

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ  
ПРОБЛЕМЫ  
СОВРЕМЕННОГО  
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

**Научный журнал**  
Издается с января 2004 г.

**Том 20**

**Март 2023 г.**

**№ 1**

# Фундаментальные проблемы современного материаловедения

## том 20 №1 2023 г.

Международный специализированный научный журнал  
Выходит ежеквартально  
Издается с января 2004 года

---

### Учредитель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

### Соучредители:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный педагогический университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

---

### Издатель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

**Адрес издателя:** 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

**Главный редактор:** д.ф.-м.н., профессор Старостенков М.Д.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: genphys@mail.ru

**Зам. главного редактора (ответственный за выпуск):** д.т.н., профессор Гурьев А.М.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gurievam@mail.ru

**Зам. главного редактора (ответственный за online выпуск):** к.ф.-м.н., доцент Черных Е.В.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: jane\_5@mail.ru

**Технический редактор:** к.ф.-м.н., доцент Черных Е.В.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Факс: +7 (385) 236-78-64

E-mail: jane\_5@mail.ru

Журнал включен в Перечень ВАК ведущих российских рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук (редакция от 01.02.2022 г.).

Журнал включен в каталог периодических изданий Ульрих  от 18.02.2015 г., в перечень журналов, вошедших в ядро РИНЦ и в список 650 российских журналов, вошедших в Russian Science Citation Index (RSCI), представленный на платформе Web of Science.

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

**Регистрационный номер:** ПИ № ФС77-75026 от 01.02.2019 г.

### Информация о подписке:

«Фундаментальные проблемы современного материаловедения» выходит раз в квартал. Индекс в каталоге ООО «Урал-Пресс» – 31038.

Цена годовой подписки через редакцию: 1200 руб. (300 руб. за номер).

**Адрес редакции:** 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

**Тел./факс** (3852) 29-08-52

**E-mail:** genphys@mail.ru

**Адрес в Internet:** <https://ojs.altstu.ru/index.php/fpsm>

**Редакционная коллегия:**

**Старостенков М.Д.** (д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Глезер А.М.** (д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», директор ИМФМ ЦНИИЧермет им. И.П. Бардина, член совета РАН по физике конденсированного состояния, главный редактор журнала «Деформация и разрушения», зам. главного редактора журнала «Материаловедение» ЦНИИЧермет, г. Москва, Россия)

**Громов В.Е.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

**Гурьев А.М.** (д.т.н., профессор, зав. кафедрой начертательной геометрии и графики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Иванов С.Г.** (д.т.н., ведущий научный сотрудник АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Кащенко М.П.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей физики УГЛТУ, г. Екатеринбург, Россия)

**Кхаре А.** (профессор, Индийский институт науки образования и исследований, г. Пуна, Индия)

**Мулюков Р.Р.** (член корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор, директор ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

**Мэй Шунчи** (профессор, декан УТУ, г. Ухань, Китай)

**Козырев Н.А.** (д.т.н., профессор, проректор по научной и инновационной деятельности СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

**Плотников В.А.** (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей и экспериментальной физики АлтГУ, г. Барнаул, Россия)

**Потекаев А.И.** (д.ф.-м.н., профессор, директор СФТИ, главный редактор журнала «Известия вузов. Физика», г. Томск, Россия)

**Пышнограй Г.В.** (д.ф.-м.н., профессор АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

**Рубаник В.В.** (д.т.н., член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, директор ГНУ "ИТА НАН Беларуси", г. Витебск, Беларусь)

**Старенченко В.А.** (д.ф.-м.н., профессор, декан общеобразовательного факультета ТГАСУ, г. Томск, Россия)

**Льгденов Б.Д.** (д.т.н., профессор ВСГУТУ, г. Улан-Удэ, Россия)

**Дмитриев С.В.** (д.ф.-м.н., доцент, зав. лабораторией ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

**Атучин В.В.** (к.ф.-м.н., доцент, руководитель лаборатории «Оптические материалы и структуры» ИФП СО РАН, г. Новосибирск, Россия)

# Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS) Vol. 20 No.1 (2023))

International specialized scientific journal  
Issued quarterly  
Published since January 2004

---

## Founders:

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»  
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Altai State Pedagogical University»  
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Siberian State Industrial University»  
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Tomsk State University of Architecture and Building»

---

## Publisher:

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»  
Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

## Editor in chief

### PhD, Hab., Professor Starostenkov M.D.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64  
E-mail: genphys@mail.ru

## Sub-Editors

### PhD, Hab., Professor Guriev A.M.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Fax: +7 (385) 236-78-64  
E-mail: gurievam@mail.ru

### PhD Chernykh E.V.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64  
E-mail: jane\_5@mail.ru

## Editorial board:

**Starostenkov M.D.**, PhD, Hab., Professor, Chief Researcher, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia  
**Glezer A.M.**, PhD, Hab., Professor, Chief Researcher of the National Research Technological University «MISIS», Director, G.V. Kurdjumov Institute of Metals Science and Physics, State Research Center of the Russian Federation «I.P. Bardin Central Research Institute of Ferrous Metallurgy», Moscow, Russia  
**Gromov V.E.**, PhD, Hab., Professor, Head of Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia  
**Guriev A.M.**, PhD, Hab., Professor, Head of Department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia  
**Ivanov S.G.**, PhD, Hab., Chief Researcher, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia  
**Kaschenko M.P.**, PhD, Hab., Professor, Head of Department, Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia  
**Khare A.**, PhD, Hab., Professor, Indian Institute of Science Education and Research, Pune, India  
**Mulyukov R.R.**, member corr. of RAS, PhD, Hab., Professor, director, Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia  
**Mei Shunqi**, Professor, dean, Wuhan Textile University, Wuhan, China  
**Kozyrev N.A.**, PhD, Hab., Professor, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia  
**Plotnikov V.A.**, PhD, Hab., Professor, Head of Department, Altai State University, Barnaul, Russia  
**Potekaev A.I.**, PhD, Hab., Professor, Director, V.D. Kuznetsov's Siberian Physical-Technical Institute, Tomsk, Russia  
**Pyshnograi G.V.**, PhD, Hab., Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia  
**Rubanik V.V.**, PhD, Hab., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, director of the State Scientific Institution «Institute of Technical Acoustics National Academy of Sciences of Belarus», Vitebsk, Republic of Belarus  
**Starenchenko V.A.**, PhD, Hab., Professor, Dean, Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russia  
**Lygdenov B.D.**, PhD, Hab., Professor, East Siberia State University of Technology and Management, Ulan-Ude, Russia  
**Dmitriev S.V.**, PhD, Hab., Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia  
**Atuchin V.V.**, PhD, Hab., Institute of Semiconductor Physics SB of RAS, Novosibirsk, Russia

## Editorial

Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia  
<https://ojs.altstu.ru/index.php/fpsm>, e-mail: genphys@mail.ru

### PhD Chernykh E.V.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64  
E-mail: jane\_5@mail.ru

## СОДЕРЖАНИЕ

### РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

<i>Н.А. Попова, Е.Л. Никоненко, Ю.В. Соловьёва, В.А. Старенченко</i> Внутренние напряжения и их источники в технически чистом никеле после равноканального углового прессования.....	9
<i>Ю.Ф. Иванов, В.В. Шугуров, Е.А. Петрикова, О.С. Толкачев</i> Получение боридов металлов в системе с горячим анодом.....	17
<i>А.А. Красников, О.В. Савельева, Г.А. Воронова, И.А. Курзина</i> Системы доставки активного компонента (новокаин) на основе ZIF-8.....	23
<i>Г.М. Полетаев, В.В. Коваленко</i> Вычисление энергии образования краевой, винтовой и двойнивающей дислокаций с помощью метода молекулярной динамики.....	33
<i>Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов, С.В. Коновалов, М.О. Ефимов, Ю.А. Шлярова, И.А. Панченко, М.Д. Старостенков</i> Структурно-фазовые состояния покрытия ВЭС Al-Fe-Co-Cr-Ni, сформированного на сплаве 5083.....	41
<i>А.А. Серебрякова, Д.В. Загуляев, В.В. Шляров</i> Влияние магнитного поля с индукцией до 0,5 Тл на динамику деформационных характеристик свинца.....	52
<i>Н.Н. Коваль, Ю.Ф. Иванов, Е.А. Петрикова, В.В. Шугуров, А.Д. Тересов, И.В. Лопатин</i> Формирование электронно-ионно-плазменным методом поверхностных слоев стали, содержащих силициды тугоплавких металлов.....	59
<i>Ю.В. Соловьёва, А.Н. Соловьёв, Е.Л. Никоненко, В.А. Старенченко</i> Деформационное упрочнение, субструктура и рельеф поверхности монокристаллов Cu-12 ат. % Al.....	66
<i>Ю.З. Васильева, А.Я. Пак, В.В. Сохорева</i> О возможности применения карбида молибдена, полученного безвакуумным электродуговым методом, в водородной топливной ячейке.....	76

## CONTENTS

### SECTION 1. CONDENSED MATTER PHYSICS

<i>N.A. Popova, E.L. Nikonenko, Yu.V. Solov'eva, V.A. Starenchenko</i> Internal stresses and their sources in technically pure nickel after equal channel angular pressing.....	9
<i>Yu.F. Ivanov, V.V. Shugurov, E.A. Petrikova, O.S. Tolkachev</i> Production of metal borides in a heated anode system.....	17
<i>A.A. Krasnikov, O.V. Savelyeva, G.A. Voronova I.A. Kurzina</i> Active ZIF-8-based component (novocaine) delivery systems.....	23
<i>G.M. Poletaev, V.V. Kovalenko</i> Calculation of the energy of formation of edge, screw and twinning dislocations using the method of molecular dynamics.....	33
<i>Yu.F. Ivanov, V.E. Gromov, S.V. Konovalov, M.O. Efimov, Yu.A. Shliarova, I.A. Panchenko, M.D. Starostenkov</i> Structural and phase states of the Al-Fe-Co-Cr-Ni HEA coating formed on the 5083 alloy.....	41
<i>A.A. Serebryakova, D.V. Zagulyaev, V.V. Shlyarov</i> Influence of a magnetic field with induction up to 0.5 T on the dynamics of the deformation characteristics of lead.....	52
<i>N.N. Koval, Yu.F. Ivanov, E.A. Petrikova, V.V. Shugurov, A.D. Teresov, I.V. Lopatin</i> Formation by the electron-ion-plasma method of steel surface layers containing silicides of refractory metals.....	59
<i>Yu.V. Solov'eva, A.N. Solov'ev, E.L. Nikonenko, V.A. Starenchenko</i> Deformation surface relief and stages of plastic deformation of Cu-12 at. % Al single crystals.....	66
<i>Yu.Z. Vassilyeva, A.Ya. Pak, V.V. Sokhoreva</i> On the possibility of application of molybdenum carbide produced by non-vacuum electric arc method in a hydrogen fuel cell.....	76

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.01.004

## ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ КРАЕВОЙ, ВИНТОВОЙ И ДВОЙНИКУЮЩЕЙ ДИСЛОКАЦИЙ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Геннадий Михайлович Полетаев<sup>1†</sup>, Виктор Викторович Коваленко<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

<sup>2</sup> Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Россия

<sup>†</sup> gmpoletaev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>

<sup>2</sup> vikt.kovalencko@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1664-003X>

**Аннотация.** Предложен метод определения с помощью молекулярной динамики энергии движущихся краевой, винтовой и двойнивающей дислокаций в ГЦК металлах, заключающийся в построении и анализе графика зависимости от времени энергии расчетной области, через которую проходит дислокация. В качестве ГЦК металлов взяты никель, медь, серебро и аустенит. Для описания межатомных взаимодействий в никеле, меди и серебре использовались потенциалы Клери-Росато, для аустенита – потенциал Лау. Инициирование образования и движения дислокации проводилось за счет сдвига двух частей торца расчетной ячейки в разные стороны. Полная дислокация появлялась при моделировании сразу в виде расщепленной на пару частичных дислокаций Шокли, разделенных дефектом упаковки. Расстояние между частичными дислокациями составляло несколько нанометров. При высоких скоростях сдвига оно уменьшалось. Выяснено, что скорость сдвига влияет на энергию дислокации только до значений, равных примерно 40 м/с. При больших значениях скорости энергия дислокации повышается. Кроме этого, выяснено, что, начиная с 8 межатомных расстояний (примерно 20 Å), ширина моделируемой расчетной ячейки с периодическими условиями не влияет на получаемые значения энергии дислокации. Согласно полученным данным, энергия краевой дислокации примерно в полтора раза выше энергии винтовой дислокации. Для рассматриваемых металлов энергии дислокаций коррелируют с упругими характеристиками. Энергия двойнивающей дислокации существенно меньше энергии краевой или винтовой дислокаций. Движущаяся двойнивающая дислокация в модели была получена в результате расщепления винтовой дислокации на двойнике на две частичные дислокации, скользящие после расщепления вдоль двойника.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, металл, дислокация, энергия дислокации, двойнивающая дислокация.

**Благодарности:** Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2020-0002).

**Для цитирования:** Полетаев Г.М., Коваленко В.В. Вычисление энергии образования краевой, винтовой и двойнивающей дислокаций с помощью метода молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 1. С. 33–40. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.01.004.

Original article

## CALCULATION OF THE ENERGY OF FORMATION OF EDGE, SCREW AND TWINNING DISLOCATIONS USING THE METHOD OF MOLECULAR DYNAMICS

Gennady M. Poletaev<sup>1†</sup>, Viktor V. Kovalenko<sup>2</sup>

<sup>1</sup> I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

<sup>2</sup> Siberian State Industrial University, Kirova Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia

<sup>†</sup> gmpoletaev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>

<sup>2</sup> vikt.kovalencko@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1664-003X>

**Abstract.** A method is proposed for determining the energy of moving edge, screw, and twinning dislocations in fcc metals using molecular dynamics, which consists in constructing and analyzing the time dependence of the energy of the computational region through which the dislocation passes. Nickel, copper, silver, and austenite were taken as fcc metals. The Cleri-Rosato potentials were used to describe interatomic interactions in nickel, copper, and silver, and the Lau potential was used for austenite. The initiation of the formation and movement of a dislocation was carried out by shifting two parts of the end face of the calculation cell in different directions. A perfect dislocation appeared in the simulation immediately in the form of a split into a pair of partial Shockley dislocations separated by a stacking fault. The distance between partial dislocations was several nanometers. At high shear rates, it decreased. It was found that the shear rate affects the dislocation energy only up to values equal to approximately 40 m/s. At high velocities, the dislocation energy increases. In addition, it was found that, starting from 8 interatomic distances (approximately 20 Å), the width of the simulated computational cell with periodic conditions does not affect the obtained values of the dislocation energy. According to the data obtained, the energy of an edge dislocation is approximately one and a half times higher than the energy of a screw dislocation. For the metals under consideration, the dislocation energies correlate with the elastic characteristics. The energy of a twinning dislocation is substantially less than the energy of edge or screw dislocations. The moving twinning dislocation in the model was obtained as a result of the splitting of a screw dislocation on the twin into two partial dislocations that slide along the twin after splitting.

**Keywords:** molecular dynamics, metal, dislocation, dislocation energy, twinning dislocation.

**Acknowledgements:** The study was supported by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (FZMM-2020-0002).

**For citation:** Poletaev, G. M. & Kovalenko, V. V. (2023). Calculation of the energy of formation of edge, screw and twinning dislocations using the method of molecular dynamics. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(1), 33–40. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.01.004.

## Введение

Образование, движение и взаимодействие дислокаций друг с другом и другими дефектами являются важными вопросами, поиск ответов на которые необходим для развития представлений о механизмах пластической деформации кристаллических материалов. Многообразие кристаллических систем, систем скольжения и типов дислокаций, а также вариантов взаимодействия дислокаций с другими дефектами порождает сложность и комплексность данного явления.

Дислокациям в металлах посвящено много работ, в том числе выполненных с помощью компьютерного моделирования [1-5]. Помимо сложных вопросов взаимодействия дислокаций друг с другом и с различными дефектами, внимание в современных работах обращено и на относительно простые вопросы: например, зависимость скорости скольжения дислокации от температуры и скорости деформирования [3, 6]. С ростом скорости деформирования скорость дислокаций, как известно, сначала растет, а затем достигает некоторого предела, который, как правило, меньше скорости звука в данном материале. Причем разные авторы приводят разные значения этого предела в отношении к скорости звука [3, 6-8]. С ростом температуры,

как отмечает большинство исследователей, скорость скольжения дислокаций снижается [3, 6, 7].

Ранее, в работах [9, 10], с помощью метода молекулярной динамики было проведено исследование скольжения краевой и винтовой дислокаций в ГЦК металле на примере никеля и серебра в зависимости от температуры и скорости сдвига, а также влияния на скорость скольжения дислокации примесных атомов углерода, азота и кислорода.

Настоящая работа посвящена определению с помощью метода молекулярной динамики энергии образования краевой, винтовой и двойнивающей дислокаций в ГЦК металлах: никеле, меди, серебре и аустените.

Теоретически, энергия дислокации  $W$ , приходящейся на единицу ее длины  $l$ , определяется по формуле [7, 11]

$$\frac{W}{l} = \frac{\mu b^2}{4\pi K} \ln \frac{R}{r_0}, \quad (1)$$

где  $\mu$  – модуль сдвига,  $b$  – модуль вектора Бюргерса,  $R$  – радиус расчетной области,  $r_0$  – условный радиус. Параметр  $K$  зависит от типа дислокации:  $K=1$  для винтовой дислокации и  $K=1-\nu$ , где  $\nu$  – коэффициент Пуассона, для краевой.

Энергия полной краевой дислокации сравнительно большая и для разных металлов может принимать значения 1-3 эВ/Å [7, 11, 12]. Даже в алюминии, со сравнительно низкой энергией связи атомов, согласно [12], энергия дислокации, в зависимости от ориентации и вектора Бюргерса, может принимать значения даже до нескольких эВ/Å.

### Определение энергии краевой и винтовой дислокаций

Для описания межатомных взаимодействий в рассматриваемых металлах использовались ЕАМ потенциалы: Клери-Росато [13] для моделирования взаимодействий в никеле, меди и серебре, и потенциал Лау [14] для моделирования взаимодействий в  $\gamma$ -Fe. Оба потенциала неоднократно использовались в молекулярно-динамических моделях и прошли успешную апробацию по большому числу структурных, энергетических и механических характеристик рассматриваемых металлов [15-18].

В кристаллах с ГЦК решеткой преимущественной является система скольжения  $\{111\}\langle 110\rangle$  [7, 8]. Вектор Бюргерса полной дислокации равен  $1/2\langle 110\rangle$ . Полная дислокация, как правило, расщепляется на две частичные дислокации с векторами Бюргерса  $1/6\langle 112\rangle$ , между которыми формируется дефект упаковки.

Для моделирования движущейся дислокации в настоящей работе была создана расчетная ячейка, содержащая около 30000 атомов (рис.1), с ориентацией осей: X –  $[\bar{1}10]$ , Y –  $[\bar{1}\bar{1}2]$ , Z –  $[111]$ . Плоскость XY (рис.1) в данном случае соответствует плоскости скольжения дислокации (111). Для инициации движения дислокации создавался сдвиг от торца расчетной ячейки. На рис.1 изображена схема создания движущейся полной краевой дислокации  $\frac{1}{2}[\bar{1}01](111)$ . Закрашенные области с левого торца перемещались как единое целое вдоль направлений, показанных на рисунке: в случае моделирования краевой дислокации верхняя часть торца смещалась вдоль плотноупакованного направления  $[\bar{1}01]$ , нижняя – вдоль противоположного направления  $[10\bar{1}]$ . В случае моделирования винтовой дислокации – верхняя часть смещалась вдоль направления  $[\bar{1}10]$  (ось X), а нижняя – вдоль  $[1\bar{1}0]$ . Атомы внутри закрашенной области в процессе компьютерного

моделирования смещались только вдоль указанных направлений с постоянной скоростью сдвига  $V_\tau$ . Граничные условия с этой стороны, таким образом, были жесткими. Вдоль оси X, вдоль ядра дислокации, граничные условия задавались периодическими, то есть имитировалось бесконечное повторение структуры расчетной ячейки вдоль оси X. По другим границам мы использовали специальный тип граничных условий – условно жесткий: все приграничные атомы сверху, снизу и справа в процессе моделирования имели возможность двигаться только вдоль плоскости XY, движение вдоль оси Z исключалось. Этого было достаточно для удержания, с одной стороны, заданной прямоугольной формы расчетного блока и, с другой стороны, свободного выхода дислокаций за пределы расчетной ячейки.

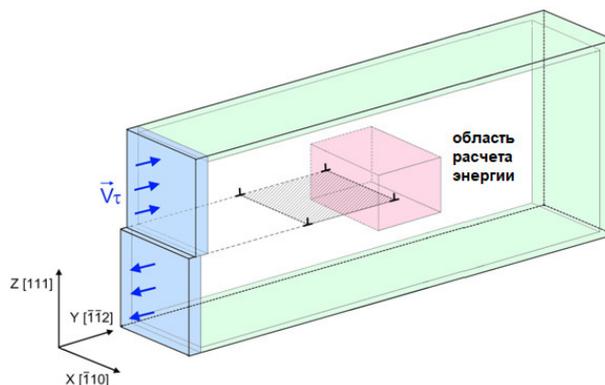


Рис.1. К описанию метода определения энергии краевой и винтовой дислокаций

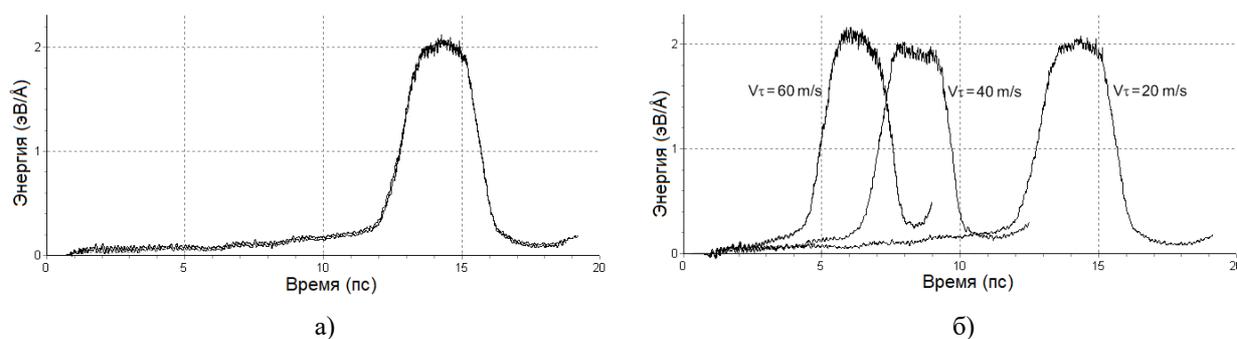
Fig.1. To the description of the method for determining the energy of edge and screw dislocations

Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе-Гувера.

В некоторый момент времени сдвиг в левой части расчетной ячейки провоцировал появление дислокации – краевой или винтовой в зависимости от направления сдвига. Полная дислокация появлялась сразу в виде расщепленной на пару частичных дислокаций Шокли, разделенных дефектом упаковки в плоскости (111). Для краевой дислокации реакция расщепления имела вид  $\frac{1}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{2}11] + \frac{1}{6}[\bar{1}\bar{1}2]$ , для винтовой –  $\frac{1}{2}[\bar{1}10] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{1}2\bar{1}] + \frac{1}{6}[\bar{2}11]$ .

Расстояние между частичными дислокациями определяется, как известно, энергией дефекта упаковки [7, 8]. В настоящей работе оно составляло несколько нанометров (в зависимости от скорости сдвига), что согласуется с результатами моделирования других авторов, например [3-5].

Во время движения дислокации через расчетную область (выделена цветом в середине расчетной ячейки на рис.1), строился график изменения потенциальной энергии расчетной области в зависимости от времени. Ширина расчетной области подбиралась такой, чтобы она, с одной стороны, была шире расстояния между частичными дислокациями (чтобы в расчетной области мог одновременно поместиться весь комплекс из двух частичных дислокаций) и, с другой, не такой большой, чтобы в нее могла войти часть следующей дислокации.



**Рис.2.** Наложения изменения энергии расчетной области при прохождении краевой дислокации в  $\gamma$ -Fe: а) при разной ширине расчетной ячейки (здесь наложены четыре графика при ширине 8, 10, 16, 20 межатомных расстояний); б) при разной скорости сдвига (20, 40 и 60 м/с)

**Fig.2.** Overlays of changes in the energy of the computational region during the passage of an edge dislocation in  $\gamma$ -Fe: a) at different widths of the computational cell (here, four graphs are superimposed at a width of 8, 10, 16, 20 interatomic distances); b) at different shear rates (20, 40 and 60 m/s)

Как можно видеть, начиная с 8 межатомных расстояний (примерно  $20 \text{ \AA}$ ), ширина не влияет вообще – наложенные зависимости очень хорошо повторяют друг друга, несмотря на то, что на рисунке наложены друг на друга зависимости для четырех разных значений ширины. До 8 межатомных расстояний, как было показано в [17], скорость дислокации может зависеть от ширины ячейки.

Скорость сдвига  $V_t$ , как оказалось, тоже почти не влияет на высоту пика энергии расчетной области, но до значений примерно 40-50 м/с. При скорости сдвига  $V_t$  больше 40-50 м/с энергия слабо увеличивается из-за дополнительных напряжений и меньшего расстояния между соседними дислокациями. Скорость самих дислокаций при прохождении рас-

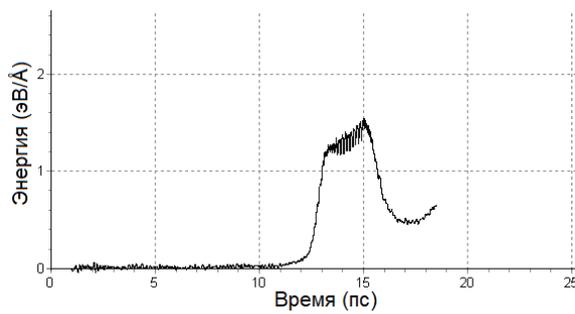
температура задавалась близкой к 0 К (точнее, стартовая температуры была равна 0 К, но в процессе создания и движения дислокации расчетная ячейка нагревалась до небольшой температуры порядка 10 К).

В первую очередь в настоящей работе было проведено исследование влияния на получаемые значения энергии полных дислокаций (то есть всего комплекса из двух частичных дислокаций плюс энергия дефекта упаковки между ними) ширины расчетной ячейки (размера вдоль оси X на рис.1) и скорости сдвига  $V_t$ .

На рис.2 изображены наложения друг на друга графиков изменения удельной энергии расчетной области (эВ/Å) при прохождении полной краевой дислокации в чистом ГЦК железом при разной ширине расчетной ячейки (рис.2а) и разной скорости сдвига (рис.2б).

четной области при этом тоже увеличивается, что видно, например, по более узкому пику для 60 м/с на рис.2б. Кстати, скорость дислокации можно определять также по ширине этого пика – это еще один возможный метод ее определения. В дальнейших исследованиях ширина расчетной ячейки обычно принималась 10 или 12 межатомных расстояний.

На рис.3 приведен график изменения энергии расчетной области для винтовой дислокации в  $\gamma$ -Fe. Видно, что энергия винтовой дислокации заметно меньше, чем краевой. Найденные значения энергии краевой и винтовой дислокаций в рассматриваемых металлах приведены ниже в общей таблице.



**Рис.3.** Изменение энергии расчетной области при прохождении винтовой дислокации в  $\gamma$ -Fe при скорости сдвига 20 м/с

**Fig.3.** Change in the energy of the computational domain during the passage of a screw dislocation in  $\gamma$ -Fe at a shear rate of 20 m/s

### Определение энергии двойнивающей дислокации

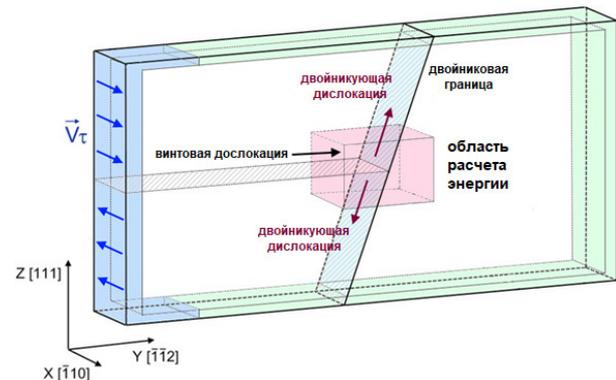
Двойнивающие дислокации образуются при формировании и миграции двойников (двойниковых границ). Как было показано в [17], при преодолении двойниковой границы краевой дислокацией и смены плоскости скольжения на самой границе образуется двойнивающая дислокация, которая быстро перемещается вдоль двойниковой границы, и, если нет препятствия для ее движения, она «залечивает» границу. Винтовая дислокация не проходит двойник, а поглощается им, меняя при этом плоскость скольжения. Это происходит при гораздо меньших напряжениях по сравнению с краевой дислокацией. После смены плоскости скольжения обе частичные дислокации расходятся в разные стороны вдоль двойниковой границы, «залечивая» границу, как и в случае прохождения краевой дислокации.

Для расчета энергии двойнивающей дислокации было сделано предположение, что энергия двойнивающих дислокаций, которые образуются при прохождении краевой дислокации и расщеплении винтовой, одинаковы. Методика определения энергии двойнивающей дислокации, получающейся при расщеплении винтовой дислокации на двойниковой границе, была следующей (рис.4). Как и в случае краевой или винтовой дислокации, строился аналогичный график изменения потенциальной энергии расчетной области, приходящейся на единицу ее ширины вдоль оси X, в процессе расщепления винтовой дислокации на двойнике. Одновременно с этим выводился график смещения реперной точки, находящейся на двойнике. При

расщеплении, которое можно было фиксировать по пику смещения реперной точки, происходил небольшой спад энергии расчетной области  $\Delta E$ . Энергия двойнивающей дислокации определялась по формуле

$$E_T = \frac{1}{2}(E_S - \Delta E), \quad (2)$$

где  $E_S$  – энергия полной винтовой дислокации.



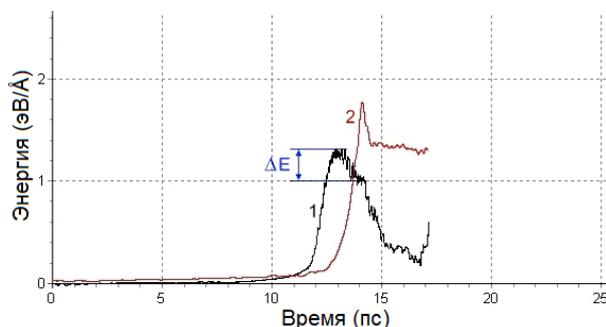
**Рис.4.** К описанию метода определения энергии двойнивающей дислокации

**Fig.4.** To the description of the method for determining the energy of a twinning dislocation

На рис.5 приведен пример изменения энергии расчетной области при вхождении в нее винтовой дислокации и ее последующего расщепления на две двойнивающие дислокации. Сравнивая эти графики с графиками прохождения винтовой дислокации через расчетную область в чистом кристалле на рис.3, следует заметить, что ширина пиков заметно меньше, что означает, что двойнивающие дислокации покидают расчетную область быстрее, чем винтовая дислокация, т.е. они являются более подвижными, что также отмечалось в [17]. В Таблице приведены полученные значения энергий краевой, винтовой и двойнивающей дислокаций.

Согласно полученным данным, энергия краевой дислокации примерно в полтора раза выше энергии винтовой дислокации, что согласуется с теоретической формулой (1). Для рассматриваемых металлов энергии дислокаций коррелируют с упругими характеристиками, что также согласуется с формулой (1). Энергия двойнивающей дислокации существенно меньше энергии краевой или винтовой дислокаций. По сути, согласно методике ее получения в модели, это одна из частичных дислокаций, которая образовалась при расщеплении

винтовой дислокации на двойнике, поэтому она, очевидно, должна быть примерно в два раза ниже энергии полной винтовой дислокации за вычетом половины энергии дефекта упаковки между частичными дислокациями в исходной винтовой дислокации.



**Рис.5.** Изменения энергии расчетной области при расщеплении винтовой дислокации на две двойникующие в  $\gamma$ -Fe при скорости сдвига 20 м/с: 1 – энергия расчетной области, 2 – смещение реперного атома на двойниковой границе для определения момента расщепления винтовой дислокации

**Fig.5.** Changes in the energy of the computational domain during the splitting of a screw dislocation into two twinning ones in  $\gamma$ -Fe at a shear rate of 20 m/s: 1 – energy of the computational domain, 2 – displacement of the reference atom on the twin boundary to determine the moment of splitting of the screw dislocation

**Таблица.** Энергии краевой, винтовой и двойникующей дислокаций в Ni, Cu, Ag и  $\gamma$ -Fe (эВ/Å)

**Table.** Edge, screw and twinning dislocation energies in Ni, Cu, Ag and  $\gamma$ -Fe (eV/Å)

	Краевая	Винтовая	Двойникующая
Ni	1,7	1,1	0,4
Cu	1,0	0,6	0,2
Ag	0,7	0,5	0,2
$\gamma$ -Fe	2,0	1,3	0,5

### Заключение

Предложен метод определения с помощью молекулярной динамики энергии движущихся краевой, винтовой и двойникующей дислокаций в ГЦК металлах, заключающийся в построении и анализе графика зависимости от времени энергии расчетной области, через которую проходит дислокация. В качестве ГЦК металлов взяты никель, медь, серебро и аустенит.

Полная краевая или винтовая дислокация появлялась при моделировании сразу в виде расщепленной на пару частичных дислокаций Шокли, разделенных дефектом упаковки. Расстояние между частичными дислокациями составляло несколько нанометров. При высоких скоростях сдвига оно уменьшалось.

Выяснено, что скорость сдвига влияет на энергию дислокации только до значений, равных примерно 40 м/с. При больших значениях скорости энергия дислокации повышается. Кроме этого, выяснено, что, начиная с 8 межатомных расстояний (примерно 20 Å), ширина моделируемой расчетной ячейки с периодическими условиями не влияет на получаемые значения энергии дислокации.

Согласно полученным данным, энергия краевой дислокации примерно в полтора раза выше энергии винтовой дислокации. Для рассматриваемых металлов энергии дислокаций коррелируют с упругими характеристиками. Энергия двойникующей дислокации существенно меньше энергии краевой или винтовой дислокаций. Движущаяся двойникующая дислокация в модели была получена в результате расщепления винтовой дислокации на двойнике на две частичные дислокации, скользящие после расщепления вдоль двойника.

### Список литературы

1. Chen C., Meng F., Ou P., Lan G., Li B., Chen H., Qiu Q., Song J. Effect of indium doping on motions of  $\langle a \rangle$ -prismatic edge dislocations in wurtzite gallium nitride // Journal of Physics: Condensed Matter. 2019. V. 31. P. 315701.
2. Olmsted D.L., Hector Jr L.G., Curtin W.A., Clifton R.J. Atomistic simulations of dislocation mobility in Al, Ni and Al/Mg alloys // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2005. V. 13. P. 371–388.
3. Zhao Sh., Osetsky Yu.N., Zhang Y. Atomic-scale dynamics of edge dislocations in Ni and concentrated solid solution NiFe alloys // Journal of Alloys and Compounds. 2017. V. 701. P. 1003–1008.
4. Rodney D., Ventelon L., Clouet E., Pizzagalli L., Willaime F. Ab initio modeling of dislocation core properties in metals and semiconductors // Acta Materialia. 2017. V. 124. P. 633–659.
5. Hunter A., Beyerlein I.J., Germann T.C., Koslowski M. Influence of the stacking fault energy surface on partial dislocations in fcc metals

with a three-dimensional phase field dislocations dynamics model // *Physical Review B*. 2011. V. 4. P. 144108.

6. Po G., Cui Y., Rivera D., Cereceda D., Swinburne T.D., Marian J., Ghoniem N. A phenomenological dislocation mobility law for bcc metals // *Acta Materialia*. 2016. V. 119. P. 123–135.

7. Friedel J. *Dislocations*. Pergamon press, 1964. P. 660.

8. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of Dislocations*. 2nd ed. Wiley, 1982. P. 600.

9. Poletaev G.M., Zorya I.V., Starostenkov M.D. Molecular dynamics modeling of dislocation glide in fcc metal // *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*. 2019. V. 16, N 4. P. 527–532.

10. Poletaev G.M., Zorya I.V. Effect of light element impurities on the edge dislocation glide in nickel and silver: molecular dynamics simulation // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2020. V. 131, N 3. P. 432–436.

11. Cahn R.W., Haasen P. *Physical Metallurgy*. 3th ed. North-Holland Physics Publishing, 1983. P. 2050.

12. Zhou X.W., Sills R.B., Ward D.K., Karnesky R.A. Atomistic calculations of dislocation core energy in aluminium // *Physical Review B*. 2017. V. 95. P. 054112.

13. Cleri F., Rosato V. Tight-binding potentials for transition metals and alloys // *Physical Review B*. 1993. V. 48. P. 22–33.

14. Lau T.T., Forst C.J., Lin X., Gale J.D., Yip S., Van Vliet, K.J. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys // *Physical Review Letters*. 2007. V. 98. P. 215501.

15. Poletaev G.M., Zorya I.V. Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation // *Technical Physics Letters*. 2020. V. 46, N 6. P. 575–578.

16. Poletaev G.M. Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti–Al system: molecular-dynamics simulation // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2021. V. 133, N 4. P. 455–460.

17. Chen C., Zhang F., Xu H., Yang Z., Poletaev G.M. Molecular dynamics simulations of dislocation-coherent twin boundary interaction in face-centered cubic metals // *Journal of Materials Science*. 2022. V. 57. P. 1833–1849.

18. Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization // *Solid State Phenomena*. 2016. V. 249. P. 3–8.

### Информация об авторах

Г. М. Полетаев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

В. В. Коваленко – доктор физико-математических наук, профессор, Сибирского государственного индустриального университета.

### References

1. Chen, C., Meng, F., Ou, P., Lan, G., Li, B., Chen, H., Qiu, Q. & Song, J. (2019). Effect of indium doping on motions of <a>-prismatic edge dislocations in wurtzite gallium nitride. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 31, 315701.

2. Olmsted, D. L., Hector, Jr L. G., Curtin, W. A. & Clifton, R. J. (2005). Atomistic simulations of dislocation mobility in Al, Ni and Al/Mg alloys. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 13, 371–388.

3. Zhao, Sh., Osetsky, Yu. N. & Zhang, Y. (2017). Atomic-scale dynamics of edge dislocations in Ni and concentrated solid solution NiFe alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 701, 1003–1008.

4. Rodney, D., Ventelon, L., Clouet, E., Pizzagalli, L. & Willaime, F. (2017). Ab initio modeling of dislocation core properties in metals and semiconductors. *Acta Materialia*, 124, 633–659.

5. Hunter, A., Beyerlein, I. J., Germann, T. C. & Koslowski, M. (2011). Influence of the stacking fault energy surface on partial dislocations in fcc metals with a three-dimensional phase field dislocations dynamics model. *Physical Review B*, 84, 144108.

6. Po, G., Cui, Y., Rivera, D., Cereceda, D., Swinburne, T. D., Marian, J. & Ghoniem, N. (2016). A phenomenological dislocation mobility law for bcc metals. *Acta Materialia*, 119, 123–135.

7. Friedel, J. (1964). *Dislocations*. Pergamon press. P. 660.

8. Hirth, J. P. & Lothe, J. (1982). *Theory of Dislocations*. 2nd ed. Wiley. P. 600.

9. Poletaev, G. M., Zorya I. V. & Starostenkov, M. D. (2019). Molecular dynamics modeling of dislocation slide in fcc metal. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 16(4), 527–532.
10. Poletaev, G. M. & Zorya, I. V. (2020). Effect of light element impurities on the edge dislocation glide in nickel and silver: molecular dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 131(3), 432–436.
11. Cahn, R. W. & Haasen, P. (1983). *Physical Metallurgy*. 3th ed. North-Holland Physics Publishing. P. 2050.
12. Zhou, X. W., Sills, R. B., Ward, D. K. & Karnesky, R. A. (2017). Atomistic calculations of dislocation core energy in aluminium. *Physical Review B*, 95, 054112.
13. Cleri, F. & Rosato, V. (1993). Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Physical Review B*, 48, 22–33.
14. Lau, T. T., Forst, C. J., Lin, X., Gale, J. D., Yip, S. & Van Vliet, K. J. (2007). Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys. *Physical Review Letters*, 98, 215501.
15. Poletaev, G. M. & Zorya, I. V. (2020). Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation. *Technical Physics Letters*, 46(6), 575–578.
16. Poletaev, G. M. (2021). Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti–Al system: molecular-dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 133(4), 455–460.
17. Chen, C., Zhang, F., Xu, H., Yang, Z. & Poletaev, G. M. (2022). Molecular dynamics simulations of dislocation–coherent twin boundary interaction in face-centered cubic metals. *Journal of Materials Science*, 57, 1833–1849.
18. Poletaev, G. M., Novoselova, D. V. & Kaygorodova, V. M. (2016). The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization. *Solid State Phenomena*, 249, 3–8.

#### Information about the authors

G. M. Poletaev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of department, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

V. V. Kovalenko – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Siberian State Industrial University.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 06.01.2023; одобрена после рецензирования 20.01.2023; принята к публикации 27.01.2023.

The article was received by the editorial board on 06 Jan. 23; approved after reviewing 20 Jan. 23; accepted for publication 27 Jan. 23.