9] у вигляді

$$\Delta\sigma_\mu = AG\chi, \quad (16)$$

де A — емпірична константа, середнє значення якої для багатокомпонентних сплавів з ГЦК ґратками було отримане після обробки експериментальних даних для багатьох сплавів і дорівнювало $0,0026 \pm \pm 0,005$. З іншого боку, маємо $\Delta\sigma_\mu = M\tau_{y2}$ [16], де M — фактор Гейлора ($M = 3,06$ для матеріалу з ГЦК ґратками). Якщо враховувати (11), (15) і (16), то буде справедливим рівняння

$$A = MA_2\chi_{s2} / \chi, \quad (17)$$

де A_2 визначається за формулою (12). У нашому випадку $A_2 = 0,000133$ для сплаву CrCoNiFeMn, тоді за формулою (17) $A = 0,0038$, що співвимірне зі значенням, яке наведено в роботі [9]. Слід зазначити, що

значення χ_{s2} та A_2 будуть також залежати від коефіцієнта Пуассона сплаву через компоненти тензора напружень в точці розташування розчиненого атому. Чим більше коефіцієнт Пуассона, тим більше χ_{s2} та A_2 . Тобто для кожного сплаву можливе своє індивідуальне значення A_2 . У роботі [9] константа A визначалася усередненням даних для різних сплавів з різними коефіцієнтами Пуассона, а в цій роботі розраховувалася для одного конкретного сплаву. Тому очікувати, що ці два значення будуть повністю збігатися, неможна і навіть їх співвимірність вже доводить, що запропонований статистичний метод дає реалістичні результати. Окрім цього, треба зробити висновок, що єдиної константи A для всіх сплавів не існує і для кожного сплаву вона має своє індивідуальне значення. Суми $P'_1, Q'_1, P''_1, Q''_1, P'_2, Q'_2, P''_2$ та Q''_2 , які визначають основні параметри поля зсувних напружень, також індивідуальні для кожного сплаву, але вони не є випадковими величинами, як зсувні напруження в площині ковзання, і не залежать від конкретної реалізації розташування розчинених атомів. Це є перевагою запропонованого методу в порівнянні з методом прямого сумування внесків від розчинених атомів.

Висновки

Розроблено метод, за яким невідповідності атомних розмірів та модулів пружності в вузлах кристалічних ґраток розглядаються як дискретні випадкові величини з математичним очікуванням, що дорівнює нулю, і певною ненульовою дисперсією. Визначення їх дисперсії дозволяє отримати аналітичні вирази для стандартних відхилень та довжин кореляції коротко- і довгохвильової компонент поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентному сплаві, що створюються розчиненими атомами навколо неї. Це дозволяє суттєво скоротити обсяги розрахунків для визначення параметрів поля зсувних напружень. Розроблений метод застосований для розрахунку цих параметрів в сплаві CrCoNiFeMn. Розраховані параметри добре корелювали з аналогічними параметрами, що визначені із аналізу розподілів зсувних напружень в площині ковзання, які розраховані методом прямого сумування внесків від розчинених атомів. Додатково знайдено, що існують окремі ефективні дисторсії кристалічних ґраток для коротко- та довгохвильової компонент, які відрізняються від середньої дисторсії, котра була запропонована раніше. Окрім цього, не існує єдиної емпіричної константи для всіх сплавів для визначення границі плинності через модуль зсуву і середню дисторсію. Але запропонований метод дозволяє встановити основні параметри поля зсувних напружень в конкретному багатокомпонентному сплаві, які можуть бути використані в подальшому для розрахунку його границі плинності.

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. Fleischer R.L. Substitutional solution hardening. *Acta Metallurgica.* 1963. Vol. 11.

- P. 203—209. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(63\)90213-X](https://doi.org/10.1016/0001-6160(63)90213-X)
3. Labusch R. A Statistical theory of solid solution hardening. *Phys. Stat. Sol.* 1970. Vol. 41. P. 659—669. <https://doi.org/10.1002/pssb.19700410221>
 4. 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>
 5. 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>
 6. Podolskiy A.V., Tabachnikova E.D., Voloschuk V.V., Gorban V.F., Krapivka N.A., Firstov S.A. 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>
 7. Фирстов С.А., Рогуль Т.Г., Крапивка Н.А., Чугунова С.И. Термоактивационный анализ температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ОЦК решеткой. *Металофіз. новітні технології*. 2018. Т. 40. С. 219—234. <https://doi.org/10.15407/mfint.40.02.0219>
 8. Фирстов С.А., Рогуль Т.Г. Термоактивационный анализ температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ГЦК решеткой. *Металофіз. новітні технології*. 2017. Т. 39. С. 33—48. <https://doi.org/10.15407/mfint.39.01.0033>
 9. Lugovy M., Slyunyaev V., Brodnikovskyy M. Solid solution strengthening in multicomponent fcc and bcc alloys: Analytical approach. *Progress in Natural Science: Mater. Int.* 2021. Vol. 31. P. 95—104. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.11.006>
 10. Луговой М.І., Слюняев В.М., Бродніковський М.П., Фірстов С.О. Розрахунок твердорозчинного зміцнення багатоконпонентних жароміцних сплавів. *Електронна мікроскопія і прочність матеріалів*. Київ: ИПМ НАН України. 2017. Вып. 23. С. 3—9.
 11. Луговой Н.И., Слюняев В.Н., Бродниковский Н.П. Принцип аддитивности термической и атермической компонент твердорастворного упрочнения в многокомпонентных сплавах. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. Киев: ИПМ НАН Украины. 2019. Вып. 25. С. 26—34.
 12. Луговой М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Форма лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ИПМ НАН України. 2021. Вип. 2. С. 19—34. <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
 13. 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. № 3. С. 24—37. <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.024>
 14. Луговой М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Дві компоненти поля зсувних напружень в площині ковзання в багатоконпонентних сплавах. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ИПМ НАН України. 2022. № 4/5. С. 12—24. <https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.012>
 15. Луговой М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Еволюція форми лінії дислокації в багатоконпонентному сплаві під навантаженням. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ИПМ НАН України. 2022. № 4/5. С. 36—50. <https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.036>
 16. Луговой М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Температурна залежність границі плинності в термінах двох компонент поля зсувних напружень в площині ковзання в сплаві CrCoNiFeMn. *Успіхи матеріалознавства*. Київ:

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. Fleischer, R. L. (1963). Substitutional solution hardening. *Acta Metallurgica*, Vol. 11, pp. 203—209. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(63\)90213-X](https://doi.org/10.1016/0001-6160(63)90213-X)
3. Labusch, R. (1970). A statistical theory of solid solution hardening. *Phys. Stat. Sol.*, Vol. 41, pp. 659—669. <https://doi.org/10.1002/pssb.19700410221>
4. 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>
5. 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>
6. Podolskiy, A. V., Tabachnikova, E. D., Voloschuk, V. V., Gorban, V. F., Krapivka, N. A., & Firstov, S. A. (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>
7. Firstov, S. O., Rogul, T. G., Krapivka, N. A., & Chugunova, S. I. (2018). Thermoactivation analysis of temperature dependence of a flow stress in solid solutions with a B.C.C. lattice. *Metallofiz. Noveishie Tekhnologii*, Vol. 40, pp. 219—234 [in Russian]. <https://doi.org/10.15407/mfint.40.02.0219>
8. 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>
9. 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>
10. Lugovy, M. I., Slyunyayev, V. N., Brodnikovskyy, M. P. & 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].
11. Lugovy, M. I., Slyunyayev, V. N. & Brodnikovskyy, M. P. (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].
12. Lugovy, M. I., Verbylo, D. G. & Brodnikovskyy, M. P. (2021). Shape of dislocation line in stochastic shear stress field. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, No. 2, pp. 19—34 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
13. Lugovy, M. I., Verbylo, D. G. & Brodnikovskyy, M. P. (2021). Modelling of shear stress field in glide plane in substitutional solid solutions. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, No. 3, pp. 24—37 [in Ukrainian]. <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.024>
14. Lugovy, M. I., Verbylo, D. G. & Brodnikovskyy, M. P. (2022). Two components of shear stress field in glide plane in multicomponent alloys. *Uspihy*

materialoznavstva, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, No. 4/5, pp. 12—24 [in Ukrainian].
<https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.012>

15. Lugovy, M. I., Verbylo, D. G. & Brodnikovskyy, M. P. (2022). Evolution of dislocation line shape in multicomponent alloys under loading. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, No. 4/5, pp. 36—50 [in Ukrainian].
<https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.036>
16. Lugovy, M. I., Verbylo, D. G. & Brodnikovskyy, M. P. (2023). Temperature dependence of yield strength in terms of two components of stochastic shear stress field in glide plane in CrCoNiFeMn alloy. *Uspihy materialoznavstva*, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, No. 6, pp. 15—31 [in Ukrainian].
<https://doi.org/10.15407/materials2023.06.015>

Statistical method for determining shear stress field parameters in glide plane in multicomponent 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

A method has been developed in which atomic sizes misfit and elastic modulus misfit at crystal lattice nodes are considered as discrete random variables and the definition of their dispersion allows to obtain analytical expressions for standard deviations and correlation lengths of the short- and long-wave components of stochastic shear stress field created by solute atoms in the glide plane in a multicomponent alloy. This makes it possible to significantly reduce the amount of calculations when determining the shear stress field parameters. The developed method was applied to calculate these parameters for the CrCoNiFeMn alloy. The calculated parameters were well correlated with similar parameters determined from the analysis of shear stress distributions in the glide plane, which were calculated by the method of direct summation of solute atoms contributions. In addition, it was found that there are separate effective crystal lattice distortions for the short- and long-wave components that differ from the average distortion that was proposed earlier. This results from the fact that these components are determined by solute atoms with different distance from the glide plane. Effective distortion is greater, the greater this distance from the glide plane. In addition, there is no single empirical constant for all alloy to determine the yield strength as a function of their shear modulus and average distortion. But the proposed method makes it possible to determine the main parameters of the shear stress field in a specific multicomponent alloy. These parameters can be used to calculate the yield strength of this alloy.

Keywords: shear stress, multicomponent alloy, glide plane, solid solution.