

**Атомистическое моделирование поведения краевой дислокации в молибдене  
при механической нагрузке**

Н. С. Серенко

Московский физико-технический институт (государственный университет)  
Объединенный институт высоких температур РАН

Молибден является важным конструкционным материалом, что вызывает необходимость знать его механические свойства и, в частности, пластические свойства. В кристаллах пластическая деформация происходит путем движения дислокаций. В данной работе методом молекулярной динамики моделируется краевая дислокация и исследуется её поведение при различных внешних механических нагрузках. Создание краевой дислокации происходит путём удаления атомной плоскости в периодической идеальной ОЦК решетке молибдена. Дальнейший расчет заключается в приложении сдвигового напряжения и активации скольжения дислокации. Расчеты проведены при различных температурах, что даёт возможность оценить влияние термодинамических флуктуаций на пороговое напряжение для начала движения дислокации и её подвижность. В работе проводится сравнение полученных результатов с другими авторами, использующие другие потенциалы, и с экспериментальными данными.

Благодарность за помощь в выполнении работы выражается научному руководителю к.ф.-м.н., С. В. Старикову.