УДК 530.131.530.12; 539.125/126 https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019

Форма лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень

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

З використанням методу дискретної дислокаційної динаміки вивчено форму лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, які можуть виникнути внаслідок дисторсії кристалічної ґратки. Форма лінії дислокації визначає в певній мірі границю текучості матеріалу, а дисторсія кристалічних ґраток може бути пов'язана з існуванням твердого розчину. Таким чином, вивчення форми лінії дислокації та моделювання її утворення в полі стохастичних зсувних напружень може допомогти в визначенні границі текучості багатокомпонентних сплавів, особливо з суттєвою концентрацією розчинених елементів.

Ключові слова: *дислокація, дискретна дислокаційна динаміка, зсувні напруження.*

Вступ

Форма лінії дислокації впливає на напруження, необхідне для її руху в площині ковзання [1]. Таким чином, ця форма в певній мірі визначає границю текучості матеріалу. Слід зазначити, що форма лінії дислокації залежить від розподілу внутрішніх напружень в кристалічних ґратках і певним чином відбиває цей розподіл. Стохастичні зсувні напруження можуть виникнути внаслідок спотворення (дисторсії) кристалічної ґратки. Такі спотворення можуть існувати, наприклад, у твердому розчині. Сучасні перспективні матеріали, такі як високоентропійні сплави та багатокомпонентні сплави з суттєвою концентрацією розчинених елементів, являють собою тверді розчини. Ці матеріали демонструють багато унікальних властивостей, зокрема дуже високу границю текучості [2, 3]. Різні атоми у твердому розчині вносять в кристалічні ґратки деяку невідповідність розмірів атомів та невідповідність модулів пружності. Ці невідповідності призводять до деформації (дисторсії) кристалічної ґратки, яка змінюється випадковим чином в просторі. Такі спотворення — це джерело внутрішніх напружень у ґратці. В цьому випадку внутрішнє напруження в певній точці має стохастичне значення, тобто є випадковою величиною, яка зазвичай підкоряється нормальному розподілу ймовірностей. Загалом, внутрішні напруження відповідають нульовому балансу в межах матеріалу. Окремим випадком таких напружень є розподіл зсувних напружень в площині ковзання дислокацій. Поле стохастичних зсувних напружень призводить до появи різних сил, що діють на різні сегменти лінії дислокації. Сегменти рухаються під дією цих сил, утворюючи рівноважну форму лінії дислокації. Важливі характеристичні параметри цієї форми можуть бути встановлені чисельними методами. Таким чином, вивчення форми дислокаційної лінії та її моделювання в полі стохастичних зсувних напружень є кроком у напрямку визначення границі текучості високоентропійних та багатокомпонентних сплавів.

Моделювання границі текучості багатокомпонентних сплавів розглядалося в багатьох роботах [1, 4—20]. Зокрема, вплив форми лінії дислокації в твердих розчинах на границю текучості досліджувався в [1, 4—17]. В роботах [5—13] хвилястість, звивистість та шорсткість лінії дислокації моделювалися в спрощеному вигляді однаковими трапецієподібними виступами в двох протилежних напрямках, що лежать в площині ковзання дислокації. Висота та довжина виступів визначалися за допомогою розрахунків з перших принципів з використанням теорії функціонала густини. Зведення хвилястості до однакових трапецієподібних виступів вимагає знехтувати реальною формою лінії дислокації, яка насправді являє собою суму виступів різної висоти, довжини та форми. Це може призвести до помилок в розрахунку границі текучості матеріалу.

В роботі [15] форма лінії дислокації моделювалася за допомогою дискретної дислокаційної динаміки. Таке моделювання дає набагато реалістичнішу форму, але воно залежить від способу визначення поля стохастичних зсувних напружень в площині ковзання. Для моделювання розподілу зсувних напружень в роботі [15] був розроблений спеціальний метод, за яким сила, що діє з боку поля зсувних напружень на певний сегмент дислокації, розраховувалась як суперпозиція сил від випадково розташованих в площині ковзання точок закріплення, кожна з яких створювала однаковий гауссовий потенціал для закріплення навколо себе. У цьому разі сила, що діяла на дислокацію з боку певної точки закріплення, спадала практично до нуля з віддаленням від цієї точки. Таким чином, точки закріплення, які розташовані далеко від сегмента дислокації, практично на нього не діяли. Такий спосіб визначення сил, що діють на дислокацію, а фактично визначення поля зсувних напружень, забезпечує нормальний розподіл ймовірностей для цих напружень, оскільки напруження в певній точці являє собою суму багатьох випадкових малих внесків від різних точок закріплення. Але такий спосіб має свої недоліки. По-перше, дисперсія нормального розподілу погано задається у цьому методі, оскільки залежить від числа точок закріплення, які попадають в зону впливу навколо певної точки на лінії дислокації. Слід також зазначити, що в методі, який запропоновано в роботі [15], точки закріплення, котрі дають свій внесок в силу, що діє на певну точку на лінії дислокації, розташовуються тільки в площині ковзання. Але в реальному сплаві багато центрів дисторсії кристалічних ґраток, які будуть давати внесок в поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання, розташовано в об’ємі над і під площиною ковзання. По-друге, однакові точки закріплення більше відповідають моделюванню бінарного сплаву, в якому однакові атоми розчинені в матриці-розчиннику. Для дослідження багатокомпонентних сплавів використання цього способу знаходиться дещо під питанням. По-третє, цей метод потребує значних обчислювальних потужностей і витрат часу на розрахунки. Таким чином, розробка іншого способу визначення стохастичних зсувних напружень в площині ковзання може бути корисною. Крім того, в роботі [15] запропоновано недостатньо точний метод для визначення характерних параметрів форми лінії дислокації і не вивчено статистику різних складових цієї форми.

Мета даної роботи — за допомогою комп'ютерного моделювання методом дискретної дислокаційної динаміки вивчити форму лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень, розробити спосіб моделювання розподілу цих напружень в площині ковзання та спеціальні чисельні методи для визначення характерних параметрів форми лінії дислокації.

Алгоритми розрахунків

Рівняння руху дислокації в певному наближенні може бути запропоновано в вигляді [4]

$$m\frac{\partial^2 x_D(z,t)}{\partial t^2}+B\frac{\partial x_D(z,t)}{\partial t}-\Gamma\frac{\partial^2 x}{\partial z^2}=[\tau+\tau_s(x,z)]b, \qquad (1)$$

де m — ефективна маса дислокації на одиницю довжини ($m\approx\rho b^2/2$ [15], ρ — густина матеріалу); $x_D(z,t)$ — координата x точки лінії дислокації, що має координату z в момент часу t($x_D(z, t)$, по суті визначає форму лінії дислокації в момент часу t); x — координата в напрямку руху дислокації; z — координата в напрямку лінії дислокації; xOz — площина ковзання дислокації; B — коефіцієнт опору руху; Γ — лінійний натяг лінії дислокації; τ — зовнішнє зсувне напруження, що прикладене до площини ковзання; $\tau_s(x,z)$ — розподіл внутрішніх зсувних напружень в площині ковзання; b — вектор Бюргерса.

Диференціальне рівняння (1) може бути вирішено чисельним методом. Для цього лінія дислокації повинна бути представлена як ланцюг вузлів, що з'єднані прямими сегментами (рис. 1). Після такої дискретизації рівняння (1) може бути переписано для вузла i в наступному вигляді:

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

де x_i та z_i — координати вузла i в площини ковзання; $\ddot{x}_i$ та $\dot{x}_i$ — прискорення та швидкість вузла i; Δz — відстань між сусідніми вузлами в напрямку z. В цьому випадку лінія дислокації буде описуватися системою диференціальних рівнянь, які визначають рух всіх вузлів [15, 21]. Слід зазначити, що така система вирішується стандартними методами з використанням періодичних граничних умов, коли останній крайній вузол праворуч вважається сусіднім для першого вузла ліворуч. Таким чином, кожен вузол формально має сусідів ліворуч і праворуч. Координати вузлів визначаються послідовно в різні моменти часу з кроком за часом Δt. Такий метод визначення форми лінії дислокації називається дискретною дислокаційною динамікою.

Наступною проблемою дискретної дислокаційної динаміки в застосуванні до багатокомпонентних сплавів є спосіб моделювання розподілу внутрішніх зсувних напружень в площині ковзання $\tau_s(x,z_i)$. Вважається, що такі напруження в точках (x,z_i) для довільного x (зокрема, для $x=\text{const}=x_j$) та $z_{i+1}=z_i+\Delta z$ можуть бути розраховані як [15]

$$\tau_s(x_j,z_i)=\hat{\tau}\sqrt{\frac{w_c}{\Delta z}}N_{ij}(0,1), \qquad (3)$$

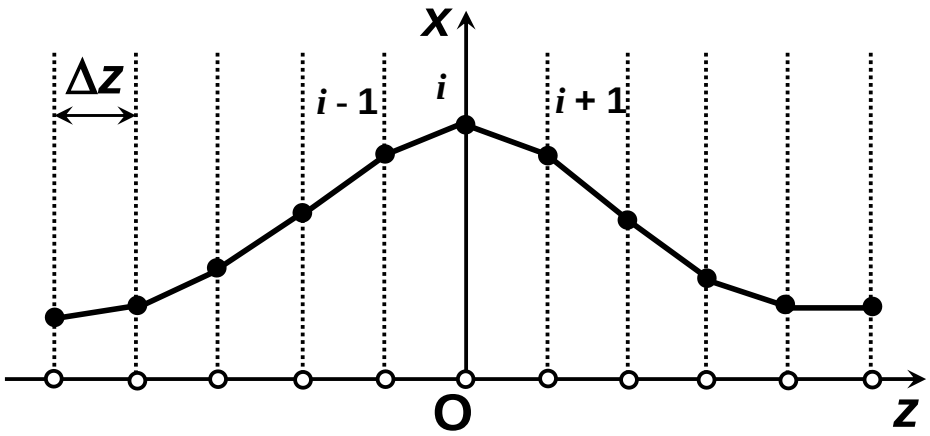

Рис. 1. Схема, що пояснює метод дискретної дислокаційної динаміки.

де $\hat{\tau}$ — ефективне зсувне напруження, що характеризує поле внутрішніх напружень в площині ковзання і залежить від середньої дисторсії кристалічних ґраток; w_c — довжина кореляції поля напружень; $N_{ij}(0,1)$ — випадкова змінна з нормальним розподілом ймовірностей з середнім значенням, що дорівнює 0, і дисперсією, що дорівнює 1, задана для точки з координатами (x_j, z_i), наприклад, за допомогою перетворення Бокса—Мюллера:

$$N_{ij}(0,1) = \cos 2\pi r_i \sqrt{-\ln r_j}\,, \tag{4}$$

де r_i та r_j — незалежні випадкові величини, що рівномірно розподілені на інтервалі. Довжину кореляції можна розглядати як середній лінійний розмір області на площині ковзання, де внутрішні зсувні напруження мають один знак [1]. Середнє значення випадкової змінної, що дорівнює 0, автоматично забезпечує дотримання балансу сил на площині ковзання. Сума всіх сил на площині ковзання, що діють з боку поля внутрішніх напружень, буде в такому випадку дорівнювати 0.

Залишається питання, як розрахувати напруження для $x \neq x_j$ таким чином, щоб середній розмір області напружень постійного знаку вздовж напрямку x дорівнював заданому w_c. Один з найпростіших способів — задати $x_{j+1} = x_j + w_c/2$ (рис. 2), а напруження для $x_j \le x \le x_{j+1}$ розраховувати як

$$\tau_s(x, z_i) = \hat{\tau}\sqrt{\frac{w_c}{\Delta z}}\left[N_{ij}(0,1)\cos\varphi + N_{i(j+1)}(0,1)\sin\varphi\right], \tag{5}$$

де $\varphi = \frac{\pi}{2}\frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}$. Формула (5) для $x = x_j$ еквівалентна формулі (3). Для $x_j < x < x_{j+1}$ слід зазначити, що

$$N_{ij}(0,1)\cos\varphi + N_{i(j+1)}(0,1)\sin\varphi = N_x(0,1)\,, \tag{6}$$

де $N_x(0,1)$ — випадкова змінна з нормальним розподілом ймовірностей з середнім значенням, що дорівнює 0, і дисперсією, що дорівнює 1, тобто вона еквівалентна по типу $N_{ij}(0,1)$ і $N_{i(j+1)}(0,1)$. Отже, розраховане таким способом напруження в точці з довільною координатою x буде мати нормальний розподіл ймовірностей з середнім значенням, що дорівнює 0, і стандартним відхиленням $\hat{\tau}\sqrt{w_c/\Delta z}$. У цьому разі довжина кореляції поля напружень вздовж напрямку x буде дорівнювати w_c.

Розраховану залежність $\tau_s(x,z_i)$ за умови $z_i = \text{const}$ можна перевірити на відповідність довжини кореляції значенню w_c за допомогою нормалізованої автокореляційної функції (7)

$$K(w) = \frac{<\tau_s(x,z_i)\tau_s(x+w,z_i)>}{<\tau_s(x,z_i)\tau_s(x,z_i)>}, \tag{7}$$

де кутові дужки означають усереднення по всьому діапазону значень x. Для випадку, коли $\tau_s(x,z_i)$ розраховується в кінцевому числі точок, формула (7) може бути переписана у вигляді

$$K(w) = \frac{q}{q-k_{\max}} \frac{\sum_{u=1}^{q-k_{\max}} \tau_s(x_u,z_i)\tau_s(x_{u+k},z_i)}{\sum_{u=1}^{q} \tau_s(x_u,z_i)\tau_s(x_u,z_i),}, \quad u+k \le q, \tag{8}$$

де $w = k\Delta x$; $x_{u+1} = x_u + \Delta x$; $k_{\max}$ — максимальне значення k ($k_{\max} < q$); q — число точок з постійною координатою z_i, в яких розраховано $\tau_s(x_u,z_i)$; Δx — відстань між сусідніми точками, в яких розраховано $\tau_s(x_u,z_i)$. Функція $K(w)$ дорівнює 1 для $w=0$, це її максимальне значення, до того ж $K(-w) = K(w)$. Зі збільшенням w значення функції зменшується. Довжина кореляції w_c дорівнює такому значенню w, за якого нормалізована автокореляційна функція стає меншою за певне критичне значення (~0,1).

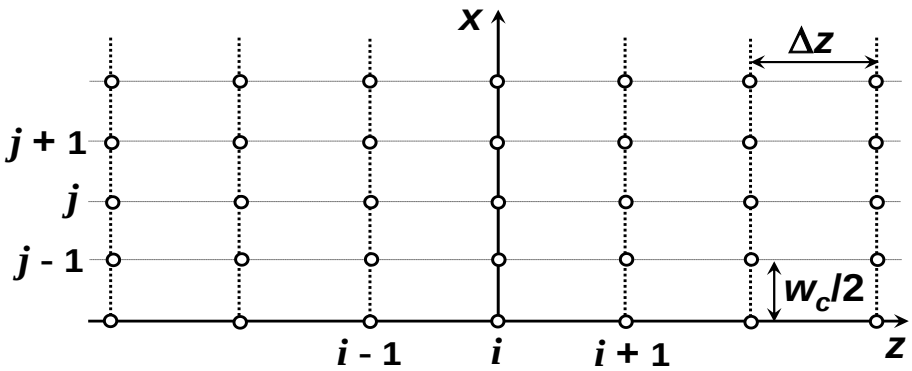

Рис. 2. Схема, що пояснює моделювання розподілу стохастичних зсувних напружень в площині ковзання.

Якщо задати дислокацію в момент часу $t = 0$ у вигляді прямої лінії, паралельної осі Oz з $x_i = 0$, то поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання за умови $\tau = 0$ буде викликати рух різних сегментів дислокації в протилежних напрямках, паралельних осі O*x*. Цей рух буде продовжуватись деякий час t_e доти, доки сили лінійного натягу, що пов'язані з локальною кривизною лінії дислокації, не скомпенсують сили, які діють на дислокацію з боку поля зсувних напружень. В цьому процесі лінія дислокації втратить пряму форму і набуде скоріш хвилястої, звивистої форми з деякою шорсткістю. Середнє значення координат x_i точок лінії дислокації (вузлів) буде в цьому випадку близьке до 0, що відповідає рівній ймовірності відхилення дислокації в протилежних напрямках від початкового положення. Чисельні методи дозволяють визначити точки перетину рівноважної лінії дислокації і осі Oz (рис. 3). Далі нескладно визначити середню напівдовжину "хвилі" L лінії дислокації, що буде дорівнювати початковій довжині лінії дислокації в напрямку *z*, поділеній на число точок перетину. Також можливо розрахувати всі напівдовжини, дослідити їх статистику і визначити максимальну напівдовжину "хвилі".

Ще один корисний метод визначення параметрів форми — розрахунок функції шорсткості

$$R(l) = \left\langle \left| x_D(z+l, t_e) - x_D(z, t_e) \right| \right\rangle, \tag{9}$$

де кутові дужки означають усереднення по всьому діапазону значень z. Для випадку дискретизації лінії дислокації і періодичних граничних умов формула (9) може бути переписана у вигляді

$$R(l) = \begin{cases} \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} \left| x_{i+k} - x_i \right|, & i + k \le n \\ \dfrac{1}{n}\sum\limits_{i=1}^{n} \left| x_{i+k-n} - x_i \right|, & i + k > n, \end{cases} \tag{10}$$

де $l = k\Delta z$, $k < n$, n — кількість вузлів на лінії дислокації. Функція шорсткості $R(l)$ дорівнює 0 для $l = 0$, далі вона збільшується і після $l = L$ виходить на випадкові коливання навколо деякого постійного рівня, який приблизно корелює зі стандартним відхиленням x_{ave} значень x_i від 0.

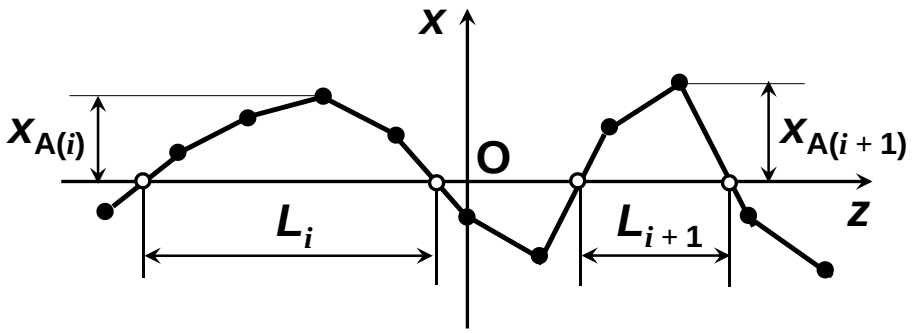

Рис. 3. Схема, що пояснює визначення параметрів форми лінії дислокації.

Наступний метод дослідження параметрів форми лінії дислокації — розділення оригінальної лінії дислокації з рівноважною формою на дві віртуальні лінії, сума яких дає оригінальну лінію. Віртуальна лінія, в якої "стерті" короткі хвилі з напівдовжиною меншою за λ, може бути визначена за допомогою процедури усереднення:

$$\tilde{x}_i(\lambda, z_i) = \begin{cases} \dfrac{1}{2k+1}\left(\sum\limits_{p=n+i-k}^{n} x_p + \sum\limits_{p=1}^{i+k} x_p\right), & i-k<1, \\ \dfrac{1}{2k+1}\sum\limits_{p=i-k}^{i+k} x_p, & i-k \geq 1,\ i+k \leq n, \\ \dfrac{1}{2k+1}\left(\sum\limits_{p=i-k}^{n} x_p + \sum\limits_{p=1}^{i+k-n} x_p\right), & i+k>n, \end{cases} \tag{11}$$

де $\lambda = k\Delta z$ — характерна довжина усереднення, $k < n/2$; x_p — координата x вузла p. Віртуальна лінія, в якої "стерті" довгі хвилі з напівдовжиною більшою за λ, може бути визначена як

$$\breve{x}_i(\lambda, z_i) = x_i - \tilde{x}_i(\lambda, z_i), \tag{12}$$

тоді $x_i = \breve{x}_i(\lambda, z_i) + \tilde{x}_i(\lambda, z_i)$. Далі дві віртуальні лінії — "довгохвильова" складова $\tilde{x}_i(\lambda, z_i)$ і "короткохвильова" складова $\breve{x}_i(\lambda, z_i)$ лінії дислокації — можуть бути досліджені окремо. Для них можуть бути визначені середні напівдовжини хвиль, максимальні напівдовжини, середні амплітуди хвиль.

Результати обчислювального експерименту та їх обговорення

Для моделювання форми лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень в площині ковзання необхідно задати певні вхідні параметри. Щоб дискретизувати лінію дислокації, перш за все необхідно визначити відстань Δz між сусідніми вузлами в напрямку z. З одного боку, чим менше ця відстань, тим точніше моделювання. З другого — існують фізичні обмеження щодо зменшення цієї відстані. Очевидно, що вона не може бути меншою за відстань між сусідніми атомами вздовж лінії дислокації (ця відстань між атомами дещо більше величини вектора Бюргерса). З раціональних міркувань відстань між вузлами має бути такою, щоб сегмент дислокації з таким розміром включав в себе хоча би декілька атомів для усереднення, тому що дислокація в такому моделюванні розглядається як пружна струна з певним лінійним натягом, а не як ланцюг з атомів. Виходячи з викладеного, найбільш прийнятним є варіант, коли $\Delta z = w_c$. Дислокація розглядалася як ланцюг з 1000 вузлів. Наступним параметром є крок за часом Δt. Це дуже важливий параметр в дискретній дислокаційній динаміці, від якого сильно залежить точність розрахунків. В нашому моделюванні крок за часом дорівнював $1{,}4 \cdot 10^{-14}$ с, що добре відповідає значенням цього параметра, які були використані в інших роботах по дискретній дислокаційній динаміці [15, 21, 22]. Інші вхідні параметри для розрахунків були задані, виходячи з міркувань реалістичності з використанням ряду робіт, в яких моделювалися реальні багатокомпонентні сплави [9, 10, 15]. Ці вхідні параметри наведено в таблиці.

Вихідні параметри для моделювання

b, нм	w_c, нм	m, кг/м	B, МПа·с	Г, Н	$\hat{\tau}$, МПа
0,25	1,37	$2{,}5\cdot10^{-16}$	$2\cdot10^{-11}$	$6{,}23\cdot10^{-10}$	331

В площині ковзання були задані точки з координатами x_j, z_i у відповідності до схеми, що наведена на рис. 2. Таким чином, мало місце $z_{i+1} = z_i + \Delta z$ і $x_{j+1} = x_j + w_c/2$. В цих точках за допомогою (4) були визначені величини $N_{ij}(0{,}1)$. Поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання розраховано з використанням формули (5) для точок з координатами x_u, z_i. Слід зазначити, що $x_{u+1} = x_u + \Delta x$, а відстань між сусідніми точками, в яких розраховано $\tau_s(x_u, z_i)$, була $\Delta x = w_c/10$. Приклад розподілу нормалізованих зсувних напружень $\tau_s/\hat{\tau}$ вздовж напрямку x для деякого $z_i = \text{const}$ показаний на рис. 4. Для різних z_i розподіл цих напружень вздовж напрямку x був різним, але статистично однаковим, тобто для всіх різних розподілів середнє значення зсувного напруження буде близьким до 0, а його стандартне відхилення від 0 однаковим. Функцію розподілу ймовірностей для нормалізованих зсувних напружень, розподіл яких наведено на рис. 4, показано на рис. 5, *а*. Суцільна лінія на цьому рисунку демонструє функцію розподілу для стандартного нормального розподілу. Добре видно, що ці функції практично співпадають. Таким чином, розраховані зсувні напруження мають нормальний розподіл ймовірностей. Нормалізована автокореляційна функція, що розрахована за допомогою (8) для розподілу на рис. 4, показана на рис. 5, *б*. Перший мінімум після максимуму за умови $w = 0$ припадає приблизно на значення $w = w_c$. Це доказує, що довжина кореляції поля напружень вздовж напрямку x дійсно дорівнює w_c, якщо вибрано такий спосіб розрахунку напружень. Але "напівхвилі" зсувних напружень з однаковим знаком мають різні довжини, в тому числі більші за w_c.

Початкова форма лінії дислокації в момент часу $t = 0$ була прямою, коли всі вузли лежали на осі Oz ($x_i = 0$). Зовнішнє зсувне напруження, що прикладене до площини ковзання, дорівнювало нулю ($\tau = 0$). В цьому випадку поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання викликало відхилення форми дислокації від прямої лінії. Кінцева

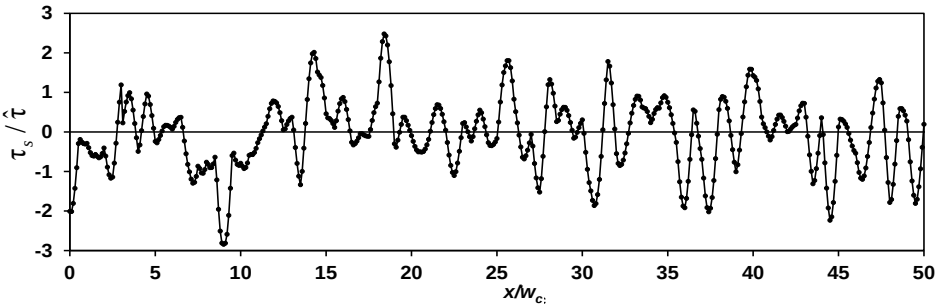

Рис. 4. Розподіл нормалізованих зсувних напружень вздовж напрямку x для деякого z_i = const.

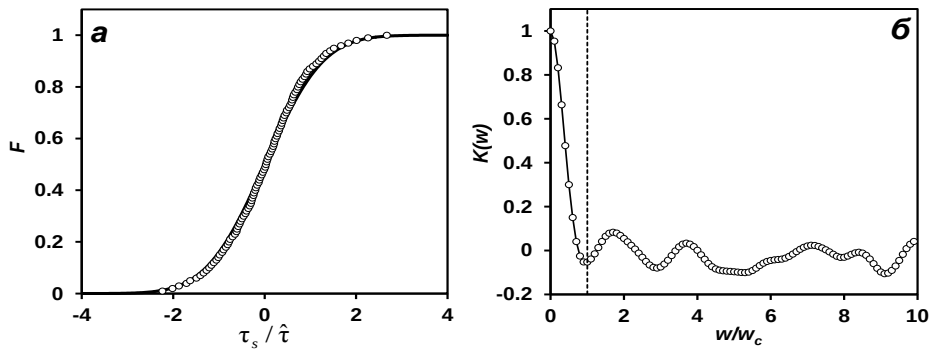

Рис. 5. Функція розподілу ймовірностей для нормалізованих зсувних напружень (*а*) і нормалізована автокореляційна функція (*б*). Суцільна лінія на (*а*) демонструє функцію розподілу для стандартного нормального розподілу.

рівноважна форма була такою, що сили лінійного натягу, які пов'язані з локальною кривизною лінії дислокації, компенсували сили, котрі діють на дислокацію з боку поля зсувних напружень. Слід зазначити, що випадковість розподілу внутрішніх напружень призводить до існування багатьох варіантів такого розподілу. Кожному варіанту розподілу зсувних напружень в площині ковзання відповідав свій варіант рівноважної форми лінії дислокації. Приклад такої форми наведено на рис. 6, *а*. Всі варіанти рівноважної форми демонструють деякі спільні риси. Наприклад, у всіх випадках середнє значення координат x_i точок лінії дислокації (вузлів) було близьке до 0. Це зумовлено рівною ймовірністю руху сегментів дислокації в протилежних напрямках під дією поля внутрішніх зсувних напружень. Інші параметри хвилястої та звивистої форми лінії дислокації потребують статистичного аналізу. На рис. 6, *б*, *в* наведено "довгохвильова" і "короткохвильова" складові лінії дислокації, які показано на рис. 6, *а* за умови характерної довжини усереднення $\lambda = 100 w_c$.

Стандартне відхилення x_{ave} значень x_i від 0 для рівноважної форми лінії дислокації дорівнювало в середньому в нашому моделюванні 1,4 нм, що дуже добре корелювало з заданим w_c. Також слід зазначити, що максимальні відхилення точок лінії дислокації від 0 дорівнювали приблизно трьом стандартним відхиленням, це дуже подібне до нормального розподілу. Відхилення точок лінії дислокації від 0, більші за x_{ave}, очевидно, зумовлені наявністю "напівхвиль" певного знаку в розподілі зсувних напружень вздовж напрямку x з довжиною більшою за w_c. За допомогою чисельних методів визначено точки перетину рівноважної лінії дислокації та осі Oz і розраховано середню напівдовжину "хвилі" L лінії дислокації, що дорівнювала 18,8 нм. Цікаво порівняти цю величину з оцінкою ефективної напівдовжини "хвилі", що розрахована за допомогою формули

$$L_p = \left(\frac{\Gamma w_c^{1/2}}{\hat{\tau} b} \right)^{2/3}, \qquad (13)$$

яка запропонована в роботі [15]. Ефективна напівдовжина у відповідності до (13) складала 4,3 нм. Очевидною є велика різниця між цими двома величинами. В роботі [15] рівняння для L_p виводилося з припущення,

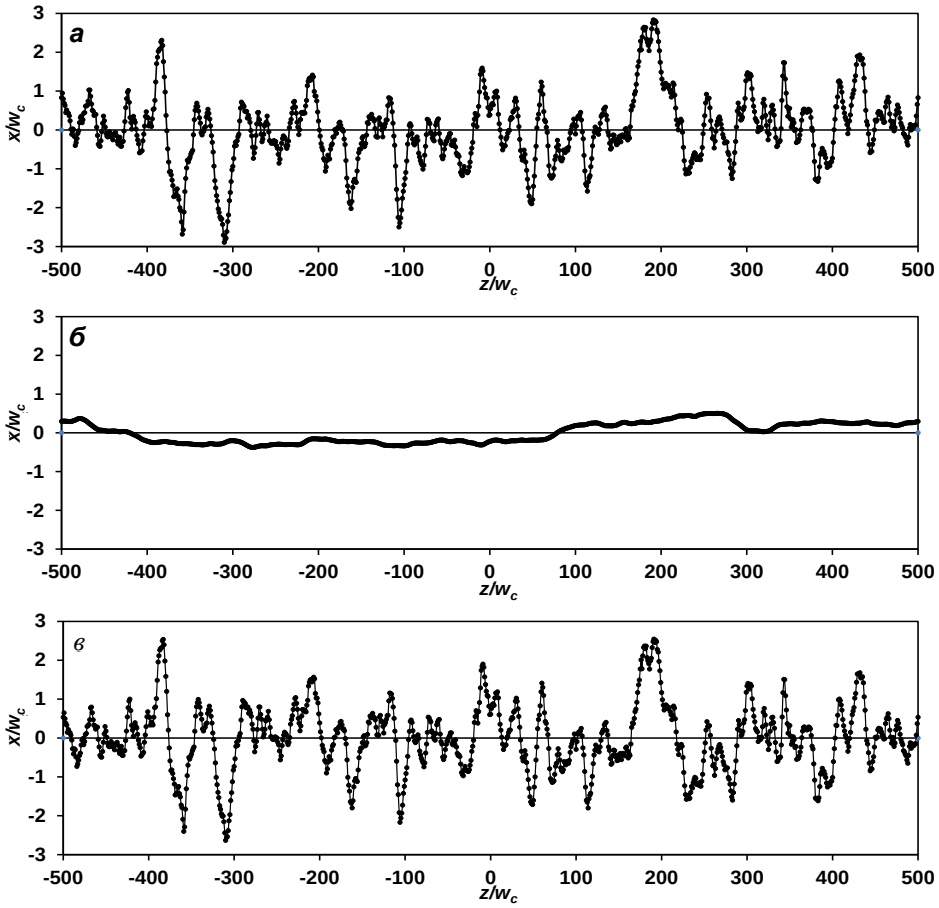

Рис. 6. Рівноважна форма лінії дислокації (*а*), “довгохвильова” (*б*) і “короткохвильова” складові (*в*) лінії дислокації.

що сила лінійного натягу, яка діє в середньому на “напівхвилю” дислокації, є $F_{LT} \approx \Gamma w_c / L_p$. Це досить вільне припущення. Більш загальний вираз для цієї сили міг би бути $F_{LT} = \beta\Gamma w_c / L_p$, де β — деякий коефіцієнт, який залежить від форми “на півхвилі”. З порівняння 18,8 і 4,3 нм можна визначити, що $\beta \approx 9{,}2$. Це можна назвати суттєвим уточненням в моделюванні рівноважної форми лінії дислокації. Уточнена формула (13) може бути переписана у вигляді

$$L_p = \left(\frac{\beta\Gamma w_c^{1/2}}{\hat{\tau} b} \right)^{2/3} . \qquad (14)$$

Функція шорсткості, яка розрахована за допомогою (10) для рівноважної форми лінії дислокації, показана на рис. 7, *а*. Слід зазначити, що точка з координатами $l = L$ і x_{ave} лежить майже на графіку $R(l)$, тобто $R(L) \approx x_{ave}$. Таким чином, якщо нам відомо x_{ave} і визначено функцію $R(l)$, то легко знайти значення L. Цей спосіб є більш точним, чим той, що запропонований в роботі [15], коли $R(l)$ береться в логарифмічних координатах

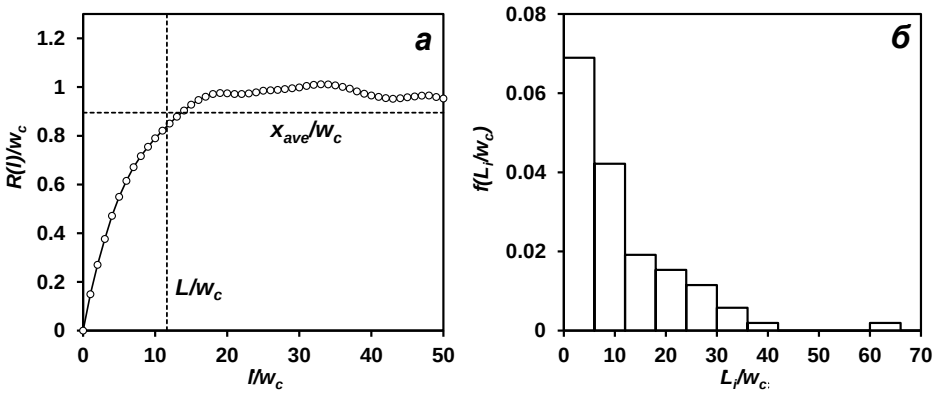

Рис. 7. Функція шорсткості (*а*) і гістограма (*б*) розподілу нормалізованих довжин “на півхвиль”.

і визначається точка перетину двох прямих, одна з яких усереднює горизонтальну ділянку $R(l)$, а друга має нахил l в логарифмічних координатах і є дотичною до початкової ділянки $R(l)$. За допомогою визначених точок перетину дислокації і осі Oz було розраховано всі довжини “напівхвиль” L_i на лінії дислокації. Статистика нормалізованих довжин “напівхвиль” наведена на рис. 7, *б* у вигляді гістограми. Гістограма підтверджує середню напівдовжину “хвилі” L = 18,8 нм, але показує також наявність великої кількості “напівхвиль” з більшою довжиною. Максимальна довжина “напівхвилі” була приблизно 83 нм. Слід зазначити, що в цій статистиці розглядалися тільки явні “напівхвилі”, які мали на кінцях точки, що лежали на осі Oz і не накладалися одна на одну.

Якщо обирати більш загальний підхід, то слід розглядати рівноважну форму лінії дислокації як суму багатьох “хвиль” з різною довжиною [8]. В такому разі метод, за яким визначаються точки перетину дислокації і осі Oz, не зовсім коректний, оскільки в ньому “довгохвильові” складові лінії дислокації будуть приховані накладеними на них “короткохвильовими” складовими. Але описана процедура усереднення з контрольованою характерною довжиною усереднення дозволяє виділити “довгохвильову” складову лінії дислокації, коли “напівхвилі” з довжиною меншою за λ певним чином “стираються” за рахунок взаємної компенсації позитивних і негативних “напівхвиль” під час усереднення. З використанням формул (11) та (12) лінія дислокації, яка зображена на рис 6, *а*, була розкладена на “довгохвильову” (рис. 6, *б*) і “короткохвильову” (рис. 6, *в*) складові. Характерна довжина усереднення $\lambda = 100 w_c$ призводить до того, що “короткохвильова” складова мало відрізняється від оригінальної лінії дислокації. “Довгохвильова” складова, навпаки, демонструє довжину “напівхвилі”, співрозмірну з повною довжиною дислокації, що моделювалася. Максимальні відхилення точок від 0 для цієї складової значно менші, ніж у оригінальної лінії. Таким чином, амплітуда x_A “довгохвильових” складових помітно менше, ніж “короткохвильових”.

Нормалізовані стандартні x_{ave} / w_c та нормалізовані максимальні x_A/w_c відхилення від 0 залежно від нормалізованої характерної довжини

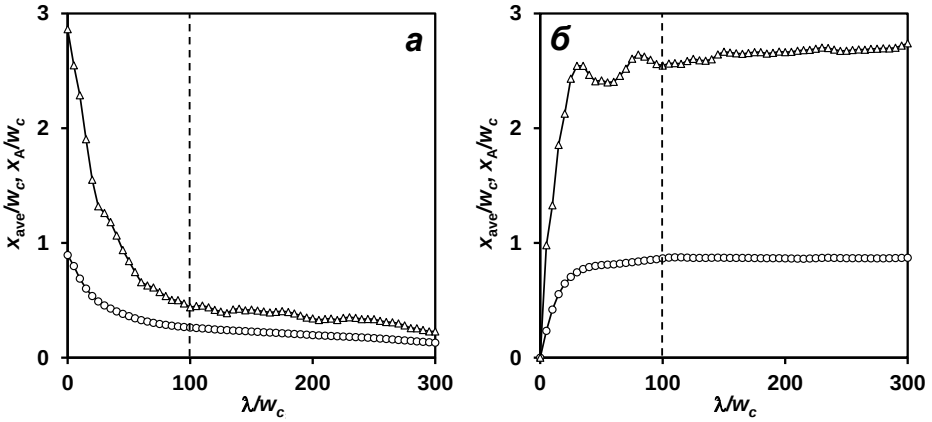

Рис. 8. Нормалізовані стандартні x_{ave}/w_c (кола) та нормалізовані максимальні x_A/w_c (трикутники) відхилення від 0 залежно від нормалізованої характерної довжини усереднення λ/w_c для "довгохвильової" (*а*) і "короткохвильової" (*б*) складових.

усереднення λ/w_c для "довгохвильової" і "короткохвильової" складових показані на рис. 8, *а*, *б* відповідно. Для "довгохвильової" складової x_{ave}/w_c і x_A/w_c зменшуються зі збільшенням λ/w_c, коли ця складова стає більш "довгохвильовою", спочатку швидко, а потім поступово повільніше. У цьому разі x_{ave}/w_c і x_A/w_c дорівнюють відповідним параметрам оригінальної лінії дислокації за умови $\lambda/w_c = 0$, тому що в цьому випадку "довгохвильова" складова співпадає з оригінальною лінією дислокації. Для "короткохвильової" складової x_{ave}/w_c і x_A/w_c дорівнюють 0 за умови $\lambda/w_c = 0$, тому що ця складова за такої умови просто відсутня. Зі збільшенням λ/w_c параметри x_{ave}/w_c і x_A/w_c для "короткохвильової" складової спочатку швидко ростуть, а потім виходять на майже горизонтальні ділянки, де вони стають дуже близькими до відповідних параметрів оригінальної лінії дислокації. Добре видно, що за умови $\lambda = 100w_c$ параметри x_{ave}/w_c і x_A/w_c для "короткохвильової" складової вже знаходяться на ділянці, де вони дуже близькі до відповідних параметрів оригінальної лінії дислокації. Це пояснює, чому "короткохвильова" складова за умови $\lambda = 100w_c$ майже співпадає з оригінальною лінією. Основним результатом цього дослідження рівноважної форми лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень є саме наявність "довгохвильової" складової, що має не нульову амплітуду. Це не співпадає з припущеннями роботи [8], де довгі "хвилі" відповідали за границю текучості за високих температур, але стверджувалося, що дислокація не може досягнути форми з довгими "хвилями" за низьких температур в зв'язку з високими енергетичними бар'єрами, пов'язаними з цими "хвилями". Моделювання, що проведене в цій роботі, відповідало температурі абсолютного нуля, тобто повній відсутності термічної активації, але довгі "хвилі" з'явилися в рівноважній формі дислокації.

Висновки

Рівноважна форма лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень була вивчена за допомогою метода дискретної дислокаційної динаміки. Розроблено більш простий та надійний спосіб моделювання розподілу зсувних напружень в площині ковзання. Максимальні відхилення точок рівноважної лінії дислокації від 0 дорівнювали приблизно трьом стандартним відхиленням. Відхилення точок лінії дислокації від 0, більші за стандартне відхилення, очевидно пов'язані з наявністю "напівхвиль" певного знаку в розподілі зсувних напружень вздовж напрямку x з довжиною, більшою за довжину кореляції поля напружень. Уточнено оцінку ефективної напівдовжини "хвилі" на лінії дислокації з урахуванням реальної її форми. Запропоновано більш точний спосіб визначення середньої напівдовжини "хвилі" лінії дислокації за допомогою функції шорсткості та стандартного відхилення точок дислокації від 0. Гістограма розподілу довжин "напівхвиль" показує наявність великої кількості "напівхвиль" з довжиною більшою за середню. Рівноважна форма лінії дислокації включає в себе також "довгохвильову" складову, що має не нульову амплітуду. Ця складова утворюється за повної відсутності термічної активації.

Цитована література

1. Nabarro F.R.N., Hirsch P.B. Solution and precipitation hardening. *The Physics of Metals*. Cambridge: Cambridge University Press, 1976. P. 152—188. doi: https://doi.org/10.1017/CBO9780511760020.007
2. 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
3. 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
4. Labusch R. Physical aspects of precipitation- and solid solution-hardening. *Czech. J. Phys*. 1981. Vol. 31. P. 165—176. doi: https://doi.org/10.1007/BF01959439
5. Leyson G., Curtin W., Hector L., Woodward C.F. Quantitative prediction of solute strengthening in aluminium alloys. *Nature Mater*. 2010. Vol. 9. P. 750—755. doi: https://doi.org/10.1038/nmat2813
6. Leyson G.P.M., Hector L.G., Curtin W.A. Solute strengthening from first principles and application to aluminum alloys. *Acta Mater*. 2012. Vol. 60, No. 9. P. 3873—3884. doi: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.03.037
7. Leyson G.P.M., Curtin W.A. Friedel vs. Labusch: the strong/weak pinning transition in solute strengthened metals. *Philos Mag*. 2013. Vol. 93, No. 19. P. 2428—2444. doi: https://doi.org/10.1080/14786435.2013.776718
8. Leyson G.P.M., Curtin W.A. Solute strengthening at high temperatures. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng*. 2016. Vol. 24. P. 065005. doi: https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/6/065005
9. Varvenne C., Luque A., Curtin W.A. Theory of strengthening in fcc high entropy alloys. *Acta Mater*. 2016. Vol. 118. P. 164—176. doi: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.07.040
10. Varvenne C., Leyson G.P.M., Ghazisaeidi M., Curtin W.A. Solute strengthening in random alloys. *Acta Mater*. 2017. Vol. 124. P. 660—683. doi: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.046
11. Nöhring W.G., Curtin W.A. Correlation of microdistortions with misfit volumes in

high entropy alloys. *Scripta Mater*. 2019. Vol. 168. P. 119—123. doi: https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.04.012
12. Bracq G., Laurent-Brocq M., Varvenne C., Perrière L., Curtin W.A., Joubert J.-M., Guillot I. Combining experiments and modeling to explore the solid solution streng-thening of high and medium entropy alloys. *Acta Mater*. 2019. Vol. 177. P. 266—279. doi: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.050
13. Hu Y., Szajewski B.A., Rodney D., Curtin W.A. Atomistic dislocation core energies and calibration of non-singular discrete dislocation dynamics. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2020. Vol. 28. P. 015005. doi: https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab5489
14. Zaiser M. Dislocation motion in a random solid solution. *Philos. Mag. A*. 2002. Vol. 82, No. 15. P. 2869—2883. doi: https://doi.org/10.1080/01418610208240071
15. Zhai J.-H., Zaiser M. Properties of dislocation lines in crystals with strong atomic-scale disorder. *Mater. Sci. Engineering: A*. 2019. Vol. 740—741. P. 285—294. doi: https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010
16. Péterffy G., Ispánovity P.D., Foster M.E., Zhou X., Sills R.B. Length scales and scale-free dynamics of dislocations in dense solid solutions. *Mater Theory*. 2020. Vol. 4, Article No. 6. doi: https://doi.org/10.1186/s41313-020-00023-z
17. Pasianot R., Farkas D. Atomistic modeling of dislocations in a random quinary high-entropy alloy. *Comp. Mater. Sci*. 2020. Vol. 173. P. 109366. doi: https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109366
18. Lugovy M., Slyunyayev V., Brodnikovskyy M. Solid solution strengthening in multicomponent fcc and bcc alloys: Analytical approach. *Progress in Natural Science: Mater. Internat*. 2021. Vol. 31. P. 95—104. doi: https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2020.11.006
19. Луговий М.І., Слюняєв В.М., Бродніковський М.П., Фірстов С.О. Розрахунок твердорозчинного зміцнення багатокомпонентних жароміцних сплавів. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. Киев: ИПМ НАН Украины. 2017. Вып. 23. С. 3—9.
20. Луговой Н.И., 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.
21. Rönnpagel D., Streit T., Pretorius T. Including thermal activation in simulation calculations of dislocation glide. *Phys. Stat. Sol. (a)*. 1993. Vol. 135. P. 445—454. doi: https://doi.org/10.1002/pssa.2211350210
22. Подрезов Ю.Н., Луговой Н.И., Вербило Д.Г. Влияние экранирования дислокациями вершины трещины на энергию квазихрупкого разрушения. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. Киев: ИПМ НАН Украины. 1997. Вып. 3. С. 14—23.

References

1. Nabarro, F. R. N., Hirsch, P. B. (1976). Solution and precipitation hardening. The Phys. Metals. Cambridge: Cambridge University Press, pp. 152—188. doi: https://doi.org/10.1017/CBO9780511760020.007
2. 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
3. George, E. P., Curtin, W. A., Tasan, C. C. (2020). High entropy alloys: A focused review of mechanical properties and deformation mechanisms. Acta Mater., Vol. 188, pp. 435—474. doi: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.12.015
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 streng-thening of high and medium entropy alloys. Acta Mater., Vol. 177, pp. 266—279. doi: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.050
13. Hu, Y., Szajewski, B. A., Rodney, D., Curtin, W. A. (2020). Atomistic dislocation core energies and calibration of non-singular discrete dislocation dynamics. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., Vol. 28, pp. 015005. doi: https://doi.org/10.1088/1361-651X/ab5489
14. Zaiser, M. (2002). Dislocation motion in a random solid solution. Philos. Mag. A, Vol. 82, No. 15, pp. 2869—2883. doi: https://doi.org/10.1080/01418610208240071
15. Zhai, J.-H., Zaiser, M. (2019). Properties of dislocation lines in crystals with strong atomic-scale disorder. Mater. Sci. Engineering: A, Vol. 740—741, pp. 285—294. doi: https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010
16. Péterffy, G., Ispánovity, P. D., Foster, M. E., Zhou, X., Sills, R. B. (2020). Length scales and scale-free dynamics of dislocations in dense solid solutions. Mater. Theory, Vol. 4, Article No. 6. doi: https://doi.org/10.1186/s41313-020-00023-z
17. Pasianot, R., Farkas, D. (2020). Atomistic modeling of dislocations in a random quinary high-entropy alloy. Comp. Mater. Sci., Vol. 173, pp. 109366. doi: https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109366
18. Lugovy, M., Slyunyayev, V., Brodnikovskyy, M. (2021). Solid solution strengthening in multicomponent fcc and bcc alloys: Analytical approach. Progress in Natural Science: Mater. Internat., 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. Rönnpagel, D., Streit, T., Pretorius, T. (1993). Including thermal activation in simulation calculations of dislocation glide. Phys. Stat. Sol. (a), Vol. 135, pp. 445—454. doi: https://doi.org/10.1002/pssa.2211350210
22. Podrezov, Yu., Lugovy, M., Verbylo, D. (1997). Effect of crack tip shielding by dislocations on quasibrittle fracture energy. Elektronnaya mikroskopiya i prochnost materialov, Kyiv: IPM NAN Ukrainy, Vol. 3, pp. 14—23 [in Russian].

Shape of dislocation line in stochastic shear stress field

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 shape of the dislocation line in the stochastic shear stress field in the glide plane was studied using the method of discrete dislocation dynamics. Stochastic shear stresses can occur due to the distortion of the crystal lattice. Such distortion may exist, for example, in a solid solution. Different atoms in a solid solution induce atomic size misfit and elastic modulus misfit into crystal lattice. These misfits result in crystal lattice distortions which varies spatially. The distortions are the origin of internal stresses in the lattice. Such internal stress in certain location has stochastic value normally distributed. The particular case of such stresses is shear stress distribution in the glide plane. The special method was developed to model such stress distribution. The stochastic shear stress field results in movement of different segments of dislocation line to form its equilibrium shape. The important characteristic parameters of the equilibrium shape can be measured by numerical methods. This shape also includes a "long-wavelength" component that has a non-zero amplitude and was formed without thermal activation. The shape of the dislocation line determines to some extent the yield strength of the material. Thus, the study of dislocation line shape and modeling its formation in the field of stochastic shear stresses can help to determine the yield strength of multicomponent alloys, especially multi-principal element alloys.

Keywords: *dislocation, discrete dislocation dynamics, shear stresses.*