

Моделирование преодоления препятствий в виде пор дислокациями в вольфраме

© 2022

Казаков Арсений Максимович^{*1,5}, студент*Шарапова Юлия Равильевна*¹, научный сотрудник*Бабичева Рита Исмагиловна*^{2,6}, кандидат физико-математических наук,

научный сотрудник школы машиностроения и аэрокосмической инженерии

Зиновьев Александр Викторович^{3,7}, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник*Терентьев Дмитрий Александрович*³, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник*Семенов Александр Сергеевич*^{4,8}, кандидат физико-математических наук, доцент¹Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа (Россия)²Наньянский технологический университет, Сингапур (Сингапур)³Бельгийский центр ядерных исследований, Мол (Бельгия)⁴Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, Мирный (Россия)

*E-mail: arseny.m.kazakov@gmail.com

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8278-8705>⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5388-3466>⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1332-5125>⁸ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

Поступила в редакцию 27.04.2022

Принята к публикации 14.07.2022

Аннотация: Вольфрам широко используется в качестве материала, способного выдержать условия работы в ядерных реакторах и других экстремальных условиях. Под воздействием облучения в металле образуются такие дефекты, как пары Френкеля, поры и дислокационные петли. Поэтому важными на сегодняшний день являются исследования, направленные на изучение взаимодействий этих дефектов друг с другом и влияния данных взаимодействий на механические свойства металла. В статье представлено теоретическое исследование, основанное на методе молекулярной динамики, целью которого является изучение механизма деформационного упрочнения вольфрама, связанного с взаимодействием дислокаций с порами. Решение данной задачи получено с использованием пакета LAMMPS. Интегрирование уравнений движений атомов проводится методом Верле четвертого порядка. Исследуемая модель представляет собой монокристалл ориентации [111], [−1−12], [1−10] вдоль основных координатных осей X, Y, Z соответственно, в котором рассматривается скольжение краевых дислокаций в основной системе скольжения металлов с объемно-центрированной кубической кристаллической решеткой и их взаимодействие с порами. Изучено влияние размера пор на величину сдвигающего напряжения: рост диаметра поры пропорционален росту напряжения. Рассчитаны зависимости сдвигающего напряжения от деформации сдвига в интервале температур 600–1400 К, причем изменение температуры не оказывает значительного влияния на величину напряжения. Показано, что дислокации перерезают поры, и при повторном взаимодействии с порой наблюдается меньшее значение пикового сдвигающего напряжения, чем при первом. Присутствие пор приводит к повышению напряжения течения, причем данный эффект становится более заметным с ростом диаметра пор. Для материала с порами диаметром 6 нм напряжение течения возросло в три раза по сравнению с материалом без пор. Описан механизм взаимодействия краевых дислокаций и пор под воздействием сдвигающего напряжения.

Ключевые слова: вольфрам; метод молекулярной динамики; поры; дислокации; взаимодействие дефектов; сдвиговая деформация.

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 А.В. Зиновьева (проведение расчетов), гранта № НШ-4320.2022.1.2 для А.М. Казакова (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ № 21-12-00275 для А.С. Семенова (постановка задачи, концептуализация исследования).

Для цитирования: Казаков А.М., Шарапова Ю.Р., Бабичева Р.И., Зиновьев А.В., Терентьев Д.А., Семенов А.С. Моделирование преодоления препятствий в виде пор дислокациями в вольфраме // Frontier Materials & Technologies. 2022. № 3. С. 76–84. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-76-84.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема выбора и разработки материалов для ядерной энергетики остается актуальной. Выбор таких материалов определяется их физическими, химическими, механическими свойствами. Вольфрам – один из перспективных материалов, который может быть при-

менен в различных установках для ядерных и термо-ядерных реакторов. Разработка и выбор передовых материалов естественным образом обусловлены необходимостью увеличения диапазона рабочих температур и флюенса, что позволит расширить возможности проведения современных экспериментальных исследований. Например, в обзорной статье [1] авторы обсуждают

возможность использования вольфрама как обращенно-го к плазме материала термоядерных установок и пути устранения недостатков вольфрама, таких как высокая температура перехода из хрупкого состояния в пластическое, радиационное охрупчивание и др. Под воздействием облучения в материале накапливаются радиационные повреждения, образуются полости и другие дефекты на различной глубине [2]. Кроме того, авторами работы [3] получена зависимость плотности и размера пор от температуры и дозы облучения.

Помимо пор, при облучении в металлах могут образовываться дислокационные петли даже при относительно небольших дозах [4; 5]. Взаимодействие дислокаций с дислокационными петлями также представляет особый интерес, поскольку такие процессы влияют на теплофизические и механические характеристики материалов для ядерных реакторов. Исследования по этой теме были представлены для железа и сплавов на его основе, причем основной вклад в упрочнение при высокой температуре облучения вносят поры, в то время как дислокационные петли обеспечивают сопоставимый вклад (30–50 %) только при облучении при 600 °С [6–8]. При интенсивном облучении вольфрамовый материал разрушается в результате многократного распухания и отслаивания вблизи поверхности. Даже если разрушение материала не наблюдается, облученные микроструктуры изменяют механические свойства материала из-за взаимодействия дислокаций и дефектов, что приводит к множеству проблем, таких как упрочнение, распухание, ползучесть при облучении, охрупчивание и т. д. Изучение отдельных радиационных дефектов представляет большой интерес. Например, решетка радиационных полостей, образованная периодическим расположением пустот, обычно повторяет симметрию и кристаллографическую ориентацию кристаллической решетки [7].

Хорошо изучено взаимодействие дислокаций с когерентными и некогерентными частицами в металлах. При взаимодействии дислокации с частицами его механизм определяется размером самой частицы [9]. Когда диаметр частиц небольшой, для дислокации энергетически выгодно перерезать частицу, в особенности, если она когерентна матрице. С увеличением размера частицы дислокации становится более выгодно огибать препятствие, при этом образуются так называемые кольца Орована. Однако при взаимодействии дислокации с полостями должны работать другие механизмы. Возникает вопрос, как именно протекает пластическая деформация в материалах с порами.

В связи с этим актуальными являются численные исследования, которые можно проводить без масштабных экспериментов. Традиционно влияние облучения на механические свойства материалов оценивается с помощью испытаний на растяжение предварительно облученных образцов при различных дозах и температурах. С точки зрения моделирования существуют методы, которые описывают облучение и деформацию как отдельные процессы, причем первый основан на теории кинетического переноса, а второй – на теории кристаллической пластичности. Еще один метод – *ab initio* моделирование – используется для оценки взаимодействия типичных примесей с межузельными атомами, дислокационными петлями и краевыми дислокациями

в вольфраме. Такие примеси присутствуют в коммерческих сортах вольфрама, а также образуются в результате трансмутации нейтронов или процесса поглощения плазмы [8]. Данное исследование расширит наши представления о том, каков механизм деформационного упрочнения вольфрама с порами и как присутствие пор влияет на механические свойства радиационно поврежденного металла.

Цель работы – моделирование взаимодействия краевой дислокации с порами.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве основного метода исследования был использован метод молекулярной динамики, который ранее зарекомендовал себя как эффективный инструмент анализа различных аспектов трансформации структуры кристаллических решеток в результате внешних воздействий, в том числе при изучении дефектов краудинонного типа [10–12], устойчивости к нагреву нанокристаллов, армированных углеродными нанотрубками [13], анализе деформационно индуцированных фазовых переходов [14], формоизменения кристаллов в результате внешних электромагнитных воздействий [15] и многих других.

В качестве модели, иллюстрирующей взаимодействие дислокации с препятствиями, была выбрана методика под названием «Периодический массив дислокаций». Выбор обусловлен удобством использования периодических граничных условий, которые в данной работе накладывались по всем трем направлениям. Это, в свою очередь, позволяет изучить динамику дислокаций при ненулевых температурах [16]. Существуют альтернативные формулировки проблемы, когда в расчетный блок вводится одна дислокация и по части поверхности накладываются жесткие граничные условия [17]. В аналогичной постановке подобная задача решалась для объемно-центрированной кубической кристаллической решетки железа [18].

Моделирование проводилось с использованием пакета LAMMPS и многочастичного межатомного потенциала для вольфрама [19]. Для визуализации результатов использовалась программа OVITO (Open Visualization Tools). Ранее данное программное обеспечение неоднократно использовалось для моделирования экстремальных воздействий в решетках металлов и сплавов, включая такие динамические дефекты, как краудиноны и воидиноны – внедренные в плотноупакованный ряд межузельные дефекты, которые могут обеспечить высокую скорость массопереноса в металлах [20–23]. При этом важно отметить, что качественно результаты совпадают с молекулярно-динамическими расчетами, выполненными с использованием самостоятельно написанных кодов [24; 25] и первопринципных расчетов [26].

Вольфрам – ОЦК металл с параметром решетки $a=3,160 \text{ \AA}$. Основная система скольжения в ОЦК металлах – $\{110\}\langle-111\rangle$. Координатные оси кристалла X , Y , Z ориентированы вдоль $[111]$, $[-1-12]$ и $[1-10]$ соответственно. Таким образом, плоскость скольжения параллельна плоскости XZ , а направление скольжения совпадает с осью X . Изначально прямолинейная краевая дислокация расположена вдоль оси Z . Размер исходной

ячейки – $L_x \times L_y \times L_z = 274 \times 224 \times 116 \text{ \AA}$ (содержит примерно 450 тысяч атомов). Вектор Бюргерса краевой дислокации равен $\frac{1}{2} [111]$. Сдвиговая деформация γ возрастала со скоростью деформации 10^9 с^{-1} . Для интегрирования уравнений движения атомов использовался метод Верле четвертого порядка с шагом интегрирования 2 фс.

Моделирование проводилось для пор различного диаметра (0,5, 1, 2, 4, 6 нм) и для различных температур (600, 800, 1000, 1200, 1400 К), при которых совершалась пластическая деформация. Моделирование начиналось с создания ячейки заданного размера и определенной ориентацией в пакете LAMMPS.

Затем с помощью OVITO получалась идеальная структура путем варьирования размера ячейки так, чтобы в ячейке все атомы имели координационное число, равное 8. Чтобы получить пару прямолинейных краевых дислокаций с координатами $X, Y = L_x/2, L_y/4$ и $X, Y = L_x/2, Y = 3L_y/4$, в расчетной ячейке удалялись части атомных плоскостей прямоугольной формы. Затем добавлялись две поры заданного диаметра, расположенные на плоскостях скольжения дислокаций. Координаты первой поры ($L_x/4, L_y/4, L_z/2$), второй поры – ($3L_x/4, 3L_y/4, L_z/2$).

После того, как были добавлены дефекты, проводилась релаксация структуры с использованием термодинамического ансамбля NPT, в процессе которой исходные дислокации расщеплялись на две частичные дислокации. Дислокации в результате релаксации оказались на порах, как показано на рис. 1, где представлена исходная равновесная структура при нулевой деформации. Затем прикладывалась сдвигающая деформация γ при использовании термодинамического ансамбля NVE.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В результате приложения монотонно увеличивающейся сдвиговой деформации γ дислокации начинали двигаться в поле сдвигающего напряжения. Итоги моделирования позволяют получить зависимости «напря-

жение – деформация» и изучить механизм взаимодействия поры и дислокации.

На рис. 2 и 3 показаны зависимости сдвигающего напряжения от деформации для различных диаметров пор при $T=600 \text{ К}$ и для различных температур при диаметре пор 4 нм соответственно.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

С помощью OVITO был изучен механизм взаимодействия дислокаций с порами. С повышением сдвигающего напряжения дислокации начинают выгибаться, затем происходит их отрыв от поры, и дислокации бегут к следующим порам, видоизменяясь в процессе перемещения (рис. 4). После этого дислокации снова встречаются с порами. Рассмотрена сдвиговая деформация до величины $\gamma=0,03$, за это время дислокации успевают два раза преодолеть пору. При рассмотрении поры после отрыва дислокации заметно, что дислокация перерезает препятствие (рис. 5).

На рис. 2 видно, что величина напряжения с увеличением γ сначала растет линейно. Для пор большого диаметра (2, 4 и 6 нм) наблюдается два максимума на кривых «напряжение – деформация». Они соответствуют моментам отрыва дислокации от поры. Второй максимум кривой напряжения ниже первого, потому что пора уже перерезана на величину одного вектора Бюргерса. При увеличении диаметра поры напряжение, необходимое для ее преодоления, увеличивается пропорционально диаметру поры как для первых максимумов, так и для последующих. При диаметре пор $D > 1 \text{ нм}$ величина деформации, необходимая для отрыва дислокации, растет линейно.

Для пор диаметра 1 нм и менее характер зависимостей напряжения от γ практически одинаков как для ячеек с порами, так и без пор, наблюдается лишь небольшое повышение уровня напряжений с ростом диаметра пор. Для преодоления поры в первый раз для этих случаев достаточно деформации $\gamma=0,007$. Осциллирующий характер зависимости, по-видимому связан с наличием барьера

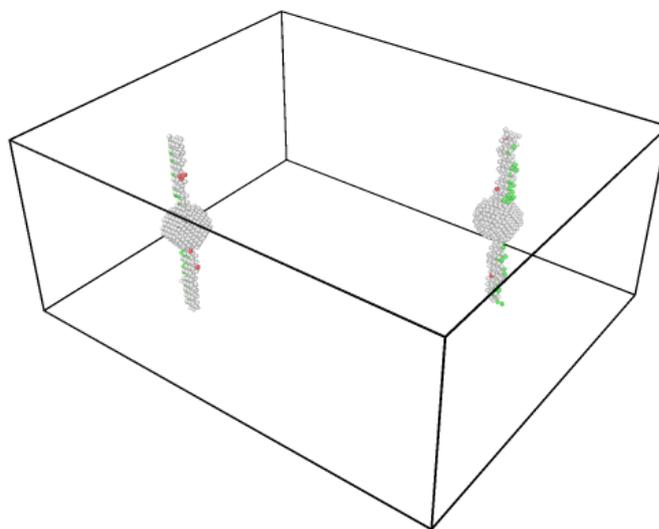


Рис. 1. Стартовое положение дислокаций и пор. $D=2 \text{ нм}$, $T=600 \text{ К}$
 Fig. 1. The starting position of dislocations and pores. $D=2 \text{ nm}$, $T=600 \text{ K}$

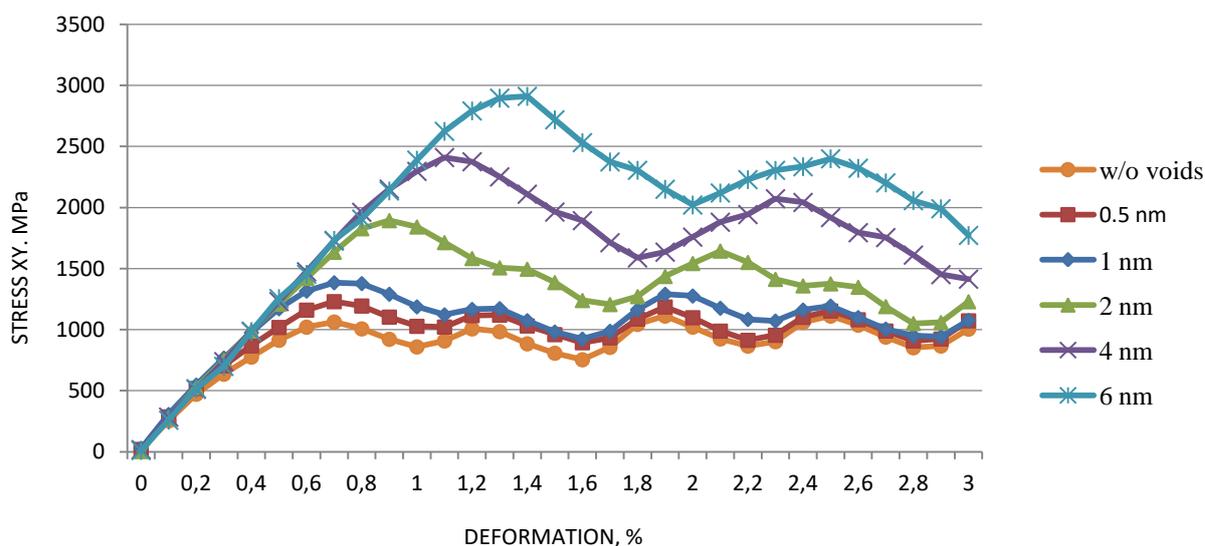


Рис. 2. Зависимость сдвигающего напряжения от деформации γ для различных диаметров пор от 0,5 до 6 нм при температуре $T=600$ К

Fig. 2. The dependence of shear stress on γ deformation for various pore diameters from 0.5 to 6 nm at the temperature of $T=600$ K

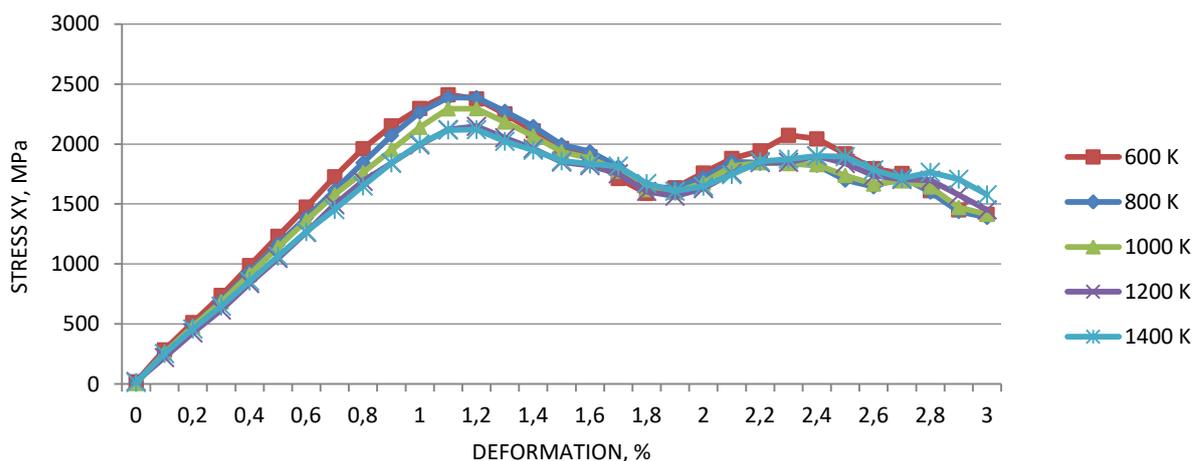


Рис. 3. Зависимость сдвигающего напряжения от деформации γ для различных температур от 600 до 1400 К при диаметре пор $D=4$ нм

Fig. 3. The dependence of shear stress on γ deformation γ for various temperatures from 600 to 1400 K with a pore diameter of $D=4$ nm

Пайерлса – Набарро, преодоление которого дислокациями происходит с образованием кинков, которые отчетливо видны в процессе всего эксперимента (рис. 6).

На рис. 3 отражена зависимость сдвигающего напряжения от γ при одинаковом диаметре поры (4 нм) при различных температурах. С увеличением температуры величина напряжения течения уменьшается, однако при температурах 1200 и 1400 К уже практически не меняется по значению. Величина сдвигающей деформации, необходимой для отрыва дислокаций от пор, слабо зависит от температуры и примерно равна $\gamma=0,011$.

Важно учесть, что данные зависимости (рис. 2 и 3) не учитывают напряжение трения, так как в [27] показано, что при моделировании с температурой выше 100 К оно почти исчезает.

Авторы планируют провести аналогичные исследования для ячейки большего размера, рассмотреть влияние скорости деформации и расстояния между порами на величину напряжения течения, а также изучить взаимодействие дислокаций и дислокационных петель в поликристаллической модели ОЦК решетки вольфрама.

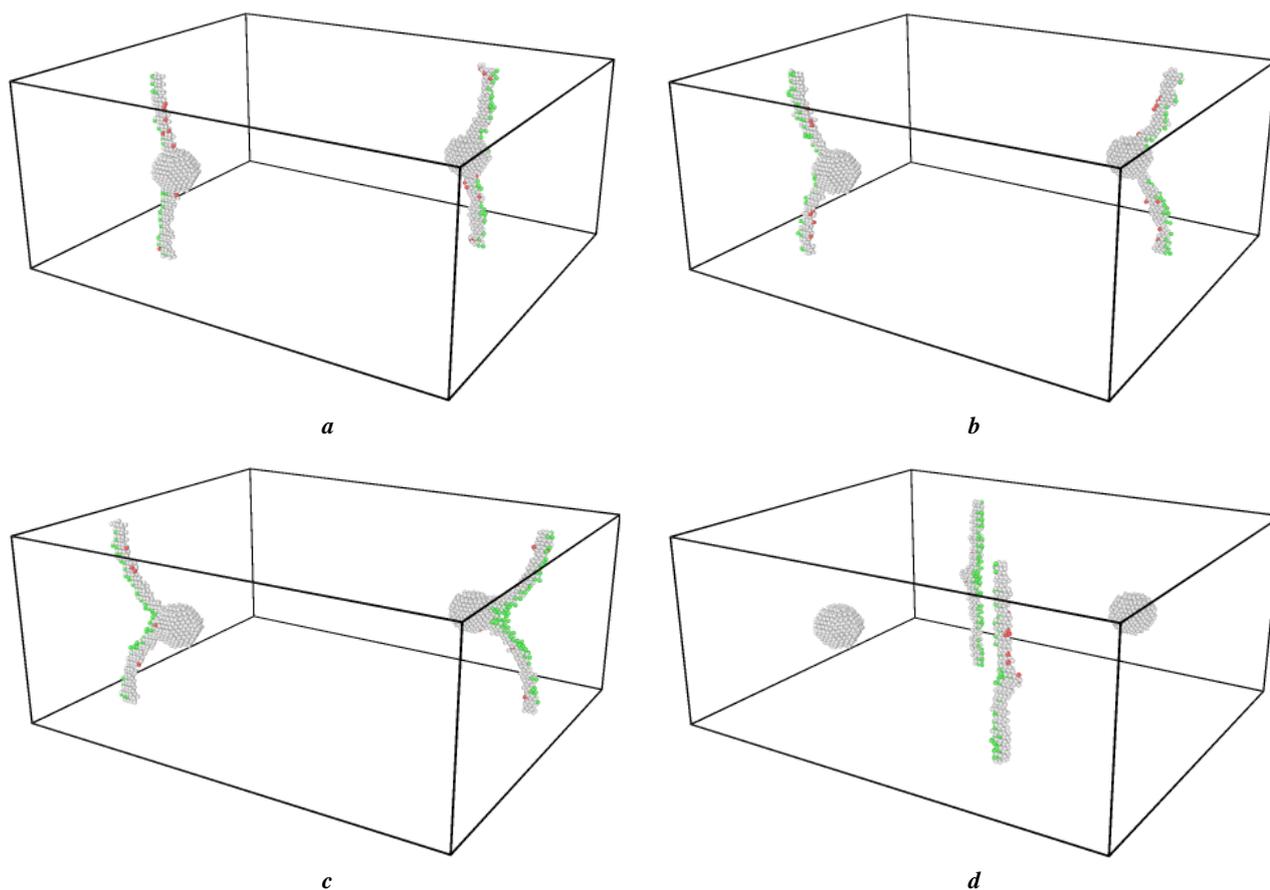


Рис. 4. Визуализация процесса преодоления пор дислокациями. Показаны только атомы с координационным числом, отличным от 8, которые располагаются вблизи дефектов.

Выгибание (a, b, c) и отрыв (d) дислокаций. $D=2$ нм, $T=600$ К

Fig. 4. Visualization of the process of overcoming pores by dislocations. Only atoms with a coordination number other than 8 that are located near defects are shown.

Flexion (a, b, c) and separation (d) of dislocations. $D=2$ nm, $T=600$ K

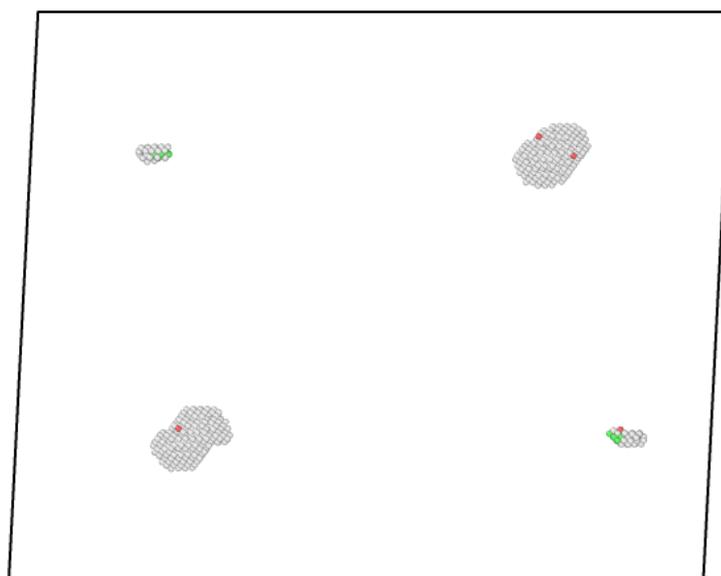


Рис. 5. Поры после прохождения через них дислокаций.

Видно, что дислокации перерезают поры. $D=2$ нм, $T=600$ К, $\gamma=0,03$

Fig. 5. Pores after dislocations pass through them.

It can be seen that dislocations intersect the pores. $D=2$ nm, $T=600$ K, $\gamma=0.03$

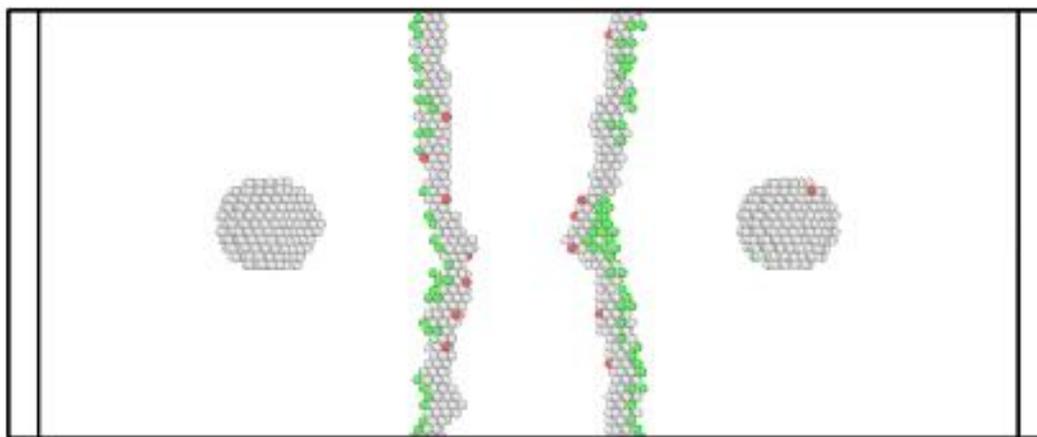


Рис. 6. Кинки на частичных дислокациях. $D=2$ нм, $T=600$ К

Fig. 6. Kinks on partial dislocations. $D=2$ nm, $T=600$ K

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

С помощью моделирования изучен механизм взаимодействия дислокаций с порами и показано, что дислокации перерезают поры. Полученные зависимости «напряжение – деформация» демонстрируют, что температура в исследованном интервале слабо влияет на сдвиговое напряжение, достаточное для преодоления препятствия, а увеличение диаметра поры приводит к росту сдвигающего напряжения и сдвигающей деформации по закону, близкому к линейному.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Голубева А.В., Черкез Д.И. Накопление водорода в разработанных для термоядерных установок сплавах вольфрама (обзор) // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. 2018. Т. 41. № 4. С. 26–37. DOI: [10.21517/0202-3822-2018-41-4-26-37](https://doi.org/10.21517/0202-3822-2018-41-4-26-37).
2. Хрипунов Б.И., Койдан В.С., Рязанов А.И., Гурев В.М., Корниенко С.Н., Латушкин С.Т., Муксунов А.М., Семенов Е.В., Столярова В.Г., Унежев В.Н. Радиационно-поврежденный вольфрам: получение и исследование в потоке стационарной плазмы // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Термоядерный синтез. 2017. Т. 40. № 4. С. 40–49. DOI: [10.21517/0202-3822-2017-40-4-40-49](https://doi.org/10.21517/0202-3822-2017-40-4-40-49).
3. Ipatova I., Harrison R.W., Donnelly S.E., Rushton M.J.D., Middleburgh S.C., Jimenez-Melero E. Void evolution in tungsten and tungsten-5wt.% tantalum under in-situ proton irradiation at 800 and 1000 °C // Journal of Nuclear Materials. 2019. Vol. 526. Article number 151730. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2019.07.030](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.07.030).
4. Masters B.C. Dislocation loops in irradiated iron // Philosophical Magazine. 1965. Vol. 11. № 113. P. 881–893. DOI: [10.1080/14786436508223952](https://doi.org/10.1080/14786436508223952).
5. Muroga T., Watanabe H., Yoshida N. Correlation of fast neutron, fusion neutron and electron irradiations based on the dislocation loop density // Journal of Nuclear Materials. 1990. Vol. 174. № 2-3. P. 282–288. DOI: [10.1016/0022-3115\(90\)90241-E](https://doi.org/10.1016/0022-3115(90)90241-E).
6. Jumel S., Van Duysen J.-C., Ruste J., Domain C. Interactions between dislocations and irradiation-induced defects in light water reactor pressure vessel steels // Journal of Nuclear Materials. 2005. Vol. 346. № 2-3. P. 79–97. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2005.04.065](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2005.04.065).
7. Rong Z., Osetsky Y.N., Bacon D.J. A model for the dynamics of loop drag by a gliding dislocation // Philosophical Magazine. 2005. Vol. 85. № 14. P. 1473–1493. DOI: [10.1080/14786430500036371](https://doi.org/10.1080/14786430500036371).
8. Osetsky Yu.N. Atomic-scale mechanisms of void strengthening in tungsten // Tungsten. 2021. Vol. 3. № 1. P. 65–71. DOI: [10.1007/s42864-020-00070-6](https://doi.org/10.1007/s42864-020-00070-6).
9. Gerold V. Precipitation Hardening; Dislocations in Solids. Vol. 4. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1979. 219 p.
10. Shepelev I.A., Bayazitov A.M., Korznikova E.A. Modeling of superionic crowdion clusters in FCC lattice: Effect of the interatomic potential // Journal of Micromechanics and Molecular Physics. 2021. Vol. 6. № 1. Article number 2050019. DOI: [10.1142/S2424913020500198](https://doi.org/10.1142/S2424913020500198).
11. Kolesnikov I.D., Shepelev I.A. Excitation and propagation of 1-crowdion in bcc niobium lattice // Materials. Technologies. Design. 2022. Vol. 4. № 1. P. 5–10. DOI: [10.54708/26587572_2022_4175](https://doi.org/10.54708/26587572_2022_4175).
12. Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M.G. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices // Computational Condensed Matter. 2017. Vol. 13. P. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).
13. Янковская У.И., Захаров П.В. Устойчивость к нагреву кристалла платины, армированного углеродными нанотрубками // Materials. Technologies. Design. 2021. Т. 3. № 4. С. 64–67. DOI: [10.54708/26587572_2021_34664](https://doi.org/10.54708/26587572_2021_34664).
14. Chen H.-Y., Tsou N.-T. The Analysis of Thermal-Induced Phase Transformation and Microstructural Evolution in Ni-Ti Based Shape Memory Alloys By Molecular Dynamics // CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences. 2019. Vol. 120. № 2. P. 319–332. DOI: [10.32604/cmcs.2019.06447](https://doi.org/10.32604/cmcs.2019.06447).
15. Yoon T., Kang S., Kang T.Y., Kim T.-S. Detection of Graphene Cracks By Electromagnetic Induction, Insensitive to Doping Level // CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences. 2019. Vol. 120. № 2. P. 351–361. DOI: [10.32604/cmcs.2019.06672](https://doi.org/10.32604/cmcs.2019.06672).

16. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications // *Materials Science Reports*. 1993. Vol. 9. № 7-8. P. 251–310. DOI: [10.1016/0920-2307\(93\)90001-U](https://doi.org/10.1016/0920-2307(93)90001-U).
17. Osetsy Yu.N., Bacon D.J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2003. Vol. 11. № 4. P. 427–440. DOI: [10.1088/0965-0393/11/4/302](https://doi.org/10.1088/0965-0393/11/4/302).
18. Bonny G., Terentyev D., Elena J., Zinovev A., Minov B., Zhurkin E.E. Assessment of hardening due to dislocation loops in bcc iron: Overview and analysis of atomistic simulations for edge dislocations // *Journal of Nuclear Materials*. 2016. Vol. 473. P. 283–289. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2016.02.031](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.02.031).
19. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers // *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 2004. Vol. 69. № 14. Article number 144113. DOI: [10.1103/physrevb.69.144113](https://doi.org/10.1103/physrevb.69.144113).
20. Shepelev I.A., Dmitriev S.V., Kudreyko A.A., Velarde M.G., Korznikova E.A. Supersonic voidions in 2D Morse lattice // *Chaos, Solitons & Fractals*. 2020. Vol. 140. Article number 110217. DOI: [10.1016/j.chaos.2020.110217](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110217).
21. Shepelev I.A., Korznikova E.A., Bachurin D.V., Semenov A.S., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice // *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*. 2020. Vol. 384. № 1. Article number 126032. DOI: [10.1016/j.physleta.2019.126032](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.126032).
22. Babicheva R.I., Evazzade I., Korznikova E.A., Shepelev I.A., Zhou K., Dmitriev S.V. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact // *Computational Materials Science*. 2019. Vol. 163. P. 248–255. DOI: [10.1016/j.commatsci.2019.03.022](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.03.022).
23. Shepelev I.A., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Dmitriev S.V. Mechanism of remote vacancy emergence by a supersonic crowdion cluster in a 2D Morse lattice // *Chinese Journal of Physics*. 2021. Vol. 70. P. 355–362. DOI: [10.1016/j.cjph.2021.01.010](https://doi.org/10.1016/j.cjph.2021.01.010).
24. Moradi Marjaneh A.M., Saadatmand D., Evazzade I., Babicheva R., Soboleva E.G., Srikanth N., Zhou K., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Mass transfer in the Frenkel-Kontorova chain initiated by molecule impact // *Physical Review E*. 2018. Vol. 98. № 2. Article number 023003. DOI: [10.1103/PhysRevE.98.023003](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.023003).
25. Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain // *Journal of Nonlinear Science*. 2021. Vol. 31. № 1. Article number 12. DOI: [10.1007/s00332-020-09663-4](https://doi.org/10.1007/s00332-020-09663-4).
26. Korznikova E., Shunaev V.V., Shepelev I.A., Glukhova O.E., Dmitriev S.V. Ab initio study of the propagation of a supersonic 2-crowdion in fcc Al // *Computational Materials Science*. 2022. Vol. 204. Article number 111125. DOI: [10.1016/j.commatsci.2021.111125](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.111125).
27. Terentyev D., Malerba L., Bacon D.J., Osetsy Yu.N. The effect of temperature and strain rate on the interaction between an edge dislocation and an interstitial dislocation loop in α -iron // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2007. Vol. 19. № 45. Article number 456211. DOI: [10.1088/0953-8984/19/45/456211](https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/45/456211).

REFERENCES

- Golubeva A.V., Cherkez D.I. Hydrogen retention in doped tungsten materials developed for fusion (review). *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Termoyadernyy sintez*, 2018, vol. 41, no. 4, pp. 26–37. DOI: [10.21517/0202-3822-2018-41-4-26-37](https://doi.org/10.21517/0202-3822-2018-41-4-26-37).
- Khripunov B.I., Koydan V.S., Ryazanov A.I., Gureev V.M., Kornienko S.N., Latushkin S.T., Muksunov A.M., Semenov E.V., Stolyarova V.G., Unezhev V.N. Radiation-damaged tungsten: production and study under steady-state plasma flux. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Termoyadernyy sintez*, 2017, vol. 40, no. 4, pp. 40–49. DOI: [10.21517/0202-3822-2017-40-4-40-49](https://doi.org/10.21517/0202-3822-2017-40-4-40-49).
- Ipatova I., Harrison R.W., Donnelly S.E., Rushton M.J.D., Middleburgh S.C., Jimenez-Melero E. Void evolution in tungsten and tungsten-5wt.% tantalum under in-situ proton irradiation at 800 and 1000 °C. *Journal of Nuclear Materials*, 2019, vol. 526, article number 151730. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2019.07.030](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.07.030).
- Masters B.C. Dislocation loops in irradiated iron. *Philosophical Magazine*, 1965, vol. 11, no. 113, pp. 881–893. DOI: [10.1080/14786436508223952](https://doi.org/10.1080/14786436508223952).
- Muroga T., Watanabe H., Yoshida N. Correlation of fast neutron, fusion neutron and electron irradiations based on the dislocation loop density. *Journal of Nuclear Materials*, 1990, vol. 174, no. 2-3, pp. 282–288. DOI: [10.1016/0022-3115\(90\)90241-E](https://doi.org/10.1016/0022-3115(90)90241-E).
- Jumel S., Van Duysen J.-C., Ruste J., Domain C. Interactions between dislocations and irradiation-induced defects in light water reactor pressure vessel steels. *Journal of Nuclear Materials*, 2005, vol. 346, no. 2-3, pp. 79–97. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2005.04.065](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2005.04.065).
- Rong Z., Osetsy Yu.N., Bacon D.J. A model for the dynamics of loop drag by a gliding dislocation. *Philosophical Magazine*, 2005, vol. 85, no. 14, pp. 1473–1493. DOI: [10.1080/14786430500036371](https://doi.org/10.1080/14786430500036371).
- Osetsy Yu.N. Atomic-scale mechanisms of void strengthening in tungsten. *Tungsten*, 2021, vol. 3, no. 1, pp. 65–71. DOI: [10.1007/s42864-020-00070-6](https://doi.org/10.1007/s42864-020-00070-6).
- Gerold V. *Precipitation Hardening; Dislocations in Solids*. Amsterdam, North-Holland Publishing Company Publ., 1979. Vol. 4, 219 p.
- Shepelev I.A., Bayazitov A.M., Korznikova E.A. Modeling of supersonic crowdion clusters in FCC lattice: Effect of the interatomic potential. *Journal of Micromechanics and Molecular Physics*, 2021, vol. 6, no. 1, article number 2050019. DOI: [10.1142/S2424913020500198](https://doi.org/10.1142/S2424913020500198).
- Kolesnikov I.D., Shepelev I.A. Excitation and propagation of 1-crowdion in bcc niobium lattice. *Materials. Technologies. Design*, 2022, vol. 4, no. 1, pp. 5–10. DOI: [10.54708/26587572_2022_4175](https://doi.org/10.54708/26587572_2022_4175).
- Chetverikov A.P., Shepelev I.A., Korznikova E.A., Kistanov A.A., Dmitriev S.V., Velarde M.G. Breathing subsonic crowdion in Morse lattices. *Computational Condensed Matter*, 2017, vol. 13, pp. 59–64. DOI: [10.1016/j.cocom.2017.09.004](https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.09.004).

13. Yankovskaya U.I., Zakharov P.V. Heat resistance of a Pt crystal reinforced with CNT's. *Materials. Technologies. Design*, 2021, vol. 3, no. 4, pp. 64–67. DOI: [10.54708/26587572_2021_34664](https://doi.org/10.54708/26587572_2021_34664).
14. Chen H.-Y., Tsou N.-T. The Analysis of Thermal-Induced Phase Transformation and Microstructural Evolution in Ni-Ti Based Shape Memory Alloys By Molecular Dynamics. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 2019, vol. 120, no. 2, pp. 319–332. DOI: [10.32604/cmcs.2019.06447](https://doi.org/10.32604/cmcs.2019.06447).
15. Yoon T., Kang S., Kang T.Y., Kim T.-S. Detection of Graphene Cracks By Electromagnetic Induction, Insensitive to Doping Level. *CMES - Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 2019, vol. 120, no. 2, pp. 351–361. DOI: [10.32604/cmcs.2019.06672](https://doi.org/10.32604/cmcs.2019.06672).
16. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications. *Materials Science Reports*, 1993, vol. 9, no. 7-8, pp. 251–310. DOI: [10.1016/0920-2307\(93\)90001-U](https://doi.org/10.1016/0920-2307(93)90001-U).
17. Osetsky Yu.N., Bacon D.J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2003, vol. 11, no. 4, pp. 427–440. DOI: [10.1088/0965-0393/11/4/302](https://doi.org/10.1088/0965-0393/11/4/302).
18. Bonny G., Terentyev D., Elena J., Zinovev A., Minov B., Zhurkin E.E. Assessment of hardening due to dislocation loops in bcc iron: Overview and analysis of atomistic simulations for edge dislocations. *Journal of Nuclear Materials*, 2016, vol. 473, pp. 283–289. DOI: [10.1016/j.jnucmat.2016.02.031](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.02.031).
19. Zhou X.W., Johnson R.A., Wadley H.N.G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 2004, vol. 69, no. 14, article number 144113. DOI: [10.1103/physrevb.69.144113](https://doi.org/10.1103/physrevb.69.144113).
20. Shepelev I.A., Dmitriev S.V., Kudreyko A.A., Velarde M.G., Korznikova E.A. Supersonic voidions in 2D Morse lattice. *Chaos, Solitons & Fractals*, 2020, vol. 140, article number 110217. DOI: [10.1016/j.chaos.2020.110217](https://doi.org/10.1016/j.chaos.2020.110217).
21. Shepelev I.A., Korznikova E.A., Bachurin D.V., Semenov A.S., Chetverikov A.P., Dmitriev S.V. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice. *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*, 2020, vol. 384, no. 1, article number 126032. DOI: [10.1016/j.physleta.2019.126032](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.126032).
22. Babicheva R.I., Evazzade I., Korznikova E.A., Shepelev I.A., Zhou K., Dmitriev S.V. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact. *Computational Materials Science*, 2019, vol. 163, pp. 248–255. DOI: [10.1016/j.commatsci.2019.03.022](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.03.022).
23. Shepelev I.A., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Dmitriev S.V. Mechanism of remote vacancy emergence by a supersonic crowdion cluster in a 2D Morse lattice. *Chinese Journal of Physics*, 2021, vol. 70, pp. 355–362. DOI: [10.1016/j.cjph.2021.01.010](https://doi.org/10.1016/j.cjph.2021.01.010).
24. Moradi Marjaneh A.M., Saadatmand D., Evazzade I., Babicheva R., Soboleva E.G., Srikanth N., Zhou K., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Mass transfer in the Frenkel-Kontorova chain initiated by molecule impact. *Physical Review E*, 2018, vol. 98, no. 2, article number 023003. DOI: [10.1103/PhysRevE.98.023003](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.023003).
25. Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. Effect of discrete breathers on the specific heat of a nonlinear chain. *Journal of Nonlinear Science*, 2021, vol. 31, no. 1, article number 12. DOI: [10.1007/s00332-020-09663-4](https://doi.org/10.1007/s00332-020-09663-4).
26. Korznikova E., Shunaev V.V., Shepelev I.A., Glukhova O.E., Dmitriev S.V. Ab initio study of the propagation of a supersonic 2-crowdion in fcc Al. *Computational Materials Science*, 2022, vol. 204, article number 111125. DOI: [10.1016/j.commatsci.2021.111125](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.111125).
27. Terentyev D., Malerba L., Bacon D.J., Osetsky Yu.N. The effect of temperature and strain rate on the interaction between an edge dislocation and an interstitial dislocation loop in α -iron. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2007, vol. 19, no. 45, article number 456211. DOI: [10.1088/0953-8984/19/45/456211](https://doi.org/10.1088/0953-8984/19/45/456211).

Simulation of overcoming obstacles in the form of pores by dislocations in tungsten

© 2022

Arseny M. Kazakov^{*1,5}, student

Yuliya R. Sharapova¹, researcher

Rita I. Babicheva^{2,6}, PhD (Physics and Mathematics),

researcher of the School of Mechanical and Aerospace Engineering

Alexandr V. Zinovev^{3,7}, PhD (Physics and Mathematics), researcher

Dmitry A. Terentyev³, PhD (Physics and Mathematics), researcher

Alexandr S. Semenov^{4,8}, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor

¹Ufa State Aviation Technical University, Ufa (Russia)

²Nanyang Technological University, Singapore (Singapore)

³SCK-CEN (Belgian Nuclear Research Centre), Mol (Belgium)

⁴Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University, Mirny (Russia)

*E-mail: arseny.m.kazakov@gmail.com

⁵ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8278-8705>

⁶ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5388-3466>

⁷ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-1332-5125>

⁸ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

Received 27.04.2022

Accepted 14.07.2022

Abstract: Tungsten is widely used as a material capable of withstanding working conditions in nuclear reactors and other extreme conditions. Under the influence of irradiation, such defects as Frenkel pairs, pores, and dislocation loops are formed in the metal. Therefore, the research aimed at studying the interactions of these defects with each other and their influence on the mechanical properties of the metal are relevant. The paper presents the theoretical study based on the molecular dynamics method, the purpose of which is to investigate the mechanism of strain hardening of tungsten associated with the interaction of dislocations and pores. The authors solved this problem using the LAMMPS package, carried out the integration of atoms motion equations by the fourth order Verlet method. The model under the study is a single crystal of a certain [111], $[-1-12]$, $[1-10]$ orientation along the basic X, Y, and Z coordinate axis relatively, in which the slip of edge dislocations in the main slip system of BCC metals and their interaction with pores is considered. The authors studied the influence of a pore size on the shear stress magnitude: the growth of pore diameter is proportional to the stress growth. The dependences of shear stress on the shear strain in the temperature range of 600–1400 K are calculated, whereby the temperature change does not significantly influence the stress value. The study shows that dislocations cut the pores and, upon the repeated interaction with a pore, a lower value of peak shear stress is observed than during the first one. The presence of pores leads to the flow stress increase, and such an effect becomes more evident with the increasing pore diameter. The flow stress increases thrice for pores with a diameter of 6 nm compared to the material without pores. The authors described the mechanism of interaction between the edge dislocations and pores under the influence of shear stress.

Keywords: tungsten; molecular dynamics method; pores; dislocations; defects interaction; shear deformation.

Acknowledgments: The research was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the state assignment of FSBEI HE USATU (agreement No. 075-03-2022-318/1) “Youth Scientific Laboratory of REC “Metals and Alloys at Extreme Conditions” for A.V. Zinovyev (calculations), grant No. NSh-4320.2022.1.2 for A.M. Kazakov (analysis and discussion of obtained results), grant of the Russian Science Foundation No. 21-12-00275 for A.S. Semenov (task description, research conceptualization).

For citation: Kazakov A.M., Sharapova Yu.R., Babicheva R.I., Zinovev A.V., Terentyev D.A., Semenov A.S. Simulation of overcoming obstacles in the form of pores by dislocations in tungsten. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 76–84. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-1-76-84.