

01,09

Моделирование движения краевых дислокаций в алюминии при высоких сдвигающих напряжениях методом молекулярной динамики

© И.С. Сугоняко¹, Р.И. Бабичева^{2,3}, А.Ю. Моркина^{1,3,4}, Д.В. Таров³, С.В. Дмитриев^{1,2}

¹ Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

² Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр РАН,
Уфа, Россия

³ Уфимский университет науки и технологий,
Уфа, Россия

⁴ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,
Уфа, Россия

E-mail: sgnilya@mail.ru

Поступила в Редакцию 4 августа 2025 г.

В окончательной редакции 15 августа 2025 г.

Принята к публикации 17 августа 2025 г.

Методом молекулярной динамики исследуется движение пары краевых дислокаций противоположного знака в монокристалле алюминия с ГЦК решеткой при различных сдвигающих напряжениях и температурах. Размеры расчетной ячейки с периодическими граничными условиями во всех трех направлениях выбраны так, что дислокации не взаимодействуют между собой. Исследован диапазон достаточно больших сдвигающих напряжений, когда реализуется надбарьерное скольжение дислокаций и их скорость убывает с ростом температуры за счет повышения вязкого трения. Рассчитана энергия дефекта упаковки и оценена частота колебаний линии дислокаций. Полученные результаты согласуются с известными результатами моделирования и экспериментальными данными, и могут использоваться при интерпретации электропластического эффекта.

Ключевые слова: молекулярная динамика, алюминий, краевая дислокация, сдвигающие напряжения, потенциал Пайерлса–Набарро.

DOI: 10.61011/FTT.2025.08.61310.221-25

1. Введение

Для большинства металлов при нормальных условиях основным механизмом пластической деформации является скольжение и переползание дислокаций, и лишь в материалах с нанокристаллической структурой, имеющих плотную сетку границ зерен, наибольший вклад в деформацию вносит зернограничное проскальзывание [1,2]. В последние десятилетия значительно вырос интерес к электропластическому эффекту (ЭПЭ) [3–5], который был открыт Троицким в 1969 году [6], и в настоящее время предлагаются различные способы его применения [7–10]. Физическая природа ЭПЭ продолжает активно обсуждаться. Помимо гипотезы электронного ветра [11] обсуждается гипотеза разогрева дислокаций потоком электронов [12–15], поскольку они оказывают повышенное сопротивление току. Дислокации, получив тепловую энергию от потока электронов, приобретают большую подвижность; это объясняет повышение пластичности металла без значительного разогрева металла в среднем, что и определяется как ЭПЭ [16]. Для более детального обсуждения описанного выше механизма ЭПЭ необходима информация о том, как подвижность дислокаций зависит от температуры и напряженности

деформированного состояния металла. Именно эта проблема послужила мотивацией данного исследования.

Известно, что движение дислокаций в металлах происходит по двум механизмам: термофлуктуационная подвижность и динамическое преодоление барьера Пайерлса–Набарро [17]. При термоактивированном движении, дислокации, находящиеся в поле сдвигающих напряжений, преодолевают барьер Пайерлса–Набарро за счет тепловых колебаний атомов, путем формирования и движения кинков на дислокациях. Скорость движения дислокаций при увеличении температуры в данном случае существенно возрастает, поскольку возрастает вероятность возникновения кинков на линии дислокации [18]. Такой механизм характерен для медленно движущихся дислокаций под действием слабых сдвигающих напряжений. При динамическом или, иными словами, надбарьерном движении дислокаций действующее сдвигающее напряжение достаточно велико для преодоления барьера Пайерлса–Набарро без дополнительного вклада термофлуктуации. В данном случае повышение температуры приводит к уменьшению скорости дислокаций, поскольку они испытывают возрастающее вязкое торможение. Динамическое торможение проявляется не только для быстрых дислокаций, но и для медленных,

определяя скорость затухания колебательного движения дислокационных сегментов между препятствиями и кинетику термофлуктуационного преодоления дислокациями потенциальных барьеров [19]. Поэтому для изучения движения дислокаций важно исследовать различные диапазоны температур и сдвигающих напряжений.

Физические процессы, происходящие в металлах во время движения дислокаций, затруднительно исследовать экспериментальным путем, так как методика эксперимента достаточно сложна, область их применения ограничена, и для них требуется дорогостоящее оборудование [20]. Поэтому для подобных исследований актуально применять методы компьютерного моделирования, а именно метод молекулярной динамики (МД). МД представляет собой численное интегрирование уравнений классической ньютоновской механики, описывающих движение отдельных атомов в твердом теле или жидкости, с использованием межчастичного потенциала взаимодействия, учитывающего свойства исследуемого вещества [21]. Для моделирования методом МД широко используются потенциалы, созданные по методу погруженного атома (ЕАМ потенциалы), учитывающие не только взаимодействие между самими атомами, но и взаимодействие между атомами и электронным газом, в результате чего межатомные взаимодействия становятся многочастичными [22]. Следует отметить значительный прогресс в развитии машинно-обученных потенциалов (MLIP потенциалы) [23–26], которые значительно превосходят ЕАМ потенциалы по точности, но уступают по быстродействию как минимум на порядок [27].

В МД моделировании, из-за ограниченной мощности вычислительной техники, рассматриваются малые объемы вещества. Как известно, отдельные дислокации создают дальнодействующие поля упругих искажений решетки и возникает проблема устранения взаимодействия рассматриваемой дислокации с такими полями, созданными другими дислокациями [28–32]. Целью настоящей работы было проведение исследования движения дислокаций в монокристалле алюминия с использованием периодических граничных условий, позволяющих, при правильном выборе размеров расчетной ячейки, полностью обнулить силы взаимодействий между дислокациями. Моделирование проводилось при разных значениях сдвигающего напряжения и температуры. Из-за упомянутой выше ограниченности компьютерных ресурсов удалось рассмотреть лишь случай надбарьерного скольжения дислокаций при сдвиговых напряжениях заметно выше напряжения течения алюминия, которое составляет 45–55 МПа в зависимости от структурного состояния. Исследованный температурный интервал от 50 до 700 К охватывает области криогенной и горячей деформации (температура плавления алюминия — 934 К). Электропластическая деформация обычно происходит без существенного разогрева металла в среднем, но в окрестности дислокаций материал разогревается сильнее, поэтому моделирование дислокаций при повышенных температурах также представляет интерес.

2. Модель

Для моделирования методом МД использовали программу LAMMPS, а для визуализации результатов расчетов программу OVITO. Для изучения динамики краевых дислокаций в алюминии построили расчетную ячейку ГЦК кристалла с координатными осями ориентированными соответственно основной системе скольжения [110] (111), характерной для металлов с ГЦК решеткой.

В настоящее время для изучения движения дислокаций в алюминии используются модели с различными граничными условиями [11,19,21,33–36]. В отличие от многих из существующих работ, где периодические граничные условия задавались по одной или двум осям [19,21], в нашей модели задавались периодические граничные условия по трем осям (x , y , z) для того, чтобы смоделировать движение пары краевых дислокаций противоположного знака. При выборе размера элементарной ячейки учитывали, что для обеспечения минимального взаимодействия между верхней и нижней дислокациями с противоположными знаками высота элементарной ячейки должна быть не менее чем втрое больше ее длины [37]. Здесь используется тот факт, что поля напряжений от цепочки равноудаленных дислокаций убывают экспоненциально быстро с расстоянием. Таким образом, размеры выбранной расчетной ячейки составили $171.4 \times 24.7 \times 517.8 \text{ \AA}$. На рис. 1, *a* представлена расчетная ячейка и направления осей. На рис. 1, *b–d* показаны колебания частичных дислокаций при различных температурах. Видно, что размер расчетной ячейки вдоль оси x достаточный, чтобы вместить несколько кинков на линии дислокации, которые хорошо видны при повышенных температурах.

Длина вектора Бюргерса для полной дислокации рассчитывается по формуле

$$|\mathbf{b}| = \frac{a}{2} |\langle 110 \rangle| = \frac{a}{\sqrt{2}}, \quad (1)$$

где $a = 4.04 \text{ \AA}$ — равновесный параметр решетки. Соответственно, подставляя в (1), получим $|\mathbf{b}| = 2.8567 \text{ \AA}$.

Для молекулярно-динамического моделирования использовали потенциал межчастичного взаимодействия, представленный в работе [38]. Моделирование проводилось при температурах $T = 50, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 700 \text{ K}$ и деформациях сдвига

$$\varepsilon_{xz} = \frac{n|\mathbf{b}|}{L}, \quad (2)$$

где n — натуральное число, L — высота элементарной ячейки. Тогда соответствующее сдвигающее напряжение равно

$$\sigma_{xz} = G \varepsilon_{xz}, \quad (3)$$

где $G = 25.5 \text{ GPa}$ — модуль сдвига алюминия [39]. Для $L = 517.8 \text{ \AA}$ рассматривались значения $n = 1, 2$ и 4 , кроме того, для ячейки удвоенной высоты, $L = 1035.6 \text{ \AA}$,

рассматривался случай $n = 1$. Таким образом, были рассмотрены деформации сдвига $\varepsilon_{xz} = 0.00275, 0.0055, 0.011$ и 0.022 , которым соответствовали напряжения сдвига $\sigma_{xz} = 70, 140, 280$ и 561 МПа. Заметим, что данные значения лежат выше напряжения течения чистого алюминия, для которого, в зависимости от размера зерна и степени чистоты, приводятся значения $\sigma_y = 30-55$ МПа; поэтому движение дислокаций в проведенных расчетах является надбарьерным.

Моделирование состояло из следующих этапов:

1. Создание идеальной кристаллической решетки ГЦК алюминия заданных размеров и кристаллографической ориентации с периодическими граничными условиями в трех измерениях.

2. Вырезание двух соседних атомных плоскостей (110) общей толщины $|b|$ и высоты $L/2$ с последующей минимизацией энергии, приводящей к склонению краев разреза и формированию пары расщепленных краевых дислокаций разного знака. Минимизация проводилась в ансамбле NVE в течение 5 ps.

3. Выдержка в течение 1 ps в ансамбле NVE для релаксации внутренних напряжений и 10 ps в ансамбле NPT при температуре последующего сдвига с целью перевода системы в равновесное состояние.

4. Приложение однородной сдвиговой деформации ε_{xz} .

5. Молекулярно-динамический расчет в течение 10 ps после приложения сдвига с регистрацией движения дислокаций.

Отметим важность этапа 2, на котором происходит расщепление полной дислокации, которая менее выгодна энергетически для данной ГЦК решетки, на две частичные краевые дислокации согласно выражению:

$$\frac{1}{2} a[110] = \frac{1}{6} a[21\bar{1}] + \frac{1}{6} a[12\bar{1}]. \quad (4)$$

Пара расщепленных дислокаций, возникших в результате релаксации кристаллита, может рассматриваться как дислокационная петля, поэтому верхняя и нижняя дислокации на рис. 1, *a* имеют противоположный топологический заряд, и при приложении положительного сдвигающего напряжения σ_{xz} они будут скользить вдоль оси x в противоположных направлениях.

Между частичными дислокациями образуется дефект упаковки. Расщепление полной дислокации устойчиво при минимуме энергии системы из двух частичных дислокаций и связывающего их дефекта упаковки. При этом напряжение дефекта упаковки стремится сжать частичные дислокации вместе, преодолевая силу их отталкивания. Следовательно, ширина области расщепления частичных дислокаций определяется энергией дефекта упаковки: чем меньше энергия дефекта упаковки, тем больше расстояние между частичными дислокациями [40].

Скорость дислокаций определялась как сумма расстояний, пройденных двумя частичными дислокациями за некоторый промежуток времени, поделенная на это время. Для более медленных дислокаций выбралась более длительный промежуток времени, чтобы пройденное

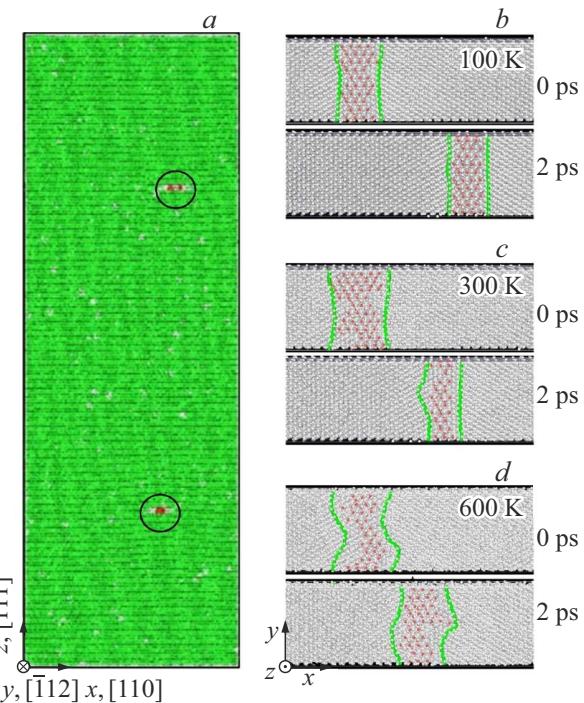


Рис. 1. (a) Расчетная ячейка и направления координатных осей. Две расщепленные краевые дислокации обведены кружками. (b-d) Движение дислокаций в плоскости скольжения при сдвигающем напряжении 140 МПа в моменты времени 0 и 2 ps при температуре (b) 100 К, (c) 300 К, и (d) 600 К. Линии частичных дислокаций показаны зеленым, атомы с ГПУ координацией красным, они располагаются на дефектах упаковки.

ими расстояние можно было зарегистрировать с достаточной точностью. Для сдвигающих напряжений $140, 280$ и 561 МПа при температурах $50, 100$ и 200 К время расчета составляло 2 ps; при температурах 300 и 400 К — 3 ps, при температурах 500 и 600 К — 4 ps, и при температуре 700 К — 5 ps. Для решетки с удвоенной высотой при сдвигающем напряжении 70 МПа время расчетов для всех случаев составило 4 ps, так как при данном значении напряжения температура слабо влияла на скорость дислокаций.

Для изучения колебаний частичных дислокаций за счет термофлуктуаций без воздействия сдвига расчеты проводились для температур $100, 300$ и 600 К.

Моделирование для определения энергии дефекта упаковки (ЭДУ) состояло из следующих пунктов:

1. Создание идеальной кристаллической решетки ГЦК алюминия размерами $171.4 \times 24.7 \times 517.8$ Å.

2. Введение в систему трех параллельных дефектов упаковки на расстоянии $5|b|$ друг от друга путем смещения соответствующих атомных блоков на $|b|/\sqrt{3}$ вдоль оси y , что эквивалентно смещению на $a/\sqrt{3}$ в направлении $\{112\}$ [41,42].

3. Минимизация энергии в ансамбле NVE в течение 5 ps и выдержка при температуре 10 К в течение 10 ps в ансамбле NPT.

4. Вычисление ЭДУ.

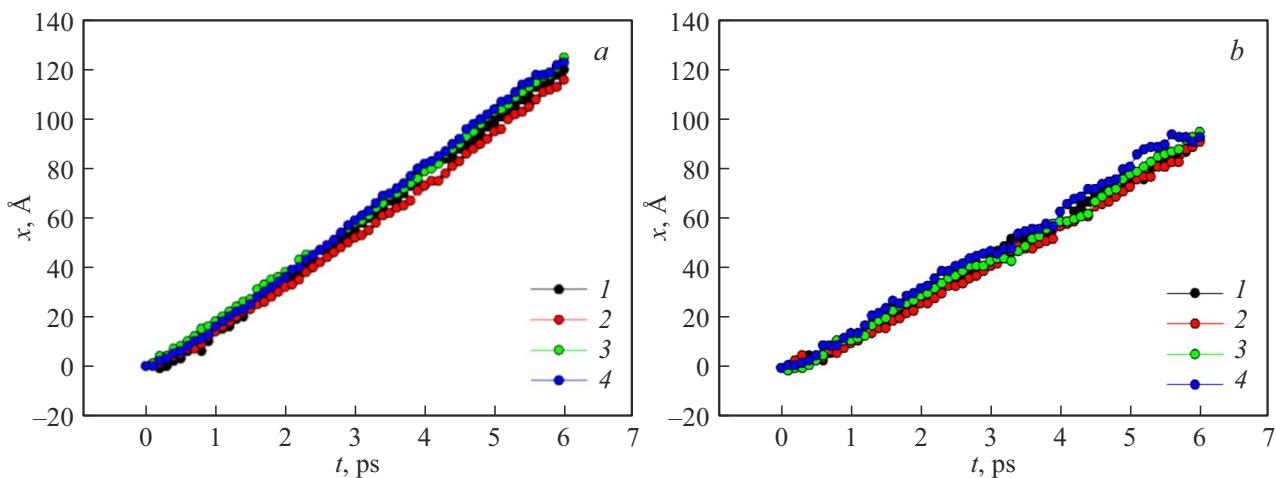


Рис. 2. Зависимость скорости частичных дислокаций от времени при сдвигающем напряжении 280 МПа при температуре: *a* — 100, *b* — 500 К, где 1, 2 — верхняя левая и правая частичные дислокации, соответственно, 3, 4 — нижняя левая и правая частичные дислокации, соответственно.

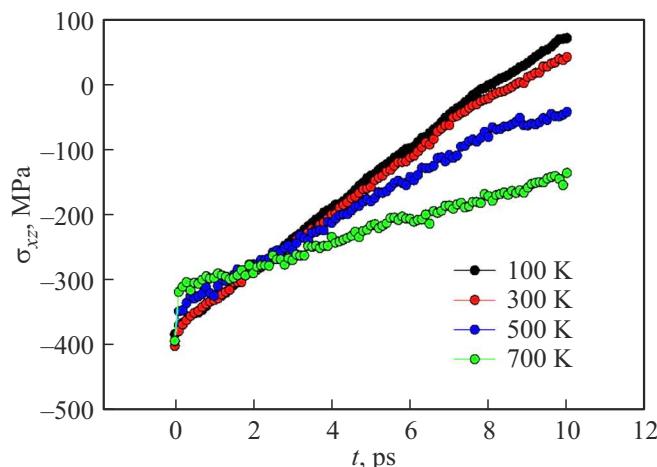


Рис. 3. Зависимость сдвигающего напряжения σ_{xz} от времени при деформации сдвига $\varepsilon_{xz} = 0.0055$.

3. Результаты и обсуждения

3.1. Движение дислокаций

На рис. 2 представлены графики зависимости расстояния, пройденного верхними и нижними частичными дислокациями, от времени при сдвигающем напряжении 280 МПа и температурах (*a*) 100 и (*b*) 500 К. Видно, что на рассматриваемом временном отрезке дислокации движутся примерно с одинаковой скоростью причем, скорость движения уменьшается с увеличением температуры. Скорость дислокаций определялась на участке линейной зависимости $x(t)$.

На рис. 3 представлены зависимости напряжения σ_{xz} а на рис. 4 — других компонент тензора напряжений от времени при сдвигающей деформации $\varepsilon_{xz} = 0.0055$ и при разных температурах. Из рис. 3 видно, что напря-

жение σ_{xz} с течением времени стремится к 0. При низких температурах наблюдается осциллирующее, а при высоких релаксационное приближение сдвигающего напряжения к нулю, что связано с повышением вязкости материала с ростом температуры. Как видно из рис. 4, напряжения σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy} , σ_{yz} при всех температурах остаются небольшими в сравнении с напряжением σ_{xz} .

На рис. 5 представлены графики зависимости скоростей дислокаций от температуры при различных значениях деформации сдвига, а на рис. 6 — графики зависимости напряжения σ_{xz} от температуры в том временному интервале, в котором считалась скорость дислокаций.

Из рис. 5 и рис. 6 видно, что с увеличением температуры скорость движения дислокаций и напряжения σ_{xz} уменьшаются. При этом сдвигающие напряжения σ_{xz} с ростом температуры значительно уменьшаются при деформации сдвига $\varepsilon_{xz} = 0.022$, менее значительно при $\varepsilon_{xz} = 0.011$ и практически не изменяются при $\varepsilon_{xz} = 0.0055$ и $\varepsilon_{xz} = 0.00275$. Это связано с динамическим преодолением дислокациями потенциала Пайерлса—Набаро за счет воздействия высоких сдвиговых напряжений (превосходящих предел текучести данного материала, равный 55 МПа и 45 МПа в исходном и отожженном состояниях, соответственно [43]) без значительного вклада термофлуктуации. Торможение дислокаций при повышении температуры обусловлено повышением вязкости среды, в которой движется дислокация.

Предполагается, что при более низких сдвигающих напряжениях (ниже предела текучести) мы попадем в область термофлуктуационной подвижности, где скорость движения дислокаций будет возрастать с ростом температуры. При этом дислокации будут двигаться значительно медленнее и их скорость необходимо будет измерять на значительно более длительных временных интервалах.

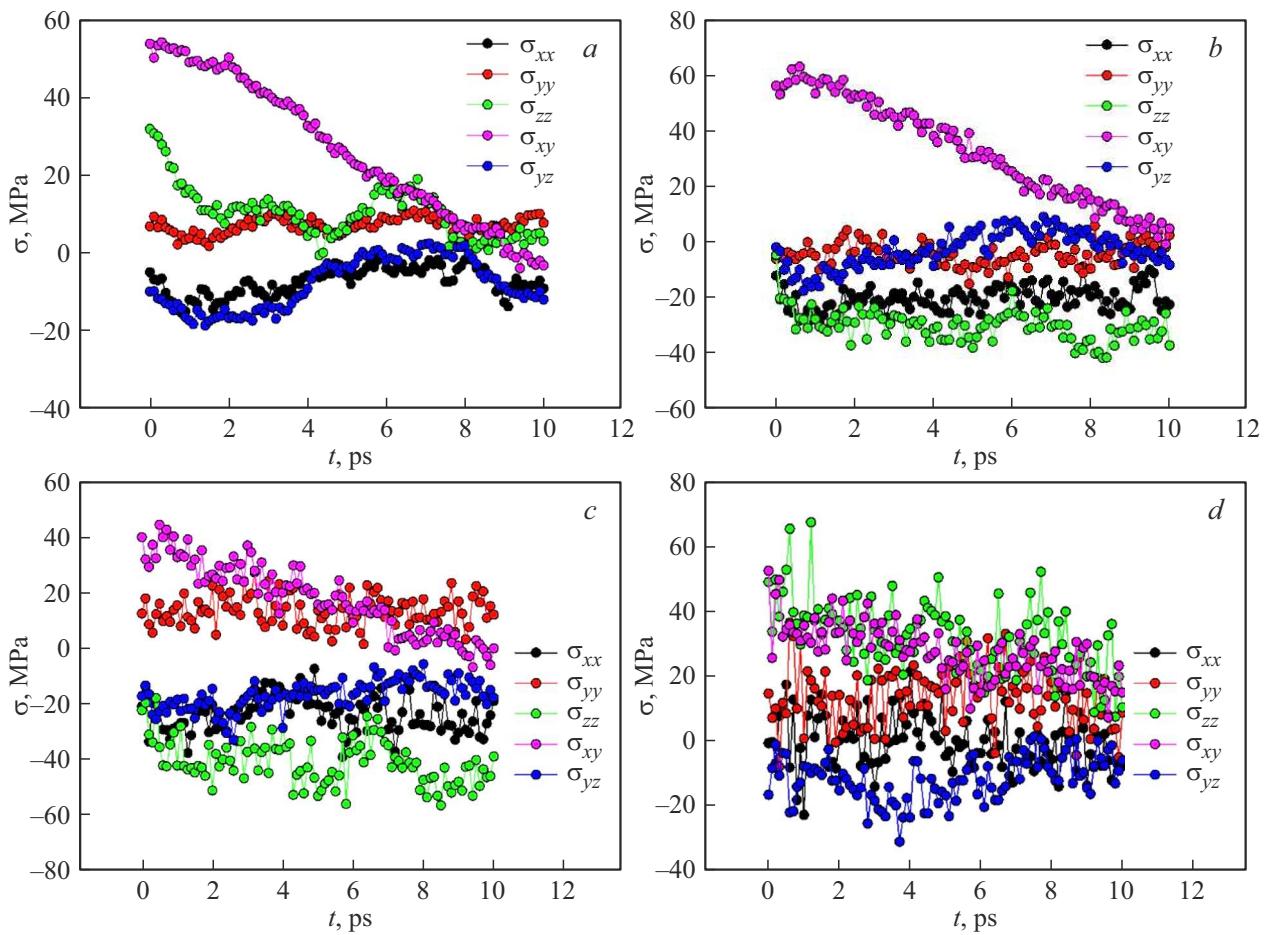


Рис. 4. Зависимость различных компонент тензора напряжений (кроме σ_{xz}) от времени при деформации сдвига $\varepsilon_{xz} = 0.0055$ и температуре: *a* — 100, *b* — 300, *c* — 500, *d* — 700 K.

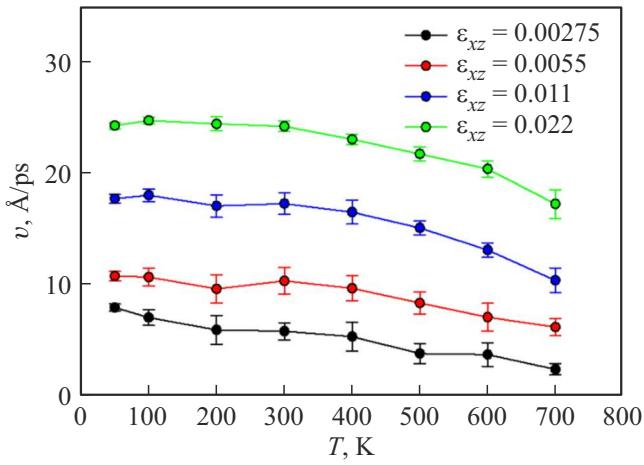


Рис. 5. Зависимости скорости дислокаций от температуры при различных деформациях сдвига.

3.2. Колебания дислокаций

На рис. 7 представлены изображения частичных дислокаций в разрезе на виде сверху при нулевом сдвигаю-

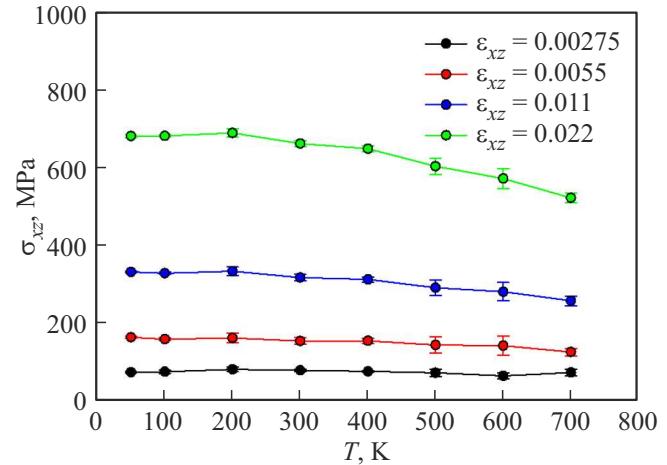


Рис. 6. Зависимости сдвигающих напряжений σ_{xz} от температуры в интервале, где считалась скорость дислокаций.

щем напряжении и при температурах 100, 300 и 600 K. Снимки представлены с интервалом 0.4 ps. Во всех случаях период колебаний линии дислокаций составляет

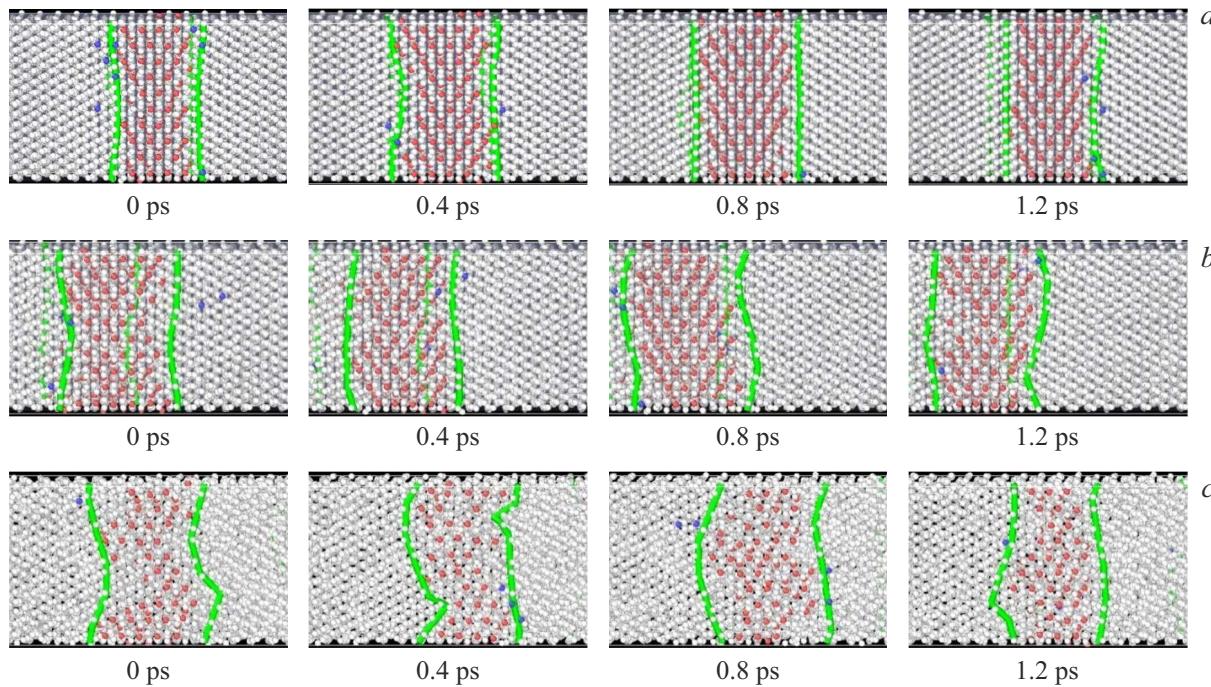


Рис. 7. Изображение частичных дислокаций (зеленые линии) в разрезе на виде сверху при нулевом сдвигающем напряжении при температурах: (a) 100, (b) 300, (c) 600 К. Дислокации для каждой температуры показаны в моменты времени с интервалом 0.4 ps.

величину порядка 0.1 ps. Видно, что амплитуда колебаний дислокаций с увеличением температуры возрастает за счет термофлуктуации атомов.

3.3. Энергия дефекта упаковки

Для расчета ЭДУ в расчетную ячейку с периодическими граничными условиями вводилось три дефекта упаковки на расстоянии $5|\mathbf{b}|$ друг от друга, см. рис. 8. Расчет проводился при температуре 10 К по формуле:

$$E_{\text{SF}} = \frac{E_2 - E_1}{3S}, \quad (5)$$

где E_1 — потенциальная энергия идеальной структуры после минимизации, E_2 — энергия дефектной структуры после минимизации, S — площадь одного дефекта упаковки. Используя численные значения $E_1 = -447380.34$ еВ, $E_2 = -447275.41$ еВ, $S = 4233.58 \text{ \AA}^2$ находим

$$E_{\text{SF}} = 0.0082 \text{ еВ/}\text{\AA}^2 = 131 \text{ мJ/m}^2. \quad (6)$$

Согласно литературным данным [44] значение ЭДУ алюминия находится в интервале 80–150 мJ/m² и полученное расчетное значение попадает в данный интервал. Совпадение ЭДУ с экспериментальными данными говорит об обоснованности выбора используемого межатомного потенциала.

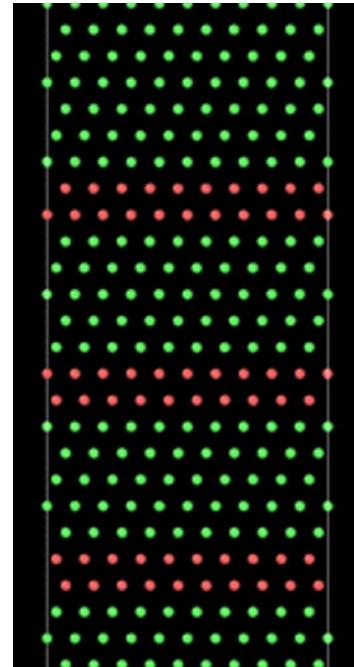


Рис. 8. К расчету энергии дефекта упаковки. Атомы с ГЦК (ГПУ) координацией показаны зеленым (красным) цветом.

4. Заключение

Проведено молекулярно-динамическое моделирование движения краевых дислокаций в ГЦК решетке монокри-

сталла алюминия при различных значениях сдвигающих напряжений и температуры. Использовались периодические граничные условия с парой краевых дислокаций противоположного знака в расчетной ячейке, в то время как ранее во многих работах рассматривалась одна дислокация при использовании жестких граничных условий по некоторым направлениям [28,29,31]. В настоящей работе отсутствие взаимодействия между парой дислокаций в расчетной ячейке достигнуто за счет выбора соотношения размеров ячейки на основании того факта, что упругие поля, созданные цепочкой равноудаленных дислокаций, убывают экспоненциально быстро с расстоянием от цепочки.

Полная дислокация расщеплялась на 2 частичные дислокации, между которыми образовывался дефект упаковки с ГПУ структурой, что характерно для ГЦК металлов. Рассчитана энергия дефекта упаковки. Полученное значение $E_{SF} = 131 \text{ mJ/m}^2$ лежит в диапазоне экспериментальных данных $80-150 \text{ mJ/m}^2$ [44], что свидетельствует о хорошем качестве используемого межатомного потенциала.

В исследованном диапазоне сдвигающих напряжений $70-561 \text{ MPa}$ (выше напряжения течения, равного $30-55 \text{ MPa}$ [43]) происходит динамическое преодоление потенциала Пайерлса–Набарро дислокациями, в результате чего, повышение вязкого трения с ростом температуры определило снижение скорости дислокаций при увеличении температуры, см. рис. 5.

При изучении процесса колебания линий частичных дислокаций при различных температурах без приложения сдвигающего напряжения установлено, что характерным периодом колебаний является 0.1 ps . Типичный импульс тока, применяемый в опытах при изучении ЭПЭ, имеет длительность равную 10^{-4} s , то есть за время прохождения одного импульса дислокация успевает совершить 10^9 колебаний.

Покажем, что представленные результаты полезны при обсуждении природы ЭПЭ. Известно, что плотность дислокаций после отжига составляет $\rho \sim 10^{12} \text{ m}^{-2}$ и достигает $\rho \sim 10^{16} \text{ m}^{-2}$ в сильно деформированных металлах [45,46]. Если рассмотреть массив равноудаленных параллельных прямолинейных дислокаций с плотностью дислокаций ρ , то расстояние между ближайшими дислокациями в нем составит $D \sim 1/\sqrt{\rho}$. Получаем, что $D \sim 10^4 \text{ \AA}$ в отожженном состоянии и $D \sim 10^2 \text{ \AA}$ в деформированном металле. Отметим, что в наших расчетах использовалась ячейка с размерами $171.4 \times 24.7 \times 517.8 \text{ \AA}$, в которой располагаются две дислокации. Таким образом, моделировалась плотность дислокаций, отвечающая сильно деформированному состоянию.

Джоулево тепло, выделившееся на дислокации, распространяется далее за счет теплопроводности в бездефектные области кристалла. Решая задачу теплопроводности, можно установить, как со временем меняется температура ядра дислокации, учитывая скорость притока джоулевы тепла и скорость оттока тепла за счет

теплопроводности. Зная температуру дислокации и зависимость скорости дислокации от температуры, можно построить кинетическую теорию электропластической деформации. Данная теория должна также учитывать изменение плотности дислокаций в ходе электропластической деформации.

Представленные результаты могут быть полезны при обсуждении экспериментальных работ по электропластичности алюминия и алюминиевых сплавов, которые подвергались электростимулированной формовке [47], кручению [48], циклическому кручению [49] и растяжению [50]. Интересны работы по влиянию тока на коэффициент трения алюминия [51], сжатия титана [52], а также вибрации металла, вызванные импульсами тока.

В последующих работах планируется определить зависимость скорости дислокаций от температуры при низких значениях сдвигающих напряжений, когда преодоление потенциала Пайерлса–Набарро происходит термофлуктуационно и ожидается повышение скорости дислокации с температурой. Такие вычисления потребуют значительно больших ресурсов, поскольку время расчетов существенно возрастет.

Благодарности

Исследование проведено сотрудниками кафедры „Оборудование и технологии сварки и контроля“ и Центра реверсивного инжиниринга Уфимского государственного нефтяного технического университета. Исследование выполнено в рамках программы Министерства науки и высшего образования Российской Федерации „ПРИОРИТЕТ 2030“. Работа Бабичевой Р.И. была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Уфимского университета науки и технологий (№ 075-03-2024-123/1) молодежной исследовательской лаборатории „Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях“.

Финансирование работы

Исследование проведено сотрудниками кафедры „Оборудование и технологии сварки и контроля“ и Центра реверсивного инжиниринга Уфимского государственного нефтяного технического университета. Исследование выполнено в рамках программы Министерства науки и высшего образования Российской Федерации „ПРИОРИТЕТ 2030“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] R.Z. Valiev, N.A. Enikeev, M.Yu. Murashkin, V.U. Kazykhanov, X. Sauvage. Scripta Mater. **63**, 9, 949 (2010).

- [2] Y. Zhang, S. Jin, P.W. Trimby, X. Liao, M.Y. Murashkin, R.Z. Valiev, J. Liu, J.M. Cairney, S.P. Ringer, G. Sha. *Acta Mater.* **162**, 19 (2019).
- [3] A.P. Sutton, T.N. Todorov. *Phys. Rev. Mater.* **5**, 11, 113605 (2021).
- [4] X. Li, Q. Zhu, Y. Hong, H. Zheng, J. Wang, J. Wang, Z. Zhang. *Nat. Commun.* **13**, 1, 6503 (2022).
- [5] M.-J. Kim, T.-A. Bui-Thi, S.-G. Kang, S.-T. Hong, H. Nam Han. *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **32**, 101190 (2024).
- [6] О.А. Троицкий. Письма в ЖЭТФ **10**, 18 (1969) [O.A. Troitskii. *JETP Letters* **10**, 11 (1969)].
- [7] L. Qian, L. Zhan, B. Zhou, X. Zhang, S. Liu, Z. Lv. *Mater. Sci. Eng. A* **812**, 141144 (2021).
- [8] C. Li, Z. Xu, L. Peng, X. Lai. *Int. J. Mech. Sci.* **218**, 107081 (2022).
- [9] J. Lozares, N. Otegi, J. Trinidad, M. Barrenetxea, I. Aizpuru, P. Jimbert, J. Mendiguren. *Mech. Mater.* **198**, 105136 (2024).
- [10] K.V. Kukudzhanov, G.R. Khalikova, E.A. Korznikova, A.V. Chentsov, S.V. Dmitriev. *Mech. Solids* **59**, 5, 3223 (2024).
- [11] X. Ren, Z. Wang. *Comput. Mater. Sci.* **253**, 113818 (2025).
- [12] В.И. Дубинко, В.Ф. Клепиков. *Изв. РАН. сер. физ.* **72**, 9, 1257 (2008). [V.I. Dubinko, V.F. Klepikov. *Bull. Russ. Acad. Sci. Phys.* **72**, 9, 1188 (2008).]
- [13] X. Li, A.M. Minor. *Microsc. Microanal.* **28**, S1, 1938 (2022).
- [14] V.V. Stolyarov. *J. Mach. Manuf. Reliab.* **52**, 4, 313 (2023).
- [15] S.V. Dmitriev, A.Y. Morkina, D.V. Tarov, G.R. Khalikova, D.U. Abdullina, P.S. Tatarinov, V.P. Tatarinov, A.S. Semenov, O.B. Naimark, A.V. Khokhlov, V.V. Stolyarov. *Spec. Mech. Eng. Oper. Res.* **1**, 27 (2024).
- [16] V. Stolyarov, A. Misochenko. *Materials* **16**, 18, 6270 (2023).
- [17] В.Л. Инденбом, А.Н. Орлов. В сб.: „Динамика дислокаций“, Х., Изд. ФТИНТ АН УССР (1968). С. 3.
- [18] В.И. Альшиц, В.Л. Инденбом. *УФН* **115**, 1, 3 (1975).
- [19] А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин. *ФТТ* **55**, 5, 931 (2013).
- [20] Л.Е. Попов, М.И. Слободской, С.Н. Колупаева. *Известия вузов. Физика* **49**, 1, 57 (2006).
- [21] А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. *Физико-химическая кинетика в газовой динамике* **7**, 27 (2008).
- [22] M.H. Müser, S.V. Sukhomlinov, L. Pastewka. *Adv. Phys. X*, **8**, 2093129 (2023).
- [23] Y.-W. Zhang, V. Sorkin, Z.H. Aitken, A. Politano, J. Behler, A.P. Thompson, T.W. Ko, S.P. Ong, O. Chalykh, D. Korogod, E. Podryabinkin, A. Shapeev, J. Li, Y. Mishin, Z. Pei, X. Liu, J. Kim, Y. Park, S. Hwang, S. Han, K. Sheriff, Y. Cao, R. Freitas. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **33**, 2, 023301 (2025).
- [24] N. Rybin, I.S. Novikov, A. Shapeev. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **27**, 10, 5141 (2025).
- [25] A.A. Kistanov, I.V. Kosarev, S.A. Shcherbinin, A.V. Shapeev, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev. *Mater. Today Commun.* **42**, 111437 (2025).
- [26] D.S. Ryabov, I.V. Kosarev, D. Xiong, A.A. Kudreyko, S.V. Dmitriev. *Comput. Mater. Contin.* **82**, 3, 3797 (2025).
- [27] I.V. Kosarev, S.A. Shcherbinin, A.A. Kistanov, R.I. Babicheva, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev. *Comput. Mater. Sci.* **231**, 112597 (2024).
- [28] A.V. Yanilkin, V.S. Krasnikov, A.Yu. Kuksin, A.E. Mayer. *Int. J. Plast.* **55**, 94 (2014).
- [29] А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин. *ФТТ* **55**, 5, 931 (2013). [A.Y. Kuksin, A.V. Yanilkin. *Phys. Solid State* **55**, 5, 1010 (2013)].
- [30] А.Ю. Куксин, А.В. Янилкин. *Изв. РАН. Механика твердого тела* **1**, 54 (2015). [A.Y. Kuksin, A.V. Yanilkin. *Mech. Solids* **50**, 1, 44 (2015)].
- [31] А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин. *Доклады АН. Физика* **420**, 4, 467 (2008). [A.Yu. Kuksin, V.V. Stegaïlov, A.V. Yanilkin. *Dokl. Phys.* **53**, 6, 287 (2008)].
- [32] Г.Э. Норман, А.В. Янилкин. *ФТТ* **53**, 8, 1536 (2011). [G.E. Norman, A.V. Yanilkin. *Phys. Solid State* **53**, 8, 1614 (2011)].
- [33] Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **11**, 427 (2003).
- [34] G.P. Purja Pun, Y. Mishin. *Acta Mater.* **57**, 18, 5531 (2009).
- [35] K.D. Manukhina, V.S. Krasnikov, D.S. Voronin, A.E. Mayer. *Comput. Mater. Sci.* **244**, 113269 (2024).
- [36] V.S. Krasnikov, A.E. Mayer. *Int. J. Plast.* **119**, 21 (2019).
- [37] A. Kazakov, R.I. Babicheva, A. Zinovev, D. Terentyev, K. Zhou, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev. *Tungsten* **6**, 3, 633 (2024).
- [38] X.-Y. Liu, F. Ercolelli, J.B. Adams. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **12**, 665 (2004).
- [39] Н.М. Беляев. *Сопротивление материалов.* Наука, М. (1965), 856 с.
- [40] О.П. Максимкин. *Дефекты упаковки, их энергия и влияние на свойства облученных металлов и сплавов.* Алматы (2010), 70 с.
- [41] L. Zhang, L. Cheng, T. Kiet, X. Zhao, L.-Q. Pei, M. Guillaume. *Chin. Phys. B* **24**, 8, 088106 (2015).
- [42] J.A. Zimmerman, H. Gao, F.F. Abraham. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **8**, 2, 103. (2000).
- [43] A.Y. Morkina, D.V. Tarov, G.R. Khalikova, A.S. Semenov, P.S. Tatarinov, I.A. Yakushev, S.V. Dmitriev. *Facta Univ., Ser. Mech. Eng.* **22**, 4, 615 (2024).
- [44] B. Hammer, K. Jacobsen, V. Milman, M.C. Payne. *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 10453 (1999).
- [45] M.J. Zehetbauer. In: *Investigations and Applications of Serve Plastic Deformation /* Edited by T.C. Lowe, R.Z. Valiev. Springer Netherlands, Dordrecht. (2000). P. 81–91.
- [46] G. Kapoor, T. Kvackaj, A. Heczel, J. Bidulski, R. Kocisko, Z. Fogarassy, D. Simcak, J. Gubicza. *Materials* **13**, 10, 2241 (2020).
- [47] S. Dou, Z. Liu, Z. Li, H. Shi, K. Zhou, J. Xia. *Metals*, **15**, 2, 117 (2025).
- [48] D. Dobras, Z. Zimniak, M. Dziubek. *Mater. Res. Proc.* **41**, 1408 (2024).
- [49] D. Dobras, K. Jaśkiewicz, M. Zwierzchowski. *Mater. Res. Proc.* **54**, 1005 (2025).
- [50] A.Y. Morkina, D.V. Tarov, I.A. Yakushev, P.S. Tatarinov, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev. *Procedia Struct. Integr.* **65**, 158 (2024).
- [51] S. Dou, K. Zhou, H. Qian, H. Shi, J. Xia. *J. Tribol.* **147**, 4, 044201 (2025).
- [52] О.Е. Корольков, А.А. Мисоченко, В.В. Столяров. *Заводская лаборатория. Диагностика материалов.* **90**, 12, 65 (2024). [O.E. Korolkov, A.A. Misochenko, V.V. Stolyarov. *Ind. Lab. Diagn. Mater.* **90**, 12, 65 (2024)].
- [53] O.B. Skvortsov, V.I. Stashenko. *Inorganic Materials: Applied Research* **16**, 1, 42 (2025).

Редактор Ю.Э. Китаев