

07,16

Моделирование одноосной деформации нанокристаллов магния „жесткой“ и „мягкой“ ориентировок

© А.М. Власова^{1,2}

¹ Институт физики металлов УрО РАН,
Екатеринбург, Россия

² Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия

E-mail: alisa@imp.uran.ru

Поступила в Редакцию 16 июля 2019 г.

В окончательной редакции 16 июля 2019 г.

Принята к публикации 24 июля 2019 г.

Проведено атомистическое моделирование высокоскоростной деформации ($v = 3 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$) сжатием идеальных, дефектных (5% вакансий, 5% примесных атомов водорода) нанокристаллов магния „жесткой“ [0001] и „мягкой“ [1 $\bar{1}$ 01] ориентировок при $T = 300\text{--}375 \text{ K}$. При моделировании использовалось три различных потенциала межатомного взаимодействия. Показана эволюция микрорельефа свободной поверхности нанокристаллов магния в процессе пластического течения. Построены диаграммы „напряжение σ –деформация ϵ “, определены деформационные зависимости скалярной плотности дислокаций, построены зависимости скорости деформации $\dot{\epsilon}$ от степени деформации ϵ . Рассмотрено изменение потенциальной энергии в процессе деформирования. Обсуждается образование барьеров, обуславливающих аномальный ход скорости деформации. Показано влияние вакансий, а также атомов водорода на форму деформационных кривых, дислокационную структуру и скалярную плотность дислокаций. Делаются выводы о влиянии типа потенциала межатомного взаимодействия на расчетные характеристики.

Ключевые слова: магний, нанокристалл, дислокация, деформационные кривые, молекулярная динамика.

DOI: 10.21883/FTT.2020.01.48750.554

1. Введение

Пластическая деформация любого металла — неоднородный процесс, хотя на макроуровне, за счет усреднения по большому числу частиц, неоднородность оказывается замаскированной и уходит на второй план. Однако именно неоднородность является фундаментальной характеристикой деформации, без которой невозможно верное объяснение сложных деформационных процессов. Неоднородность деформации, обусловленная различными микроскопическими механизмами, как и сами механизмы, хорошо поддаются изучению в процессе моделирования, в частности методами молекулярной динамики.

Деформационное поведение при сжатии и растяжении монокристаллов магния одинаковых ориентировок различно. Так, например, экспериментально показано, что приведенные критические напряжения сдвига отличаются в несколько раз [1,2]. В данной работе в качестве одноосного нагружения рассматривалось одноосное сжатие.

Магний обладает гексагональной плотноупакованной решеткой (ГПУ). Были выбраны две ориентировки монокристаллов магния с различным комплексом прочностных и пластических свойств. Одной из них является ориентировка с осью [1 $\bar{1}$ 01] (под 45° к оси симметрии шестого порядка) — („мягкая“ ориентировка) с преимущественным базисным скольжением S_b , для которого

фактор Шмида принимает максимальное значение равное 0.5 [2,3], критическое напряжение сдвига составляет 0.7 МПа [4]. Экспериментально эта ориентировка, наряду с другими, была впервые рассмотрена в работе [2], в которой построены деформационные кривые для различных ориентировок при низких скоростях деформации ($v = 30 \text{ s}^{-1}$). Данных о проведении молекулярно-динамических расчетов по изучению деформационного поведения [1 $\bar{1}$ 01] монокристаллов не найдено.

Второй („жесткой“ ориентировкой) является ориентировка с осью [0001] симметрии шестого порядка, активизирующая пирамидальное скольжение S_{pyrII} и двойникование по системам

$$(10\bar{1}1)\langle 10\bar{1}\bar{2} \rangle, (10\bar{1}\bar{2})\langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle, \\ (10\bar{1}\bar{3})\langle 30\bar{3}\bar{2} \rangle \text{ и } (11\bar{2}1)\langle 11\bar{2}\bar{6} \rangle.$$

[0001]-монокристаллы являются интересным объектом для экспериментального, теоретического и численного исследования деформационного поведения магния при различных типах нагружения до настоящего времени. Так экспериментально установлено термоактивируемое образование дислокационных барьеров (сидячих дислокационных конфигураций) при сжатии таких монокристаллов [5,6].

Согласно [2], условный предел текучести для [0001]-монокристаллов составляет $\sigma_{0,2}^{[0001]} = 102 \text{ МПа}$, относительное удлинение принимает значение $\delta^{[0001]} = 5\%$, для

$[1\bar{1}01]$ -монокристаллов $\sigma_{0,2}^{[1\bar{1}01]} = 2.7 \text{ МПа}$, $\delta^{[1\bar{1}01]} > 12\%$ для низких скоростей деформации. Таким образом, монокристаллы магния $[0001]$ -ориентировки имеют самое высокое значение условного предела текучести и самую низкую пластичность среди всех возможных ориентировок, а монокристаллы $[1\bar{1}01]$ -ориентировки, напротив, имеют самое низкое значение предела текучести и самую высокую пластичность.

Магний, как ГПУ-кристалл, имеет большое число деформационных мод: скольжения и двойникования.

Пирамидальное скольжение второго рода S_{pyrII} впервые наблюдалось Bell and Cahn на $[0001]$ -монокристаллах Zn (ГПУ) в 1957 г., в работе отмечается необходимость скольжения, предшествующего двойникованию [7].

В 70-х годах XX века три группы исследователей занимались деформационными особенностями монокристаллов магния, а именно экспериментальным изучением пирамидального скольжения S_{pyrII} в магнии при нагружении $[0001]$ -монокристаллов [8–10]. Уже в XXI веке два других независимых эксперимента [11,12] на тонких образцах позволили наблюдать пирамидальное скольжение первого рода S_{pyrI} . В работе [13] молекулярно-динамическим методом выявлено призматическое скольжение и последующее двойникование по плоскости $\{10\bar{1}3\}$ для $[11\bar{2}0]$ -ориентировок. Моделирование микросжатия $[0001]$ -монокристаллов [14,15] выявило, что деформация осуществляется путем пирамидального скольжения обоих типов, притом двойникования не наблюдалось. Исследователями выявлен факт преимущественного пирамидального скольжения второго рода перед пирамидальным скольжением первого рода.

Базисное скольжение экспериментально наблюдается для всех ориентировок, при нулевом факторе Шмида отклонение от точной ориентировки даже на доли градуса инициирует легкое базисное скольжение.

Электронно-микроскопическим методом ранее в результате экспериментов по деформации монокристаллов магния наблюдались скользящие \mathbf{a} -дислокации [16], барьеры из $(\mathbf{c} + \mathbf{a})$ -дислокаций [8,9,17], дислокационные петли [18], диполи, сетки, дефекты упаковки [19], двойники [20].

С развитием вычислительных ресурсов метод молекулярной динамики широко применялся и применяется для моделирования скольжения отдельных дислокаций в магнии [21] и деформационного поведения магниевых $[0001]$ -нанокристаллов в условиях динамического нагружения [22].

Магний является уникальным металлом, демонстрирующим особенности и аномалии. Так известно, что этот металл проявляет температурную аномалию предела текучести при динамическом нагружении [9]. При специальной технологии, сочетающей экструзию, прокатку и температурные отжиги, магний способен деформироваться в тонкую фольгу, толщиной около $10 \mu\text{m}$ [23]. Таким образом надо полагать, что магний об-

ладает не вполне понятным и малоизученным ресурсом пластичности.

Целью настоящей работы являлось моделирование деформационного поведения $[0001]$ - и $[1\bar{1}01]$ -монокристаллов магния, условный предел текучести $\sigma_{0,2}$ которых различается на порядок, расчет и сравнение полученных кривых „напряжение–деформация“, построение зависимостей изменения дислокационной плотности, потенциальной энергии системы, скорости деформации в зависимости от степени деформации, определение влияния 5% вакансий и примеси водорода на деформационные кривые и плотность дислокаций.

2. Методика измерений

Моделирование проводилось с использованием вычислительного пакета LAMMPS [24], обработка расчетных данных выполнена при помощи Open Visualization Tools OVITO [25].

Для ориентировки $[1\bar{1}01]$ (здесь и далее G ориентировка) моделируемая ячейка размером $9.7 \times 22.1 \times 41.4 \text{ nm}$ была выбрана в форме прямоугольного параллелепипеда, ребрам которого соответствовали кристаллографические направления $\mathbf{X} = [\bar{1}\bar{1}20]$, $\mathbf{Y} = [\bar{1}101]$, $\mathbf{Z} = [\bar{1}10\bar{1}]$. Для ориентировки $[0001]$ (здесь и далее A ориентировка) размер прямоугольной моделируемой ячейки составил $19.1 \times 22.1 \times 31.2 \text{ nm}$, ребрам которой соответствовали кристаллографические направления $\mathbf{X} = [1\bar{1}00]$, $\mathbf{Y} = [11\bar{2}0]$, $\mathbf{Z} = [0001]$. Вакансии вводились путем удаления атомов.

Параметры гексагональной кристаллической решетки для магния принимались равными $a = 0.32 \text{ nm}$, $c = 0.52 \text{ nm}$.

Для расчета поведения системы взаимодействующих частиц, в качестве которых выступают отдельные атомы, в рамках метода молекулярной динамики решалась система классических уравнений движения Ньютона

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \mathbf{F}_i, \quad (1)$$

где i — номер атома; m_i — масса i -атома; \mathbf{r}_i — радиус-вектор i -атома; \mathbf{F}_i — равнодействующая всех сил, действующих на i -атом. Для расчетов использовался алгоритм Верле.

Граничные условия вдоль ортогональных направлений принимались свободными, чтобы включить в рассмотрение выход дислокаций на свободные поверхности моделируемых нанокристаллитов.

Одноосное сжатие осуществлялось путем переопределения скоростей атомов, находящихся в приповерхностных торцевых слоях толщиной 0.52, 0.62 nm, что суммарно составило около 1.7%, 1.5% (для A , G нанокристаллов соответственно) от расстояния вдоль кристаллографической оси Z моделируемых ячеек; толщина приповерхностного слоя, перпендикулярного оси Z подбиралась эмпирически, (исходя из оптимального времени расчета). Вдоль оси Z лабораторной системы

Таблица 1. Физические свойства магния (экспериментальные данные и расчет при помощи потенциалов [26], [27], [28])

Свойства	a (HCP), Å	c/a	E_{coh} , eV/at.	C_{11} , GPa	C_{12} , GPa	C_{44} , GPa	C_{13} , GPa	C_{33} , GPa	C_{66} , GPa	$\Delta E_{\text{fcc} \rightarrow \text{hcp}}$, eV/at.
Эксп.	3.186	1.622	1.510	63.5	26.0	18.4	21.7	66.5	18.75	0.013
Sun [26]	3.184	1.628	1.529	69.6	25.3	12.8	16.0	69.5	22.15	0.012
Liu [27]	3.206	1.623	1.516	61.8	25.9	18.2	21.9	67.5	17.95	0.015
Smirnova [28]	3.188	1.633	1.527	52.0	18.5	14.9	16.0	74.0	16.70	0.006

координат проекции скоростей атомов нагружаемых слоев были фиксированы, для скоростей атомов вдоль других кристаллографических направлений ограничения не накладывались. Модули скоростей соответствовали величине $V = 5 \text{ m/s}$, а направления в различных слоях были ориентированы в сторону центра моделируемой системы. Этим задавалось одноосное сжатие образца вдоль кристаллографической оси Z с постоянной скоростью 10 m/s . В направлении осей X и Y лабораторной системы координат проекции скоростей атомов в торцевых слоях равнялись нулю. Механическая работа над кристаллом при сжатии совершалась, полная и потенциальная энергии не сохранялись.

Для выбранных потенциалов [26–28] характерно хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных для параметров решетки, отношения c/a , упругих модулей, энергии фазового перехода, энергии когезии (табл. 1).

Для определения векторов Бюргера, возникающих в кристаллите дислокаций, использовался алгоритм DXA (Dislocation Extraction Algorithm) [29].

Для перехода от атомистического представления поверхности ячейки магния к континуальному, применялся модификатор construct surface mesh [30], который создает многогранную сетку вокруг набора частиц, составляющих моделируемую ячейку. Помимо визуализации, геометрического создания поверхности, модификатор позволяет количественно измерять объем твердого тела, площадь поверхности, пористость, разделяя пространство на внутреннюю и внешнюю области.

Радиус зонда R_a , как параметр, позволяющий отделить кристаллографические поры от макропор, трещин, полостей в твердом теле, принимается равным 4 и 6 Å, а уровень сглаживания — 8 ед. изм.

С целью классификации атомов кристаллических систем использовался алгоритм CNA (Common Neighbor Analysis) [31], который позволяет получить информацию о гранецентрированной кубической (ГЦК), объемноцентрированной кубической (ОЦК), гексагональной плотноупакованной (ГПУ), либо икосаэдрической координациях атомов, посредством анализа взаимосвязи центрального атома с ближайшими соседями (ближайшего окружения атома). Характерное расстояние (cutoff radius, принималось равным расстоянию между атомами первой и второй координационных сфер, 3.8 Å) определяет пары связанных атомов.

3. Результаты моделирования

3.1. Рельеф поверхности

Расчитана эволюция рельефа макроповерхности моделируемых нанокристаллитов магния A и G ориентировок. На рис. 1, a, b , в показан рельеф поверхности монокристалла A ориентировки при $\epsilon = 2.8, 9.2, 15.1\%$ соответственно.

На рис. 1, c, d, e показан рельеф поверхности монокристалла G ориентировки при $\epsilon = 2.8, 9.2, 15.1\%$ соответственно. Пластическое течение локализовано и сосредоточено в некоторых микрообъемах нанокристаллитов. Видны параллельные полосы, расположенные под углом примерно 45° к оси нагружения OZ для обеих ориентировок. Эти полосы зарождаются от боковой поверхности моделируемого кристаллита, после чего прорастают через все сечение образца, наблюдаются экспериментально, и получили название полос Чернова–Людерса [32].

Определена динамика доли поверхностных атомов $\frac{\Delta N}{N}$ в объеме V моделируемой ячейки в процессе деформирования (табл. 2). Приведены значения $\frac{\Delta N}{N}$ для радиуса

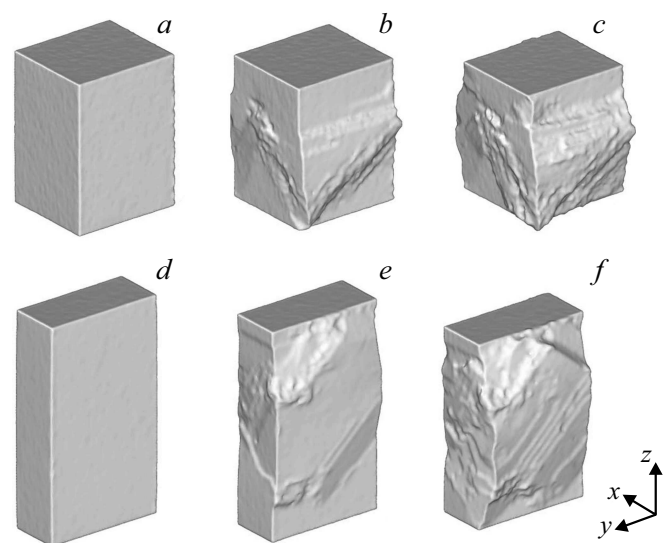


Рис. 1. Изменение микрорельефа поверхности моделируемых нанокристаллитов магния в процессе пластической деформации сжатием a, b, c — A ориентировка. $\epsilon = 2.8\%, 9.2\%, 15.1\%$ соответственно; d, e, f — G ориентировка. $\epsilon = 4.5\%, 8.2\%, 14\%$ соответственно.

Таблица 2. Изменение доли поверхностных атомов $\frac{\Delta N}{N}$ в зависимости от R_a

Параметр	$R_a, \text{Å}$	$\varepsilon = 2.8\%$	$\varepsilon = 9.2\%$	$\varepsilon = 15.1\%$	$\varepsilon = 4.5\%$	$\varepsilon = 8.2\%$	$\varepsilon = 14.0\%$
$\frac{\Delta N}{N}$	4	0.026	0.025	0.025	0.035	0.034	0.032
	6	0.026	0.025	0.025	0.035	0.033	0.032

зонда R_a равного 4 и 6 Å. Согласно табл. 2 в процессе деформирования доля поверхностных атомов в общем объеме атомов уменьшается и практически не зависит от R_a .

3.2. Диаграммы напряжение σ -деформация ε

На рис. 2, 3 приводятся расчетные деформационные кривые для изначально бездефектных нанокристаллов A и G ориентровок, построенные с использованием двух потенциалов межатомного взаимодействия [26,27]. Диаграммы построены в условных координатах, когда степень деформации ε приводится в относительных единицах $\varepsilon = \frac{\Delta H_Z}{H_Z}$, рассчитанных как отношение убыли ΔH_Z длины ячейки вдоль оси деформирования Z к исходной длине H_Z вдоль направления Z .

Деформационные диаграммы в истинных и условных координатах, совпадают при малых значениях $\frac{\Delta l}{l_0}$, где Δl — удлинение образца, l_0 — начальная длина образца, поскольку

$$\ln \left(1 + \left(\frac{l}{l_0} - 1 \right) \right) \approx \left(\frac{l}{l_0} - 1 \right) = \frac{\Delta l}{l_0}, \text{ при } l \rightarrow l_0. \quad (2)$$

В настоящей работе максимальная степень деформации не превосходит 20%. Напряжение σ на диаграммах приводится в безразмерных единицах измерения $\frac{\sigma}{\sigma_{\max}}$, где σ_{\max} — это максимальное напряжение для каждой деформационной схемы.

Рассмотрим случай A ориентровки и идеального монокристалла. В этом случае деформационная диаграмма σ - ε представлена на рис. 2. Для кривой A^{Sun} при изменении степени деформации ε в интервале от 0 до 0.04 идет процесс упругого деформирования, чему, согласно закону Гука, соответствует линейный участок. На участке кривой, соответствующем упругому деформированию, проявляется зубчатость (пилообразность).

После зарождения дислокаций при $\sigma = \sigma_{\max}$ со свободной поверхности кристалла [13] функциональные зависимости $\frac{\sigma}{\sigma_{\max}} = \frac{\sigma}{\sigma_{\max}}(\varepsilon)$ претерпевают разрыв в точке, где значения $\frac{\sigma}{\sigma_{\max}} = \frac{\sigma}{\sigma_{\max}}(\varepsilon)$ уменьшаются скачком от $\sigma = \sigma_{\max}$ до $\sigma = 0.1 \cdot \sigma_{\max}$. Дальнейшая деформация протекает при напряжениях, не превышающих величины $\sigma = 0.15 \cdot \sigma_{\max}$. При $0.05 \leq \varepsilon \leq 0.16$ напряжения принимают значения в интервале $0.1 \leq \frac{\sigma}{\sigma_{\max}} \leq 0.16$, кривая пластического хода также имеет зубчатость. При $\varepsilon = 0.1$

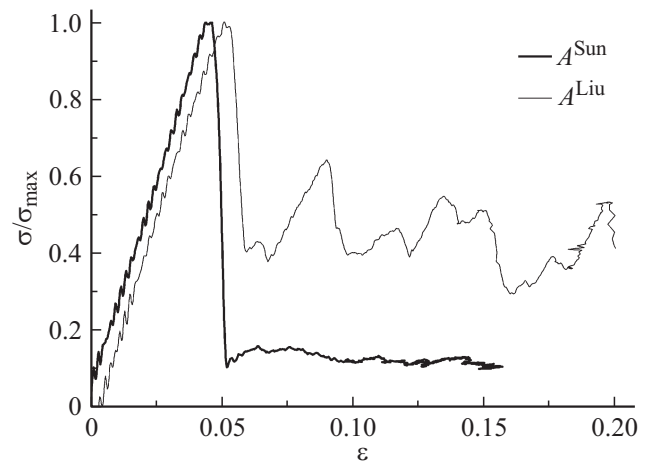


Рис. 2. Кривые напряжение σ -деформация ε для A ориентровки. Потенциал Sun [26] (жирная линия) и Liu [27] (тонкая линия).

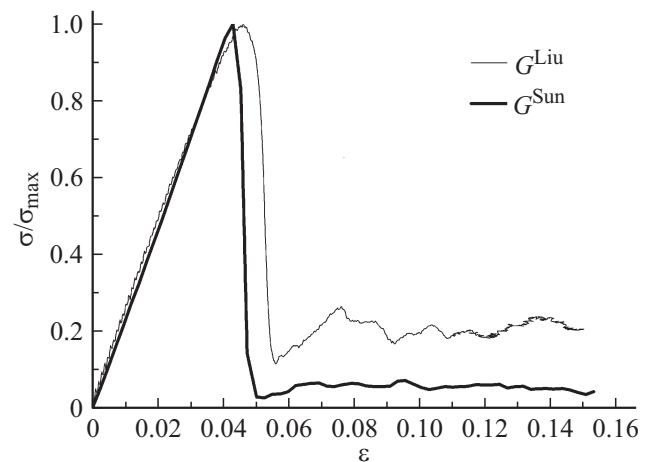


Рис. 3. Кривые напряжение σ -деформация ε для G ориентровки. Межатомный потенциал Sun [26] (жирная линия) и Liu [27] (тонкая линия).

зубчатость резко меняет характер, который приобретает преимущественную ступенчатость, кривая петляет и имеет возвратный характер. При $\varepsilon = 0.16$ напряжения, необходимые для деформации в 10 раз меньше напряжений, требуемых для зарождения дислокаций.

Кривая A^{Liu} отличается от кривой A^{Sun} тем, что напряжения деформации после образования дислокаций составляют $\sigma = 0.5 \cdot \sigma_{\max}$, при этом напряжения резко и

скачкообразно меняются в интервале $0.4 \leq \frac{\sigma}{\sigma_{\max}} \leq 0.65$. Пик смещен вправо на 0.01 по оси абсцисс.

В случае *G* ориентировки и идеального монокристалла деформационная диаграмма σ – ϵ представлена на рис. 3. Для межатомного потенциала [26] при изменении степени деформации ϵ в интервале от 0 до 0.04 идет процесс упругого деформирования, чему, согласно закону Гука, соответствует линейный участок.

После зарождения дислокаций при $\sigma = \sigma_{\max}$ со свободной поверхности кристалла, напряжения, достаточные для продолжения пластического течения скачком уменьшаются до $\sigma = 0.012 \cdot \sigma_{\max}$, дальнейшая деформация протекает при напряжениях, не превышающих величины $\sigma = 0.075 \cdot \sigma_{\max}$. При $0.05 \leq \epsilon \leq 0.16$ напряжения принимают значения в интервале $0.012 \leq \frac{\sigma}{\sigma_{\max}} \leq 0.075$.

При $\epsilon = 0.14$ напряжения, необходимые для деформации превосходят таковые в момент образования первых дислокаций более чем в 2.5 раза.

Для потенциала [27] напряжения деформации после образования первых дислокаций находятся в интервале $0.16 \leq \frac{\sigma}{\sigma_{\max}} \leq 0.24$, пик смещен вправо на 0.01 по оси абсцисс. Кривая пластического хода соответствует напряжениям в 2–4 раза большим, чем для межатомного потенциала [26].

3.3. Диаграммы напряжение σ –деформация ϵ для нанокристаллов с 5% дефектов

В моделируемые кристаллиты *A* и *G* ориентировок были введены 5% точечных дефектов (вакансий) от общего числа атомов, после чего были рассчитаны деформационные кривые подобные представленным на рис. 2, рис. 3. Видно, что ход деформационных кривых претерпел кардинальные изменения (рис. 4).

Качественно расчетные деформационные кривые (рис. 4) для кристаллов с 5% вакансий имеют тот же вид, что и кривые для бездефектных кристаллов (рис. 2, рис. 3). Однако скачок напряжений является двухступенчатым (потенциал Sun). Первая ступень соответствует резкому падению при практически неизменном значении степени деформации от $\sigma = \sigma_{\max}$ до $\sigma = (0.3-0.5) \cdot \sigma_{\max}$, вторая ступень — более плавное изменение деформирующих напряжений от $\sigma = (0.3-0.5) \cdot \sigma_{\max}$ до $\sigma = 0.2 \cdot \sigma_{\max}$ при $0.04 \leq \epsilon \leq 0.07$. Когда $\epsilon > 0.07$, то напряжение пластического течения практически неизменно и оказывается выше напряжения для бездефектного нанокристалла в 2–3 раза. Видно, что напряжения пластического течения для *A* ориентировки несколько выше, чем для *G* ориентировки.

Потенциал Liu демонстрирует завышенное в 2–4 раза напряжение пластического течения по сравнению с потенциалом Sun.

Для определения влияния типа точечных дефектов (вакансии и примесные атомы водорода) на деформационные кривые был произведен расчет для *A* и *G* нанокри-

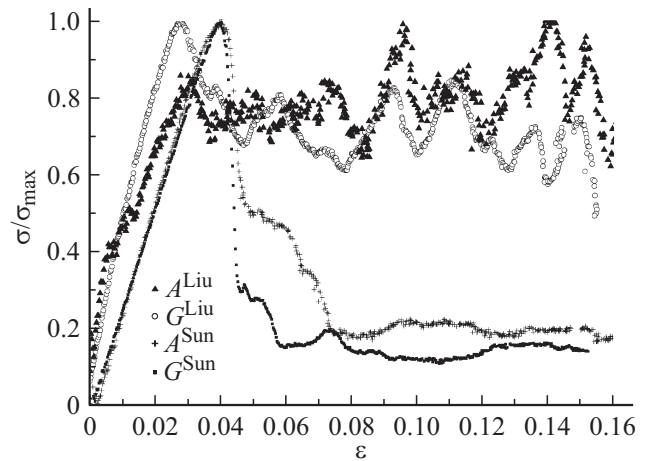


Рис. 4. Кривые напряжение σ –деформация ϵ для *A* и *G* ориентировок с 5% вакансий (A^{Sun} , G^{Sun} — межатомный потенциал Sun [26], A^{Liu} , G^{Liu} — межатомный потенциал Liu [27]).

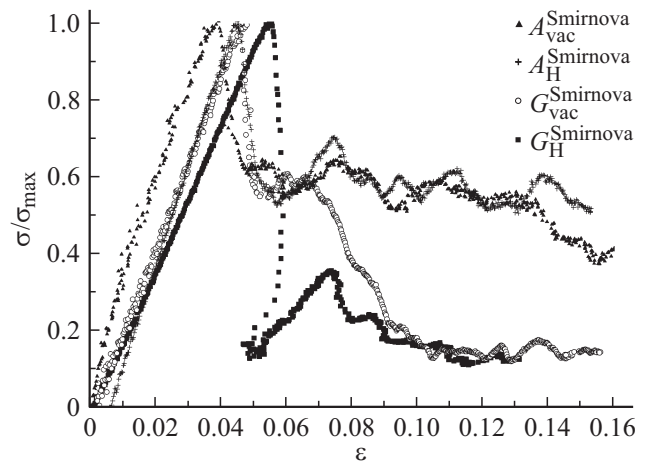


Рис. 5. Кривые напряжение σ –деформация ϵ для *A* и *G* ориентировок с 5% точечных дефектов (вакансий или примесных атомов водорода). Межатомный потенциал Смирновой [28].

сталлов с 5% вакансий и 5% примесных атомов водорода с использованием потенциала Смирновой [28] (рис. 5).

Кривая $A_{\text{vac}}^{\text{Smirnova}}$ при $\epsilon < 0.04$ демонстрирует линейный рост, при $0.04 \leq \epsilon \leq 0.06$ — двухступенчатое резкое падение деформирующих напряжений до 0.55, при $\epsilon > 0.06$ напряжения плавно уменьшаются в пределах $0.28 \leq \frac{\sigma}{\sigma_{\max}} \leq 0.55$.

Кривая $G_{\text{vac}}^{\text{Smirnova}}$ при $\epsilon < 0.045$ демонстрирует линейный рост, при $0.045 \leq \epsilon \leq 0.1$ — двухступенчатое плавное падение деформирующих напряжений до 0.1, при $\epsilon > 0.1$ напряжения выходят на плато $\frac{\sigma}{\sigma_{\max}} = 0.1$.

Кривая $A_{\text{H}}^{\text{Smirnova}}$ при $\epsilon < 0.04$ демонстрирует линейный рост, при $0.04 \leq \epsilon \leq 0.06$ — одноступенчатое резкое падение деформирующих напряжений до 0.55, при $\epsilon > 0.06$ напряжения плавно уменьшаются в пределах $0.28 \leq \frac{\sigma}{\sigma_{\max}} \leq 0.55$.

Таблица 3. Расчетные количественные характеристики деформационных кривых монокристаллов магния σ_{\max} , σ_{\min} , $\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\min} - \varepsilon_{\max}$, $\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}}$, $\frac{\bar{\sigma}}{\sigma_{\max}}$ при скорости деформации равной 10^9 s^{-1}

Параметр	σ_{\max} , GPa	σ_{\min} , GPa	$\Delta\varepsilon = \varepsilon_{\min} - \varepsilon_{\max}$	$\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}}$	$\frac{\bar{\sigma}}{\sigma_{\max}}$, GPa
A^{Sun}	3.55	0.36	0.0063	8.9	0.12
G^{Sun}	3.16	0.04	0.0071	77.97	0.056
$A^{\text{Sun}}_{\text{vac}}$	1.8	0.3	0.04	6	0.19
$G^{\text{Sun}}_{\text{vac}}$	2.3	0.34	0.02	6.7	0.15
A^{Liu}	2.4	0.97	0.01	2.49	0.44
G^{Liu}	2.19	0.26	0.01	8.5	0.21
$A^{\text{Liu}}_{\text{vac}}$	0.43	0.32	0.005	1.36	0.8
$G^{\text{Liu}}_{\text{vac}}$	1.24	0.77	0.048	1.61	0.7
$\text{Mg-H}^{\text{Smirnova}}_{0001}$	1.6	0.8	0.012	3.2	0.57
$\text{Mg}^{\text{Smirnova}}_{0001}$	1.66	1	0.01	1.61	0.53
$\text{Mg-H}^{\text{Smirnova}}_{1\bar{1}01}$	2.82	0.34	-0.07	8.3	0.19
$\text{Mg}^{\text{Smirnova}}_{1\bar{1}01}$	2.5	1.4	0.01	1.79	2.26

Кривая $G^{\text{Smirnova}}_{\text{H}}$ при $\varepsilon < 0.055$ демонстрирует линейный рост, при $\varepsilon = 0.055$ одноступенчатое падение деформирующих напряжений до 0.1, при $\varepsilon > 0.1$ напряжения выходят на плато $\frac{\sigma}{\sigma_{\max}} = 0.1$.

Введем некоторые количественные характеристики расчетных деформационных кривых. Максимальное напряжение σ_{\max} , соответствующее напряжению зарождения дислокаций, определяется как $\lim_{\varepsilon \rightarrow \bar{\varepsilon} - 0} \sigma(\varepsilon) = \sigma_{\max}$, а минимальное напряжение, соответствующее началу пластической деформации σ_{\min} , — $\lim_{\varepsilon \rightarrow \bar{\varepsilon} + 0} \sigma(\varepsilon) = \sigma_{\min}$. Разность Δ между напряжениями σ_{\min} и σ_{\max} рассчитывается как $\Delta = \sigma_{\max} - \sigma_{\min}$. Ширину перехода от упругой деформации к пластической положим $\varepsilon = \varepsilon_{\min} - \varepsilon_{\max}$. $\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}}$ — отношение максимального напряжения, соответствующего упругой деформации к минимальному напряжению, соответствующему пластической деформации.

Все перечисленные выше деформационные характеристики рассчитаны для A и G ориентровок с 5% точечных дефектов и без дефектов и сведены в табл. 3.

Экспериментальное отношение пределов текучести A и G ориентровок при низких скоростях деформации составляет $\frac{\sigma_{0.2\text{EXP}}^A}{\sigma_{0.2\text{EXP}}^G} = 0.34$, что в 4 раза превышает отношение $\frac{\sigma_{\min}^A}{\sigma_{\min}^G}$.

3.4. Эволюция дислокационной плотности

Физическая величина скалярной плотности дислокаций ρ_V рассчитывалась как отношение суммарной длины L_{Σ}^{tot} дислокационных сегментов в каждый момент

времени к объему V кристаллита

$$\rho_V = \frac{L_{\Sigma}^{\text{tot}}}{V}. \quad (3)$$

Построены кривые изменения дислокационной плотности с использованием потенциалов [26,27] для A ориентровки для бездефектных нанокристаллов и нанокристаллов с 5% вакансий (рис. 6).

Для кривой A^{Sun} до степени деформации, равной $\varepsilon = 0.045$, идеальный нанокристалл не содержит дислокаций (область упругого деформирования). При $\varepsilon = (0.045-0.050)$ увеличение суммарной длины L_{Σ}^{tot} дислокационных сегментов происходит скачкообразно до величины $\rho = 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. При $\varepsilon = 0.16$ суммарная

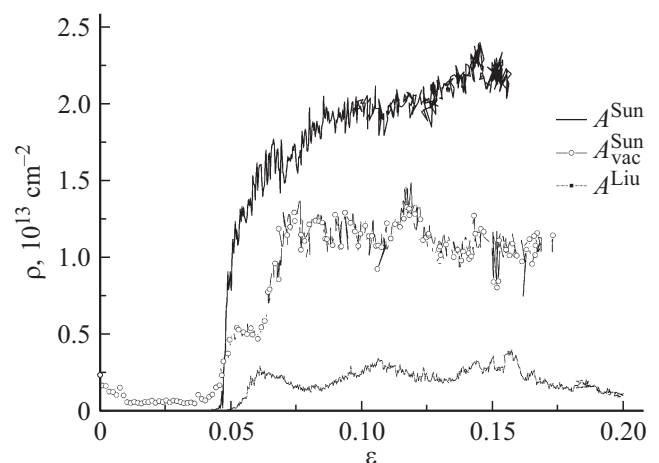


Рис. 6. Эволюция дислокационной плотности в процессе деформирования A нанокристалла. A^{Sun} — межатомный потенциал [26], бездефектный кристалл; $A^{\text{Sun}}_{\text{vac}}$ — межатомный потенциал [26], 5% вакансий; A^{Liu} — межатомный потенциал [27], бездефектный кристалл.

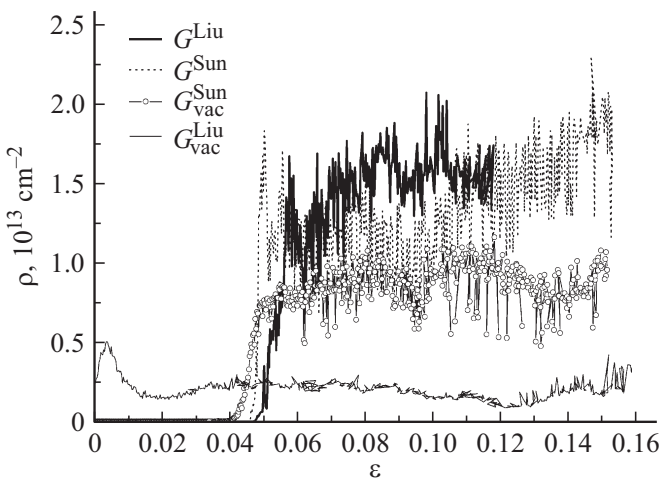


Рис. 7. Эволюция дислокационной плотности в процессе деформирования G нанокристалла. G^{Sun} — межатомный потенциал [26], бездефектный кристалл; $G^{\text{Sun}}_{\text{vac}}$ — межатомный потенциал [26], 5% вакансий; G^{Liu} — межатомный потенциал [27], бездефектный кристалл; $G^{\text{Liu}}_{\text{vac}}$ — межатомный потенциал [27], 5% вакансий.

длина дислокационных сегментов составляет около $L^{\text{tot}}_{\Sigma} = 3 \mu\text{m}$ в объеме $V = 1.4 \cdot 10^{-14} \text{mm}^3$, что соответствует $\rho = 2 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$. Наблюдается накопление дислокаций в объеме.

Для кривой $A^{\text{Sun}}_{\text{vac}}$ при $\epsilon < 0.045$ зафиксирована ненулевая плотность дислокаций. При $\epsilon = (0.045-0.075)$ увеличение суммарной длины L^{tot}_{Σ} дислокационных сегментов происходит скачкообразно в два этапа от 0 до $\rho = 5 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ и от $\rho = 5 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ до $\rho = 1.4 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$. При деформации до $\epsilon = 0.16$ не наблюдается накопление дислокаций в объеме, а некоторый спад до величины $\rho = 10^{13} \text{cm}^{-2}$.

Для кривой A^{Liu} при $\epsilon < 0.05$ зафиксирована ненулевая плотность дислокаций. При $\epsilon = (0.045-0.075)$ увеличение дислокационной плотности происходит скачкообразно до $\rho = 2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ и пластическое течение осуществляется при значениях ρ того же порядка. При расчетах деформации A нанокристалла с дефектами [27] плотность дислокаций имеет величину порядка 10^6 , что с учетом выбранного на рис. 6 масштаба, не сравнимо с приведенными на рис. 6 значениями.

Построены кривые изменения дислокационной плотности с использованием потенциалов [26,27] для G ориентировки для бездефектных нанокристаллов и нанокристаллов с 5% вакансий (рис. 7).

Для кривой G^{Sun} при $\epsilon < 0.04$ дислокаций не наблюдалось, при $\epsilon = 0.04$ дислокационная плотность ρ меняется скачком до $\rho = 2.25 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$. При увеличении степени деформации значение плотности ρ меняется скачкообразно и не превышает $\rho = 2 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.

Для кривой G^{Liu} при $\epsilon < 0.05$ дислокаций не наблюдалось, при $\epsilon = 0.05$ дислокационная плотность ρ меняется скачком до $\rho = 1.5 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$. При увеличении

степени деформации значение плотности ρ меняется скачкообразно и не превышает $\rho = 2 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.

Для кривой $G^{\text{Sun}}_{\text{vac}}$ при $\epsilon < 0.04$ дислокаций не наблюдалось, при $\epsilon = 0.04$ дислокационная плотность ρ меняется скачком до $\rho = 5 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$. При увеличении степени деформации значение плотности ρ меняется скачкообразно и не превышает $\rho = 10^{13} \text{cm}^{-2}$.

Ход кривой $G^{\text{Liu}}_{\text{vac}}$ кардинально отличается от хода кривых G^{Sun} , $G^{\text{Sun}}_{\text{vac}}$, G^{Liu} . Значения ρ не превышают $5 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-2}$.

3.5. Изменение скорости деформации и потенциальной энергии в процессе деформации

Модуль мгновенной скорости деформации $|\dot{\epsilon}|$ моделируемых нанокристаллитов рассчитывался как

$$\dot{\epsilon} = \left| \frac{l_i - l_{i+1}}{\Delta\tau \cdot l_0} \right|, \quad (4)$$

где l_0 — исходная длина моделируемого кристаллита, l_i — длина на i -м шаге, $\Delta\tau$ — время, за которое длина образца изменилась от l_i до l_{i+1} .

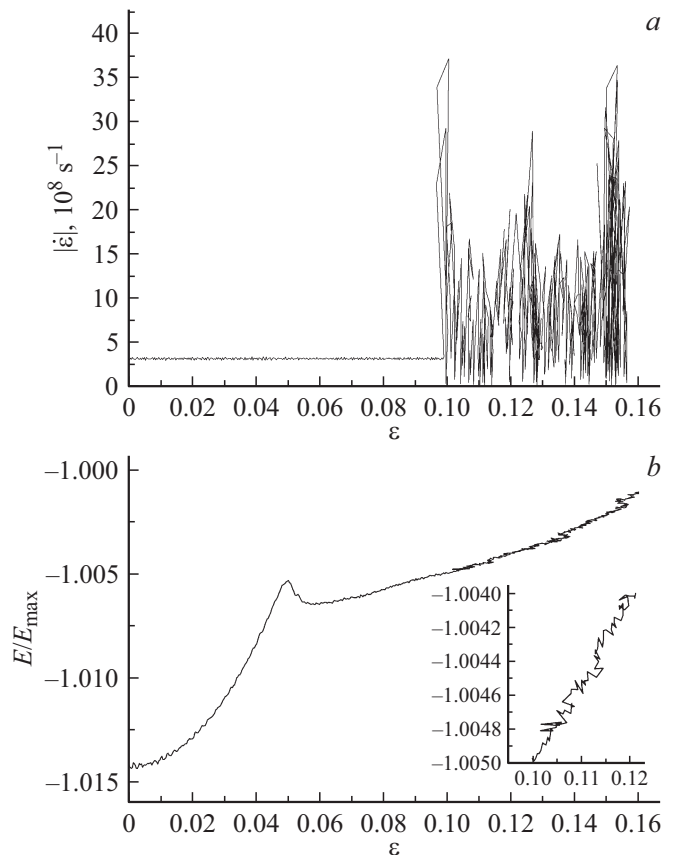


Рис. 8. Модуль скорости деформации в процессе деформации (а), и соответствующее изменение нормированной потенциальной энергии $\frac{E}{E_{\text{max}}}$ (b) для A -монокристаллов, межатомный потенциал [26].

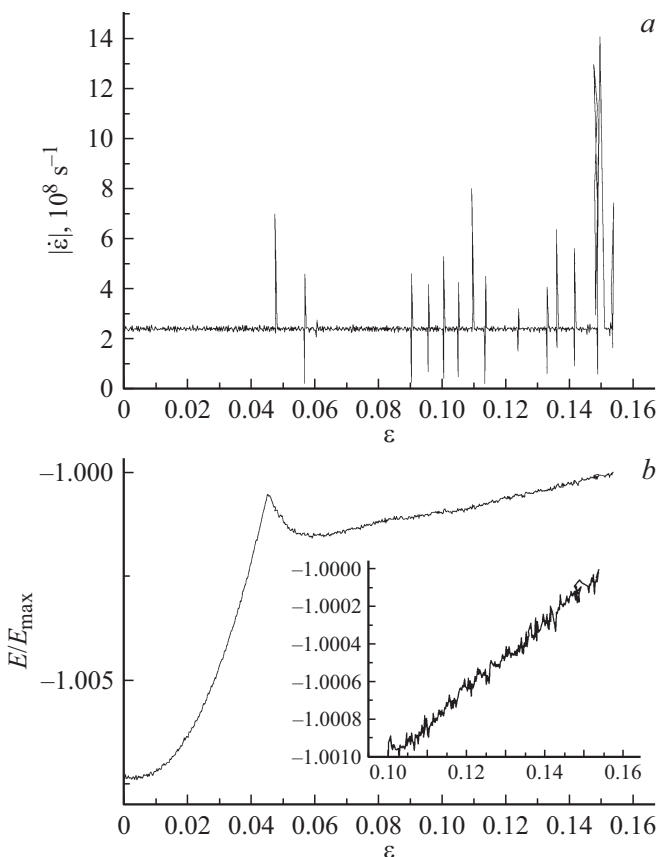


Рис. 9. Модуль скорости деформации с течением процесса деформации (а), и соответствующее изменение потенциальной энергии (б) для G-монокристаллов, межатомный потенциал [26].

На рис. 8, а показана зависимость скорости $\dot{\epsilon}$ деформации от степени деформации (для удобства здесь и далее зависимость от времени τ заменили на зависимость от степени деформации ϵ) для А ориентировки и межатомного потенциала [26].

Видно (рис. 8, а), что деформационная скорость $\dot{\epsilon}$ постоянна при $\epsilon < 0.1$ и равна $3 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. При $\epsilon > 0.1$ характер кривой принимает неустойчивый характер, на кривой можно наблюдать аномальные скачки, максимальный из которых соответствует скорости деформации, почти на порядок превосходящий средний модуль скорости $|\dot{\epsilon}| = 6.3 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. Остальные скачки превосходят среднюю скорость в 2–8 раз. Модуль скорости принимает значения в интервале $0 < |\dot{\epsilon}| < 3.8 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$.

На рис. 8, б показано изменение нормированной потенциальной энергии E/E_{\max} системы атомов в зависимости от ϵ для А ориентировки, межатомный потенциал [26]. Локальный максимум наблюдается при $\epsilon = 0.05$, что соответствует зарождению дислокаций. При $0.05 < \epsilon < 0.06$ наблюдается монотонное убывание потенциальной энергии, а при $\epsilon > 0.06$ виден слабый монотонный рост. При $\epsilon > 0.1$ кривая принимает характерную пилообразную форму с горизонтальной компонентой зубчатости (вставка на рис. 8, б).

На рис. 9, а показана зависимость скорости $\dot{\epsilon}$ деформации от степени деформации для G ориентировки, межатомный потенциал [26].

Видно (рис. 9, а), что деформационная скорость $\dot{\epsilon}$ постоянна при $\epsilon < 0.045$ и равна $2.4 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. При $\epsilon > 0.045$ на кривой наблюдаются аномальные скачки, максимальный из которых соответствует скорости деформации, почти на порядок превосходящий средний модуль скорости $|\dot{\epsilon}| = 6.3 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$. Остальные скачки превосходят среднюю скорость в 2–8 раз. Модуль скорости принимает значения в интервале $0 < |\dot{\epsilon}| < 3.8 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$.

На рис. 9, б показано изменение нормированной потенциальной энергии E/E_{\max} системы атомов в зависимости от ϵ для А ориентировки, межатомный потенциал [26]. Локальный максимум наблюдается при $\epsilon = 0.05$, что соответствует зарождению дислокаций. При $0.05 < \epsilon < 0.06$ наблюдается монотонное убывание потенциальной энергии. При $\epsilon > 0.06$ виден слабый монотонный рост. При $\epsilon > 0.1$ кривая принимает характерную пилообразную форму с горизонтальной компонентой зубчатости (вставка на рис. 8, б).

Для G ориентировки наблюдается другая картина. Аномальные скачки скорости немногочисленны, междислокационное взаимодействие сказывается в меньшей степени, деформирование как процесс протекает более однородно.

4. Обсуждение результатов

Свидетельство неоднородности деформации на начальных этапах моделирования — это образование параллельных полос, расположенных под углом примерно 45° к оси нагружения (рис. 1). Экспериментально такие полосы наблюдаются (полосы Чернова–Людерса) в виде узких тонких линий на полированной или шлифованной поверхности образца при достижении предела текучести. Такие полосы, как и другие эффекты, сопряженные с неоднородностью и неустойчивостью деформации, свидетельство локализованной пластичности, регистрируются методом цифровой статистической спекл-фотографии. Этим методом удается *in situ* регистрировать области, в которых при заданном приросте общей длины образца локализуется деформация материала [32].

На микроскопическом уровне неоднородность деформации очевидна: движение дислокаций является скачкообразным. На макроскопическом уровне свидетельством неоднородности являются полосы Чернова–Людерса, полосы скольжения, ямки травления, эффект Портевена–Ле Шателье. Последний характерен для сплавов и заключается в повторяющемся возникновении локализованных или распространяющихся деформационных полос, вызывающих скачки деформации на деформационных кривых [33].

Экспериментально деформационные кривые „напряжение σ –деформация ϵ “ строятся для низких и средних скоростей деформации (до $v \approx 10^3 \text{ s}^{-1}$) для металлов и

сплавов с исходной дефектной структурой, и характеризуют деформационное поведение материалов под нагрузкой. Для высоких ($v > 10^3 \text{ s}^{-1}$) скоростей деформации такие кривые экспериментально не строятся.

Деформационным кривым (рис. 2, 3, 4, 5) ставились в соответствие расчеты по изменению дислокационной плотности (рис. 6, рис. 7), деформационной скорости (рис. 8, а, 9, а) и потенциальной энергии (рис. 8, б, 9, б).

Непосредственно (для оценки упрочнения материала) измерить суммарную длину дислокационных сегментов в объеме кристаллита экспериментально невозможно (используются методики, позволяющие косвенно определить указанную величину). В настоящей работе рассчитывается дислокационная плотность как отношение суммарной длины дислокационных сегментов к объему моделируемой ячейки.

Деформация бездефектных кристаллов в упругой области (потенциал Sun) сопровождается линейным ростом деформирующих напряжений (рис. 2, 3), отсутствием дислокаций (рис. 6, 7), ростом потенциальной энергии (рис. 8, б, рис. 9, б), при этом скорость деформации является константой (рис. 8, а, 9, а). При достижении напряжений σ_{\max} происходит зарождение дислокаций. После чего в узкой области $\Delta\epsilon$ деформирующее напряжение падает скачком до σ_{\min} , а дислокационная плотность ρ возрастает скачком до $\rho \approx 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. При этом потенциальная энергия падает, а деформационная скорость продолжает оставаться практически неизменной. С дальнейшим ростом степени деформации, дислокационная плотность и потенциальная энергия возрастают, скорость деформации локально меняется скачками и, в общем случае, может достигать отрицательных значений, деформирующие напряжения примерно постоянны и достигают $0.2\sigma_{\max}$.

Наличие вакансий влияет на резкое скачкообразное падение деформирующего напряжения в узкой области $\Delta\epsilon$, теперь оно происходит в два этапа. Первый этап, как и в случае бездефектного нанокристалла, связан с резким падением потенциальной энергии, связанной с образованием дислокаций, но при наличии в системе вакансий с некоторого момента образованные дислокации начинают взаимодействовать с вакансиями, происходит аннигиляция, и потенциальная энергия повышается, для последующей деформации требуются более высокие напряжения, чем в случае, если бы аннигиляции не происходило. Введение вакансий способствует размытию перехода от деформирования при максимальном напряжении σ_{\max} к деформированию при минимальном напряжении σ_{\min} .

Кривые дислокационной плотности для нанокристаллов с вакансиями (рис. 4) (для обеих ориентровок) лежат заметно ниже кривых для изначально бездефектных кристаллов.

Наличие вакансий понижает напряжения зарождения дислокаций σ_{\max} в 1.5–2 раза, но затрудняет скольжение дислокаций, увеличивая среднее значение напряжений

для скольжения $\frac{\dot{\sigma}}{\sigma_{\max}}$ в 1.5–3 раза, последнее связано с аннигиляцией вакансий и образующихся дислокаций: носителей деформации становится меньше и напряжения пластического течения возрастают.

Наличие примесных атомов водорода (рис. 5) влечет зарождение дислокаций при меньших степенях деформации, при этом σ_{\max} не изменяется (*A* ориентровка), либо на несколько процентов возрастает (*G* ориентровка).

Расчет показывает, что *G* ориентровка более пластична, чем *A* ориентровка. Во-первых, напряжения $\frac{\dot{\sigma}}{\sigma_{\max}}$ для *A* ориентровки заметно выше, чем для *G* ориентровки для всех рассмотренных потенциалов межатомного взаимодействия и наличие дефектов на это не влияет. Во-вторых, эволюция дислокационной плотности для *G* ориентровки характеризуется накоплением дислокаций и их спадом, чему соответствует колебание плотности в широких пределах, при практически неизменном уровне плотности с увеличением дислокационной плотности. Для *A* ориентровки дислокационная плотность имеет стабильный монотонный рост. Значит, для *A* ориентровки характерно накопление дислокаций в объеме, а для *G* — выход дислокаций, осуществляющих пластическую деформацию на свободную поверхность. Дислокации в объеме, которые не могут выйти на поверхность — это дислокационные барьеры, для преодоления которых требуются повышенные напряжения.

Экспериментально установлено, что максимальные значения для плотности дислокаций не превосходят 10^{13} cm^{-2} . Можно предположить, что плотность дислокаций 10^{13} cm^{-2} является естественным пределом для кристаллической решетки монокристалла.

Потенциал Liu демонстрирует завышенное в 2–4 раза напряжение пластического течения по сравнению с потенциалом Sun. При этом кривые дислокационной плотности принимают низкие значения. Для *A* ориентровки околонулевые, для *G* ориентровки порядка 10^{12} cm^{-2} . Потенциал Sun лучше описывает деформационное поведение магния в целом, чем потенциал Liu.

Кривые модуля скорости имеют неустойчивый характер, наблюдаются локальные скачки в процессе деформации. До момента зарождения дислокаций были достигнуты большие (сдвиговые) напряжения, которые обеспечили разгон дислокаций до больших скоростей. В результате скорость пластической деформации за счет движения дислокаций значительно превышает скорость внешней (заданной) деформации, с которой производится сжатие — скорость деформации может оказаться отрицательной. Аномальные скачки скорости также как и неустойчивый характер кривой $\frac{E}{E_{\max}}(\epsilon)$ свидетельствуют о междислокационном взаимодействии в процессе сжатия, преодолении дислокационных барьеров. Для *G* ориентровки, дислокационных барьеров не наблюдается экспериментально и при данном расчете. Скорость для этой ориентровки почти постоянна с редкими выбросами значений. Для *A* ориентровки с преодо-

лением плотности в $2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ наблюдается резкое изменение скорости деформации, начиная с $\varepsilon = 0.1$. При $\varepsilon > 0.1$ наблюдалось образование дислокационных конфигураций, которые, по-видимому, и обуславливают аномальные выбросы скорости, а также горизонтальную компоненту зубчатости на кривой зависимости потенциальной энергии.

Известно, что [0001]-монокристаллы магния в результате пластического деформирования образуют дислокационные барьеры, электронно-микроскопически наблюдаемые в качестве прямолинейных дислокаций [6], молекулярно-динамически рассчитываемые в качестве размазанного (в двух либо трех плоскостях) ядра $(c + a)$ -дислокаций [34].

Временная зависимость скорости деформации является показателем, позволяющим выявить неоднородность деформационных процессов. С одной стороны, скорость является макрохарактеристикой, которую легко задать внешним образом. С другой стороны, изменение деформационной скорости от момента к моменту, при постоянном внешнем усилии, показывает различия и неоднородность пластического течения.

5. Заключение

Проведено атомистическое моделирование деформации сжатием идеальных [0001]-нанокристаллов магния и $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов при $T = 300\text{--}375 \text{ К}$.

Пластическое течение магния, как и любого другого металла, содержит в себе три уровня: микроскопический, связанный с движением дислокаций и дисклинаций, двойников; макроскопический, соответствующий усредненному пластическому отклику в континуальном приближении, и мезоскопический, физический масштаб которого связан с природой кооперативных явлений. Описания пластичности на микро- и макроуровне однозначно не связаны и требуют исследований, которые позволили бы осуществить переход от атомистического представления пластической деформации к континуальному.

Построены расчетные кривые напряжение-деформация для указанных ориентировок. Характер кривых имеет общие черты. Линейный рост напряжения при низких степенях деформации скачком выходит на плато. Средние напряжения деформации при этом отличаются от максимального на порядок для [0001]-нанокристаллов и на два порядка для $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов (потенциал Sn). Показано, что зарождение и скольжение дислокаций протекает при более высоких напряжениях для [0001]-нанокристаллов чем для $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов.

Рассчитаны кривые зависимости скорости деформации от степени деформации. $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллы деформируются при практически одинаковой скорости $\dot{\varepsilon} \approx 2.4 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$. на кривой наблюдаются несколько аномальных скачков скорости. [0001]-нанокристаллы дефор-

мируются при постоянной скорости $\dot{\varepsilon} \approx 3 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$ до степени деформации $\varepsilon = 0.1$, после чего скорость принимает значения в широком диапазоне $0 < \dot{\varepsilon} < 4 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$.

Роль междислокационного взаимодействия в процессе деформирования велика для [0001]-нанокристаллов, для $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов незначительна.

Рассчитано изменение дислокационной плотности в процессе деформации. Показано, что в случае [0001]- и $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов магния накопление дислокаций не превышает плотности в 10^{13} см^{-2} . Однако для [0001]-нанокристаллов происходит монотонное накопление дислокаций в объеме, в то время как для $[1\bar{1}01]$ -нанокристаллов происходит накопление и сброс дислокаций, что позволяет поддерживать уровень дислокационной плотности на постоянном уровне $\rho = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$.

Наличие точечных дефектов влияет на ход расчетных деформационных кривых. Ввиду аннигиляции дислокаций и вакансий напряжения пластического течения выше, чем в случае исходных бездефектных нанокристаллов.

Благодарности

Расчеты проводились на суперкомпьютере ИММ УрО РАН „УРАН“. Автор благодарит центр коллективного пользования ИММ УрО РАН „Суперкомпьютерный центр ИММ УрО РАН“ (СКЦ ИММ УрО РАН).

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме „Давление“ № АААА-А18-118020190104-3.

Конфликт интересов

У автора нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J. Robson. Metallurg. Mater. Trans. A **45**, 5226 (2014).
- [2] E.W. Kelly, W.F. Hosford. Trans. Met. Soc. AIME **242**, 5 (1968).
- [3] J. Zhang, S.P. Joshi. J. Mech. Phys. Solids **60**, 945 (2012).
- [4] W.F. Shelly, R.R. Nash. Trans. Metallurg. Soc. AIME **218**, 416 (1960).
- [5] Б.А. Гринберг, М.А. Иванов, О.В. Антонова, А.М. Власова, Н.А. Кругликов, А.В. Плотицкий. Изв. вуз. Физика **54**, 58 (2011).
- [6] Б.А. Гринберг, М.А. Иванов, О.В. Антонова, А.М. Власова. Кристаллография **57**, 603 (2012).
- [7] R.L. Bell, R. Cahn. Proc. Roy. Soc. A **239**, 494 (1957).
- [8] T. Obara, H. Yoshinga, S. Morozumi. Acta Met. **21**, 845 (1973).
- [9] J.F. Stohr, J.P. Poirier. Phil. Mag. **25**, 1313 (1972).
- [10] F.F. Lavrentev, Yu.A. Pochil. Mater. Sci. Eng. **32**, 121 (1978).
- [11] C.M. Bayer, B. Le, B. Cao. Scripta Mater. **62**, 536 (2010).
- [12] T. Kitahara, S. Ando, M. Tsushida, H. Kitahara, H. Tonda. Rey Eng. Mater. **345–346**, 129 (2007).

- [13] А.М. Власова, А.Ю. Никонов. Кристаллография **63**, 1 (2018).
- [14] X.-Z. Tang, Y.-F. Guo, S. Xu, Y.-S. Wang. Phil. Mag. **95**, 2013 (2015).
- [15] B. Syed, J. Geng, R.K. Mishra, K.S. Kumar. Scripta Mater. **67**, 700 (2012).
- [16] P.B. Hirsch, J.S. Lally. Phil. Mag. **12**, 595 (1965).
- [17] S.R. Agnew, J.A. Horton, M.H. Yoo. Metall. Mater. Trans. A **33**, 851 (2002).
- [18] J. Geng, M.F. Chisholm, R.K. Mishra, K.S. Kumar. Phil. Mag. Lett. **94**, 377 (2014).
- [19] B. Li, P. Yan, M. Sui, E. Ma. Acta Mater. **58**, 173 (2010).
- [20] A. Chapuis, J.H. Driver. Acta Mater. **59**, 1986 (2011).
- [21] T. Nogaret, W. Curtin, J. Yasi, L. Hector, D. Trinkle. Acta Mater. **58**, 4332 (2010).
- [22] D. Phelan, N. Stanford, B. Thijssse, J. Sietsma. Mater. Sci. Forum **638–642**, 1585 (2010).
- [23] O.V. Antonova, A.Y. Volkov, D.A. Komkova, B.D. Antonov. Mater. Sci. Eng. A **706**, 319 (2017).
- [24] S. Plimpton. J. Comp. Phys. **117**, 1 (1995).
- [25] A. Stukowski. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2010).
- [26] D.Y. Sun, M.I. Mendeleev, C.A. Becker, K. Kudin, T. Haxhimali, M. Asta, J.J. Hoyt, A. Karma, D. Srolovitz. Phys. Rev. B **73**, 024116 (2006).
- [27] X.-Y. Liu, J.B. Adams, F. Ercolessi, J.A. Moriarty. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **4**, 293 (1996).
- [28] D.E. Smirnova, S.V. Starikov, A.M. Vlasova. Comp. Mater. Sci. **154**, 295 (2018).
- [29] A. Stukowski, K. Albe. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 085001 (2010).
- [30] A. Stukowski. JOM **66**, 399 (2014).
- [31] A. Stukowski, V.V. Bulatov, A. Arsenlis. Mod. Simul. Mater. Sci. Eng. **20**, 085007 (2012).
- [32] М.А. Лебедкин, Л.Р. Дунин-Барковский. ФТТ **40**, 487. (1998).
- [33] В.В. Горбатенко, В.И. Данилов, Л.Б. Зуев. ЖТФ **87**, 372 (2017).
- [34] T. Nogaret, W. Curtin, J. Yasi, L. Hector, D. Trinkle. Acta Mater. **58**, 4332 (2010).

Редактор Ю.Э. Китаев