

Залежність дисторсії ґраток від температури в сплаві CrCoNiFeMn

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

За допомогою комп'ютерного моделювання досліджено залежність середньої дисторсії кристалічних ґраток від температури в багатокомпонентному сплаві CrCoNiFeMn. Особливості цієї залежності зумовлені температурними залежностями міжатомних відстаней і модулів пружності, які визначаються ангармонізмом взаємодії між атомами, тобто асиметрією функції міжатомного потенціалу відносно її мінімуму. Показано, що існують такі залежності міжатомних відстаней і модулів пружності від температури для атомів компонентів всередині сплаву, для яких середня дисторсія кристалічних ґраток збільшується з температурою і може компенсувати зменшення модуля зсуву.

Ключові слова: дисторсія ґраток, твердий розчин, температура, багатокомпонентний сплав.

Вступ

Створення нових багатокомпонентних сплавів дозволяє досягнути визначних механічних властивостей за рахунок твердорозчинного зміцнення, що є дуже корисними для багатьох практичних застосувань цих матеріалів [1, 2]. Багатокомпонентні сплави в багатьох випадках являють собою тверді розчини заміщення або такі розчини є складовими фазами цих сплавів. Розчинені атоми мають зазвичай невідповідності розмірів та модулів пружності по відношенню до атомів матриці-розчинника. Ці невідповідності призводять до дисторсії кристалічних ґраток сплаву і, як наслідок, до виникнення стохастичних зсувних напружень в площині ковзання дислокації. В свою чергу, границя плинності багатокомпонентних сплавів залежить від цих внутрішніх напружень, тобто по суті від дисторсії кристалічних ґраток. Поле стохастичних зсувних напружень в площині ковзання створює хвилясту форму лінії дислокації, коли сили, що діють на окремі сегменти дислокації з боку цього поля, і сили лінійного натягу урівноважуються. Таким чином, ці зсувні напруження, які є сумою внесків від багатьох локальних дисторсій кристалічних ґраток в місцях розташування розчинених атомів, створюють опір руху дислокації і впливають на границю плинності, тобто на твердорозчинне зміцнення багатокомпонентних сплавів. Невідповідності розмірів та модулів пружності розчинених атомів по відношенню до атомів матриці-розчинника, які важливі для визначення дисторсії ґраток, можна кількісно оцінювати різними способами [3]. Середню дисторсію ґраток сплаву можна розрахувати, як запропоновано в роботах [3, 4].

Розуміння особливостей твердорозчинного зміцнення може допомогти в розробці нових перспективних багатокомпонентних сплавів тому, що дозволить більш точно прогнозувати ймовірні границі плинності таких матеріалів. Тому дуже важливим є моделювання твердорозчинного

зміцнення, яке залежить від дисторсії кристалічних ґраток, різними методами [3—23]. Для застосувань багатокомпонентних сплавів за високих температур також важлива залежність їх границі плинності від температури. Зазвичай така залежність демонструє “плато” — практично постійне значення границі плинності — в певному діапазоні температур. У роботі [19] показано, що існування такого “плато” є по суті аномальним. Модуль пружності матеріалу зменшується з підвищенням температури, що, в свою чергу, повинно призводити до зменшення стохастичних зсувних напружень в площині ковзання дислокації, які створюються численними локальними дисторсіями кристалічних ґраток, і, відповідно, до зменшення границі плинності, а не до її постійного значення за підвищених температур. Оскільки “плато” спостерігається експериментально, повинні існувати додаткові фактори, що компенсують зменшення модуля пружності з підвищенням температури.

Автори роботи [19] пропонують розглядати зростання середніх квадратичних зміщень атомів з ідеальних положень в кристалічних ґратках в результаті лінійного збільшення динамічних спотворень з підвищенням температури як один з таких факторів.

В області температур, де спостерігається “плато”, в багатокомпонентних твердих розчинах, окрім збільшення середніх квадратичних зміщень атомів, також може існувати ефект динамічного деформаційного старіння, що супроводжується відповідним зміцненням, яке компенсує зменшення модуля пружності [19]. Але цей ефект не є універсальним і не може пояснити “плато” в усіх випадках. Таким чином, фактори, що компенсують зменшення модуля пружності з підвищенням температури та сприяють виникненню “плато”, потребують подальших досліджень, а дослідження залежності дисторсії кристалічних ґраток від температури в цьому сенсі є актуальним.

Мета даної роботи — за допомогою комп’ютерного моделювання дослідити залежності невідповідностей розмірів та модулів пружності розчинених атомів по відношенню до атомів матриці-розчинника і середньої дисторсії кристалічних ґраток від температури в сплаві CrCoNiFeMn.

Алгоритм розрахунку

Середню дисторсію кристалічних ґраток сплаву можна розрахувати із невідповідностей розмірів та модулів пружності розчинених атомів по відношенню до атомів матриці-розчинника [3, 4]. Розмір атома слід оцінювати по відстані від цього атома до його найближчого сусіда в ґратках. Слід зазначити, що атом в чистому компоненті — складовій багатокомпонентного сплаву, де присутні тільки атоми одного елемента, буде мати цю відстань іншою, ніж цей же атом у сплаві, де він буде оточений атомами різних елементів. Така відстань була оцінена в роботах [3, 24] за допомогою потенціалу міжатомної взаємодії в гармонічному наближенні, яке не дає температурної залежності. Для отримання залежності від температури слід враховувати ангармонізм взаємодії між атомами, тобто асиметрію функції міжатомного потенціалу відносно її мінімуму.

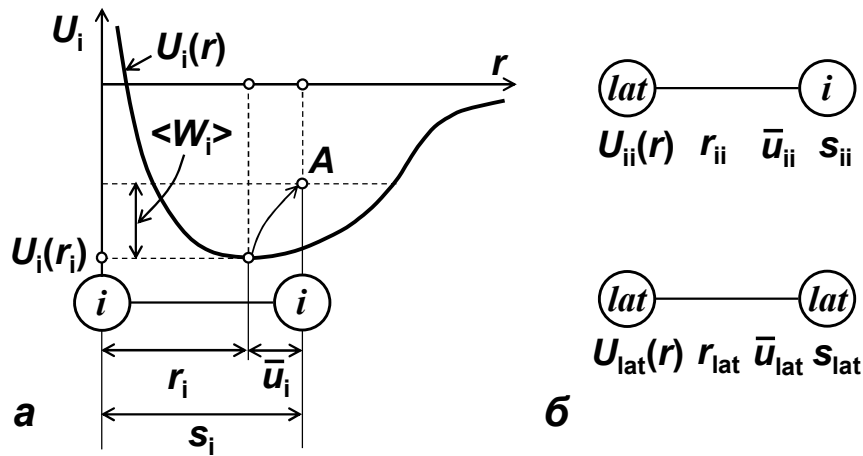


Рис. 1. Схема, що пояснює двохатомну модель твердого тіла: *a* — потенціал міжатомної взаємодії для пари атомів чистого компонента *i*; *б* — пара атомів чистого компонента *i*—“середній” атом сплаву і пара двох “середніх” атомів сплаву. Точка *A* — точка рівноваги для атому, який здійснює коливання.

Таким чином, можна використати спрощену двохатомну модель твердого тіла, коли розглядається взаємодія тільки між двома атомами, для визначення залежності відстані між найближчими атомами від температури. Ця ж модель може бути застосована і для визначення температурної залежності модуля пружності. Слід зазначити, що параметри цієї моделі будуть ефективними, тобто двохатомна модель буде демонструвати властивості матеріалу в цілому, але у цьому випадку модельні атоми будуть відрізнятися за своїми властивостями від реальних атомів у кристалічних ґратках. Схема, що пояснює двохатомну модель твердого тіла, показана на рис. 1. Нас цікавлять випадки пари атомів чистого компонента *i*—*i* (рис. 1, *a*), пара атомів чистого компонента *i*—“середній” атом сплаву *i*—*lat* і пара двох “середніх” атомів сплаву *lat*—*lat* (рис. 1, *б*).

Пара модельних атомів чистого компонента *i*—*i* дозволяє описати температурні залежності відстані до найближчого сусіда $s_i(T)$ та модуля зсуву $G_i(T)$ в чистому компоненті *i*. Пара атомів чистого компонента *i*—“середній” атом сплаву описує залежність міжатомної відстані $s_{ii}(T)$ і модуля зсуву $G_{ii}(T)$ від температури для атому компонента *i*, який знаходиться в сплаві в оточенні атомів інших компонентів. Пара двох “середніх” атомів сплаву, якщо сплав розглядати як матеріал, що складається з однакових “середніх” атомів з ефективними властивостями, дає температурні залежності для середньої ефективної міжатомної відстані $s_{lat}(T)$ і модуля зсуву $G(T)$ сплаву. Параметри $s_{ii}(T)$, $s_{lat}(T)$, $G_{ii}(T)$ та $G(T)$ необхідні для розрахунку невідповідностей атомних розмірів і модулів пружності за різних температур. Параметри $s_i(T)$ та $G_i(T)$ потрібні як допоміжні для визначення $s_{ii}(T)$ та $G_{ii}(T)$. Далі викладемо співвідношення двохатомної моделі для випадку чистого компонента *i*, але слід розуміти, що всі ці

формули справедливі також для пар $i-lat$ і $lat-lat$ шляхом простої заміни нижнього індексу i в усіх основних параметрах на індекси ii та lat відповідно. У двохатомній моделі один з атомів вважається нерухомим і відстань r до другого рухомого атома вимірюється відносно цього нерухомого атома (рис. 1). Потенційну енергію рухомого атома можна розкласти в ряд Тейлора поблизу точки її мінімуму і взяти доданки тільки до кубічного, щоб врахувати ангармонізм:

$$\begin{aligned} U_i(r) &= U_i(r_i) + \left. \frac{dU_i}{dr} \right|_{r=r_i} (r-r_i) + \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2U_i}{dr^2} \right|_{r=r_i} (r-r_i)^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3U_i}{dr^3} \right|_{r=r_i} (r-r_i)^3 = \\ &= U_i(r_i) + \frac{1}{2} C_i u_i^2 - \frac{1}{3} g_i u_i^3 = p_i^{(0)} + p_i^{(1)} r + p_i^{(2)} r^2 + p_i^{(3)} r^3, \end{aligned} \quad (1)$$

де $U_i(r_i)$ — потенційна енергія атома в точці її мінімуму з координатою r_i ;

$$\left. \frac{dU_i}{dr} \right|_{r=r_i} = 0, \quad \left. \frac{d^2U_i}{dr^2} \right|_{r=r_i} = C_i \quad \text{— силова стала; } \left. \frac{d^3U_i}{dr^3} \right|_{r=r_i} = -2g_i \quad \text{—}$$

коефіцієнт, що враховує ангармонізм; $p_i^{(0)} = U_i(r_i) + \frac{1}{2} C_i r_i^2 + \frac{1}{3} g_i r_i^3$,

$$p_i^{(1)} = -(C_i r_i + g_i r_i^2), \quad p_i^{(2)} = \frac{1}{2} C_i + g_i r_i, \quad p_i^{(3)} = -\frac{1}{3} g_i; \quad u_i = r - r_i \quad \text{—}$$

зміщення атома відносно точки мінімуму потенційної енергії.

Зміщення атома, який робить теплові коливання з середньою енергією $\langle W_i \rangle$ відносно точки мінімуму потенційної енергії, можна виразити як $u_i = \bar{u}_i + \xi_i + \xi_a$, де \bar{u}_i — зміщення точки рівноваги (точка A на рис. 1) в результаті ангармонізму міжатомної взаємодії; ξ_i — зміщення атома відносно точки A в результаті теплових коливань; ξ_a — зміщення атома відносно точки A в результаті дії зовнішньої сили F_a . У цьому випадку повну силу, яка діє на рухомий атом, можна розписати як

$$\begin{aligned} F &= F_a + F_i = F_a - C_i \bar{u}_i - C_i \xi_a - C_i \xi_i + g_i \bar{u}_i^2 + g_i \xi_a^2 + g_i \xi_i^2 + 2g_i \bar{u}_i \xi_a + \\ &+ 2g_i \bar{u}_i \xi_i + 2g_i \xi_a \xi_i, \end{aligned} \quad (2)$$

де $F_i = -\frac{dU_i}{dr} = -C_i u_i + g_i u_i^2$ — внутрішня сила в результаті взаємодії двох атомів. Якщо атом здійснює коливання біля точки рівноваги, то середня повна сила, яка діє на нього, буде дорівнювати нулю:

$$\langle F \rangle = F_a - C_i \bar{u}_i - C_i \xi_a + g_i \langle \xi_i^2 \rangle + 2g_i \bar{u}_i \xi_a = 0, \quad (3)$$

оскільки всі доданки, які містять зміщення в результаті теплових коливань ξ_i в першому степені, при усередненні дорівнюють нулю тому, що зміщення різних знаків мають рівну ймовірність, а доданками, які містять \bar{u}_i^2 і ξ_a^2 , можна знехтувати внаслідок їх малої величини. Якщо $F_a = 0$ і $\xi_a = 0$, рівняння (3) скорочується до $-C_i \bar{u}_i + g_i \langle \xi_i^2 \rangle = 0$, звідки

$\bar{u}_i = g_i \langle \xi_i^2 \rangle / C_i$. Крім того, якщо прирівняти середню потенційну енергію атома половині його середньої теплової енергії $C_i \langle \xi_i^2 \rangle / 2 = \langle W_i \rangle / 2$, то отримаємо $\langle \xi_i^2 \rangle = \langle W_i \rangle / C_i$. Повна середня енергія теплових коливань з урахуванням квантових ефектів буде [25]

$$\langle W_i \rangle = \frac{\hbar\omega_i}{2} \coth \frac{\hbar\omega_i}{2k_B T}, \quad (4)$$

де \hbar — зведена стала Планка; ω_i — ефективна частота коливань атому (в спрощеній двохатомній моделі весь спектр коливань атому в кристалічних ґратках можна замінити одною ефективною частотою як в теорії теплоємності Ейнштейна); k_B — стала Больцмана. Вираз (4) при $T = 0$ дорівнює $\hbar\omega_i/2$, а за достатньо високих температур наближається до $k_B T$. Таким чином,

$$\bar{u}_i = \bar{u}_i(T) = \frac{g_i \langle \xi_i^2 \rangle}{C_i} = \frac{\hbar\omega_i g_i}{2C_i^2} \coth \frac{\hbar\omega_i}{2k_B T}. \quad (5)$$

Залежна від температури міжатомна відстань може бути виражена як (рис. 1)

$$s_i = s_i(T) = r_i + \bar{u}_i(T), \quad (6)$$

де з умови $\left. \frac{dU_i}{dr} \right|_{r=r_i} = 0$ можна знайти

$$r_i = \frac{-p_i^{(2)} + \sqrt{(p_i^{(2)})^2 - 3p_i^{(3)}p_i^{(1)}}}{3p_i^{(3)}}. \quad (7)$$

Температурна залежність коефіцієнта термічного розширення твердого тіла, яка описується двохатомною моделлю, буде

$$\alpha_i(T) = \frac{1}{s_i(0)} \frac{ds_i}{dT} = \frac{2\hbar\omega_i}{k_B T^2 [1 + 2r_i C_i^2 / (\hbar\omega_i g_i)] [\exp(\hbar\omega_i / (k_B T)) - 1]^2}, \quad (8)$$

де $s_i(0) = r_i + \bar{u}_i(0)$ і $\bar{u}_i(0) = \hbar\omega_i g_i / (2C_i^2)$.

З рівняння (3), якщо врахувати $-C_i \bar{u}_i + g_i \langle \xi_i^2 \rangle = 0$, отримуємо лінійне співвідношення між зовнішньою силою і зміщенням атому в результаті її дії, залежне від температури

$$F_a = [C_i - 2g_i \bar{u}_i(T)] \xi_a. \quad (9)$$

Якщо прирівняти роботу зовнішньої сили, що знайдена інтегруванням (9), і роботу на один ступінь свободи окремого атому, що знайдена при всебічному стискуванні матеріалу, отримаємо

$$\frac{1}{2} [C_i - 2g_i \bar{u}_i(T)] \xi_a^2 = \frac{1}{2} K_i(T) \left(\frac{\Delta V}{V} \right)^2 V_i \Phi_i = \frac{1}{2} K_i(T) \left(\frac{3\xi_a}{s_i(T)} \right)^2 V_i \Phi_i, \quad (10)$$

де $K_i(T)$ — залежний від температури модуль всебічного стискування матеріалу; $\Delta V / V$ — дилатація; $V_i = s_i(T)^3 / (n_i f_i^3)$ — об'єм на один атом

в матеріалі; n_i — число атомів в елементарній комірці; f_i — коефіцієнт, що зв'язує міжатомну відстань s_i і період ґраток a_i ($s_i = f_i a_i$); φ_i — ефективна доля роботи зовнішніх сил на один атом, що припадає на один ступінь свободи (в двохатомній моделі розглядаємо тільки одновимірний рух атому, тобто тільки один ступінь свободи). Кожен атом в кристалічних ґратках має три ступеня свободи, тому в ідеальному випадку $\varphi_i \approx 1/3$, але в нашій ефективній моделі можна лише стверджувати, що $0 < \varphi_i < 1$. Тоді з (10) можна знайти залежні від температури модуль всебічного стискування, модуль Юнга та модуль зсуву відповідно:

$$K_i(T) = \frac{n_i f_i^3 [C_i - 2g_i \bar{u}_i(T)]}{9s_i(T)\varphi_i}, \quad E_i(T) = 3(1 - 2\nu_i)K_i(T), \quad (11)$$

$$G_i(T) = 3(1 - 2\nu_i)K_i(T)/[2(1 + \nu_i)],$$

де ν_i — коефіцієнт Пуассона матеріалу. Слід зазначити, що існують інші залежності модуля пружності від температури у вигляді аналітичних виразів [26—30], але залежність (11) напряму пов'язана зі зміною міжатомної відстані з температурою, що надає їй перевагу при аналізі дисторсії ґраток.

Для того щоб визначити параметри двохатомної моделі для чистих компонентів, треба скористатись експериментальними температурними залежностями $\alpha_i(T)$, $K_i(T)$, $E_i(T)$ і $G_i(T)$. Ці залежності можуть бути розраховані також за допомогою формул (8) і (11) спрощеної двохатомної моделі твердого тіла. Таким чином, можна знайти такі параметри r_i , C_i , g_i , ω_i , φ_i , щоб експериментальні і розраховані залежності були максимально близькими. Відзначимо ще раз, що параметри моделі будуть ефективними тому, що модель буде описувати макровластивості полікристалічного матеріалу, а не реальних атомів в кристалічних ґратках. Така ж процедура можлива і для опису “середніх” атомів сплаву, коли по відомих експериментальних даних $\alpha_{lat}(T)$, $K(T)$, $E(T)$ і $G(T)$ можна знайти ефективні параметри r_{lat} , C_{lat} , g_{lat} , ω_{lat} , φ_{lat} . Цікаво порівняти ці параметри з аналогічними параметрами, що знайдені за середнім за компонентами, тобто з умов: $U_{lat}(r) = \sum_i X_i U_i(r)$, $\omega_{lat} = \sum_i X_i \omega_i$, $\nu_{lat} = \sum_i X_i \nu_i$, $\varphi_{lat} = \sum_i X_i \varphi_i$, де X_i — атомна частка компонента i .

Більш складною задачею є визначення параметрів для пари атом компонента i —“середній” атом сплаву, де не існує експериментальних температурних залежностей. Можна лише припустити, що $s_{ii}(T)$ має знаходитися між $s_i(T)$ і $s_{lat}(T)$, які нам відомі. Це підтверджується моделюванням у роботі [24]. Аналогічно припустимо, що $G_{ii}(T)$ лежить між відомими $G_i(T)$ і $G(T)$. Такі залежності $s_{ii}(T)$ і $G_{ii}(T)$ можна підібрати. Також можна прийняти $\omega_{ii} = (\omega_i + \omega_{lat})/2$, $\nu_{ii} = (\nu_i + \nu_{lat})/2$, $n_{ii} = n_{lat}$, $f_{ii} = f_{lat}$. Для підібраних залежностей $s_{ii}(T)$ і $G_{ii}(T)$ можна

знайти ефективні параметри r_{ii} , C_{ii} , g_{ii} , φ_{ii} такі, щоб підібрані і теоретичні залежності були максимально близькими. Цікавою для порівняння є також оцінка $s_{ii}(T)$ і $G_{ii}(T)$ за середнім, коли $U_{ii}(r) = [U_i(r) + U_{lat}(r)]/2$, $\omega_{ii} = (\omega_i + \omega_{lat})/2$, $v_{ii} = (v_i + v_{lat})/2$, $\varphi_{ii} = (\varphi_i + \varphi_{lat})/2$, $n_{ii} = n_{lat}$, $f_{ii} = f_{lat}$. Може існувати багато варіантів підібраних залежностей $s_{ii}(T)$ і $G_{ii}(T)$, але нас цікавить тільки такий варіант, в якому невідповідності розмірів та модулів пружності розчинених атомів по відношенню до атомів матриці-розчинника δ_i та η_i , що розраховані за формулами [3]

$$\delta_i = 2 \frac{s_{ii}(T) - s_{lat}(T)}{s_{ii}(T) + s_{lat}(T)} \quad \text{і} \quad \eta_i = 2 \frac{G_{ii}(T) - G_{lat}(T)}{G_{ii}(T) + G_{lat}(T)}, \quad (12)$$

дають середню дисторсію кристалічних ґраток χ , яка розрахована за формулою [4]

$$\chi = \left[\sum_{i=1}^N \varepsilon_i X_i \right]^{2/3}, \quad (13)$$

де $\varepsilon_i = (\eta_i^2 + \alpha^2 \delta_i^2)^{0.5}$ [31]; $\eta'_i = \eta_i / (1 + 0.5|\eta_i|)$; α — константа, яка залежить від типу дислокацій (для крайових дислокацій $\alpha = 16$); X_i — атомна частка компонента i є такою, що збільшується з температурою таким чином, що компенсує зменшення модуля зсуву.

Важливо довести, що такі залежності $s_{ii}(T)$ і $G_{ii}(T)$, які відповідають умовам близькості до $s_i(T)$ та $s_{lat}(T)$ і $G_i(T)$ та $G(T)$ відповідно, дійсно існують, оскільки компенсація зменшення модуля зсуву насправді спостерігається в експериментах, де є “плато”. Таким чином, можна було б довести гіпотезу, що зменшення модулю зсуву з температурою може компенсуватися збільшенням середньої дисторсії кристалічних ґраток.

Результати обчислювального експерименту та їх обговорення

Для моделювання залежності невідповідностей розмірів та модулів пружності розчинених атомів по відношенню до атомів матриці-розчинника і середньої дисторсії кристалічних ґраток від температури було обрано багатокомпонентний сплав CrCoNiFeMn з ГЦК ґратками. Експериментальні температурні залежності $\alpha_i(T)$, $E_i(T)$ для чистих компонентів і $\alpha_{lat}(T)$, $E(T)$, $G(T)$ для сплаву CrCoNiFeMn наведені в роботах [32, 33]. Залежності $K_i(T)$, $G_i(T)$ та $K(T)$ можуть бути розраховані з $E_i(T)$ і $E(T)$ з урахуванням відповідних коефіцієнтів Пуассона. Експериментальні і відповідно підібрані теоретичні залежності $\alpha_i(T)$, $\alpha_{lat}(T)$, $E_i(T)$, $G_i(T)$, $K_i(T)$, $E(T)$, $G(T)$, $K(T)$ показано на рис. 2. Видно, що спрощена двохатомна модель дає теоретичні залежності, які дуже добре корелюють з експериментальними даними. Знайдені параметри двохатомної моделі для чистих компонентів і для сплаву CrCoNiFeMn наведено в табл. 1 і 2 відповідно. Ефективні частоти за порядком величини добре корелюють з частотою теплових коливань атомів у твердому тілі. Якщо порівняти параметри для сплаву, які знайдені за експериментальними даними і за

середнім за компонентами (табл. 2), то видно, що вони відносно близькі, але точно розрахувати параметри двохатомної моделі, котрі відповідають експериментальним залежностям, простим усередненням параметрів міжатомних потенціалів компонентів практично неможливо.

Залежності модулів пружності і міжатомних відстаней від температури для атомів компонентів всередині сплаву в оточенні атомів інших компонентів будуть відмінними від відповідних залежностей для чистих компонентів чи для сплаву. Можна зробити лише фізично обґрунтоване

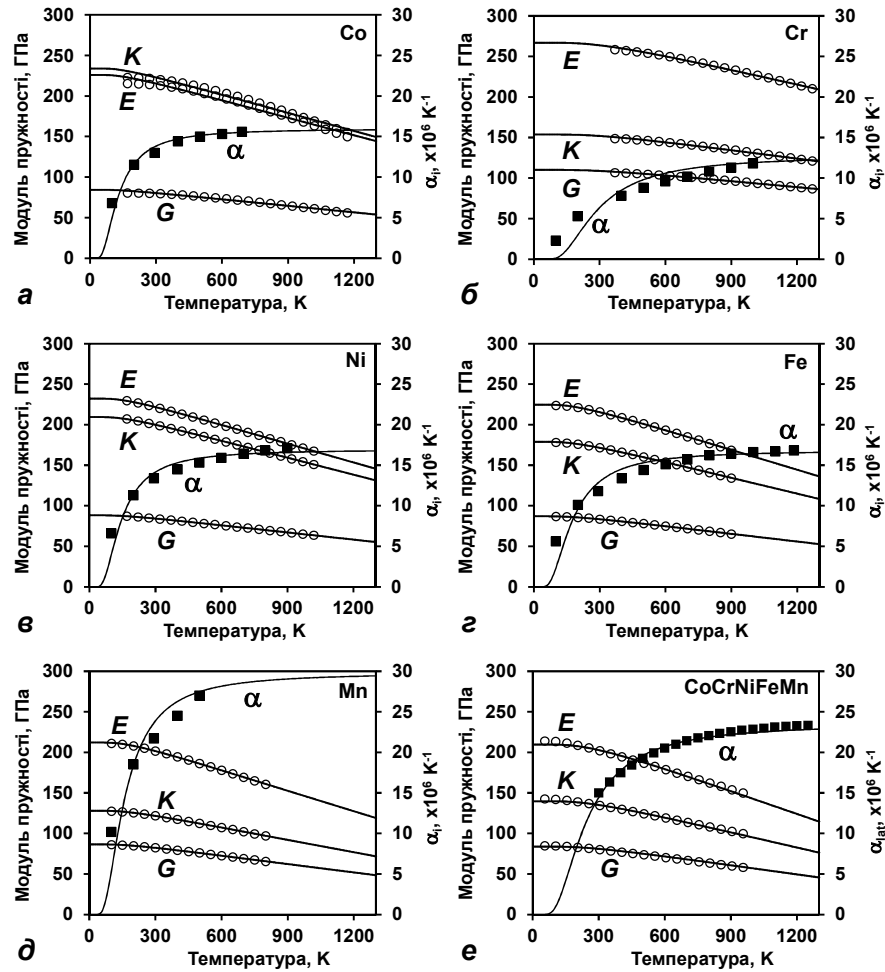


Рис. 2. Експериментальні і відповідно підібрані теоретичні залежності модулів пружності і коефіцієнтів термічного розширення від температури: *a* — Co; *b* — Cr; *c* — Ni; *z* — Fe; *d* — Mn; *e* — CrCoNiFeMn. Кола і квадрати — експериментальні дані.

Т а б л и ц я 1. Параметри двохатомної моделі для чистих компонентів

Параметр	Co	Cr	Ni	Fe	Mn
r_i , нм	0,248	0,25	0,248	0,247	0,248
$U_i(r_i)$, eВ	-4,39	-4,1	-4,44	-4,28	-2,92

C_i , Н/М	129,43	139,29	119,76	131,77	43
g_i , Н/М ²	$4,824 \cdot 10^{12}$	$4,507 \cdot 10^{12}$	$4,376 \cdot 10^{12}$	$5,245 \cdot 10^{12}$	$9,983 \cdot 10^{11}$
ω_i , рад/с	$5,185 \cdot 10^{13}$	$1,172 \cdot 10^{14}$	$5,795 \cdot 10^{13}$	$6,992 \cdot 10^{13}$	$6,458 \cdot 10^{13}$
v_i	0,34	0,21	0,32	0,29	0,22
φ_i	0,33	0,47	0,34	0,39	0,18
n_i	6	2	4	2	58
f_i	0,619	0,866	0,707	0,866	0,283
$p_i^{(0)}$, Н·м	$2,791 \cdot 10^{-17}$	$2,73 \cdot 10^{-17}$	$2,513 \cdot 10^{-17}$	$2,957 \cdot 10^{-17}$	$5,96 \cdot 10^{-18}$
$p_i^{(1)}$, Н	$-3,296 \cdot 10^{-7}$	$-3,175 \cdot 10^{-7}$	$-2,981 \cdot 10^{-7}$	$-3,517 \cdot 10^{-7}$	$-7,225 \cdot 10^{-8}$
$p_i^{(2)}$, Н/М	1262,646	1198,148	1143,804	1359,727	269,426
$p_i^{(3)}$, Н/М ²	$-1,608 \cdot 10^{12}$	$-1,502 \cdot 10^{12}$	$-1,459 \cdot 10^{12}$	$-1,748 \cdot 10^{12}$	$-3,328 \cdot 10^{11}$

Т а б л и ц я 2. Параметри двохатомної моделі для сплаву CrCoNiFeMn

Параметр	CoCrNiFeMn (за експериментальними даними)	CoCrNiFeMn (за середнім за компонентами)
r_{lat} , нм	0,251	0,248
$U_{lat}(r_{lat})$, еВ	-3,98	-4,03
C_{lat} , Н/М	76,03	104,81
g_{lat} , Н/М ²	$2,494 \cdot 10^{12}$	$4,091 \cdot 10^{12}$
ω_{lat} , рад/с	$9,713 \cdot 10^{13}$	$7,229 \cdot 10^{13}$
v_{lat}	0,25	0,28
φ_{lat}	0,29	0,34
n_{lat}	4	—
f_{lat}	0,707	—
$p_{lat}^{(0)}$, Н·м	$1,494 \cdot 10^{-17}$	$2,317 \cdot 10^{-17}$
$p_{lat}^{(1)}$, Н	$-1,765 \cdot 10^{-7}$	$-2,767 \cdot 10^{-7}$
$p_{lat}^{(2)}$, Н/М	664,424	1065,256
$p_{lat}^{(3)}$, Н/М ²	$-8,312 \cdot 10^{11}$	$-1,364 \cdot 10^{12}$

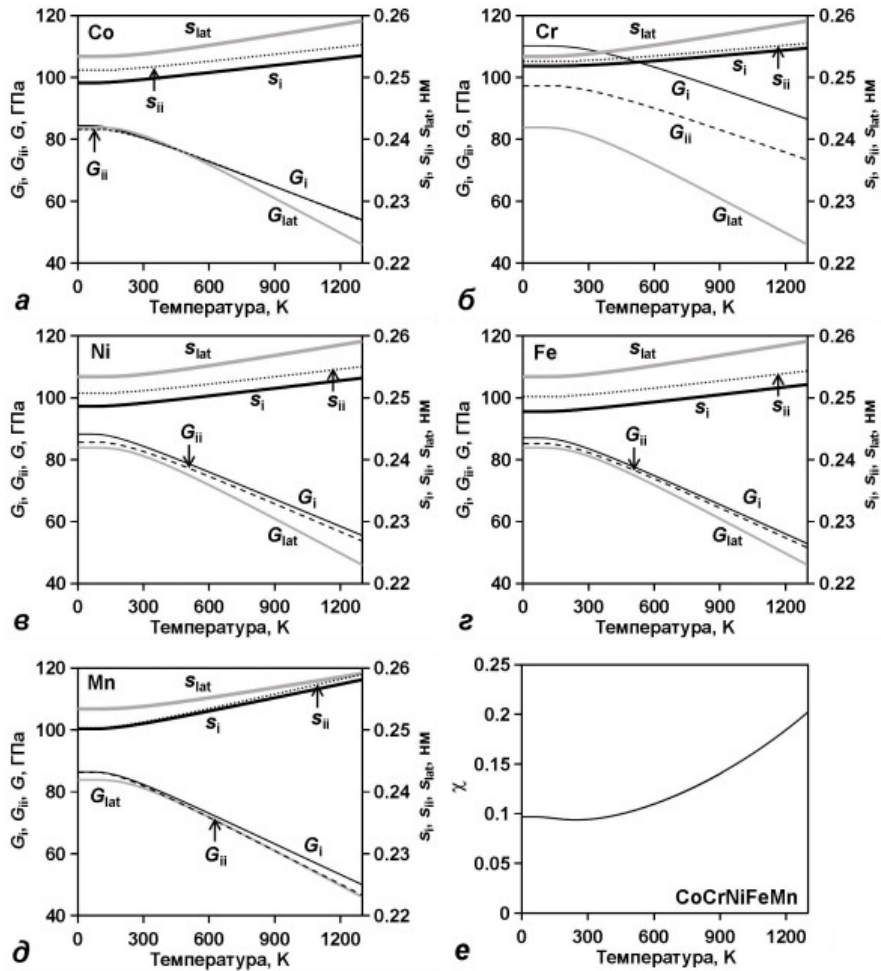


Рис. 3. Залежності модулів пружності і міжатомних відстаней від температури для чистих компонентів, сплаву та атомів компонентів всередині сплаву: *a* — Co; *б* — Cr; *в* — Ni; *г* — Fe; *д* — Mn; *е* — середня дисторсія ґраток в CrCoNiFeMn.

припущення, що $s_{ii}(T)$ і $G_{ii}(T)$ повинні бути подібними до відомих нам $s_i(T)$, $s_{lat}(T)$, $G_i(T)$, $G(T)$ і знаходитися між цими залежностями в усьому діапазоні температур. Подібними — це значить мати “поличку” за низьких температур і наближатися до прямої з певним нахилом — за високих. Найпростішим способом задати такі $s_{ii}(T)$ і $G_{ii}(T)$ є лінійна комбінація $s_i(T)$ та $s_{lat}(T)$ і $G_i(T)$ та $G(T)$ відповідно. Залежності модулів пружності і міжатомних відстаней від температури для чистих компонентів, сплаву та підібрані належним чином (спеціальний випадок) так, щоб середня дисторсія кристалічних ґраток χ збільшувалася з температурою і компенсувала зменшення модуля зсуву, для атомів компонентів всередині сплаву показано на рис. 3. Параметри відповідної двохатомної моделі для

Т а б л и ц я 3. Параметри двохатомної моделі для атомів

компонентів всередині сплаву CrCoNiFeMn

Параметр	Co	Cr	Ni	Fe	Mn
r_{ii} , нм	0,25/0,249	0,251/0,251	0,25/0,249	0,249/0,249	0,248/0,25
C_{ii} , Н/м	134,05/101,63	162,64/107,64	126,05/96,58	137,75/101,03	39,5/60,09
g_{ii} , Н/м ²	5,15·10 ¹² / 3,659·10 ¹²	5,998·10 ¹² / 3,5·10 ¹²	4,819·10 ¹² / 3,435·10 ¹²	5,684·10 ¹² / 3,869·10 ¹²	9,16·10 ¹¹ / 1,746·10 ¹²
ω_{ii} , рад/с	7,449·10 ¹³	1,071·10 ¹⁴	7,754·10 ¹³	8,353·10 ¹³	6,458·10 ¹³
v_{ii}	0,29	0,23	0,28	0,27	0,24
Φ_{ii}	0,44/0,31	0,62/0,38	0,42/0,31	0,49/0,34	0,17/0,21
n_{ii}	4	4	4	4	4
f_{ii}	0,707	0,707	0,707	0,707	0,707
$p_{ii}^{(1)}$, Н	-3,556·10 ⁻⁷ / -2,53·10 ⁻⁷	-4,197·10 ⁻⁷ / -2,47·10 ⁻⁷	-3,315·10 ⁻⁷ / -2,373·10 ⁻⁷	-3,863·10 ⁻⁷ / -2,641·10 ⁻⁷	-6,63·10 ⁻⁸ / -1,244·10 ⁻⁷
$p_{ii}^{(2)}$, Н/м	1354,939/ 963,535	1588,827/ 931,286	1265,573/ 904,114	1483,413/ 1012,075	247,192/ 466,92
$p_{ii}^{(3)}$, Н/м ²	-1,717·10 ¹² / -1,22·10 ¹²	-1,999·10 ¹² / -1,167·10 ¹²	-1,606·10 ¹² / -1,145·10 ¹²	-1,895·10 ¹² / -1,29·10 ¹²	-3,053·10 ¹¹ / -5,82·10 ¹¹

атомів компонентів всередині сплаву CrCoNiFeMn наведено в табл. 3. Через косу риску показано для порівняння параметри, знайдені за середнім. Вони близькі за порядком величини, але неточні і досить відрізняються. Розрахована середня дисторсія ґраток в CrCoNiFeMn показана на рис. 3, *e*. Для спеціально підібраних залежностей модулів пружності і міжатомних відстаней від температури для атомів компонентів всередині сплаву (спеціальний випадок) середня дисторсія збільшується з підвищенням температури.

Залежності від температури відносного модуля зсуву $G(T)/G(0)$, відносної середньої дисторсії $\chi(T)/\chi(0)$ і фактора компенсації $\kappa(T) = \chi(T)G(T)/[\chi(0)G(0)]$ показано на рис. 4. Товста сіра лінія відповідає

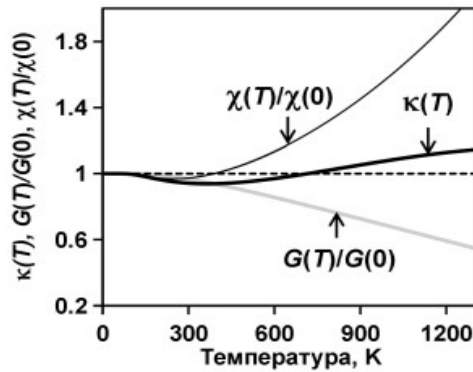


Рис. 4. Залежності від температури відносного модуля зсуву сплаву, відносної середньої дисторсії і фактора компенсації.

залежності від температури відносного модуля зсуву $G(T)/G(0)$. Ця залежність зменшується зі збільшенням температури. Пунктирна лінія

показує рівень, який складає одиницю. Тонка чорна лінія — це залежність від температури відносної середньої дисторсії $\chi(T)/\chi(0)$, яка зростає з температурою. Товста чорна лінія на рис. 4 відповідає фактору компенсації $\kappa(T)$. У спеціальному випадку фактор компенсації $\kappa(T)$ близький до одиниці в усьому діапазоні температур і зменшення модуля зсуву компенсується збільшенням дисторсії. Тим самим підтверджується гіпотеза [19], що така компенсація може залежати від зміщення атомів в результаті теплових коливань, це призводить до зміни положення рівноваги атомів та теплового розширення матеріалу з підвищенням температури. Це явище можна назвати зростанням середніх квадратичних зміщень атомів з ідеальних положень в кристалічних ґратках в результаті збільшення спотворень ґраток з підвищенням температури.

Висновки

Показано, що існують такі залежності міжатомних відстаней і модулів пружності для атомів компонентів всередині сплаву CrCoNiFeMn від температури, кожна з яких знаходиться між відповідними залежностями для чистого компонента та сплаву в цілому і подібна до них, при цьому невідповідності атомних розмірів і модулів пружності цих атомів по відношенню до “середніх” атомів сплаву дають дисторсію кристалічних ґраток, що збільшується з температурою і може компенсувати зменшення модуля зсуву. Таким чином, це може пояснити компенсацію зменшення модуля зсуву з підвищенням температури, яка насправді спостерігається в експериментах, де існує “плато”.

Список літератури

1. Miracle D.B., Senkov O.N. A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Mater.* 2017. Vol. 122. P. 448—511. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
2. George E.P., Curtin W.A., Tazan C.C. High entropy alloys: A focused review of mechanical properties and deformation mechanisms. *Acta Mater.* 2020. Vol. 188. P. 435—474. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.12.015>
3. Lugovy M., Slyunyayev 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>
4. Луговий М.І., Вербило Д.Г., Бродніковський М.П. Моделювання поля зсувних напружень в площині ковзання в твердому розчині заміщення. *Усниху матеріалознавства.* 2021. № 3. С. 24—37. <https://doi.org/10.15407/materials2021.03.024>
5. Nabarro F. Solution and precipitation hardening. In P. Hirsch (Author). *The Physics of Metals.* Cambridge: Cambridge University Press, 1976. P. 152—188. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511760020.007>
6. Labusch R. Physical aspects of precipitation- and solid solution-hardening. *Czech. J. Phys.* 1981. Vol. 31. P. 165—176. <https://doi.org/10.1007/BF01959439>
7. Varvenne C., Luque A., Curtin W.A. Theory of strengthening in fcc high entropy alloys. *Acta Mater.* 2016. Vol. 118. P. 164—176.

- <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.07.040>
8. 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>
 9. Nöhring W.G., Curtin W.A. Correlation of microdistortions with misfit volumes in High Entropy Alloys. *Scripta Mater.* 2019. Vol. 168. P. 119—123. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2019.04.012>
 10. 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. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.06.050>
 11. Zaiser M. Dislocation motion in a random solid solution. *Philos. Mag. A.* 2002. Vol. 82, No. 15. P. 2869—2883. <https://doi.org/10.1080/01418610208240071>
 12. Zhai J.-H., Zaiser M. Properties of dislocation lines in crystals with strong atomic-scale disorder. *Mater. Sci. Engineering: A.* 2019. Vol. 740—741. P. 285—294. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2018.10.010>
 13. Pasianot R., Farkas D. Atomistic modeling of dislocations in a random quinary high-entropy alloy. *Comp. Mater. Sci.* 2020. Vol. 173. P. 109366. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109366>
 14. Луговой М.І., Слюняев В.М., Бродніковський М.П., Фірстов С.О. Розрахунок твердорозчинного зміцнення багатокомпонентних жароміцних сплавів. *Електронна мікроскопія і прочність матеріалів.* 2017. Вып. 23. С. 3—9.
 15. 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.* 2019. Вып. 25. С. 26—34.
 16. Луговой М.І., Вербилло Д.Г., Бродніковський М.П. Форма лінії дислокації в полі стохастичних зсувних напружень. *Успіхи матеріалознавства.* 2021. № 2. С. 19—34. <https://doi.org/10.15407/materials2021.02.019>
 17. Луговой М.І., Вербилло Д.Г., Бродніковський М.П. Дві компоненти поля зсувних напружень в площині ковзання в багатокомпонентних сплавах. *Успіхи матеріалознавства.* 2022. № 4/5. С. 12—24. <https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.012>
 18. Луговой М.І., Вербилло Д.Г., Бродніковський М.П. Еволюція форми лінії дислокації в багатокомпонентному сплаві під навантаженням. *Успіхи матеріалознавства.* 2022. № 4/5. С. 36—50. <https://doi.org/10.15407/materials2022.04-05.036>
 19. Фірстов С.О., Рогуль Т.Г. “Плато” на температурній залежності критичного напруження зсуву в бінарних і полікомпонентних твердих розчинах та в чистих металах. *Металофіз. новітні технології.* 2022. Т. 44. С. 127—140. <https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127>
 20. 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 $\text{Ti}_{30}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{15}\text{Nb}_{20}\text{Ta}_{10}$ high entropy alloy at temperatures 4.2—350 K. *Mater. Sci. Engineering: A.* 2018. Vol. 710. P. 136—141. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2017.10.073>
 21. 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>
22. Фирстов С.А., Роголь Т.Г. Термоактивационный анализ температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ГЦК решеткой. *Металлофіз. новітні технології*. 2017. Т. 39. С. 33—48. <https://doi.org/10.15407/mfint.39.01.0033>
 23. Okamoto N.L., Yuge K., Tanaka K., Inui H., & George E.P. Atomic displacement in the CrMnFeCoNi high-entropy alloy — A scaling factor to predict solid solution strengthening. *AIP Advances*. 2016. Vol. 6. P. 125008. <https://doi.org/10.1063/1.4971371>
 24. Toda-Caraballo I., Wrobel J.S., Dudarev S.L., Nguyen-Manh D., Rivera-Diaz-del-Castillo P.E. Interatomic spacing distribution in multicomponent alloys. *Acta Mater*. 2015. Vol. 97. P. 156—169. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.07.010>
 25. Feynman R.P. *Statistical mechanics: A set of lectures*. Boca Raton: CRC Press, 1998. 372 p. <https://doi.org/10.1201/9780429493034>
 26. Zakarian D., Khachatryan A., Firstov S. Universal temperature dependence of Young's modulus. *Metal Powder Report*. 2019. Vol. 74, No. 4. P. 204—206. <https://doi.org/10.1016/j.mprp.2018.12.079>
 27. Фірстов С.О., Луговський Ю.Ф. Температурні залежності модуля Юнга металів з різними кристалічними ґратками у широкому діапазоні температур. *Успіхи матеріалознавства*. 2023. No. 6. С. 3—14. <https://doi.org/10.15407/materials2023.06.003>
 28. Фирстов С.А., Саржан Г.Ф. О температурной зависимости коэффициента диффузии. *Электронная микроскопия и прочность материалов*. 2014. Вып. 20. С. 71—75.
 29. Varshni Y.P. Temperature dependence of the elastic constants. *Phys. Rev. B*. 1970. Vol. 2. P. 3952—3958. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.2.3952>
 30. Wachtman J.B., Jr., Tefft W.E., Lam D.G., Jr., Apstein C.S. Exponential temperature dependence of Young's modulus for several oxides. *Phys. Rev.* 1961. Vol. 122. P. 1754. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.122.1754>
 31. 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>
 32. Touloukian Y.S., Kirky R.K., Taylor R.E., Desai P.D. *Thermophysical properties of matter, Thermal expansion: Metallic elements and alloys*, TPRC Data Books. New York: Plenum Press, 1975, 1421 p. doi: 10.1007/978-1-4757-1622-1
 33. Laplanche G., Gadaud P., Horst O., Otto F., Eggeler G., George E.P. Temperature dependencies of the elastic moduli and thermal expansion coefficient of an equiatomic, single-phase CoCrFeMnNi high-entropy alloy. *J. Alloys Comp.* 2015. Vol. 623. P. 348—353. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.11.061>