

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С НАНОВКЛЮЧЕНИЯМИ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОСКОРОСТНОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ

А.Ю. Куксин, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва  
Московский физико-технический институт, г.Долгопрудный*

### Аннотация

Компьютерное моделирование пластического деформирования алюминия методом молекулярной динамики показало возрастание сопротивления скольжению дислокаций в кристалле с увеличением температуры. Подтверждена фононная природа аномального возрастания динамического предела текучести, что наблюдалось в экспериментах с ударными волнами. Продемонстрировано возрастание энергоемкости процесса преодоления дислокациями наноразмерных препятствий с увеличением температуры в условиях высокоскоростного деформирования.

### MODELING OF THE EDGE DISLOCATION DYNAMICS AND INTERACTION WITH NANOPRECIPIATES AT HIGH STRAIN RATES

The computer simulation of the plastic deformation of aluminum via the molecular-dynamics method showed the increase of the resistance to the dislocation sliding in a crystal with raise of temperature. It was proved that the anomalous growth of the dynamical yield strength observed in experiments has the phonon-based underlying mechanisms. The increase of the energy of the depinning process during dislocation-nanoprecipitate interaction at higher temperatures at high strain rates is shown.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в мире широко и плодотворно применяются методы атомистического моделирования, которые позволяют прояснить механизмы высокоскоростной деформации, выявить элементарные акты разрушения, фазовых переходов и оценить роль структурных несовершенств в этих процессах. В частности, метод молекулярной динамики, который использовался в данной работе, представляет собой численное интегрирование уравнений классической механики, описывающих движение отдельных атомов в твердом теле или жидкости, с использованием межчастичного потенциала взаимодействия, учитывающего индивидуальные свойства исследуемого вещества. Для моделирования металлов и сплавов развиты и успешно используются потенциалы, построенные на основе метода погруженного атома. В данной работе методом молекулярной динамики рассмотрены микроскопические механизмы динамики краевых дислокаций и определены их кинетические характеристики при различных температурах и скоростях деформирования, в том числе при взаимодействии с наноразмерными включениями различной природы.

## 2. РАСЧЕТ ЗАВИСИМОСТИ СКОРОСТИ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИИ ОТ ПРИЛОЖЕННОГО СДВИГОВОГО НАПРЯЖЕНИЯ

### 2.1. Модель

На сегодняшний момент предложено три варианта молекулярно-динамических моделей, с разными граничными условиями, позволяющих изучать подвижность единичных дислокаций [1]. В наших расчетах за основу был взят вариант модели с набором дислока-

ций, периодически повторяющихся в пространстве, предложенный в работе [2]. Периодические граничные условия применяют в этом случае не только вдоль оси дислокации, но также и вдоль направления вектора Бюргерса дислокации  $b$ .

На рис.1 представлена схема расчетной ячейки, соответствующая этой модели. Направления осей ориентированы соответственно одной из систем скольжения, типичной для ГЦК решетки, какой обладает алюминий, а именно  $[1-10](111)$ . Вектор Бюргерса полной краевой дислокации, обеспечивающей такое скольжение, будет  $b=[1-10]a/2$  (направление совпадает с осью  $x$ ). Скольжение дислокации происходит в плоскости  $xz$ , т.е.  $(111)$ . Линия краевой дислокации совпадает с осью  $z$ . Периодические граничные условия действуют вдоль осей  $x$  и  $z$ . Подвижные частицы расчетной ячейки составляют блок  $A$  (размер поперечного сечения  $L_b \times H$ ). Периодические образы частиц этого блока, которые попадают в радиус действия межчастичного потенциала, и участвуют тем самым в расчете сил, составляют области  $P$ . Для создания сдвиговых напряжений используются несколько крайних атомных слоев, каждый состоящих из частиц, неподвижных друг относительно друга. Положение трех атомных слоев у нижней границы ( $F$ ) фиксируется, в то время как слои у верхней границы ( $R$ ) двигаются вдоль оси  $x$  с постоянной заданной скоростью  $v_x$  (способ 1), либо под действием заданной внешней силы  $F_x$  (способ 2). Таким образом, в первом случае непосредственно контролируется деформация, во втором же сдвиговое напряжение. Напряжения в системе рассчитываются на основании теоремы вириала, применяемой к блоку  $A$ .

При молекулярно-динамическом моделировании использовался потенциал межчастичного взаимодей-

ствия [3] разработанный на основе метода погруженного атома (embedded atom method potential), для описания свойств алюминия. На первом этапе было проведено его сопоставление с двумя другими потенциалами, часто используемыми в современных расчетах [4] и [5]. Эмпирические константы в таких потенциалах подбираются с тем, чтобы воспроизводить, среди прочего, упругие модули материала, известные из экспериментов. На основе вышеописанной методики были определены модули сдвига в трех режимах деформирования: а) [100](010), б) [110](-110) и в) [1-10](111). Сопоставление их с данными, опубликованными для тех же потенциалов, показывает хорошее согласие.

Для создания дислокации используется следующая процедура:

- а) в идеальной кристаллической структуре удаляются две соседних атомных полуплоскости (1-10);
- б) при небольшом сжатии кристалла происходит сближение атомных плоскостей, находящихся по разные стороны от места выреза, координаты атомов по осям  $y$  и  $z$  при этом фиксируются (т.е. движение атомов происходит вдоль оси  $x$ );
- в) снятие ограничения на движение вдоль оси  $x$  для частиц блока  $A$ , «замораживание» частиц в блоках  $R$  и  $F$ , релаксация образовавшейся структуры методом минимизации потенциальной энергии;
- г) релаксация с выводом на заданную температуру и давление.

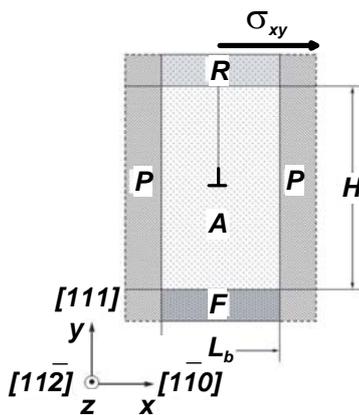


Рис. 1. Схема модели для расчета поведения дислокации в ГЦК кристалле под действием сдвига. Часть со свободными атомами  $A$ . Область с фиксированными атомами –  $F$ . Область атомов в виде абсолютно твердого тела  $R$ , которая движется в направлении оси  $x$  с заданной скоростью либо под действием заданной внешней силы. Области атомов, возникающих из-за периодических граничных условий  $P$  (толщина равна радиусу обрезания потенциала)

Отметим важность третьего этапа (в) описанной процедуры, поскольку на нем происходит процесс расщепление полной дислокации, энергетически менее выгодной для ГЦК решетки, на две частичные краевые дислокации:

$$\frac{a}{2}[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[1\bar{2}1] \quad (1)$$

Поскольку атомы в ядре дислокации, а также в промежутке между разбежавшимися частичными дислокациями, образуют дефекты в упаковке ГЦК решетки, то их можно успешно выделять на основании параметров, характеризующих ближайшее окружение частицы. Анализ движения дислокаций проводится на

основании расчета координационного числа  $K_i$  и (локального) параметра центральной симметрии для каждого атома  $CS_i$ . На рис. 2 представлены результаты подобного расчета: положение ядер двух частичных дислокаций на оси  $x$  в зависимости от времени.

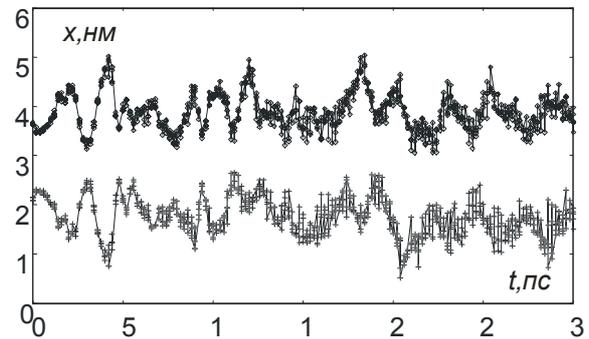


Рис. 2. Движение частичных дислокаций в плоскости (111) в недеформированном монокристалле. Точки указывают положение по оси  $x$  ядер двух частичных дислокаций, выделенных на основе параметра центральной симметрии  $CS$ . Разброс точек в один момент времени соответствует нескольким сечениям вдоль оси  $z$ , то есть, означает искривленные линии дислокации. Размер системы  $229 \times 70 \times 50$  Å, число частиц в системе около 50 тысяч. Показан процесс релаксации к значению температуры  $T = 600$  К из равновесия при 0 К. Потенциал межатомного взаимодействия [3]

## 2.2. Результаты

Расчеты статическими методами (минимизация потенциальной энергии системы) показывают, что равновесное расстояние между частичными дислокациями составляет 1.5 нм для двух рассмотренных потенциалов [4] и [5]. Такое значение близко к данным экспериментов и расчетов из первых принципов (значение варьируется от 0.3 до 4 нм, подробнее см. [6]). При использовании потенциала [5] равновесное расстояние оказывается существенно больше и сравнимо с размером ячейки. Равновесное расстояние между частичными дислокациями  $r_{eq}$  определяется равновесием двух сил: упругой отталкивающей силы  $\sim \mu b^2/r$  и силы притяжения, связанной с увеличением энергии ( $\gamma r$  на единицу длины) при увеличении размера дефектной области между дислокациями. Таким образом, равновесное расстояние между частичными дислокациями  $r_{eq} \sim \mu b^2/\gamma$  (см., например, [7]). Несмотря на то, что значение модуля сдвига для потенциала [31] меньше, расстояние между дислокациями оказывается для него больше. Это объясняется чрезвычайно низкой энергией образования дефектной структуры, которая не принималась во внимание при разработке этого потенциала. Поскольку данный параметр представляется важным при рассмотрении подвижности дислокаций и их взаимодействия с дефектами в ГЦК кристалле, в исследованиях используется потенциал [3] и потенциал для системы алюминий-медь на его основе.

При моделировании недеформированного монокристалла при конечной температуре хорошо видны колебания расстояния между частичными дислокациями около значения 1.5 нм в диапазоне 1 – 4 нм (рис. 2). Такое пульсирующее движение дислокаций наблюдалось при молекулярно-динамическом моделировании ГЦК кристаллов и получило название дыхания дислокаций [8]. Характер пульсаций несколько изменяется при повышении температуры с колебаний в проти-

вофазе на менее коррелированное движение. Частота изломов линии дислокации возрастает с температурой. С ростом температуры наблюдается также увеличение среднего расстояния между дислокациями от 1.5 нм (0 К) до 2 нм (700 К).

Подвижность дислокаций в зависимости от сдвигового напряжения удобно изучать, прикладывая внешнюю силу к блоку атомов  $R$ , в то время как блок  $F$  остается зафиксированным. Величина сдвигающей силы определяется значением заданного напряжения  $\sigma_{xy}$  и площадью поверхности  $S_{xz}$ , к которой она прикладывается:  $F_x = \sigma_{xy} S_{xz}$ . В результате кристалл подвергается упругой деформации. Мгновенная величина напряжения, рассчитываемая из теоремы вириала, при этом колеблется около среднего заданного значения  $\sigma_{xy}$ . При малых напряжениях дислокация может оставаться на месте, либо совершать нерегулярные движения в ту или иную сторону, изгибаться. По достижении критического значения напряжения ее перемещения становятся упорядоченными, начинается перемещение с постоянной скоростью, зависящей от прикладываемой сдвиговой силы и температуры. Колебания мгновенной величины напряжения, упомянутые выше, не сказываются на скорости дислокации.

Измеренные нами зависимости скорости дислокации от сдвигового напряжения для нескольких температур, вплоть до температуры плавления, представлены на рис. 3. Четко выделяются два режима (особенно при низких температурах): линейный в области низких значений напряжения и режим асимптотического приближения скорости дислокации к поперечной скорости звука. Во всем исследованном диапазоне увеличение температуры приводит к уменьшению скорости дислокации, таким образом, движение дислокаций не требует термоактивации. Наоборот, имеет место динамический режим с фоновым трением дислокаций. Движение лимитируется перекачкой энергии от дислокации к элементарным возбуждениям в кристалле. Линейный участок зависимости принято характеризовать коэффициентом динамического торможения дислокации  $B$ :  $\sigma b = Bv$ . На основании полученных в этой работе методом молекулярной динамики данных была определена температурная зависимость коэффициента торможения  $B(T)$ .

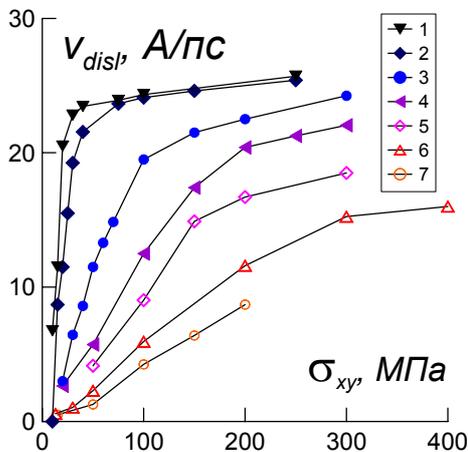


Рис. 3. Зависимость скорости движения дислокации  $v_{disl}$  (А/пс) от прикладываемого сдвигового напряжения  $\sigma_{xy}$  (МПа). Представлены результаты для различных температур: 1 – 50 К, 2 – 100 К, 3 – 300 К, 4 – 500 К, 5 – 650 К, 6 – 800 К, 7 – 900 К

В обезразмеренном на температуру  $\theta$  (порядка дебаевской, подробнее смотри [9]) и соответствующее значение коэффициента  $B(\theta)$  в виде она представлена на рис. 4. Для алюминия использовано значение  $\theta = 230$  К. Для сравнения приведены экспериментальные данные, взятые из обзора [9]. Абсолютное значение коэффициента торможения дислокации при 300 К, определенное из обработки молекулярно-динамических расчетов, составило приблизительно 0.14 миллипуаз, что близко к экспериментальному диапазону [9]. В области умеренных температур зависимость близка к линейной. Такой ход кривой  $B(T)$  описывается в рамках существующих теорий фоновый трения.

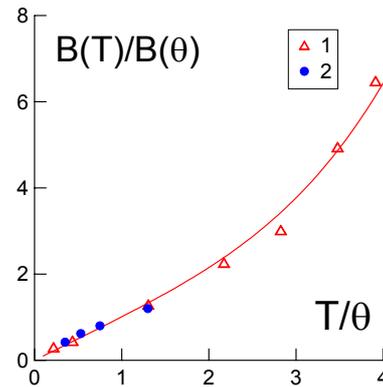


Рис. 4 Температурная зависимость коэффициента динамического торможения дислокации  $B(T)$  для кристалла алюминия. Значения температуры и коэффициента обезразмерены на температуру  $\theta = 230$  К и величину  $B(\theta)$ . 1 – молекулярная динамика, 2 – эксперимент

С ростом температуры сказываются отклонения от линейного закона, хорошо описываемые полиномом третьей или четвертой степени, например:

$$\frac{B(T)}{B(\theta)} = \frac{T}{\theta} + 0.0095 \left( \frac{T}{\theta} \right)^4 \quad (2)$$

### 2.3. Температурная зависимость динамического предела текучести

Величину напряжения течения при высокоскоростном нагружении можно определить, если считать, что скорость пластического деформирования  $\dot{\epsilon}$  определяется подвижностью дислокаций:  $\dot{\epsilon} = \rho_m b v$ . Будем считать, что плотность подвижных дислокаций  $\rho_m$  постоянна в экспериментах, не зависит от температуры и условий деформирования. Тогда величина динамического предела текучести как функция температуры определяется температурной зависимостью коэффициента торможения дислокаций  $B(T)$  в соответствии с формулой

$$\sigma_T(T) = \frac{\dot{\epsilon}}{\rho_m b^2} B(T). \quad (3)$$

Полученные таким образом значения можно сопоставить с данными о динамическом пределе текучести монокристаллического алюминия, полученными из ударно-волнового эксперимента [10], где скорости деформирования составляют приблизительно  $\dot{\epsilon} = 10^6 \text{ с}^{-1}$  (рис. 5). Точные значения плотности дислокаций в условиях ударно-волнового сжатия не известны, однако видно, что экспериментально полученная температурная зависимость хорошо описывается зависимо-

стью динамического коэффициента торможения дислокаций от температуры  $B(T)$ , если величину плотности дислокаций принять равной  $\rho_m \approx 7 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$ . Различие на один – два порядка в сравнении с характерной плотностью подвижных дислокаций в монокристаллическом алюминии при нормальных условиях ( $10^6 - 10^7 \text{ см}^{-2}$  по данным из [9]) можно объяснить возрастанием плотности дислокаций при сжатии материала в ударной волне. По измеренным в эксперименте [10] величинам предела текучести можно оценить среднюю скорость движения дислокаций  $v \sim 700 \text{ м/с}$ , что соответствует динамическому режиму торможения.

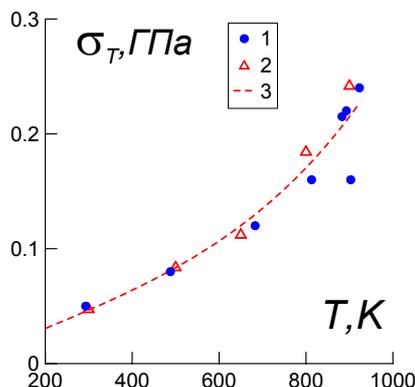


Рис. 5. Зависимость динамического предела текучести монокристаллического алюминия от температуры. 1 – эксперимент [1], 2 – соотношение (3) при  $b=2 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon=10^6 \text{ с}^{-1}$ ,  $\rho_m=7 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$  и значениях  $B(T)$  из молекулярной динамики, 3 – то же, что и 2, но при аппроксимации  $B(T)$  по формуле (2)

### 3. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРЕПЯТСТВИЙ В ВИДЕ НАНОВКЛЮЧЕНИЙ МЕДИ И ПОР НА ДВИЖЕНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ АЛЮМИНИИ

#### 3.1. Модель

Схема модели взаимодействия дислокации в ГЦК монокристалле с препятствием нанометровых размеров (включение примесных атомов или пора) показана на рис. 6. Она аналогична постановке исследования движения дислокаций в монокристаллическом алюминии, описанной выше. Отличие состоит в том, что в плоскость движения дислокаций находится препятствие размером несколько нанометров. Исследования проводились как в динамической (классическая молекулярная динамика), так и в статической (минимизация потенциальной энергии) постановках. Сдвиговое напряжение создавалось заданием постоянной скорости смещения блока подвижных слоев  $R$  вдоль оси  $x$ . В расчетах использовался потенциал погруженного атома, описывающий межчастичные взаимодействия в алюминии и меди [10]. Часть потенциала, относящаяся к алюминию, эквивалентна потенциалу [3].

Моделирование деформации сдвига в статических условиях осуществлялось по схеме:

- смещение атомов подвижного блока  $R$  на заданную величину  $\Delta x$  вдоль оси  $x$ ;
- динамическая релаксация системы из состояния с нулевыми скоростями всех частиц;
- минимизация потенциальной энергии системы методом наискорейшего спуска.

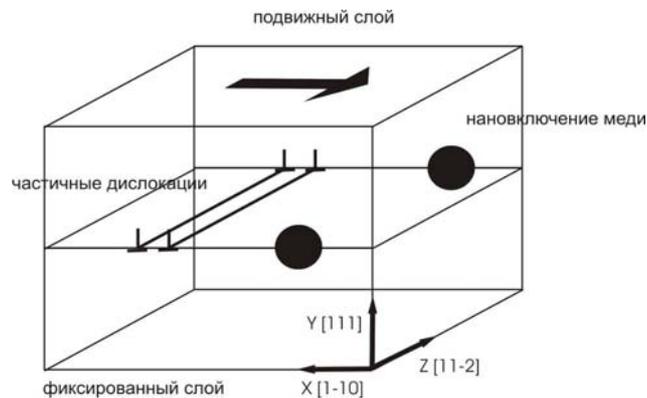


Рис. 6. Модель исследования влияния препятствий на подвижность дислокации

#### 3.2. Результаты

Результаты такого моделирования для системы с дислокацией и препятствием (полость радиусом 1 нм) приведены на рис. 7. Величина энергии системы  $E$  отсчитывается от ее значения в недеформированном состоянии. На начальном этапе деформирования происходит так, как если бы полость отсутствовала. Заметное искривление дислокационной линии происходит лишь на расстояниях до препятствия порядка размеров самого препятствия, в данном случае, на расстоянии около 3 нм. Захват дислокации происходит быстро (при величине деформации около 0.005), что отмечается резким падением энергии всей системы и сдвиговых напряжений.

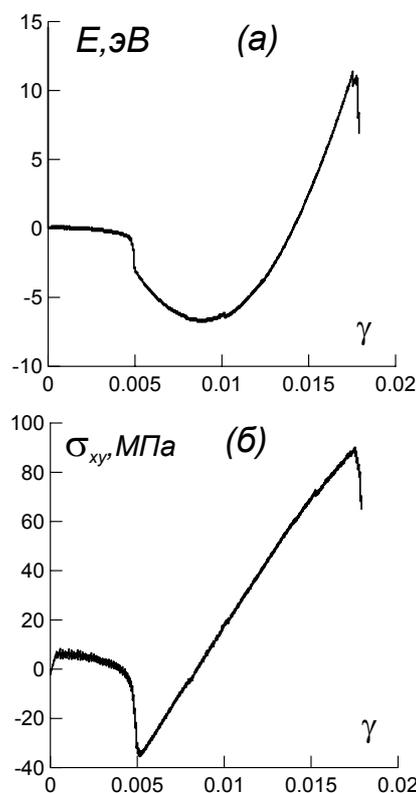


Рис. 7. Зависимость энергии системы  $E$  (эВ) и сдвиговых напряжений в ней  $\sigma_{xy}$  (МПа) от сдвиговой деформации  $\gamma$  при деформировании в статическом режиме. Радиус препятствия 10 А. Смещение блока  $R$  вдоль оси  $x$  на каждом шаге составляло  $\Delta x = 0.01 \text{ \AA}$ . Размер системы  $166 \times 140 \times 296 \text{ \AA}$ , число частиц около 43 тысяч

На диаграммах деформирования захват первой и второй частичных дислокаций выделить не удастся. При моделировании меди захват ведущей и ведомой дислокаций хорошо различаются [11]. Различие объясняется в очень малом расстоянии между частичными дислокациями в алюминии вследствие большой энергии образования дефекта упаковки. Дальнейшее уменьшение энергии системы происходит из-за уменьшения длины дислокации в процессе ее «подтягивания» к положению препятствия. Дальнейший рост энергии и напряжения (диапазон от 0.008 до 0.017) сопровождается изгибанием линии дислокации в процессе ее ухода от препятствия. Предельные величины, соответствующие отрыву дислокации, для данной системы: энергии – 12 эВ, напряжения – 90 МПа. Вклад упругой деформации кристалла в величину критической энергии можно оценить как:

$$E_{elastic} \approx \frac{\sigma_{max}^2}{2\mu} V,$$

где модуль сдвига алюминия  $\mu \approx 28$  ГПа,  $V$  – объем системы. Упругий вклад (около 5 эВ) оказывается сопоставим с величиной порога, оставшаяся часть (около 7 эВ) приходится на изгиб линии дислокации. Величина порога велика и не может быть преодолена термофлуктуационным путем.

В динамическом режиме, с помощью метода классической молекулярной динамики, проведены аналогичные расчеты для системы большего размера (вдоль оси  $x$ ). Результаты для деформирования системы с препятствием радиуса 1.5 нм при сравнительно малой скорости  $3 \times 10^7$  с<sup>-1</sup> и четырех различных температур приведены на рис. 8. Скорость движения дислокации при таких условиях равна 0.8 А/пс.

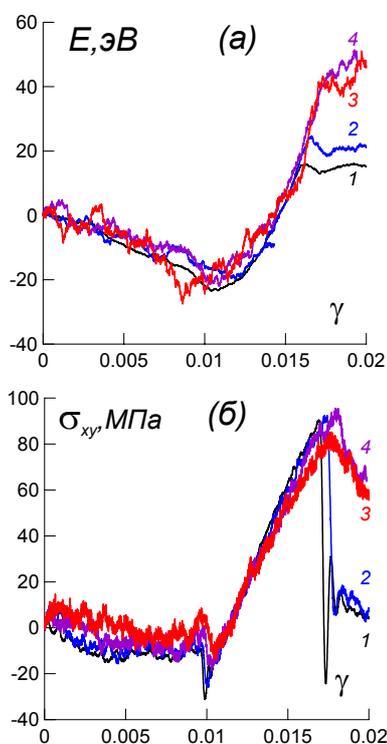


Рис. 8. Зависимость энергии системы  $E$  (эВ) и сдвиговых напряжений в ней  $\sigma_{xy}$  (МПа) от сдвиговой деформации  $\gamma$  при скорости деформирования  $3 \times 10^7$  с<sup>-1</sup>. Радиус препятствия 15 А. Размер системы  $571 \times 140 \times 296$  А, число частиц около  $1.4 \times 10^6$ . Приведены данные для четырех температур: 1 – 100 К, 2 – 300 К, 3 – 500 К, 4 – 700 К

Величина предельно достижимого напряжения при сдвиге составляет приблизительно  $80 \pm 10$  МПа и не зависит от температуры (в пределах погрешности, по-видимому, обусловленной микроструктурой препятствия). Порог по энергии существенно увеличивается в области высоких температур (сравнить ход кривых 1, 2 и 3, 4 рис. 8а), время же релаксации напряжения также сильно возрастает. Действительно, после отрыва при температуре 300 К линия дислокации быстро принимает прямолинейную форму (разница во времени между (б) и (в) на рис. 9 составляет 4 пс), в то время как при 500 К восстановление прежней формы требует больше времени (разница между моментами времени на рис. 10 составляет 40 пс). Это связано с тем, что с повышением температуры при отходе дислокации от препятствия происходит разрыв дислокационной линии. Разрыв происходит в результате уменьшения расстояния между частичными дислокациями, непосредственно прилегающими к препятствию (сравнить рис. 9 и 10).

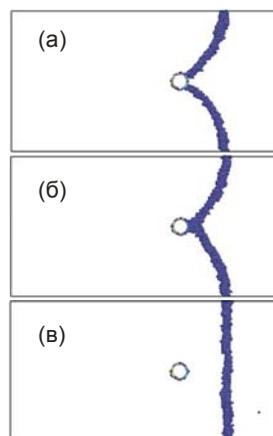


Рис. 9. Отрыв дислокации от препятствия при низкой температуре (300 К). Представлен срез системы через каждые 4 пс. Показаны атомы, составляющие дефекты кристаллической решетки

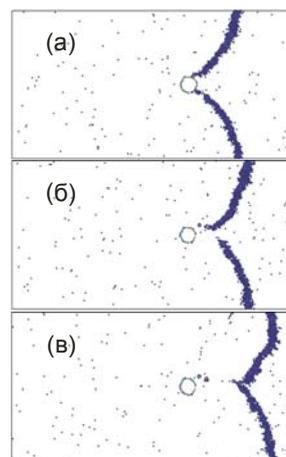


Рис. 10. Отрыв дислокации от препятствия при высокой температуре (500 К). Представлен срез системы через каждые 40 пс. Показаны атомы, составляющие дефекты кристалла

Заметим, что фактически это дислокации другого типа, поскольку направление линии дислокации и вектора Бюргерса сильно отличается от случая прямолинейных краевых диссоциировавших дислокаций. В результате сдвиг в части решетки, находящейся за

препятствием, не происходит. Далее происходит испускание дислокационной петли в другой плоскости скольжения, которая затем объединяется с первоначальной дислокацией, замыкая ее в прежней плоскости скольжения (рис. 11). При этом наблюдается активное образование дефектов кристаллической решетки, что заметно, например, на рис. 10.

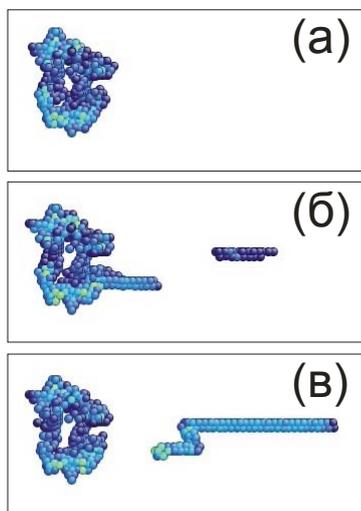


Рис. 11. Механизм прохождения дислокации через препятствие при высокой температуре или сильно искаженном включении. Показаны атомы, составляющие дефекты кристалла.

Напряжение отрыва дислокации  $\sigma_{cr}$ , а именно, максимальное значение напряжения в процессе прохождения дислокации через препятствие при деформировании, оказывается зависящим от скорости дислокации (рис. 12). Видно, что с уменьшением скорости дислокации данная зависимость существенно ослабляется.

Температурная зависимость напряжения отрыва проявляется при большей скорости деформировании, что видно из рассмотрения рис. 13, суммирующего результаты для скорости деформирования  $3 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$  при нескольких значениях радиуса препятствия и температуры. Скорость движения дислокации в этом случае составляет 8.5 А/пс. Видно заметное увеличение критического напряжения, необходимого для отрыва дислокации от препятствия, при увеличении температуры до 700 К. С увеличением размера препятствия величина критического напряжения растет.

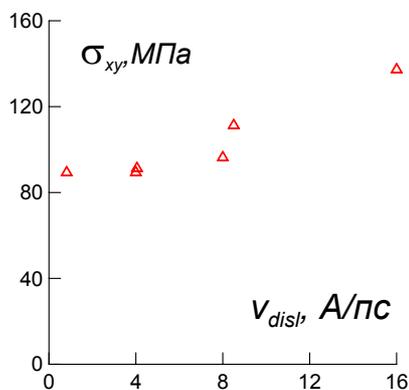


Рис. 12. Напряжение отрыва дислокации от препятствия при разных скоростях дислокации. Радиус препятствия 15 А. Температура 300 К

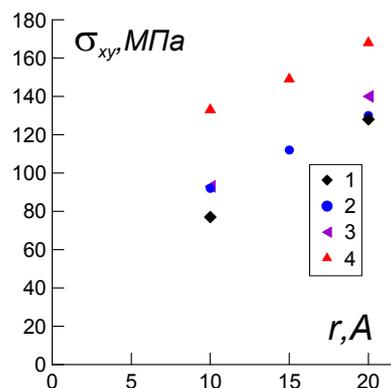


Рис. 13. Зависимость напряжения отрыва дислокации от размера препятствия при скорости деформирования  $3 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$ . Размер системы 571x140x296 А. Температура: 1 – 100 К, 2 – 300 К, 3 – 500 К, 4 – 700 К

### 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построена молекулярно-динамическая модель движения краевой дислокации в монокристалле. В модели алюминия получены зависимости скорости краевой диссоциировавшей дислокации от сдвигового напряжения при различных температурах. С увеличением прикладываемого сдвигового напряжения достигается предельная скорость движения дислокаций, близкая к скорости распространения упругих сдвиговых возмущений. Определена температурная зависимость коэффициента динамического торможения, соответствующая при малых температурах имеющимся экспериментальным данным и теоретическим представлениям. С приближением к температуре плавления полученная зависимость коэффициента динамического торможения дислокаций существенно отличается от линейной. Результаты согласуются с экспериментальными данными по температурной зависимости предела текучести алюминия при высокоскоростной деформации и могут служить для определения плотности дислокаций за фронтом ударной волны.

Исследован процесс преодоления одиночной краевой дислокацией нанополости в монокристалле. Показано определяющее значение температуры на механизм процесса, характерное время и критическое напряжение отрыва. Продемонстрировано возрастание энергоёмкости процесса преодоления дислокациями наноразмерных препятствий с увеличением температуры в условиях высокоскоростного деформирования.

Расчеты выполнены на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ (ГУ) и на кластере МСЦ РАН.

Авторы выражают признательность Г.И.Канелю за полезные обсуждения и интерес к данной работе. Работа выполнена при финансовой поддержке по программам фундаментальных исследований РАН №3 и №9, Межсекционной программе ОЭМПУ РАН «Интегрированные модели физической механики», гранту РФФИ №05-08-65423, а также в рамках проектов Министерства образования и науки РФ РНП2.1.1.712 и 2007-3-1.3-25-01-397 и контракта с Национальными лабораториями Сандия по программе US DOE/NNSA ASC.

**СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ**

- $b$  — вектор Бюргера  
 $a$  — постоянная решетки  
 $L_b$  — размер расчетной ячейки в направлении  $x$  [1-10]  
 $H$  — размер расчетной ячейки в направлении  $y$  [111]  
 $v_x$  — заданная фиксированная скорость атомов в группе  $R$   
 $F_x$  — заданная сила, приложенная к атомам в группе  $R$   
 $K$  — координационное число  
 $CS$  — параметр центральной симметрии  
 $r$  — расстояние между частичными дислокациями, образовавшимися после диссоциации полной  
 $\mu$  — модуль сдвига  
 $\sigma$  — сдвиговое напряжение в расчетной ячейке  
 $S$  — площадь сечения расчетной ячейки  
 $v$  — скорость дислокации  
 $B$  — коэффициента динамического торможения дислокации  
 $\theta$  — безразмерная температура  
 $\dot{\epsilon}$  — скорость пластической деформации  
 $\rho_m$  — плотность подвижных дислокаций  
 $E$  — полная потенциальная энергия системы  
 $V$  — объем расчетной ячейки

**Индексы:**

- $i$  — величина, относящаяся к  $i$ -му атому  
 $xu$  — величина, относящаяся к плоскости  $xu$   
 $eq$  — в состоянии равновесия  
 $disl$  — величина, относящаяся к одиночной краевой дислокации

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

- Osetsky Yu. N., Bacon D. J. // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2003. № 11. P. 427.
- Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. // Mater. Sci. Rep. 1992. № 9. P. 251.
- Liu X.-Y., Ercolessi F., Adams J.B. // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 2004. № 12. P. 665.
- Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. // Phys. Rev. B. 1999. V. 59. P. 3393.
- Cai J., Ye Y.Y. // Phys. Rev. B. 1996. № 54. P. 8398.
- Srinivasan S.G., Liao X.Z., Baskes M.I., McCabe R.J., Zhao Y.H., Zhu Y.T. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 125502.
- Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972.
- Mordehai D., Ashkenazy Y., Kelson I., Makov G. Dynamic properties of screw dislocations in Cu: A molecular dynamics study // Phys. Rev. B. 2003. V. 67. P. 024112.
- Альшиц В.И., Инденбом В.Л. Динамическое торможение дислокаций. // УФН. 1975. Т. 115. № 1. С.
- Канель Г.И., Фортов В.Е., Разоренов С.В., Ударные волны в физике конденсированного состояния // УФН. 2007. Т. 177. № 8. С. 809.
- Liu X.-Y., Xu Wei, Foiles S.M., Adams J.B. Atomistic studies of segregation and diffusion in Al-Cu grain boundaries. // Appl. Phys. Lett. 1998. V. 72. № 13. P.
- Hatano T., Matsui H. Molecular dynamics investigation of dislocation pinning by a nanovoid in copper // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. P. 094105.