

Моделирование дислокационного электропластического эффекта в монокристалле методом молекулярной динамики

© 2022

Брызгалов Владимир Александрович^{*1,5}, магистрант**Дмитриев Сергей Владимирович**^{2,6}, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник**Корзникова Елена Александровна**^{1,7}, доктор физико-математических наук, профессор**Бибихов Юрий Владимирович**^{3,8}, кандидат физико-математических наук, доцент¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)²Институт физики молекул и кристаллов Уфимского научного центра Российской академии наук, Уфа (Россия)³Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Мирный (Россия)

*E-mail: bryzgalovv2000@gmail.com

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7435-0001>⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>⁸ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Поступила в редакцию 04.05.2022

Принята к публикации 27.07.2022

Аннотация: Электропластический эффект – это снижение сопротивления металлических кристаллов деформированию под влиянием импульсного электрического тока высокой плотности. Применение данного эффекта позволяет проводить деформационную обработку относительно хрупких металлов без резкого повышения температуры, что уменьшает вероятность негативного влияния температуры на материал. В статье рассматривается влияние электропластического эффекта на изменение деформирующего усилия и динамику дислокаций для двумерной модели монокристалла, взаимодействие атомов в которой основано на методе молекулярной динамики при использовании потенциала Морзе. Предложена модель, реализующая электропластический эффект посредством увеличения общей кинетической энергии системы не равномерно по всему объему кристалла, а в зависимости от потенциальной энергии атомов. Считается, что в результате прохождения импульса электрического тока возрастает кинетическая энергия атомов пропорционально кубу их потенциальной энергии. Более высокую потенциальную энергию имеют атомы вблизи дефектов, поэтому температура будет повышаться в области дефектов сильнее, увеличивая их подвижность. Проведено моделирование движения дислокаций под воздействием сдвигающих напряжений и температуры с учетом влияния импульсов электрического тока на систему. Описаны зависимости предела текучести от температуры без учета электропластического эффекта, а затем – с его учетом. Построены графики зависимости кинетической энергии системы от частоты и мощности импульсов тока. Показано, что электропластический эффект резко снижает предел текучести кристалла, тем самым увеличивая температуру в системе. Это связано с тем, что, помимо общего разогрева, система подвергается локальному нагреву атомов вблизи дефектов, что облегчает движение последних.

Ключевые слова: электропластический эффект; молекулярная динамика; дислокации; предел текучести; потенциал Морзе.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УГАТУ» (соглашение № 075-03-2022-318/1) «Молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ "Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях"» для В.А. Брызгалова (проведение расчетов), гранта НШ-4320.2022.1.2 для Е.А. Корзниковой (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ 21-12-00229 для С.В. Дмитриева (постановка задачи, концептуализация исследования).

Для цитирования: Брызгалов В.А., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Бибихов Ю.В. Моделирование дислокационного электропластического эффекта в монокристалле методом молекулярной динамики // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 61–68. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-61-68.

ВВЕДЕНИЕ

Электропластический эффект является одним из эффективных методов улучшения технологических свойств электропроводящих материалов. Данный эффект позволяет повышать пластичность металлов, управлять процессами зарождения и развития дислокационной структуры, снижать усилия, необходимые для обработки материала [1–3].

Одной из гипотез, объясняющих явление снижения предела текучести материала в случае присутствия электрического тока, является предположение о локализации джоулева тепла на дефектах решетки, что, в свою очередь, приводит к снижению потенциальных барьеров их миграции.

Электропластический эффект был впервые обнаружен в середине XX века при действии одиночными импульсами тока с плотностью $\sim 10^9$ А/м² и длительностью

около 0,1 мс на деформацию кристаллов цинка сжатием и растяжением [4–6]. В работе [7] показано, что электрический импульс приводит к интенсивному размножению двойникоующих дислокаций и коллективному взаимодействию их винтовых составляющих с препятствиями. При действии электрического тока возможно нарушение закона Холла – Петча, что было показано на примере пленок AZ31 в работе [8]. Также было проведено моделирование для двойникоующихся материалов [9] и установлено, что под воздействием электрического тока облегчается преодоление двойникоующими дислокациями структурных несовершенств кристаллической структуры. Были проведены эксперименты по применению тока к прокатке малоуглеродистой мартенситной стали [10], в ходе механической обработки которой сильно возросло относительное удлинение. В керамике электропластический эффект сильно снижает предел текучести при относительно небольшой напряженности электрического поля (1 КВ/см^2) [11]. В никелевых [12; 13] и алюминиевых [14; 15] сплавах электропластический эффект снижает сопротивляемость деформированию и ускоряет ползучесть. Также исследователями было экспериментально показано снижение предела текучести в нержавеющей стали AISI 316L при электропластической деформации [16]. Во всех вышеупомянутых исследованиях было показано, что электропластический эффект облегчает пластическую деформацию для различных материалов.

В монокристаллах преобладает дислокационный электропластический эффект, описанный в ходе эксперимента в работе [17] для монокристалла никеля.

В настоящей работе изучено движение дислокаций в двумерной модели монокристалла под воздействием электрического тока и проанализирован эффект дислокационной электропластичности. Новизна работы заключается в том, что дислокационная электропластичность исследуется в модели двумерного монокристалла, наглядность которой позволяет легко визуализировать исследуемые процессы. Для моделирования применялся метод молекулярной динамики с использованием потенциала Морзе, так как он наиболее пригоден для небольших моделей атомов на коротком интервале времени.

Цель работы – изучение влияния дислокационного электропластического эффекта на пластические свойства двумерной модели монокристалла, построенной при помощи метода молекулярной динамики.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследование проводилось при помощи метода молекулярной динамики (МД). Данный метод позволяет определять эволюцию ансамбля атомов при помощи интегрирования уравнений их движения. Траектории атомов и молекул в этом методе определяются путем численного решения уравнений движения Ньютона для системы взаимодействующих частиц, в которой силы между частицами и их потенциальные энергии рассчитываются с использованием межатомных потенциалов или силовых полей молекулярной механики [18].

Для описания взаимодействия атомов в работе использовался межатомный потенциал Морзе (рис. 1). Данный потенциал является функцией потенциальной

энергии электростатического поля, предложенной американским физиком Филиппом Морзе как аппроксимация для энергии двухатомной молекулы [19; 20]. Потенциал имеет вид:

$$U = D_e \left(1 - e^{-\alpha(r-r_e)}\right)^2,$$

где D_e – глубина потенциальной ямы;
 r_e – равновесное расстояние;
 α – коэффициент жесткости потенциала;
 r – межъядерное расстояние.

В работе использовались следующие параметры потенциала Морзе: $D_e=1$, $r_e=1$, $\alpha=6$. Радиус обрезки потенциала равен 5 межатомных расстояний. Все расчеты проводились в безразмерных единицах. В качестве единицы энергии связи двух атомов выступала глубина потенциала Морзе. Единица расстояния – это равновесное межатомное расстояние для пары атомов. Единица времени была выбрана таким образом, чтобы масса атома равнялась единице. Выбор этих единиц измерения не снижает общности и не влияет на физику рассматриваемых процессов. Использование в данной работе безразмерных параметров потенциала обусловлено тем, что не ставилась задача изучения конкретного материала, а анализировалась двумерная модель монокристалла.

Потенциал Морзе содержит один существенный параметр α , который не может быть безразмерен. Данный параметр определяет жесткость потенциала Морзе. Его типичные значения лежат в диапазоне $\alpha=[4; 6]$. Нами было выбрано значение $\alpha=6$, так как чем выше коэффициент α , тем меньше дальное действие потенциала, и можно брать относительно небольшой радиус обрезки потенциала с целью ускорения расчетов. Величины параметров потенциала были выбраны из соображений удобства и быстроты вычислений, так как данное исследование направлено на составление методик изучения электропластического эффекта с целью их применения в будущих работах для реальных материалов.

Расчеты проводились с использованием программы, написанной на языке C++ в оболочке Builder 6. Была построена модель двумерного монокристалла и при помощи метода МД определено межатомное расстояние в кристалле $\alpha=0,995$ (равновесное межатомное расстояние между парой атомов равно 1, а под действием дальнедействующих сил в ходе релаксации структуры равновесное расстояние между атомами в кристалле снижается до указанного значения). Расчетная ячейка имела размер 256×256 атомов, на нее накладывались периодические граничные условия. Затем из системы была удалена цепочка атомов посередине расчетной ячейки для создания призматической дислокационной петли; после релаксации в структуре образовались две дислокации (рис. 2).

Затем система подвергалась действию монотонно увеличивающейся сдвиговой деформации вкупе с подъемом температуры. Температура задавалась путем ввода случайных начальных смещений атомам в указанном диапазоне. Чем больше диапазон, тем выше температура. Для моделирования импульсов электрического тока была увеличена кинетическая энергия системы. Задачей являлось сделать так, чтобы энергия в большей мере

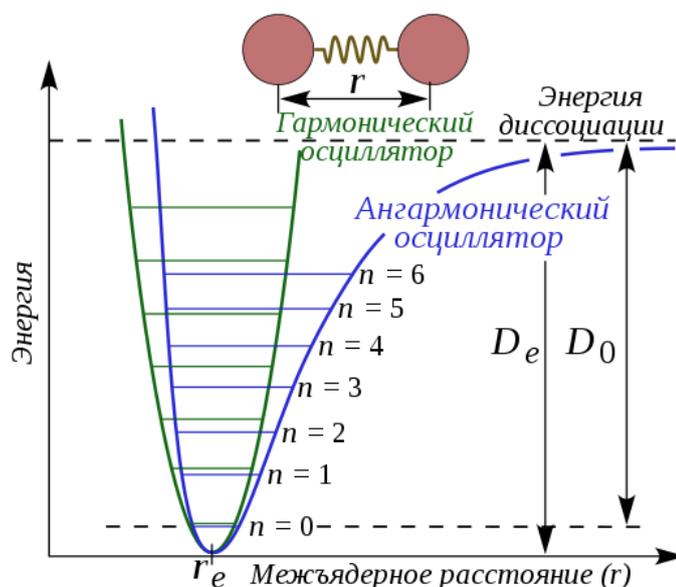


Рис. 1. Вид потенциала Морзе в зависимости от расстояния между ядрами двух атомов. Для сравнения показан потенциал и уровни энергии гармонического осциллятора.
n – главное квантовое число

Fig. 1. Morse potential view depending on the distance between the nuclei of two atoms. For comparison, the potential and energy levels of the harmonic oscillator are shown.
n – the main quantum number

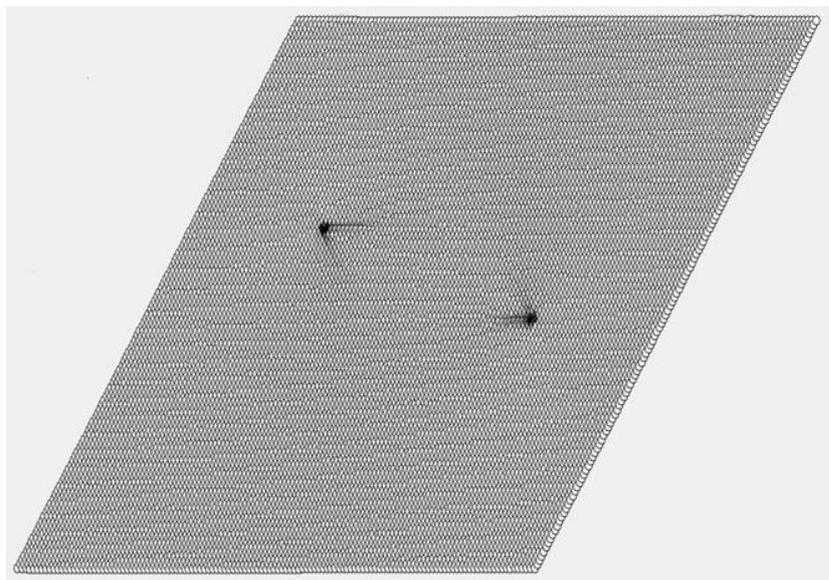


Рис. 2. Модель двумерного монокристалла с введенными в него двумя дислокациями (атомы окрашены в соответствии с величиной потенциальной энергии; черным цветом показаны атомы с максимальной энергией, они располагаются вблизи ядер дислокаций)

Fig. 2. The model of a two-dimensional single crystal with two dislocations introduced into it (atoms are colored in accordance with their potential energy; atoms with large energy are shown in black, they are located near the dislocation cores)

выделялась на атомах с высокой потенциальной энергией, следовательно, на тех, которые находятся вблизи дефектов. Таким образом, потенциальная энергия атомов использовалась для расчета прироста кинетической энергии и, следовательно, температуры атомов. Уравнение, задающее прирост температуры (кинетической энергии) *n*-го атома системы, имеет вид:

$$dK_n = pK \left(\frac{P_n - P_{\min}}{P_{\max} - P_{\min}} \right)^3, \quad (1)$$

где *p* – параметр, определяющий мощность тока;
P_n – потенциальная энергия *n*-го атома;
K – кинетическая энергия всей системы (пропорциональна температуре кристалла);

P_{\min} и P_{\max} – минимальная и максимальная потенциальная энергия атомов в системе соответственно.

Как видно из выражения (1), прирост кинетической энергии n -го атома пропорционален температуре кристалла (его кинетической энергии K) и пропорционален кубу потенциальной энергии n -го атома.

Для мощности тока устанавливалось значение $p=0,001$, частота импульсов тока – каждые 7,5 единиц времени (моделирование занимает 62,2 единицы времени). Параметры были подобраны так, чтобы система не перегревалась до плавления и сохраняла свою кристаллическую структуру.

Для построения зависимости предела текучести от температуры моделирование проводилось для различных значений сдвиговых деформаций и температуры. Если сдвигающие напряжения, возникшие в системе в момент приложения заданной сдвиговой деформации, показывают тенденцию к уменьшению, то считалось, что в системе идет пластическая деформация и сдвигающие напряжения превышают напряжение течения. Например, на рис. 3 сдвигающие напряжения уменьшаются с течением времени, что позволяет сказать, что при данных параметрах в системе начинается пластическая деформация. Пик в начале графика связан с релаксацией системы после задания начальных смещений атомов для введения значений температуры.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В ходе моделирования была построена зависимость предела текучести от температуры для двух случаев: а) модели 256×256 атомов, без применения импульсов тока; б) модели 256×256 атомов, с учетом электропластического эффекта. Из рис. 4 видно, что до повышения температуры до $T=0,08$ предел текучести практически не изменяется; после же наблюдается резкое снижение предела текучести с увеличением температуры системы. Применение электрического тока при

водит к более интенсивному снижению предела текучести. Для того чтобы определить, как данные параметры влияют на величину электропластического эффекта, были построены зависимости кинетической энергии системы от количества импульсов тока (рис. 5, при построении графика коэффициент мощности тока был постоянен и равен $p=0,001$) и от его мощности (рис. 6, в данном расчете за 62,5 единиц времени было применено 8 импульсов тока). Как видно из рис. 5, кинетическая энергия практически не меняется при температуре $T=0,1$, несмотря на относительно высокое значение деформации сдвига. Вместе с этим при небольшом увеличении температуры и снижении деформации сдвига кинетическая энергия резко увеличивается с повышением числа импульсов тока.

На рис. 6 можно заметить, что кинетическая энергия системы резко увеличивается при превышении мощностью импульсов тока некоторого значения. Это предельное значение уменьшается при повышении температуры. Так, при температуре $T=0,12$ резкий рост кинетической энергии наблюдается при мощности тока $p=0,003$, а в случае $T=0,1$ – при значении $p=0,007$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты, представленные на рис. 4, показывают, что резкое снижение предела текучести при относительно высоких температурах связано с наличием потенциала Пайерлса – Набарро, который легче преодолевается дислокациями при повышенных температурах. Электропластический эффект же существенно снижает предел текучести только при достаточно высоких температурах.

Анализ графиков зависимости кинетической энергии системы от количества импульсов тока (рис. 5) и его мощности (рис. 6) показал, что, несмотря на относительно высокое значение деформации сдвига, при более низкой температуре кинетическая энергия

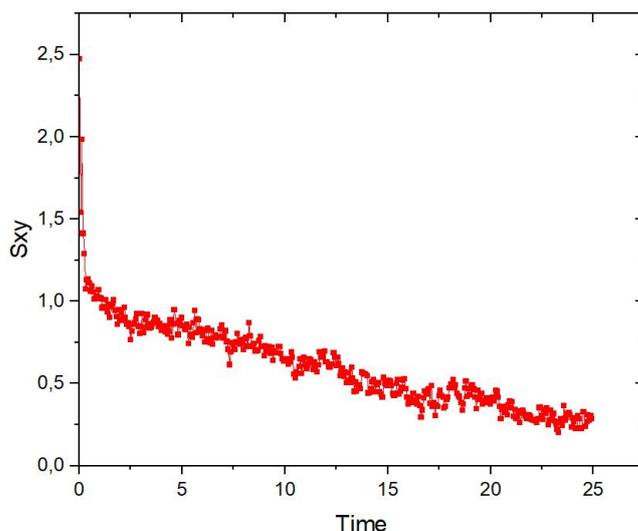


Рис. 3. Пример графика зависимости сдвигающих напряжений от времени. Величина сдвиговой деформации: $\varepsilon_{xy}=0,037$ при температуре $T=0,13$

Fig. 3. An example of a plot of shear stress versus time. Shear strain value: $\varepsilon_{xy}=0.037$, at the temperature of $T=0.13$

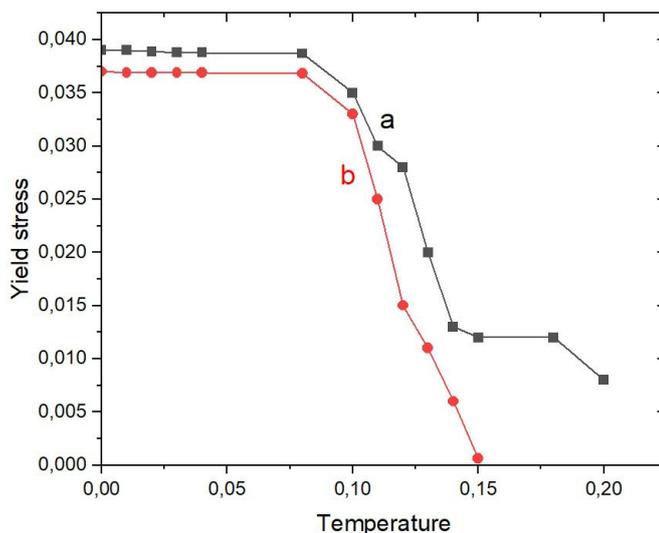


Рис. 4. Зависимость предела текучести от температуры:
a – модель 256×256 атомов, без применения импульсов тока;
b – модель 256×256 атомов, с учетом электропластического эффекта
Fig. 4. Yield stress versus temperature:
a – a model containing 256×256 atoms, without the use of current pulses;
b – a model containing 256×256 atoms, taking into account the electro-plastic effect

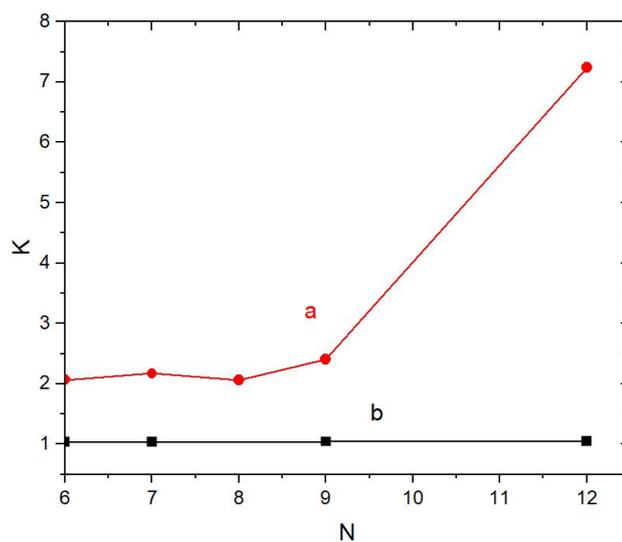


Рис. 5. Зависимость общей кинетической энергии системы от количества импульсов тока, примененных за время счета (62,5 единиц времени):
a – при сдвиговой деформации $\varepsilon=0,016$ и температуре $T=0,12$; **b** – $\varepsilon=0,033$ и $T=0,1$
Fig. 5. Total kinetic energy of the system versus the number of current pulses applied during the simulation run (62.5 time units):
a – with shear deformation $\varepsilon=0.016$ and temperature $T=0.12$; **b** – $\varepsilon=0.033$ and $T=0.1$

кристалла практически не изменяется (кривые *b*). Это связано с тем, что дислокации относительно слабо разогреты импульсами тока и двигаются термофлуктуационно, так как им тяжело преодолеть барьер Пайерлса – Набарро. При относительно небольшом увеличении температуры и снижении деформации сдвига кинетическая энергия резко увеличивается с повышением количества импульсов тока и мощности тока (кривые *a*). Резкий скачок кинетической энергии системы связан

с тем, что при относительно высоких значениях параметров тока и температуры происходит надбарьерное скольжение дислокаций, и в ходе этого скольжения дислокации выделяют большое количество тепла. Разогрев происходит за счет выделения тепла, связанного с работой приложенного сдвигающего напряжения на совершение пластической деформации. Кинетическая энергия системы входит в формулу (1), согласно которой повышение температуры материала ускоряет его разогрев.

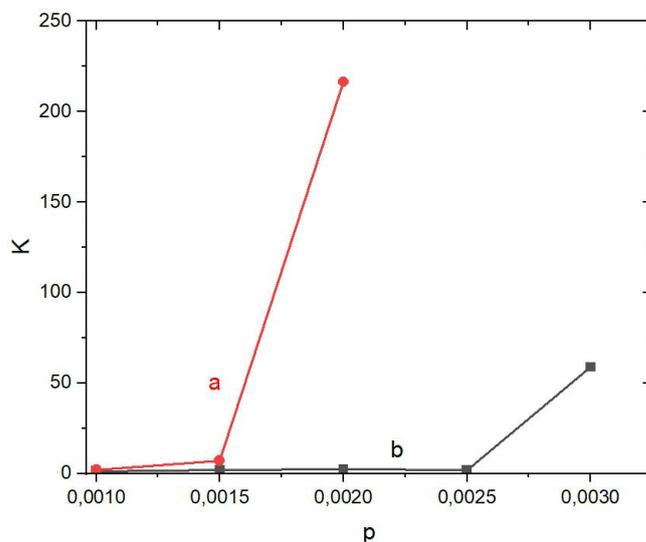


Рис. 6. Зависимость общей кинетической энергии системы от мощности тока:
a – при сдвиговой деформации $\varepsilon=0,016$ и температуре $T=0,12$; **b** – $\varepsilon=0,033$ и $T=0,1$

Fig. 6. Total kinetic energy of the system versus the current power;

a – with shear deformation $\varepsilon=0.016$ and temperature $T=0.12$; **b** – $\varepsilon=0.033$ and $T=0.1$

Из полученных данных можно видеть, что электропластический эффект существенно облегчает пластическую деформацию, особенно при увеличении температуры системы.

Продоланная работа является первым шагом к изучению электропластического эффекта в реальных металлических монокристаллах. В данной работе этот эффект объясняется преимущественным выделением джоулева тепла на дефектах кристаллической структуры, подвижность которых и обеспечивает протекание пластической деформации. Помимо дислокаций, в будущих работах планируется рассмотреть границы зерен, что поможет определить вклад электростимулированного зернограничного проскальзывания в пластическую деформацию поликристаллов.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

1. Создана молекулярно-динамическая модель двумерного монокристалла с межатомными взаимодействиями, описываемыми потенциалом Морзе. Предложены способ введения краевых дислокаций в систему и модель применения импульсов электрического тока к системе. Проведено моделирование движения дислокаций при заданных сдвиговых деформациях и температурах.

2. Анализ графиков зависимости предела текучести от температуры без применения тока и с применением импульсного тока показал, что электропластический эффект существенно облегчает движение дислокаций только при достаточно высокой температуре кристалла. Это связано с наличием потенциала Пайерлса – Набарро, который легче преодолевается дислокациями при повышенных температурах.

3. Анализ графиков зависимости общей кинетической энергии системы от частоты импульсов тока и от их мощности показал, что параметры тока оказывают влияние на электропластичность материала, в особен-

ности при повышенной температуре. Это связано с тем, что при относительно низкой температуре дислокации двигаются термофлуктуационно и слабо разогревают систему, а при повышенной температуре дислокации двигаются посредством надбарьерного скольжения, в ходе которого происходит резкий разогрев системы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Столяров В.В. Электропластический эффект в титановых сплавах // Вестник научно-технического развития. 2013. № 3. С. 35–39.
2. Троицкий О.А., Баранов Ю.В., Авраамов Ю.С., Шляпин А.Д. Физические основы и технологии обработки современных материалов. Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. Т. 1–2.
3. Троицкий О.А. Электромеханический эффект в металлах // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1969. № 10. С. 18–22.
4. Кравченко В.Я. Воздействие направленного потока электронов на движущиеся дислокации // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1966. Т. 51. № 6. С. 1676–1678.
5. Кравченко В.Я. Влияние электронов на торможение дислокаций в металлах // Физика твердого тела. 1966. Т. 8. № 3. С. 927–935.
6. Климов К.М., Шнырев Г.Д., Новиков И.И. Об электропластичности металлов // Доклады АН СССР. 1974. Т. 219. № 2. С. 323–324.
7. Савенко В.С. Электропластичность двойникующихся металлов // Веснік МДПУ імя І.П. Шамякіна. 2009. № 1. С. 154–158.
8. Xiao X., Xu Sh., Sui D., Zhang H. The electroplastic effect on the deformation and twinning behavior of AZ31 foils during micro-bending test // Materials Letters. 2021. Vol. 288. Article number 129362. DOI: [10.1016/j.matlet.2021.129362](https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129362).

9. Влашевич В.В., Остриков О.М. Моделирование электропластического эффекта при механическом микродвойниковании // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2014. Т. 10. № 6. С. 146–149. EDN: [TGLEJF](#).
10. Qian L., Zhan L., Zhou B., Zhang X., Liu S., Lv Z. Effects of electroplastic rolling on mechanical properties and microstructure of low-carbon martensitic steel // *Materials Science and Engineering A*. 2021. Vol. 812. Article number 141144. DOI: [10.1016/j.msea.2021.141144](#).
11. Conrad H. Electroplasticity in metals and ceramics // *Materials Science and Engineering A*. 2000. Vol. 287. № 2. P. 276–287. DOI: [10.1016/S0921-5093\(00\)00786-3](#).
12. Liu Y.Z., Meng B., Du M., Wan M. Electroplastic effect and microstructural mechanism in electrically assisted deformation of nickel-based superalloys // *Materials Science and Engineering A*. 2022. Vol. 840. Article number 142975. DOI: [10.1016/j.msea.2022.142975](#).
13. Demler E., Gerstein G., Dalinger A., Epishin A., Rodman D., Nürnberger F. Influence of High-Current-Density Impulses on the Compression Behavior: Experiments with Iron and a Nickel-Based Alloy // *Journal of Materials Engineering and Performance*. 2016. Vol. 26. № 2. P. 177–184. DOI: [10.1007/s11665-016-2457-x](#).
14. Bumgardner C.H., Croom B.P., Song N., Zhang Yu., Li X. Low energy electroplasticity in aluminum alloys // *Materials Science and Engineering A*. 2020. Vol. 798. Article number 140235. DOI: [10.1016/j.msea.2020.140235](#).
15. Krishnaswamy H., Kim M.J., Hong S.-T., Kim D., Song J.-H., Lee M.-G., Han H.N. Electroplastic behaviour in an aluminium alloy and dislocation density based modelling // *Materials and Design*. 2017. Vol. 124. P. 131–142. DOI: [10.1016/j.matdes.2017.03.072](#).
16. Mai J., Peng L., Lin Zh., Lai X. Experimental study of electrical resistivity and flow stress of stainless steel 316L in electroplastic deformation // *Materials Science and Engineering A*. 2011. Vol. 528. № 10-11. P. 3539–3544. DOI: [10.1016/j.msea.2011.01.058](#).
17. Li X., Turner J., Bustillo K., Minor A.M. In situ transmission electron microscopy investigation of electroplasticity in single crystal nickel // *Acta Materialia*. 2022. Vol. 223. Article number 117461. DOI: [10.1016/j.actamat.2021.117461](#).
18. Проценко С.П., Байдаков В.Г., Козлова З.Р. Молекулярно-динамическое моделирование метастабильных фазовых состояний. Термодинамические свойства Леннард-Джонсовской системы // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. 2014. Т. 18. № 1. С. 214–223. EDN: [SDHUND](#).
19. Zhou Y., Karplus M., Ball K.D., Berry R.S. The distance fluctuation criterion for melting: Comparison of square-well and Morse potential models for clusters and homopolymers // *Journal of Chemical Physics*. 2002. Vol. 116. № 5. P. 2323–2329. DOI: [10.1063/1.1426419](#).
20. Zhou K., Liu B. Fundamentals of classical molecular dynamics simulation // *Molecular Dynamics Simulation*. Amsterdam: Elsevier, 2022. P. 1–40. DOI: [10.1016/B978-0-12-816419-8.00006-4](#).

REFERENCES

1. Stolyarov V.V. Electroplastic effect in titanium alloys. *Vestnik nauchno-tekhnicheskogo razvitiya*, 2013, no. 3, pp. 35–39.
2. Troitsky O.A., Baranov Yu.V., Avraamov Yu.S., Shlyapin A.D. *Fizicheskie osnovy i tekhnologii obrabotki sovremennykh materialov* [Physical foundations and technologies for modern materials processing]. Izhevsk, Institut kompyuternykh issledovaniy Publ., 2004. Vol. 1–2.
3. Troitsky O.A. Electromechanical effect in metals. *Pisma v zhurnal eksperimentalnoy i teoreticheskoy fiziki*, 1969, no. 10, pp. 18–22.
4. Kravchenko V.Ya. Effect of a directed electron flow on moving dislocations. *Journal of experimental and theoretical physics*, 1966, vol. 51, no. 6, pp. 1676–1678.
5. Kravchenko V.Ya. Influence of electrons on the drag of dislocations in metals *Physics of the solid state*, 1966, vol. 8, no. 3, pp. 927–935.
6. Klimov K.M., Shnyrev G.D., Novikov I.I. On the electroplasticity of metals. *Doklady AN SSSR*, 1974, vol. 219, no. 2, pp. 323–324.
7. Savenko V.S. Electroplasticity of twinning metals. *Vesnik MDPU im. I.P. Shamyakina*, 2009, no. 1, pp. 154–158.
8. Xiao X., Xu Sh., Sui D., Zhang H. The electroplastic effect on the deformation and twinning behavior of AZ31 foils during micro-bending test. *Materials Letters*, 2021, vol. 288, article number 129362. DOI: [10.1016/j.matlet.2021.129362](#).
9. Vlashevich V.V., Ostrikov O.M. Modeling electroplastic effect at mechanical microtwinning. *Vestnik Vorontzhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2014, vol. 10, no. 6, pp. 146–149. EDN: [TGLEJF](#).
10. Qian L., Zhan L., Zhou B., Zhang X., Liu S., Lv Z. Effects of electroplastic rolling on mechanical properties and microstructure of low-carbon martensitic steel. *Materials Science and Engineering A*, 2021, vol. 812, article number 141144. DOI: [10.1016/j.msea.2021.141144](#).
11. Conrad H. Electroplasticity in metals and ceramics. *Materials Science and Engineering A*, 2000, vol. 287, no. 2, pp. 276–287. DOI: [10.1016/S0921-5093\(00\)00786-3](#).
12. Liu Y.Z., Meng B., Du M., Wan M. Electroplastic effect and microstructural mechanism in electrically assisted deformation of nickel-based superalloys. *Materials Science and Engineering A*, 2022, vol. 840, article number 142975. DOI: [10.1016/j.msea.2022.142975](#).
13. Demler E., Gerstein G., Dalinger A., Epishin A., Rodman D., Nürnberger F. Influence of High-Current-Density Impulses on the Compression Behavior: Experiments with Iron and a Nickel-Based Alloy. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2016, vol. 26, no. 2, pp. 177–184. DOI: [10.1007/s11665-016-2457-x](#).
14. Bumgardner C.H., Croom B.P., Song N., Zhang Yu., Li X. Low energy electroplasticity in aluminum alloys. *Materials Science and Engineering A*, 2020, vol. 798, article number 140235. DOI: [10.1016/j.msea.2020.140235](#).
15. Krishnaswamy H., Kim M.J., Hong S.-T., Kim D., Song J.-H., Lee M.-G., Han H.N. Electroplastic behaviour in an aluminium alloy and dislocation density

- based modelling. *Materials and Design*, 2017, vol. 124, pp. 131–142. DOI: [10.1016/j.matdes.2017.03.072](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.03.072).
16. Mai J., Peng L., Lin Zh., Lai X. Experimental study of electrical resistivity and flow stress of stainless steel 316L in electroplastic deformation. *Materials Science and Engineering A*, 2011, vol. 528, no. 10–11, pp. 3539–3544. DOI: [10.1016/j.msea.2011.01.058](https://doi.org/10.1016/j.msea.2011.01.058).
17. Li X., Turner J., Bustillo K., Minor A.M. In situ transmission electron microscopy investigation of electroplasticity in single crystal nickel. *Acta Materialia*, 2022, vol. 223, article number 117461. DOI: [10.1016/j.actamat.2021.117461](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117461).
18. Protsenko S.P., Baydakov V.G., Kozlova Z.R. Molecular-dynamics simulation of metastable phase states. Thermodynamic properties of Lennard-Jones system. *Vestnik Ufimskogo gosudarstvennogo aviatsionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2014, vol. 18, no. 1, pp. 214–223. EDN: [SDHUND](https://www.edn.ru/SDHUND).
19. Zhou Y., Karplus M., Ball K.D., Berry R.S. The distance fluctuation criterion for melting: Comparison of square-well and Morse potential models for clusters and homopolymers. *Journal of Chemical Physics*, 2002, vol. 116, no. 5, pp. 2323–2329. DOI: [10.1063/1.1426419](https://doi.org/10.1063/1.1426419).
20. Zhou K., Liu B. Fundamentals of classical molecular dynamics simulation. *Molecular Dynamics Simulation*. Amsterdam, Elsevier, 2022, pp. 1–40. DOI: [10.1016/B978-0-12-816419-8.00006-4](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-816419-8.00006-4).

Modeling of the dislocation electroplastic effect in a single crystal using the molecular dynamics method

© 2022

Vladimir A. Bryzgalov^{*1,5}, graduate student

Sergey V. Dmitriev^{2,6}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor, leading researcher

Elena A. Korznikova^{1,7}, Doctor of Sciences (Physics and Mathematics), Professor

Yuri V. Bebikhov^{3,8}, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

²Institute of Physics of Molecules and Crystals of Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, Ufa (Russia)

³Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Mirny (Russia)

*E-mail: bryzgalovv2000@gmail.com

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7435-0001>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

⁸ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8366-4819>

Received 04.05.2022

Accepted 27.07.2022

Abstract: The electro-plastic effect is a decrease in the resistance of metal crystals to deformation under the influence of a high-density pulsed electric current. Applying this effect allows deformation processing of relatively brittle metals without a sharp increase in temperature while reducing the probability of temperature negatively affecting the material. The paper discusses the influence of the electro-plastic effect on the change in the deforming force and the dislocations dynamics for a two-dimensional single crystal model based on the molecular dynamics method using the Morse potential. The authors propose a model implementing the electro-plastic effect by increasing the total kinetic energy of the system not uniformly over the entire crystal volume but depending on the potential energy of atoms. It is accepted that as a result of the electric current pulse traveling, the atom's kinetic energy increases proportionally to the third degree of their potential energy. Atoms near defects have higher potential energy; therefore, the temperature will grow to a greater extent in the areas of defects, increasing their mobility. The authors simulated the motion of dislocations under the influence of shear stresses and temperature, considering the electric current pulse effect on the system. The paper describes the dependence of yield strength on temperature without taking into account the electro-plastic effect and then with it. The authors plotted the graphs of the dependence of the system's kinetic energy on the frequency and the power of current pulses. The study shows that the electro-plastic effect sharply reduces the yield strength of a crystal, increasing the temperature in the system. It is caused by the fact that, besides general heating, the system is subjected to local heating of atoms near defects, which facilitates their motion.

Keywords: electroplastic effect; molecular dynamics; dislocations; yield stress; Morse potential.

Acknowledgments: The study was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the state assignment of the Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education “USATU” (agreement No. 075-03-2022-318/1) “Youth Research Laboratory of the REC “Metals and Alloys under the Extreme Conditions” for V.A. Bryzgalov (calculations), grant No. NSh-4320.2022.1.2 for E.A. Korznikova (analysis and discussion of the results), the RSF grant No. 21-12-00229 for S.V. Dmitriev (problem setting, research conceptualization).

For citation: Bryzgalov V.A., Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Bebikhov Yu.V. Modeling of the dislocation electroplastic effect in a single crystal using the molecular dynamics method. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 61–68. DOI: [10.18323/2782-4039-2022-3-1-61-68](https://doi.org/10.18323/2782-4039-2022-3-1-61-68).