


Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна
Фізичний факультет
Кафедра фізики кристалів

«Допущено до захисту»

Оцінка « _____ »

В.о. зав. кафедри фізики кристалів
Академік НАН України,
д-р т. наук, проф.
Гриньов Б.В.  _____
12 червня 2025 р.

Голова ЕК:
член-кореспондент НАН України,
д-р фіз.-мат. наук,
Сорокін О. В. _____
19 червня 2025 р.

Поправка Михайло Васильович

**Вплив просторового розподілу дислокацій на високотемпературну
повзучість монокристалів з ґраткою типу NaCl**

Кваліфікаційна робота
на здобуття освітнього ступеня
«Бакалавр» за спеціальністю
104 – «фізика та астрономія»
Освітньо-професійна програма «фізика»



Науковий керівник – доцент кафедри
фізики кристалів, канд. фіз.-мат. наук,
Богданов В.В.



Консультант – канд. фіз.-мат. наук,
Мацокін Д.В.



Рецензент - доцент кафедри фізики
кристалів, канд. фіз.-мат. наук,
Коршак В.Ф.

Харків 2025

Анотація

Поправка М.В. Вплив просторового розподілу дислокацій на високотемпературну повзучість монокристалів з ґраткою типу NaCl. – Рукопис.

Дипломна робота на здобуття освітньо-кваліфікаційного рівня «Бакалавр» за спеціальністю 104 – «фізика та астрономія», – Харків: ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2025. – 40 с. – рис. 9.

З метою дослідження взаємодії дислокацій, що активно народжуються та рухаються в процесі високотемпературної повзучості монокристалів з ґраткою типу NaCl в умовах одноосного стискання вздовж напрямку $\langle 100 \rangle$, було розроблено модель тривимірної дислокаційної динаміки. Ця модель розширяє існуючу модель двовимірної дислокаційної динаміки та враховує взаємодію дислокаційних сегментів з утворенням сидячих дислокацій, площа ковзання яких не є площиною легкого ковзання в монокристалах з ґраткою типу NaCl.

Аналітично досліджено взаємодію двох перпендикулярних сегментів дислокаційних ліній в умовах можливого протікання реакції між ними з утворенням сидячої дислокації.

Промодельовано взаємодію дислокацій різних сімейств, що утворюються при одноосному стисканні монокристалів з ґраткою типу NaCl вздовж напрямку $\langle 100 \rangle$. Сидячі дислокації, що утворились в результаті реакції, перешкоджають подальшому руху дислокацій та зменшують швидкість повзучості.

Ключові слова: дислокації, внутрішні напруження, високотемпературна повзучість, комп'ютерне моделювання.

Abstract

Popravka M. V. Influence of the spatial distribution of dislocations on the high-temperature creep of single crystals with a NaCl lattice. – Manuscript. Diploma thesis for obtaining the educational qualification level “Bachelor” in specialty 104 – “Physics and Astronomy”, - V.N. Karazin Kharkiv National University, 2025. – P. 40. – Fig. 9.

A three-dimensional dislocation dynamics model has been developed to study the interaction of dislocations actively nucleating and moving in the process of high-temperature creep of single crystals with a NaCl lattice under uniaxial compression along the $\langle 100 \rangle$ direction. This model extends the existing model of two-dimensional dislocation dynamics and takes into account the interaction of dislocation segments with the formation of sessile dislocations, the sliding plane of which is not the plane of easy sliding in single crystals with a NaCl lattice.

The interaction of two perpendicular segments of dislocation lines under the conditions of a possible reaction between them with the formation of a sessile dislocation is analytically investigated.

The interaction of dislocations of different families formed under uniaxial compression of monocrystals with a NaCl lattice along the direction the $\langle 100 \rangle$ direction. Sessile dislocations formed as a result of the reaction prevent further movement of dislocations and reduce the creep rate.

Keywords: dislocations, internal stresses, high-temperature creep, computer modeling.

ЗМІСТ

Вступ	5
Розділ 1. Аналітичний огляд літератури	7
1.1 Пластична деформація монокристалів та динаміка дислокацій	7
1.2. Моделювання динаміки дислокацій.....	9
1.2.1. Поділ дислокаційної лінії на окремі сегменти.....	12
1.2.2. Моделювання дислокаційних реакцій	13
1.2.3. Проблеми ефективності процедури моделювання та вибору часового кроку	14
1.3. Залежність швидкості повзучості від кількості активних систем ковзання та можливих реакцій в дислокаційній системі	15
Розділ 2. Методологія тривимірного моделювання еволюції дислокаційних структур у монокристалах із ґраткою типу NaCl	19
2.1. Теоретичні основи взаємодії дислокацій.....	19
2.2. Дислокаційні реакції в монокристалах з ґраткою типу NaCl.....	21
2.3. Опис комп'ютерної моделі.....	28
Розділ 3. Результати моделювання	32
Висновки	36
Список використаних джерел	37

Вступ

Механічні властивості кристалів, зокрема їхня міцність і пластичність, значною мірою визначаються внутрішньою будовою та дефектами кристалічної ґратки. Серед таких дефектів особливу роль відіграють дислокації, які в багатьох випадках визначають процеси деформації, повзучості та руйнування матеріалів. Дослідження дислокаційних структур та їхньої просторової організації є ключовим для розуміння механізмів пластичності, особливо в умовах високих температур, коли активуються процеси дифузії.

Монокристали з ґраткою типу NaCl, такі як KCl, NaCl та інші лужно-галоїдні кристали (ЛГК), є зручними модельними об'єктами для вивчення фундаментальних закономірностей пластичної деформації. Вони мають відносно просту кубічну структуру, що дозволяє детально досліджувати вплив дислокаційних ансамблів на механічні властивості.

Головною гіпотезою дослідження було те, що однією з головних причин зниження швидкості деформації кристалів з квадратною формою горизонтального перерізу, ніж з прямокутною є більш активне утворення сидячих дислокацій у чотирьох системах легкого ковзання при однакових умовах (температура та зовнішнє механічне напруження).

Метою даної роботи є дослідження впливу просторового розподілу дислокацій на високотемпературну повзучість монокристалів з ґраткою типу NaCl. Для цього використано комп'ютерне моделювання взаємодії дислокаційних ансамблів під дією зовнішніх напружень. Також проведено детальний аналіз можливих шляхів утворення малорухомих сидячих крайових дислокацій. Отримані результати дозволять краще зрозуміти механізми пластичної деформації в умовах високотемпературної повзучості

та можуть бути використані для оптимізації властивостей матеріалів у прикладних задачах.

Актуальність дослідження полягає в тому, що вивчення просторової організації дислокацій дає змогу прогнозувати поведінку кристалів при деформації, що є важливим як для фундаментальної науки, так і для розробки нових матеріалів з контрольованими механічними параметрами. Оскільки процеси високотемпературної повзучості супроводжуються динамічними змінами дислокаційної структури, їхнє моделювання дозволяє поліпшити розуміння механізмів релаксації напружень в монокристалах.

Дослідження закономірностей взаємного розташування дислокацій є необхідним для оптимізації термомеханічної стабільності монокристалічних матеріалів. Просторовий розподіл пов'язаних з дислокаціями локальних внутрішніх напружень визначає можливості та шляхи анігіляції і розмноження дислокацій, що безпосередньо впливає на довготривалу міцність кристалічних матеріалів при експлуатації в умовах високих температур.

Робота виконана на базі кафедри фізики кристалів фізичного факультету Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна та включає теоретичний аналіз, та комп'ютерне моделювання.

Розділ 1. Аналітичний огляд літератури

1.1 Пластична деформація монокристалів та динаміка дислокацій

Під час експлуатації монокристали піддаються механічним напруженням. Для прогнозування поведінки монокристалів необхідна надійна інформація про їх пластичну деформацію. Високотемпературна пластична деформація в кристалічних твердих тілах у багатьох випадках обумовлена рухом дислокацій та колективної поведінки дислокаційних ансамблів. Про механіку дислокацій відомо багато як з атомістичної, так і з континуальної точки зору [1].

При певній температурі та рівні зовнішніх напружень швидкість деформації, як відомо, залежить від початкової дислокаційної структури монокристала, його кристалографічних особливостей (кількість можливих площин легкого ковзання) та типу напруженого стану [2]. Вплив останніх двох факторів можна з'ясувати, вивчаючи анізотропію пластичної деформації монокристалів при різних орієнтаціях щодо зовнішніх напружень. Для кристалів з великою кількістю систем легкого ковзання (ґратки г.ц.к. та о.ц.к., кристали типу NaCl) вивчення та аналіз анізотропії пластичної деформації є доволі складними. У цих випадках варіюється не лише орієнтація кристала щодо зовнішньої сили, а й тип напруженого стану. В літературі відомі експериментальні роботи з орієнтаційної залежності пластичної деформації монокристалів металів. Ці дослідження проводилися як при низьких температурах (від рідкого гелію до кімнатної) у режимі активного навантаження, так і при гомологічно високих температурах в режимі повзучості [2].

Враховуючи важливу роль процесів, що відбуваються у дислокаційній системі кристалів, у визначенні міцності матеріалів, описати їх в межах континуальної теорії пластичності кристалів виявилось складним завданням через множинність і складність механізмів руху та взаємодії дислокацій [3]. Крім того, хоча атомістичне моделювання дислокацій є бажаним, його застосування до задач навіть субмікронного масштабу є надзвичайно обчислювально витратним [9,10]. На противагу цьому, континуальні феноменологічні моделі та теорія пружності не враховують дискретність дислокаційного ядра.

Звичайні феноменологічні описи пластичної деформації широко використовуються для аналізу мікромасштабних механічних процесів. Приклади включають деформацію і руйнування в композитних матеріалах, з характерним розміром структури порядку мікрметрів або десятків мікрметрів; пластичну течію поблизу гострих кінців тріщин, мікроіндентування та неоднорідні деформації зерен у полікристалах. Традиційні теорії пластичності не залежать від довжини і ґрунтуються на концепції деформованого матеріального середовища. Пластичність, що обумовлена рухом дислокацій, має характерну довжину, вектор Бюргерса, а дислокації мають тенденцію до утворення високоорганізованих, гетерогенних структур, таких як комірки та полігональні стінки. Крім того, неоднорідне розташування дислокацій призводить до локальних концентрацій напружень (наприклад, на скупченнях), які не моделюються при феноменологічному описі пластичної деформації, і можуть бути важливими для дослідження мікромасштабних процесів руйнування.

Хоча поля напружень, що створюють дислокації навколо себе в кристалах та сили, що діють на них, є добре відомими [18], система рівнянь руху дислокацій не має аналітичного розв'язку.

Теоретичний опис руху дислокаційної лінії в 3Д просторі може розглядатись як векторна міра густини дислокацій, яка враховує не лише

положення, але й напрямок та кривизну дислокаційних ліній у 3D просторі [13]. Рівняння еволюції цієї міри, що є узагальненням класичного тензора густини дислокацій, описує зміну дислокаційної структури з часом і використовує узагальнену швидкість, яка включає рух та обертання дислокацій. Цей підхід дозволяє побудувати кінематично замкнену теорію пластичності, де швидкість пластичної деформації визначається еволюцією цієї міри.

Хоча дислокація в кристалі є «віртуальним» об'єктом, що допомагає легко описати колективний рух окремих атомів, іноді дислокаціям приписують весь спектр характеристик матеріальних об'єктів. Тоді динаміка дислокацій визначається "ньютонівським" рівнянням руху, що включає інерційний, демпфуючий члени та рушійну силу, яка виникає від коротко- та далекодіючих взаємодій. На дислокації діють різні сили, включаючи силу від зовнішнього навантаження, сили взаємодії між дислокаціями, силу самодії дислокації, силу взаємодії з перешкодами, силу «зображення» (image force) [3].

Для більшого розуміння процесів, що відбуваються у дислокаційній підсистемі кристалів в таких умовах можна використовувати методи комп'ютерного моделювання. Отримані дані необхідні для розвитку сучасної теорії пластичності та прогнозування поведінки пристроїв на основі таких кристалів (зокрема, сцинтиляторів) в умовах високотемпературної експлуатації під дією механічних напружень.

1.2. Моделювання динаміки дислокацій

Оскільки безпосередньо спостерігати рух дислокацій у кристалах неможливо, потрібен інструмент, здатний відстежувати рух і взаємодію дислокацій у часі. Дискретна дислокаційна динаміка є одним з таких інструментів, за допомогою якого можна відстежувати еволюцію окремих

дислокаційних ліній. Основи динаміки дислокацій (ДД) були закладені ще в середині 1960-х років. Пізніше концепція тривимірної дискретної динаміки дислокацій була запропонована в 1990-х роках спочатку для ГЦК металів [29, 31]. З того часу було розроблено значну кількість моделей дискретної дислокаційної динаміки та відповідних програмних кодів [3, 4, 9, 10, 25, 26, 30], присвячених різним підходам та аспектам моделювання динаміки дислокацій.

Хоча фундаментальні основи методу ДД були створені протягом кількох десятиліть, проблема зв'язку локальної поведінки дислокацій з макроскопічною реакцією матеріалу, такою як деформаційне зміцнення, довгий час була проблемою обчислювальної спроможності [6, 17, 27, 28, 32]. Ця проблема обумовлена тим, що моделювання поведінки великої кількості дислокацій є обчислювально інтенсивною задачею, оскільки для адекватного опису макроскопічної поведінки матеріалу потрібно враховувати велику кількість дислокаційних сегментів, число яких значно зростає під час деформації, що призводить до стрімкого збільшення обчислювальних витрат. Крім того, складність зумовлена далекодіючою природою взаємодії між дислокаційними сегментами, наявністю великих за абсолютною величиною градієнтів на малих відстанях, гетерогенним просторовим розподілом дислокацій, а також необхідністю обробки дискретних топологічних подій, пов'язаних з реакціями в ядрі дислокацій, такими як анігіляція та утворення дислокаційних з'єднань [11].

Враховуючи обчислювальну складність задачі, спочатку активно моделювали динаміку двовимірних дислокаційних ансамблів [7, 9, 10, 12], головним чином таких, що склалися з періодично повторюваних комірок, кожна з яких містить дислокації нескінченної довжини [6, 12, 25]. Зокрема, моделювання самоорганізації дислокацій під час відпалу, у трикутній ґратці з трьома системами ковзання показало що, з випадкових початкових конфігурацій спонтанно формувалися чіткі дислокаційні стінки та комірки,

причому з часом структура суттєво змінювалась: менші комірки зникали, а середній розмір комірок зростав за степеневим законом. Кількість дислокацій і стінок зменшувалася за степеневими законами, причому середній кут розорієнтації залишався майже постійним [12].

В роботі [25] представлено результати моделювання формування трьох типів дислокаційних структур: стійких смуг ковзання, планарних масивів та дислокаційних комірок. Показано, що формування стійких смуг ковзання є наслідком конкуренції між дипольним утворенням і анігіляцією дислокацій з протилежними векторами Бюргерса. Планарні масиви виникають в умовах монотонного напруження через посилене розмноження дислокацій та формування стабільних дипольних конфігурацій уздовж площини ковзання. Дислокаційні коміркові структури формуються в біаксіальних системах при високих температурах, коли переповзання та ковзання є конкурентними, внаслідок утворення нерухомих диполів і вузлів [25].

У двовірному моделюванні дислокації моделюються як лінійні сингулярності в пружному середовищі. Двовірне моделювання дозволяє враховувати деформації в кілька відсотків і реалістичну густину дислокацій, навіть при складній геометрії експерименту, що моделюється. Однак, таке моделювання є обмеженим через припущення про двовірну геометрію, яка не може безпосередньо врахувати такі важливі особливості, як геометрія ковзання, ефекти лінійного натягу, мультиплікація, перетин дислокацій, утворення з'єднань і перехресне ковзання, які є суттєвими при оцінках як динаміки дислокаційних ансамблів, так і для розрахунку макроскопічних характеристик.

При моделюванні дислокаційної системи як набору прямолінійних дислокаційних ліній короткодійчі взаємодії враховуються як статичні об'єкти, тоді як у тривірних моделях густина джерел і перешкод еволюціонує разом із розвитком дислокаційної структури. Крім того, в той час як двовірне моделювання включає природне утворення диполів та сидячих дислокацій на

перетині площин ковзання, утворення тривимірних з'єднань, які є набагато міцнішими, не враховується. 3D-моделювання необхідне для врахування складної геометрії дислокаційних петель, утворення міцних стабільних тривимірних структур[24].

В процесі моделювання динаміки дислокацій, до народження нових дислокацій підходять по-різному, залежно від початкових умов та мети дослідження. У більшості випадків для моделювання народження дислокацій використовують ізольовані джерела Франка-Ріда. Також спіральні (односторонньо закріплені) джерела, поверхневі дислокації та реакції між дислокаціями [8].

1.2.1. Поділ дислокаційної лінії на окремі сегменти

При моделюванні ДД дислокації розглядаються як дискретні сегменти ліній, що ковзають під дією рушійних сил, таких як зовнішні сили, натяг дислокаційних ліній та сили взаємодії між дислокаціями. Увесь кристал розглядається як ізотропне пружне середовище [17]. Тривимірні моделі взаємодії дислокацій розглядають дислокаційні петлі або сегменти довільної форми, що складаються з послідовності крайових та гвинтових підсегментів елементарної довжини. Прямолінійні відрізки закріплені на кінцях, і їм дозволено вигинатися. Перетин дислокацій розглядається різним чином, у тому числі «ідеалізовано», дозволяючи двом дислокаціям або проходити одна крізь одну коли взаємодія є відштовхувальною, або утворювати просте сидяче з'єднання, коли взаємодія є притягальною [28].

Якщо моделювати дислокаційну лінію як сукупність прямолінійних сегментів, то розумно довжину кожного прямого сегмента обмежити приблизно 50-200 одиницями вектора Бюргерса [32]. В цьому випадку варто врахувати сингулярні сили та напруження, що виникають на гострих кутах взаємодії прямих сегментів та призводить до розбіжності середньої сили над прямим сегментом при зменшенні його довжини.

Незважаючи на певні відмінності між моделюючими кодами ДД, всі моделі дискретизують дислокації на скінченну множину сегментів, з'єднаних у лінію. Сили, що діють на ці дискретні лінії обчислюються з пружної теорії дислокацій, а положення сегментів дислокацій оновлюються згідно з рівняннями руху, що залежать від матеріалу. Складний аспект моделювання ДД полягає у визначенні «локальних» правил, які враховують властивості дислокаційного ядра, такі як перехресне ковзання дислокацій і зародження дислокацій. Такі правила мають бути вироблені або шляхом порівняння з результатами атомістичного моделювання, або за допомогою аналізу результатів відповідних експериментів[22-23].

1.2.2. Моделювання дислокаційних реакцій

Дислокації зумовлюють зміцнення за рахунок їхнього розмноження та взаємодії одна з одною. У роботі [20] показано, що наявність короткодіючих взаємодій між дислокаціями є основною причиною зміцнення монокристалів при повзучості.

У роботі [17] було застосовано ефективний алгоритм, за допомогою якого процес проходження різних типів дислокаційних реакцій та їх кількість можна визначити «на льоту» під час моделювання. До цього, зазвичай, такі дані отримували по закінченню моделювання шляхом імовірнісного аналізу того, що могло статись раніше. Визначення дислокаційних реакцій «на льоту» гарантує, що умови дислокаційних реакцій будуть точно враховані без необхідності зберігати великі обсяги проміжних даних протягом кроків моделювання[1].

Значну увагу було приділено вивченню впливу дислокаційних реакцій на процес зміцнення монокристалів за допомогою різних методів ДД. Було показано, що у ГЦК кристалах виникають чотири незалежні дислокаційні реакції, а саме: замок Хірта, замок Ломера, колінеарні реакції та ковзаючі з'єднання [20]. Було встановлено, що домінуючою взаємодією, яка сприяє

механізму зміцнення, є колінеарна реакція, що виникає між дислокаціями, лінії яких є паралельними [5, 15].

1.2.3. Проблеми ефективності процедури моделювання та вибору часового кроку

З'ясувалось, що значна еволюція дислокаційних структур відбувається завдяки випадковим швидким локальним подіям перегрупування, спричинених нестабільністю структури. Реалістичне моделювання цих подій вимагає великої кількості дуже коротких часових кроків. Тому деякі моделі розглядали ситуації, в яких на кожному часовому кроці рухається лише одна дислокація (на яку діє найбільша сила або яка рухається з найбільшою швидкістю), а усі інші (або більшість дислокацій, розташованих у віддалених локалізаціях) не рухаються [7]. Інші фізично реалістичні методи вимагають проведення ретельного вивчення таких «швидких» процесів і зведення їх у набір простих правил для використання в моделюванні на «повільніших» часових масштабах.

Оскільки система дислокацій в кристалах може проявляти динамічну нестійкість що призводить до самоорганізації та спонтанного формування структур, виникають деякі труднощі з коректним моделюванням таких систем [28]. Для короткодійчих взаємодій базові теорії, які описують основні фізичні механізми на рівні ядра, можуть бути строго включені в динаміку тривимірних дислокацій.. Хоча це було б важливо при дослідженні локальної взаємодії між двома дислокаціями на малих відстанях (близько до ядра), це є небажаним, коли маємо справу з відносно великою кількістю дислокацій у великому масштабі. Наприклад, коли дві дислокації наближаються одна до одної, утворюючи диполь або сидячу дислокацію, їхні відносні швидкості швидко зростають. Чисельно це вимагає використання дуже малого часового кроку (порядку 10^{-12} с), що унеможлиблює моделювання макроскопічної деформації адекватних величин. Тому з фізичної точки зору не обов'язково

слідувати за траєкторіями двох дислокацій, якщо їх взаємна відстань є дуже малою - важливіше сформувавши відповідну сидячу дислокацію (чи диполь), і просто зафіксувати її в просторі, щоб забезпечити подальшу коректну взаємодію з іншими вільно рухомими дислокаціями. Тому постає питання знайти критичну умову (відстань), за якої утворюється сидяча дислокація [27].

При великій кількості дислокацій в ансамблі, оскільки пряме обчислення попарних дальніх взаємодій є обчислювально складним, використання «відстані відсікання» (за межами якої дислокації не взаємодіють) може бути доволі привабливим. Однак дослідження показали, що використання відсікаючої відстані в чисельному аналізі може призвести до створення штучних дислокаційних ансамблів. Тим не менше, пряме обчислення дальніх взаємодій є масивним і накладає серйозні обмеження на обчислювальні зусилля [28].

1.3. Залежність швидкості повзучості від кількості активних систем ковзання та можливих реакцій в дислокаційній системі

В деяких експериментальних дослідженнях [2] відзначалось, що хоча дислокації є основними носіями пластичної деформації, збільшення кількості активних систем ковзання при однаковому значенні приведенного напруження зсуву в цих системах не приводить до обов'язкового збільшення швидкості пластичної деформації.

Кількість активних систем легкого ковзання в монокристалах з ґраткою типу NaCl, що стискаються в напрямку $\langle 100 \rangle$, можна змінювати, змінюючи співвідношення геометричних розмірів прямокутних зразків, що виколоті по площинах спайності $\{100\}$.

При прямокутному перерізі ($a \approx 2c$) дислокації виникають і рухаються переважно лише у двох взаємно перпендикулярних площинах (активні дві

системи легкого ковзання). Якщо мінімальний розмір поперечного перерізу кристала (c) паралельний осі OZ , то в пластичній деформації беруть участь лише чотири дислокації \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 , \mathbf{b}_3 , і \mathbf{b}_4 (рис. 1). Цей факт можна пояснити тим, що ефективний внесок у деформацію вносять дислокації в еквівалентних площинах легкого ковзання (з однаковим значенням приведенного напруження в площині ковзання), яким потрібно долати менше перешкод при



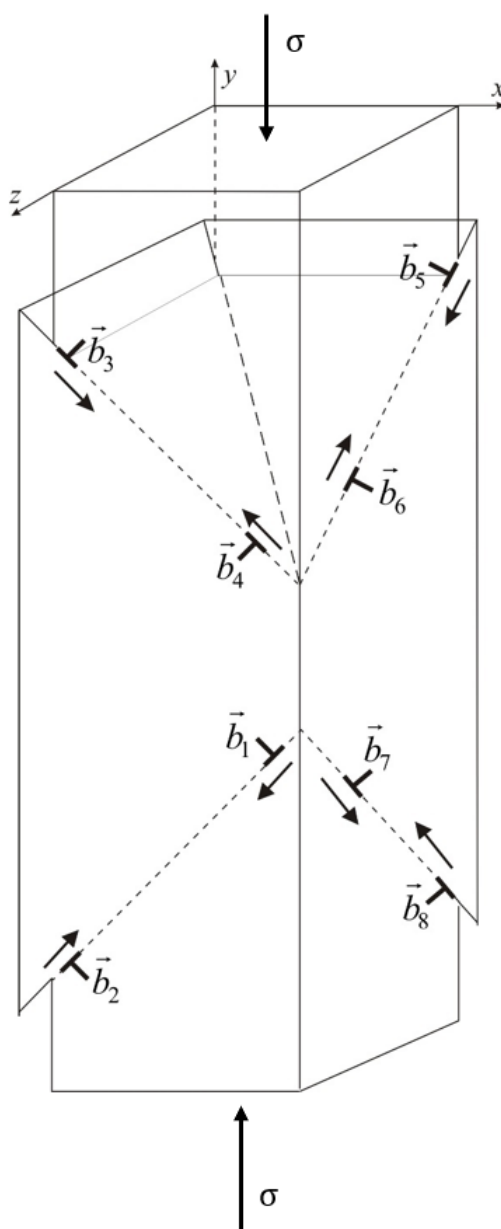


Рис. 1. Вісім типів дислокацій, що утворюються при одноосному стисканні вздовж осі y (вертикально) монокристалів з ґраткою типу NaCl, виколотих по площинах спайності[2, 33].

русі. Отже, якщо бар'єри рівномірно розподілені в об'ємі кристала, то чим коротший шлях дислокації до поверхні, тим легше вона прослизає і тим більший внесок вона зробить у деформацію. Це пояснює також зростання швидкості повзучості, що спостерігається в експериментах при зменшенні

мінімального поперечного розміру (c) кристала (рис. 2, криві 1 і 2). Можна було б очікувати, що при однакових значеннях (c) кристал з квадратним перерізом, де активними є 4 площини ковзання, деформуватиметься швидше, ніж кристал з прямокутним перерізом. Однак експерименти показали, що при $a \approx 2c$ швидкість повзучості вища, ніж для кристалів з $a \approx c$ (рис. 2, криві 2 і 3). Оскільки поперечний переріз є квадратним ($a \approx c$), чотири площини типу $\{110\}$ є еквівалентними і вісім різних типів дислокацій можуть робити внесок у деформацію. На рис. 1 одноосне напруження σ прикладено вздовж осі OY до площини XOZ .

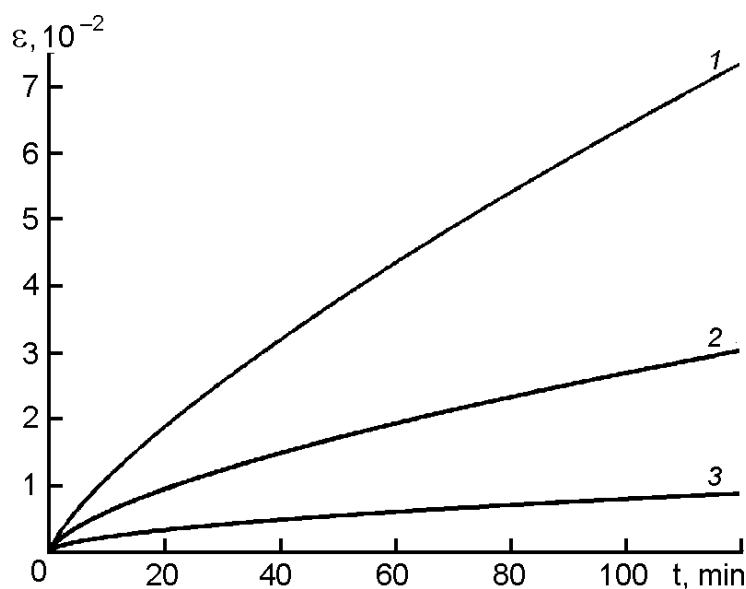


Рис. 2. Часова залежність деформації монокристалів NaCl. $T = 600^{\circ} \text{C}$, $\sigma = 0.8 \text{ МПа}$. Зразки з прямокутним (1, 2) та квадратним (3) поперечним перерізом. $l_{min}(1) < l_{min}(2) \approx l_{min}(3)$ [2].

Перші дві можливості однакові для всіх дислокацій. Третя причина призводить до збільшення рівня зворотних внутрішніх напружень і, як зазначалось вище, ймовірність зупинки зростає зі збільшенням довжини шляху до поверхні кристала (збільшення розмірів кристала). Автори [2] припускають, що саме четверта можливість є основною причиною зменшення кількості рухливих дислокацій при такому експерименті.

Розділ 2. Методологія тривимірного моделювання еволюції дислокаційних структур у монокристалах із ґраткою типу NaCl

2.1. Теоретичні основи взаємодії дислокацій

Для дослідження динаміки дислокацій у кристалі використовувалася наступна модель. В її основі лежить уявлення про те, що кожна дислокація створює навколо себе поле пружних напружень. Це поле впливає на інші дислокації, що входять до ансамблю. Зовнішнє напруження, якщо воно є, додається до внутрішніх напружень, створюваних дислокаціями, згідно з принципом суперпозиції.

Знаючи напруження, за відомою формулою Піча-Келера [18] можна визначити силу, що діє на одиницю довжини дислокації

$$f_i = e_{ijk} l_j \sigma_{km} b_m \quad (1)$$

де l_j – одиничний вектор, що співпадає із напрямком лінії дислокації, який у правій трійці, направлений у протилежний бік вісі Z.

Швидкість руху кожної ділянки дислокаційної лінії визначається лише сумарною силою, яка на неї діє. Залежність швидкості ковзання дислокації від сили, що на неї діє, визначалась за експериментальними даними [19]. При гомологічно високих температурах під дією механічних напружень дислокації ковзають зі швидкістю, пропорційною до прикладеного напруження [30].

Швидкість переповзання є лінійною функцією від прикладеної сили [14, 18].

Поодинокa нескінченна прямолінійна крайова дислокація, що має вектор Бюргерса $\vec{b} = (b, 0, 0)$, а лінія якої співпадає з віссю Oz , створює у безмежному пружному середовищі наступні напруження[18]:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{yy} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \\ \sigma_{xy} &= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}\end{aligned}\quad (2)$$

$$\begin{aligned}\sigma_{zz} &= \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = \sigma_{yy} = -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2} \\ \sigma_{xz} &= \sigma_{yz} = 0\end{aligned}$$

де μ – модуль зсуву, ν – коефіцієнт Пуассона, b – величина вектора Бюргерса. Для монокристалів NaCl $\mu = 1.88 \cdot 10^{10}$ Па, $\nu = 0,26$, $b = 3,96 \cdot 10^{-10}$ м.

В умовах процесу, який ми моделюємо, народжуються та рухаються дислокації двох сімейств.

а) Дислокації з векторами Бюргерса $b_a = b(\pm 1, \pm 1, 0)$, лінії яких паралельні осі Oz . Вони позначені на рис. 1 як $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3, \vec{b}_4$.

б) Дислокації з векторами Бюргерса $b_b = b(0, \pm 1, \pm 1)$, лінії яких паралельні осі Ox . Вони позначені на рис. 1 як $\vec{b}_5, \vec{b}_6, \vec{b}_7, \vec{b}_8$.

Формули для механічних напружень, що створюють ці дислокації можна отримати двома шляхами. Або з формул (2), застосувавши відповідні матриці повороту[30], або використавши скалярну функцію напружень Ейрі [18]

$$\psi = -\frac{\mu b y}{4\pi(1-\nu)} \ln(x^2 + y^2),$$

другі похідні від якої (з відповідною попередньою заміною x та y) дадуть нам формули для напружень.

У випадку, коли дислокації різних сімейств перетинаються, або лінії дислокацій підходять близько одна до одної, можна умовно поділити дислокаційні лінії на окремі сегменти та окремо розглядати взаємодію цих сегментів. Тоді треба використовувати інші формули для напружень, що створює у пружному просторі прямолінійний сегмент крайової дислокації [18].

Нехай прямолінійний сегмент дислокаційної лінії з вектором Бюргерса $\vec{b} = (b, 0, 0)$ лежить на осі z та займає відрізок (z_1^*, z_2^*) . Тоді [18]:

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}(x, y, z, z^*) &= \sigma_0 b \frac{y}{R(R + \lambda)} \left[1 + \frac{x^2}{R^2} + \frac{x^2}{R(R + \lambda)} \right] \\ \sigma_{yy}(x, y, z, z^*) &= -\sigma_0 b \frac{y}{R(R + \lambda)} \left[1 - \frac{y^2}{R^2} - \frac{y^2}{R(R + \lambda)} \right] \\ \sigma_{xy}(x, y, z, z^*) &= -\sigma_0 b \frac{x}{R(R + \lambda)} \left[1 - \frac{y^2}{R^2} - \frac{y^2}{R(R + \lambda)} \right] \\ \sigma_{zz}(x, y, z, z^*) &= \sigma_0 b \left[2y/R(R + \lambda) + y\lambda/R^3 \right] \\ \sigma_{xz}(x, y, z, z^*) &= -\sigma_0 b \frac{xy}{R^3} \\ \sigma_{yz}(x, y, z, z^*) &= \sigma_0 b \left(\frac{y}{R} - \frac{y^2}{R^2} \right)\end{aligned}\quad (3)$$

$$\text{Де } \sigma_0 = \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)}, \lambda = z^* - z, R = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z^*)^2}.$$

Відповідні компоненти тензора напружень треба обчислювати як різницю

$$\sigma_{ij}(x, y, z) = \sigma_{ij}(x, y, z, z_2^*) - \sigma_{ij}(x, y, z, z_1^*) \quad (\text{якщо } z_2^* > z_1^*)$$

2.2. Дислокаційні реакції в монокристалах з ґраткою типу NaCl

У роботі [2] описано наступний експеримент. Зразки монокристалів NaCl у формі прямокутних паралелепіпедів були виколоті по площинах спайності $\{100\}$. Початкова густина дислокацій складала $\rho_0 \sim 10^9 \text{ м}^{-1}$. Зразок вертикально поміщали в трубчасту піч і нагрівали. Після досягнення

температури в 600°C ($0,81 T_{\text{пл}}$) до зразка прикладали одноосне стискаюче (вертикальне) напруження величиною $0,8$ МПа (що є достатнім для утворення нових дислокацій при температурі експерименту). Зразок витримували під навантаженням протягом певного часу при постійній температурі в режимі повзучості.

Експеримент виявив суттєві відмінності у деформації та її швидкості залежно від співвідношення сторін горизонтального перерізу зразка. Виявилось, що при однакових умовах (температура та зовнішнє механічне напруження) сильніше та швидше деформуються кристали з прямокутною формою горизонтального перерізу, ніж з квадратною (рис. 2). Автори висловили припущення, що однією з головних причин цього є більш активне утворення сидячих дислокацій в умовах, коли дислокації активно утворюються у чотирьох системах легкого ковзання.

Розглянемо можливі дислокаційні реакції в кристалах типу NaCl більш детально. Дві дислокації з векторами Бюргерса \mathbf{b}_1 і \mathbf{b}_2 можуть реагувати одна з одною і утворювати дислокацію з вектором Бюргерса \mathbf{b} , якщо виконується $|\vec{b}_1|^2 + |\vec{b}_2|^2 \geq |\vec{b}|^2$ зменшення енергії кристала, тобто релаксація внутрішніх напружень. Кристали типу NaCl містять 6 систем легкого ковзання ($\{110\}\langle 110\rangle$), отже, існує 12 типів дислокацій з різними векторами Бюргерса.

Тому, в принципі, можливі $\frac{12 \cdot 11}{2} = 66$ різних дислокаційних реакцій. Розглянемо як приклад можливі дислокаційні реакції прямолінійної крайової дислокації з вектором Бюргерса $\mathbf{b}_1 = a/2[101]$ і вектором, дотичним до дислокаційної лінії $l_1 = [010]$, з іншими дислокаціями кристала:

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] + \frac{a}{2}[10\bar{1}] = \mathbf{0} \quad (4)$$

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] + \frac{a}{2}[\bar{1}10] = \frac{a}{2}[\bar{2}11] \quad (5)$$

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] + \frac{a}{2}[101] = a[001] \quad (6)$$

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] + \frac{a}{2}[01\bar{1}] = \frac{a}{2}[\bar{1}10] \quad (7)$$

Перша реакція приводить до анігіляції дислокацій. Друга реакція можлива, оскільки $b_1^2 + b_2^2 < b^2$ (існує 4 реакції цього типу). Третя реакція не дає приросту або зменшення енергії кристала, тобто вона може відбуватися під зовнішньою дією, але не спонтанно. В результаті утворюється сидяча дислокація. Четверта дислокаційна реакція є енергетично вигідною і може відбуватися спонтанно або під незначною зовнішньою дією, оскільки $b_1^2 + b_2^2 > b^2$. В результаті утворюється сидяча дислокація з дотичним вектором $l = [\bar{1}11]$. Таких реакцій також є 4. Дислокаційні структури кристалів з орієнтацією $\langle 100 \rangle$ якісно подібні між собою у зразках, деформованих стисканням при кімнатній температурі з подальшим відпалом, та зразках, випробуваних у режимі високотемпературної повзучості. Вони характеризуються типовою дрібноблоковою структурою з сіткою дислокаційних границь, що містить як поодинокі хаотично розташовані дислокації, так і підвішені границі з одним або обома обірваними кінцями всередині блоків.

Енергетичний критерій можливості протікання дислокаційної реакції $|\vec{b}_1|^2 + |\vec{b}_2|^2 > |\vec{b}|^2$ виконується для пар дислокацій, якщо кут між їхніми векторами Бюргерса є тупим. Наприклад, для дислокацій з векторами $\vec{b}_1 = b(1,1,0)$ та $\vec{b}_2 = b(0,-1,1)$ (рис. 1) кут $\varphi = 120^\circ$.

Для того щоб краще з'ясувати протікання процесу утворення сидячої дислокації у випадку, коли енергетичний критерій виконано, більш докладно розглянемо взаємодію двох невеликих сегментів дислокацій (дислокаційних ліній) з векторами $\vec{b}_1 = b(1,1,0)$ та $\vec{b}_2 = b(0,-1,1)$, схематично зображених на рис. 3. Будемо вважати, що ці сегменти є прямолінійними. Розглянемо їх взаємодію з точки зору напружень, які вони створюють у пружному середовищі, сил, що діють на ці сегменти та можливих шляхів руху цих сегментів під час протікання дислокаційної реакції.

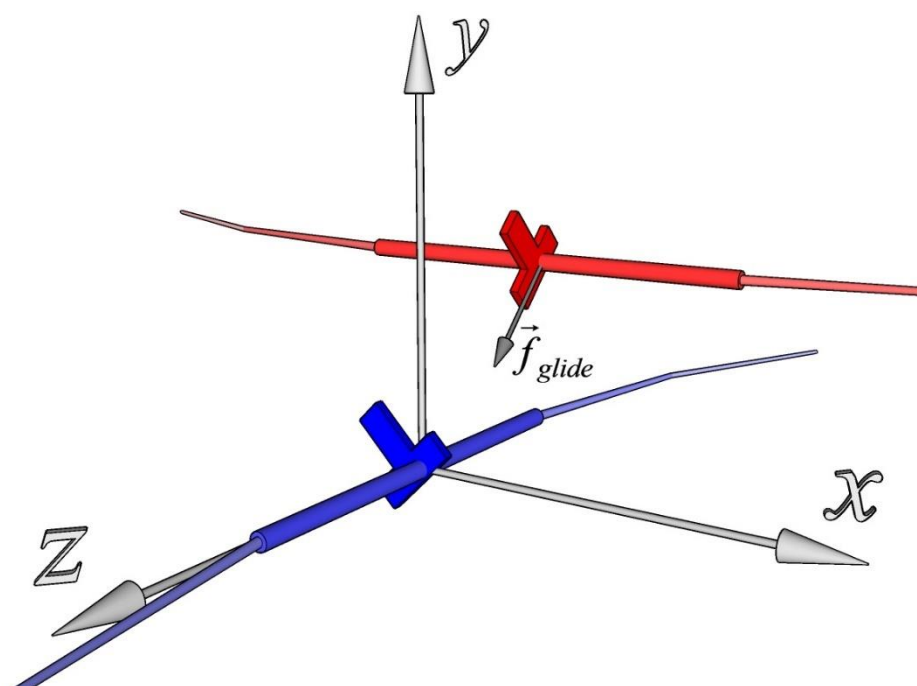
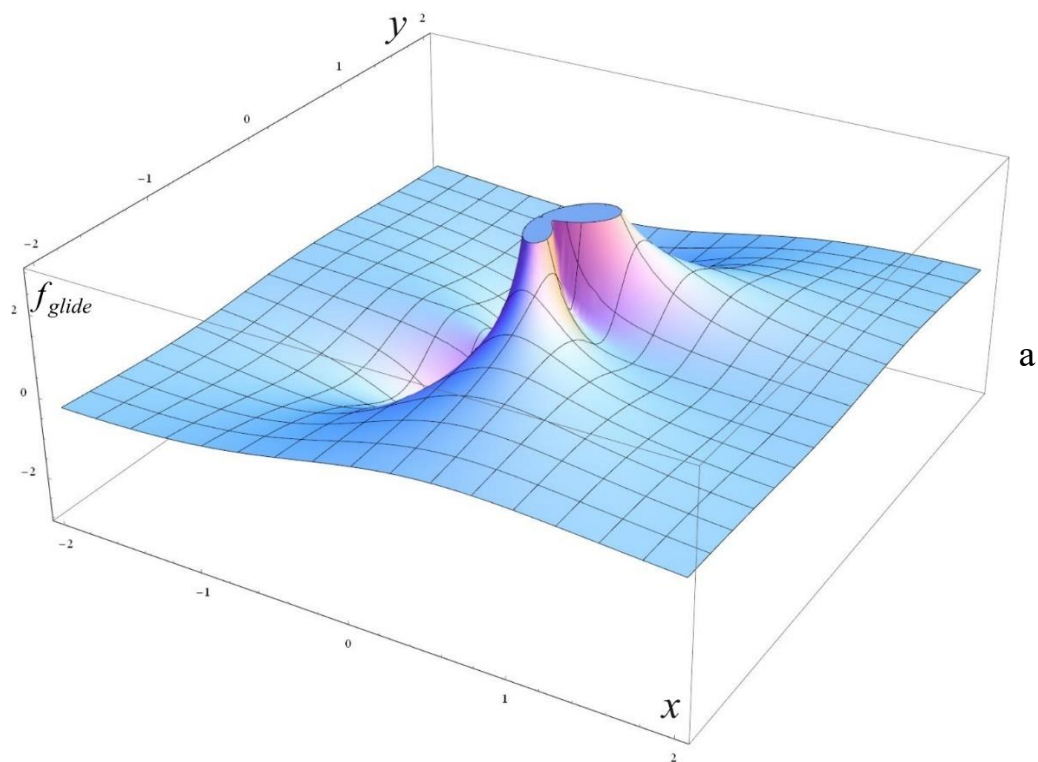


Рис. 3. Схематичне зображення двох сегментів дислокацій. Синім кольором позначена дислокація з вектором Бюргера $\vec{b}_1 = b(1,1,0)$ (рис. 1). Червоним кольором позначена дислокація з вектором Бюргера $\vec{b}_7 = b(0,-1,1)$ (рис. 1).

При подальшому аналізі будемо вважати, що центр «синього» сегменту розташований в початку координат та не рухається. Розрахуємо всі компоненти тензора механічних напружень, які створює «синій» сегмент у точці, де знаходиться «червоний» сегмент. Далі, використовуючи формулу Піча-Келера (1), розрахуємо сили f_y , f_z , що діють на «червоний» сегмент. Оскільки крайові дислокації рухаються двома механізмами (ковзання та переповзання), які суттєво відрізняються за своєю природою та швидкістю, розглянемо окремо проекцію цих сил (f_{glide}) на площину ковзання «червоної» дислокації.

На рис. 4 (а, б) та 5 (а, б) наведено загальний вигляд поверхні $f_{glide}(x,y)$ та контурів рівних «висот» цієї поверхні. Рис. 4 ілюструє ситуацію, коли $z_1^* < z < z_2^*$, тобто центр «червоного» сегмента (рис. 3) розташований по осі z в межах «синього» сегмента. Рис. 5 відповідає ситуації, коли $z_1^* < z_2^* < z$, тобто

«червоний» сегмент знаходиться по осі z за межами «синього сегмента». В обох випадках ми бачимо (рис. 4б, 5б), що існує положення стійкої рівноваги (червона лінія, що проходить крізь початок координат). Тобто, це і є шлях (вздовж цієї лінії) зближення сегментів дислокаційних ліній, перед утворенням сидячої дислокації.



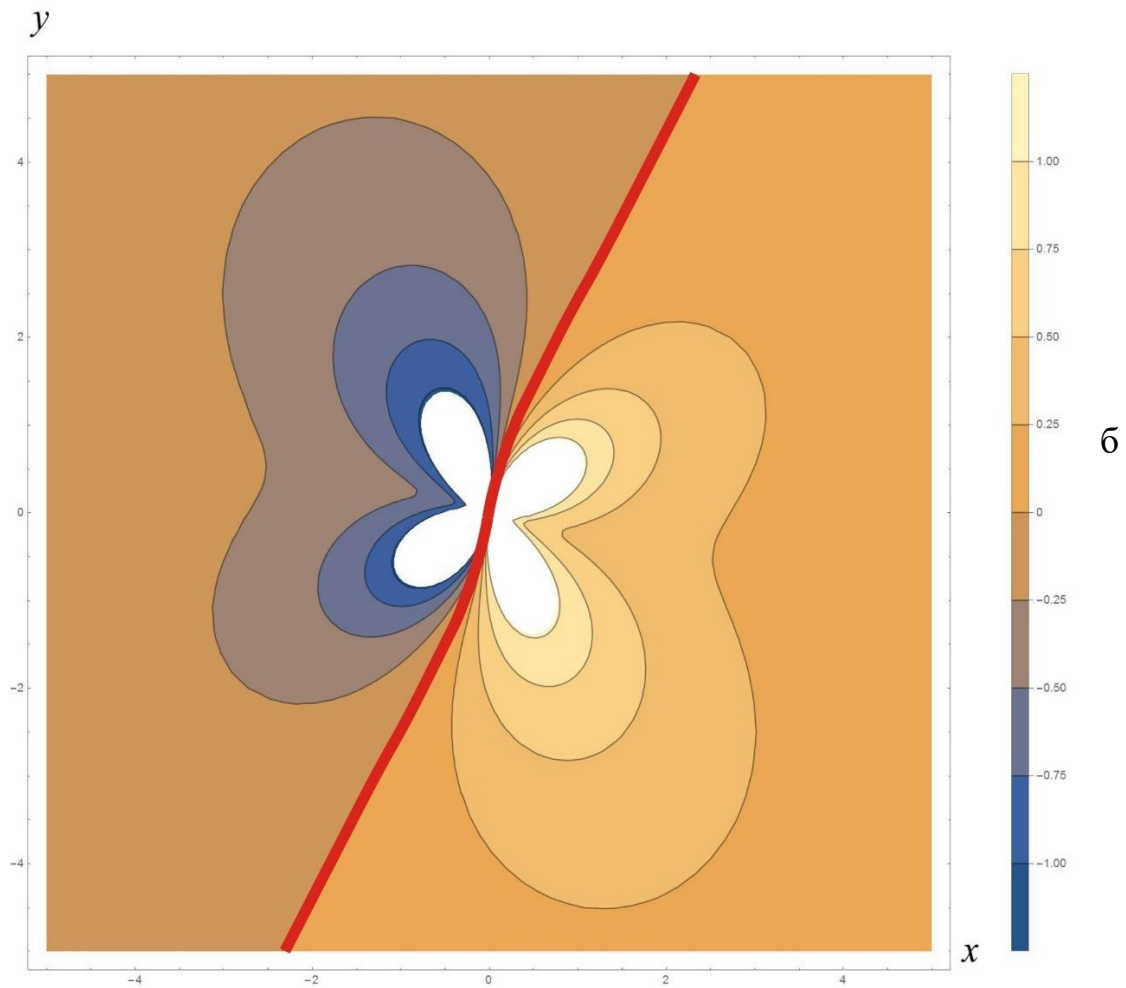


Рис. 4. Функція $f_{glide}(x, y)$ при $z_1^* < z < z_2^*$. а) – вигляд поверхні; б) – контури рівних «висот» поверхні. Усі величини взяті в довільних (нормованих) одиницях. Червона лінія позначає положення сталої рівноваги сегмента, що рухається ковзанням.

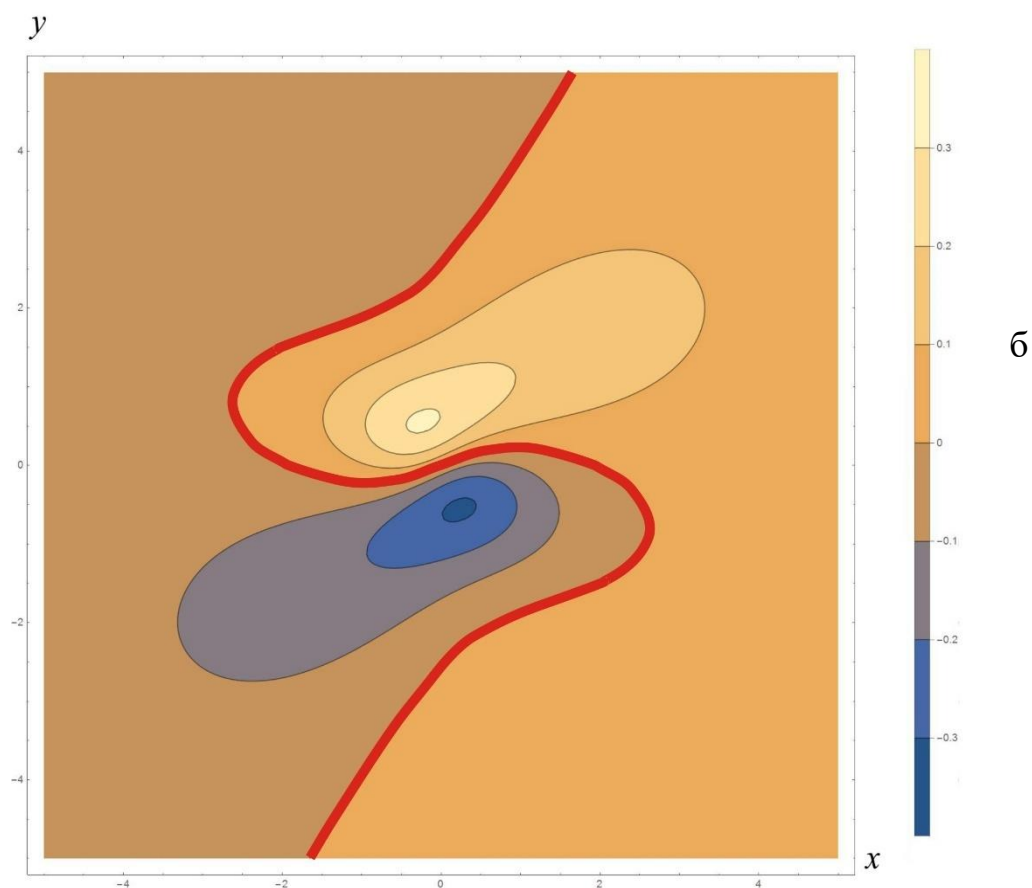
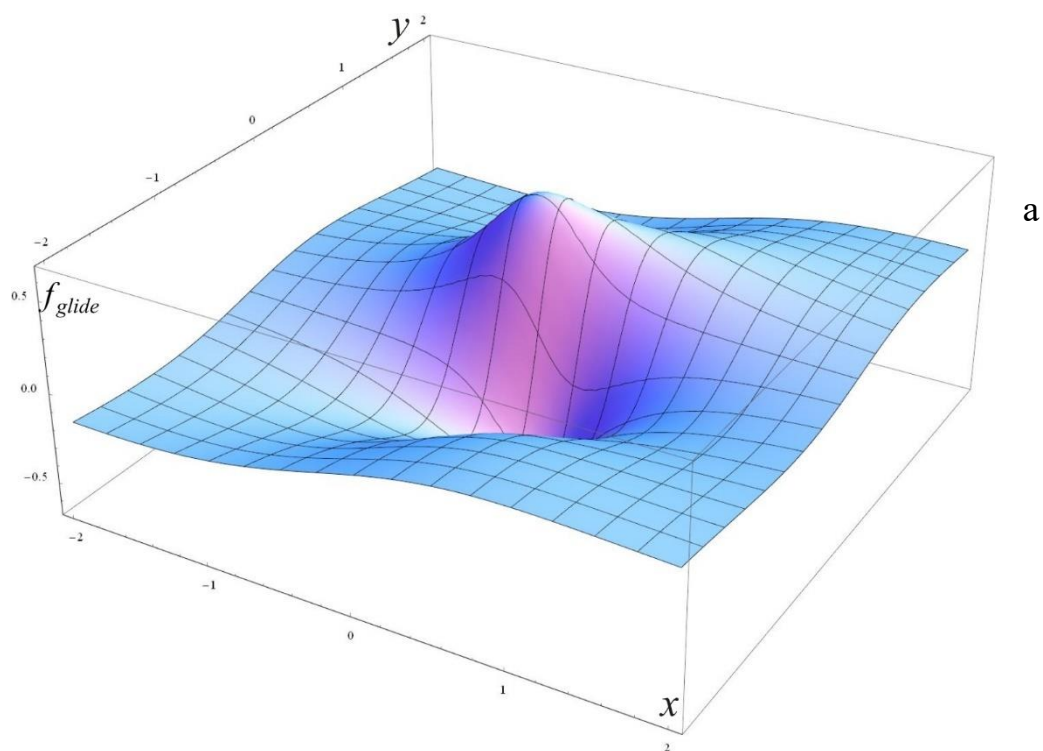


Рис. 5. Функція $f_{glide}(x, y)$ при $z_1^* < z_2^* < z$. а) – вигляд поверхні; б) – контури рівних «висот» поверхні. Усі величини взяті в довільних (нормованих) одиницях. Червона лінія позначає положення сталої рівноваги сегмента, що рухається ковзанням.

На рис. 6 зображено поверхню, що являє собою розв'язання рівняння $f_{glide}(x, y)=0$. Тобто це геометричне місце точок, в яких центр «червоного» сегмента перебуває у положенні стійкої рівноваги «за ковзанням». Фактично поверхня на рис. 6 відображає безперервний набір червоних ліній (рис. 4 б, 5 б), обчислених при різних значеннях z .

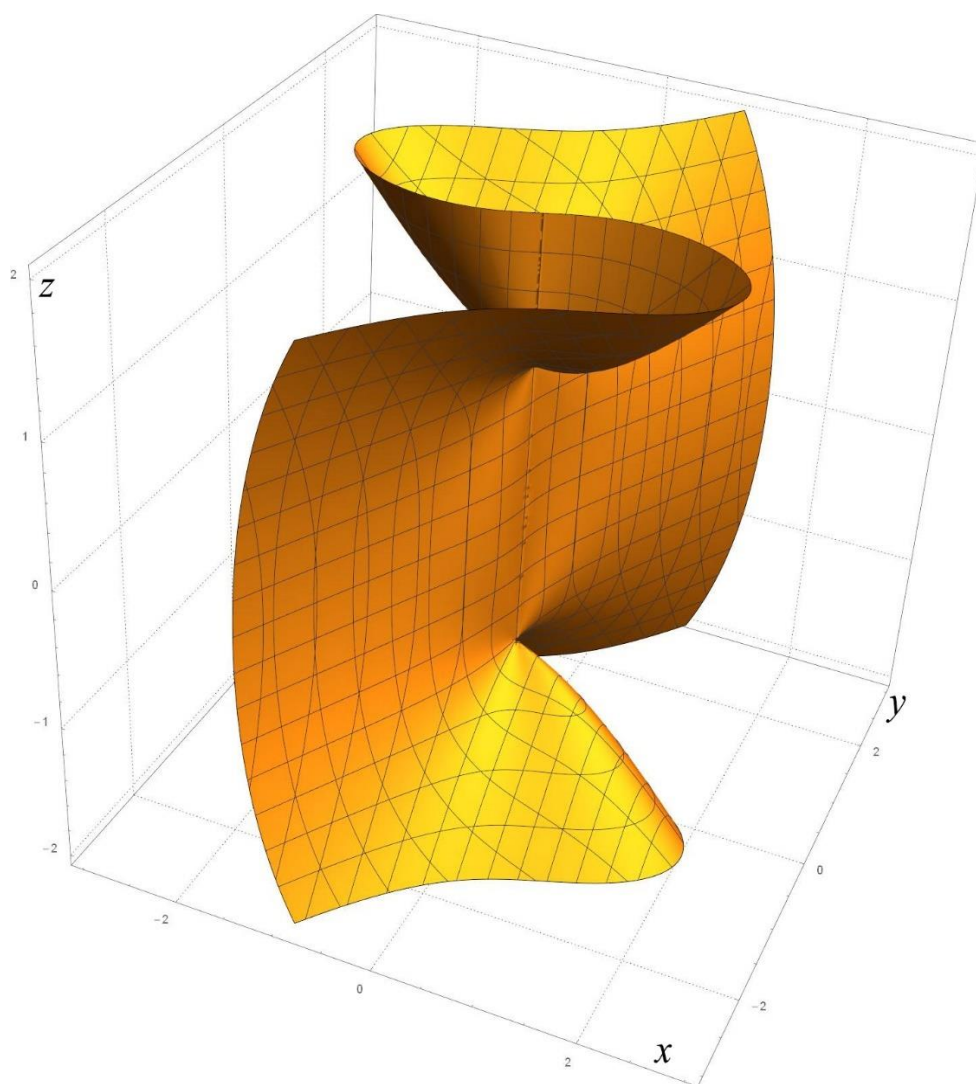


Рис. 6. Поверхня, що являє собою розв'язання рівняння $f_{glide}(x, y)=0$.

2.3. Опис комп'ютерної моделі

Для того щоб промоделювати взаємодію непаралельних дислокацій та їх сегментів у тривимірному кристалі, а також для візуалізації отриманих результатів, було створено нову модель тривимірної дислокаційної динаміки. Ця модель розвиває ідеї і підходи та частково базується на вже існуючій моделі двовимірної динаміки дислокацій [16].

Для більш простої та наочної візуалізації результатів ми використовували платформу 3D візуалізації (3D-рушій) Unity 3D. Платформа Unity надає інструменти для рендерингу, що характеризуються гнучкою архітектурою управління об'єктами та їх просторовими трансформаціями. Це забезпечує надійний контроль над рухом відповідно до траєкторій, що визначаються програмним кодом. Конвеєр рендерингу Unity забезпечує ефективну обробку динамічних змін положення об'єктів у сценах зі значною кількістю елементів, що перебувають у русі. Текст програми написаний мовою програмування C#.

Окремо треба зупинитись на особливостях моделювання фізичних процесів у середовищі Unity на C#. За замовчання Unity для представлення чисел з «плаваючою» крапкою (real numbers) використовує тип float. Цей тип використовує 4 байти на число та є ефективним з точки зору швидкодії та використання оперативної пам'яті. Однак, якщо нам потрібно проводити інтенсивні циклічні обчислення, цього буде недостатньо через постійні помилки округлення (особливо якщо алгоритм потребує систематичного віднімання величин одного порядку, коли різниця може бути малою і співмірною з помилкою округлення). Тому в задачах моделювання варто використовувати тип double (8 байтів на число) та відповідні математичні функції (тригонометричні, квадратний корінь, ...) з бібліотеки System.

На кожному часовому кроці, знаючи поточне положення кожного сегмента кожної дислокації, розраховуються механічні напруження, які створює відповідний сегмент у навколишньому просторі. А саме, у точках, де знаходяться центри інших сегментів інших дислокацій. Потім за формулою Піча-Келера (1) розраховуються компоненти сили, що діє на кожен сегмент.

Оскільки дислокація бере участь у двох типах руху (консервативний та неконсервативний), то потрібно обчислити проекції сили на площину ковзання дислокаційної лінії (f_{glide}) та на нормаль до цієї площини (f_{climb}). Далі розраховуються відповідні швидкості ковзання та переповзання. Вважаємо, що протягом часового кроку Δt всі сегменти рухаються з обчисленими швидкостями прямолінійно та рівномірно.

Питання вибору величини часового кроку при моделювання процесів у системах, що складаються з багатьох частинок, активно дискутується у літературі [7, 22, 23, 31]. Ми вважаємо розумним наступний підхід.

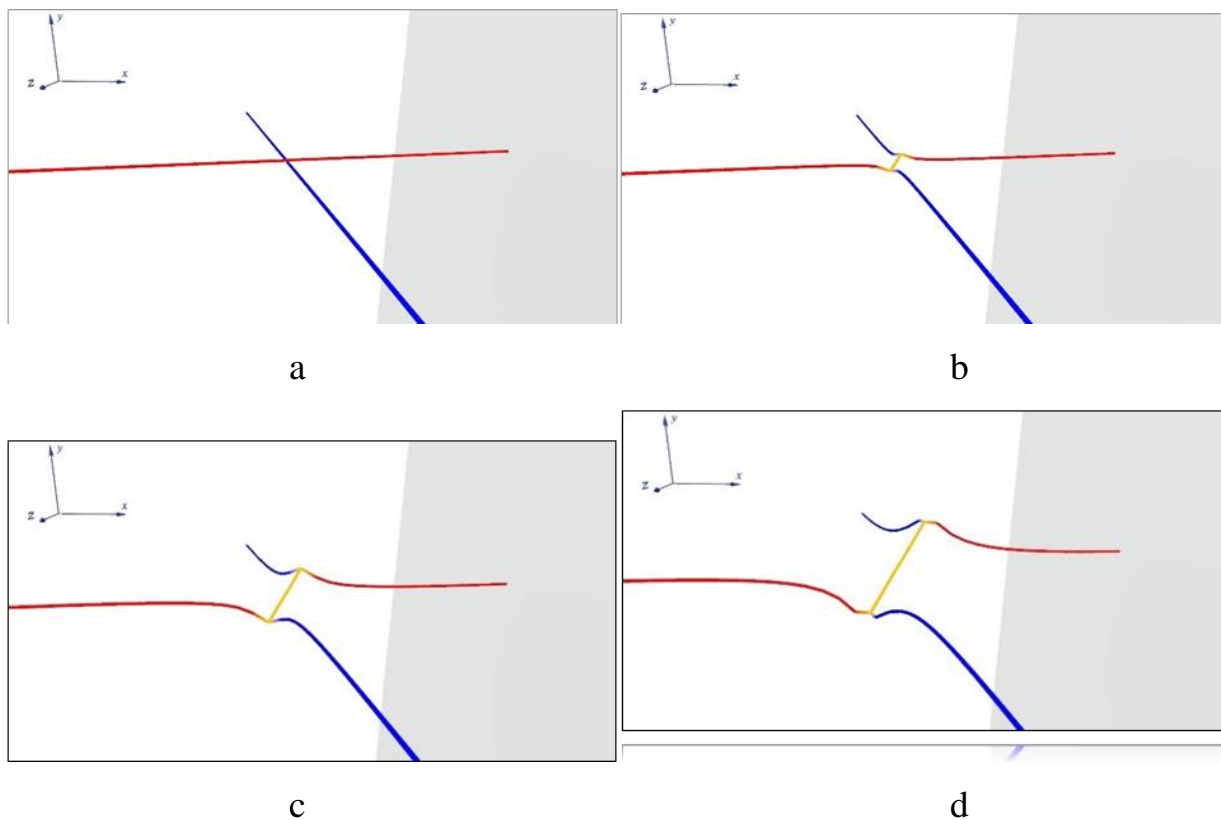
Оскільки величини компонентів тензора напружень, що створюють дислокації навколо себе, пропорційні $\frac{1}{R}$, де R – відстань поміж дислокаціями (або їх сегментами), то при наближенні дислокацій одна до одної (наприклад, перед дислокаційною реакцією), напруження зростають. Відповідно зростають величини сил та швидкостей. Тому, щоб уникнути нереалістичного ефекту «тунелювання», в таких ситуаціях потрібно зменшувати часовий крок. Ми обчислюємо найменшу відстань поміж сегментами, а також найбільшу швидкість (абсолютну величину), яку має якийсь сегмент. Відношення цих величин дає нам час, за який найшвидший сегмент подолає найменшу відстань. Цей час ми ділимо на коефіцієнт (що підбирається експериментально), і отримуємо величину часового кроку. Такий підхід нам гарантує, що жоден сегмент за один часовий крок не наблизиться до свого найближчого сусіда ближче, ніж на долю відстані поміж ними, яка визначається цим коефіцієнтом. У двовимірному випадку (коли взаємодіють паралельні дислокації) значення цього коефіцієнту беремо в межах 4 – 10. У тривимірному випадку – суттєво більше (50 – 200).

При такому підході часові кроки є нерівномірними. Тобто моделювання, що йде при роботі програми у «реальному часі» (з точки зору платформи Unity), з точки зору системи, що моделюється відбувається дуже нерівномірно (величина часових кроків може відрізнятись на кілька

порядків). Тому потрібно реєструвати справжній час, що йде у системі дислокацій.

Розділ 3. Результати моделювання

Моделювання виявило, що активна взаємодія між дислокаціями двох сімейств призводить до масового утворення стабільних сидячих дислокацій, які істотно впливають на кінетику повзучості. За допомогою розробленої моделі візуалізовано утворення сидячої дислокації при взаємодії двох дислокацій з векторами Бюргерса $\vec{b} = b(1,1,0)$ та $\vec{b} = b(0,-1,1)$. Вектор Бюргерса результуючої дислокації дорівнюватиме $\vec{b} = b(1,0,1)$. Як це і передбачалось з геометричних міркувань, лінія дислокації, що утворилась, йде вздовж напрямку $[11\bar{1}]$ (вздовж цієї прямої перетинаються площини ковзання дислокацій, що взаємодіють). На рис. 7 наведено послідовні стадії утворення такої сидячої дислокації.



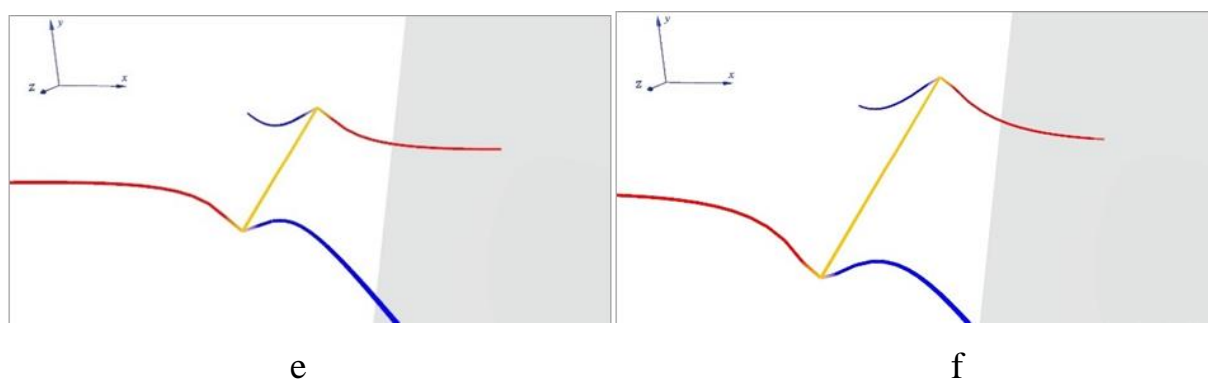


Рис. 7. Послідовні стадії утворення сидячої дислокації (позначена помаранчевим кольором) при взаємодії двох дислокацій з векторами Бюргерса $\vec{b} = b(1,1,0)$ (синій колір) та $\vec{b} = b(0,-1,1)$. (червоний колір). Сірий чотирикутник у правій частині – зовнішня поверхня, на яку виходить червона лінія.

Якісно промодельовано поведінку дислокаційного ансамблю, що складається з двох сімейств дислокацій. А саме, що утворюються при одноосному стисканні монокристалів з ґраткою типу NaCl вздовж напрямку $\langle 100 \rangle$: дислокацій з векторами Бюргерса $\vec{b} = b(1,1,0)$ та $\vec{b} = b(0,-1,1)$. Встановлено, що в результаті взаємодії утворюються сидячі дислокації з вектором Бюргерса $\vec{b} = b(1,0,1)$, лінія яких йде вздовж напрямку $[11 \]$ (рис. 8).

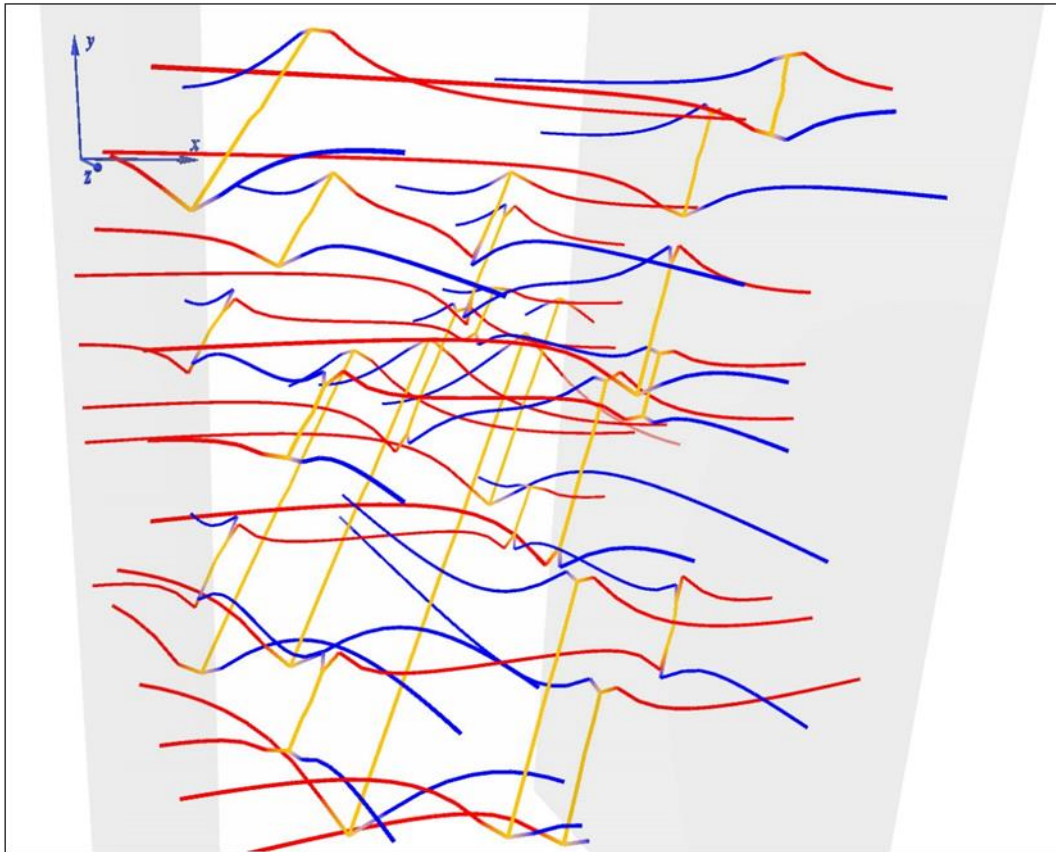


Рис. 8. Результат взаємодії дислокацій двох сімейств: з векторами Бюргера $\vec{b} = b(1,1,0)$ (синій колір) та $\vec{b} = b(0,-1,1)$ (червоний колір). Жовтим кольором позначені сидячі дислокації з вектором Бюргера $\vec{b} = b(0,1,0)$, лінії яких йдуть вздовж напрямку $[11\bar{1}]$. Кінці синіх ліній розташовані на передній та задній гранях, червоних ліній – на лівій та правій гранях.

У рамках дослідження взаємодії іншої пари сімейств дислокацій виявлено, що утворюються в тих самих умовах, виявлено, що між цими дислокаціями відбуваються характерні реакції, що призводять до утворення стабільних сидячих дислокацій. При взаємодії дислокацій з векторами Бюргера $\vec{b} = b(-1,-1,0)$ та $\vec{b} = b(0,1,1)$ утворюються сидячі дислокації з вектором Бюргера $\vec{b} = b(-1,0,1)$, лінія яких йде вздовж напрямку $[111]$ (рис. 9).

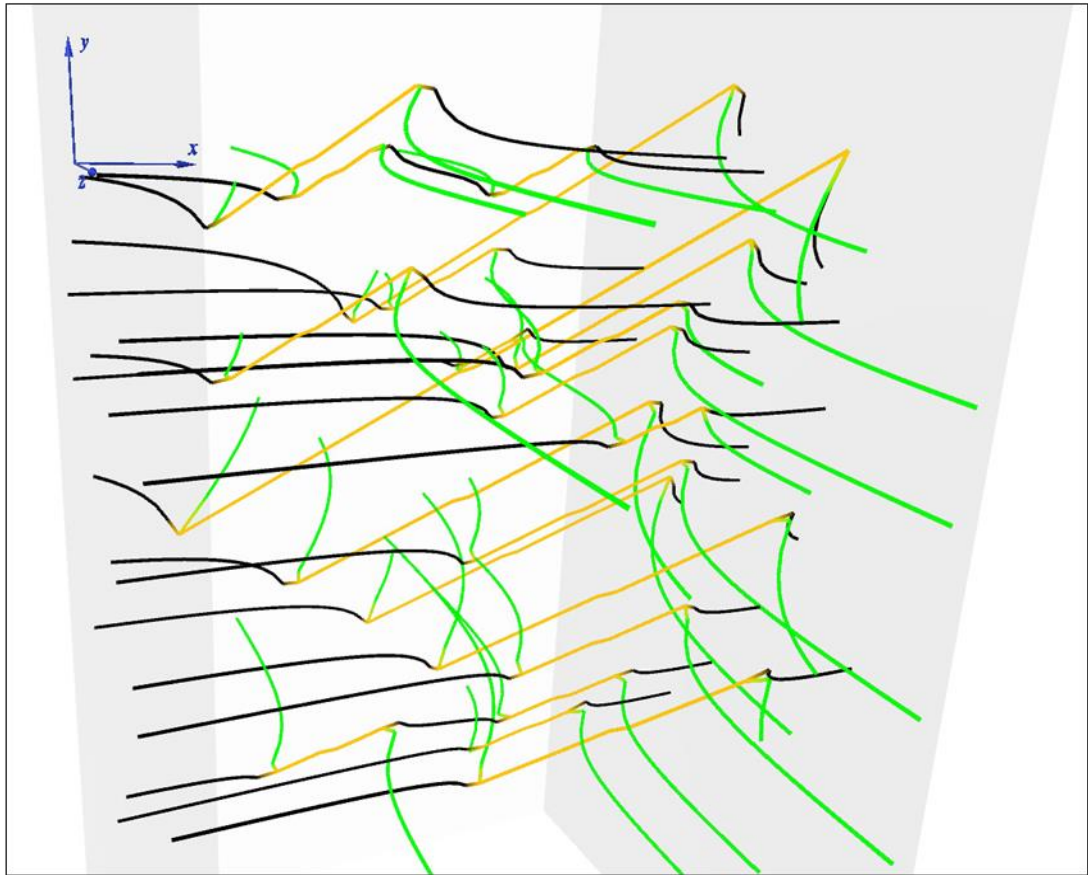


Рис. 9. Результат взаємодії дислокацій двох сімейств: з векторами Бюргерса $\vec{b} = b(-1, -1, 0)$ (зелений колір) та $\vec{b} = b(0, 1, 1)$ (чорний колір). Жовтим кольором позначені сидячі дислокації з вектором Бюргерса $\vec{b} = b(-1, 0, 1)$, лінії яких йдуть вздовж напрямку $[111]$. Кінці зелених ліній розташовані на передній та задній гранях, чорних ліній – на лівій та правій гранях.

Висновки

1. На базі існуючої моделі двовимірної дислокаційної динаміки розроблено нову модель динаміки дислокацій, що враховує взаємодію дислокаційних сегментів з утворенням сидячих дислокацій, площина ковзання яких не є площиною легкого ковзання в монокристалах з ґраткою типу NaCl.

2. Аналітично досліджено взаємодію двох перпендикулярних сегментів дислокаційних ліній в умовах можливого протікання реакції між ними з утворенням сидячої дислокації.

3. Промодельовано взаємодію дислокацій різних сімейств, що утворюються при одноосному стисканні монокристалів з ґраткою типу NaCl вздовж напрямку $\langle 100 \rangle$.

Список використаних джерел

1. A. Mishra, A. Alankar, Identification of Dislocation Reactions and their Role in Uni-axial Deformation of Copper Single Crystals, *Procedia Structural Integrity*, Volume 14, 2019, Pages 544-548, <https://doi.org/10.1016/j.prostr.2019.05.065>.
2. Matsokin D.V. Peculiarities of high-temperature plastic straining anizotropy in with NaCl type single crystals in creep condition / D.V. Matsokin, I.N. Pakhomova, V.P. Matsokin // *Functional materials.*–2005.–12, N 4.– С. 652 – 657.
3. H.M.Zbib, Introduction to Discrete Dislocation Dynamics. In: Sansour, C., Skatulla, S. (eds) *Generalized Continua and Dislocation Theory. CISM Courses and Lectures*, vol 537. (2012). p.219, https://doi.org/10.1007/978-3-7091-1222-9_4
4. X. Peng, N. Mathew, I. J. Beyerlein, K. Dayal, A. Hunter, A 3D phase field dislocation dynamics model for body-centered cubic crystals, *Computational Materials Science*, Volume 171, 2020, 109217,
5. B. Liu, D. Raabe, P. Eisenlohr, F. Roters, A. Arsenlis, G. Hommes, Dislocation interactions and low-angle grain boundary strengthening, *Acta Materialia*, Volume 59, Issue 19, 2011, Pages 7125-7134, <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.07.067>.
6. E. van der Giessen, A. Needleman, Discrete dislocation plasticity - a simple planar model: a simple planar model, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, vol. 3, no. 5, 1995, pp. 689 - 735. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/3/5/008>
7. N. Argaman, O. Levy, G. Makov, When do 2-D dislocations form cellular structures?, *Materials Science and Engineering: A*, Volumes 309–310, 2001, Pages 386-392, [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(00\)01732-9](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(00)01732-9).

8. C. Zhou, S. Bulent Biner, R. LeSar, Discrete dislocation dynamics simulations of plasticity at small scales, *Acta Materialia*, Volume 58, Issue 5, 2010, Pages 1565-1577, <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.11.001>.
9. S. Xu, J. R. Mianroodi, A. Hunter, B. Svendsen, I. J. Beyerlein, Comparative modeling of the disregistry and Peierls stress for dissociated edge and screw dislocations in Al, *International Journal of Plasticity*, Volume 129, 2020, 102689, <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102689>.
10. S. Lu, Q. Kan, M. Zaiser, Z. Li, G. Kang, X. Zhang, Size-dependent yield stress in ultrafine-grained polycrystals: A multiscale discrete dislocation dynamics study, *International Journal of Plasticity*, Volume 149, 2022, 103183, <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2021.103183>.
11. A Arsenlis, W Cai, M Tang, M Rhee, T Ooppelstrup, G Hommes, T G Pierce, V V Bulatov, Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2007, Volume 15, Number 6, 553, DOI 10.1088/0965-0393/15/6/001
12. N. Argaman, O. Levy, G. Makov, Dislocation Pattern Formation–Simulations of Annealing in Two Dimensions. *MRS Online Proceedings Library* 683, 221 (2001). <https://doi.org/10.1557/PROC-683-BB2.2.1>
13. T. Hochrainer, M. Zaiser, P. Gumbsch, P. A three-dimensional continuum theory of dislocation systems: kinematics and mean-field formulation. *Philosophical Magazine*, 87(8–9), (2007). 1261–1282. <https://doi.org/10.1080/14786430600930218>
14. D. Raabe, On the consideration of climb in discrete dislocation, dynamics, *Philosophical Magazine A*, 77:3, (1998) 751-759, DOI: 10.1080/01418619808224081
15. V. Vivekanandan, P. Lin, G. Winther, A. El-Azab, On the implementation of dislocation reactions in continuum dislocation dynamics modeling of mesoscale plasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 149, 2021, 104327, <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2021.104327>.

16. Д.В. Мацокин, И.Н. Пахомова, Моделирование поведения дислокационных ансамблей в щелочно-галогидных монокристаллах, Вісник ХНУ, № 558, серія "Фізика", вип. 6, 2002, с. 85-90
17. H. M. Zbib, M. Rhee, J.P. Hirth, On plastic deformation and the dynamics of 3D dislocations, International Journal of Mechanical Sciences, Volume 40, Issues 2–3, 1998, Pages 113-127, [https://doi.org/10.1016/S0020-7403\(97\)00043-X](https://doi.org/10.1016/S0020-7403(97)00043-X).
18. J.P.Hirth, J. Lothe, Theory of dislocations, Wiley, New York, 1982, 857 p.
19. Гутманас Э.Ю. Изучение движения дислокаций в кристаллах хлористого натрия [Текст] / Э.Ю. Гутманас, Э.М. Надгорный, А.В. Степанов // ФТТ. – 1963. – Т.5, № 4. – С. 1021–1026.
20. G. Saada, P. Veyssièrè, Chapter 61 Work hardening of face centred cubic crystals. Dislocations intersection and cross slip, Editor(s): F.R.N. Nabarro, M.S. Duesbery, Dislocations in Solids, Elsevier, Volume 11, 2002, Pages 413-458, [https://doi.org/10.1016/S1572-4859\(02\)80012-2](https://doi.org/10.1016/S1572-4859(02)80012-2).
21. L.T.W. Smith, Y. Su, S. Xu, A. Hunter, I. J. Beyerlein, The effect of local chemical ordering on Frank-Read source activation in a refractory multi-principal element alloy, International Journal of Plasticity, Volume 134, 2020, 102850, <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102850>.
22. B. Devincre, R. Gatti, Physically Justified Models for Crystal Plasticity Developed with Dislocation Dynamics Simulations. AerospaceLab Journal. 9. 2. (2015). DOI:10.12762/2015.AL09-02.
23. B. Devincre, R. Madec, S. Queyreau, L. P. Kubin, Modeling crystal plasticity with dislocation dynamics simulations : the «MICROMEGAS» code.. Mechanics of Nano-Objects, 2011, p. 81 – 100.
24. A.A. Benzerga, Y. Brechet, A. Needleman, E. Van der Giessen, Incorporating three-dimensional mechanisms into two-dimensional dislocation dynamics, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 12 (2004) 159–196, <https://doi.org/10.1088/0965-0393/12/1/014>

25. R. J. Amodeo, N. M. Ghoniem, Dislocation dynamics. II. Applications to the formation of persistent slip bands, planar arrays, and dislocation cells *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics*, B 41, 6968, 1990, DOI [10.1103/physrevb.41.6968](https://doi.org/10.1103/physrevb.41.6968)
26. H. M. Zbib, T. D. de la Rubia, A multiscale model of plasticity, *International Journal of Plasticity*, Volume 18, Issue 9, 2002, Pages 1133-1163, [https://doi.org/10.1016/S0749-6419\(01\)00044-4](https://doi.org/10.1016/S0749-6419(01)00044-4).
27. K. W. Schwarz; Simulation of dislocations on the mesoscopic scale. I. Methods and examples. *J. Appl. Phys.* 1 January 1999; 85 (1): 108–119. <https://doi.org/10.1063/1.369429>
28. M Rheey, H M Zbibyx, J P Hirthy, H Huangz, T de la Rubiaz, Models for long-/short-range interactions and cross slip in 3D dislocation simulation of BCC single crystals, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 6 (1998) 467–492. DOI [10.1088/0965-0393/6/4/012](https://doi.org/10.1088/0965-0393/6/4/012)
29. L.P Kubin, G Canova, The modelling of dislocation patterns, *Scripta Metallurgica et Materialia*, Volume 27, Issue 8, 1992, Pages 957-962, [https://doi.org/10.1016/0956-716X\(92\)90456-O](https://doi.org/10.1016/0956-716X(92)90456-O).
30. R. J. Amodeo, N. M. Ghoniem, Dislocation dynamics. I. A proposed methodology for deformation micromechanics, *Phys. Rev. B* 41, 6958, 1990, DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.6958>
31. L.P.Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, Y. Bréchet, Dislocation Microstructures and Plastic Flow: A 3D Simulation. *Solid State Phenomena*, 1992. 23–24, p. 455–472. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/ssp.23-24.455>
32. N.M. Ghoniem, S. Tong, L. Sun, Parametric dislocation dynamics: A thermodynamics-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation. *Physical Review B*, 61, (2000), 913-927. DOI: [10.1103/PHYSREVB.61.913](https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.61.913)
33. Ковтун І.І, кваліфікаційна робота на здобуття освітнього ступеня

«Бакалавр». Дослідження та комп'ютерне моделювання побудови дислокаційних структур при різних схемах деформації у лужногалоїдних монокристалах із ґраткою типу NaCl. ХНУ, Харків, 2021.