

УДК 539.5

*А.В. Бакаев, Е.Е. Журкин*

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИСЛОКАЦИЙ В АУСТЕНИТНОМ СПЛАВЕ ЖЕЛЕЗА НА АТОМАРНОМ МАСШТАБЕ РАССТОЯНИЙ**

С помощью компьютерного моделирования проведено исследование движения дислокаций в модельном сплаве железа, содержащем 10% Ni и 20% Cr, с целью последующего изучения взаимодействия дислокаций с радиационными дефектами. В частности, протестирована модель периодических дислокаций и рассчитан ряд дислокационных характеристик.

ДИСЛОКАЦИЯ, АУСТЕНИТНЫЙ СПЛАВ, МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, МОДЕЛИРОВАНИЕ.

### **Введение**

Аустенитные сплавы широко используются в качестве конструкционных материалов для ядерных энергетических установок. Их применение обуславливается хорошими эксплуатационными свойствами, в частности, устойчивостью к коррозии. Однако в процессе эксплуатации они подвержены радиационному охрупчиванию, которое обусловлено накоплением и ростом радиационных дефектов, возникающих в результате взаимодействия потока нейтронов с материалом [1]. Характер радиационного повреждения аустенитных сплавов при нейтронном облучении был изучен в целом ряде экспериментальных работ (см., например, статьи [2 – 4]), в которых было установлено, что преобладающим типом протяженных радиационных дефектов в таких сплавах (при дозах до 10 с.н.а. (смещений на атом)) являются дислокационные петли Франка межузельного типа. Считается, что именно эти дефекты в наибольшей мере обуславливают радиационное упрочнение аустенитных сталей, имеющих гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку, при нейтронных флюенсах (дозах), соответствующих диапазону  $10^{-3}$  – 10 с.н.а. Физические причины возникновения радиационного упрочнения и охрупчивания связаны с тем, что петли Франка препятствуют движению дислокаций в своих плоскостях скольжения. В результате взаимодействия дислокации с дефектом-барьером происходят дислокационные реакции, которые

приводят к возрастанию предела текучести материала. В результате этих реакций петли Франка могут либо поглощаться, либо деформироваться. Изучение взаимодействия подвижных дислокаций и радиационных дефектов необходимо для понимания процессов пластической деформации облученных материалов.

Типичные размеры дислокационных петель составляют порядка нескольких нанометров, поэтому для моделирования их свойств логично использовать атомистические подходы [1]. В связи с этим метод классической молекулярной динамики (МД) является подходящим инструментом для исследования механизмов взаимодействия дислокаций и дефектов на атомарном уровне, причем данный метод позволяет варьировать температуру материала и условия внешней нагрузки.

Взаимодействие дислокаций и радиационных дефектов уже было изучено в чистых металлах (таких как алюминий, никель, медь), имеющих ГЦК кристаллическую решетку [5 – 8]. Аустенитные сплавы железа (также имеющие ГЦК-решетку) характеризуются относительно низким значением величины энергии дефекта упаковки (около 20 мДж/м<sup>2</sup>) при высоком значении модуля упругости (80 ГПа), что не реализуются ни в одном из чистых ГЦК-материалов. Основными легирующими компонентами аустенитной стали являются никель и хром, вариация концентраций которых приводит к изменению энергии дефекта упаковки

(ЭДУ), в связи с чем сплав железа, содержащий 10 % Ni и 20 % Cr, используется на практике как модельный для изучения свойств аустенитных сталей.

Цель данной работы – выяснение характера движения дислокаций в модельном аустенитном сплаве  $Fe_{0,7}Ni_{0,1}Cr_{0,2}$  в рамках атомистической модели. Верификация модели движения дислокаций необходима для последующего изучения взаимодействия дислокаций с радиационными дефектами. Это позволит охарактеризовать механизмы такого взаимодействия в аустенитных сплавах на атомарном уровне, а также вычислить значения критического напряжения сдвига, необходимого для преодоления дислокацией дефекта-барьера. Эти результаты, в свою очередь, можно использовать в прогностических моделях изменения механических свойств аустенитных сталей и сплавов под воздействием нейтронного облучения.

В рамках же представленной работы, в частности, проведено тестирование атомистической модели периодических дислокаций [9] и рассчитан ряд дислокационных характеристик. Кроме того, определена скорость приложения внешней нагрузки, при которой предел текучести в моделируемом кристалле соответствует таковому для аустенитной стали марки 304L (российский аналог – сталь марки 03X18H11) [10] в рассматриваемом диапазоне температур  $T = 300 - 900$  К при скоростях нагрузки, характерных для квазистатических тестов на растяжение.

#### Методика исследования

Для решения поставленных задач мы использовали компьютерное моделирование в рамках метода классической молекулярной динамики, который позволяет отслеживать индивидуальные траектории каждой из частиц изучаемой системы путем интегрирования уравнений движения Ньютона [11]. Для проведения вычислений применялся стандартный алгоритм молекулярной динамики, адаптированный авторами работы [9] свыше десятилетия назад для атомистического моделирования дислокаций в кристаллах. Для вычисления сил взаимодействия между атомами использовался не-

давно созданный потенциал [12], который основан на стандартной модели погруженного атома. При этом данный потенциал оптимизирован с целью корректного воспроизведения механических свойств тройных аустенитных ГЦК-сплавов Fe-Ni-Cr (с учетом относительно низких величин ЭДУ при высоком значении модуля упругости) при различном содержании легирующих элементов. Он позволяет с хорошей точностью воспроизводить значения энергии когезии, постоянных кристаллической решетки, констант упругости  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{44}$ , энергии образования и миграции вакансии, энергии образования различных межузельных конфигураций (гантелей  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ , а также межузлий в октаэдрических и тетраэдрических позициях), воспроизводить ЭДУ как для чистых металлов (Fe, Ni, Cr), так и для сплава  $Fe_{0,7}Ni_{0,1}Cr_{0,2}$ . При этом достигается хорошее согласие и с опубликованными ранее экспериментальными данными, и с результатами, полученными в рамках квантовомеханического метода *ab initio* (детали сравнений приведены в статье [12]).

В данной работе рассмотрены дислокации краевого и винтового типов с вектором Бюргерса  $(1/2) \langle 110 \rangle$ . Было принято, что оси декартовой системы координат  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ , параллельные граням прямоугольного модельного кристалла, ориентированы вдоль кристаллографических направлений  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 112 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$ , соответственно. Периодические граничные условия применялись вдоль осей  $X$ ,  $Y$ ; плоскости граней  $(111)$  являлись свободными поверхностями, перпендикулярными оси  $Z$ . Размеры модельных боксов, соответствующее число атомов и плотность дислокаций приведены в табл. 1 для краевой и винтовой дислокаций. Шаг интегрирования уравнений движения атомов был равен 5 фс.

Для атомных конфигураций, содержащих дислокации, была проведена процедура релаксации (минимизация энергии кристалла) при нулевой температуре, а затем полученные конфигурации использовались в качестве начальных для молекулярно-динамического моделирования при конечных температурах  $T = 300, 600$  и  $900$  К.

Таблица 1

**Характеристики моделируемых дислокаций**

| Использованная величина            |               | Значение для дислокации        |                                |
|------------------------------------|---------------|--------------------------------|--------------------------------|
|                                    |               | краевой                        | винтовой                       |
| Число атомов                       | Общее         | 1470936                        | 1481884                        |
|                                    | Интегрируемое | 1075800                        | 1085040                        |
| Размер модельного бокса, ед. $a_0$ |               | $84,5 \times 61,2 \times 52,0$ | $62,3 \times 83,9 \times 52,0$ |
| Плотность дислокаций, $m^{-2}$     |               | $1,8 \cdot 10^{15}$            |                                |

Примечание. Общее число атомов включало в себя верхний подвижный и нижний неподвижный блоки модельного кристалла, а также те атомы, для которых производилось интегрирование уравнений движения в рамках МД-моделирования.

Обозначение:  $a_0$  – постоянная решетки.

Температура инициализировалась путем раздачи скоростей каждому из атомов согласно следующей процедуре: вначале всем атомам системы раздавались импульсы случайным образом, в соответствии с распределением Максвелла для температуры  $2T$  (где  $T$  – требуемая температура). Далее рассчитывался полный импульс системы, после чего производился одновременный пересчет всех скоростей таким образом, чтобы обнулить полный импульс системы. Мы использовали следующую процедуру для установления динамического равновесия: на протяжении 10 тыс. шагов происходит интегрирование уравнений движения, при этом через каждые 100 шагов по времени импульсы всех атомов перенормируются таким образом, чтобы полная кинетическая энергия системы соответствовала требуемой температуре. После этого начинается приложение внешней нагрузки, согласно нижеописанному алгоритму.

Внешняя нагрузка была реализована путем сдвига нескольких верхних атомных плоскостей (111) модельного кристалла. Атомы в этих слоях жестко фиксированы в своих позициях, и интегрирование уравнений Ньютона для них не производится. Скорость приложения внешней нагрузки (путем сдвига) варьировалась в пределах от  $2,0 \cdot 10^7$  до  $4,0 \cdot 10^8$   $c^{-1}$ , что соответствует скорости движения дислокации в диапазоне от 43,8 до 874,9 м/с. Атомы в нижних слоях кристалла также были жестко зафиксированы в своих начальных позициях, и резуль-

тирующее напряжение сдвига, вызванное сдвигом верхних слоев кристалла, определяли, исходя из расчета силы, действующей на нижний фиксированный слой атомов в направлении приложенной нагрузки.

При анализе конечной конфигурации атомов использовалась численная процедура метода «связанных ячеек», обеспечивающая наиболее эффективный поиск ближайших соседей каждого атома в модельном кристалле [11]. Атомы ядра дислокации и дефекта упаковки анализировались по критериям координационного числа, подсчета числа соседей, соответствующих ГЦК-структуре и потенциальной энергии каждого атома. Конфигурация локального окружения каждого атома сравнивалась с идеальной ГЦК-решеткой (мы исходили из количества соседей, соответствующих ГЦК-структуре). Атомы ядра дислокации были идентифицированы по наличию 10 или 11 ГЦК-соседей; дефект упаковки определялся по двойному слою атомов, имеющих по 9 ГЦК-соседей.

**Результаты и их обсуждение**

**Верификация модели дислокаций.** Согласно модели Орована [13], скорость движения дислокаций связана со скоростью приложения внешней нагрузки и плотностью дислокаций следующим образом:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{d\varepsilon}{dt} = b\rho_m v, \quad (1)$$

где  $\varepsilon$  – абсолютная величина прилагаемой

Таблица 2

## Сравнение используемой модели движения (скольжения) дислокаций с теоретической моделью Орована

| Тип дислокации | Температура, К | Скорость движения, м/с       |                          |
|----------------|----------------|------------------------------|--------------------------|
|                |                | Результат расчета методом МД | Согласно формуле Орована |
| Краевая        | 300            | 45,0 ± 1,3                   | 43,8                     |
|                | 600            | 44,0 ± 1,3                   | 43,9                     |
|                | 900            | 45,4 ± 1,5                   | 44,0                     |
| Винтовая       | 300            | 41,7 ± 1,8                   | 43,4                     |
|                | 600            | 41,8 ± 1,9                   | 43,6                     |
|                | 900            | 42,9 ± 1,6                   | 43,7                     |

Обозначение: МД – молекулярная динамика.

нагрузки,  $b$  – модуль вектора Бюргера дислокации,  $\rho_m$  – плотность подвижных дислокаций,  $v$  – скорость движения дислокации,  $t$  – время.

В результате проведенных МД-вычислений на основе анализа позиции дислокации, была вычислена ее скорость (табл. 2).

При всех рассмотренных температурах скорость движения дислокаций соответствовала величине, рассчитанной по формуле (1). Дислокационные сегменты двигались равномерно, и средняя ширина расщепления дислокации  $d$  составляла  $23,90a_0$ ;  $23,90a_0$ ;  $24,69a_0$  ( $a_0$  – постоянная решетки) в случае краевой дислокации и  $10,9a_0$ ;  $12,6a_0$ ;  $13,0a_0$  для случая винтовой дислокации при температурах  $T = 300, 600$  и  $900$  К, соответственно. Согласно работе [13], для величины  $d$  справедливы следующие соотношения:

$$d_e = \frac{Gb^2(2 + \nu)}{4\pi\gamma(1 - \nu)}; \quad (2)$$

$$d_s = \frac{Gb^2(2 - 3\nu)}{4\pi\gamma(1 - \nu)}, \quad (3)$$

где  $G$  – модуль сдвига,  $b$  – модуль вектора Бюргера дислокации,  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $\gamma$  – энергия дефекта упаковки.

Формулы (2) и (3) приведены для краевой и винтовой дислокаций, соответственно. Поделив уравнение (2) на уравнение (3), можно получить соотношение, позволяющее вычислить коэффициент Пу-

ассона при известных значениях ширины расщепления краевой ( $d_e$ ) и винтовой ( $d_s$ ) дислокаций. Величины  $d_e$  и  $d_s$ , полученные из МД-расчетов, были использованы нами для вычисления коэффициента Пуассона. Он оказался равным 0,28; данный результат хорошо согласуется с экспериментальным значением коэффициента Пуассона 0,29, измеренным для аустенитных сталей [14].

Полученные нами результаты показывают, что использованная атомистическая модель периодических дислокаций и алгоритмы идентификации дефектов предсказывают величины, которые полностью согласуются с теорией упругости.

**Расчет активационного объема и энергии активации.** На рис. 1 приведена усредненная по типу дислокации зависимость напряжения нагрузки  $\sigma$  от температуры при различных скоростях приложения внешней нагрузки. Показаны результаты, полученные с помощью компьютерного моделирования, а также на основе экспериментальных данных для аустенитных сталей 304L и 316L [10]. Результирующее напряжение сдвига  $\sigma_\gamma$  было найдено путем усреднения мгновенных значений напряжения сдвига  $\sigma$  после того, как дислокация достигала расчетной скорости.

На основе этих данных нами была вычислена энергия активации  $\Delta H^*$  и активационный объем  $V^*$  для рассматриваемых дислокаций с использованием следующих соотношений [15]:

$$V^* = \frac{k_B \ln(\dot{\epsilon}_2 / \dot{\epsilon}_1)}{\Delta\sigma_Y}; \quad (4)$$

$$\Delta H^* = -V^* T \left( \frac{\partial \sigma_Y}{\partial T} \right)_{\dot{\epsilon}}, \quad (5)$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $\left( \frac{\partial \sigma_Y}{\partial T} \right)_{\dot{\epsilon}}$  – производная от  $\sigma_Y$  по температуре при постоянной скорости приложения внешней нагрузки  $\dot{\epsilon}$ .

Активационный объем был получен путем ряда тестовых расчетов при условиях постоянной температуры и варьируемой скорости нагрузки. Энергия активации рассчитывалась при постоянной скорости приложения внешней нагрузки и варьируемой температуре. Результаты расчетов приведены на рис. 2.

На основе анализа полученных результатов следует отметить, что при принятой нами плотности дислокаций экспериментальное значение предела текучести реализуется при скоростях дислокаций около 225 и 45 м/с для температур  $T = 300$  и  $600$  К, соответственно, при заданных значениях плотности и длины сегмента.

Рассчитанные нами температурные зависимости активационного объема и энергии активации позволяют экстраполировать полученные величины  $\sigma_Y$  на другие диапазоны температур.

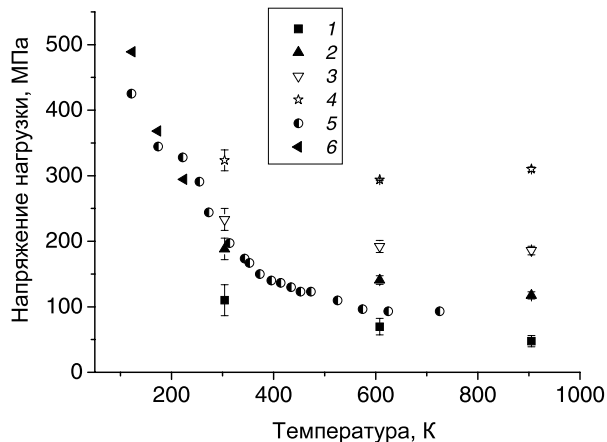
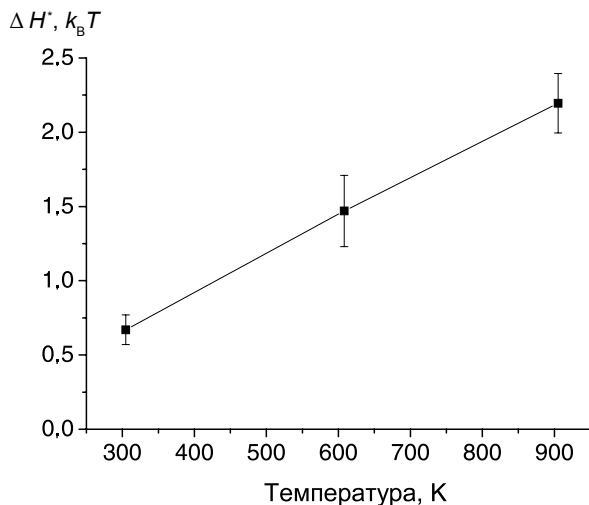


Рис. 1. Сравнение расчетных (1 – 4) и экспериментальных (5, 6) зависимостей результирующего напряжения нагрузки  $\sigma_Y$  от температуры при различных значениях средней скорости движения дислокаций  $v$ , м/с: 45 (1), 225 (2), 450 (3), 900 (4). Экспериментальные зависимости получены в работе [10] для аустенитных сталей 304L (5) и 316L (6) при  $v = 0,4$  мкм/с

Кроме того, с помощью алгоритма, описанного в работе [16], появляется возможность прогнозирования ситуаций, в которых скорости движения дислокаций отличаются от их типичных значений при тестировании аустенитной стали на растяжение. При таком тестировании типичная скорость приложения внешней нагрузки составляет  $10^{-3} \text{ с}^{-1}$ .

а)



б)

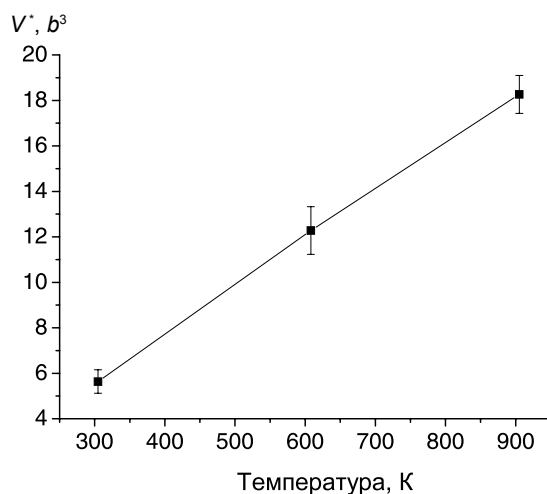


Рис. 2. Температурные зависимости энергии активации в единицах  $k_B T$  (а) и активационного объема в единицах  $b^3$  (б);  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $b$  – вектор Бюргерса

### Заключение

Таким образом, в настоящей работе подтверждено согласие использованной атомистической модели периодических дислокаций (включая алгоритм их идентификации) с теорией упругости. Кроме того, определена скорость приложения внешней нагрузки, при которой предел текучести в моделируемом кристалле соответствует пределу текучести аустенитной стали марки 304L (ее российский аналог – сталь марки 03X18H11) в рассматриваемом диапазоне температур  $T = 300 - 900$  К. Это позволяет перейти к следующему этапу работы – выяснению механизмов взаимодействия дислокаций и радиационных

дефектов в аустенитных сплавах. В последующих работах предполагается не только изучить возможные механизмы такого взаимодействия на атомарном уровне, но и провести соответствующие оценки критического напряжения сдвига (напряжение, необходимое для преодоления дислокацией дефекта-барьера). Полученные оценки в дальнейшем могут быть использованы для параметризации метода дислокационной динамики, позволяющего моделировать движение дислокаций в поле дефектов на масштабе расстояний порядка нескольких микрон. Проведенные исследования, на наш взгляд, вносят вклад в понимание механизмов пластической деформации аустенитных сталей при облучении.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Кирсанов В.А.** ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении. М.: Энергоатомиздат, 1990. 303 с.
2. **Pokor C., Brechet Y.** Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part I: Evolution of the microstructure // *Journal of Nuclear Materials*. 2004. Vol. 326, pp. 19-29.
3. **Pokor C., Brechet Y.** Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part II: Irradiation induced hardening // *Journal of Nuclear Materials*. 2004. Vol. 326, pp. 30-37.
4. **Zinkle S.J., Maziasz P.J., Stoller R.E.** Dose dependence of the microstructural evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel // *Journal of Nuclear Materials*. 1993. Vol. 206, pp. 266-286.
5. **Nogaret T., Robertson C., Rodney D.** Atomic-scale plasticity in the presence of Frank loops // *Philosophical Magazine*. 2007. Vol. 87, pp. 945-966.
6. **Rodney D., Martin G.** Dislocation pinning by glissile interstitial loops in a nickel crystal: a molecular dynamics study // *Physical Review B*. 2000. Vol. 61, pp. 8714-8730.
7. **Rodney D.** Molecular dynamics simulation of screw dislocations interacting with interstitial Frank loops in a model FCC crystal // *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52, pp. 607-614.
8. **Osetsky Y.N., Rodney D., Bacon D.J.** Atomic-scale simulations of dislocation-stacking fault tetrahedron interaction // *Philosophical Magazine*. 2006. Vol. 86, pp. 2295-2313.
9. **Osetsky Y.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, pp. 427-446.
10. **Byun T.S., Hashimoto N., Farrell K.** Temperature dependence of strain hardening and plastic instability behavior in austenitic stainless steels // *Acta Materialia*. 2004. Vol. 52, pp. 3889-3899.
11. **Allen M.P., Tildesley D.J.** Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987. 387 p.
12. **Bonny G., Terentyev D., Pasianot R.C., Ponce S., Bakaev A.** Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2011. Vol. 19. P. 085008.
13. **Bacon D.J., Hull D.** Introduction to dislocations. 4<sup>th</sup> edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2001. 242 p.
14. **Dong-Gyu Ahn, Gyung-Je Moon, Chang-Gyun Jung, Gil-Young Han, Dong-Yol Yang.** Impact behavior of a st 304 h sheet with a thickness of 0.7 mm // *The Arabian Journal for Science and Engineering*. 2009. Vol. 34, pp. 57-71.
15. **Tapasa K., Osetsky Y.N., Bacon D.J.** Computer simulation of interaction of an edge dislocation with a carbon interstitial in alpha-iron and effects on glide // *Acta Materialia*. 2007. Vol. 55, pp. 93-104.
16. **Domain C., Monnet G.** Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations // *Physical Review Letters*. 2005. Vol. 95. P. 215506.

### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**БАКАЕВ Александр Викторович** – аспирант кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
bakaev\_vic@mail.ru

**ЖУРКИН Евгений Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной ядерной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29  
ezhurkin@phmf.spbstu.ru

### *Bakaev A.V., Zhurkin E.E.* ATOMIC-SCALE SIMULATION OF DISLOCATIONS IN THE IRON AUSTENITIC ALLOY.

We have investigated the movement of dislocations in a model iron alloy with 10 % Ni and 20 % Cr by means of computer simulation in order to study an interaction of dislocations with radiation defects in metals afterwards. Among other things, we tested the model of periodical dislocations and calculated a set of dislocation characteristics.

DISLOCATION, AUSTENITIC ALLOY, MOLECULAR DYNAMICS, MODELING.

### REFERENCES

1. **Kirsanov V.A.** *EVM-eksperiment v atomnom materialovedenii*. Moscow, Energoatomizdat, 1990, 303 p. (rus)
2. **Pokor C., Brechet Y.** Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part I: Evolution of the microstructure. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, Vol. 326, pp. 19-29.
3. **Pokor C., Brechet Y.** Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part II: Irradiation induced hardening. *Journal of Nuclear Materials*, 2004, Vol. 326, pp. 30-37.
4. **Zinkle S.J., Maziasz P.J., Stoller R.E.** Dose dependence of the microstructural evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel. *Journal of Nuclear Materials*. 1993. Vol. 206, pp. 266-286.
5. **Nogaret T., Robertson C., Rodney D.** Atomic-scale plasticity in the presence of Frank loops. *Philosophical Magazine*, 2007, Vol. 87, pp. 945-966.
6. **Rodney D., Martin G.** Dislocation pinning by glissile interstitial loops in a nickel crystal: a molecular dynamics study. *Physical Review B*, 2000, Vol. 61, pp. 8714-8730.
7. **Rodney D.** Molecular dynamics simulation of screw dislocations interacting with interstitial frank loops in a model FCC crystal. *Acta Materialia*, 2004, Vol. 52, pp. 607-614.
8. **Osetsky Y.N., Rodney D., Bacon D.J.** Atomic-scale simulations of dislocation-stacking fault tetrahedron interaction. *Philosophical Magazine*, 2006, Vol. 86, pp. 2295-2313.
9. **Osetsky Y.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, pp. 427-446.
10. **Byun T.S., Hashimoto N., Farrell K.** Temperature dependence of strain hardening and plastic instability behavior in austenitic stainless steels. *Acta Materialia*, 2004, Vol. 52, pp. 3889-3899.
11. **Allen M.P., Tildesley D.J.** *Computer simulation of liquids*. Oxford: Clarendon Press, 1987, 387 p.
12. **Bonny G., Terentyev D., Pasianot R.C., Ponce S., Bakaev A.** Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2011, Vol. 19. P. 085008.
13. **Bacon D.J., Hull D.** *Introduction to dislocations*. 4<sup>th</sup> edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2001, 242 p.
14. **Dong-Gyu Ahn, Gyung-Je Moon, Chang-Gyun Jung, Gil-Young Han, Dong-Yol Yang.** Impact behavior of a sts 304 h sheet with a thickness of 0.7 mm. *The Arabian Journal for Science and Engineering*, 2009, Vol. 34, pp. 57-71.
15. **Tapasa K., Osetsky Y.N., Bacon D.J.** Computer simulation of interaction of an edge dislocation with a carbon interstitial in alpha-iron and effects on glide. *Acta Materialia*, 2007, Vol. 55, pp. 93-104.
16. **Domain C., Monnet G.** Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations. *Physical Review Letters*, 2005, Vol. 95, P. 215506.

#### THE AUTHORS

**BAKAEV Alexander V.**

*St. Petersburg State Polytechnical University*

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

bakaev\_vic@mail.ru

**ZHURKIN Evgeny E.**

*St. Petersburg State Polytechnical University*

29 Politekhnikeskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

ezhurkin@phmf.spbstu.ru