

Н.І. Шумакова, С.І. Проценко, В.І. Шевченко, І.Ю. Проценко

Вплив концентрації елементів на кінетичні та динамічні властивості високоентропійних твердих розчинів

Сумський державний університет, Суми, Україна, i.protsenko@aph.sumdu.edu.ua

Здійснено узагальнення раніше отриманих розрахункових даних стосовно залежності динамічних (параметр решітки (a) та температура Дебая (θ_D)) та експериментальних даних стосовно кінетичних характеристик (питомий опір (ρ) та середня довжина вільного пробігу електронів (λ)) від концентрації елементів у високоентропійних сплавах. У першому випадку розрахунок проводився на прикладі масивних т.р. із ГЦК решіткою на основі атомів Cu, Co, Ni, Fe, Cr, Al або Ti, а у другому випадку – на основі експериментальних даних для плівкових високоентропійних т.р. на основі тих же елементів за виключенням Al і Ti. У обох випадках розрахунки здійснювалися у еквіатомному наближенні для чотири-шести компонентних т.р. Була встановлена кореляція між θ_D і a та ρ і λ^{-1} у чотири- п'яти компонентних т.р., в яких відсутні атоми Al і Ti. Причину незадовільної кореляції при наявності атомів Al і Ti ми пояснюємо відносно великим значенням параметра δ – різниці атомних радіусів (5,2 – 7,1%) у т.р. із атомами Al і Ti. Індивідуальний параметр δ_i має ще більше значення: 10,3% (Al) або 12,0-15,4% (Ti). Відносно великі значення δ та δ_i можуть обумовити деформацію решітки т.р., що проявиться у відсутності кореляції θ_D і a та ρ і λ^{-1} .

Ключові слова: Високоентропійні сплави, Тверді розчини, Параметр решітки, Температура Дебая, Питомий опір, Середня довжина вільного пробігу, Плівка, Кореляція, Параметр різниці атомних радіусів.

Подано до редакції 21.08.2025; прийнято до друку 08.12.2025.

Вступ

На даний момент досліджень властивостей високоентропійних сплавів (ВЕС), одним із різновидів яких є тверді розчини (т.р.), накопичений значний експериментальний матеріал стосовно фізико-механічних і магнітних властивостей багатокомпонентних металевих покриттів у вигляді ВЕС або їх нітридів. У нашій роботі аналізується питання про вплив концентрації парамагнітних і магнітних компонент на електрофізичні властивості плівок [1-3] та динамічні характеристики (параметр решітки і температура Дебая) масивних т.р. [4-6]. У процитованих роботах були вирішені питання, які пов'язані із формуванням фазового складу без побічних фаз; проведені дослідження електрофізичних (питомий опір, термічний коефіцієнт опору, коефіцієнт тензочутливості) і магніторезистивних (нормальний та анізотропний

магнітоопір) властивостей в залежності від концентрації допіруючих атомів. Це забезпечує потенціальні можливості для виготовлення чутливих елементів приладів функціональної електроніки із прогнозованими характеристиками та перспектив застосування ВЕС в аерокосмічній, енергетичній та приладобудівельній галузях.

Мета нашої роботи полягає в узагальненні отриманих раніше [1-6] експериментальних даних для окремих компонент (питомий опір – ρ та середня довжина вільного пробігу електронів (СДВП) – λ) та розрахункових на основі результатів для масивних металів (температура Дебая – θ_D та параметр решітки – a) результатів з точки зору впливу концентрації (атомної долі) окремих компонент ВЕС на вказані властивості і характеристики.

У еквіатомному наближенні були проаналізовані дані для ВЕС, в яких чотирикомпонентні т.р. формувалися на основі Cu, Co, Ni та Fe;

п'ятикомпонентні – на основі вказаних чотирьох елементів та Cr або Al та шестикомпонентних, в яких постою компонентою виступали атоми ГЦП-Ті або віртуального ГЦК – Ті. У останньому випадку параметр $a_{ГЦК}$ і радіус атому (r) Ті розраховувалися за співвідношеннями $a_{ГЦК} = \sqrt{2} \cdot a_{ГЦП}$ та $4r = \sqrt{2} a_{ГЦК}$.

I. Робочі співвідношення, методологія розрахунків

Розрахунок параметра решітки, температури Дебая, питомого опору та середньої довжини вільного пробігу для високоентропійних твердих розчинів здійснювався на основі співвідношень, які наводилися у наших попередніх роботах [3-6] і записуються у відповідності із принципом адитивності таким чином:

$$a = \frac{1-x}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} a_i + x a_n;$$

$$\theta_D = \frac{1-x}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} \theta_{Di} + x \theta_{Dn}; \quad (1)$$

$$\rho = \frac{1-x}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} \rho_i + x \rho_n + \rho_{зал}$$

та

$$\lambda^{-1} = \frac{1-x}{n-1} \sum_{i=1}^{n-1} \lambda_i^{-1} + x \lambda_n^{-1}$$

де множник $\frac{1-x}{n-1}$ означає еквіатомний склад фазоутворюючої системи елементів; n – число компонент; i – номер допіруючого елементу; x – атомна частка; $\rho_{зал}$ – залишковий питомий опір, який задовольняє вимозі $\rho_{зал} \ll \rho$.

Ми виходимо із того, що принцип адитивності може бути застосований при розрахунках величини властивостей чи характеристик високоентропійних твердих розчинів у тому випадку, коли для кожної компоненти властивість чи характеристика носить не колективний, а власний характер. Мова може іти про розміри, масу і магнітний момент атомів; температуру Дебая; відносну зміну питомого опору при термовідпалюванні або деформації. Відмітимо, що λ само по собі не є власною характеристикою, але, оскільки

$$\rho = \frac{A}{N\lambda} \quad (2)$$

де A – певна константа; N – концентрація електронів провідності, то величину λ^{-1} можна вважати умовно власною характеристикою, хоча більш правильно такою вважати величину $(N\lambda)^{-1}$.

У розділі II ми здійснюємо спробу установити кореляцію між величинами ρ і (λ^{-1}) , що буде виступати підтвердженням або непідтвердженням наведених вище міркувань.

Дуже важливо підкреслити наступне. Розрахунки концентраційних залежностей для ρ і λ були здійснені для плівкових ВЕС, в той час як для a і θ_D – для масивних. Для цього ми скористалися накопиченими нами обширними експериментальними даними стосовно величини ρ однокомпонентних плівок

товщиною 50-70 нм (див. [1,3,5] та цитовану в них літературу). Стосовно величин λ в однокомпонентних плівках, то їх отримували після обробки експериментальних розмірних і температурних залежностей для ρ в рамках теоретичних моделей Тельє, Тоссе, Пішар (більш детально див., наприклад, [7]).

У випадку розрахунків концентраційної залежності a і θ_D ми скористалися табличними даними [8,9]. Відмітимо, що у цьому випадку можна було також скористатися експериментальними даними для плівок, оскільки різниця $\Delta a = a_{пл} - a_0$ (індекс «0» позначає величини для масивних однокомпонентних зразків) складає несуттєву величину 0,001-0,003 нм. У той же час величина $\rho_{пл}$ більша ρ_0 на порядок, а для λ і λ_0 вказана різниця має ще більше значення. Стосовно θ_D можна лише стверджувати про її помітну відміну в плівках і масивних однокомпонентних металах, але така інформація для однокомпонентних плівок, яка могла б бути використана, у літературі відсутня.

II. Результати розрахунків, їх обговорення

2.1. Параметр решітки, температура Дебая

Використовуючи співвідношення (1), були проведені розрахунки залежності параметра решітки (таблиця 1) та температури Дебая (таблиця 2) від концентрації x допіруючого n -го елементу, яким по черзі виступають усі елементи ВЕС. У правій колонці цих таблиць наведені екстраполяційні дані для залежностей $a(x)$ і $\theta_D(x)$, наведених в [6], які не мають відношення до ВЕС, а відповідають області стабілізації багатоконпонентного сплаву (БКС).

Укажемо на такі особливості концентраційних залежностей для a . У випадку чотирикомпонентного ВЕС найбільше значення $a = 0,350$ нм і найменше $a = 0,334$ нм (у таблиці 1 відмічено жирним шрифтом) реалізується при $x = 0,10$ (допіруючий елемент – Fe або Cu).

У випадку п'ятикомпонентного ВЕС найменше і найбільше значення a має місце при $x = 0,30$ та $x = 0,10$ відповідно. При переході до шестикомпонентного ВЕС спостерігається при $x = 0,10$ найменше значення $a = 0,320$ нм (допіруючий елемент Cu) і найбільше значення $a = 0,326$ нм (допіруючий елемент Fe або Cr).

Таким чином, змінюючи число компонент і концентрацію допіруючого елементу, ми можемо отримувати ВЕСи, параметри решітки яких змінюються у межах $\Delta a = 0,04$ нм. На наш погляд, така зміна параметра решітки впливає на коефіцієнт тензочутливості плівкових ВЕС, про що описано нами в роботі [1].

У таблиці 2 представлені результати розрахунків θ_D в залежності від атомної частки x допіруючого елементу. Звертає на себе увагу той факт, що θ_D змінюється у певному інтервалі: $\Delta \theta_D = 25$ K ($n = 4$); 50 K ($n = 5$) та 24 K ($n = 6$), що відкриває можливість впливати на температурну залежність теплоємності

ВЕСів.

Порівняння даних таблиць 1 і 2 вказує на те, що спостерігається кореляція між θ_D і a , суть якої полягає в наступному.

Оскільки $\theta_D = \frac{\hbar \omega_{max}}{k} \sim \frac{1}{\lambda_{min}}$ ($\hbar$ – стала Дірака; k – стала Больцмана; $\lambda_{min} = 2a_{min}$ – мінімальна довжина хвилі фононів), то максимальна величина параметра решітки відповідає мініальному значенню θ_D і

Таблиця 1.

Вплив концентрації (х, ат. частка) допіруючих елементів (ДЕ) на параметр решітки (нм) чотири-, п'яти- та шестикомпонентних сплавів

ДЕ х	Cu	Co	Ni	Fe	Al Cr	Ti ^{ГЦП} Ti ^{ГЦК}	Cu	Co	Ni	Fe	Al Cr	Ti ^{ГЦП} Ti ^{ГЦК}
Розрахунок параметра решітки ВЕС, нм							Екстраполяція параметра решітки БКС, нм					
0,00	0,328	0,330	0,331	0,353	-	-	-	-	-	-	-	-
0,10	0,334	0,336	0,336	0,350	-	-	-	-	-	-	-	-
0,15	0,338	0,337	0,337	0,346	-	-	-	-	-	-	-	-
0,20	0,339	0,338	0,338	0,342	-	-	-	-	-	-	-	-
0,30	0,340	0,340	0,340	0,335	-	-	-	-	-	-	-	-
0,40	-	-	-	-	-	-	0,344	0,342	0,341	0,327	-	-
0,50	-	-	-	-	-	-	0,347	0,344	0,349	0,321	-	-
0,60	-	-	-	-	-	-	0,349	0,345	0,344	0,313	-	-
0,00	0,349	0,351	0,352	0,368	0,339 -	-	-	-	-	-	-	-
0,10	0,351	0,352	0,352	0,360	0,345 -	-	-	-	-	-	-	-
0,15	0,351	0,352	0,352	0,356	0,349 -	-	-	-	-	-	-	-
0,20	0,352	0,352	0,352	0,352	0,352 -	-	-	-	-	-	-	-
0,30	0,353	0,352	0,352	0,344	0,359 -	-	-	-	-	-	-	-
0,40	-	-	-	-	-	-	0,353	0,352	0,350	0,332	0,364 -	-
0,50	-	-	-	-	-	-	0,355	0,353	0,352	0,328	0,368 -	-
0,60	-	-	-	-	-	-	0,357	0,353	0,352	0,319	0,377 -	-
0,00	0,340	0,341	0,342	0,355	- 0,354	0,329 -	-	-	-	-	-	-
0,10	0,342	0,343	0,344	0,348	- 0,345	0,338 -	-	-	-	-	-	-
0,15	0,343	0,343	0,344	0,345	- 0,344	0,342 -	-	-	-	-	-	-
0,20	0,344	0,344	0,343	0,341	- 0,342	0,345 -	-	-	-	-	-	-
0,50	-	-	-	-	-	-	0,351	0,346	0,346	0,320	- 0,321	0,372 -
0,60	-	-	-	-	-	-	0,354	0,348	0,347	0,313	- 0,314	0,382 -
0,00	0,315	0,317	0,317	0,330	- 0,330	- 0,329	-	-	-	-	-	-
0,10	0,320	0,321	0,321	0,326	- 0,326	- 0,325	-	-	-	-	-	-
0,15	0,322	0,322	0,323	0,324	- 0,324	- 0,324	-	-	-	-	-	-
0,20	0,325	0,324	0,324	0,322	- 0,322	- 0,322	-	-	-	-	-	-
0,50	-	-	-	-	-	-	0,338	0,336	0,334	0,307	- 0,308	- 0,310
0,60	-	-	-	-	-	-	0,342	0,339	0,337	0,303	- 0,305	- 0,308

навпаки (відповідні величини в таблиці 1 і 2 також позначені жирним шрифтом). Відмічаємо, що у випадку п'яти- і шестикомпонентних сплавів, коли до класичної групи елементів Cu, Co, Ni та Fe додаються Al (n = 5) і Ti (n = 6), можна говорити лише про умовну кореляцію. Виникає ідея, що атоми Al та ГЦП-Ti або віртуального ГЦК-Ti не в повній мірі задовольняють третьому критерію формування ВЕС – різниця атомних радіусів δ повинна становити не більше 6,6 % [10] або 8,5% [11] (у літературі зустрічаються також інші значення $\delta = (6,7 - 7,3) \%$

[12,13], оскільки величини параметру залежать від концентрації елементів).

Нами у еквіатомному наближенні здійснений розрахунок δ за співвідношенням:

$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^n c_i (1 - r_i/\bar{r})^2}, \quad (3)$$

де $\bar{r}$ – середній атомний радіус.

Були отримані наступні результати: $\delta = 1,05 \%$ (ВЕС – CuCoNiFe); 5,2% (CuCoNiFeAl); 5,4 %

Таблиця 2.

Вплив концентрації (x, ат. доля) допіруючих елементів на температуру Дебая (К) чотири-, п'яти- та шестикомпонентних сплавів

ДЕ x	Cu	Co	Ni	Fe	Al Cr	Ti ^{ГЦП}	Cu	Co	Ni	Fe	Al Cr	Ti ^{ГЦП}
Розрахунок температури Дебая ВЕС, К							Екстраполяція температури Дебая БКС, К					
0,00	435	419	393	392	-	-	-	-	-	-	-	-
0,10	429	420	404	404	-	-	-	-	-	-	-	-
0,15	424	418	407	407	-	-	-	-	-	-	-	-
0,20	419	416	411	410	-	-	-	-	-	-	-	-
0,30	409	412	412	417	-	-	-	-	-	-	-	-
0,40	-	-	-	-	-	-	398	408	421	422	-	-
0,50	-	-	-	-	-	-	387	405	430	431	-	-
0,60	-	-	-	-	-	-	378	401	439	440	-	-
0,00	495	484	464	463	414	-	-	-	-	-	-	-
0,10	479	474	464	463	439	-	-	-	-	-	-	-
0,15	472	469	464	464	451	-	-	-	-	-	-	-
0,20	464	464	464	463	464	-	-	-	-	-	-	-
0,30	449	454	464	464	489	-	-	-	-	-	-	-
0,40	-	-	-	-	-	-	430	448	464	464	508	-
0,50	-	-	-	-	-	-	417	438	465	465	530	-
0,60	-	-	-	-	-	-	400	425	465	466	565	-
0,00	472	463	447	446	-	457	-	-	-	-	-	-
0,10	459	455	448	448	414	453	-	-	-	-	-	-
0,15	452	451	450	449	435	451	-	-	-	-	-	-
0,20	445	447	450	450	447	448	-	-	-	-	-	-
0,40	-	-	-	-	457	-	418	430	454	454	-	435
0,50	-	-	-	-	-	-	403	422	456	457	501	430
0,60	-	-	-	-	-	-	380	413	460	461	520	417
											542	

(CuCoNiFeCr ГЦП-Ті) та 7,1% (CuCoNiFeCr ГЦК-Ті).

Ці дані до деякої міри підтверджують, що атоми Al і Ti не у повній мірі задовольняють вимогам третього критерію формування ВЕС. Ми пропонуємо додатково розглядати також параметр δ_i – індивідуальну різницю атомних радіусів окремих компонент:

$$\delta_i = \frac{\bar{r} - r_i}{\bar{r}}. \quad (3')$$

Для елементів ВЕС, які ми аналізуємо, отримуємо наступні дані для δ_i – чотирикомпонентні ВЕС: -1,6% (Cu), 0,8% (Co,Ni) та -0,8% (Fe); – п'ятикомпонентні ВЕС: 1,2% (Cu), 3,5% (Co,Ni), 2,0% (Fe) та -10,3% (Al);

– шестикомпонентні ВЕС: -4,1% (Cu), -1,6% (Co,Ni), -3,3% (Fe), -5,7% (Cr) та 15,4% (атоми ГЦК-Ті); шестикомпонентні ВЕС: 7,7% (Cu), 3,8% (Co,Ni), 2,3% (Fe), 0,8% (Cr) та -12,0% (атоми ГЦП-Ті).

Це підтверджує висновок про те, що компоненти Al і Ti не в повній мірі задовольняють третьому критерію формування ВЕС. Великі значення δ_i можуть бути причиною значних мікронапружень решітки та деформації фононного спектру.

2.2. Питомий опір, середня довжина вільного пробігу

На рис. 1 і в таблицях 3 і 4 наведені залежності $\rho(x)$ і $\lambda(x)$, які розраховувалися за співвідношенням (1) для ρ і λ^{-1} . Як відмічалось в розділі I величини ρ

Таблиця 3.

Залежність питомого опору (Ом·м) від концентрації допіруючого елементу чотири- і п'ятикомпонентного ВЕС на основі атомів Cr, Ni, Co, Fe та Cu

ДЕ x	Cr	Ni	Co	Fe	Cu	Примітка
0.00	5.50	5.15	4.00	3.35	-	Множник 10^{-7} Ом·м біля величини питомого опору опущений.
0.05	5.40	5.15	4.15	3.65	-	
0.10	5.20	4.95	4.25	3.80	-	
0.15	4.95	4.80	4.25	4.00	-	
0.20	4.62	4.60	4.30	4.25	-	
0.23	4.40	4.40	4.40	4.40	-	
0.00	4.85	4.65	3.75	3.00	4.55	
0.05	4.60	4.40	3.75	3.40	4.35	
0.10	4.45	4.35	3.95	3.70	4.30	
0.15	4.35	4.30	4.07	3.95	4.25	
0.20	4.23	4.23	4.23	4.25	4.23	

Таблиця 4.

Залежність середньої довжини вільного пробігу електронів (нм) від концентрації допіруючого елементу чотири- і п'ятикомпонентного ВЕС на основі атомів Cr, Ni, Co, Fe та Cu

ДЕ x	Cr	Ni	Co	Fe	Cu	Cr	Ni	Co	Fe	Cu
0.00	37.1	41.8	42.0	40.3	-	35.1	39.5	40.0	39.0	38.0
0.05	37.5	42.4	41.8	40.4	-	35.8	38.2	39.3	38.5	37.4
0.10	37.8	41.3	40.8	40.0	-	36.9	38.8	39.3	38.5	38.1
0.15	39.0	41.2	40.5	40.3	-	38.0	38.9	39.6	39.0	39.4
0.20	40.1	41.3	41.2	40.8	-	38.6	39.8	38.5	38.6	38.4
0.21	-	-	-	-	-	38.7	38.8	38.8	38.7	38.7
0.25	41.1	41.0	41.0	41.0	-	-	-	-	-	-

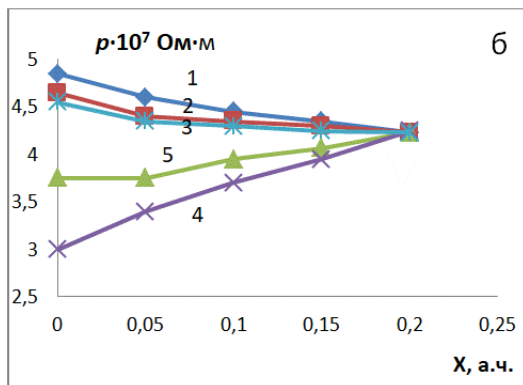
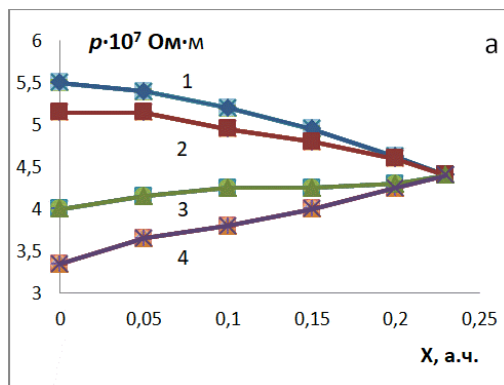


Рис. 1. Залежність $\rho(x)$ для чотирикомпонентних ВЕС (а): (FeCoNi)_{1-x} – Cr_x (1); (FeCoCr)_{1-x} – Ni_x (2); (FeNiCr)_{1-x} – Co_x (3) та (CoNiCr)_{1-x} – Fe_x (4) та п'ятикомпонентних ВЕС (б): (FeCoNiCu)_{1-x} – Cr_x (1); (FeCoCrCu)_{1-x} – Ni_x (2); (FeCoNiCr)_{1-x} – Cu_x (3); (FeNiCrCu)_{1-x} – Co_x (4) та (CoNiCrCu)_{1-x} – Fe_x (5).

і λ при $x = 0$ для окремих компонент відповідають експериментальним даним для однокомпонентних плівок, а усі інші розраховані дані мають відношення до ВЕСів. Не дивлячись на те, що ми порівнюємо лише ρ і λ^{-1} , оскільки відсутні дані про концентрацію носіїв N , можна стверджувати, що найбільші або найменші значення ρ відповідають найменшим або найбільшим значенням λ , тобто має місце кореляція $\rho \sim \lambda^{-1}$.

Крім того слід зауважити, що порівняльний аналіз даних у таблицях 3 і 4 вказує на тенденцію зростання або навпаки зменшення питомого опору при навпаки зменшенні або збільшенні величини СДВП. Додатково вкажемо, що збільшення $\rho(x)$ спостерігається при допіруючих елементах Co і Fe, що корелює із величиною середнього магнітного моменту атомів (μ) ВЕСу. Хоча у випадку атомів Ni обидві залежності $\rho(x)$ і $\lambda(x)$ не мають чітко вираженої тенденції, можна сказати, що вони «розміті». Проведені нами відповідні розрахунки вказують на те, що величина $\bar{\mu}$ в одиницях магнетону Бора змінюється при збільшенні x від 0 до 0,20 у таких інтервалах: 1,135 - 0,908 (допіруючі елементи Cu і Cr); 0,984 - 0,912 (Co) та 0,580 - 0,908 (Fe). Зміна $\rho(x)$ у відповідності із зміною $\bar{\mu}$ пов'язана не тільки із взаємодією електронів провідності з фононами але і при спин-орбітальній взаємодії.

Висновки

Узагальнені раніше отримані розрахункові (для параметра решітки і температури Дебая) та експериментальні (питомий опір і середня довжина вільного пробігу електронів) дані для чотиришестикомпонентних високоентропійних сплавів у

вигляді ГЦК твердих розчинів як пізнovidу ВЕСів:

– установлено, що між величинами θ_D і a існує кореляція, яка обумовлюється індивідуальністю цих динамічних характеристик, для яких виконується принцип адитивності;

– вказана кореляція реалізується в більшій мірі у ВЕСах на основі атомів Cu, Co, Ni, Fe та Cr і у меншій мірі у сплавах, в яких п'ятою або шостою компонентою виступають атоми Al і Ti;

– сказане відносно кореляції між θ_D і a пояснюється відносно великими значеннями параметру δ (різниця атомних радіусів) для ВЕСу в цілому: 5,2-7,1% при допіруючих елементах Al і Ti; індивідуальний параметр δ_i має такі значення: 10,3 % (допіруючий елемент Al) та (12,0-15,4)% (Ti);

– відносно великі значення δ та δ_i можуть спричинити деформацію решітки і фононного спектру, що проявиться у цьому випадку у відсутності кореляції між θ_D і a .

Атоми Al і Ti, як компоненти ВЕСів, можуть впливати на кореляцію питомого опору і середньої довжини вільного пробігу (СДВП), оскільки деформація фононного спектру буде спричиняти зменшення λ і відповідне збільшення величини $\rho(x)$.

Крім електрон-фононної взаємодії величина $\rho(x)$ у великій мірі залежить від спин-орбітальної взаємодії електронів провідності, яка дуже ефективна при наявності магнітних компонент.

Шумакова Н.І. – кандидат фіз.-мат. наук, доцент кафедри електроніки, загальної та прикладної фізики СумДУ;

Проценко С.І. – доктор фіз.мат. наук, професор;

Шевченко В.І. – аспірант;

Проценко І.Ю. – доктор фіз.мат. наук, професор.

- [1] S.I. Vorobiov, D.M. Kondrakhova, S.A. Nepijko, N.I. Shumakova, I.Yu. Protsenko, *Crystalline structure, electrophysical and magnetoresistive properties of high entropy film alloys*, J. Nano- Electron. Phys., 8(3), 03026 (2016); [https://doi.org/10.21272/jnep.8\(3\).03026](https://doi.org/10.21272/jnep.8(3).03026).
- [2] L.V. Odnodvoretz, Yu. Protsenko, Y.M. Shabelnyk, N.I. Shumakova, *Correlation between the entropy degree and properties of multi-component (high-entropy) film materials*, J. Nano- Electron. Phys. 12(2), 02014 (2020); [https://doi.org/10.21272/jnep.12\(2\).02014](https://doi.org/10.21272/jnep.12(2).02014).
- [3] I.Yu. Protsenko, L.V., Odnodvoretz, M.V. Vasyukhno, A.K. Rylova, N.I. Shumakova, *Concentration Effects in the Electronic Properties of High-entropy Film Alloys*, J. Nano- Electron. Phys., 14(4), 04021 (2022); [https://doi.org/10.21272/jnep.14\(4\).04021](https://doi.org/10.21272/jnep.14(4).04021).
- [4] I.Yu. Protsenko, M.O. Shumakova, A.K. Rylova, N.I. Shumakova, *The concentration dependences of lattice parameters and Debye temperature in multicomponent solid solutions* Metallofizika i Noveishie Tekhnologii, 45(7), 857 (2023); <https://doi.org/10.15407/mfint.45.07.0857>.
- [5] S.I. Protsenko, L.V. Odnodvoretz, N.I. Shumakova, O.O. Pasko, I.Yu. Protsenko, *Concentration effects in multicomponent metallic solid solutions*, Physics and Chemistry of Solid State, 2024, 25(2), 284 (2024); <https://doi.org/10.15330/pcss.25.2.284-288>.
- [6] I.Y. Protsenko, L.V. Odnodvoretz, N.I. Shumakova, S.I. Protsenko, Y.M. Shabelnyk, *A method of predicting the physical properties of multicomponent materials*, European Physical Journal Plus, 139(3), 252 (2024); <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-024-05030-4>.
- [7] I.M. Pazukha, I.Yu. Protsenko, *Theoretical methods of investigation of thin film materials properties*, Sumy, Sumy State University, 102 (2017).
- [8] *Fizika tverdoho tela. Enciklopedicheskii slovar. Vol. 1* (Ed. by Bar'yakhtar V.G.) – Kyiv: Naukova dumka, 1996. – 656 p. [in Russian].
- [9] *Fizika tverdoho tela. Enciklopedicheskii slovar. Vol. 2* (Ed. by Bar'yakhtar V.G.) – Kyiv: Naukova dumka, 1998. – 644 p. [in Russian].

- [10] Xiao Yang, Yong Zhang, *Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multi-component alloys*. Materials Chemistry and Physics, 132, 233 (2012); <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2011.11.021>.
- [11] V. Cherniavsky, *Generalized correlation of structure and mechanical properties formation in high entropy alloys of Al-Cu-Ni-Fe-Cr-Ti-V system during mechanical alloying and sintering*, Avtoreferat dysertacii k.t.n., NTU “KPI”, Kyiv, 24 (2016).
- [12] Y. Zhang, X. Yang, P. K. Liaw, *Alloy Design and Properties Optimization of High-Entropy Alloys*, JOM, 64 (7), (2012); <https://doi.org/10.1007/s11837-012-0366-5>.
- [13] Sheng Guo, Qiang Hu, Chun Ng, C.T. Liu, *More than entropy in high-entropy alloys: Forming solid solutions or amorphous phase*, Intermetallics 41, 96 (2013); <https://doi.org/10.1016/J.Intermet.2013.05.002>.

N.I. Shumakova, S.I. Protsenko, V.I. Shevchenko, I.Yu. Protsenko

Influence of Element Concentration on Kinetic and Dynamic Properties of High-Entropy Solid Solutions

Sumy State University, Sumy, Ukraine, i.protsenko@aph.sumdu.edu.ua

Previously obtained calculation data on the dependence of dynamic characteristics (lattice parameter (a) and Debye temperature θ_D) and experimental data on kinetic characteristics (resistivity ρ and mean free path of electrons λ) on the concentration of elements in high-entropy alloys (HEAs) were generalized. In the first case, calculations were carried out for bulk solid solutions with an FCC lattice based on Cu, Co, Ni, Fe, Cr, Al, or Ti atoms; in the second case, on the basis of experimental data.

A correlation was established between θ_D and a , and between ρ and λ^{-1} in four- and five-component solid solutions, in which Al and Ti atoms are absent. The reason for the unsatisfactory correlation in the presence of Al and Ti atoms is explained by the relatively large value of the parameter δ – the difference in atomic radii (5.2–7.1%) in solid solutions containing Al and Ti atoms. The individual parameter δ_i has an even larger value: 10.3% (Al) or 12.0–15.4% (Ti). Relatively large values of δ and δ_i can cause deformation of the solid-solution lattice, which manifests itself in the absence of correlation between θ_D and a , as well as between ρ and λ^{-1} .

Keywords: High-entropy alloys, Solid solutions, Lattice parameter, Debye temperature, Resistivity, Mean free path, Thin films, Correlation, Atomic radius difference parameter.