

# МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

*к.ф.-м.н, с. н. с. И.А. Брюханов,*

лаборатория наномеханики,  
НИИ механики МГУ, Москва

Данный доклад посвящен исследованию дислокационной пластичности металлов и сплавов. В нем проводится обзор методов атомистического моделирования и дискретных дислокаций для описания свойств одиночных дислокаций и динамики их коллективного движения. Обсуждаются недавние результаты по моделированию деформационного упрочнения кристаллов в рамках многомасштабного подхода [1- 3].

В докладе представлены результаты исследований, недавно проведенных автором. Методом молекулярной динамики рассчитана и аппроксимирована кинетика одиночной краевой дислокации в сплаве медь-никель в широком диапазоне температур и концентраций никеля (Ni) [4]. Показано, что существует два разных режима влияния атомов Ni на скорость движения краевой дислокации: 1) при внешнем напряжении меньше критического атомы Ni действуют как барьеры и замедляют движение дислокации; 2) с ростом напряжения движение дислокации переходит в режим «насыщения» и ее скорость приближается к анизотропной скорости звука в материале. В этом режиме, скорость движения дислокации растет с увеличением концентрации атомов Ni, что обусловлено ростом скорости звука в сплаве медь-никель.

Рассчитанные зависимости скорости краевой дислокации от сдвигового напряжения и температуры были использованы при анализе релаксации сдвиговых напряжений методом дискретных краевых дислокаций [5]. Установлено, что начальное напряжение, при котором наблюдается ускорение релаксации напряжения “примесными” атомами Ni, повышается с ростом плотности дислокаций.

Методом молекулярной динамики изучено импульсное нагружение кристаллов меди вдоль кристаллографического направления [111], в которых имеется сформированная дислокационная структура [6]. Проведено сравнение структуры ударной волны, механизмов пластичности и разрушения со случаем бездефектного кристалла меди, а также с экспериментом для отожженных поликристаллических медных образцов [7]. Обнаружено, что за фронтом волны сегменты дислокаций с положительной ориентацией движутся в направлении ударной волны, в то время как отрицательно ориентированные сегменты распространяются в противоположном направлении. Показано, что затухание упругого предвестника усиливается с ростом плотности дислокаций и скорости удара. Установлено, что наличие дислокаций в образце приводит к вязкому разрушению образца, замедляя образования и развитие полостей по сравнению с бездефектным кристаллом, в котором реализуется откол одной части материала от другой. Обсуждаются результаты моделирования импульсного нагружения кристаллов меди вдоль других кристаллических ориентаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 19-71-00080.

Литература:

[1] Zepeda-Ruiz, L. A., Stukowski A., et. al., 2021. Atomistic insights into metal hardening. *Nature materials*, 20(3), 315-320.

[2] Zepeda-Ruiz L. A., Stukowski A., et al, 2017. Probing the limits of metal plasticity with molecular dynamics simulations, *Nature*, 550, 7677, 495.

[3] Sills, R. B., Bertin, N., Aghaei, A., Cai, W. 2018. Dislocation networks and the microstructural origin of strain hardening. *Physical review letters*, 121(8), 085501.

- [4] Bryukhanov I.A., 2020. Dynamics of edge dislocation in Cu–Ni solid solution alloys at atomic scale. *Int. J. Plast.*, 102834.
- [5] Bryukhanov I.A., Emelyanov V.A. 2022. Shear stress relaxation through the motion of edge dislocations in Cu–Ni solid solution alloys: a molecular dynamics and discrete dislocation study. *Comp. Mat. Sci.*, 201, 110885.
- [6] Bryukhanov I.A., 2022, Atomistic simulation of the shock wave in copper single crystals with preexisting dislocation network. *Int. J. Plast.*, 103171.
- [7] Zaretsky, E. B., Kanel, G. I. 2013. Response of copper to shock-wave loading at temperatures up to the melting point. *Journal of Applied Physics*, 114(8), 083511.