



УДК 538.951

DOI 10.17073/0368-0797-2023-6-681-687

Оригинальная статья
Original article

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ПРОЧНОСТЬ АУСТЕНИТА ПРИ НАЛИЧИИ В КРИСТАЛЛЕ ПОРЫ ИЛИ ВАКАНСИЙ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

И. В. Зоря¹, Г. М. Полетаев², Р. Ю. Ракитин³

¹ Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

² Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

³ Алтайский государственный университет (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, Комсомольский пр., 100)

✉ zorya.i@mail.ru

Аннотация. Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния поры разного диаметра, а также соответствующей концентрации отдельных вакансий на теоретическую прочность аустенита при разной температуре. Деформация в модели осуществляется путем сдвига с постоянной скоростью 20 м/с. Рассматривается сдвиг вдоль двух направлений: $[112]$ и $[111]$. Расчетная ячейка аустенита имеет форму прямоугольного параллелепипеда длиной 14,0 нм, высотой 14,0 нм и шириной 5,1 нм. Для описания межатомных взаимодействий использовался ЕАМ потенциал Лау, хорошо воспроизводящий структурные, энергетические и упругие характеристики аустенита. Кривые напряжение – деформация, полученные для обоих рассматриваемых направлений сдвига, имеют аналогичный вид. В отсутствие источников дислокаций пластическая деформация осуществляется путем формирования дислокационных диполей (дислокаций с противоположными векторами Бюргерса). Наличие поры существенно снижает предельную прочность аустенита. Обнаружено, что случайно разбросанные по объему расчетной ячейки одиночные вакансии также приводят к снижению предельной прочности, но, естественно, не так сильно, как пора. Испускание дислокаций порой при деформации происходит путем формирования дислокационных петель, как правило, сразу в двух плоскостях скольжения. Сильнее влияние поры и вакансий на предельную прочность наблюдается при низких температурах. При увеличении температуры влияние дефектов на критическое напряжение, при котором происходит образование дислокаций, снижается. С увеличением размера поры, как и концентрации вакансий, прочность уменьшается. При этом наиболее сильная зависимость наблюдается для пор диаметром до 1 нм. Влияние концентрации вакансий в рассматриваемом диапазоне на предельную прочность оказалось сравнительно более плавное и почти линейное.

Ключевые слова: молекулярная динамика, аустенит, дислокация, пора, вакансия, теоретическая прочность

Для цитирования: Зоря И.В., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Теоретическая прочность аустенита при наличии в кристалле поры или вакансий: молекулярно-динамическое исследование. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2023;66(6):681–687.

<https://doi.org/10.17073/0368-0797-2023-6-681-687>

THEORETICAL STRENGTH OF AUSTENITE IN THE PRESENCE OF A PORE OR VACANCIES IN THE CRYSTAL: MOLECULAR DYNAMICS STUDY

I. V. Zorya¹, G. M. Poletaev², R. Yu. Rakitin³

¹ Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654007, Russian Federation)

² Polzunov Altai State Technical University (46 Lenina Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

³ Altai State University (100 Komsomol'skii Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

✉ zorya.i@mail.ru

Abstract. The molecular dynamics method was used to study the influence of pores of different diameters, as well as the corresponding concentration of individual vacancies, on the theoretical strength of austenite at different temperatures. The deformation in the model was carried out by shear at a constant rate of 20 m/s. We considered a shear along two directions: $[112]$ and $[111]$. The computational austenite cell had the shape of a rectangular parallelepiped 14.0 nm long, 14.0 nm high, and 5.1 nm wide. To describe interatomic interactions, the Lau EAM potential was used, which reproduces

well the structural, energy, and elastic characteristics of austenite. The stress-strain curves obtained for both considered shear directions had a similar form. In the absence of dislocation sources, plastic deformation was carried out by the formation of dislocation dipoles (dislocations with opposite Burgers vectors). The presence of a pore significantly reduced the yield strength of austenite. In this case, it was found that single vacancies randomly scattered over the volume of the computational cell also lead to a decrease in the yield strength, but, of course, not as much as the pore. The emission of dislocations during deformation occurred by the formation of dislocation loops, as a rule, in two slip planes at once. The effect of pores and vacancies on the yield strength was stronger at low temperatures. As the temperature increased, the effect of defects on the critical stress at which dislocations were formed decreased. With an increase in the pore size, as well as the concentration of vacancies, the yield strength decreased. In this case, the strongest dependence was observed for pores up to 1 nm in diameter. The influence of the concentration of vacancies in the considered range on the yield strength turned out to be comparatively smoother and almost linear.

Keywords: molecular dynamics, austenite, dislocation, pore, vacancy, theoretical strength

For citation: Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu. Theoretical strength of austenite in the presence of a pore or vacancies in the crystal: molecular dynamics study. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2023;66(6):681–687. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2023-6-681-687>

ВВЕДЕНИЕ

При пластической деформации в качестве источников дислокаций в поликристаллических материалах помимо границ раздела (границ зерен и их тройных стыков, межфазных границ, поверхностей) важную роль играют поры и микропустоты [1–3]. Однако работ, посвященных исследованию механизмов пластической деформации на атомном уровне с участием пор, сравнительно немного. К настоящему времени с помощью компьютерного моделирования показано, что испускание дислокаций порами при деформации происходит за счет формирования дислокационных петель [3–6], причем авторы работ [5; 6] утверждают, что в ГЦК кристаллах при этом петли формируются одновременно в двух плоскостях скольжения. С увеличением размера поры уменьшается критическое напряжение, при котором происходит образование дислокации [5; 6].

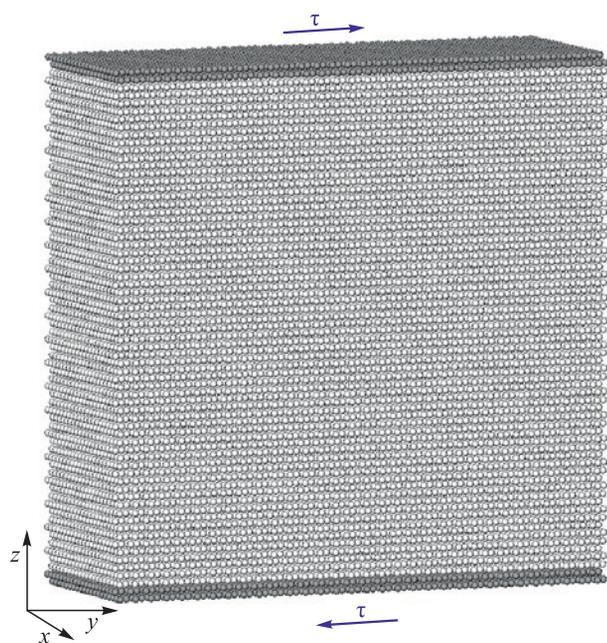


Рис. 1. Расчетная ячейка для моделирования сдвига вдоль оси y (направления $[\bar{1}\bar{1}2]$) в ГЦК железе

Fig. 1. Calculation cell for modeling the shift along the y axis (direction $[\bar{1}\bar{1}2]$) in the FCC iron

Точечные дефекты, например решеточные вакансии, также, очевидно, приводят к снижению теоретической прочности, однако влияние их концентрации на прочность изучено недостаточно, особенно в сравнении с влиянием их скоплений, в частности, пор. Настоящая работа посвящена сравнительному исследованию методом молекулярной динамики влияния вакансий и поры на теоретическую прочность аустенита в зависимости от температуры и концентрации вакансий или размера поры. Интерес к аустениту вызван тем, что он является основой многих сталей, имеющих большое практическое значение, например, стали Гадфильда [7; 8]. Кроме того, качественные результаты, полученные для аустенита в настоящей работе, очевидно, можно будет распространить на другие металлы с ГЦК кристаллической решеткой.

Ранее [9] методом молекулярной динамики было проведено исследование скорости скольжения краевой и винтовой дислокаций в аустените и стали Гадфильда в зависимости от температуры и скорости деформирования. Была рассчитана энергия образования рассматриваемых дислокаций. Настоящее исследование является продолжением работы [9].

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Расчетная ячейка аустенита в молекулярно-динамической модели имела форму прямоугольного параллелепипеда (рис. 1) длиной 14,0 нм, высотой 14,0 нм и шириной 5,1 нм. Количество атомов изначально составляло 87 040. Ориентация координатных осей соответствовала следующим кристаллографическим направлениям в ГЦК решетке: $x - [\bar{1}10]$, $y - [\bar{1}\bar{1}2]$, $z - [111]$. В работе рассматривался сдвиг вдоль двух направлений: оси y (как показано на рис. 1) и оси z . Сдвиг в модели инициировался путем смещения атомов в приграничных областях (на рис. 1 выделены темно-серым цветом). Атомы в этих областях на противоположных сторонах расчетной ячейки в процессе компьютерного эксперимента перемещались в противоположных направлениях с постоянной скоростью 20 м/с. В работе [9] при моделировании особенностей скольжения дислокации в аустените это значение было

выбрано как оптимальное для моделирования сдвига методом молекулярной динамики. Движение остальных атомов в расчетной ячейке никак не ограничивалось, оно описывалось классическими уравнениями движения Ньютона. Граничные условия вдоль остальных осей использовались периодические.

Для описания межатомных взаимодействий в аустените использовался ЕАМ потенциал Лау [10], хорошо воспроизводящий структурные, энергетические и упругие характеристики аустенита [10; 11]. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики составлял 2 фс [12 – 14]. Температуру задавали через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. При задании температуры обязательным являлся учет теплового расширения кристаллической решетки [13 – 15]. Для используемого в работе потенциала межатомного взаимодействия коэффициент теплового расширения равен $18 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, что хорошо согласуется со справочными данными [11]. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе-Гувера. На всем интервале варьирования температуры (от 100 до 1500 К) тип кристаллической решетки ГЦК сохранялся постоянным, полиморфное превращение в настоящей работе не учитывалось.

Пора создавалась в центре расчетной ячейки путем удаления атомов в сферической области. Диаметр поры варьировался в пределах 0,6 – 2,0 нм. Вакансии вводились путем удаления случайных атомов по всему объему расчетной ячейки, кроме приграничных слоев (на рис. 1 выделены темно-серым). Рассматриваемые значения концентрации вакансий соответствовали количеству удаленных атомов при создании пор. После введения дефектов следовала процедура релаксации структуры до достижения равновесного состояния.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 изображены зависимости напряжение – деформация для двух рассматриваемых ориентаций сдвига с постоянной скоростью 20 м/с при температуре 300 К для бездефектного кристалла (1), кристалла, содержащего 79 случайно разбросанных по объему вакансий (2), и кристалла, содержащего пору диаметром 1,2 нм (3). Количество вакансий было равно количеству удаленных атомов при создании рассматриваемой поры и соответствовало в данном случае концентрации 0,09 %.

Теоретическая прочность кристаллов металлов на сдвиг, как известно, очень высока и может достигать более 10 ГПа [1; 5; 6; 16; 17]. Введение всего одной дислокации в чистый кристалл в молекулярно-динамической модели снижает прочность до нескольких сотен МПа [18]. Как видно из рис. 2, пластическая деформация в чистом кристалле аустенита при температуре 300 К начиналась при сдвиге как вдоль оси y , так и вдоль оси z , примерно при том же значении деформации

(12,0 – 12,5 %) и напряжения (9,0 – 9,5 ГПа). Следует подчеркнуть, что идеальный кристалл изначально не содержал каких-либо источников образования дислокаций, даже свободной поверхности. В связи с этим область упругой деформации была сравнительно очень большой.

В отсутствие источников дислокаций пластическая деформация осуществлялась путем формирования дислокационных диполей (дислокаций с противоположными векторами Бюргерса). Полные дислокации сразу формировались в виде пары частичных дислокаций Шокли, разделенных дефектом упаковки. Расстояние между частичными дислокациями, как правило, составляло несколько нанометров, что согласуется с результатами моделирования других авторов [19 – 21]. Наряду с дислокационными диполями, при дальнейшей деформации интенсивно проходил также процесс образования деформационных двойников.

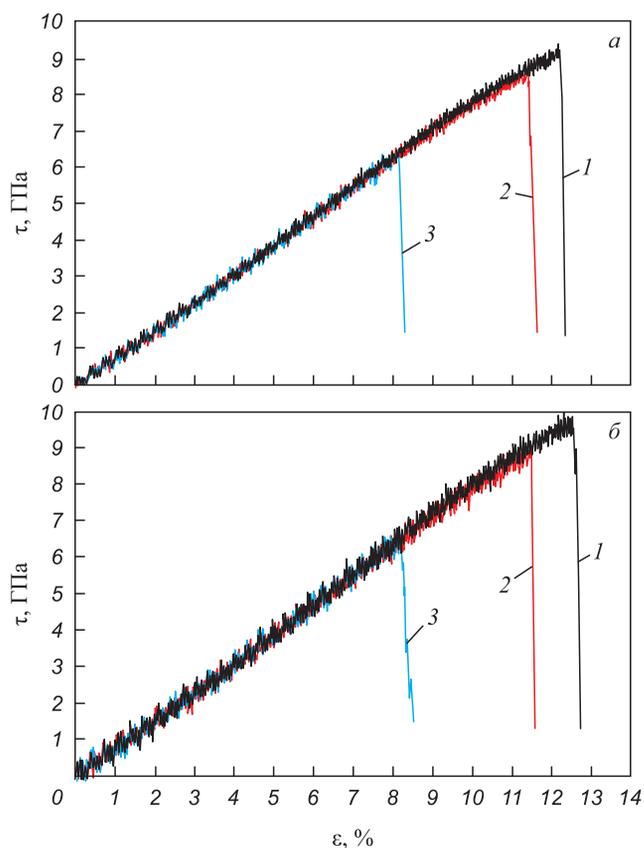


Рис. 2. Зависимости напряжение – деформация при температуре 300 К при сдвиге вдоль оси y (направления $[\bar{1}\bar{1}2]$) (а) и при сдвиге вдоль оси z (направления $[111]$) (б): 1 – в чистом кристалле ГЦК железа; 2 – при наличии 79 вакансий, случайно разбросанных по объему расчетной ячейки; 3 – при наличии поры диаметром 1,2 нм

Fig. 2. Stress – strain dependences at a temperature of 300 K when shifted along the y axis (direction $[\bar{1}\bar{1}2]$) (a) and when shifted along the z axis (direction $[111]$) (b): 1 – in a pure FCC iron crystal; 2 – in the presence of 79 vacancies, randomly scattered over the volume of the calculation cell; 3 – in the presence of a pore with a diameter of 1.2 nm

Как можно видеть на рис. 2, наличие поры диаметром 1,2 нм существенно снижает теоретическую прочность: пластический сдвиг и образование дислокаций происходят при существенно более низких значениях деформации и напряжения (примерно 8,5 % и 6 ГПа соответственно). При этом случайно разбросанные по объему расчетной ячейки вакансии при том же количестве, что и в поре, влияют на предел прочности значительно слабее, однако, что является интересным результатом, все же снижают его: дислокации образуются при деформации примерно 11,5 % и напряжении 8,5 ГПа. Таким образом, даже простые точечные дефекты (вроде вакансий) снижают теоретическую прочность кристалла.

Испускание дислокаций порой при деформации происходило путем формирования дислокационных петель, что согласуется с результатами моделирования других авторов [3 – 6]. Примеры образования подобных петель из поры диаметром 1,2 нм при сдвиге вдоль осей y и z приведены на рис. 3. Можно видеть, что петли формируются в двух плоскостях скольжения, на что указывали также авторы работ [5; 6]. Для изображения дислокаций в расчетной ячейке использовался визуализатор среднего расстояния до ближайших атомов (дает представление о наличии локального растяжения и косвенно о распределении свободного объема). Для каждого атома проводили расчет среднего расстояния до ближайших атомов. Если среднее расстояние незначительно отличалось от расстояния, соответствующего идеальному

кристаллу, атом не выделяли цветом; в противном случае атом закрашивали в тот или иной оттенок.

Температура, как известно, влияет на упругие свойства материала и вероятность образования дислокаций при деформации. Модули упругости в широком диапазоне температур уменьшаются с ростом температуры почти линейно [22 – 24], что обычно связывают с тепловым расширением [22]. Пластическая деформация с ростом температуры в большинстве материалов начинается при меньших значениях напряжения [24 – 26].

На рис. 4 изображены зависимости предельной прочности от температуры при сдвиге вдоль осей y и z . Зависимости приведены для бездефектного кристалла (1), кристалла, содержащего 79 случайно разбросанных по объему вакансий (2), и кристалла, содержащего пору диаметром 1,2 нм (3). Во всех случаях с ростом температуры действительно прочность падает. При этом следует отметить важную особенность: при повышении температуры степень влияния дефектов на теоретическую прочность снижается. Отличия значений предельной прочности для случаев с бездефектным кристаллом, с вакансиями и порой уменьшаются с ростом температуры, стремясь к одному значению (пересечения зависимостей, видимо, следует ожидать при температуре плавления).

На рис. 5 изображены зависимости предельной прочности при температуре 300 К при сдвиге вдоль осей y и z (рис. 5, б) от количества (%) удаленных из

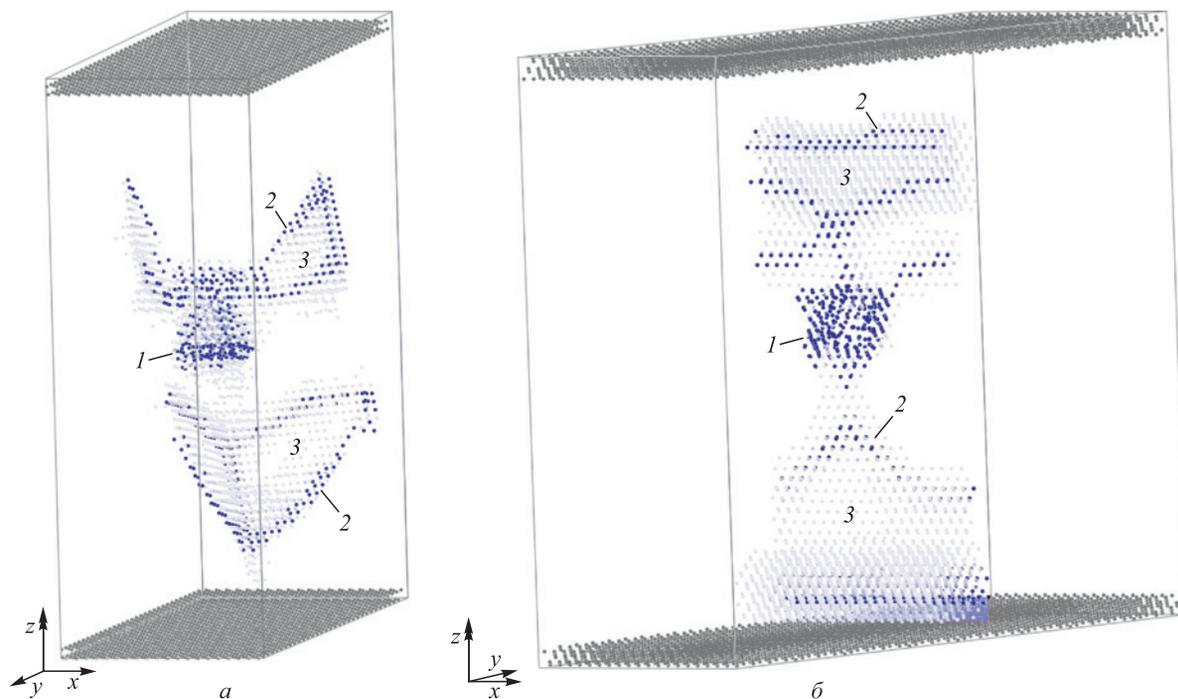


Рис. 3. Испускание дислокаций порой в виде дислокационных петель при сдвиге вдоль оси y (а) и оси z (б): 1 – пора; 2 – частичная дислокация; 3 – дефект упаковки

Fig. 3. Emission of dislocations by a pore in the form of dislocation loops when shifted along the y axis (а) and when shifted along the z axis (б): 1 – pore; 2 – partial dislocation; 3 – packaging defect

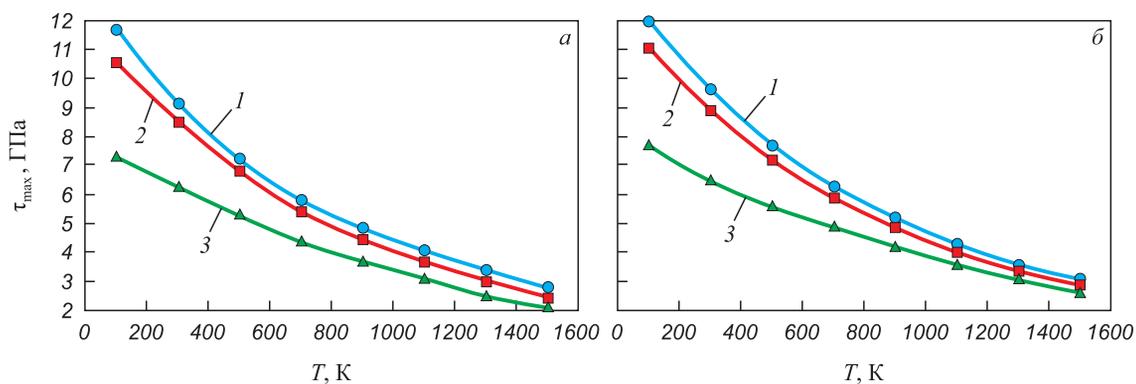


Рис. 4. Зависимости прочности от температуры при сдвиге вдоль оси y (направления $[\bar{1}\bar{1}2]$) (а) и при сдвиге вдоль оси z (направления $[111]$) (б):
 1 – в чистом кристалле ГЦК железа; 2 – при наличии 79 вакансий, случайно разбросанных по объему расчетной ячейки; 3 – при наличии поры диаметром 1,2 нм

Fig. 4. Dependences of strength on temperature when shifted along the y axis (direction $[\bar{1}\bar{1}2]$) (a) and when shifted along the z axis (direction $[111]$) (b):
 1 – in a pure FCC iron crystal; 2 – in the presence of 79 vacancies randomly scattered over the volume calculation cell; 3 – in the presence of a pore with a diameter of 1.2 nm

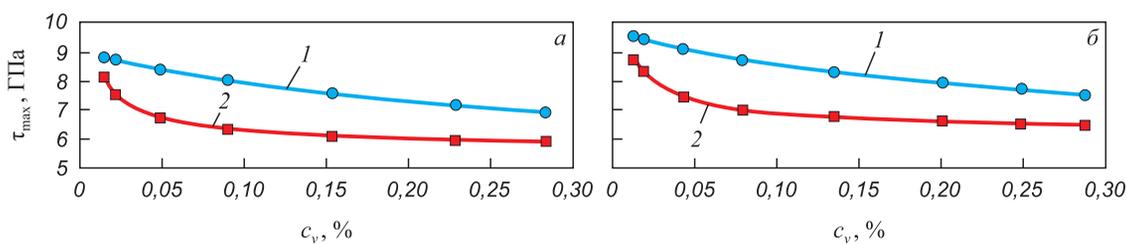


Рис. 5. Зависимости прочности при температуре 300 К от количества удаленных из расчетной ячейки атомов в виде случайно разбросанных вакансий (1) или поры (2) при сдвиге вдоль оси y (направления $[\bar{1}\bar{1}2]$) (а) и при сдвиге вдоль оси z (направления $[111]$) (б)

Fig. 5. Dependences of strength at temperature of 300 K on the number of atoms removed from the calculated cell in the form of randomly scattered vacancies (1) or pores (2) when shifted along the y axis (directions $[\bar{1}\bar{1}2]$) (a) and when shifted along the z axis (directions $[111]$) (b)

расчетной ячейки атомов c_v в виде отдельных случайно разбросанных вакансий или пор (зависимости 1 и 2 соответственно на рис. 2, 4). Для сравнения: при диаметре поры 1,0 нм $c_v = 0,05\%$, при диаметре поры 1,2 нм $c_v = 0,09\%$, при диаметре 1,6 нм $c_v = 0,23\%$.

Как можно видеть, с ростом как концентрации вакансий, так и радиуса пор прочность снижается. При этом наиболее сильная зависимость наблюдается для малых размеров пор: примерно до 1 нм. При дальнейшем увеличении радиуса поры прочность продолжает снижаться, но гораздо слабее, чем при малых размерах поры. Влияние концентрации вакансий в рассматриваемом диапазоне на теоретическую прочность более плавное и почти линейное.

Выводы

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния поры разного диаметра, а также соответствующей концентрации отдельных вакансий на теоретическую прочность аустенита при разной

температуре. Деформация в модели осуществлялась путем сдвига с постоянной скоростью 20 м/с. Рассматривался сдвиг вдоль двух направлений: $[\bar{1}\bar{1}2]$ и $[111]$. Зависимости напряжение – деформация, полученные для обоих направлений сдвига, имели аналогичный вид. В отсутствие источников дислокаций пластическая деформация осуществлялась путем формирования дислокационных диполей (дислокаций с противоположными векторами Бюргера). Наличие поры существенно снижало предельную прочность аустенита. Обнаружено, что случайно разбросанные по объему расчетной ячейки одиночные вакансии также приводят к снижению предельной прочности, но, естественно, не так сильно, как пора. Испускание дислокаций порой при деформации происходило путем формирования дислокационных петель, как правило, сразу в двух плоскостях скольжения. Сильнее влияние поры и вакансий на предельную прочность наблюдалось при низких температурах. При увеличении температуры влияние дефектов на критическое напряжение, при котором происходило образование дислокаций, снижа-

лось. С увеличением размера поры, как и концентрации вакансий, прочность уменьшалась. При этом наиболее сильная зависимость наблюдалась для пор диаметром до 1 нм. Влияние концентрации вакансий в рассматриваемом диапазоне на предельную прочность оказалось сравнительно более плавное и почти линейное.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

- Seppälä E.T., Belak J., Rudd R.E. Three-dimensional molecular dynamics simulations of void coalescence during dynamic fracture of ductile metals. *Physical Review B*. 2005;71(6):064112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.064112>
- Bobylev S.V., Morozov N.F., Ovid'ko I.A. Dislocation emission by pores in nanocrystalline metals. *Physics of the Solid State*. 2007;49(6):1098–1103. <https://doi.org/10.1134/S1063783407060133>
- Ruestes C.J., Bringa E.M., Stukowski A., Rodríguez Nieva J.F., Tang Y., Meyers M.A. Plastic deformation of a porous bcc metal containing nanometer sized voids. *Computational Materials Science*. 2014;88:92–102. <http://dx.doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.02.047>
- Wang Y., Bi W., Deng L., Zhang X., Tang J., Wang L. Study on the relationship between surface and dislocation of nanoporous copper under cyclic shear loading. *AIP Advances*. 2022;12(3):035318. <https://doi.org/10.1063/5.0085569>
- Traiviratana S., Bringa E.M., Benson D.J., Meyers M.A. Void growth in metals: Atomistic calculations. *Acta Materialia*. 2008;56(15):3874–3886. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.03.047>
- Bringa E.M., Traiviratana S., Meyers M.A. Void initiation in fcc metals: Effect of loading orientation and nanocrystalline effects. *Acta Materialia*. 2010;58(13):4458–4477. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.04.043>
- Zhang F.C., Lv B., Wang T.S., Zheng C.L., Zhang M., Luo H.H., Liu H., Xu A.Y. Explosion hardening of Hadfield steel crossing. *Materials Science and Technology*. 2010;26(2):223–229. <https://doi.org/10.1179/174328408X363263>
- Chen C., Lv B., Ma H., Sun D., Zhang F. Wear behavior and the corresponding work hardening characteristics of Hadfield steel. *Tribology International*. 2018;121:389–399. <https://doi.org/10.1016/j.triboint.2018.01.044>
- Зоря И.В., Поletaев Г.М., Ракитин Р.Ю. Энергия и скорость скольжения краевой и винтовой дислокаций в аустените и стали Гадфильда: молекулярно-динамическое моделирование. *Известия вузов. Черная металлургия*. 2022;65(12):861–868. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2022-12-861-868>
Zorya I.V., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu. Energy and velocity of sliding of edge and screw dislocations in austenite and Hadfield steel: Molecular dynamics simulation. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2022;65(12):861–868. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2022-12-861-868>
- Lau T.T., Forst C.J., Lin X., Gale J.D., Yip S., Van Vliet K.J. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys. *Physical Review Letters*. 2007;98(21):215501. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.215501>
- Oila A., Bull S.J. Atomistic simulation of Fe-C austenite. *Computational Materials Science*. 2009;45(2):235–239. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.09.013>
- Chen C., Zhang F., Xu H., Yang Z., Poletaev G.M. Molecular dynamics simulations of dislocation-coherent twin boundary interaction in face-centered cubic metals. *Journal of Materials Science*. 2022;57:1833–1849. <https://doi.org/10.1007/s10853-021-06837-7>
- Poletaev G.M. Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti–Al system: Molecular-dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2021;133(4):455–460. <https://doi.org/10.1134/S1063776121090041>
- Poletaev G.M., Novoselova D.V., Kaygorodova V.M. The causes of formation of the triple junctions of grain boundaries containing excess free volume in fcc metals at crystallization. *Solid State Phenomena*. 2016;247:3–8. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/SSP.247.3>
- Poletaev G.M., Zorya I.V. Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation. *Technical Physics Letters*. 2020;46(6):575–578. <https://doi.org/10.1134/S1063785020060231>
- Bukreeva K.A., Iskandarov A.M., Dmitriev S.V., Umeno Y., Mulyukov R.R. Theoretical shear strength of FCC and HCP metals. *Physics of the Solid State*. 2014;56(3):423–428. <https://doi.org/10.1134/S1063783414030081>
- Li P.-T., Yang Y.-Q., Xia Zh., Luo X., Jin N., Gao Y., Liu G. Molecular dynamic simulation of nanocrystal formation and tensile deformation of TiAl alloy. *RSC Advances*. 2017;7:48315–48323. <https://doi.org/10.1039/C7RA10010H>
- Krasnikov V.S., Kuksin A.Yu., Mayer A.E., Yanilkin A.V. Plastic deformation under high-rate loading: the multiscale approach. *Physics of the Solid State*. 2010;52(7):1386–1396. <https://doi.org/10.1134/S1063783410070115>
- Zhao Sh., Osetsky Yu.N., Zhang Y. Atomic-scale dynamics of edge dislocations in Ni and concentrated solid solution NiFe alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 2017;701:1003–1008. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.01.165>
- Rodney D., Ventelon L., Clouet E., Pizzagalli L., Willaime F. Ab initio modeling of dislocation core properties in metals and semiconductors. *Acta Materialia*. 2017;124:633–659. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.09.049>
- Hunter A., Beyerlein I.J., Germann T.C., Koslowski M. Influence of the stacking fault energy surface on partial dislocations in fcc metals with a three-dimensional phase field dislocations dynamics model. *Physical Review B*. 2011;84(14):144108. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.144108>
- Штремель М.А. *Прочность сплавов. Ч. 1. Дефекты решетки*. Москва: Металлургия; 1982:280.
- Киттель Ч. *Введение в физику твердого тела*. Москва: Наука, 1978:792.
Kittel Ch. *Elementary Solid State Physics*. John Wiley & Sons; 1962:339.
- Guo J., Wen B., Melnik R., Yao Sh., Li T. Molecular dynamics study on diamond nanowires mechanical properties: Strain rate, temperature and size dependent effects. *Diamond and Related Materials*. 2011;20(4):551–555. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2011.02.016>
- Tachibana T., Furuya H., Koizumi M. Dependence on strain rate and temperature shown by yield stress of uranium dioxide. *Journal of Nuclear Science and Technology*. 1976;13(9):497–502. <https://doi.org/10.1080/18811248.1976.9734063>

26. Cereceda D., Diehl M., Roters F., Raabe D., Perlado J.M., Marian J. Unraveling the temperature dependence of the yield strength in single-crystal tungsten using atomistically-

informed crystal plasticity calculations. *International Journal of Plasticity*. 2016;78:242–265.
<https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2015.09.002>

Сведения об авторах

Information about the Authors

Ирина Васильевна Зоря, д.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой теплогазоводоснабжения, водоотведения и вентиляции, Сибирский государственный индустриальный университет
ORCID: 0000-0001-5748-813X
E-mail: zorya.i@mail.ru

Irina V. Zorya, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof., Head of the Chair of Heat-Gas-Water Supply, Water Disposal and Ventilation, Siberian State Industrial University
ORCID: 0000-0001-5748-813X
E-mail: zorya.i@mail.ru

Геннадий Михайлович Поletaев, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
ORCID: 0000-0002-5252-2455
E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Gennadii M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof., Head of the Chair of Advanced Mathematics, Polzunov Altai State Technical University
ORCID: 0000-0002-5252-2455
E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Роман Юрьевич Ракитин, к.ф.-м.н., доцент, директор колледжа, Алтайский государственный университет
ORCID: 0000-0002-6341-2761
E-mail: movehell@gmail.ru

Roman Yu. Rakitin, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assist. Prof., Director of College, Altai State University
ORCID: 0000-0002-6341-2761
E-mail: movehell@gmail.ru

Вклад авторов

Contribution of the Authors

И. В. Зоря – постановка задачи, анализ литературных источников, обработка результатов, написание основного текста статьи.

I. V. Zorya – problem statement, analysis of literary sources, processing of results, writing the main text.

Г. М. Поletaев – постановка задачи, разработка компьютерной модели, анализ литературных источников, обработка результатов, редактирование финальной версии статьи.

G. M. Poletaev – problem statement, development of a computer model, analysis of literary sources, processing of results, editing the final version of the article.

Р. Ю. Ракитин – создание компьютерной модели, проведение расчетов и получение результатов, получение рисунков и графиков для статьи.

R. Yu. Rakitin – creating a computer model, performing calculations, obtaining results, obtaining drawings and graphs.

Поступила в редакцию 06.02.2023
После доработки 27.02.2023
Принята к публикации 20.07.2023

Received 06.02.2023
Revised 27.02.2023
Accepted 20.07.2023