

PACS numbers: 61.72.Hh, 62.20.F-, 62.40.+i, 65.40.De, 81.40.Cd, 81.40.Lm, 83.60.La

## **Термоактивационный анализ температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ОЦК-решёткой**

С. А. Фирстов, Т. Г. Рогуль, Н. А. Крапивка, С. И. Чугунова

*Институт проблем материаловедения им. И. Н. Францевича НАН Украины,  
ул. Кржижановского, 3,  
03142 Киев, Украина*

Проведён сравнительный анализ температурных зависимостей предела текучести поликомпонентных и бинарных твёрдых растворов с ОЦК-решёткой (AlCrFeCoNi, AlTiVCrNbMo,  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12,5}Ta_{12,5}$ , VNbMoTaW, Fe–Cr, Fe–Mo, Fe–W, Cr–Fe), а также некоторых чистых ОЦК-металлов. Методом термоактивационного анализа вычислены значения энергии активации движения дислокаций и активационного объёма. Показано, что, как для бинарных, так и для поликомпонентных твёрдых растворов, характерно увеличение атермической компоненты напряжения течения в сравнении с чистыми ОЦК-металлами. При этом, в сравнении с чистыми металлами, поликомпонентные твёрдые растворы демонстрируют усиление термической составляющей, в то время как для бинарных ОЦК-сплавов имеет место ослабление температурной зависимости напряжения течения. Обсуждается природа этого эффекта. Показано, что высокое атермическое твёрдорастворное упрочнение поликомпонентных твёрдых растворов может быть связано с изменением вектора Бюргера вдоль дислокационной линии (как по длине, так и по направлению) и появлением составляющей, перпендикулярной плоскости скольжения. Наблюдаемое усиление термической составляющей напряжения течения в поликомпонентных ОЦК-твёрдых растворах предположительно обусловлено наличием высокой концентрации точек закрепления термически активирова-

---

Corresponding author: Tamara Grygorivna Rogul  
E-mail: rogul.tamara@gmail.com

*I. M. Frantsevich Institute for Problems in Materials Science, N.A.S. of Ukraine,  
3 Academician Krzhyzhanovskyy Str., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

Citation: S. O. Firstov, T. G. Rogul, M. O. Krapivka, and S. I. Chugunova, Thermoactivation Analysis of Temperature Dependence of a Flow Stress in Solid Solutions with a B.C.C. Lattice, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **40**, No. 2: 219–234 (2018) (in Russian), DOI: 10.15407/mfint.40.02.0219.

мого дислокационного отрезка атомами элементов, которые имеют высокий уровень размерно-упругого несоответствия по сравнению со средним значением для сплава.

**Ключевые слова:** критическое напряжение сдвига, предел текучести, энергия активации движения дислокаций, активационный объем.

Проведено порівняльну аналізу температурних залежностей межі плинності полікомпонентних і бінарних твердих розчинів з ОЦК-гратницею (AlCrFeCoNi, AlTiVCrNbMo,  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$ , VNbMoTaW, Fe–Cr, Fe–Mo, Fe–W, Cr–Fe), а також деяких чистих ОЦК-металів. Методом термоактиваційної аналізи розраховано значення енергії активації руху дислокацій та активаційного об'єму. Показано, що, як для бінарних, так і для полікомпонентних твердих розчинів, характерним є збільшення атермічної компоненти напруження плинності в порівнянні з чистими ОЦК-металами. При цьому, у порівнянні з чистими металами, полікомпонентні тверді розчини демонструють посилення термічної складової напруження плинності, в той час як для бінарних ОЦК-сплавів відбувається її послаблення. Обговорюється природа цього ефекту. Показано, що високе атермічне твердорозчинне зміцнення полікомпонентних твердих розчинів може бути пов'язане зі зміною Бюргерсового вектора уздовж дислокаційної лінії (як за довжиною, так і за напрямком) і появою компоненти, перпендикулярної до площини ковзання. Припускається, що посилення термічної складової температурної залежності межі плинності полікомпонентних ОЦК-твердих розчинів зумовлене наявністю високої концентрації точок закріплення термічно активованого дислокаційного відрізка атомами елементів, які мають високий рівень розмірно-пружної невідповідності в порівнянні з середнім значенням для стопу.

**Ключові слова:** критичне напруження зсуву, межа плинності, енергія активації руху дислокацій, активаційний об'єм.

Comparative analysis of the yield-stress temperature dependences for polycomponent and binary solid solutions with a b.c.c. lattice (AlCrFeCoNi, AlTiVCrNbMo,  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$ , VNbMoTaW, Fe–Cr, Fe–Mo, Fe–W, Cr–Fe), and some pure b.c.c. metals is carried out. Using the thermoactivation analysis, the values of the activation energy of dislocation movement and the activation volume are calculated. As shown, for the binary and polycomponent solid solutions, an increase in athermal component of a flow stress is characteristic in comparison with pure b.c.c. metals. In this case, in comparison with pure metals, multicomponent solid solutions demonstrate an increasing of the thermal component, while for binary b.c.c. alloys, there is a weakening of the temperature dependence of a flow stress. The nature of this effect is discussed. As shown, high athermal solid-solution hardening of polycomponent solid solutions can be associated with a change of the Burgers vector (by both the length and the direction) along the dislocation line and an appearance of a component perpendicular to the glide plane. The observed increase of the flow-stress thermal component in polycomponent b.c.c. solid solutions is presumably due to the presence of a high concentration of points of fixation of the thermally activated dislocation segment by atoms of elements, which have a high level of size-elastic discrepancy in comparison with

an average value for the alloy.

**Key words:** critical shear stress, yield stress, activation energy for dislocation motion, activation volume.

*(Получено 24 октября 2017 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] приведены результаты анализа температурной зависимости предела текучести  $\sigma_{0,2}$  (или соответствующего критического напряжения сдвига  $\tau_{кр} = \sigma_{0,2}/2$ ) некоторых чистых металлов, а также бинарных и поликомпонентных (высокоэнтропийных) твёрдых растворов с ГЦК-решёткой. Показано, что в сравнении с чистыми металлами с ГЦК-решёткой в бинарных и поликомпонентных твёрдых растворах с таким же типом решётки наблюдается как существенное увеличение атермической компоненты температурной зависимости предела текучести, так и более резкая зависимость её термической компоненты. При этом в бинарных и поликомпонентных твёрдых растворах энергия активации движения дислокаций ( $U_0$ ) или соизмерима с таковой в чистых металлах, или несколько возрастает, в то же время активационный объём ( $V$ ) в твёрдых растворах меньше, чем в чистых металлах. Как в бинарных, так и в поликомпонентных системах добавление входящего в твёрдый раствор легирующего элемента приводит к усилению термической компоненты зависимости предела текучести и росту атермической. Наряду с этим наблюдается тенденция к увеличению значений  $U_0$  и уменьшению значений  $V$ . При этом в поликомпонентных твёрдых растворах вышеуказанные эффекты проявляются ярче. Как указывается в работе [1], отмеченные изменения характера температурной зависимости предела текучести, а также значений  $U_0$  и  $V$  при легировании твёрдого раствора связаны с возрастанием уровня пикоразмерных дисторсий кристаллической решётки и с уменьшением расстояния между точками закрепления дислокаций атомами легирующих элементов. Это приводит к увеличению сил «трения» со стороны кристаллической решётки при движении дислокаций, вследствие чего температурная зависимость напряжения течения ГЦК-твёрдых растворов становится подобной ОЦК-металлам (b.c.c.-like behaviour).

В то же время, в работе [2] показано, что для ОЦК-высокоэнтропийного сплава AlTiVCrNbMo, также как и для ГЦК-бинарных и поликомпонентных твёрдых растворов, наблюдается резкое усиление температурной зависимости напряжения течения и аномально высокое атермическое упрочнение в сравнении с чистыми ОЦК-металлами. Это вызывает интерес к системному исследованию особен-

ностей температурной зависимости напряжения течения в твёрдых растворах с ОЦК кристаллической решёткой. В этой связи в настоящей работе проведён сравнительный анализ характера изменения температурной зависимости предела текучести поликомпонентных (высокоэнтропийных) и бинарных твёрдых растворов с ОЦК-решёткой ( $\text{AlCrFeCoNi}$ ,  $\text{AlTiVCrNbMo}$  [2],  $\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Nb}_{12,5}\text{Ta}_{12,5}$  [3],  $\text{VNbMoTaW}$  [4],  $\text{Fe-Cr}$ ,  $\text{Fe-Mo}$ ,  $\text{Fe-W}$ ,  $\text{Cr-Fe}$  [5]), а также некоторых чистых ОЦК-металлов; методом термоактивационного анализа вычислены значения энергии активации движения дислокаций  $U_0$  и активационного объёма  $V$ .

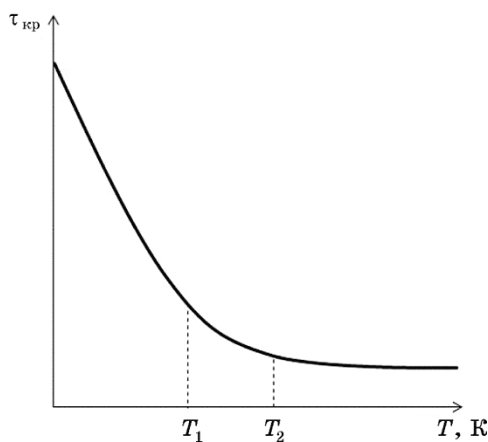
## 2. МЕТОДИКА АНАЛИЗА

Расчёт энергии активации движения дислокаций  $U_0$  и активационного объёма  $V$  проведены в соответствии с изложенной в работе Трефилова и Мильмана [6] методикой, основывающейся на анализе экспериментальной температурной зависимости критического напряжения сдвига  $\tau_{\text{кр}}$  (рис. 1). Детальный сравнительный анализ методик термоактивационного анализа представлен в работе [1].

Согласно [6] компонента напряжения течения при температурах порядка  $(0,1-0,2)T_{\text{пл}}$  хорошо описывается выражением:

$$\tau = (3B \dot{\epsilon} kT/V)^{1/3} \exp(U_0/(3kT)), \quad (1)$$

а для более низких температур выражением:



**Рис. 1.** Схематическая зависимость критического напряжения сдвига от температуры [6].

**Fig. 1.** Schematic representation of dependence of the critical shear stress on the temperature [6].

$$\tau = (U_0 - kT \ln(M) / \dot{\epsilon}) / V. \quad (2)$$

Здесь  $B$  — константа материала,  $\dot{\epsilon}$  — скорость деформации,  $k$  — постоянная Больцмана,  $U_0$  — энергия активации движения дислокаций,  $V$  — активационный объём,  $T$  — температура; величина  $\ln M$  слабо зависит от температуры.

Таким образом, при температурах ниже  $T_1$  термическая компонента  $\tau_T$  зависимости  $\tau_{кр}(T)$  может быть описана уравнением прямой линии (2), а в интервале температур  $T_1 < T < T_2$  носит экспоненциальный характер и описывается уравнением (1) (рис. 1). Выше  $T_2$ , вплоть до температур  $(0,35-0,4)T_{пл}$ , упрочнение носит атермический характер и не определяется барьерами, преодоление которых возможно с помощью термических флуктуаций.

Для расчёта  $U_0$  данные по температурной зависимости критического напряжения сдвига обрабатываются в координатах  $\ln \tau_{кр}(1/T)$  и в области температур  $(0,1-0,2)T_{пл}$ , где зависимость описывается уравнением (1), по наклону прямой линии определяется энергия активации  $U_0$ . Затем, определяя  $\tau_{(0)}$  из экстраполяции зависимости  $\tau_T$  на 0 К и, используя уравнение (2), можно определить  $V$ :

$$V = U_0 / \tau_T. \quad (3)$$

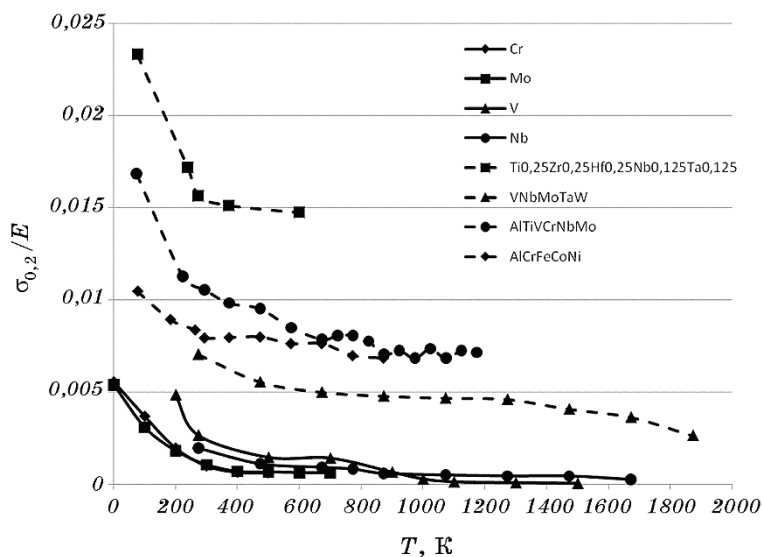
Важно отметить, что при определении значений  $\tau_T$  и  $\tau_{(0)}$  необходимо вычесть значение атермической составляющей  $\tau_a$ , представляющей собой сумму слагаемых, которые не зависят или слабо зависят от температуры.

При анализе экспериментальных данных температурной зависимости твёрдости по Виккерсу для пересчёта твёрдости  $H$  в предел текучести  $\sigma_{0,2}$  использовали соотношение Тейбора [7] между твёрдостью и напряжением течения ( $\sigma_{0,2} = H/3$ ).

### 3. АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ НАПРЯЖЕНИЯ ТЕЧЕНИЯ В ТВЁРДЫХ РАСТВОРАХ С ОЦК-РЕШЁТКОЙ

#### 3.1. Температурные зависимости предела текучести поликомпонентных (высокоэнтропийных), бинарных твёрдых растворов и чистых металлов с ОЦК-решёткой

На рисунке 2 приведены температурные зависимости нормированного на модуль Юнга  $E$  напряжения течения  $\sigma_{0,2}$  для однофазных поликомпонентных (высокоэнтропийных) ОЦК-сплавов AlCrFeCoNi, AlTiVCrNbMo, Ti<sub>25</sub>Zr<sub>25</sub>Hf<sub>25</sub>Nb<sub>12,5</sub>Ta<sub>12,5</sub>, VNbMoTaW и для ОЦК-металлов — хрома, молибдена, ванадия и ниобия. Для построения использованы приведённые в работах [2–4, 8–11] экспериментальные температурные зависимости предела текучести



**Рис. 2.** Температурная зависимость нормированного на модуль Юнга ( $E$ ) напряжения течения ( $\sigma_{0,2}$ ) для ОЦК высокоэнтропийных сплавов AlCrFeCoNi, AlTiVCrNbMo [2],  $\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Nb}_{12,5}\text{Ta}_{12,5}$  [3], VNbMoTaW [4] и для металлов с ОЦК-решёткой — хрома, молибдена, ванадия и ниобия [8, 9–11].

**Fig. 2.** Temperature dependence of a flow stress ( $\sigma_{0,2}$ ) normalized to the Young's modulus ( $E$ ) for the high-entropy b.c.c. alloys AlCrFeCoNi, AlTiVCrNbMo [2],  $\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Nb}_{12,5}\text{Ta}_{12,5}$  [3], VNbMoTaW [4] and for b.c.c. metals—chromium, molybdenum, vanadium and niobium [8, 9–11].

(твёрдости) для металлов и высокоэнтропийных сплавов с ОЦК-решёткой. Табличные значения  $E$  для металлов взяты из [12], для сплавов AlTiVCrNbMo,  $\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Nb}_{12,5}\text{Ta}_{12,5}$ , VNbMoTaW экспериментальные значения  $E$  указаны в работах [2–4] (см. табл. 1). Значения  $E$  сплава AlCrFeCoNi рассчитаны в приближении правила смеси Вегарда:  $E_{\text{см}} = \sum_i c_i E_i$ , где  $c_i$  — концентрация входящего в сплав элемента,  $E_i$  — модуль Юнга входящего в сплав элемента.

Данные по температурной зависимости  $\sigma_{0,2}$  сплава AlCrFeCoNi, выплавленного вакуумно-дуговой плавкой в атмосфере очищенного аргона, получены в настоящей работе по данным измерения твёрдости в диапазоне температур 77–1073 К [13, 14].

Как видно из рис. 2, б, все высокоэнтропийные сплавы с ОЦК-решёткой в сравнении с металлами с таким же типом кристаллической решётки отличаются аномально высоким атермическим упрочнением. При этом для сплавов AlTiVCrNbMo и  $\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Nb}_{12,5}\text{Ta}_{12,5}$  характерно усиление термической составляющей температурной зависимости напряжения течения в сравнении с чистыми металлами. Анализ термической составляющей за-

**ТАБЛИЦА 1.** Модуль Юнга ( $E$ ) чистых металлов [12] и сплавов AlTiVCrNbMo, AlCrFeCoNi,  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$ , VNbMoTaW с ОЦК кристаллической решёткой [2–4].

**TABLE 1.** Young's modulus ( $E$ ) of pure metals [12] and alloys AlTiVCrNbMo, AlCrFeCoNi,  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$ , VNbMoTaW with b.c.c. crystal lattice [2–4].

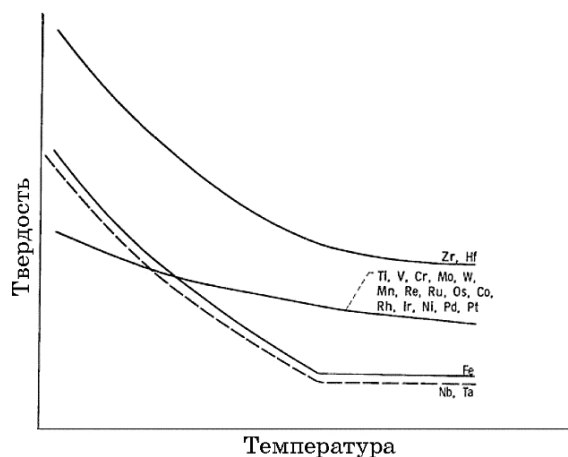
Металлы и сплавы	$E$ , ГПа
Cr	279
V	128
Mo	329
Nb	105
Al	70
Fe	211
Co	209
Ni	200
AlTiVCrNbMo [2]	161
AlCrFeCoNi	194 (расчёт)
$Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$ [3]	78
VNbMoTaW [4]	180

висимости напряжения течения для сплавов AlCrFeCoNi и VNbMoTaW, ввиду отсутствия экспериментальных точек при низких температурах, не представляется возможным.

В то же время, как известно [5, 15–18 и др.], бинарные и тройные ОЦК твёрдые растворы демонстрируют более слабую температурную зависимость предела текучести (твёрдости) от температуры, чем чистые базовые металлы, т.е. так называемое разупрочнение при легировании (solid-solution softening). Даже небольшие добавки легирующих элементов при низких температурах понижают предел текучести в сравнении с основным металлом. Однако атермическая составляющая температурной зависимости предела текучести (твёрдости) от температуры при этом повышается (рис. 3).

### 3.2. Результаты термоактивационного анализа температурных зависимостей напряжения течения твёрдых растворов с ОЦК-решёткой

В таблице 2 представлены вычисленные согласно описанной выше методике Трефилова и Мильмана [6] значения энергии активации  $U_0$  и активационного объёма  $V$  для рассматриваемых в работе би-



**Рис. 3.** Схематическая температурная зависимость твёрдости нелегированного железа и бинарных сплавов на его основе [5].

**Fig. 3.** Schematic representation of the temperature dependence of hardness of unalloyed iron and binary iron alloys [5].

нарных и поликомпонентных твёрдых растворов и некоторых чистых металлов с ОЦК-кристаллической решёткой, значения отношения  $(\tau_{(0)} - \tau_{-a})/G$ , характеризующего термическую составляющую зависимости напряжения течения, а также значения размерных дисторсий кристаллической решётки сплавов, описываемых величиной усреднённого относительного изменения параметра кристаллической решётки  $(\Delta a/a)_{\text{ср}}$ .

Для вычисления  $(\Delta a/a)_{\text{ср}}$  использовали выражение

$$(\Delta a/a)_{\text{ср}} = \sum_i [c_i(a_i - a)/a], \quad (4)$$

где  $c_i$  — концентрация входящего в сплав  $i$ -ого элемента,  $a_i$  — параметр решётки входящего в сплав элемента в ОЦК-кристаллической модификации,  $a$  — параметр кристаллической решётки сплава (экспериментальный или вычисленный согласно правилу смеси:  $a_{\text{см}} = \sum_i c_i a_i$ ).

Значения параметров решётки входящих в сплав элементов в ОЦК-кристаллической модификации и поликомпонентных сплавов приведены в табл. 3. Параметры ОЦК-решётки Al и Ni рассчитаны, исходя из соображений преобразования их ГЦК-решёток (с параметрами  $a_{\text{Al}}^{\text{ГЦК}} = 4,0494 \text{ \AA}$  и  $a_{\text{Ni}}^{\text{ГЦК}} = 3,524 \text{ \AA}$ ) в ОЦК-решётки. В качестве поправочного коэффициента взята величина отношения параметров ОЦК- и ГЦК-решётки при переходе Fe из ОЦК- в ГЦК-кристаллическую модификацию при 1183 К:  $a_{\text{Fe}}^{\text{ОЦК}}/a_{\text{Fe}}^{\text{ГЦК}} =$



**ТАБЛИЦА 2.** Значения дисторсий кристаллической решётки  $(\Delta a/a_{\text{cp}})$ , отношения  $(\tau_{(0)} - \tau_{-a})/G$ , энергии активации движения дислокаций  $U_0$  и активационного объёма  $V$  для бинарных и поликомпонентных твёрдых растворов, а также металлов с ОЦК-кристаллической решёткой.

**TABLE 2.** Values of crystal lattice distortions  $(\Delta a/a_{\text{cp}})$ ,  $(\tau_{(0)} - \tau_{-a})/G$  ratio, activation energy of the dislocation movement  $U_0$ , and activation volume  $V$  for binary and polycomponent solid solutions and metals with a b.c.c. crystal lattice.

Материал	$U_0$ , эВ	$V \cdot 10^{24}$ , см <sup>3</sup>	$(\tau_{(0)} - \tau_{-a})/G$	$(\Delta a/a)_{\text{cp}}$
AlCrFeCoNi	0,16	–	–	0,0409
AlTiVCrNbMo	0,22	38	0,0145	0,0395
Ti <sub>25</sub> Zr <sub>25</sub> Hf <sub>25</sub> Nb <sub>12,5</sub> Ta <sub>12,5</sub>	0,18	45	0,0155	0,0391
VNbMoTaW	0,16	–	–	0,0281
Fe–7,77Cr	0,12	68	0,0018	0,0009
Fe–16,2Cr	0,11	187	0,0011	0,0018
Fe–1,02Mo	0,22	122	0,0035	0,00196
Fe–2Mo	0,21	134	0,003	0,0038
Fe–4,03Mo	0,20	176	0,0022	0,0075
Fe–7,95Mo	0,15	222	0,0012	0,0141
Fe–1,32W	0,23	166	0,0027	0,0027
Fe–3,46W	0,16	178	0,0017	0,0069
Fe [6]	0,22	84		
Cr	0,20	44	0,0152	
Mo	0,19	45	0,0126	
W [6]	0,49	57,5		

$= 2,905/3,646 = 0,797$  [19]. Для вычисления параметра  $\text{Co}$  в ГЦК-решётке использовали соотношение:  $r = 0,3536a_{\text{ГЦК}}$ , где  $r$  — радиус атома  $\text{Co}$  ( $r = 125$  пм) [12] и ранее вычисленный коэффициент  $0,797$  для перехода из ГЦК- в ОЦК-решётку,  $a_{\text{Co}}^{\text{ОЦК}} = 2,8254$ . Значения модулей сдвига  $G_i$  чистых металлов взяты из табличных данных [12]. Значения модулей сдвига поликомпонентных сплавов  $G_{\text{cp}}$  определены из соотношения  $G_{\text{cp}} = (3/8)E$  [21], а для расчёта  $G_{\text{cp}}$  бинарных сплавов использовали правило смеси:  $G_{\text{см}} = \sum_i c_i G_i$ .

Как видно из табл. 2, величина размерного несоответствия, описываемого выражением  $(\Delta a/a)_{\text{cp}}$ , для приведённых высокоэнтропийных сплавов значительно превышает значения для бинарных (различие иногда достигает двух порядков). При этом для сплавов

**ТАБЛИЦА 3.** Параметр ОЦК-решётки ( $a$ ), модуль сдвига ( $G$ ) чистых металлов [12] и сплавов AlTiVCrNbMo, AlCrFeCoNi,  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$ , VNbMoTaW с ОЦК-кристаллической решёткой [2–4].

**TABLE 3.** The b.c.c. lattice parameter ( $a$ ), shear modulus ( $G$ ) of pure metals [12] and alloys AlTiVCrNbMo, AlCrFeCoNi,  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$ , VNbMoTaW with b.c.c. crystal lattice [2–4].

Металлы и сплавы	$a$ , нм (ОЦК)	$G$ , ГПа
Cr	0,2885	115
V	0,3024	47
Mo	0,31446	120
Nb	0,3294	38
Al	0,322	26
Fe	0,28665	82
Co	0,28254	75
Ni	0,2809	76
W	0,31652	161
Ti	0,3276	44
Zr	0,3589	33
Hf	0,352	30
Ta	0,33013	69
AlTiVCrNbMo	0,3128 [2]	60 [2]
AlCrFeCoNi	0,29212	72,6 (расчёт)
$Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$	0,342066 [3]	40,125 (расчёт)
VNbMoTaW	0,318582 [4]	72,5 (расчёт)

AlTiVCrNbMo и  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12.5}Ta_{12.5}$ , которые демонстрируют усиление термической составляющей температурной зависимости напряжения течения в сравнении с бинарными твёрдыми растворами (рис. 2, 3), значения отношения  $(\tau_{(0)} - \tau_{-a})/G_{cp}$  также выше (примерно на порядок), чем в бинарных, и сопоставимы со значениями для Cr и Mo.

Из сравнения энергии активации движения дислокаций  $U_0$  и активационного объёма  $V$  для приведённых в табл. 2 твёрдых растворов и чистых металлов видно, что значения  $U_0$  как в поликомпонентных, так и в бинарных твёрдых растворах сопоставимы со значениями для чистых металлов. В то же время активационный объём  $V$  в поликомпонентных твёрдых растворах значительно ниже, чем в бинарных.

Повышение концентрации легирующего элемента в указанных в

табл. 2 бинарных системах приводит к понижению значений отношения  $(\tau_{(0)} - \tau_{-a})/G_{\text{ср}}$ , энергии активации движения дислокации и к увеличению активационного объёма.

### 3.3. Атермическое упрочнение высокоэнтропийных сплавов

В нашей работе [2] показано, что аномально высокое атермическое твёрдорастворное упрочнение сплава AlTiVCrNbMo связано с изменением вектора Бюргера вдоль дислокационной линии (как по длине, так и по направлению) и обусловлено наличием у него составляющей, перпендикулярной плоскости скольжения. Для оценки наблюдаемого упрочнения  $\Delta\sigma$  (или  $\Delta H$ ) предложено относительно простое выражение, учитывающее эмпирический («средний») модуль сдвига  $G_{\text{ср}}$  и «средний» параметр размерного несоответствия  $(\Delta a/a)_{\text{ср}}$ :

$$\Delta\sigma = k(\Delta a/a)_{\text{ср}}G_{\text{ср}} \quad (5)$$

или

$$\Delta H = k_H(\Delta a/a)_{\text{ср}}G_{\text{ср}}. \quad (6)$$

Очевидно, что коэффициенты пропорциональности в выражениях (5) и (6) связаны выражением  $k_H \approx 3k$ , что соответствует соотношению Тейбора [7] между твёрдостью и напряжением течения ( $\sigma_{0,2} = H/3$ ).

Экспериментальная твёрдость сплава тогда равна

$$H = H_{\text{см}} + \Delta H = H_{\text{см}} + k_H(\Delta a/a)_{\text{ср}}G_{\text{ср}}, \quad (7)$$

где  $H_{\text{см}} = \sum_i c_i H_i$  (где  $c_i$  и  $H_i$  — концентрация и твёрдость по Виккерсу элемента, входящего в сплав, соответственно).

В работе [2] показано, что выражение (6) хорошо выполняется для ряда сплавов при значениях  $k_H$  примерно 1,5–1,6. Так, для сплава AlTiVCrNbMo рассчитанный коэффициент  $k_H = 1,57$  (при использовании экспериментальных значений модуля сдвига  $G_{\text{ср}}$ , параметра кристаллической решётки  $a$  и экспериментальной твёрдости сплава  $H_{\text{эксп}} = 5,1$  ГПа).

Расчёты показывают, что величина коэффициента  $k_H$  для сплава  $\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Nb}_{12,5}\text{Ta}_{12,5}$  ( $H_{\text{эксп}} = 3,8$  ГПа) составляет примерно 1,7, для сплава  $\text{VNbMoTaW}$  ( $H_{\text{эксп}} = 5,25$  ГПа) —  $\cong 1,51$ , а для сплава  $\text{AlCrFeCoNi}$  ( $H_{\text{эксп}} = 4,66$  ГПа) —  $\cong 1,4$ , т.е. значения  $k_H$  для указанных сплавов находятся в интервале примерно 1,4–1,7, что почти совпадает с интервалом для  $k_H$ , указанным в работе [2]. При расчёте  $H_{\text{см}}$  и  $G_{\text{ср}}$  использованы данные табл. 3 и 4.

ТАБЛИЦА 4. Значения твёрдости по Виккерсу чистых металлов [12].

TABLE 4. Vickers' hardness of pure metals [12].

Элемент	Тип кристаллической структуры	$H$ , ГПа
Al	ГЦК	0,167
Cr	ОЦК	1,06
Fe	ОЦК	0,608
Co	ГПУ	1,043
Ni	ГЦК	0,638
Nb	ОЦК	1,32
W	ОЦК	3,43
Ti	ГПУ	0,97
Zr	ГПУ	0,903
Hf	ГПУ	1,76
Ta	ОЦК	0,873
Mo	ОЦК	1,53
V	ОЦК	0,628

Различие в полученных для указанных сплавов значениях коэффициента  $k_H$  может быть обусловлено несколькими причинами. Прежде всего, это различие в экспериментальных и расчётных данных, а также очевидное отличие используемых для расчёта  $G_{cp}$  и  $H_{cm}$  и табличных значений  $G_i$  (табл. 1) и  $H_i$  (табл. 4) для входящих в ОЦК-сплав элементов, имеющих ГЦК- и ГПУ-кристаллические решётки, от значений, которые эти элементы могли бы иметь в ОЦК-решётке.

### 3.4. Температурно-зависимая составляющая напряжения течения

Как следует из приведённых выше данных, исследуемые поликомпонентные однофазные ОЦК-сплавы AlTiVCrNbMo и  $Ti_{25}Zr_{25}Hf_{25}Nb_{12,5}Ta_{12,5}$ , в отличие от бинарных твёрдых растворов с ОЦК-решёткой, демонстрируют усиление термической составляющей температурной зависимости напряжения течения в сравнении с чистыми металлами (рис. 2 и 3). Это хорошо описывается значениями отношения  $(\tau_{(0)} - \tau_{-a})/G_{cp}$ , которое характеризует термическую составляющую зависимости напряжения течения и в поликомпонентных сплавах на порядок выше, чем в бинарных системах (табл. 2).

Из таблицы 2 видно, что если значения энергии активации дви-

жения дислокаций  $U_0$ , как в поликомпонентных, так и в бинарных твёрдых растворах, сопоставимы со значениями для чистых металлов, то активационный объём  $V$  в поликомпонентных твёрдых растворах значительно ниже, чем в бинарных, и сопоставим со значениями для металлов (в некоторых случаях и ниже). При этом различие в значениях  $(\Delta a/a)_{\text{ср}}$ , которое характеризует уровень дисторсий кристаллической решётки, связанный с различиями атомных радиусов входящих в сплав элементов, для приведённых высокоэнтропийных сплавов и бинарных систем иногда достигает двух порядков (табл. 2).

Можно предположить, что в поликомпонентных твёрдых растворах высокая концентрация точек закрепления термически активируемого дислокационного отрезка атомами элементов, которые имеют высокий уровень размерно-упругого несоответствия по сравнению со средним значением для сплава, приводит к уменьшению активационного объёма в сравнении с бинарными твёрдыми растворами. При этом в поликомпонентных твёрдых растворах с ОЦК-кристаллической решёткой наблюдается более резкая температурная зависимость напряжения течения в сравнении с подобными зависимостями для бинарных твёрдых растворов и чистых металлов.

#### 4. ВЫВОДЫ

1. В исследованных в работе поликомпонентных твёрдых растворах (однофазных высокоэнтропийных сплавах) с ОЦК-кристаллической решёткой ( $\text{AlCrFeCoNi}$ ,  $\text{AlTiVCrNbMo}$ ,  $\text{Ti}_{25}\text{Zr}_{25}\text{Hf}_{25}\text{Nb}_{12,5}\text{Ta}_{12,5}$ ,  $\text{VNbMoTaW}$ ), также как и в бинарных ОЦК твёрдых растворах, наблюдается существенное увеличение атермической компоненты напряжения течения, в сравнении с чистыми ОЦК-металлами.
2. В отличие от бинарных твёрдых растворов, для которых характерно ослабление температурной зависимости напряжения течения в сравнении с чистыми металлами, изученные поликомпонентные (высокоэнтропийные) твёрдые растворы демонстрируют её усиление.
3. Определённая по методике Трефилова и Мильмана энергия активации движения дислокаций  $U_0$  как в поликомпонентных, так и в бинарных ОЦК твёрдых растворах сопоставима со значениями для чистых металлов. В то же время, активационный объём  $V$  в поликомпонентных твёрдых растворах значительно ниже, чем в бинарных, и сопоставим со значениями для ОЦК-металлов (а в некоторых случаях и ниже).
4. Более резкая температурная зависимость напряжения течения в поликомпонентных ОЦК-твёрдых растворах в сравнении с подобными зависимостями для бинарных твёрдых растворов может быть обусловлена наличием высокой концентрации точек закрепления

термически активируемого дислокационного отрезка атомами элементов, которые имеют более высокий уровень размерно-упругого несоответствия по сравнению со средним значением для сплава. О справедливости такого предположения свидетельствуют рассчитанные значения активационного объёма, которые в поликомпонентных ОЦК твёрдых растворах значительно ниже, чем в бинарных.

5. Наблюдаемое высокое атермическое твёрдорастворное упрочнение в исследованных поликомпонентных твёрдых растворах может быть связано с изменением вектора Бюргерса вдоль дислокационной линии (как по длине, так и по направлению) и появлением у него составляющей, перпендикулярной плоскости скольжения [2], и пропорционально параметру  $(\Delta a/a)_{cp}$ , характеризующему размерные дисторсии кристаллической решётки сплавов.

### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. С. А. Фирстов, Т. Г. Рогуль, *Металлофиз. новейшие технол.*, **39**, № 1: 33 (2017).
2. С. А. Фирстов, Т. Г. Рогуль, Н. А. Крапивка, С. С. Пономарев, В. Н. Ткач, В. В. Ковыляев, В. Ф. Горбань, М. В. Карпец, *Деформация и разрушение материалов*, № 2: 9 (2013).
3. С. А. Фирстов, В. Ф. Горбань, Н. А. Крапивка, Н. И. Даниленко, В. Н. Назаренко, *Вопросы атомной науки и техники (ВАНТ)*, № 2 (96): 178 (2015).
4. O. N. Senkov, G. B. Wilks, J. M. Scott, and D. B. Miracle, *Intermetallics*, **19**: 698 (2011).
5. J. R. Stephens and W. R. Witzke, *NASA Scientific and Technical Publication* (Washington, D. C.: Lewis Research Center National Aeronautics and Space Administration: 1976).
6. Ю. В. Мильман, В. И. Трефилов, *О физической природе температурной зависимости предела текучести. Механизм разрушения металлов* (Киев: Наукова думка: 1966), с. 59.
7. D. Tabor, *The Hardness of Metals* (Oxford, UK: Clarendon Press.: 1951), p. 102.
8. В. И. Трефилов, Ю. В. Мильман, С. А. Фирстов, *Физические основы прочности тугоплавких металлов* (Киев: Наукова думка: 1975).
9. Е. В. Савицкий, Г. С. Бурханов, *Металловедение тугоплавких металлов и сплавов* (Москва: Наука: 1967).
10. Т. Титц, Дж. Уилсон, *Тугоплавкие металлы и сплавы* (Москва: Металлургия: 1969) (пер. с англ.).
11. *Физическое металловедение* (Ред. Р. У. Кан, П. Хаазен) (Москва: Металлургия: 1987), т. 3 (пер. с англ.).
12. *The Periodic Table of the Elements*, WebElements: <http://www.webelements.com>
13. Т. Гудцов, И. Г. Лозинский, *Журнал технической физики*, № 8 (22): 1249 (1952).
14. Ю. В. Мильман, О. Е. Скляров, А. П. Удовенко, *Труды Ин-та метрологии*

- СССР, вып. 91 (151): 167 (1967).
15. W. C. Leslie, *Metal. Trans.*, **3**, No. 1: 5 (1972).
  16. E. Pink and R. J. Arsenault, *Prog. Mater. Sci.*, **24**: 1 (1980).
  17. D. Leeman and M. E. Fine, *Metall. Trans.*, **5**, No. 6: 1331 (1974).
  18. J. R. Stephens and W. R. Witzke, *J. Less-Common Metals*, **41**: 265 (1975).
  19. О. М. Барабаш, Ю. Н. Коваль, *Структура и свойства металлов и сплавов* (Киев: Наукова думка: 1986).
  20. С. А. Фирстов, Т. Г. Рогуль, Н. А. Крапивка, С. С. Пономарев, В. В. Ковыляев, Н. И. Даниленко, Н. Д. Бега, В. И. Даниленко, С. И. Чугунова, *Порошковая металлургия*, № 3/4 (508): 127 (2016).
  21. Г. Конрад, *Структура и механические свойства металлов* (Москва: Металлургия: 1967) (пер. с англ.).

## REFERENCES

1. S. O. Firstov and T. G. Rogul, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 1: 33 (2017) (in Russian).
2. С. А. Фирстов, Т. Г. Рогуль, Н. А. Крапивка, С. С. Пономарев, В. Н. Ткач, В. В. Ковыляев, В. Ф. Горбан', and М. В. Карпеты, *Deformatsiya i Razrusheniye Materialov*, No. 2: 9 (2013) (in Russian).
3. S. A. Firstov, V. F. Gorban', N. A. Krapivka, N. I. Danilenko, and V. N. Nazarenko, *Voprosy Atomnoy Nauki i Tekhniki (VANT)*, No. 2 (96): 178 (2015) (in Russian).
4. O. N. Senkov, G. B. Wilks, J. M. Scott, and D. B. Miracle, *Intermetallics*, **19**: 698 (2011).
5. J. R. Stephens and W. R. Witzke, *NASA Scientific and Technical Publication* (Washington, D. C.: Lewis Research Center National Aeronautics and Space Administration: 1976).
6. Yu. V. Mil'man and V. I. Trefilov, *O Fizicheskoy Prirode Temperaturnoy Zavisimosti Predela Tekuchesti. Mekhanizm Razrusheniya Metallov* (Kiev: Naukova Dumka: 1966), p. 59 (in Russian).
7. D. Tabor, *The Hardness of Metals* (Oxford, UK: Clarendon Press.: 1951), p. 102.
8. V. I. Trefilov, Yu. V. Mil'man, and S. A. Firstov, *Fizicheskie Osnovy Prochnosti Tugoplavkikh Metallov* (Kiev: Naukova Dumka: 1975) (in Russian).
9. E. V. Savitskiy and G. S. Burkhanov, *Metallovedenie Tugoplavkikh Metallov i Splavov* (Moscow: Nauka: 1967) (in Russian).
10. T. E. Tietz and J. W. Wilson, *Tugoplavkie Metally i Splavy* [Refractory Metals and Alloys] (Moscow: Metallurgiya: 1969) (Russian translation).
11. *Fizicheskoe Metallovedenie* (Eds. R. W. Cahn and P. Haasen) (Moscow: Metallurgiya: 1987), vol. 3 (Russian translation).
12. *The Periodic Table of the Elements*, WebElements: <http://www.webelements.com>
13. N. T. Gudtsov and I. G. Lozinskiy, *Zhurnal Tekhnicheskoy Fiziki*, No. 8 (22): 1249 (1952) (in Russian).
14. Yu. V. Milman, O. E. Sklyarov, and A. P. Udovenko, *Trudy Instituta Metrologii SSSR*, Iss. 91 (151): 167 (1967) (in Russian).
15. W. C. Leslie, *Metal. Trans.*, **3**, No. 1: 5 (1972).
16. E. Pink and R. J. Arsenault, *Prog. Mater. Sci.*, **24**: 1 (1980).
17. D. Leeman and M. E. Fine, *Metall. Trans.*, **5**, No. 6: 1331 (1974).

18. J. R. Stephens and W. R. Witzke, *J. Less-Common Metals*, **41**: 265 (1975).
19. O. M. Barabash and Yu. N. Koval', *Struktura i Svoystva Metallov i Splavov* (Kiev: Naukova Dumka: 1986) (in Russian).
20. S. A. Firstov, T. G. Rogul', N. A. Krapivka, S. S. Ponomarev, V. V. Kovylyayev, N. I. Danilenko, N. D. Bega, V. I. Danilenko, and S. I. Chugunova, *Poroshkovaya Metallurgiya*, Nos. 3/4 (508): 127 (2016) (in Russian).
21. H. Conrad, *Struktura i Mekhanicheskie Svoystva Metallov* [Structure and Mechanical Properties of Metals] (Moscow: Metallurgiya: 1967) (Russian translation).