

На правах рукописи

Фомин Евгений Владимирович

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ И
МАЛОУГЛОВЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ГЦК МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ**

Специальность 1.3.3 (01.04.02) – теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Челябинск – 2021

Работа выполнена на кафедре общей и прикладной физики ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет»

Научный руководитель: **Майер Александр Евгеньевич**, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой общей и прикладной физики ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» (г. Челябинск)

Официальные оппоненты: **Александров Игорь Васильевич**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики ФГБОУ ВО «Уфимский государственный авиационный технический университет» (г. Уфа)

Брюханов Илья Александрович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории наномеханики НИИ Механики и лаборатории многомасштабного моделирования ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова» (г. Москва)

Ведущая организация: «Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук» – филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук (г. Пермь)

Защита состоится 25 февраля 2022 г. на заседании диссертационного совета 24.2.431.01 (Д212.296.03) при ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» по адресу: 454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Челябинского государственного университета. Электронная версия автореферата доступна по адресу: <http://www.csu.ru>

Автореферат разослан «__» _____ г.

ВРИО учёного секретаря

диссертационного совета 24.2.431.01 (Д 212.296.03),

доктор физико-математических наук, доцент

Соколовский В.В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Исследование пластической деформации металлов до сих пор является невероятно актуальной задачей – этот процесс затрагивает физические явления на всех масштабных уровнях, начиная от атомарного уровня, заканчивая макроскопическим [1]. Основным механизмом пластической деформации является движение дислокаций [1-4] и их взаимодействие с другими дефектами кристаллической структуры [5-7].

Границы зерен (ГЗ) представляют собой один из самых распространенных дефектов кристаллической структуры, они в значительной степени определяют пластическую деформацию поликристаллических металлов [8, 9]. ГЗ могут быть как источниками дислокаций, которые проникают в зерна поликристалла, так и барьером, затрудняющим перемещение дислокаций между зернами. [4]. Движение ГЗ под действием внешних нагрузений также является частью пластической деформации в поликристаллах, вклад этого механизма зависит от размера зерен [10-12]. Существует множество экспериментальных и численных исследований, в которых изучаются различные свойства и характеристики ГЗ, например, их структура [13-17], энергия [14, 16], отклик на деформацию [15] возможные состояния ГЗ [16, 17], зарождение дислокаций на ГЗ [15-17]. Несмотря на это, ГЗ до сих пор остаются недостаточно изученным объектом. Это частично связано с тем, что существует множество конфигураций границ, и невозможно описать разнообразную структуру и поведение ГЗ в рамках простой теории. Большой прорыв в изучении границ зерен произошел вследствие развития методов атомистического моделирования, в частности молекулярной динамики (МД). Метод МД позволяет отслеживать внутренние процессы в кристаллах, происходящие во время деформации [14-17], а также наблюдать за изменением кристаллической структуры. Метод МД адекватно описывает пластическую деформацию металлов, данные моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами напрямую или с помощью промежуточной теоретической модели [18]. Влияние движения ГЗ на макроскопический отклик материала также исследуется методом конечных элементов с учетом теории пластичности, которая включает эффекты со стороны границ зерен [19].

Создание сплавов является наиболее перспективным методом повышения прочности материалов за счет управления взаимодействием дислокаций и дефектов кристаллической структуры в процессе пластической деформации. Интерес к исследованию алюминиевых сплавов остается традиционно высоким, поскольку они сочетают в себе малый вес и достаточно высокие прочностные характеристики.

Высокопрочные сплавы на основе алюминия с медью в качестве основного легирующего элемента в настоящее время рассматриваются как возможный материал для защиты космических аппаратов, изготовления самолетов и военной техники [20]. Традиционный метод повышения прочности алюминиевых сплавов заключается в выдержке образцов при повышенной температуре – это называется искусственным старением сплава. В зависимости от легирующих элементов и цели старения температуры и продолжительность обработки могут значительно различаться, но обычно требуются температуры в несколько сотен градусов по Цельсию и продолжительность более нескольких часов. В процессе старения образуются структурированные включения, которые выделяются из твердого раствора и в значительной степени обеспечивает прочность сплава. Для системы алюминий-медь упрочняющие фазы выделяются в следующей последовательности: пересыщенный твердый раствор, зоны Гинье-Престона (ГП), θ'' , θ' и θ фазы [21]. Образование небольших упрочняющих включений обеспечивает увеличение сдвиговой прочности алюминиево-медных сплавов, как это было экспериментально продемонстрировано в работах [22] и показано путем численного моделирования [23]. Твердый раствор атомов примеси также обладает упрочняющими свойствами, так как затрудняет движение дислокаций [24].

Актуальным является исследование процессов пластичности на разных масштабных уровнях. Атомистическое исследование в виде МД моделирования позволяет проследить основные закономерности процесса деформации и вычислить необходимые параметры. Данные МД моделирования служат основой для разработки теоретических моделей процессов пластической деформации, и могут использоваться для параметризации этих моделей. Разработанные и параметризованные модели применяются в численных схемах крупномасштабного моделирования для теоретического исследования механических свойств металлов и сплавов на макроуровне.

Цель диссертационной работы состоит в теоретическом исследовании движения уединенной краевой дислокации и малоугловой ГЗ наклона как совокупности краевых дислокаций в чистых ГЦК металлах (алюминий, медь и никель) и в алюминиево-медных сплавах (твердый раствор меди в алюминиевой матрице и сплав с наноразмерными медными кластерами), а также в разработке соответствующих теоретических моделей.

Задачи диссертационной работы:

1. Проведение численного эксперимента на основе метода МД по исследованию движения малоугловых границ зерен наклона в алюминии, меди, никеле и твердом растворе атомов меди в алюминиевом кристалле.

2. Проведение численного эксперимента на основе метода МД по исследованию движения уединенной краевой дислокации в твердом растворе атомов меди в алюминиевом кристалле и алюминии с наноразмерными медными кластерами.
3. Разработка теоретической модели движения ГЗ как совокупности дислокаций и её верификация и параметризация на основе данных МД моделирования.
4. Разработка теоретической модели движения краевой дислокации в алюминий-медном сплаве с наноразмерными медными кластерами и её применение в схеме двумерной дискретной дислокационной динамики для перехода на макроскопический уровень и сравнения с экспериментальными данными.

Научная новизна:

1. Впервые разработана теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона как совокупности краевых дислокаций с учетом следов пластической релаксации напряжений за движущимися дислокациями и взаимодействия между каждой дислокацией в системе. Модель разработана и верифицирована на основе данных МД моделирования.
2. Впервые показаны три стадии движения ГЗ дислокаций соответствующие различному распределению напряжений вблизи ГЗ. Существование этих стадий наблюдается также в численном МД эксперименте.
3. Впервые на основе теоретической модели установлена стадия быстрого движения ГЗ, которая возникает из-за неоднородного распределения напряжений в кристалле.
4. Впервые применена теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона как совокупности краевых дислокаций для случая движения ГЗ в алюминиевом кристалле с твердым раствором меди.
5. Впервые разработана теоретическая модель динамического преодоления дислокацией перерезаемых и неперерезаемых наноразмерных медных включений. Показано, что модель предсказывает напряженное состояние экспериментально полученного перспективного алюминий-медного сплава AA2024, упрочненного кластерами нанометрового размера, сформированными в результате циклического нагружения.

Научная и практическая значимость работы. Разработанные теоретические модели, верифицированные и параметризованные на основе данных МД моделирования, могут далее использоваться в многомасштабном моделировании поведения материала. Для перехода на более высокий масштабный уровень, теоретическая модель может быть включена в качестве подмодели в дискретную дислокационную динамику, другой сеточный или бессеточный численный метод решения уравнений механики сплошной среды.

Достоверность результатов обеспечивается на всех этапах исследований приведенных в диссертационной работе. Результаты теоретических моделей сравниваются с данными, полученными из численного эксперимента (МД), или с натурными экспериментами, что также верифицирует полученные в диссертации результаты. В части МД расчетов достоверность поддерживается использованием программных комплексов и методов атомистического моделирования, которые давно доказали свою эффективность и точность. Основой теоретических моделей является механика сплошной среды и уравнения, связывающие движения дислокаций с пластическими деформациями, которые также хорошо апробированы.

Апробация работы. Результаты работы докладывались на следующих конференциях: LIX Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» (Тольятти, 2017); XXXIII International Conference on Equations of State for Matter (Кабардино-Балкария, 2018); XLIV Международная молодёжная научная конференция «Гагаринские чтения» (Москва, 2018); 2nd International Conference on Structural Integrity and Durability - ICSID 2018 & Summer School - Fatigue and Fracture Modelling and Analysis (Дубровник, Хорватия, 2018); XXXIV International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Кабардино-Балкария, 2019); VI International Conference on Particle-Based Methods - PARTICLES 2019 (Барселона, Испания, 2019); Международная конференция «Математическое Моделирование в Естественных Науках» (Пермь, 2020); XXXVI International Conference on Equations of State for Matter (Кабардино-Балкария, 2021); Международный симпозиум «Перспективные Материалы и Технологии» (Минск, Беларусь, 2021); Международная конференция «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии» (Томск, 2021).

Публикации. Результаты диссертационной работы опубликованы в 10 публикациях, в числе которых 5 статей в научных журналах, которые рекомендованы ВАК РФ или приравненные к ним.

Личный вклад автора. Автор непосредственно создавал МД модели бикристаллов чистого алюминия, меди, никеля и бикристалла алюминия с твердым раствором атомов меди; проводил моделирование сдвиговой деформации перечисленных систем методом МД и анализировал полученные результаты. Автор совместно с Красниковым В.С. проводил МД моделирование сдвиговой деформации систем с уединенной дислокацией в алюминиевом кристалле с твердым раствором атомов меди и медным кластером.

Разработка теоретических моделей проводилась автором совместно с Майером А.Е. Вклад автора в представленные в диссертации результаты является определяющим.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа содержит введение, четыре главы, заключение, публикации автора и список литературы. Объем диссертации составляет 222 страниц, при этом объем цитируемых источников - 155 ссылок.

Результаты и положения, выносимые на защиту:

1. Теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона как совокупности краевых дислокаций с учетом локального распределения напряжений в кристалле и междислокационных взаимодействий. Учет этих факторов позволяет описать стадии движения ГЗ, связанные с изменением профиля локальных напряжений, а так же изменение формы ГЗ в ходе её движения, связанное с междислокационным взаимодействием. Упрощенная теоретическая модель движения ГЗ (без учета междислокационных сил и решения уравнения движения только относительно среднего положения ГЗ) в случае чистых ГЦК металлов дает приемлемые результаты в сравнении с численным МД экспериментом.

2. Существование стадии быстрого движения ГЗ, соответствующей ситуации, когда зона пластически отрелаксированных напряжений в окрестности дислокации больше не увеличивается. При этом релаксация средних напряжений не снижает скорость ГЗ, что позволяет зернограничным дислокациям быстро проходить большие расстояния в кристалле. Эта стадия особенно четко проявляется для субмикрористаллических и микрористаллических зерен.

3. Атомы твердого раствора повышают напряжения, необходимые для движения дислокации примерно в 8.5 раз для случая 0.5 % концентрации растворенных атомов. Преодоление зон высокой концентрации растворенных атомов осуществляется за счет перерезания или ползучести. Движение малоугловой ГЗ наклона в твердом растворе можно описать, используя теоретическую модель движения ГЗ для чистого алюминия, с повышением предела текучести и модуля сдвига по сравнению с чистым алюминием.

4. Теоретическая модель движения дислокации в алюминии с наноразмерными кластерами меди, которая учитывает как возможность перерезания, так и обхода нанокластера с образованием петли Орована. Параметры теоретической модели идентифицируются методом Байеса на данных численного МД эксперимента. Теоретическая модель и МД моделирование показывают, что дислокация при взаимодействии перерезает кластеры до 1.2 нм включительно или обходит путем образования петли Орована кластеры больших размеров.

5. Теоретическая модель движения дислокации в алюминии с наноразмерным кластером меди, обобщается в схеме двухмерной дискретной дислокационной динамики для перехода на мезомасштабный уровень. Полученные результаты показывают хорошее соответствие с экспериментальными данными по сдвиговым напряжениям (порядка 220 МПа) для сплава AA2024, упрочненного кластерами нанометрового размера, сформированными в результате циклического нагружения.

Основное содержание работы

Во введении обоснована актуальность темы исследования, изложено современное состояние проблемы, сформулированы цель и задачи диссертационной работы; указана научная новизна, а также научная и практическая значимость; обоснована достоверность результатов; приведены основные публикации автора и вклад автора в диссертационную работу; сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе проведен обзор современных представлений о дефектах кристаллической структуры и их связи с пластической деформацией металлов и сплавов, а также о методах теоретических исследований в данной области. В разделе 1.1 рассмотрены дислокации и ГЗ как дефекты кристаллической структуры, которые в основном определяют пластическую деформацию металлов и сплавов. Рассмотрено движение дислокаций в чистых металлах и в сплавах, приведены основные механизмы упрочнения сплавов. Показана структура ГЗ, распределение ГЗ в поликристаллах чистых металлов и сплавов, влияние этих факторов на деформацию. Также показано, что движение ГЗ может приводить к значительной релаксации сдвиговых напряжений в системе, а малоугловые ГЗ наклона движутся как массив дислокаций под действием внешних напряжений или за счет отталкивания от других дислокаций в системе. В разделе 1.2 рассмотрены примеры методов многомасштабного моделирования, включающие разработку теоретических моделей в рамках механики сплошной среды. Рассмотрены дислокации как источники полей напряжений. В разделе 1.3 показано, что метод МД позволяет глубже понимать процессы, лежащие в основе деформации металлов и сплавов. Рассмотрена математическая постановка метода МД.

Во второй главе исследуется движение малоугловых ГЗ наклона в бикристаллах при деформации сдвига перпендикулярного плоскости границы. Оба зерна в бикристаллах состоят из одного материала (алюминия, меди или никеля). Движение малоугловых ГЗ как массива полных дислокаций рассматривается под действием напряжений сдвига в МД моделировании, и этот процесс также описывается с помощью предложенной теоретической модели. Теоретическая модель учитывает неоднородное распределение

локальных сдвиговых напряжений в кристалле, возникающее в результате движения дислокаций [25] и междислокационные взаимодействия.

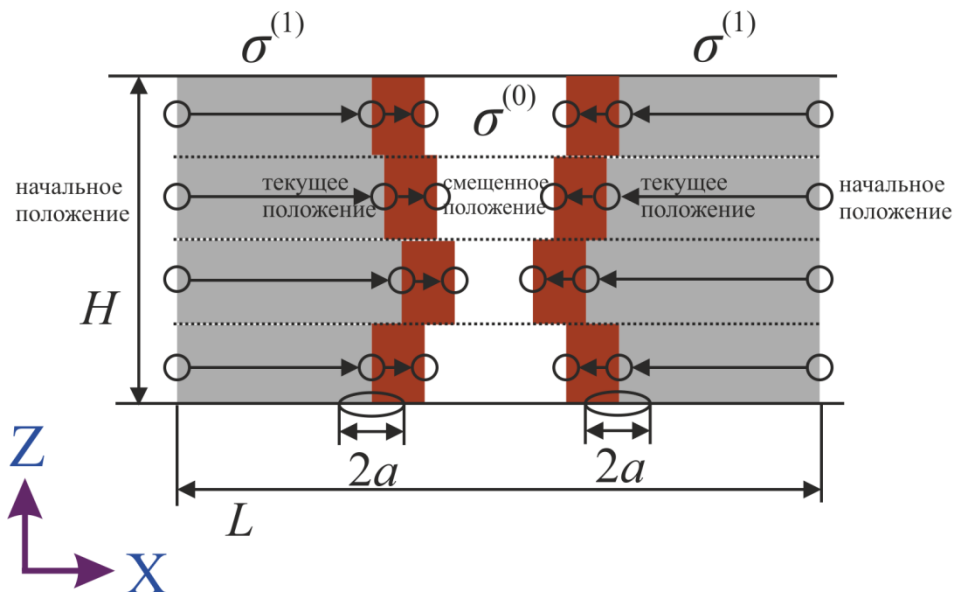


Рис. 1. Схема движения малоугловых ГЗ наклона под действием сдвиговых напряжений с учетом неоднородного распределения локальных напряжений вокруг зернограничных дислокаций.

В разделах 2.1-2.2 описана постановка теоретической модели (рисунок 1) и МД моделирования. Движение дислокации приводит к перестроению кристаллической решетки за её следом, что приводит к релаксации сдвигового напряжения [25]. В кристалле возникает неоднородное распределение напряжений. Напряжение в пластически недеформированной зоне $\sigma_{xz}^{(0)}$ является следствием приложенной сдвиговой деформации к бикристаллу и может быть определено по смещению верхней области кристалла относительно нижней с постоянной скоростью u за время t :

$$\sigma_{xz}^{(0)} = G \frac{ut}{H}, \quad (1)$$

где H - высота кристалла, G - модуль сдвига.

Пластически деформированная область кристалла находится за стенкой дислокаций, и характеризуются меньшим значением сдвиговых напряжений $\sigma_{xz}^{(1)}$ из-за пластической релаксации позади движущихся дислокации. Величина пластической деформации может быть найдена из уравнения Орована [26]:

$$w_{xz} = \frac{bN}{4H}, \quad (2)$$

где b - вектор Бюргера зернограничных дислокации.

Можно получить выражение для $\sigma_{xz}^{(1)}$ через $\sigma_{xz}^{(0)}$ используя закон Гука совместно с формулами (1) и (2):

$$\sigma_{xz}^{(1)} = \sigma_{xz}^{(0)} - 2Gw_{xz} = G \frac{ut - bN/2}{H}. \quad (3)$$

Начальные и текущие позиции дислокационных стенок определяют границу пластически деформированной области кристалла. Разделим образец на $N/2$ слоя длиной $2L$ и высотой $H/(N/2)$ вокруг плоскости скольжения каждой зернограничной дислокации и предположим, что текущая граница пластически деформированной области в пределах рассматриваемого слоя является вертикальной линией, совпадающей с позицией дислокации x_l^i (или $x_r^{i+N/2}$): l - для левой ГЗ, r - для правой ГЗ. Среднее по области напряжение можно рассчитать следующим образом:

$$\langle \sigma_{xz} \rangle = \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{Gb}{2HL} \sum_{i=1}^{N/2} (L - x_r^{i+N/2} + x_l^i). \quad (4)$$

В формуле (4) учитывается, что начальное положение левой ГЗ равно $x_l^i(t=0) = 0$, а начальное положение правой ГЗ $x_r^{i+N/2}(t=0) = L$.

Выражения для сил F_{sh}^i , действующих на стенку дислокации, можно получить через сдвиговые напряжения, описанные в уравнении (3). Напряжения действуют на зернограничные дислокации в слое $2a$ вокруг ядра каждой дислокации, где a - характерный размер области локализации поля упругих смещений вокруг дислокационного ядра. Значение a находится в диапазоне от 2.5 до 2.87 нм в зависимости от рассматриваемого металла. Когда ГЗ начинает двигаться и движение зернограничной дислокации удовлетворяет условию $x_l^i \leq a$ для левой стенки или $L - x_r^{i+N/2} \leq a$ для правой стенки (I этап движения), дислокации оставляют позади себя пластически отрелаксированную область длиной x_l^i или $L - x_r^{i+N/2}$ с напряжениями $\sigma_{xz}^{(1)}$, в то время как напряжения $\sigma_{xz}^{(0)}$ действуют на область перед дислокацией с длиной $a - x_l^i$ и $a - (L - x_r^{i+N/2})$ для каждой системы скольжения. На II этапе, движение ГЗ (условия для которого: $x_r^{i+N/2} - a \geq x_l^i > a$ для левой стенки и $x_l^i + a \leq x_r^{i+N/2} < L - a$ для правой стенки) напряжение $\sigma_{xz}^{(1)}$ действует в одной половине слоя $2a$ и $\sigma_{xz}^{(0)}$ в другой половине. Когда левая зернограничная дислокация вместе с окружающим ее слоем $2a$ входит в тот же слой правой зернограничной дислокации ($x_r^{i+N/2} - x_l^i \leq a$, этап III), область кристалла будет дополнительно отрелаксирована:

$$F_{sh}^i = b \langle \sigma_{xz}^i \rangle_{2a}, i = 1 \dots N \quad (5)$$

для левой стенки:

$$\langle \sigma_{xz}^i \rangle_{2a} = \begin{cases} \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{H} \frac{x_l^i}{4a}, & x_l^i \leq a \text{ (этап I);} \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{4H}, & x_r^{i+N/2} - a \geq x_l^i > a \text{ (этап II);} \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{2H} \left(1 - \frac{x_r^{i+N/2} - x_l^i}{2a} \right), & x_l^i + a > x_r^{i+N/2} \text{ (этап III);} \end{cases} \quad (6)$$

для правой стенки:

$$\langle \sigma_{xz}^{i+N/2} \rangle_{2a} = \begin{cases} \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{H} \frac{(L - x_r^{i+N/2})}{4a}, & L - x_r^{i+N/2} \leq a \text{ (этап I);} \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{4H}, & x_l^i + a \leq x_r^{i+N/2} < L - a \text{ (этап II);} \\ \sigma_{xz}^{(0)} - \frac{GbN}{2H} \left(1 - \frac{x_r^{i+N/2} - x_l^i}{2a} \right), & x_r^{i+N/2} - a < x_l^i \text{ (этап III);} \end{cases} \quad (7)$$

где $i = 1 \dots N/2$ в обоих уравнениях (6) и (7).

Для учета междислокационных взаимодействий необходимо рассчитать силы взаимодействия между дислокациями и добавить их к силе, действующей со стороны сдвиговой деформации F_{sh}^i . Обозначим F_D^{ij} силу, действующую на i -ю дислокацию со стороны j -й дислокации. Эта сила определяется выражением [27]:

$$F_D^{ij} = b_i b_j \frac{G}{2\pi(1-\mu)} \frac{\Delta x_{ij} (\Delta x_{ij}^2 - \Delta y_{ij}^2)}{(\Delta x_{ij}^2 + \Delta y_{ij}^2)^2}, \quad (8)$$

где $(\Delta x_{ij}, \Delta y_{ij})$ - двумерный вектор, проведенный из j -й дислокации к i -й дислокации; μ - коэффициент Пуассона.

Для того чтобы получить силу F_D^i , действующую на i -ю дислокацию, нужно формально суммировать все взаимодействия этой дислокации:

$$F_D^i = \sum_{j \neq i} F_D^{ij}. \quad (9)$$

Из-за периодических граничных условий вдоль оси X , имеется бесконечный периодически повторяющийся набор стенок взаимодействующих дислокаций и сумма в уравнении (9) является бесконечной. Поэтому явно в уравнении (9) учитываются только дислокации одной и той же ГЗ и двух соседних ГЗ. Взаимодействие с остальными ГЗ учитывается косвенно в уравнении (12). Тогда суммарная сила, действующая на i -ю дислокацию, выглядит следующим образом:

$$F_f^i = F_{sh}^i + F_D^i. \quad (10)$$

Скорость каждой зернограничной дислокации может быть получена путем решения дифференциального уравнения [28]:

$$\frac{m}{\left(1 - \left(\frac{V_i}{c}\right)^2\right)^{3/2}} \frac{dV_i}{dt} = \left(F_f^i - \frac{bY}{2} \text{sign}(F_f^i)\right) H\left(|F_f^i| - \frac{bY}{2}\right) - \frac{B}{\left(1 - \left(\frac{V_i}{c}\right)^2\right)^{3/2}} V_i, \quad (11)$$

где $H(f)$ - ступенчатая функция Хэвисайда от аргумента f , m - масса покоя дислокации на единицу длины, V_i - скорость i -й дислокации, Y - предел текучести, B - коэффициент трения при низкой скорости дислокации, и c - поперечная скорость звука.

Предел текучести в уравнении (11) зависит от плотности дислокаций согласно уравнению Тейлора [29] и имеет следующий вид:

$$Y = Y_0 + Agb\sqrt{\rho_D}, \quad (12)$$

где Y_0 - сопротивление от точечных препятствий и барьера Пайерлса, ρ_D - общая скалярная плотность дислокаций, A - постоянная средней силы взаимодействия на больших расстояниях по всем дислокациям.

В разделах 2.3-2.7 приведены результаты теоретической модели и МД моделирования, проведено сравнение результатов. Движение малоугловой симметричной ГЗ наклона в ГЦК металлах можно представить как движение стенки периодически расположенных полных краевых дислокаций, что показывают результаты МД моделирования – рисунок 2. Несмотря на то, что уединенные полные дислокации в ГЦК кристаллах имеют тенденцию к расщеплению на пары частичных дислокаций Шокли, зернограничные дислокации не проявляют этой тенденции до схождения противоположных ГЗ. В теоретической модели выделены три этапа движения границ: влияние этих стадий на движение ГЗ зависит от скорости деформации и размера зерна – рисунок 3. Модель показывает хорошее согласие с данными МД моделирования движения ГЗ, рисунок 3, однако дальнейший прогресс в исследовании ГЗ может быть достигнут за счет включения в модель большего количества физических эффектов, сопровождающих движение ГЗ. Учет междислокационных взаимодействий позволяет описать изменение формы ГЗ, наблюдаемое в МД моделировании – рисунок 2.

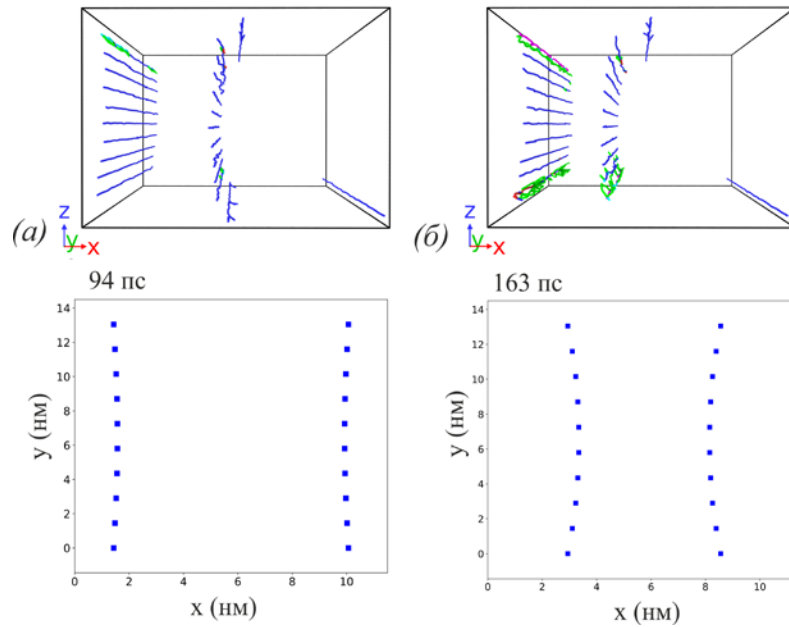


Рис. 2. Положения зернограничных дислокаций, полученные из МД моделирования (верхние графики) и рассчитанные по теоретической модели (нижние графики) в различные моменты времени для случая бикристалла алюминия с углом разориентировки 12° и скоростью сдвига 10 м/с. Результаты приведены для времен моделирования сдвиговой деформации (а) 94 пс, (б) 163 пс.

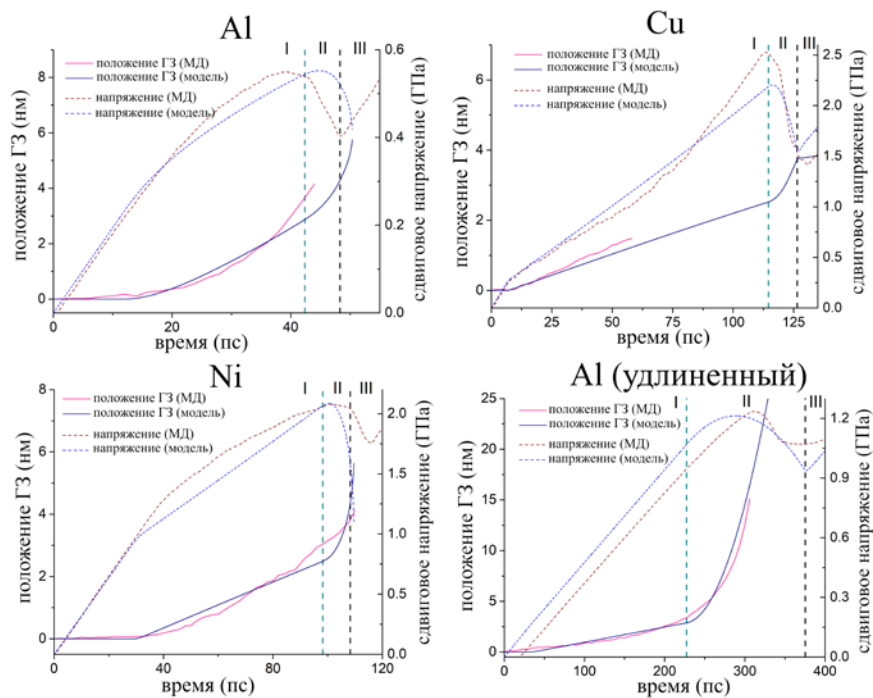


Рис. 3. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели для движения малоугловой симметричной ГЗ наклона при перпендикулярном сдвиге: Al – алюминиевый бикристалл с углом разориентировки 2° при скорости сдвига 10 м/с; Cu – медный

бикристалл с углом разориентировки 9° при скорости сдвига 10 м/с; Ni – никелевый бикристалл с углом разориентировки 3.6° при скорости сдвига 5 м/с; Al (удлиненный) – алюминиевый удлиненный бикристалл с углом разориентировки 12° при скорости сдвига 3 м/с, соответственно.

В третьей главе в разделе 3.1 проводится МД моделирование взаимодействия уединенной краевой дислокации с твердым раствором атомов меди различной концентрации (до 1 ат.%) в алюминиевом кристалле при нормальной температуре (300 К). В разделе 3.2 формулируется теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона в твердом растворе атомов меди в алюминиевом кристалле (2 и 5 ат.%) при нормальной температуре. Модель основана на полученных в МД моделировании представлениях о движении, как уединенной краевой дислокации, так и малоугловых ГЗ наклона в твердом растворе атомов меди в алюминиевой матрице.

Теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона в твердом растворе атомов меди построена на основе модели движения ГЗ в чистых ГЦК металлах, которая сформулирована в разделе 2.1. Для данной теоретической модели варьировались 3 параметра: модуль сдвига G , область локализации напряжений вокруг зернограничных дислокации в кристалле a/b , предел текучести Y_0 . Изменение значений параметров связано с взаимодействием движущихся зернограничных дислокаций с растворенными атомами меди. В целом, результаты МД и теоретической модели показывают хорошее количественное и качественное соответствие – рисунок 4.

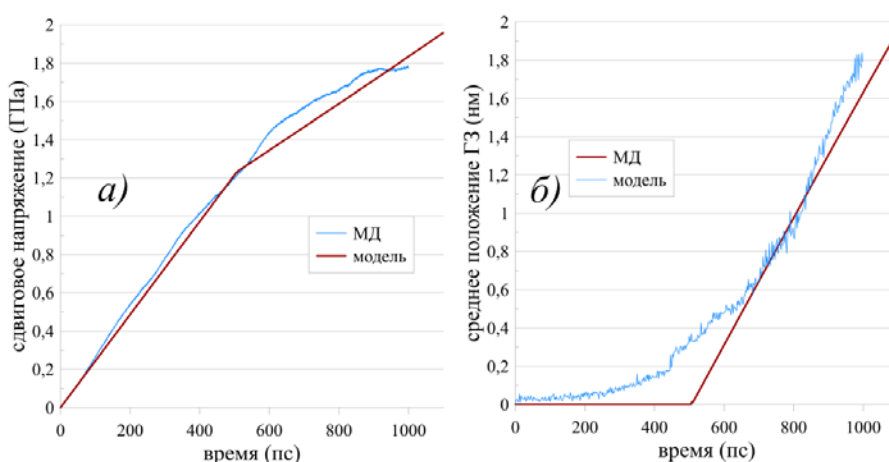


Рис. 4. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели движения малоугловой симметричной ГЗ наклона в бикристалле алюминия с 5% твердым раствором атомов меди и углом разориентировки 8.1° при перпендикулярном сдвиге 1 м/с: (а) сдвиговые напряжения, (б) среднее положение ГЗ.

В четвертой главе осуществляется многомасштабное моделирование алюминиевого сплава упрочненного наноразмерными медными кластерами. Путем МД моделирования исследуются механизмы взаимодействия краевой дислокации и кластеров размером 1-4 нм, рассматриваются несколько скоростей сдвига (2.5×10^7 и 8.3×10^7 с⁻¹), температур МД системы (100 – 700 К) и концентраций меди внутри объема кластера (20 – 100 ат.%). Далее формулируется теоретическая модель преодоления кластера и включается в схему двумерной дискретной дислокационной динамики (2D ДДД) для перехода на мезоскопический масштабный уровень.

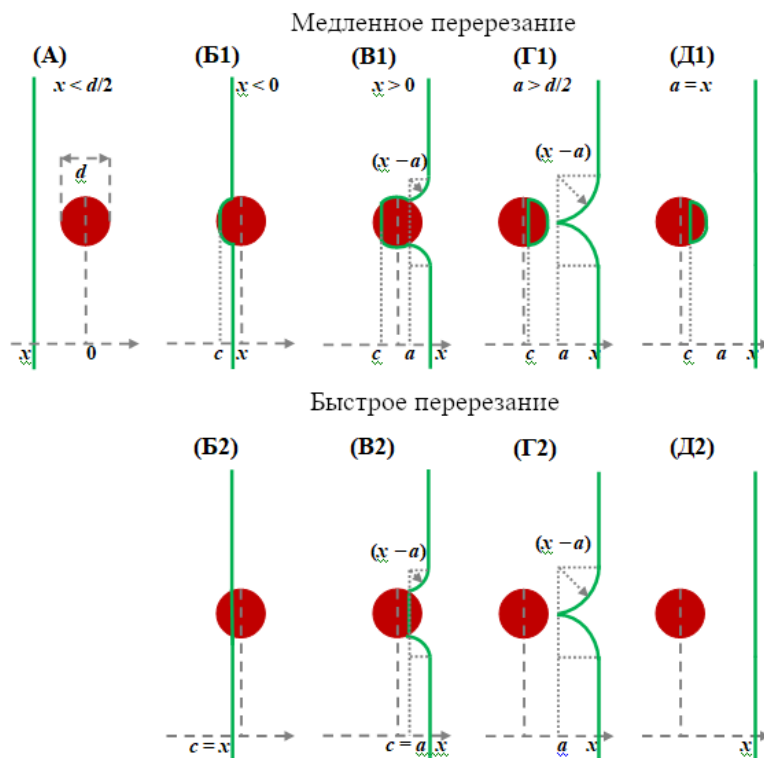


Рис. 5. Схема движения дислокации и взаимодействия с медным кластером: стадия (А) приближение дислокации к препятствию; стадия (Б) начало взаимодействия дислокации с кластером, когда основной сегмент дислокации ещё не дошел до середины препятствия; стадия (В) завершающая стадия взаимодействия; этап (Г) стягивание к основной части дислокации её отстающих круговых сегментов после взаимодействия; стадия (Д) движение прямой дислокационной линии после взаимодействия.

В разделе 4.2 формулируется теоретическая модель перерезания наноразмерного медного кластера – схема и этапы модели приведены на рисунке 5. В периодически повторяющейся системе, соответствующей постановке МД моделирования, расстояние между кластерами: D вдоль линии дислокации; L вдоль вектора Бюргерса, совпадающего с направлением движения краевой дислокации, и H в направлении, перпендикулярном

плоскости скольжения. Движение каждого дислокационного сегмента описывается с помощью обобщенных координат x , a , c – рисунок 5.

Движение прямой дислокационной линии на стадиях (А) и (Д) описывается уравнением движения (11):

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F_x \left(1 - \frac{1}{c^2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 \right)^{3/2} - B \left(\frac{dx}{dt} \right), \quad (13)$$

где F_x - сила со стороны сдвиговых напряжений, действующая на единицу длины дислокационной линии.

В работе [25] показано, что следует использовать локальные напряжения в окрестности дислокационной линии при расчете F_x :

$$F_x = b\sigma', \quad (14)$$

где σ' - действующее напряжение.

При деформации сдвига, когда верхняя область кристалла сдвигается с постоянной скоростью u , σ' в момент времени t рассчитывается аналогично случаю малоугловых границ зерен наклона в формулах (6) - (7):

$$\sigma' = \begin{cases} \frac{G}{H}(ut - Nb) - \frac{Gb}{2H} \left(\frac{x-x_0}{ab} \right), & (x - x_0) < ab, \\ \frac{G}{H}(ut - Nb) - \frac{Gb}{2H} \left(2 - \frac{L-(x-x_0)}{ab} \right), & (x - x_0) > L - ab, \\ \frac{G}{H}(ut - Nb) - \frac{Gb}{2H}, & \text{в других случаях,} \end{cases} \quad (15)$$

где x_0 - начальное положение дислокации, N - количество полных циклов движения дислокации по периодической системе, ab - размер области действующих напряжений вокруг ядра дислокации.

Среднее напряжение в системе составляет:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{G}{H} \left(ut - b \frac{S_D}{LD} \right), \quad (16)$$

где S_D - площадь замеченная дислокацией при ее движении:

$$S_D = \begin{cases} D(x - x_0) - (2 - \pi/2)(x - a)^2 + NLD, & \text{на стадиях (А), (Г), (Д),} \\ D(x - x_0) + S_{in}(c) - \pi d^2/4 + NLD, & \text{на стадии (Б),} \\ D(x - x_0) - (2 - \pi/2)(x - a)^2 - (x - a)\sqrt{d^2 - 4a^2} + S_{in}(c) - \\ - \pi d^2/4 + NLD, & \text{на стадии (В),} \end{cases} \quad (17)$$

где $S_{in}(c)$ - площадь замеченная дислокацией внутри включения, определяемая координатой перерезания c .

Чтобы найти действующие на дислокацию силы, нужно записать энергию дислокации, которая включает в себя как работу упругого поля $-S_D b \sigma'$, так и собственную энергию, которая пропорциональна длине линии дислокации [2]:

$$E_D = \begin{cases} -S_D b \sigma' + \varepsilon_e D + \frac{1}{2} [\pi \varepsilon_s - (4 - \pi) \varepsilon_e] (x - a), & \text{на стадиях (А), (Г), (Д),} \\ -S_D b \sigma' + \varepsilon_e (D - \sqrt{d^2 - 4x^2}) + \\ + \varepsilon_s [\sqrt{d^2 - c^2} + \arcsin(2x/d) - \arcsin(2c/d)], & \text{на стадии (Б),} \\ -S_D b \sigma' + \varepsilon_e (D - \sqrt{d^2 - 4x^2}) + \frac{1}{2} [\pi \varepsilon_s - (4 - \pi) \varepsilon_e] (x - a) + \\ + \varepsilon_c [\sqrt{d^2 - c^2} + \arcsin(2x/d) - \arcsin(2c/d)], & \text{на стадии (В),} \end{cases} \quad (18)$$

где $a = x$ на этапах (А) и (Д), а энергии дислокационных сегментов: ε_e - краевых, ε_s - винтовых, ε_c - перерезающих кластер.

Обобщенные силы, f_x, f_c и f_a , действующие на координаты, x, c и a , соответственно, рассчитываются следующим образом:

$$f_x = -\frac{\partial E_D}{\partial x}, \quad (19a)$$

$$f_a = -\frac{\partial E_D}{\partial a}, \quad (19б)$$

$$f_c = -\frac{\partial E_D}{\partial c} - \gamma L_c \cdot \text{sign}\left(\frac{dc}{dt}\right), \quad (19в)$$

где последний член в выражении для f_c - сила сопротивления, связанная с преодолением медного кластера. Перерезание не начинается пока первый упругий член в правой части уравнения (19в) не преодолеет силу сопротивления. Коэффициент γ с размерностью поверхностной энергии характеризует силу сопротивления. Эффективные длины сегментов дислокации, L_x, L_c и L_a , связанные с изменением координат x, c и a , определяются через производные от заметенной площади. А силы на единицу длины дислокационной линии равны:

$$F_x = \begin{cases} b \sigma' & \text{на стадиях (А) и (Д),} \\ b \sigma' - \frac{4 \varepsilon_e x + 2 \varepsilon_c d}{L_x \sqrt{d^2 - 4x^2}} & \text{на стадии (Б1),} \\ b \sigma' - \gamma \frac{\sqrt{d^2 - 4x^2}}{L_x} \text{sign}\left(\frac{dx}{dt}\right) & \text{на стадии (Б2),} \\ b \sigma' - \frac{1}{2 L_x} [\pi \varepsilon_s - (4 - \pi) \varepsilon_e] & \text{на стадиях (В) и (Г),} \end{cases} \quad (20a)$$

$$F_c = \begin{cases} \frac{2\varepsilon_c}{d-2c} + b\sigma' - \gamma \cdot \text{sign}\left(\frac{dc}{dt}\right) \text{ на стадиях от (Б1) до (Д1),} \\ \frac{1}{\sqrt{d^2-4c^2}} \left\{ \frac{1}{2} [\pi\varepsilon_s - (4-\pi)\varepsilon_e] - \frac{4\varepsilon_e x + 2\varepsilon_c d}{\sqrt{d^2-4x^2}} + b\sigma' L_a \right\} - \\ - \gamma \cdot \text{sign}\left(\frac{dc}{dt}\right) \text{ на стадии (В2),} \end{cases} \quad (20б)$$

$$F_a = \begin{cases} \frac{1}{2(4-\pi)(x-a)} \left\{ [\pi\varepsilon_s - (4-\pi)\varepsilon_e] - \frac{4\varepsilon_e x + 2\varepsilon_c d}{\sqrt{d^2-4x^2}} \right\} + \\ + b\sigma' \text{ на стадии (В1),} \\ \frac{\pi\varepsilon_s - (4-\pi)\varepsilon_e}{2(4-\pi)(x-a)} + b\sigma' \text{ на стадии (Г),} \end{cases} \quad (20в)$$

на стадии (В2) в формуле (20б) предполагается, что вся сила прилагается к отрезку длиной $L_c = \sqrt{d^2 - 4c^2}$, разрезающему кластер, поскольку сопротивление в кластере намного выше, чем в окружающей матрице.

Уравнение движения для координаты a :

$$m \frac{d^2 a}{dt^2} = F_a \left(1 - \frac{1}{c_t^2} \left(\frac{da}{dt} \right)^2 \right)^{3/2} - B \left(\frac{da}{dt} \right). \quad (21)$$

Изменение координаты a отражает движение свободных сегментов дислокации, помимо этого нет большой разницы между коэффициентом трения для краевых и винтовых сегментов. С другой стороны, для координаты перерезания c используется аналогичное уравнение движения, но с ожидаемо большим коэффициентом трения B_c , соответствующим движению дислокации в зоне сегрегации атомов меди:

$$m \frac{d^2 c}{dt^2} = F_c \left(1 - \frac{1}{c_t^2} \left(\frac{dc}{dt} \right)^2 \right)^{3/2} - B \left(\frac{dc}{dt} \right). \quad (22)$$

Чтобы замкнуть модель необходимо определить удельные энергии дислокаций, которые взяты из литературных данных [2]:

В разделах 4.1 и 4.3 приводятся результаты теоретической модели и данные МД моделирования. Предложенная теоретическая модель взаимодействия дислокации с включениями и перерезания включений позволяет адекватно описать упрочнение материала наноразмерными медными кластерами – рисунок 6. Наибольшее отклонение между МД данными и результатами теоретической модели наблюдается при высокой скорости сдвига. Это может быть связано с эффектом локализации поля напряжений вокруг дислокации при больших скоростях деформации.

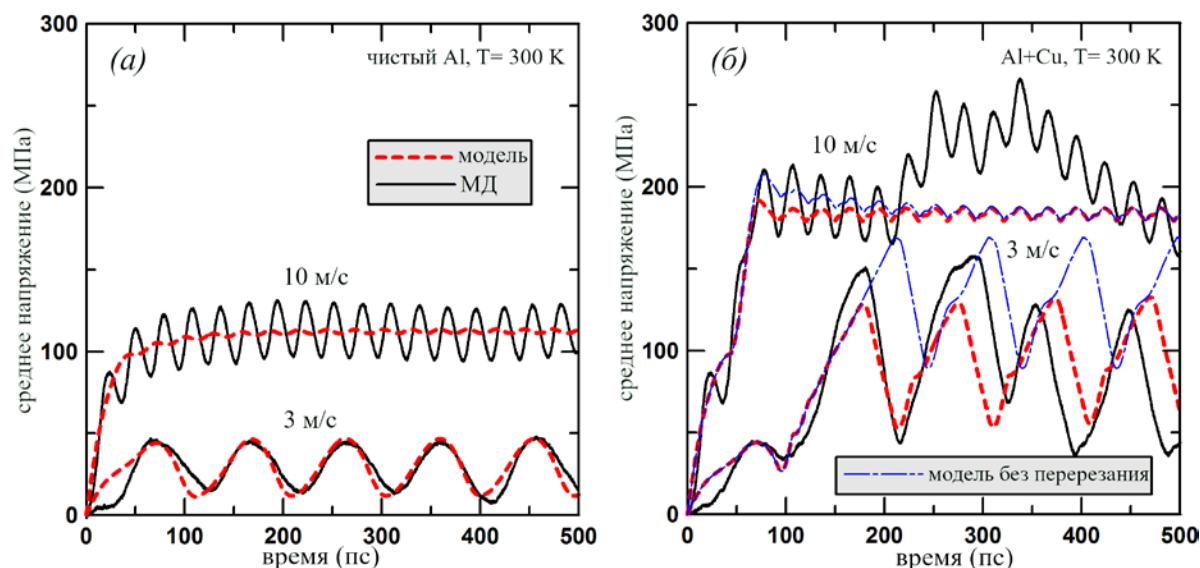


Рис. 6. Сравнение результатов МД моделирования и теоретической модели с параметрами, определенными байесовским алгоритмом: среднее напряжение сдвига при температуре 300 К для случая (а) чистого алюминия и (б) алюминия с кластером меди диаметром 1 нм и с концентрацией 50% атомов меди.

На рисунке 7 сравниваются результаты теоретической модели с данными МД моделирования для включений диаметром до 4 нм. Модель адекватно отражает увеличение среднего напряжения с увеличением диаметра кластера. И в МД, и в теоретической модели перерезание происходит только для включений диаметром до 1.2 нм включительно, в то время как петля Орована образуется вокруг включений с диаметром 1.4 нм и более.

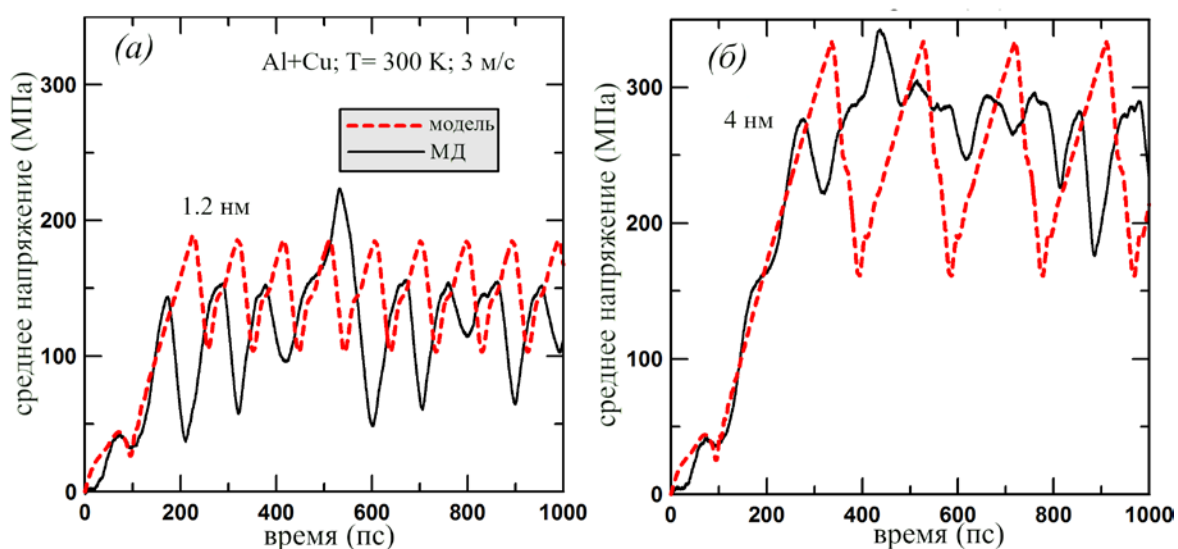


Рис. 7. Сравнение результатов теоретической модели и МД моделирования для кластеров разных размеров [1.2 нм (а), 4 нм (б)]: среднее сдвиговое напряжение в системе при

температуре 300 К в алюминиевом кристалле, содержащем кластер с концентрацией 50% атомов меди.

В разделе 4.4 для оценки макроскопического отклика системы упрочненного наноразмерными медными кластерами, сформулирован метод 2D ДДД, который был изначально предложен в работе [24] для оценки макроскопического отклика Al-Cu сплава с неперерезаемыми включениями типа θ -фазы. Следуя предложенному подходу и используя теоретическую модель взаимодействия дислокаций с наноразмерным кластером можно получить новую модель 2D ДДД.

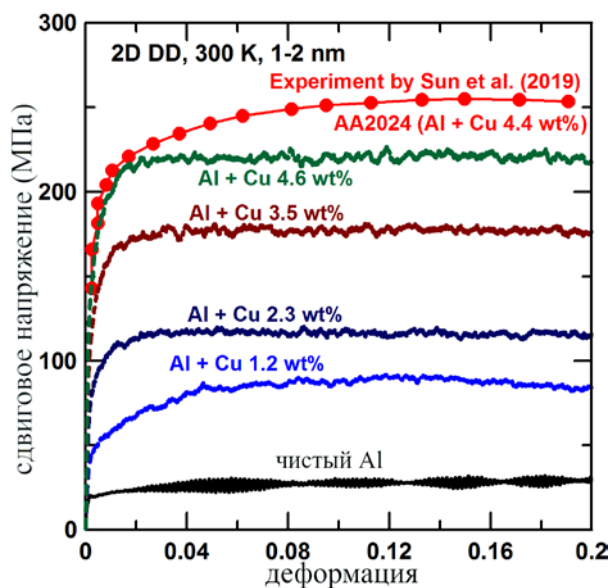


Рис. 8. Результаты 2D ДДД: кривые напряжение-деформация для алюминиевого сплава с медными наноразмерными включениями, равномерно распределенными по размеру от 1 до 2 нм; линия с кружками представляет экспериментальные результаты [30] для алюминиевого сплава 2024 с содержанием меди 4.4 мас. %, обработанного циклическим нагружением.

Из данных представленных на рисунке 8 следует, что полученные результаты расчетов 2D ДДД согласуются с экспериментальными данными [30], хотя есть некоторая неопределенность в реальном распределении по размерам и содержанию атомов меди внутри кластеров в экспериментах. Дополнительное параметрическое исследование показывает, что как и в случае θ -фазы, рассмотренной в работе [24], распределенные по размеру включения дают гораздо более высокое напряжение течения, чем монодисперсные. Напряжение течения зависит от конкретной формы распределения по размерам.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1. Разработана теоретическая модель движения малоугловой ГЗ наклона в чистых ГЦК металлах, которая основана на данных МД моделирования. Теоретическая модель позволяет описать основные стадии движения ГЗ в соответствии с распределением локальных напряжений в кристалле. Искривление формы границы в процессе движения, связаны с дислокационными взаимодействиями. Все перечисленные эффекты наблюдаются в численном МД эксперименте. Проведены исследования с различными скоростями деформации и определена стадия быстрого движения ГЗ, которая наблюдается как в динамическом, так и в квазистатическом режиме.
2. Исследовано движение уединенной краевой дислокации и малоугловых границ зерен в твердом растворе атомов меди. Средние напряжения значительно возрастают в системе с уединенной дислокацией, также как и порог движения границ зерен (предел текучести). Теоретическая модель движения малоугловых ГЗ наклона дает приемлемое соответствие с численным МД экспериментом.
3. Рассмотрена пластичность алюминий-медного сплава упрочненного наноразмерными медными кластерами, что соответствует экспериментально полученному сплаву [30]. Разработана теоретическая модель перерезания/обхода кластера на основе данных МД моделирования. Предложенная теоретическая модель, обобщенная в схеме двумерной дискретной дислокационной динамики, показывает хорошее соответствие с экспериментальными данными.

Список публикаций автора по теме диссертации

Статьи в изданиях из списка ВАК и приравненных к ним

- A1. Алфёрова, Е.А. Пластическая деформация [001]-монокристаллов никеля. Моделирование и эксперимент / Е.А. Алфёрова, Е.В. Фомин // Журнал Технической Физики, – 2019. – Т. 89. Вып. 1. – С. 112–119.
- A2. Fomin, E.V. Interaction of edge dislocation with copper atoms in an aluminum crystal / E.V. Fomin, V.S. Krasnikov // Journal of Physics: Conference Series. –2020. – V. 1556. – P. 012050.
- A3. Fomin, E.V. Slip of low-angle tilt grain boundary (110) in FCC metals at perpendicular shear / E.V. Fomin, A.E. Mayer // International Journal of Plasticity. – 2020. – V. 134. – P. 102843.
- A4. Fomin, E.V. Prediction of shear strength of cluster-strengthened aluminum with multi-scale approach describing transition from cutting to bypass of precipitates by dislocations / E.V. Fomin, A.E. Mayer, V.S. Krasnikov // International Journal of Plasticity. – 2021. – V. 146. – P. 103095.

А5. Грачева, Н.А. Применение нейронных сетей для моделирования ударно-волновых процессов в алюминии / Н.А. Грачева, М.В. Леканов, А.Е. Майер, Е.В. Фомин // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. – 2021. – № 3. – С. 42–61.

Тезисы и статьи в сборниках трудов и докладов международных и всероссийских научных конференций

1. Актуальные проблемы прочности : LIX Международная конференция (Тольятти, 5–8 сентября 2017 года) : сборник материалов и конкурсных докладов / отв. ред. А.Ю. Виноградов, Д.Л. Мерсон. – Тольятти : Изд-во ТГУ, 2017. – 334 с.
2. XXXIII International Conference on Equations of State for Matter. Book of Abstracts / – Moscow & Chernogolovka & Nalchik, 2018. – p. 334.
3. Механика и моделирование материалов и технологий. Сборник трудов Секции Международной молодёжной научной конференции «XLIV Гагаринские чтения» (17-20 апреля 2018) / Москва: ИПМех РАН, 2018. – 182 с.
4. XXXIV International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. Book of Abstracts / – Moscow & Chernogolovka & Nalchik, 2018. – p. 397.
5. Перспективные материалы и технологии: материалы международного симпозиума, Минск, 23 - 27 августа 2021 г. / под. ред. В.В. Рубаника - Минск: Белорусский государственный институт стандартизации и сертификации», 2021. – 475 с.

Список литературы

1. Трусов, П.В. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения / П.В. Трусов, А.И. Швейкин // – Н.: Изд-во СО РАН, 2019. – 605 с.
2. Hirth, J.P. Theory of Dislocations / J.P. Hirth, J. Lothe // – second ed. –N.–Y.: Wiley, 1982.
3. McDowell, D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity / D.L. McDowell // International Journal of Plasticity. – 2010. – V. 26. – P. 1280–1309
4. Zhang, L. A review on atomistic simulation of grain boundary behaviors in face-centered cubic metals / L. Zhang, C. Lu, K. Tieu // Computational Materials Science. – 2016. – V. 118. – P. 180–191.
5. Fribourg, G. Microstructure-based modelling of isotropic and kinematic strain hardening in a precipitation-hardened aluminium alloy / G. Fribourg, Y. Brechet, A. Deschamps, A. Simar, // Acta Materialia. – 2011. – V. 59. –P. 3621–3635.
6. Anjabin, N. Constitutive Modeling of Hot Deformation Behavior of the AA6063 Alloy with Different Precipitates / N. Anjabin, A.K. Taheri, H.S. Kim // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2013. – V. 44. – P. 5853–5860
7. de Vaucorbeil, A. The superposition of strengthening contributions in engineering alloys / A. de Vaucorbeil, W.J. Poole, C.W. Sinclair // Materials Science and Engineering: A. – 2013. – V. 582. – P. 147–154.
8. Wulfinghoff, S. A gradient plasticity grain boundary yield theory / S. Wulfinghoff, E. Bayerschen, T. Bohlke // International Journal of Plasticity. – 2013. – V. 51. – P. 33–46.

9. Rubio, R.A. Grain boundary strengthening of FCC polycrystals / R.A. Rubio, S. Haouala, J. LLorca // *Journal of Materials Research*. – 2019. – V. 34. – Iss. 13. – P. 2263–2274.
10. Borodin, E.N. Coupled model for grain rotation, dislocation plasticity and grain boundary sliding in fine-grained solids / E.N. Borodin, A.E. Mayer, M.Yu. Gutkin // // *International Journal of Plasticity*. – 2020. – V. 134. – P. 102776.
11. Gutkin, M.Yu. Strengthening and softening mechanisms in nanocrystalline materials exhibiting superplasticity / M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko, N.V. Skiba // *Proc. SPIE 6253, Ninth International Workshop on Nondestructive Testing and Computer Simulations*. – 2006. – P. 62530J.
12. Shveykin, A. Statistical Crystal Plasticity Model Advanced for Grain Boundary Sliding Description / A. Shveykin, P. Trusov, E. Sharifullina // *Crystals*. – 2020. – V. 10. – P. 822.
13. Bobylev, S.V. Partial and split dislocation configurations in nanocrystalline metals / S.V. Bobylev, M.Yu. Gutkin, I.A. Ovid'ko // *Physical Review B*. –2006. – V. 73. – P. 064102.
14. Tucker, G.J. Non-equilibrium grain boundary structure and inelastic deformation using atomistic simulations / G.J. Tucker, D.L. McDowell // *International Journal of Plasticity*. – 2011. – V. 27. – Iss. 6. – P. 841–857.
15. Peron-Lühns, V. Quasicontinuum study of the shear behavior of defective tilt grain boundaries in Cu / V. Peron-Lühns, F. Sansoz, L. Noels // *Acta Materialia*. – 2014. – 64. – P. 419–428.
16. Burberry, N.J. Modelling with variable atomic structure: dislocation nucleation from symmetric tilt grain boundaries in aluminium / N.J. Burberry, R. Das, W.G. Ferguson // *Computational Materials Science*. – 2015. – V. 101. – P. 16–28.
17. Wyman, R.D. Variability of non-Schmid effects in grain boundary dislocation nucleation criteria / R.D. Wyman, D.T. Fullwood, R.H. Wagoner, E.R. Homer // *Acta Materialia*. – 2017. – V. 124. – P. 588–597.
18. Krasnikov, V.S. Plastic deformation under high-rate loading: the multiscale approach / V.S. Krasnikov, A.Yu. Kuksin, A.E. Mayer, A.V. Yanilkin // *Physics of the Solid State*. – 2010. – V. 52. – P. 1386–1396.
19. Pouriayevali, H. Decomposition of dislocation densities at grain boundary in a finite-deformation gradient crystal-plasticity framework / H. Pouriayevali, B.-X. Xu // *International Journal of Plasticity*. – 2017. – V. 96. – P. 36–55.
20. Williams, J.C. Progress in structural materials for aerospace systems / J.C. Williams, E.A. Starke Jr. // *Acta Materialia*. – 2003. – V. 51. – P. 5775–5799.
21. Ma, Z. Stress-level-dependency and bimodal precipitation behaviors during creep ageing of Al-Cu alloy: Experiments and modeling / Z. Ma, L. Zhan, C. Liu, L. Xu, Y. Xu, P. Ma, J. Li // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – V. 110. – P. 183–201.
22. Zuiko, I. Ageing response of cold-rolled Al-Cu-Mg alloy / I. Zuiko, R. Kaibyshev // *Mater. Sci. Eng. A*. – 2020. – V. 781. – P. 139148.

23. Krasnikov, V.S. Prediction of the shear strength of aluminum with θ phase inclusions based on precipitate statistics, dislocation and molecular dynamics / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, V.V. Pogorelko // *International Journal of Plasticity*. – 2020. – V.128. – P. 102672.
24. Bryukhanov, I.A. Dynamics of edge dislocation in Cu–Ni solid solution alloys at atomic scale / I.A. Bryukhanov // *International Journal of Plasticity*. – 2020. – V. 135. – P. 102834.
25. Krasnikov, V.S., Mayer, A.E., Influence of local stresses on motion of edge dislocation in aluminum / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – V. 101. – P. 170–187.
26. Kosevich, A.M. Dynamical theory of dislocations / A.M. Kosevich // *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*. – 1965. – V. 7. – P. 837–854.
27. Nabarro, F.R.N. Mathematical theory of stationary dislocations / F.R.N. Nabarro // *Advances in Physics*. – 1952. – V. 1. – Iss. 3. – P. 269–394.
28. Krasnikov, V.S. Dislocation based high-rate plasticity model and its application to plate-impact and ultra short electron irradiation simulations / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer, A.P. Yalovets // *International Journal of Plasticity*. – 2011. – V. 27. – Iss. 8. – P. 1294–1308.
29. Suzuki, T. *Dislocation Dynamics and Plasticity* / T. Suzuki, S. Takeuchi, H. Yoshinaga. – Springer, Berlin, Heidelberg. 1991. – 228 p.
30. Sun, W. Precipitation strengthening of aluminum alloys by room-temperature cyclic plasticity / W. Sun, Y. Zhu, R. Marceau, L. Wang, Q. Zhang, X. Gao, C. Hutchinson // *Science*. – 2019. – V. 363. – P. 972–975.