

Кузбасский гуманитарно-педагогический институт федерального
государственного бюджетного образовательного учреждения высшего
образования
«Кемеровский государственный университет»

На правах рукописи



ЛИПУНОВ ВЯЧЕСЛАВ НИКОЛАЕВИЧ

**АТОМНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ СВОБОДНОГО
ОБЪЕМА В ГЦК КРИСТАЛЛЕ ПРИ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ**

Специальность 1.3.8 «Физика конденсированного состояния»

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н, доцент,
Маркидонов А.В.

Новокузнецк - 2023

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
1. ПРОЦЕССЫ ПОРООБРАЗОВАНИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ И МЕТОДЫ БОРЬБЫ С НИМИ	12
1.1. Понятие пористости твердых тел как объемной фазово-структурной неоднородности.....	12
1.2. Механизмы образования и роста пор в твердых телах	14
1.3. Влияние пористости на свойства твердых тел и способы борьбы с ней...	16
1.4. Воздействие ударных волн на поры в твердом теле	19
2. МЕТОД КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	23
2.1. Методы описания системы взаимодействующих частиц	23
2.2. Метод молекулярной динамики	25
2.3. Потенциалы межчастичного взаимодействия.....	36
2.4. Построение молекулярно-динамической модели.....	41
3. СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ, ПРОИСХОДЯЩИЕ В КРИСТАЛЛЕ, СОДЕРЖАЮЩЕМ ИЗБЫТОЧНЫЙ СВОБОДНЫЙ ОБЪЕМ.....	47
3.1. Структурные изменения в кристалле, содержащем высокую концентрацию вакансий.....	48
3.2. Влияние деформации на структурные изменения, происходящие в кристалле	55
3.3. Влияние ударных волн на структурные изменения	59
4. СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОПОР В КРИСТАЛЛЕ ПРИ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ.....	64
4.1. Исследование влияния температуры на структурные изменения сферической поры.....	65
4.2. Исследование влияния деформации на структурные изменения поры.....	67
4.3. Исследование влияния ударных волн на структурные изменения поры ..	76
4.4. Исследование влияния внешнего силового воздействия на ансамбль пор	81
5. СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ НАНОПОР В КРИСТАЛЛЕ ПРИ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ.....	89
5.1. Исследование влияния температуры на структурные изменения цилиндрической поры	89
5.2. Исследование влияния деформации на структурные изменения цилиндрической поры	91

5.3. Исследование влияния ударных волн на структурные изменения цилиндрической поры	99
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	104
ЛИТЕРАТУРА	106

ВВЕДЕНИЕ

Изменение структуры конструкционных материалов на микроуровне при радиационных, механических и температурных воздействиях является предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований в связи с тем, что структурные несовершенства кристаллического строения тела, и в особенности объемные, играют важную роль в изменении его физико-механических свойств. Так при внешних высокоинтенсивных воздействиях (радиационных, лазерных и т.д.) в твердом теле происходит интенсивное порообразование, которое может сопровождаться распуханием материала, что значительно ухудшает его эксплуатационные свойства. Например, распухание является одной из основных причин выхода из строя конструкций, эксплуатирующихся в условиях ионизирующих излучений. Кроме того, высокая пористость после спекания является причиной склонности к коррозии изделий, изготовленных методами порошковой металлургии. Поэтому уменьшение несплошностей является одной из важнейших задач современного материаловедения. *Актуальность* фундаментальных исследований в данном направлении обусловлена необходимостью создания радиационно-стойких конструкционных материалов, способных работать в экстремальных условиях без значительного изменения своих свойств.

Существует ряд технологий, направленных на восстановление сплошности материалов, включающих в себя воздействие высоких температур или давлений. Выбор применяемых технологий во многом определяется положением пор в твердом теле. Так, например, использование только температурного воздействия для залечивания пор, имеющих выход на поверхность, является малоэффективным, так как в данном случае требуются очень высокие температуры, приводящие к значительным структурным изменениям. Поэтому, более эффективным является применение обеих выше названных технологий, которые могут дополняться предварительным снятием

поверхностного поврежденного слоя. Сложности, связанные с реализацией обработки материала для уменьшения пористости, способствуют тому, что разработка новой технологии является актуальной задачей, решению которой должны предшествовать глубокие теоретические проработки вопроса.

Внешнее высокоэнергетическое воздействие на материал может приводить к образованию в его объеме ударных волн, которые могут приводить к значительным структурным изменениям в твердом теле. Данные волны, как показывает выполненный аналитический обзор, могут рассматриваться в качестве уникального инструмента воздействия на избыточный свободный объем, распределенный в кристалле, позволяющего регулировать его локализацию.

Целью проводимого исследования является определение методом молекулярной динамики атомных механизмов, способствующих структурным преобразованиям нанопор, приводящих к уменьшению их объема, при внешнем воздействии на кристалл, сопровождающимся образованием ударных волн.

Объектом исследования является молекулярно-динамическая модель кристалла с ГЦК решеткой, содержащая избыточный свободный объем, локализованный в виде нанопор. *Предметом* исследования являются структурные изменения, происходящие в кристалле, при внешнем воздействии, и сопровождающиеся делокализацией свободного объема.

Выдвинутая гипотеза: следует ожидать, что ударные волны, возникающие в кристалле при внешнем высокоэнергетическом воздействии, могут приводить к структурным изменениям дефектных образований кристалла, приводящих к делокализации свободного объема.

Методологические и теоретические подходы. При проведении исследования используется диалектический принцип проверки полученных знаний на практике. В качестве общенаучного метода, реализуемого в исследовании, применяется моделирование. В основе исследования лежит теоретическая концепция научной школы Заслуженного деятеля науки РФ,

д.ф.-м.н., профессора Михаила Дмитриевича Старостенкова «Теория и компьютерное моделирование в физике конденсированного состояния».

Современная наука о материалах невозможна без широкого применения математического (компьютерного) моделирования. Сущность данного метода состоит в замене исходного объекта его «образом» – математической моделью – и в дальнейшем изучении модели при помощи реализуемых на компьютерах вычислительно-логических алгоритмов. В настоящее время методология компьютерного моделирования бурно развивается, охватывая все сферы – от разработки новых высоких технологий обработки материалов и управления технологическими процессами до изучения свойств материалов исходя из их структуры на основе микроскопического описания.

При проведении диссертационного исследования был выбран *метод* молекулярной динамики, позволяющий моделировать детальную микроскопическую картину внутренней подвижности систем, состоящих из частиц. С помощью МД-моделирования можно проследить траекторию движения атомов и молекул в некотором конечном временном интервале, не превышающем нано- или микросекунду. Из анализа этих траекторий движения можно также получать данные о динамике атомов и молекул, визуально наблюдать за реакцией или рассчитывать механические и термодинамические свойства данной системы.

Задачи исследования.

1. Установить особенности структурных изменений, происходящих в обедненной зоне кристалла в процессе структурной релаксации и под воздействием ударных волн.

2. Выявить структурные изменения, происходящие в кристалле, содержащем сферические нанопоры различного размера, их ансамбль, а также цилиндрические поры, при внешнем температурном и силовом воздействии.

3. Установить роль ударных волн, генерируемых в кристалле, в инициации процессов делокализации свободного объема.

4. Определить условия внешних воздействий, при которых наблюдается

уменьшение объема поры, а также условия полного залечивания нанопор.

Представленная диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы.

Первая глава диссертации посвящена обзору отечественных и зарубежных литературных источников, в которых рассматривается пористость твердых тел, в том числе с позиции объемной фазово-структурной неоднородности. Осуществляется обзор современных представлений о механизмах образования и роста пор, а также влияние пористости на свойства твердых тел и способы борьбы с ней. Отдельно рассмотрены имеющиеся результаты исследований влияния ударных волн на поры. Сделан вывод, что наиболее адекватным методом исследования для достижения поставленной цели является метод компьютерного моделирования.

Вторая глава посвящена описанию выбранного метода исследования и описанию построения компьютерной модели. В связи с тем, что исследование проводится при помощи метода компьютерного моделирования, вначале осуществляется обзор имеющихся на сегодняшний день методов моделирования систем взаимодействующих частиц, в результате которого делается вывод, что поставленные задачи предпочтительнее решать при помощи метода молекулярной динамики. После этого в отдельном разделе осуществляется более детальное описание данного метода, приводится описание этапов компьютерного эксперимента, осуществляемого по методу молекулярной динамики, приводятся соотношения, позволяющие вычислить различные макроскопические характеристики, а также подходы для моделирования различных термодинамических ансамблей. Далее описываются проблемы выбора потенциальной функции межатомного взаимодействия, так как исследователю приходится искать компромисс между скоростью вычислений и реалистичностью получаемых результатов, и приводится используемый в работе потенциал, вычисленный по методу погруженного атома. В завершении главы описывается процесс построения используемой при проведении исследования модели, параметры выбранного потенциала, а также

указывается используемое программное обеспечение.

В *третьей главе* рассматриваются структурные изменения, происходящие в кристалле, содержащем высокую концентрацию вакансий, в процессе релаксации моделируемой системы. Показано, что в процессе релаксации моделируемой системы, содержащей малую концентрацию вакансий, дефекты перестраиваются в тетраэдры дефектов упаковки, а при высокой концентрации наблюдается формирование зеренной структуры и порообразование. Под воздействием ударных волн число атомов, принадлежащих ГПУ-фазе и представляющие собой в моделируемом кристалле дефекты упаковки, уменьшается. Кроме того, с помощью анализа дислокационной структуры моделируемой системы выполнена оценка числа, типа и общей протяженности сформированных в процессе релаксации дислокационных сегментов. Показано, что под воздействием ударных волн происходит уменьшение общего числа дислокационных сегментов, в результате чего начинают преобладать сегменты типа частичных дислокаций Шокли. Исследование образованной при высокой концентрации вакансий зеренной структуры показало, что избыточный свободный объем растворяется в межзеренных границах. После прохождения ударных волн доля растворенного свободного объема снижается, и он локализуется в области генерирования волн в виде нанопор. Выполнена количественная оценка уменьшения растворенного свободного объема при различных температурах.

В *четвертой главе* рассматривались структурные изменения, происходящие в кристалле, содержащем свободный объем, локализованный в виде сферических нанопор, при внешнем температурном и силовом воздействии. Показано, что эти дефекты обладают стабильностью, но при сдвиговой деформации вблизи поверхности нанопоры формируются две области повышенного механического напряжения, которые являются источниками зарождающихся частичных дислокаций. Основным механизмом образования дислокаций является смещение группы атомов по направлению к внутренней поверхности поры. Также показано, что при величине касательных

напряжений, недостаточной для образования дислокаций, эмиссия петли может быть инициирована ударной волной, генерируемой в расчетной ячейке. При повышении температуры число зарождаемых дислокационных петель увеличивается и, кроме того, наблюдается образование дислокаций Ломер-Коттрелла. Причиной образования дислокаций в данном случае являются дополнительные касательные напряжения, создаваемые волной разгрузки. При этом для формирования устойчивой дислокационной петли, у которой сила линейного натяжения уравнивается силой Пича-Келлера, обусловленной внешним напряжением, необходимо, чтобы фронт ударной волны при распространении по моделируемому кристаллу оказывал воздействие на области повышенного напряжения у поверхности поры. Кроме того, приведены результаты молекулярно-динамического моделирования, посвященного исследованию процессов залечивания группы сферических пор. Как показало проведенное исследование для пор, располагающихся в непосредственной близости друг от друга, характерно образование общей дислокационной петли, образующейся в результате притяжения отдельных петель, имеющих участки с противоположными знаками винтовой ориентации. Формирование и последующее развитие такой петли способствует уменьшению свободного объема, локализованного в кристалле в виде пор. В случае генерации в расчетной ячейке ударной волны, которая создает дополнительные напряжения, также наблюдается формирование описанной выше петли, а также последующее схлопывание отдельных пор. Учитывая, что моделирование проводилось при температурах, недостаточных для активизации диффузионных процессов, а при модельных экспериментах с генерацией волны применялась процедура термостатирования, то можно сделать вывод, что ударная волна является причиной схлопывания поры даже в отсутствие высоких температур, а одним из основных механизмов данного процесса является развитие дислокационной структуры ансамбля пор.

При проведении компьютерных экспериментов, результаты которых изложены в *пятой главе*, рассматривались структурные изменения,

происходящие в кристалле, содержащем поры цилиндрической формы. Исследование показало, что подобного рода дефекты являются источником гетерогенного зарождения дислокационных петель, способствующих снижению касательных напряжений в моделируемой структуре. Были установлены зависимости средней плотности дислокаций от угла сдвига и температуры расчетной ячейки, а также выполнена оценка скорости роста петель. Генерируемые ударные волны создают дополнительные касательные напряжения, способствующие образованию дислокационных петель, поэтому в данном случае дислокации наблюдаются даже при малой сдвиговой деформации. Если в ходе моделирования увеличивается тепловое воздействие, то осуществляется схлопывание поры.

Научная новизна. Полученные при проведении исследования результаты углубляют понимание изучаемых процессов и явлений, рассматриваемых в рамках радиационного материаловедения.

Теоретическая значимость. Результаты исследования дополняют, развивают теорию и концепции, а также уточняют теоретически положения, связанные с изучением процессов, протекающих в кристаллах при внешнем высокоэнергетическом воздействии.

Практическая значимость исследования. Возможно последующее применение полученных данных для изучения и разрешения таких научных проблем как борьба с набуханием конструктивных узлов и создание радиационностойких материалов.

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Ударные волны, генерируемые в расчетной ячейке, уменьшают концентрацию растворенного в зернограничной области избыточного свободного объема за счет инициации перескоков вакансий в новые положения при прохождении фронта сжатия.

2. Касательные напряжения, создаваемые волной разгрузки, инициируют гетерогенное образование на поверхности нанопор частичных дислокаций Шокли, способствующих уменьшению их объема путем выноса «пустоты».

3. Эмиссия дислокаций, инициируемая ударной волной, при температуре, близкой к температуре плавления, их рост, а также сопутствующие диффузионные процессы, способствуют залечиванию нанопоры по дислокационно-диффузионному механизму.

4. Дислокационные петли, создаваемые ансамблем нанопор, формируют единую петлю, охватывающую поры. Ее последующий рост осуществляет вынос «пустоты» и приводит к уменьшению объема нанопор.

5. Дислокационный и дислокационно-диффузионный механизм делокализации свободного объема реализуется как для сферических, так и для цилиндрических пор.

Личный вклад соискателя заключается в анализе литературных данных, планировании и проведении компьютерных экспериментов, обработки полученных результатов и их сопоставлении с известными данными, написании статей и тезисов.

Достоверность полученных результатов подтверждается использованием широко известного метода молекулярной динамики, ранее апробированного потенциала межчастичного взаимодействия, а также их не противоречием данным, представленным в научной литературе.

Апробация исследования осуществлялась путем представления результатов на 15 научных конференциях различного уровня.

Публикации. Основные результаты исследования изложены в 5 научных статьях, опубликованных в журналах, рекомендованных ВАК, две из которых имеют переводную версию, включенную в реферативную базу Scopus.

1. ПРОЦЕССЫ ПОРООБРАЗОВАНИЯ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ И МЕТОДЫ БОРЬБЫ С НИМИ

1.1. Понятие пористости твердых тел как объемной фазово-структурной неоднородности

В физическом материаловедении сложилось два подхода к определению понятия пористости. Первый основывается на представлении, что пора представляет собой неотъемлемый компонент структуры материала, определяющий его назначение, свойства и происхождение. Такой подход применим к различным пористым спеченным композиционным материалам, пористой керамике, тонковолокнистым структурам и прочим материалам, содержащим большое количество пустот. В основе второго подхода лежит представление поры как трехмерного дефекта структуры твердого тела. Такой подход применим, например, для литых металлов и сплавов, то есть в том случае, когда поры не являются характерными структурными элементами материала.

Универсальным подходом, объединяющим оба вышеназванных, является методологическая концепция, развиваемая авторами работы [1], в которой поры рассматриваются не только как объемно-структурные, но и как фазово-структурные неоднородности, то есть инородные фазовые включения. Считается, что в таком случае упрощается термодинамическое описание закономерностей формирования и эволюции пористых систем в условиях внешнего воздействия.

Понятие пористости твердого тела неразрывно связано с понятием *свободного объема*, который геометрически определяется как разность между объемом твердого тела и суммарным собственным объемом атомов, то есть это объем, который занимает фаза «пустоты». Тогда суммарный свободный объем, отнесенный к полному объему тела, характеризует объемную долю (или в процентном соотношении объемную концентрацию) пор и является

пористостью твердого тела. В таком случае пора это локальное выделение свободного объема, которое имеет место *локализации*, форму и размеры, превышающие межзатомное расстояние. Последнее условие позволяет отделить поры от междузельных пустот, которые также вносят свой вклад в суммарный свободный объем. Локализоваться поры могут как внутри элементов структуры, например кристаллитов, так и по их границам. При этом отмечают как хаотическое их расположение, так и упорядоченное [2, 3].

Равновесное состояние поры, при котором ее объем остается постоянным, достигается при уравнивании поверхностного напряжения, обусловленного геометрией поры, и внутривывороваго давления (например, давление газа для газонаполненных пор). В случае если внутреннее и внешнее давление не скомпенсированы, вокруг поры возникает поле напряжений, и в результате происходящих релаксационных процессов происходит изменение формы поры (залечивание поры или ее рост).

Для кристаллов, обладающих анизотропией свойств, поверхностная энергия, минимум которой соответствует равновесному состоянию поры, является функцией кристаллографического направления. Учитывая также, что свободная энергия поры определяется числом оборванных межзатомных связей, равновесная конфигурация должна соответствовать их минимальному числу. В связи с этим поверхность поры ограняется кристаллографическими плоскостями, обладающими минимальной межфазной поверхностной энергией. Но при этом в условиях внешнего напряжения огранка поры может не соответствовать минимуму поверхностной энергии (округление ребер, эллипсоидная форма) так как равновесное состояние поры в данном случае во многом определяется пространственным распределением напряжений.

Генезис пор как фазовых неоднородностей определяет их индивидуальную морфологическую особенность. В макроскопическом представлении единичные поры, изолированные в объеме тела, относятся к закрытым (внутренним) несплошностям, поверхность которых иногда не относят к общей поверхности тела, а сквозные поры и тупиковые

(односторонне закрытые) капилляры произвольной формы – к открытым. Кроме того, генезис пор позволяет выполнить разделение пористости твердых тел на следующие виды:

1. Конденсационная пористость, возникающая при кристаллизации, осаждении из газовой фазы и т.д.;
2. Диффузионная пористость, возникающая при миграции избыточных вакансий в твердой фазе и взаимодействии их с другими структурными несовершенствами;
3. Деформационная пористость, обусловленная пластической деформацией;
4. Радиационная пористость, вызванная взаимодействием ионизирующего излучения с твердым телом;
5. Эрозионная пористость, обусловленная деструктивным воздействием агрессивной среды, в которой располагается материал.

В реальных материалах порообразование может являться комбинацией различных причин, и иметь, например, диффузионно-деформационную или конденсационно-радиационную природу, что значительно усложняет изучение кинетики порообразования [4 - 7].

1.2. Механизмы образования и роста пор в твердых телах

Вакансии в однокомпонентной однофазной системе могут рассматриваться как квазикомпонента «пустоты», способной локализоваться и обладающей термодинамически равновесной концентрацией в кристалле. В неравновесном состоянии, вызванным, например, быстрым переохлаждением, радиационным, деформационным, термоциклическим и прочим воздействием, возникает избыточная концентрация вакансий. Излишек квазикомпоненты усиливает ее склонность к выделению в системе в виде самостоятельной фазы. Это обусловлено тенденцией к минимизации свободной энергии в результате кластеризации вакансий, уменьшением упругой энергии кристалла в результате компенсации полей напряжений, создающих изолированными вакансиями, а

также снижением конфигурационной энергии областей, содержащих вакансии, в результате восстановления части разорванных межатомных связей [8].

Для кластера вакансий возможно несколько устойчивых конфигураций, характеризующихся положительной энергией связи, и разнообразие которых увеличивается с ростом числа вакансий [9 - 11]. При этом наибольшей энергией связи на одну вакансию в ОЦК-решетке обладает трехмерная конфигурация в виде октаэдра, который может рассматриваться как зародыш поры. В ГЦК-решетке плоские вакансионные кластеры имеют тенденцию к образованию дислокационных петель, что является энергетически более выгодной конфигурацией. При увеличении вакансий в кластере его потенциальная энергия минимизируется при образовании конфигурации в виде полиэдров. Так для ГЦК-решетки этому условию соответствует тетрадекаэдр, а для ОЦК-решетки – ромбический додекаэдр. Кроме того, исследования показывают, что для различных металлов и при различном числе вакансий в кластере наиболее выгодными оказываются тетраэдры дефектов упаковки, частичные или полные дислокационные петли, поры.

Некоторые из вакансионных кластеров могут являться зародышами будущих пор [12, 13]. Образование зародыша поры может быть рассмотрено как фазовый переход первого рода, представляющий собой в данном случае процесс распада пересыщенного твердого раствора вакансий [14]. После формирования такого зародыша при определенных условиях начинается его рост путем притока вакансий из объема кристалла. Ограниченные поверхности пор являются естественными стоками для вакансий, которые диффундируя к ней и адсорбируясь на поверхности, в дальнейшем аннигилируют на ступеньках, вызывая рост поры [15].

Стоит оговорить, что для гомогенного порообразования флуктуационным путем необходима высокая концентрация вакансий, поэтому чаще порообразование происходит гетерогенно, на границах раздела или на инородных включениях.

Росту поры в значительной степени способствуют растягивающие напряжения [12], которые уменьшают работу, производимую смещающейся поверхностью при увеличении объема поры вследствие присоединения к ней вакансий. Поэтому наиболее интенсивный рост пор наблюдается в области концентрации напряжений, таких как, например, границы зерен или места стыков [16 - 18].

Заключительной стадией развития пористости является коалесценция (поглощение малых пор крупными), в результате которой происходит уменьшение свободной поверхности пор при неизменном объеме и с сохранением пикнометрической плотности [19, 20]. В основе данного процесса лежит термоактивированное испарение вакансий порами. У поверхности малых пор, которые испаряются интенсивнее и в итоге растворяются, концентрация равновесных вакансий больше, чем у поверхности крупных пор, поэтому наблюдается поток вакансий от малых пор в объем кристалла, а из объема – в крупные поры. Данный тепло-индуцированный механизм коалесценции качественно верно описывает позднюю стадию процесса диффузионного распада твердого раствора вакансий при высоких температурах, когда в результате длительного отжига в кристалле наблюдаются только крупные поры, но не подходит для объяснения уменьшения плотности пор при низких температурах. В таком случае коалесценция объясняется радиационно-индуцированным механизмом [21], в основе которого лежит явление преференса, заключающееся в том, что поры предпочитают поглощать межузельные атомы, а не вакансии. Малые поры более интенсивно поглощают межузельные атомы и в результате этого растворяются, а крупные поры поглощают избыток вакансий и растут.

1.3. Влияние пористости на свойства твердых тел и способы борьбы с ней

Приобретенная пористость в результате, например, пластической деформации, радиационного или лазерного воздействия, наводороживании,

коррозии и так далее, приводит, как правило, к ухудшению физико-механических свойств материалов [22, 23].

Пористость способствует уменьшению плотности внутренних контактов и создает дополнительные концентраторы напряжений, что в первую очередь приводит к снижению прочности твердых тел (рост пористости приводит к убыванию предела прочности). Кроме того, уменьшается суммарное удлинение пористого материала до разрыва при деформации растяжения и остаточное относительное удлинение после разрыва, а также снижается пластичность и ударная вязкость, если поры расположены на межзеренных границах. С увеличением пористости для многих материалов уменьшается электропроводность, магнитная восприимчивость, теплоемкость, плотность, коэффициент Пуассона, модуль Юнга, предел усталости, удельная работа разрушения и возрастают скорости ползучести и коррозии [1, 24-26].

Также геометрия образующихся трехмерных вакансионных кластеров приводит к увеличению объема твердого тела, то есть к его набуханию [27-29]. Проблема набухания особенно актуальна для материалов, подверженных радиационному облучению, что обусловлено большим числом образующихся точечных дефектов. Из-за меньшего значения энергии активации диффузии межузельных атомов они более интенсивно взаимодействуют с дислокациями и дислокационными петлями в результате чего в объеме твердого тела образуется избыток вакансий. В дальнейшем образуются поры, которые продолжают расти, благодаря потоку вакансий, и если отсутствуют факторы, предотвращающие порообразование, то материал набухает.

Таким образом, уменьшение пористости материалов путем восстановления его сплошности должно способствовать улучшению эксплуатационных характеристик материалов, что, очевидно, является немаловажной задачей для современного материаловедения.

В качестве основных механизмов заживления поры в кристаллических материалах называются диффузионное растворение изолированной поры, диффузионно-вязкое или дислокационно-вязкое течение, коалесценция

ансамбля пор и генерирование порой дислокационных петель, уносящих часть ее объема [22, 30 - 32]. Так, в этих работах показано, что поры, образованные в результате деформации, локализуются в тонких поверхностных слоях. Такая пористость отжигается при температуре, составляющей приблизительно половину от температуры плавления. В данном случае пора растворяется диффузионным путем, с выносом вакансий на поверхность по ядрам дислокаций (так называемая трубчатая диффузия). При этом процесс отжига значительно интенсифицируется при наличии растягивающих напряжений. Поры, расположенные в объеме металла, отжигаются при температуре, уже приближенной к температуре плавления материала. Кроме того, такие поры эффективно залечиваются под воздействием высокого гидростатического давления по дислокационному механизму, что подтверждается наличием полос скольжения вблизи залечивающихся пор и увеличением общей плотности дислокаций.

Суть дислокационного механизма залечивания пор следующий. Под давлением около поры возникают сдвиговые напряжения, обусловленные несоответствием формы поры идеальному шару. Под действием этих напряжений закрепленные участки дислокаций с краевой ориентацией становятся источниками новых дислокаций. При превышении порогового значения напряжений начинается формирование петли, и граница поры смещается на величину вектора Бюргерса. Такой механизм залечивания поры под давлением реализуется при комнатной температуре. При повышении температуры дислокационный механизм сменяется на диффузионный [33].

Использование высокотемпературного отжига для восстановления сплошности не всегда эффективно, так как в данном случае возможны различные побочные структурные изменения, которые снижают эффективность упрочения материала в результате уменьшения пористости.

Считается, что эффективная технология избавления от пор должна включать в себя несколько видов обработки, такие как, например, снятие поврежденного слоя, низкотемпературный отжиг (для залечивания малых пор)

и воздействие давления (для залечивания крупных пор и трещин) [22], то есть это достаточно сложная процедура. Поэтому можно сделать вывод, что разработка простой и эффективной технологии обработки пористого материала является по-прежнему актуальной задачей.

Стоит отметить, что существует еще один подход к борьбе с пористостью, заключающийся в использовании импульсных технологий. Так, в работе [34] показано, что ударная волна, возникающая в твердом теле после воздействия на поверхность коротким и интенсивным лазерным импульсом, вызывает залечивание пор. В работе [35] смоделированы тепловые пики, соответствующие высокоинтенсивному облучению, и показано, что в результате распространения упругих волн происходит залечивание поры.

Таким образом можно считать, что импульсные технологии являются эффективным инструментом для борьбы с порообразованием.

1.4. Воздействие ударных волн на поры в твердом теле

В результате фокусировки высокоинтенсивного кратковременного лазерного импульса, мощность которого превышает порог абляции, над поверхностью облучаемого материала образуется плазма, обладающая высокой температурой и давлением. Расширяющийся плазменный факел оказывает давление на поверхность в результате чего в теле формируется ударная волна [36].

Значение пикового давления в ударной волне зависит от плотности мощности и длительности лазерного импульса, а также от физико-механических свойств облучаемого материала. Так в работе [34] величина этого давления оценивается в 5 ГПа. Считается, что применение лазеров для генерации ударных волн позволяет достичь давлений, сопоставимых с давлением в ближней зоне подземных ядерных взрывов [37].

Ударные волны в твердом теле также могут быть созданы при корпускулярном облучении, в результате которого развиваются каскады атомных смещений. Развитие каскада происходит за время порядка 10^{-12} с. За

это время устанавливается максвелловское распределение сталкивающихся частиц по скоростям. Средний радиус области, в которой развиваются каскадные смещения, составляет приблизительно 5 нм. Для отведения тепла из области таких размеров требуется порядка 10^{-11} с [38]. В результате этого несоответствия образуется наноразмерная область с локализованной тепловой энергией, в которой значение температуры может достигать нескольких тысяч градусов [39], а давление составляет десятки ГПа [40]. На границе данной расширяющейся области возникает резкий скачок термодинамических параметров, то есть формируется ударная волна, распространяющаяся в твердом теле со сверхзвуковой скоростью [41]. В дальнейшем, из-за механизмов фокусировки атомных столкновений, сферическая волна трансформируется во фрагменты плоских волн, которые распространяются вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений [42, 43].

Оценки давления во фронте ударной волны показывают, что оно может превышать предел текучести твердого тела, в результате распространяющаяся волна может инициировать различные явления: течение бездефектного материала с перемешиванием атомов среды и образованием дефектов за фронтом волны; аномальный массоперенос, заключающийся в резком увеличении смещений на атом в объеме материала при температурах, недостаточных для протекания диффузионных процессов; бездиффузионные процессы типа мартенситных превращений; фазовые превращения [41, 44 - 48].

При изучении модификации материала после облучения применяется оптический металлографический анализ, электронно-микроскопическое или рентгеноструктурное исследование. Но для выявления непосредственно механизмов образования, развития и залечивания пор под воздействием ударных волн, на наш взгляд, больше подходит метод компьютерного моделирования.

Так, например, распространение ударных волн по кристаллу успешно моделировалось с помощью метода молекулярной динамики в работах [49-52].

В работе [53] показана возможность формирования зародышей пор вблизи поверхности раздела двух металлов при прохождении ударных волн. При этом причиной образования пор называется рассеивание энергии, переносимой волной, на границе раздела металлов при распространении волны вдоль неплотноупакованных кристаллографических направлений.

Гомогенное порообразование под воздействием растягивающих напряжений, возникающих после прохождения фронта ударной волны, моделировалось в работе [54]. В ней же показана возможность образования пор в зернограничной области под воздействием волн, с последующим ростом зерен. При этом все процессы, связанные с кинетикой вакансий, протекали при температурах, недостаточных для их термоактивации. Также приведены результаты моделирования, демонстрирующие воздействие ударной волны на пору, которое приводит к ее смещению, расщеплению на части, разрушение поры на более мелкие кластеры, а также растворение поры вблизи свободной поверхности кристалла под воздействием серии ударных волн. Кроме того, продемонстрирована возможность инициации процесса коалесценции при воздействии волны на группы пор. При исследовании влияния деформации кристалла на кинетику пор продемонстрирована возможность смещения вакансионных кластеров, которые стабилизированы растягивающими напряжениями, серией ударных волн. Также показано, что если пора расположена в зернограничной области, то ее структурные преобразования могут быть вызваны ударными волнами меньшей интенсивности по сравнению с аналогичными исследуемыми процессами в монокристаллах.

В работе [55] проведено моделирование взаимодействия каскада атомных смещений со сферической порой, состоящей из 60 вакансий. Проанализировано влияние удаления первичного выбитого атома на схлопывание поры.

Частичное заполнение поры материалом в результате локального повышения температуры вблизи поры при ударно-волновом воздействии на металлическое стекло показано в [56]. При увеличении скорости волны наблюдалось образование множества мелких пор с последующей их

коалесценцией. Локальный разогрев вблизи схлопывающейся поры при различной величине давления во фронте волны, распространяющейся по кристаллу, исследовался в работе [57] с применением многомасштабного моделирования.

В работе [58] показано, что стенки пор могут вызывать отражение фронта ударной волны, что вызывает дополнительные растягивающие напряжения, приводящие к разрушению материала. Отражение ударной волны от поверхности поры наблюдалось и в работе [59].

В [60] проведено моделирование залечивания цилиндрических пор под воздействием ударных волн. Показано, что при слабом ударе залечивание реализуется при помощи вязкопластической деформации, а при сильном ударе этот процесс имеет гидродинамический характер. В работе [61] также показаны различные механизмы залечивания пор, доминирование каждого из которых зависит от силы удара. Так при слабом ударе реализуется механизм пластического течения, а при сильном ударе наблюдается локальное плавление с заполнением поры материалом.

Схлопывание нанопор, инициированное ударной волной, с образованием разрыва в мембране смоделировано в работе [62]. Показано, что повреждение мембраны зависит как от скорости, так и от продолжительности распространения ударной волны.

Таким образом можно сделать вывод, что при помощи компьютерного моделирования успешно исследуются процессы залечивания пор. Но нужно признать, что исчерпывающее описание реализации тех или иных механизмов залечивания еще не завершено.

2. МЕТОД КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ ПРОВЕДЕНИИ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1. *Методы описания системы взаимодействующих частиц*

Исследования материалов путем реальных экспериментов может быть связано со значительными трудностями, такими как, например, отсутствие возможности осуществления контроля над условиями проводимого эксперимента, или же затруднения могут возникнуть при измерении значений различных исследуемых параметров, что может привести к неоднозначной трактовке получаемых результатов. Применение компьютерного моделирования в данном случае может являться более предпочтительным, чем реальные эксперименты [63]. С учетом того, что производительность вычислительных систем постоянно растет, возрастает сложность компьютерных моделей, которые могут учитывать все большее число параметров, и, как следствие, получаемые результаты постепенно приближаются к результатам натуральных экспериментов.

При проведении исследований в физике конденсированного состояния различают два основных направления компьютерного моделирования, которые зависят от выбора масштабного уровня [64].

Первое – макроскопическое моделирование – предполагает решение уравнений физики сплошных сред.

Второе направление, которое для нас представляет наибольший интерес, – микроскопическое моделирование – рассматривает систему взаимодействующих друг с другом частиц. Такой подход в моделировании становится оправданным в том случае, когда получаемый результат определяется взаимодействием атомов или их движением. Но в таком случае временные и пространственные масштабы моделируемых явлений значительно меньше, и макроскопические законы механики, сопротивления материалов, гидравлики и т.д. становятся неприемлемыми. Зато начинают проявляться

квантовые законы, которые могут приводить к результатам, не укладывающимся в рамки классических представлений.

В микроскопическом моделировании можно выделить следующие группы методов описания систем взаимодействующих частиц, каждая из которых обладает рядом преимуществ и ограничений [65, 66].

К первой группе относятся неэмперические методы *ab initio* (квантово-механические расчеты «из первых принципов»), которые без дополнительных предположений относительно потенциалов взаимодействия учитывают различные квантовые эффекты. В данном случае исследование системы проводится с помощью многоэлектронной волновой функции. Одним из наиболее распространённых методов, принадлежащих этой группе, является метод Хартри-Фока. Так как решение квантового уравнения Шредингера для системы многих частиц связано с большими вычислительными сложностями, неэмперические методы применяются для изучения небольших систем, а также предполагают нахождение приближений, позволяющих упростить вычисления без привлечения параметров модели, полученных экспериментально [67].

Несмотря на сложность вычислений такие методы стимулировали ускоренное развитие химии, позволили выполнить расчет свойств различных молекул, а также привели к появлению группы полуэмпирических методов для расчета крупных молекулярных систем, которые учитывают параметры, определенные опытным путем. И эмпирические и полуэмпирические методы описания систем относятся к методам квантовой химии.

Следующая группа объединяет эмпирические методы, в которых используются параметры, определенные экспериментальным путем, и для описания системы используются уравнения классической механики. К этой группе, например, относится метод молекулярной динамики.

Решая уравнения движения, можно вычислить изменение конфигурации частиц в течении заданного числа временных шагов, причем после выполнения каждого шага для исследователя доступна различная информация, такая как

координаты частиц, их кинетическая и потенциальная энергия, термодинамические характеристики всей системы и т.п.

Эмпирические методы основаны на классических представлениях о поведении системы многих частиц и не описывают квантовые эффекты (могут быть учтены только неявным образом [66]). В данном случае частицы рассматриваются как материальные точки, которые взаимодействуют через силовые поля, определяемые потенциалами взаимодействия. Таким образом, эмпирические методы требуют детального описания взаимодействия между частицами, и при исследовании разных материалов или процессов могут потребоваться различные модели межчастичного взаимодействия, параметры которых подгоняются к экспериментальным данным. Данные методы не такие требовательные к вычислительным ресурсам, поэтому позволяют моделировать системы, состоящие из большого числа частиц, но неоднозначность потенциальных функций взаимодействия ограничивает их широкое применение.

Как показывает практика, результаты, полученные и в результате квантово-механических расчетов, и в результате молекулярно-динамического моделирования, являются вполне надежными, и не требуют обязательной экспериментальной проверки [68].

Также стоит отметить, что если первые работы с использованием вышеназванных методов являлись сугубо теоретическими, то с развитием вычислительной техники, они выделились в отдельное направление, связывающее экспериментальный и теоретический метод исследования, и которое можно обозначить как «численный эксперимент».

2.2. Метод молекулярной динамики

Исторически метод молекулярной динамики возник в молекулярной физике, в рамках которой он получил свое развитие и обоснование [69]. Именно специалистами в области молекулярной физики были предложены различные потенциалы взаимодействия атомов и молекул веществ. Учитывая,

что основной моделью в частицы в данном случае является материальная точка, то, моментные взаимодействия здесь не учитываются и для их описания пришлось вводить многочастичные потенциалы. Метод молекулярной динамики показал хорошие результаты и при решении задач механики деформируемых тел [70], даже без разработки специализированных потенциалов.

Стоит оговорить, что хотя большие атомы твердого тела могут быть в рамках моделирования рассмотрены как объекты классической механики, все же исследователи избегают рассматривать с этой точки зрения атомы, размеры которых меньше длины де Бройля. К таким исключениям относятся атомы водорода и гелия.

Развитие данного метода шло по двум путям [69]. Первый – классический путь – предполагает вычисление траектории атомов и имеет длительную историю, начинающуюся с задачи двухчастичного рассеивания. В дальнейшем классический подход был дополнен полуклассическими методами для тех случаев, когда квантовые эффекты слишком значительны. Второй путь развития метода молекулярной динамики заключался в исследовании термодинамических характеристик системы в целом. Это направление базируется на работах Ван-дер-Ваальса и Больцмана.

В настоящее время метод молекулярной динамики является идеальным инструментом для изучения статических и динамических свойств наноразмерных структур, состоящих из конечного числа частиц [66].

Метод молекулярной динамики позволяет наблюдать и анализировать поведение атомов на ограниченном временном интервале, что в свою очередь дает возможность делать выводы о их динамике на более длительном промежутке времени. Этот метод основывается на математической модели, которая включает систему дифференциальных уравнений, разностную схему, потенциал межатомного взаимодействия и начальные и граничные условия [71]. Модель представляет собой гипотетическую многоатомную систему,

состоящую из N материальных точек, движение которых описывается классическими уравнениями Ньютона. Каждая из этих точек:

- 1) имеет массу m_i , радиус-вектор \vec{r}_i и скорость \vec{v}_i ($i = 1, 2, \dots, N$);
- 2) взаимодействует с другими материальными точками посредством сил $\vec{f}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i}$, где $U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ – потенциальная энергия взаимодействия системы;

- 3) взаимодействует с внешними полями посредством сил \vec{f}_i^* .

Таким образом поведение совокупности частиц определяется системой $2N$ обыкновенных дифференциальных уравнений движения:

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{f}_i + \vec{f}_i^*, \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \end{cases} \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.1)$$

Силу \vec{F}_i , действующую на частицу i , можно представить как сумму сил, обусловленных взаимодействием частиц друг с другом, и внешних сил:

$$\vec{F}_i = - \sum_{j=1(i \neq j)}^N \frac{d}{dr_{ij}} \varphi(r_{ij}) \cdot \frac{d\vec{r}_{ij}}{dr_{ij}} + \vec{f}_i^*, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2.2)$$

где $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$, $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$, $\varphi(r_{ij})$ – потенциал межчастичного взаимодействия, выбор которого зависит от моделируемого материала.

Для того, чтобы решить систему (2.1) при помощи интегрирования необходимо знать начальные координаты и начальные скорости всех частиц. Определение начальных условий является важной задачей, так как это оказывает значительное влияние на результаты, получаемые в процессе моделирования. При моделировании кристаллической среды начальные условия могут быть заданы тремя этапами [71]:

1. Вычисляется постоянная решетки a при заданной температуре T для образца, обладающего бесконечной протяженностью и находящегося в

равновесном состоянии при нулевом давлении. Для этого строится расчетная ячейка с $\tilde{a} = 1$, и так как потенциальная энергия каждой частицы является функцией от расстояния до окружающих частиц $u_i = u(r_{i1}, \dots, r_{ij}, \dots, r_{iN})$, $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, $i \neq j$, то исходя из теоремы о вириале для частицы с координатами $(0, 0, 0)$ может быть записано уравнение:

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N r_{0j} \frac{\partial u(r_{01}, \dots, r_{0N})}{\partial r_{0j}} = 3k_B T, \quad r_{0j} = a\tilde{r}_{0j}, \quad (2.3)$$

где $\tilde{r}_{0j} = \sqrt{\tilde{x}_{0j}^2 + \tilde{y}_{0j}^2 + \tilde{z}_{0j}^2}$ – безразмерное расстояние от начала координат до j -ой частицы, k_B – постоянная Больцмана. Уравнение (2.3) определяет зависимость a от T ;

2. Координаты частиц определяются на основе положений атомов в узлах кристаллической решетки, которые соответствуют минимуму потенциальной энергии. На следующем этапе может быть случайным образом добавлено отклонение частиц от равновесного положения или введена кинетическая энергия системы, соответствующая двойному значению температуры ($2T$). Последующая релаксация модели приводит к выравниванию кинетической и потенциальной энергий;

3. На следующем этапе задаются скорости частиц, соответствующие распределению Максвелла, которое соответствует температуре T или $2T$, в зависимости от того, было ли задано отклонение от положения равновесия на этапе №2. При этом суммарный импульс системы должен равняться нулю.

Далее следует сама процедура релаксации моделируемой системы, которая должна привести систему к стационарному состоянию.

Система (2.1) представляет собой набор обыкновенных дифференциальных уравнений, которые могут быть решены при знании начальных условий [71]. Однако при моделировании системы частиц могут возникнуть дополнительные требования, и для их выполнения необходимо указать специальные граничные условия для объекта. Так, для того чтобы

результаты, получаемые при помощи модели, состоящей из $10^4 - 10^5$ частиц, были правдоподобными их следует перенести на макрообъем. В таком случае, во-первых, необходимо, чтобы однородность в свойствах рассматриваемой микроскопической системы с уменьшением ее размера сохранялась вплоть до некоторой величины l . Тогда по свойствам произвольного фрагмента этой системы (ячейки моделирования), с размером, превышающим l , можно получать информацию о свойствах всей макросистемы. Во-вторых, для того, чтобы ячейка моделирования представляла собой часть системы, а не изолированный образец некоторого конечного размера, требуется указать условия сшивки рассматриваемого микрообъема с внешним объемом кристалла, что будет являться граничным условием для изучаемой системы.

Жесткие граничные условия означают, что координаты атомов на границе системы остаются фиксированными. Эти граничные условия часто используются при изучении точечных дефектов, когда взаимодействие атомов вблизи дефектной области с граничными атомами не играет существенной роли.

При моделировании дефектов с большими линейными размерами, используются подвижные граничные условия. Подвижные граничные условия позволяют границе системы двигаться и атомам взаимодействовать с граничными атомами. Это более реалистичная модель, которая учитывает взаимодействие атомов на границе с окружающей средой или другими дефектами. Для их реализации моделируемая область окружается пограничным слоем атомов, перемещающихся в соответствии с теорией сплошных сред. Чтобы задать подвижные граничные условия для граничных атомов, часто используется давление, которое предотвращает разрушение кристаллита. Иногда, кроме давления, применяется вязкая сила, которая моделирует отток энергии из расчетной области в окружающую среду.

Если необходимо учесть взаимодействие с частью кристалла, не входящей в расчетную область, то применяют периодические граничные условия. Для их реализации расчетная область представляется в виде куба со

стороной L и содержит N частиц. Для создания периодических граничных условий, вокруг расчетного куба создаются дополнительные кубы, состоящих из того же числа частиц. Координаты этих частиц отличаются от координат частиц расчетного куба на величину L . Таким образом, если один из атомов выходит за границу расчетного куба, на противоположной грани вводится точно такой же атом.

Следует отметить, что при использовании данного типа граничных условий следует учитывать ограничение на максимальный радиус действия потенциала межчастичного взаимодействия. Он не должен превышать половины длины ребра расчетного куба, чтобы избежать возможного взаимодействия атомов с самими собой.

В случаях моделирования поверхности кристалла без внешних воздействий, использование граничных условий не требуется [72].

Применение метода молекулярной динамики для исследования систем, состоящих из большого числа частиц, может приводить к значительному потреблению вычислительных ресурсов. Чтобы нивелировать этот недостаток метода приходится осуществлять корректную организацию вычислительного процесса. Так, выполнение одной итерации при интегрировании системы уравнений (2.1) можно разбить на два этапа:

- 1) вычисление потенциала межчастичного взаимодействия, а также суммы сил, которые действуют на каждый атом со стороны остальных атомов, а также при необходимости внешних сил;

- 2) расчет новых координат атомов и их скоростей.

Именно первый этап наиболее требователен к вычислительным мощностям. Один из способов увеличения скорости вычислений – это введение радиуса обрезания потенциала r_c . Это допущение обосновано тем, что для большинства материалов потенциал взаимодействия между частицами является кратковременным, то есть можно пренебречь взаимодействием атомов на расстоянии $r > r_c$. Введение радиуса обрезания существенно сокращает время расчета потенциальной энергии и сил, однако возникает сингулярность в точке

обрезания, если потенциал не стремится к нулю плавно [73]. Следовательно нужно проводить проверку, как влияет радиус обрезания на рассматриваемые характеристики исследуемой системы.

Следующий способ повышения скорости вычислений заключается в ускорении поиска частиц, которые взаимодействуют с рассматриваемым атомом. Для этого применяются различные алгоритмы, среди которых наиболее эффективным является метод списка Верле или метод списка соседей [74]. В данном случае в пределах сферы, радиус которой совпадает с радиусом обрезания потенциала, определяется число «соседей» для каждой частицы. Однако более эффективным подходом является разделение пространства ячейки моделирования на кубические блоки, которые нумеруются последовательно. Номера соответствующих блоков определяются по координатам атомов. Для определения сил, действующих на конкретный атом, рассматриваются только атомы, находящиеся в том же блоке или в одном из соприкасающихся блоков. Блочный способ разбиения пространства наиболее эффективен при моделировании кристаллических сред [75].

На следующем этапе нужно выполнить интегрирование большого количество уравнений с установленными граничными и начальными условиями, так как требуется вычислить траектории массива частиц. Однако при численном решении системы (2.1) возникают погрешности в определении ее значений. Поэтому важно определить подходящий временной шаг для разностной схемы и осуществить контроль и корректировку ошибок округления, независимо от выбранного численного метода решения.

Временной шаг – это ключевая величина, от которой зависит размер доступного времени наблюдения за системой. Но при этом если длина временного шага Δt будет слишком большой, частица может войти в область, запрещенную для движения в классической механике, в которой потенциальная энергия является возрастающей функцией координат. Таким образом, приращение Δt следует выбирать достаточно малым, чтобы значение полной энергии всегда оставалось постоянным. Но при этом слишком малое значение

Δt не позволит охватить достаточный временной интервал, на котором система эволюционирует [67]. Необходимо отметить, что оптимальное значение Δt во многом зависит от начальной энергии и типа рассматриваемого потенциала.

Для контроля ошибок округления наиболее распространенным методом является проверка закона сохранения энергии [72]. Кроме этого, можно выполнить расчет макроскопических характеристик моделируемого материала и сравнить их с известными теоретическими значениями.

Алгоритм Верле получил наибольшую популярность среди множества известных методов интегрирования уравнений (2.1) [74]. Он часто называется неявной симметричной разностной схемой и является наиболее рациональным выбором, если в системе (2.1) отсутствуют неконсервативные силы. Однако есть и другие схемы, которые учитывают также трение. Идея алгоритма заключается в разложении радиус-вектора частицы в моменты времени $\vec{r}(t + \Delta t)$ и $\vec{r}(t - \Delta t)$ в ряд Тейлора до третьей степени по Δt :

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \frac{d\vec{r}(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} \Delta t^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3\vec{r}(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4), \quad (2.4)$$

$$\vec{r}(t - \Delta t) = \vec{r}(t) - \frac{d\vec{r}(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2} \Delta t^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3\vec{r}(t)}{dt^3} \Delta t^3 + O(\Delta t^4). \quad (2.5)$$

Складывая (2.4) и (2.5), а также учитывая, что вторая производная радиус-вектора по времени имеет смысл ускорения $\vec{a}(t)$, получим

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \vec{a}(t)\Delta t^2 + O(\Delta t^4). \quad (2.6)$$

Следовательно, координата частицы определяется на основе двух предыдущих положений, а ускорение можно вычислить, учитывая силы, которые на нее действуют.

В алгоритме Верле не нужно вычислять скорость частицы, но если это необходимо, к примеру, для определения кинетической энергии, то ее можно рассчитать вычитая уравнение (2.5) из уравнения (2.4):

$$\vec{v}(t) = \frac{d\vec{r}(t)}{dt} = \frac{1}{2}\Delta t[\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)] + O(\Delta t^2). \quad (2.7)$$

Данный алгоритм пользуется большой популярностью в молекулярно-динамических расчетах из-за простоты использования, достаточной точности и стабильности. Основным недостатком алгоритма Верле заключается в том, что он не самостартующий и необходимо использовать сторонний алгоритм для получения нескольких первых точек координат [76].

Существует модификация вышеописанного алгоритма, так называемый скоростной алгоритм Верле, где положение частицы и ее скорость на шаге $t + \Delta t$ вычисляются следующим образом:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2, \quad (2.8)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}\vec{a}(t + \Delta t)\Delta t, \quad (2.9)$$

где $\vec{v}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t$.

В данном случае координаты, скорости и ускорения частиц рассчитываются в моменты времени, кратные Δt . Сначала, при помощи обычных уравнений движения, обновляются координаты частиц, затем в данных координатах вычисляются ускорения и далее из среднего значения двух ускорений рассчитывается скорость.

Использование скоростной формы алгоритма Верле позволяет не хранить значения сил, рассчитанных на предыдущем временном шаге, что способствует уменьшению объема памяти, необходимой для хранения информации о частицах. По стабильности этот алгоритм превосходит алгоритм Верле, так как скорость в момент времени $t + \Delta t$ рассчитывается из ускорения в моменты времени t и $t + \Delta t$. Кроме того, он допускает вычисление координат частиц с большим по величине шагом Δt и, следовательно, позволяет воспроизводить более продолжительное время моделирования, используя меньшее число

шагов. Еще одним достоинством этой формы алгоритма Верле можно считать возможность получить первые точки координат без посторонних алгоритмов [76].

В методе молекулярной динамики, помимо основных кинематических соотношений, также используются вспомогательные соотношения, которые позволяют вычислять различные макроскопические величины, характеризующие состояние моделируемой системы. Так, потенциальная энергия системы складывается из потенциальной энергии взаимодействия атомов и потенциальной энергии, обусловленной действием внешних сил:

$$E_{pot} = \sum_i \varphi_i(r_i) + \sum_k \phi_k(r_k), \quad (2.10)$$

где k – индексы атомов, на которые действуют внешние силы \vec{f}_k^* , описываемые потенциалом $\phi_k(r_k)$, r_k – величина отклонения k -го атома от положения равновесия.

Для вычисления кинетической энергии системы применяется формула

$$E_{kin} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i |\vec{v}_i|^2. \quad (2.11)$$

Полная энергия системы E_{tot} представляет собой сумму кинетической и потенциальной энергии.

Температура может быть выражена через среднюю кинетическую энергию частиц:

$$T = \frac{2 \langle E_{kin} \rangle}{s N k_B}, \quad (2.12)$$

где s – число степеней свободы системы.

Ранее рассмотренный метод интегрирования системы уравнений (2.1) обеспечивает сохранение энергии системы. Если также предполагается, что объем и количество частиц остаются постоянными, то данный метод моделирует микроканонический NVE ансамбль. Иногда возникает необходимость смоделировать канонический NVT (фиксированы число частиц,

объем и температура). Для поддержания температуры на постоянном уровне существуют различные методы, объединенные под названием термостатов, которые можно разделить на следующие группы.

1. *Дифференциальный метод*. В этом методе термодинамическая величина f имеет постоянное значение, и флуктуации вокруг среднего значения $\langle f \rangle$ отсутствуют.

2. *Пропорциональный метод*. На каждом шаге интегрирования все величины, связанные с f , корректируются с использованием поправочного коэффициента, который устанавливает желаемое значение термодинамической величины f . Данный поправочный коэффициент определяет величину флуктуаций около $\langle f \rangle$.

3. *Интегральный метод*. Этот метод заключается в расширении гамильтониана системы путем введения новых независимых величин, которые отражают влияние внешней системы, определяющей состояние желаемого ансамбля. Эволюция этих величин во времени описывается уравнениями движения, полученными из расширенного гамильтониана.

4. *Стохастический подход*. В данном случае значения, связанные с термодинамической величиной f , определяются с использованием модифицированных уравнений движения, в которых некоторые степени свободы изменяются случайным образом, чтобы достичь желаемого значения $\langle f \rangle$.

Одним из наиболее популярных методов термостатирования, применяемого при молекулярно-динамическом моделировании, является термостат Берендсена [77], относящегося к группе пропорциональных термостатов. Метод основывается на идеи контакта исследуемой системы с внешним тепловым резервуаром, при чем это взаимодействие учитывается не явным образом, а путем введения знакопеременной силы трения [78]. Изменения температуры в момент времени $T(t)$ корректируются при помощи уравнения Ландау-Теллера:

$$\frac{dT(t)}{dt} = 2 \frac{\Delta T(t)}{Q_t^{(B)}}, \quad (2.13)$$

где $Q_t^{(B)}$ – характерное время взаимодействия с резервуаром.

Таким образом, отклонение температуры уменьшается экспоненциально с изменением временной постоянной $Q_t^{(B)}$. Варьируя эту постоянную, мы можем регулировать интенсивность теплообмена и адаптировать его к нашим конкретным целям. Например, при начальном уравнивании системы мы можем выбрать меньшую временную постоянную, но для моделирования системы в равновесии требуется использовать достаточно большую постоянную. С ростом значения параметра $Q_t^{(B)}$ флуктуации мгновенного значения температуры вблизи заданного значения затухают. В противном случае взаимодействие между термостатом и системой снижается, и возникают большие колебания температуры. Значение величины $Q_t^{(B)}$ преимущественно определяется с учетом размера системы (от количества частиц) и температуры термостата. Как правило, при выполнении расчетов для временной постоянной используют значение порядка 1 пс.

На каждом шаге изменения кинетической энергии моделируются перемасштабированием скоростей атомов системы путем умножения их значений на коэффициент λ , определяемый из условия:

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{2\Delta t}{\tau} \left(\frac{T_{ext}}{T(t - \Delta t)} - 1 \right)}, \quad (2.14)$$

$$v \left(t + \frac{1}{2} \Delta t \right) = \lambda \left[v \left(t - \frac{1}{2} \Delta t \right) + a(t) \Delta t \right]. \quad (2.15)$$

Основным недостатком термостата Берендсена является некорректность физического описания малых систем, из-за неравномерного распределения энергии по степеням свободы [72].

2.3. Потенциалы межчастичного взаимодействия

Первым этапом проведения моделирования является определение энергетических параметров взаимодействия атомов друг с другом. С позиций статистической физики свойства конкретного материала определяются непосредственно потенциалом межчастичного взаимодействия. Это может быть некоторая общая модель взаимодействия, или же набор различных моделей, воспроизводящих взаимодействия атомов различного сорта.

Модельный потенциал должен как можно корректнее характеризовать физическую (химическую) природу межчастичного взаимодействия в веществе и, тем самым, верно отображать свойства рассматриваемой системы. В качестве основания для выбора конкретной модели потенциала могут служить соображения о наличии в многочастичной системе какого-то конкретного типа межчастичного взаимодействия. С другой стороны, модельный потенциал для какой-то конкретной системы может представлять собой результат квантово-механических расчетов, предварительных вычислений, связанных с первопринципным (*ab initio*) моделированием. Кроме того, модельные потенциалы могут также конструироваться через решение обратной задачи – рассмотрение различных структурных характеристик, представленных экспериментальными данными, например, по рентгеновской и/или конкретной дифракции.

Самым чувствительным к выбору потенциала межчастичного взаимодействия из всех методов компьютерного моделирования является метод молекулярной динамики. Корректность молекулярно-динамических вычислений во многом зависит от выбора потенциалов взаимодействия частиц, поскольку небольшие изменения потенциала ведут к существенно отличающимся результатам расчетов.

Следует отметить, что конструирование потенциалов межчастичного взаимодействия применительно к какому-либо конкретному материалу является отдельной задачей и не относится к методу молекулярной динамики, в котором используются уже готовые модельные потенциалы.

Существуют два основных подхода к описанию молекулярно-

динамической модели физической системы: классический и квантовомеханический [79]. В классическом подходе атомы рассматриваются как материальные точки с массой, но не учитывается их сложная структура. Взаимодействие между атомами описывается эмпирическими формулами, которые включают ряд экспериментальных параметров. Этот подход позволяет определять устойчивые конфигурации моделируемой системы, изучать кинетику протекания фазовых переходов и т.д. Квантовомеханический подход учитывает электронную подсистему атомов и позволяет рассчитывать энергетические уровни моделируемой системы, конфигурацию электронных орбиталей, спектры поглощения и т.д.

Наиболее простым видом межатомных потенциалов являются парные потенциалы, т.е. зависящие от положения двух атомов. Следует отметить, что эти потенциалы не имеют строгого квантовомеханического обоснования, однако их простота позволяла широко использовать их в ранних моделях [80]. В приближении парных потенциалов энергия системы частиц представляется как сумма потенциальных энергий взаимодействия всех пар атомов:

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1(j \neq i)}^N \varphi(r_{ij}), \quad (2.16)$$

где $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ – расстояние между парой атомов i - j .

Все парные потенциалы относятся к эмпирическим потенциалам, которые основаны на простых выражениях, содержащих параметры, которые могут быть выбраны таким образом, чтобы потенциал правильно описывал некоторые свойства вещества. Несмотря на свою простоту, парные потенциалы оказываются очень полезными во многих случаях, например, при описании физических свойств разреженных газов, простых жидкостей и даже некоторых свойств идеальных кристаллов. Однако они имеют существенные недостатки. Прежде всего, парные потенциалы взаимодействия атомов не зависят от окружающей среды. Это означает, что атомы в кристаллической решетке, на поверхности или около дефектов взаимодействуют между собой одинаково.

Однако, в реальности атомная связь имеет тенденцию к насыщению. Это означает, что энергия, связанная с каждой связью, уменьшается, когда окружение атома становится плотным (согласно принципу Паули). Во-вторых, парные потенциалы дают в 3-4 раза завышенную оценку энергии образования вакансий. И в-третьих, они неправильно описывают упругие свойства кристаллов. При использовании парных потенциалов между упругими константами кубических кристаллов существует так называемое соотношение Коши $c_{12} = c_{44}$, которое для металлов никогда не соблюдается [80].

Представление энергии в виде суммы парных взаимодействий не имеет квантовомеханического обоснования, и возможно лишь для кристаллов инертных газов, у которых межатомные связи определяются ван-дер-ваальсовскими силами. Металлы обладают не только прямым ион-ионным взаимодействием между атомами, но и косвенным взаимодействием через эффекты электронного распределения. Соединения с металлической и ковалентной связью (металлы, полупроводники) для своего описания требуют более реалистичных потенциалов, для которых приходится учитывать вклады трехчастичных и более высокого порядка взаимодействий.

Для расширения применимости парных потенциалов для металлов и учета многочастичных эффектов предлагается два подхода [66].

Первый подход заключается в использовании кластерных потенциалов, которые включают взаимодействия более высокого порядка, такие как трехчастичные или четырехчастичные члены, с соответствующей формой и симметрией функций. Включение этих членов позволяет более точно моделировать энергию, чем при использовании только парных потенциалов.

Второй подход предполагает добавление функционала электронной плотности атома в локальном приближении к парным взаимодействиям. Это приводит к возникновению нескольких альтернативных потенциалов, которые имитируют многочастичные взаимодействия.

Доу и Баскс [81] предложили альтернативный подход для описания энергетических состояний соединений с металлическими связями, получивший название метод погруженного атома (embedded atom method, EAM). Данный метод базируется на квантовомеханической теории функционала электронной плотности, согласно которой вклад в энергию произвольно расположенных ядер от взаимодействия с электронами может быть представлен как однозначный функционал полной электронной плотности (функционал погружения). Предполагая, что состояние и энергия атома зависят только от плотности электронов, а плотность в металле представляется комбинацией вкладов отдельных атомов. Кроме того, электронная плотность, создаваемая одним атомом, обладает сферической симметрией. В данном случае потенциальная энергия кристалла является суммой энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия атомов с электронным газом:

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1(i \neq j)}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i), \quad (2.17)$$

где $F(\rho_i)$ – энергия внедрения i -го атома в электронную плотность, ρ_i – суммарная электронная плотность для i -го атома.

Плотность ρ_i вычисляется при помощи сферически симметричных функций одноэлектронной плотности $f(r_{ij})$ других атомов:

$$\rho_i = \sum_{j=1(i \neq j)}^N f(r_{ij}). \quad (2.18)$$

Функции $\varphi(r_{ij})$, $F(\rho_i)$ и $f(r_{ij})$ в некоторых случаях пытаются рассчитывать на основе квантовомеханической теории. В большинстве случаев, однако, выбираются различные приближения с параметрами, подогнанными под экспериментальные значения известных физических величин. Например, функцию $\varphi(r_{ij})$ часто представляют в форме парного потенциала или в форме полиномов n -го порядка. Электронные плотности $f(r_{ij})$ отдельных атомов записывают исходя из квантовомеханических представлений, а информация о функции $F(\rho_i)$ может быть получена из уравнения состояния.

Джонсон [82] предложил следующий функциональный вид электронной плотности $f(r)$, парного потенциала $\varphi(r)$ и энергии внедрения $F(\rho)$:

$$f(r) = f_e \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right], \quad r \leq r_c, \quad (2.19)$$

$$\varphi(r) = \varphi_e \exp \left[-\gamma \left(\frac{r}{r_e} - 1 \right) \right], \quad r \leq r_c, \quad (2.20)$$

$$F(\rho) = -E_c \left[1 - \frac{\alpha}{\beta} \ln \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right) \right] \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\alpha/\beta} - \Phi_e \left(\frac{\rho}{\rho_e} \right)^{\gamma/\beta}, \quad (2.21)$$

где $\alpha = 3\sqrt{\Omega B / E_c}$, Ω – атомный объем, B – модуль всестороннего сжатия, E_c – энергия связи, $\rho_e = 12f_e$, $\Phi_e = 6\varphi_e$, r_e – кратчайшее равновесное расстояние между атомами, r_c – радиус обрезания потенциала.

В величине $f_e = S(E_c / \Omega)$, являющийся постоянной масштабирования, значение S принимается равной единице для чистых металлов. Функция $f(r)$ является положительной и убывающей, а функция $F(\rho)$ имеет положительную кривизну. Поэтому, с увеличением плотности, взаимодействие становится более отталкивающим. Параметры потенциала φ_e , β , γ , r_c определяются путем подгонки к атомному объему Ω или параметру решетки a_0 , энергии образования вакансии E_v , энергии связи E_c , модулю сдвига G и модулю всестороннего сжатия B .

В методе ЕАМ учитывается многочастичное взаимодействие благодаря функции внедрения $F(\rho_i)$. Поэтому вычисленный потенциал корректно описывает уменьшение энергии связи, приходящейся на одну связь, при увеличении координационного числа [80].

2.4. Построение молекулярно-динамической модели

В данном исследовании рассматривалась монокристаллическая модель гранецентрированной кубической решетки. Для этого в прямоугольной системе

координат задавался размер расчетной ячейки, имеющей форму параллелепипеда, с координатными осями, совпадающими с кристаллографическими направлениями. Затем массив частиц формировал ячейку, соответствующую решетке ГЦК, которая заполнялась по всему заданному объему путем трансляции ячейки. Полученная моделируемая системы включала в себя в среднем 32000 частиц ($20 \times 20 \times 20$ элементарных ячеек). Физический размер элементарной ячейки задавался в соответствии с параметром решетки моделируемого материала. Так как рассматривались металлы Ni и Au, то постоянные решетки были равны 3,524 и 4,08 Å соответственно. Ориентация в пространстве расчетной ячейки задавалась таким образом, чтобы ось X совпадала с кристаллографическим направлением $[1\bar{1}0]$, ось Y – с направлением $[11\bar{2}]$, а Z – с $[111]$. Для имитации бесконечной протяженности расчетной ячейки использовались периодические граничные условия вдоль всех трех осей.

В качестве потенциала межчастичного взаимодействия использовался ЕАМ потенциал Джонсона, параметры которого приведены в таблице 2.1, а графики функций (2.19), (2.20) и (2.21) представлены на рисунке 2.1.

Таблица 2.1

Параметры потенциала Джонсона [83]

Металл	f_e	φ_e , эВ	α	β	γ	r_c , Å
Ni	0.41	0.74	4.98	6.41	8.86	4.84
Au	0.23	0.65	6.37	6.67	8.20	5.70

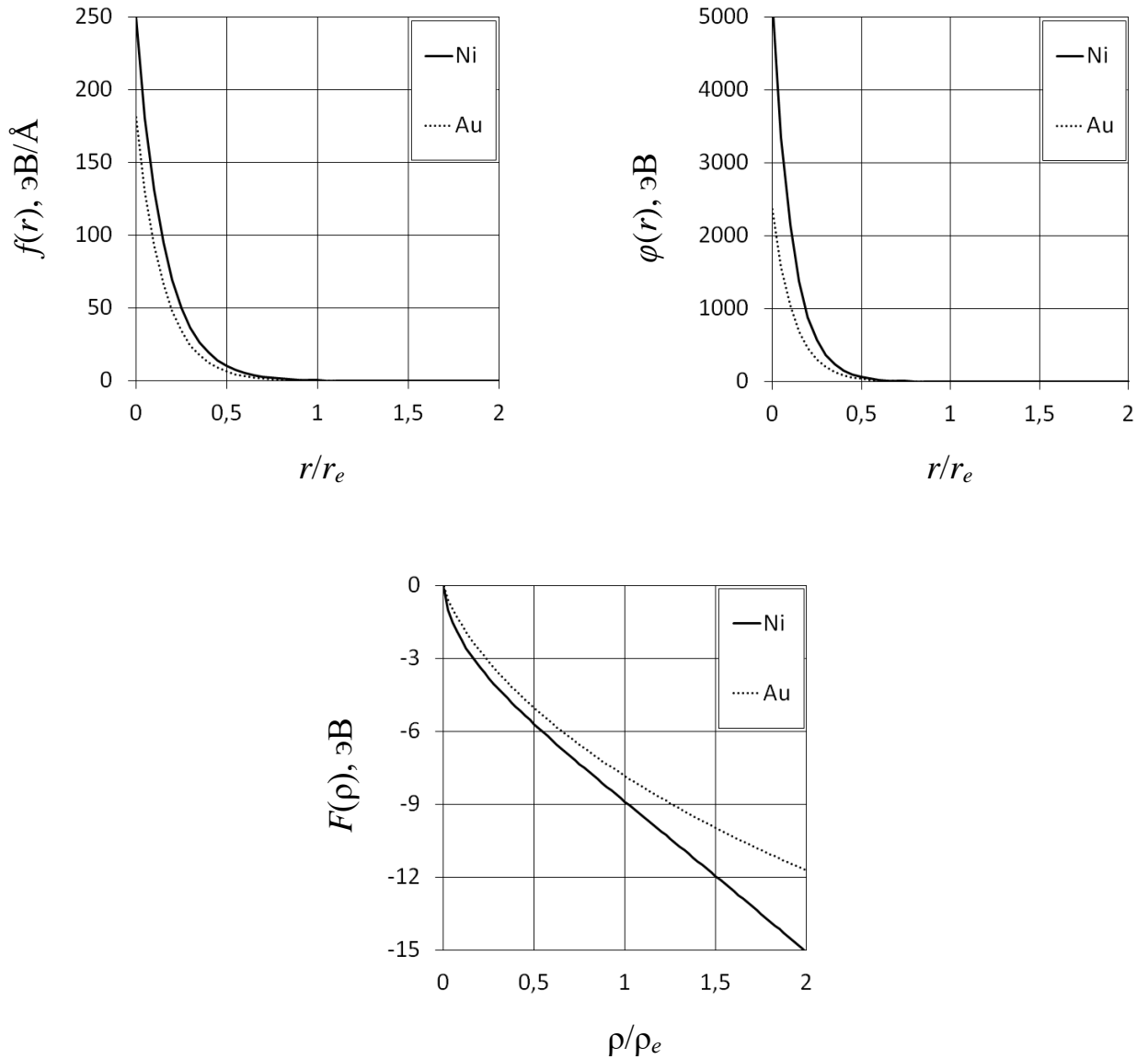


Рис. 2.1. Графики функций, определяющих потенциал Джонсона

При расчетах применялся некоммерческий пакет молекулярно-динамического моделирования XMD, разработанный Джоном Рифкиным (John Rifkin) в университете штата Коннектикут (США), распространяемый как программное обеспечение с открытым исходным кодом по лицензии GPL. Очевидное преимущество этого пакета заключается в его обширных возможностях, легкости использования и доступности исходных кодов.

Численные эксперименты проводились следующим образом. После создания модели идеального кристалла в нем создавался избыточный свободный объем, как правило локализованный в виде поры, и в дальнейшем с

помощью метода молекулярной динамики осуществлялась релаксация системы, путем выполнения вычислительных итераций (шаг численного интегрирования уравнений движения с применением алгоритма Верле равнялся 5 фс) при заданной температуре (для ее фиксации использовался термостат Берендсена), в результате чего достигался локальный энергетический минимум, и полученная подобным образом структура использовалась для последующего исследования структуры при помощи различных визуализаторов. Для этого использовался пакет OVITO [84].

OpenVisualisationTool (OVITO) – это современное программное обеспечение для 3D-визуализации, предназначенное для анализа и постобработки больших массивов данных, полученных в результате молекулярно-динамического моделирования и симуляций методов Монте-Карло. Уникальные возможности анализа, редактирования и анимации интегрированы в простой в использовании графический интерфейс пользователя. Программное обеспечение написано на объектно-ориентированном языке программирования C++, управляется скриптами Python и легко расширяется с помощью подключаемых интерфейсов. Пакет OVITO распространяется как программное обеспечение с открытым исходным кодом по лицензии GPL. OVITO использует аппаратно-ускоренный рендеринг на основе стандарта OpenGL для отображения большого количества атомов в реальном времени. Даже со слабой видеокартой OVITO может плавно отображать несколько миллионов атомов, используя самые современные методы рендеринга, такие как шейдерные программы, непосредственно выполняемые на графическом процессоре (GPU).

Так как предполагается проведение исследования влияния ударной волны на структурные изменения, происходящие в моделируемом кристалле, то необходимо описать методику создания такой волны. Для этого в расчетной ячейке выделялась кристаллографическая плоскость $\{1\bar{1}0\}$, содержащая граничные атомы, которым присваивалась равная по величине скорость,

превышающая скорость продольных звуковых волн и вектор которой ориентирован по нормали к выделенной плоскости. Последующие эстафетные кооперативные атомные смещения порождают бегущую волну, ширина фронта которой остается в пределах нескольких межатомных расстояний (см. рисунок 2.2), при этом амплитуда смещений атомов значительно превышает амплитуду тепловых колебаний. Волна, исследуемая в работе [85], имеет схожее описание.

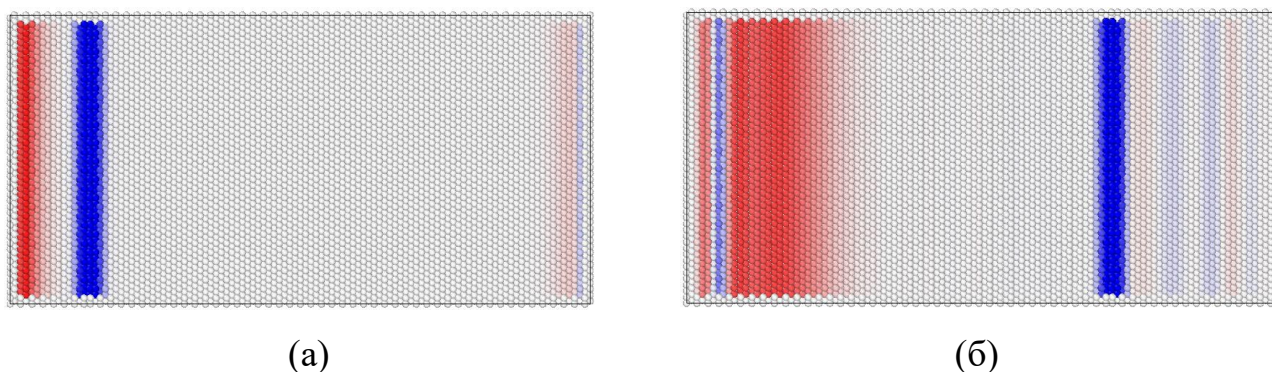


Рис. 2.2. Визуализация локальной упругой деформации в расчетной ячейке при распространении волны через 25 (а) и 125 (б) фс. Синим цветом выделена область сжатия, красным – растяжения.

Расстояние, проходимое ударной волной до ее вырождения в звуковую волну, зависит от начальной скорости атомов и измеряется десятками ангстрем. Чтобы избежать повторного прохождения волны через исследуемую область, к атомам на противоположной границе были приложены вязкие силы, моделирующие отток энергии из расчетной области в окружающую среду.

Расчеты, проведенные при генерации волны по данной методике [72], показали, при температуре расчетной ячейке 600 К и стартовой скорости граничных атомов, равной полторы скорости звука в моделируемом материале, напряжение, исчисляется ГПа. Это значение сильно зависит от количества граничных атомов, которым присваивается скорость во время генерации волны. Тем не менее, несмотря на большую величину возникающих напряжений, моделируемая кристаллическая решетка при прохождении волны оставалась упруго искаженной.

Кроме того, не наблюдалось расщепление ударной волны на упругий предвестник и последующий пластический фронт, и ударная волна состояла только из упругой компоненты. Это, по-видимому, связано с отсутствием дефектов решетки, которые могли бы быть основой для последующего пластического сдвига. Например, в [86, 87] было показано, что идеальная кристаллическая решетка меди остается упругой до давления 30 ГПа, но когда имеются точечные дефекты, то дефекты упаковки образуются уже при давлении 5 ГПа. Не расщепление ударной волны в идеальных кристаллах при компьютерном моделировании наблюдалось в работе [88]. Таким образом, можно признать, что в целом, поведение экспериментально сгенерированных ударных волн и реакция смоделированной кристаллической структуры согласуются с известными данными.

Также необходимо оговорить, что выбранный потенциал межчастичного взаимодействия верно описывает пороговую энергию смещения [72], поэтому описанный выше способ создания волны в кристалле исключает некорректность моделирования.

3. СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ, ПРОИСХОДЯЩИЕ В КРИСТАЛЛЕ, СОДЕРЖАЩЕМ ИЗБЫТОЧНЫЙ СВОБОДНЫЙ ОБЪЕМ

Одной из важнейших задач радиационного материаловедения является прогнозирование поведения конструкционных материалов в условиях интенсивного облучения высокоэнергетическими частицами с целью улучшения их радиационной стойкости.

Известно, что область повреждения, образуемая в результате прохождения каскада атомных соударений, имеет дифференциацию распределения атомов. Центр данной области представляет собой обедненную зону, окруженную облаком смещенных атомов. Из-за процессов каналирования и фокусировки атомных столкновений возможно проявление анизотропии в распределении межузельных атомов, предотвращающее их аннигиляцию с вакансиями. В результате этого вакансионные скопления, присутствующие в избытке, начинают перестраиваться в различные кластеры – дислокационные петли, тетраэдры дефектов упаковки и т.п.

Наряду с традиционными методами физического эксперимента радиационные дефекты успешно исследуются методами компьютерного моделирования. Данные методы позволяют получить результаты, которые невозможно на сегодняшний день достичь экспериментальным путем. Например, в работе [89] методом молекулярной динамики исследовались процессы образования дислокационных петель в облученном α -Fe. Показано, что при пересечении отдельных каскадов возможно образование даже энергетически невыгодных петель. В работах [10, 90, 91] изучалась стабильность и механизмы образования различных вакансионных кластеров в ГЦК металлах. Показано, что в процессе релаксации мелкие кластеры объединяются и образуют тетраэдры дефектов упаковки (ТДУ). Критические условия внешнего воздействия, при котором дислокационные петли Франка перестраиваются в ТДУ, определены для ГЦК кристалла в [92]. В работе [93]

описывается дислокационный механизм образования ТДУ на границе раздела Cu-Al. Процесс частичного разрушения ТДУ с образованием дислокационных петель под воздействием приложенных напряжений исследован в работе [94]. Тем не менее, несмотря на большое число различных работ по данной тематике, при изучении процессов формирования ТДУ в обедненных зонах не учитывается возможность распространения по кристаллу ударных послекасадных волн.

Целью компьютерных экспериментов, результаты которых приведены в данной главе и опубликованы в работах [95-103], является выявление особенностей структурных преобразований, происходящих в обедненной зоне, принадлежащей ГЦК-кристаллу (на примере никеля), под воздействием ударных волн.

При проведении моделирования в расчетной ячейке удалялись атомы, выбранные случайно в соответствии с дискретным равномерным распределением, число которых соответствовало от 5% до 20%-й концентрации вакансий n . После этого система выдерживалась при задаваемой температуре определенное число вычислительных шагов и после снятия теплового фона путем многократного обнуления скоростей атомов анализировалась полученная структура с помощью различных визуализаторов.

3.1. Структурные изменения в кристалле, содержащем высокую концентрацию вакансий

На начальном этапе было проведено исследование структурных изменений, происходящих в кристалле, содержащем различную концентрацию вакансий. Было установлено, что вакансии в процессе структурной релаксации начинают объединяться в различные кластеры. Так на рисунке 3.1 представлена визуализация атомных смещений в различные моменты времени проведенного моделирования.

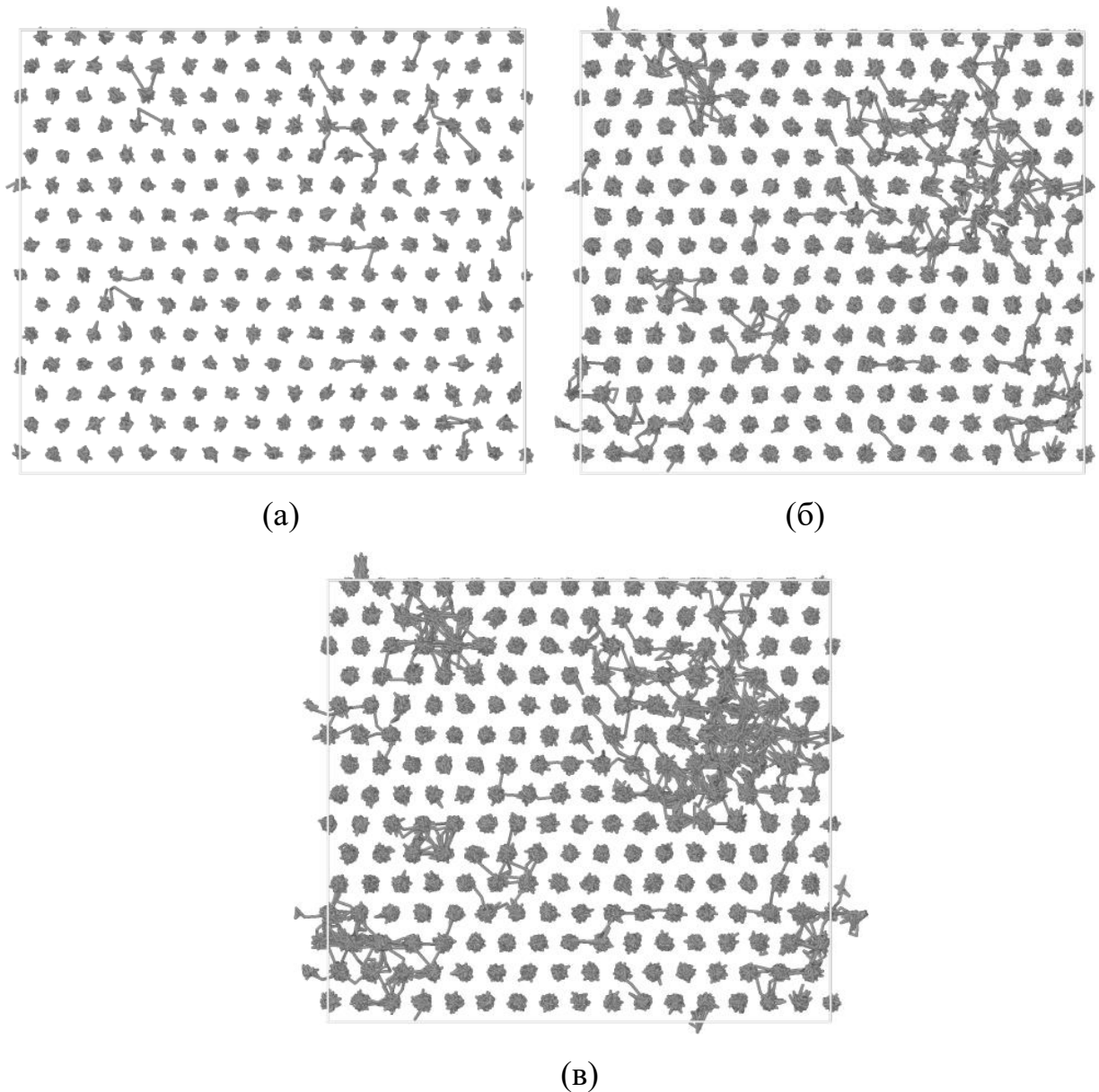


Рис. 3.1. Визуализация атомных смещений в расчетной ячейке, содержащей концентрацию вакансий $n = 1.5\%$, через 2.5 (а), 12.5 (б) и 25 (в) пс моделируемого времени. Температура расчетной ячейки 1700 К

Для построения изображения на рисунке 3.1 использовался визуализатор, представляющий собой линии, соединяющие начальное положение атома и его положение в некоторый момент времени. В результате вычисления положения атомов в различные моменты времени появляется возможность построить траекторию движения атома.

Как следует из рисунка, траектории атомов сгущаются в отдельных областях расчетной ячейки, что свидетельствует об образовании кластеров дефектов.

Объединение вакансий является энергетически выгодным процессом. Для подтверждения этого была вычислена энергия связи вакансий в кластере вакансией ΔE_v по формуле

$$\Delta E = U_0 - U, \quad (3.1)$$

где U_0 – потенциальная энергия моделируемой системы частиц, содержащей вакансии на таком расстоянии друг от друга, которое исключает их взаимодействие (как правило, несколько десятков межатомных расстояний); U – потенциальная энергия моделируемой системы, в которой вакансии объединены в кластер.

Результаты вычислений потенциальной энергии и энергии связи вакансий в кластере представлены на рисунках 3.2 и 3.3.

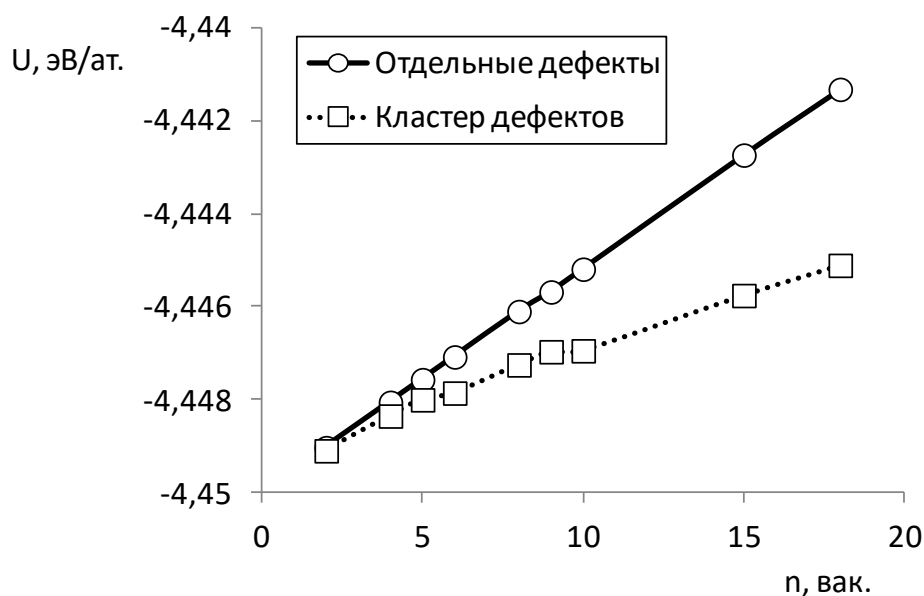


Рис. 3.2. Потенциальная энергия расчетной ячейки, содержащей отдельные вакансии и вакансии, объединенные в кластер

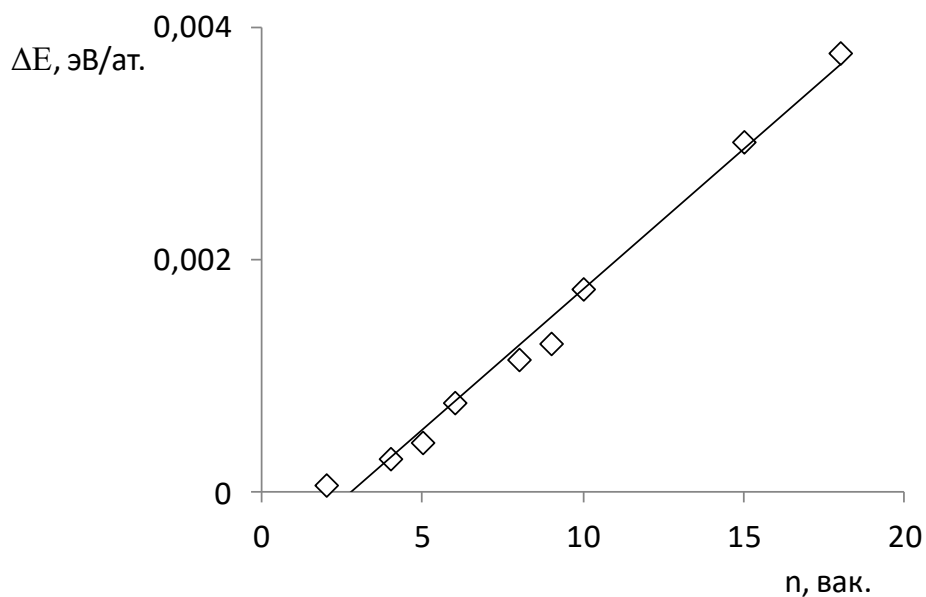


Рис. 3.3. Изменение энергии связи вакансий в кластере по мере увеличения числа дефектов

Как следует из рисунка 3.2 энергия связи вакансий увеличивается при росте кластера. Рассматривая относительно небольшое число вакансий это увеличение можно считать подчиняющимся линейному закону.

Крупные кластеры вакансий представляют собой тетраэдры дефектов упаковки. В данном дефекте четыре грани представляют собой дефекты упаковки вычитания в плоскостях $\{111\}$, а шесть ребер – это вершинные дислокации с вектором Бюргера $a/6 \langle 110 \rangle$. Идентифицировать дефекты упаковки в ГЦК-решетке можно по атомам с локальным ГПУ-окружением. Для оценки доли таких атомов использовался структурный анализ, заключающийся в идентификации локального окружения частиц с использованием метода углов и связей Экланда-Джонса [104], который анализирует распределение углов, образованных парами соседей центрального атома. Распределение атомов с ГПУ-окружением представлено на рисунке 3.4.

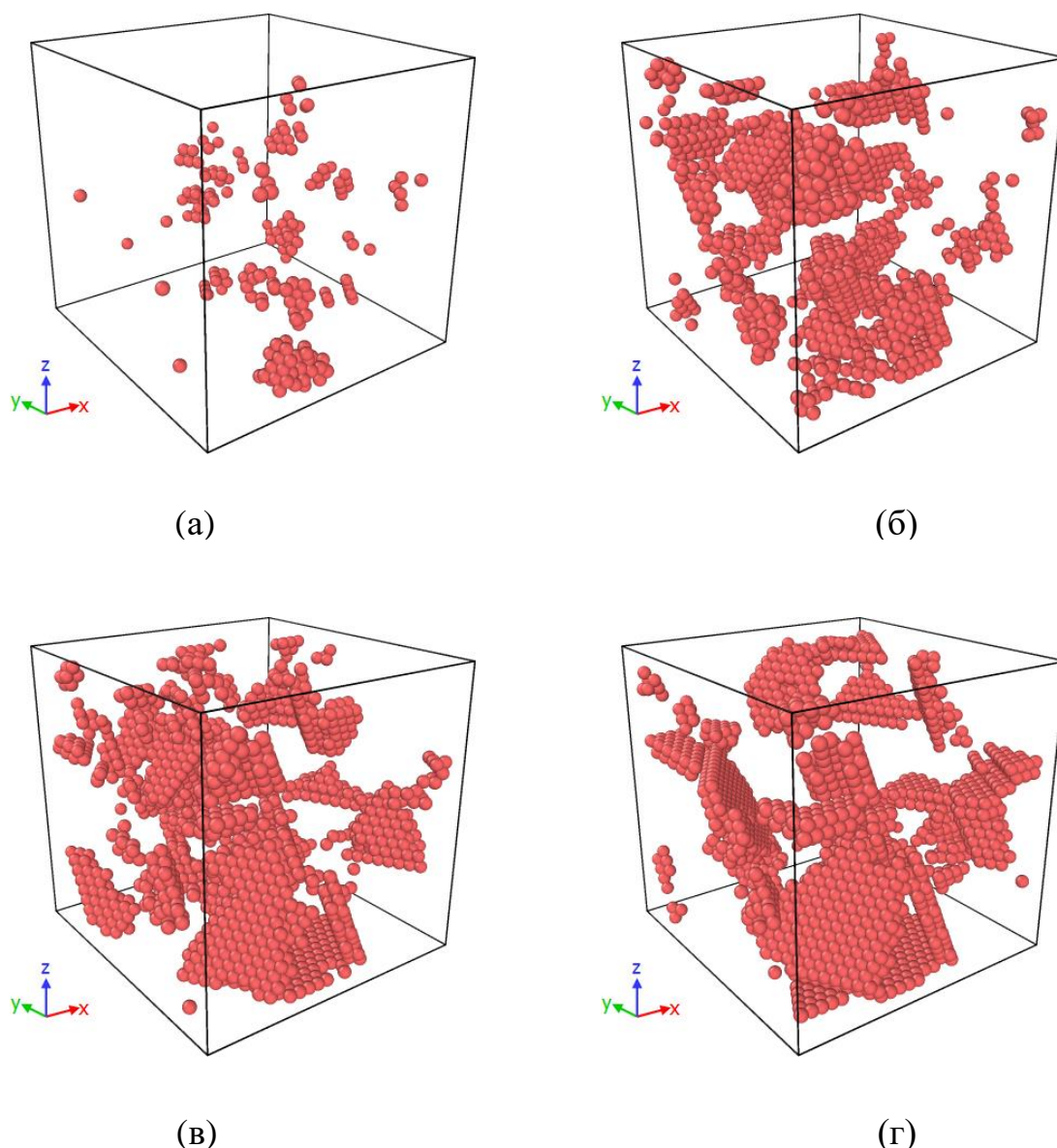
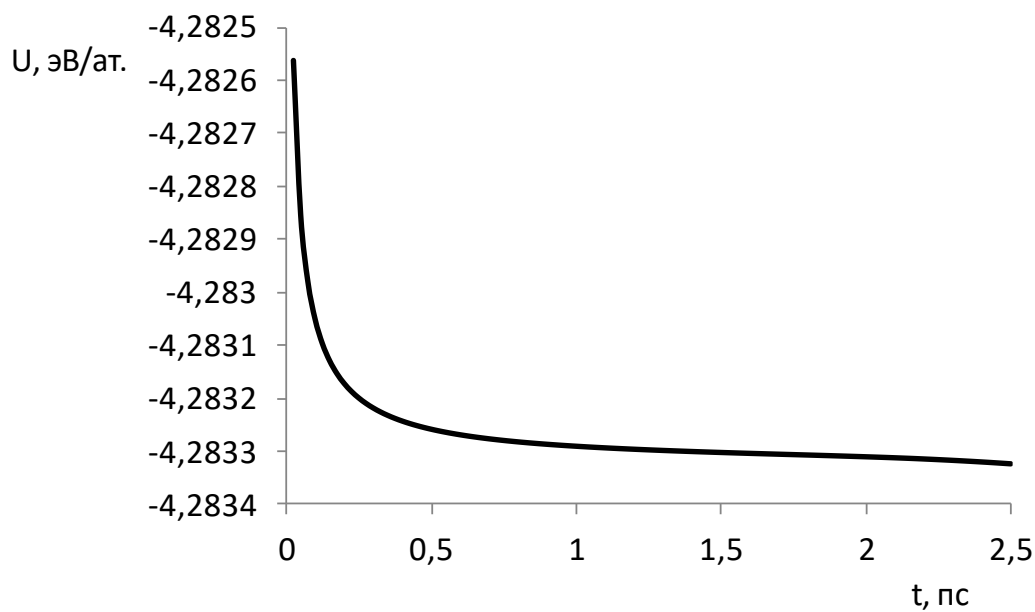


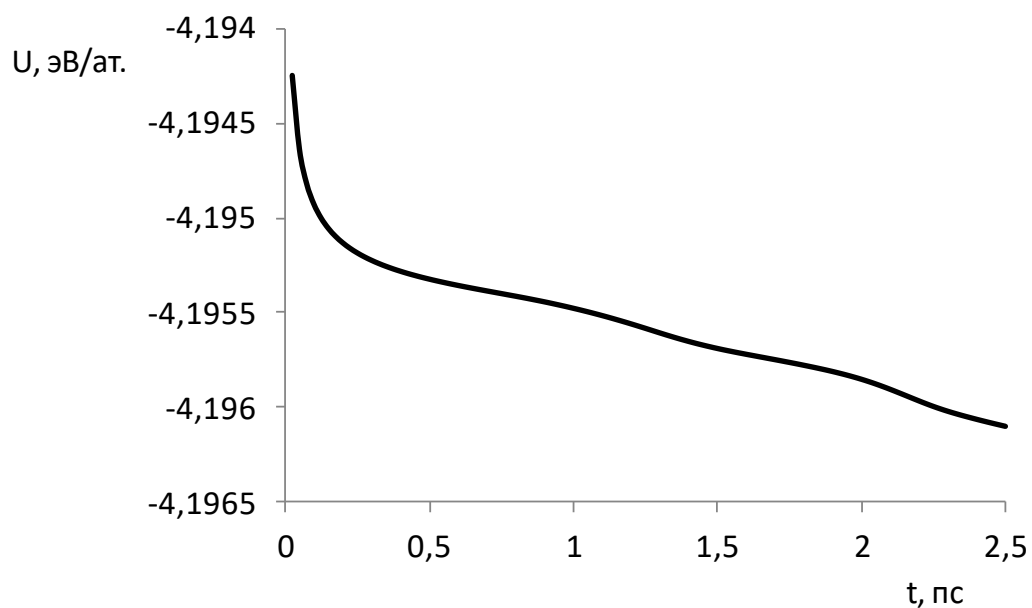
Рис. 3.4. Преобразования дефектной структуры расчетной ячейки через 1 (а), 5 (б), 10 (в) и 15 (г) пс моделируемого времени. Концентрация вакансий $n = 5\%$, температура расчетной ячейки 900 К. Показаны атомы, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке

На рисунке 3.4 отчетливо видны плоские скопления атомов, представляющих собой дефекты упаковки.

Все структурные изменения в расчетной ячейке сопровождаются понижением потенциальной энергии моделируемой системы. Результаты вычислений энергии при различной концентрации вакансий в расчетной ячейке представлено на рисунке 3.5.



(a)



(б)

Рис. 3.5. Изменение потенциальной энергии моделируемой системы в течение процесса моделирования при концентрации вакансий $n = 10\%$ (а) и 15% (б)

При сравнении рисунков можно сделать вывод, что 10% концентрации вакансий времени моделирования было достаточно для того, чтобы система пришла к минимуму энергии, а при 15% времени моделирования не хватило, и

структура на момент окончания моделирования еще не завершила свою перестройку.

Как показали расчеты, в данном случае концентрация атомов с локальным ГПУ-окружением увеличивается с 0.3 до 15.7% при увеличении вакансий с 10 до 15% от общего числа атомов расчетной ячейки (см. рис. 3.6).

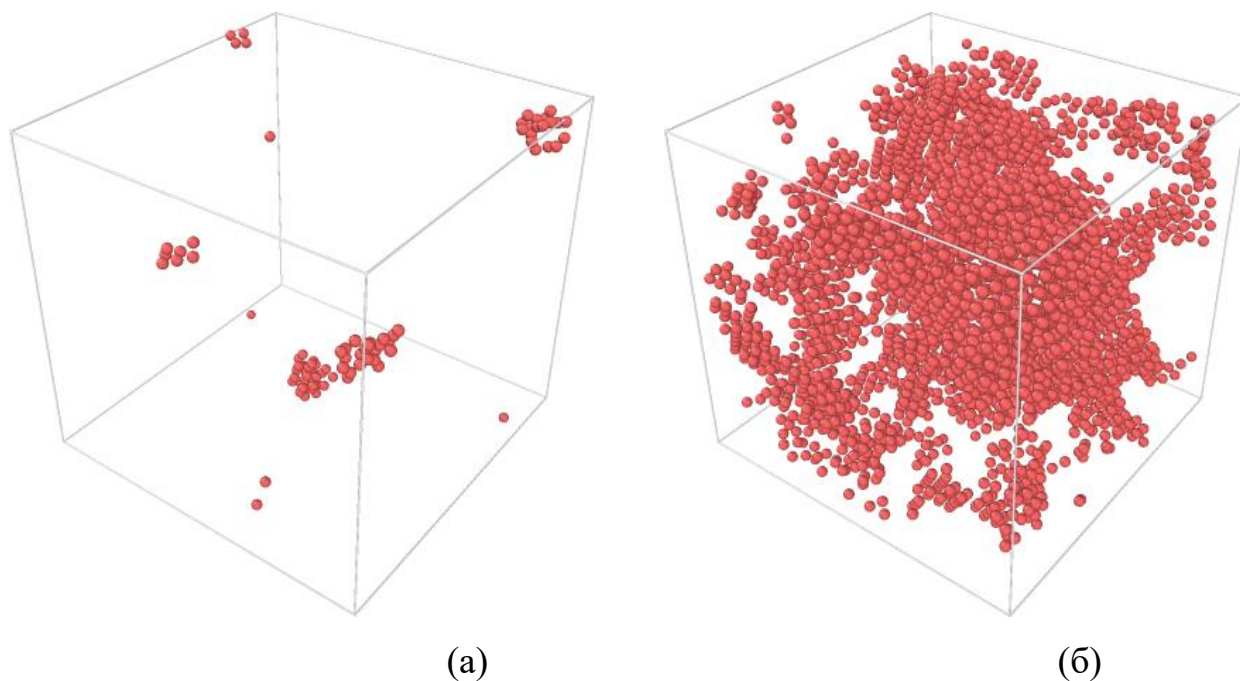


Рис. 3.6. Распределение атомов, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке, после структурной релаксации расчетной ячейки при 300 К, содержащей вакансии, концентрация которых равна $n = 10$ (а) и 15 (б) %

По мере увеличения концентрации вакансий наблюдаются более значительные структурные изменения в моделируемом кристалле. Так при 15%-й концентрации вакансий наблюдалась локальная аморфизация. При значительном разогреве и с последующей закалкой наличие избыточного свободного объема способствует образованию зеренной структуры (см. рис. 3.7.а). Дальнейшее увеличение создаваемых вакансий приводит к порообразованию в кристалле (см. рис. 3.7.б).

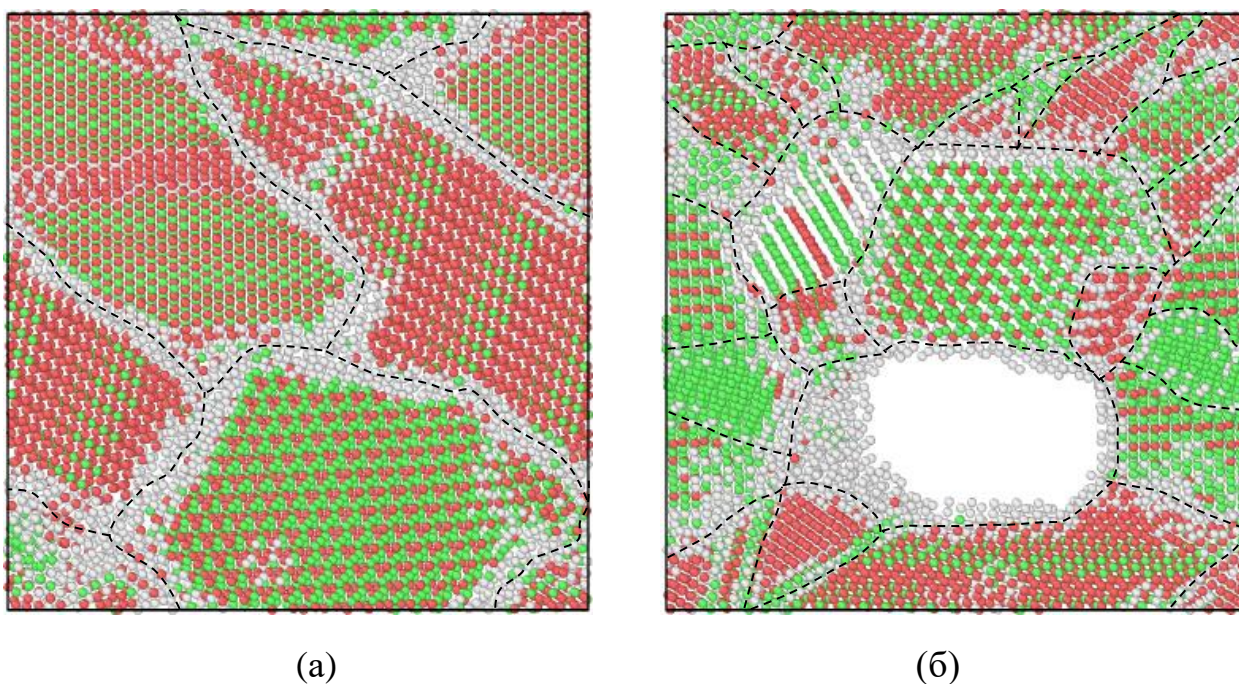
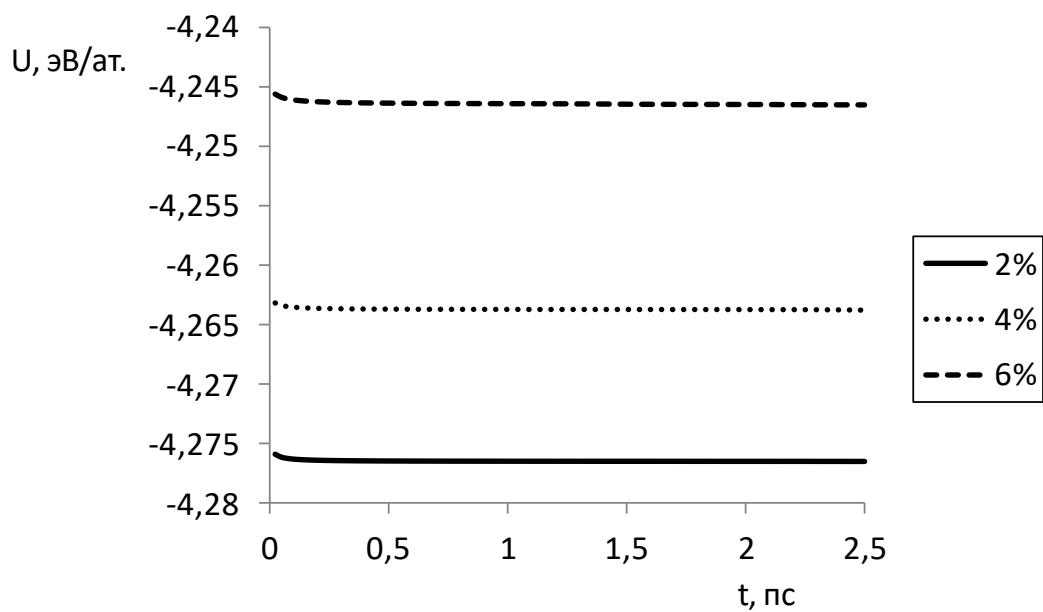


Рис. 3.7. Структура моделируемого кристалла через 10 пс моделируемого времени: (а) $n = 15\%$, $T = 1200$ К; (б) $n = 20\%$, $T = 300$ К. Цветовая визуализация соответствует распределению локального окружения атомов: зеленый – ГЦК, красный – ГПУ, бесцветный – не определено. Выделены межзеренные границы

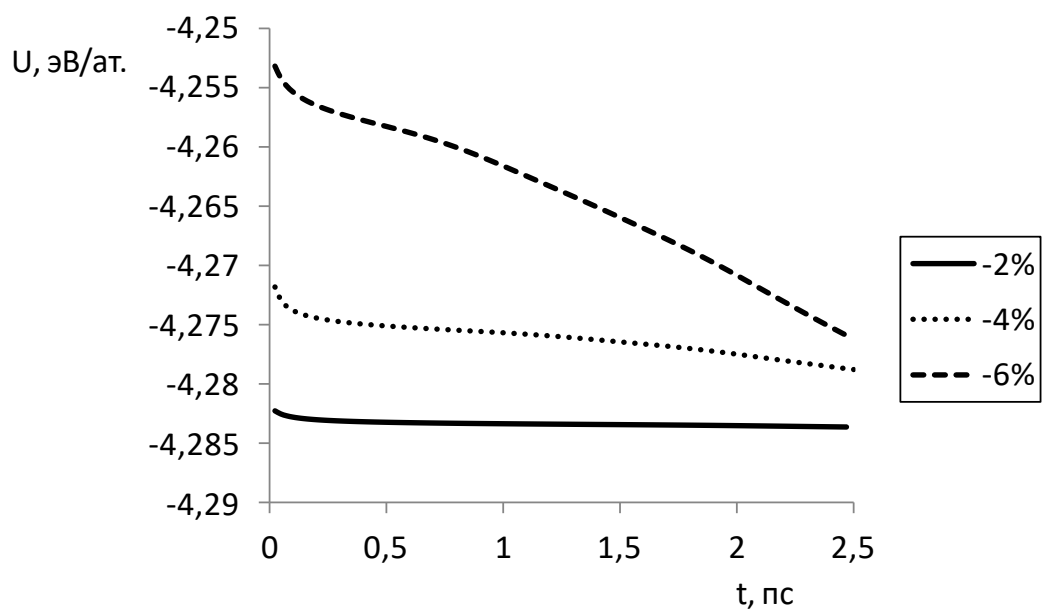
Стоит оговорить, что на рисунке 3.7. частицы, ближайшее окружение которых не идентифицируется как имеющее дальний порядок, не выделяются цветом и считаются принадлежащими аморфной фазе.

3.2. Влияние деформации на структурные изменения, происходящие в кристалле

На следующем этапе исследовалось влияние одноосной деформации (вдоль оси X) на структурные изменения, происходящие в расчетной ячейке, содержащей 10% концентрацию вакансий. Расчет потенциальной энергии показал, что при растяжении расчетной ячейки значение энергии в процессе моделирования остается на постоянном уровне, что свидетельствует об отсутствии структурных изменений (см. рис. 3.8.а).



(a)



(б)

Рис. 3.8. Изменение потенциальной энергии моделируемой системы в течение процесса моделирования при различной величине одноосной деформации растяжения (а) и сжатия (б)

Деформации сжатия приводит к уменьшению потенциальной энергии (см.

рис. 3.8.б). При этом наибольшее снижение отмечается при максимальной из рассматриваемых величин деформации. В данном случае структурная перестройка моделируемого кристалла сопровождается образованием дислокационных сегментов. Для идентификации дислокационных линий использовался алгоритм Dislocation Extraction (DXA) [105], основанный на тесселяции и триангуляции Делоне. Данный алгоритм идентифицирует выявленные дислокационные линии и раскрашивает их в определенный цвет (см. табл. 3.1).

Таблица 3.1.

Цветовая легенда алгоритма DXA для дислокационных сегментов

№	Вектор Бюргерса	Используемый цвет
1	$1/2 \langle 110 \rangle$	
2	$1/6 \langle 112 \rangle$	
3	$1/6 \langle 110 \rangle$	
4	$1/3 \langle 001 \rangle$	
5	$1/3 \langle 111 \rangle$	
6	Не определен	

Дислокационные сегменты, идентифицируемые в моделируемой структуре с помощью алгоритма DXA, представлены на рисунке 3.9.

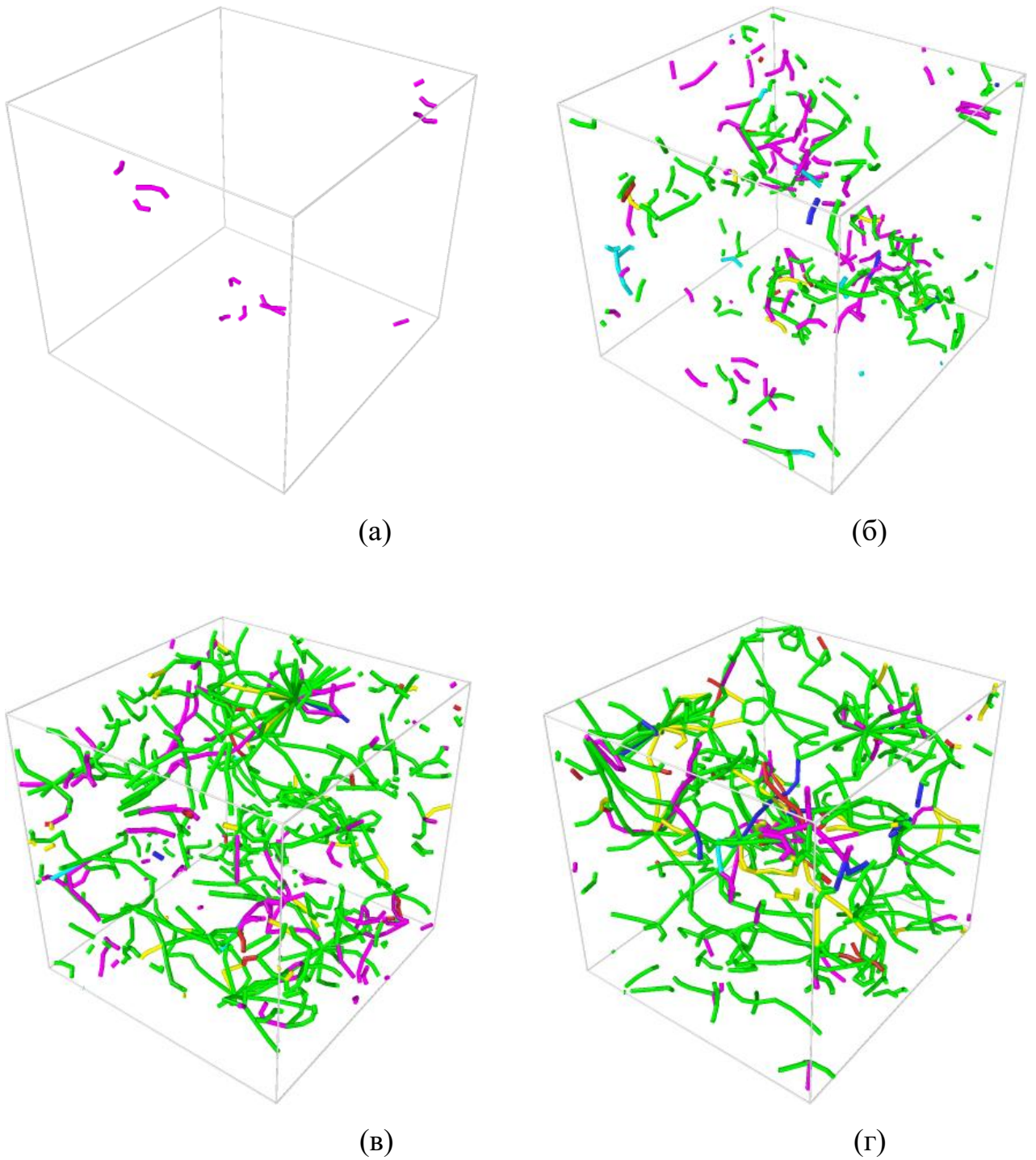


Рис. 3.9. Визуализация дислокационных линий через 2.5 пс модельного времени в расчетной ячейке, без деформации (а) и при деформации одноосного сжатия величиной $\epsilon = -2$ (б), -4 (в) и -6 (г) %. Концентрация вакансий $n = 10\%$, $T = 300$ К

Согласно результатам, полученным с применением алгоритма DXA, наибольшее число дислокационных сегментов идентифицируются как частичные дислокации Шокли (раскрашены в зеленый цвет). Изменение общей протяженности дислокаций, в выше представленном эксперименте, приведено в таблице 3.2.

Таблица 3.2

Результаты анализа обедненных зон ($n = 10\%$) после релаксации при различной деформации алгоритмом DXA

ε , %	Дислокационные сегменты: количество / длина (Å)					
	Вектор Бюргерса					
	$a/2 \langle 110 \rangle$	$a/6 \langle 112 \rangle$	$a/6 \langle 110 \rangle$	$a/3 \langle 001 \rangle$	$a/3 \langle 111 \rangle$	Прочий
0	0 / 0	0 / 0	10 / 69.78	0 / 0	0 / 0	0 / 0
-2	2 / 13.73	113 / 981.69	61 / 450.34	5 / 30.99	7 / 63.01	4 / 32.97
-4	3 / 31.12	233 / 2548.47	64 / 619.20	16 / 125.54	3 / 29.41	16 / 107.54
-6	8 / 94.84	226 / 3179.76	42 / 498.35	34 / 373.77	2 / 47.17	11 / 97.03

Таким образом, проведенное моделирование показало, что в обедненной зоне в процессе релаксации структуры формируется сеть дислокаций. Согласно результатам, полученным с применением алгоритма DXA, наибольшее число дислокационных сегментов идентифицируются как частичные дислокации Шокли (раскрашены в зеленый цвет), общая протяженность которых увеличивается пропорционально создаваемой деформации – с 981.69 анг (при $\varepsilon = -2\%$) до 3179.76 (при $\varepsilon = -6\%$), т.е. приблизительно в 3 раза.

3.3. Влияние ударных волн на структурные изменения

Перейдем к рассмотрению влияния ударной волны на структурные преобразования, происходящие при названных выше концентрациях вакансий. В общем случае прохождение по кристаллу фронта сжатия и последующей за

ним волны разгрузки вызывает миграцию вакансий по направлению к области кристалла, в которой генерировалась волна. Поэтому в случае генерации нескольких волн вакансии не успевают образовывать кластеры, и их локализация в одном месте вызывает либо аморфизацию данной области, либо образование в ней поры. В связи с этим был проведен сравнительный анализ структурных изменений, происходящих в кристалле при генерации волн через определенный временной интервал. Оказалось, что для кристалла, в котором были сгенерированы волны, характерно уменьшение доли атомов, принадлежащих ГПУ-фазе. Так на рисунке 3.10 представлено изменение соответствующего числа атомов в процессе моделирования при последовательном генерировании пяти волн с интервалом 1 000 вычислительных шагов.

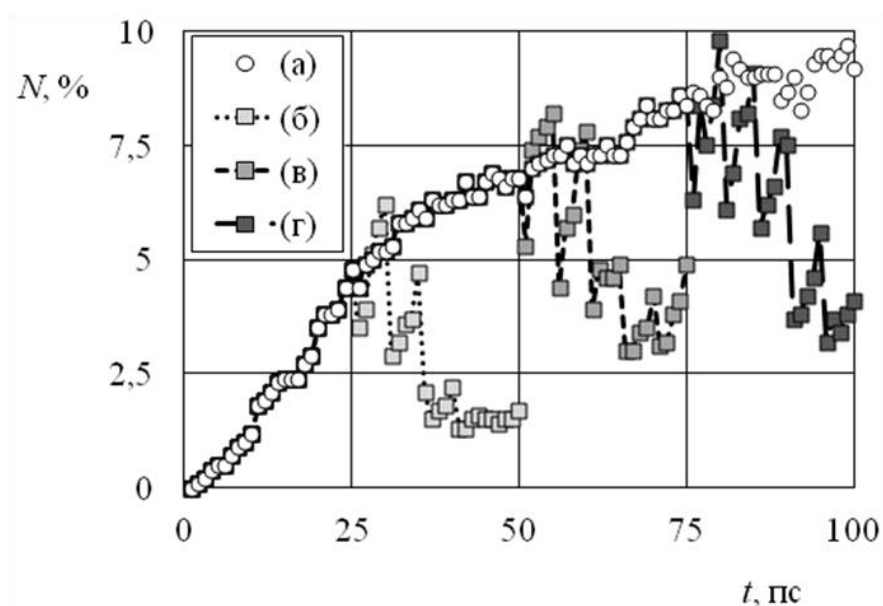


Рис. 3.10. Изменение содержания атомов N расчетной ячейки, принадлежащих ГПУ-фазе, в процессе моделирования: (а) – без генерации волны; (б), (в) и (г) – при генерации волны через 5 000, 10 000 и 15 000 вычислительных шагов соответственно. Концентрация вакансий $n = 5\%$, поддерживаемая температура расчетной ячейки $T = 900$ К

Анализ дислокационной структуры расчетной ячейки показал, что после релаксации в моделируемой системе содержаться преимущественно вершинные

дислокации с вектором Бюргерса $\vec{b} = 1/6\langle 110 \rangle$ и частичные дислокации Шокли ($\vec{b} = 1/6\langle 112 \rangle$). Наличие данных дислокаций обусловлено дефектами упаковки, в том числе образующих тетраэдр. После прохождения серии ударных волн общее число дислокационных сегментов значительно снижается, и в расчетной ячейке наибольшей протяженностью начинают обладать дислокации Шокли. Так, например, на рисунке 3.11 приведены дислокационные структуры расчетной ячейки, соответствующие результатам моделирования, представленным на рисунке 3.10 в момент времени $t = 75$ пс.

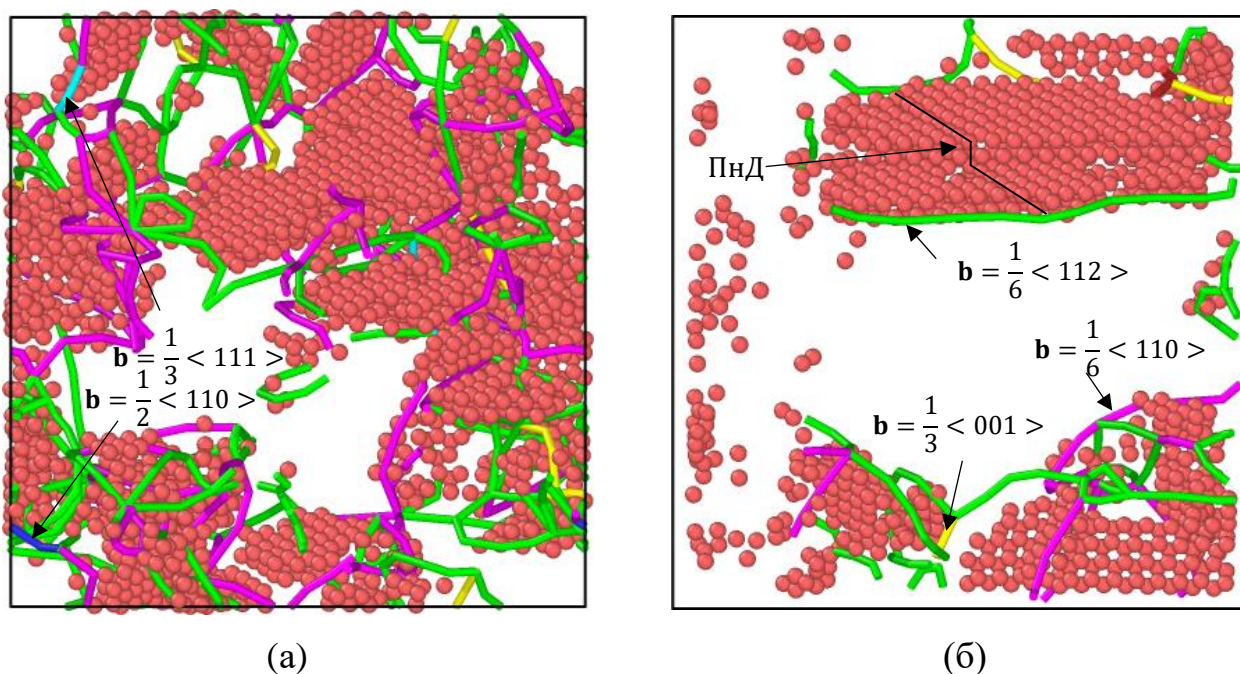


Рис. 3.11. Распределение дислокационных сегментов в расчетной ячейке (плоскость XZY) после 75 пс моделирования ($n = 5\%$, $T = 900$ К): (а) – без генерации ударных волн; (б) – после прохождения пяти ударных волн.

Цветовая визуализация дислокационных линий: зеленый – частичная дислокация Шокли; фиолетовый, желтый – вершинная дислокация; голубой – дислокация Франка; синий – полная дислокация. Дополнительно обозначен порог на дислокации (ПнД)

В данный момент общая протяженность линий вершинных дислокаций для моделируемой системы составила 1039.78 Å, а для дислокаций Шокли –

1498.72 Å. Если же при проведении моделирования к этому моменту в расчетной ячейке было сгенерировано пять ударных волн, то протяженность дислокационных линий сокращалась до 202.081 Å и 556.222 Å соответственно.

На следующем этапе исследовались расчетные ячейки с 15%-й концентрацией вакансий. Как уже говорилось выше в данном случае характерно образование зеренной структуры. При этом избыточный свободный объем распределяется по границам зерен. Под воздействием волн наблюдается укрупнение зерен и при этом распределенный свободный объем за счет перескоков вакансий в новые положения начинает локализоваться в области генерации волн (см. рис. 3.12).

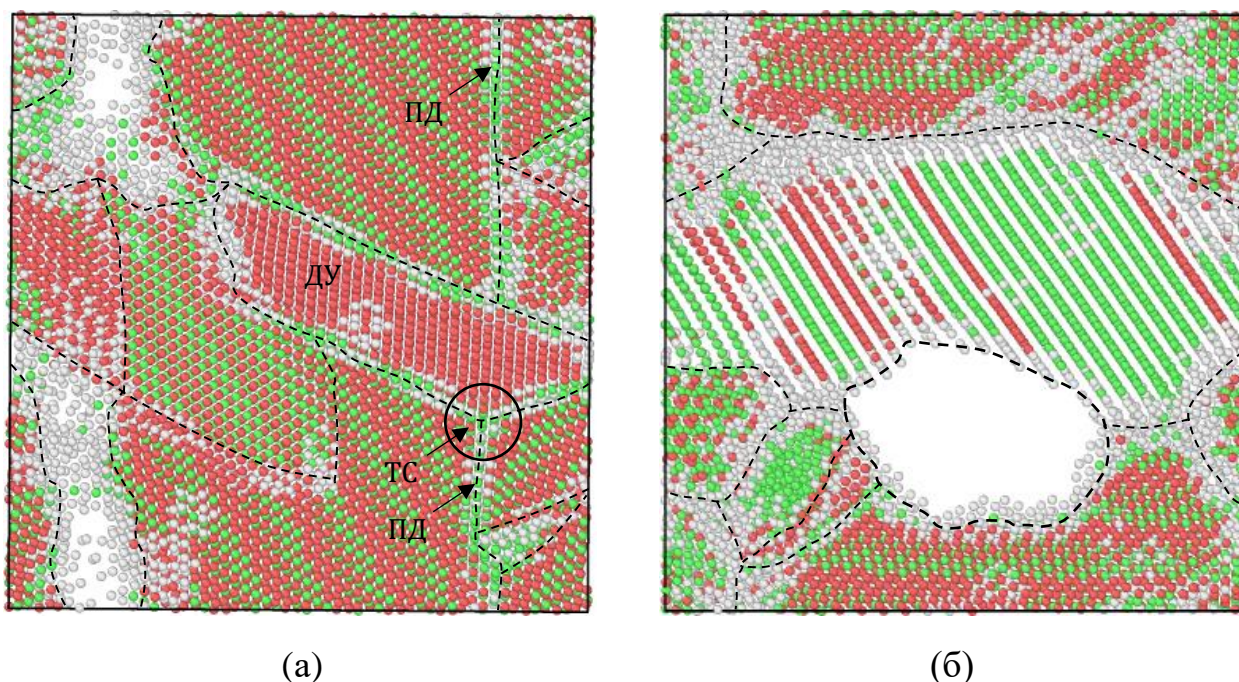


Рис. 3.12. Структура моделируемого кристалла (плоскость XZY) после прохождения пяти ударных волн, генерируемых через 3 000 вычислительных шагов: (а) $n = 15\%$, $T = 1200$ К; (б) $n = 20\%$, $T = 300$ К.

Цветовая визуализация выполнена аналогично рисунку 3.7.

Дополнительно обозначен дефект упаковки (ДУ), плоскость двойникования (ПД), тройной стык (ТС)

Для количественной оценки растворенного свободного объема в межзеренных границах можно воспользоваться методом поверхностной сетки [106-108], основанном на тетраэдризации Делоне. В данном методе геометрическому множеству точек сопоставляется множество тетраэдров, заполняющих пространство между точками, при условии, что они располагаются на определенном расстоянии (в нашем случае половина кратчайшего расстояния между атомами). После этого выполняется расчет объема полученной фигуры.

Вычисления с помощью описанного выше метода показали, что, например, после прохождения по расчетной ячейке, содержащей 15%-ю концентрацию вакансий, пяти ударных волн, генерируемых с интервалом 3000 вычислительных шагов, при температуре 600 К, 900 К и 1200 К содержание растворенного свободного объема уменьшается на 3.74%, 4.69% и 6.73% соответственно.

Проведенное исследование показало, что ударные послекаскадные волны, генерируемые в твердом теле, содержащем обедненную зону, могут оказывать значительное влияние на процессы структурной перестройки вакансионных скоплений. Под воздействием волн уменьшается число образуемых тетраэдров дефектов упаковки, снижается доля атомов, принадлежащих ГПУ-фазе, а также наблюдается формирование двойников и тройных стыков границ зерен. Кроме того, прохождение волн по формирующейся поликристаллической структуре способствует понижению доли растворенного на межзеренных границах избыточного свободного объема. Как правило, под воздействием волн свободный объем локализуется в виде нанопор. Механизмом такого перераспределения является инициация перескоков вакансий при прохождении фронта сжатия волны и их последующая агрегатизация.

4. СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОПОР В КРИСТАЛЛЕ ПРИ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Как уже говорилось ранее, радиационное воздействие на твердые тела сопровождается интенсивным дефектообразованием. Системы первичных радиационных дефектов являются нестабильными, и в ходе релаксации структуры образуют различные нанокластеры, в частности нанопоры, присутствие которых в материале может оказывать значительное влияние на его функциональные характеристики. Одной из актуальных задач радиационного материаловедения является прогнозирование поведения кристаллических тел в условиях интенсивного радиационного воздействия, в частности очень важной является проблема предотвращения радиационного набухания материала. Пористость материала развивается при температурах, достаточных для активации диффузии точечных дефектов и их миграции к естественным стокам.

В условиях эксплуатации материал подвергается различным силовым, вибрационным и температурным нагрузкам. Кроме того, радиационное набухание способствует созданию неоднородных напряжений в конструктивных узлах, что может способствовать выходу их из строя. Наличие внутренних сжимающих и сдвиговых напряжений, достигающих критических значений, способствует залечиванию поры по дислокационному механизму, реализуемому путем срабатывания источника Франка-Рида [109]. Эмиссия дислокационных петель в кристаллах, содержащих поры, наблюдается также и при ударном воздействии на твердое тело [110, 111].

Целью компьютерных экспериментов, результаты которых приведены в данной главе и опубликованы в работах [112-120], является исследование структурных изменений сферических нанопор, происходящих при различном внешнем (температурном и силовом) воздействии на кристалл (на примере золота).

Для создания поры в расчетной ячейке предварительно выделялась сферическая область, центр которой совмещался с центральным узлом моделируемой кристаллической решетки, и затем удалялись все атомы, принадлежащие ей.

4.1. Исследование влияния температуры на структурные изменения сферической поры

На данном этапе методом молекулярной динамики осуществлено исследование влияния температуры расчетной ячейки на структурные трансформации нанопоры. Моделирование проводилось при различных температурах расчетной ячейки: 300, 600, 900 и 1200 К. После установки температуры, система выдерживалась при ней в течение 25 пс моделируемого времени, и затем следовала закалка (многократное обнуление скорости частиц). Полученная после этих действий структура подвергалась структурному анализу.

Расчеты показали, что при 300 К пора сохраняет сферическую форму и значительные структурные изменения не происходят (см. рис. 4.1.а). При 600 К в расчетной ячейке наблюдаются дислокации Ломер-Коттрелла (см. рис. 4.1.б), источником образования которых является поверхность поры. При 900 К наблюдается частичное растворение поры (см. рис. 4.1.в), а при 1200 К анализатор структуры уже не определяет атомы, соответствующие поверхности (см. рис. 4.1.г), что свидетельствует о полном залечивании поры.

Для идентификации дислокационных линий использовался алгоритм DXA, описанный ранее. Визуализация пустот в расчетной ячейке осуществлялась с применением метода альфа-формы Эдельсбруннера и Мюкке, в котором геометрическое множество точек объединяется поверхностной сеткой при помощи тетраэдризации Делоне с последующей процедурой сглаживания. В данном методе идентификация пустоты в объеме осуществляется путем вписывания виртуальной сферы в межчастичное пространство. При расчетах радиус сферы задавался равным межатомному

расстоянию, и, следовательно, непопадание частиц в эту сферу рассматривалось как пустота.

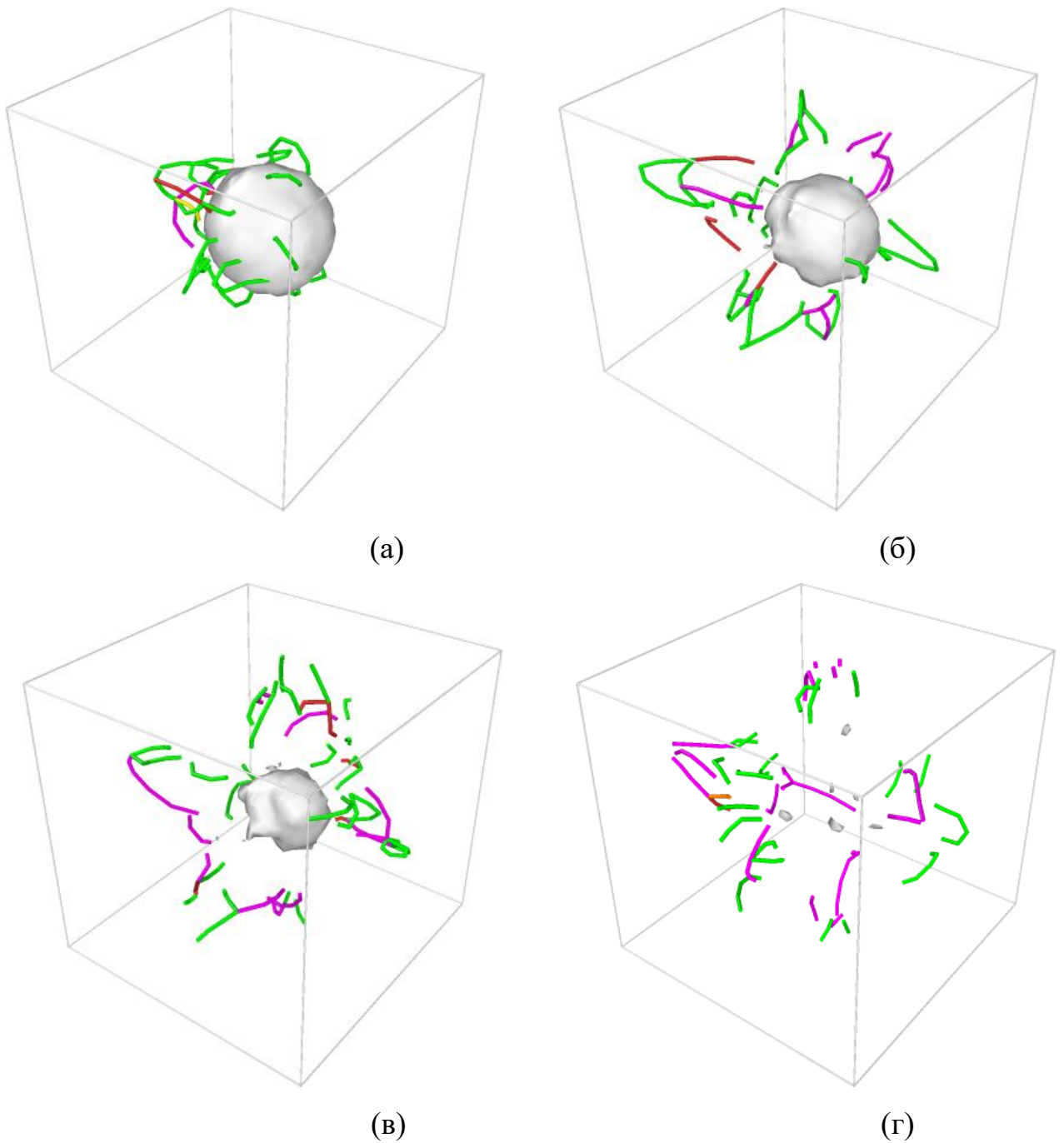


Рис. 4.1. Визуализация поверхности поры и дислокационных линий в расчетной ячейке, содержащей нанопору и выдержанной при 300 (а), 600 (б), 900 (в) и 1200 (г) К в течение 25 пс моделируемого времени

4.2. Исследование влияния деформации на структурные изменения поры

Перейдем к исследованию расчетных ячеек, подверженных всесторонней деформации. Для создания деформации осуществлялось изменение параметра решетки, и, как следствие, атомы располагались на расстоянии, отличном от равновесного.

Известно, что растягивающие напряжения стабилизируют пору, а сжимающие напряжения, наоборот, способствуют ее схлопыванию. Проведенное исследование показало, что при растяжении нанопора остается стабильной, и значительные структурные изменения не наблюдаются, за исключением увеличения площади поверхности поры (при деформации 6% площадь увеличивается почти в 5 раз по сравнению с недеформированной расчетной ячейкой) (см. рис. 4.2).

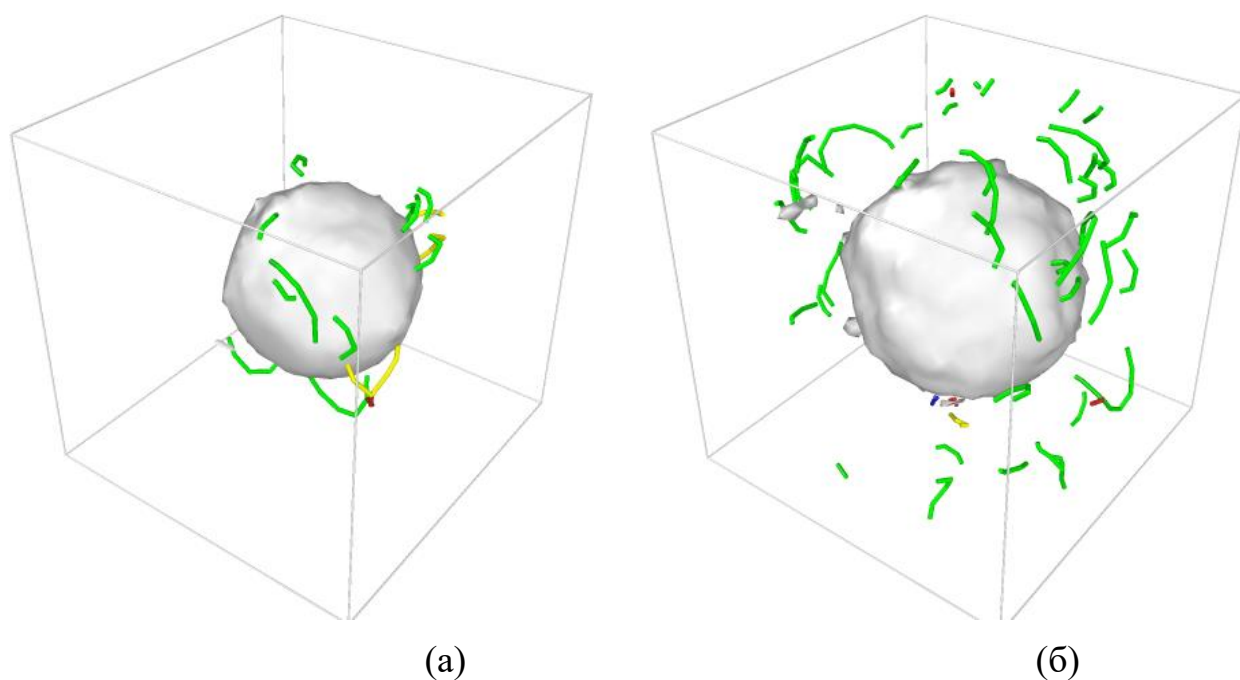


Рис. 4.2. Визуализация поверхности поры и дислокационных линий в расчетной ячейке, содержащей нанопору, выдержанной при 300 К в течение 25 пс моделируемого времени. Величина деформации $\varepsilon = 3\%$ (а) и 6% (б)

При сжатии расчетной ячейки пора трансформируется в несколько совмещенных тетраэдров дефектов упаковки (см. рис. 4.3). При этом если в случае величины деформации $\varepsilon = -1\%$ пора частично сохраняется (см. рис. 4.3.a), то уже при $\varepsilon = -2\%$ она схлопывается (см. рис. 4.3.б).

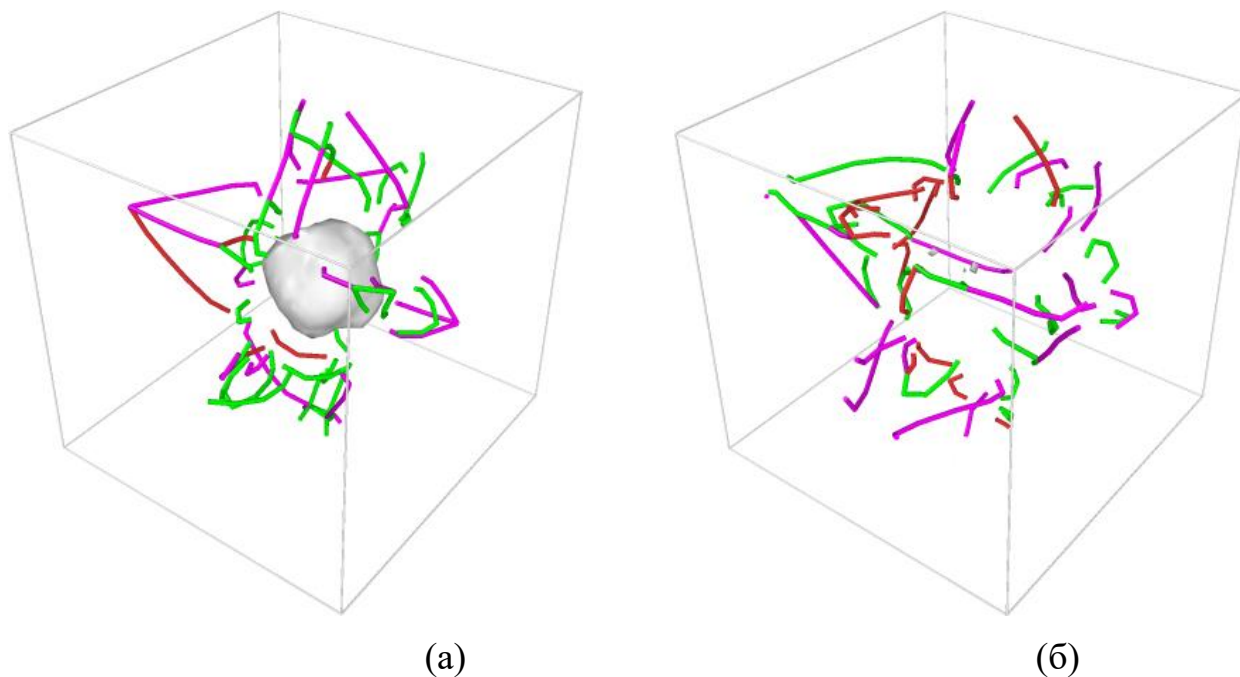


Рис. 4.3. Визуализация поверхности поры и дислокационных линий в расчетной ячейке, содержащей нанопору, выдержанной при 300 К в течение 25 пс моделируемого времени. Величина деформации $\varepsilon = -1\%$ (a) и -2% (б)

В нашем случае тетраэдры являются частично недостроенными. Для их идентификации выполнялась оценка доли атомов с локальным ГПУ-окружением при помощи метода Экленда-Джонса. Последующая их визуализация позволяет выявить ТДУ. Распределение атомов с ГПУ-окружением представлено на рисунке 4.4.

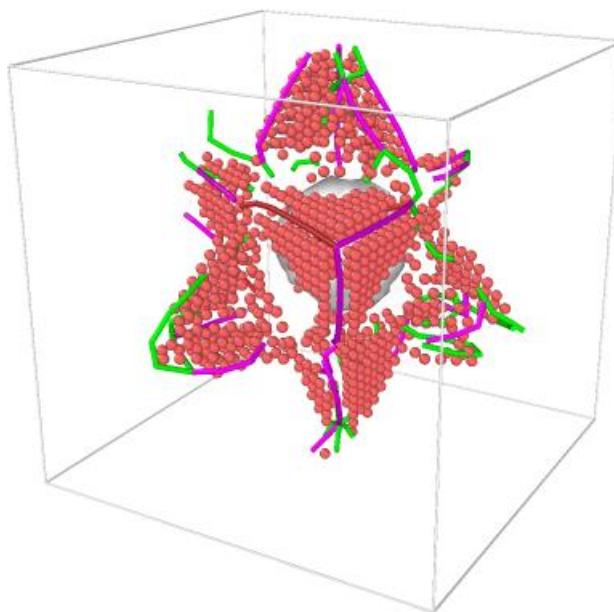


Рис. 4.4. Распределение атомов, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке, после структурной релаксации расчетной ячейки при 300 К в течение 25 пс моделируемого времени. Величина деформации $\varepsilon = -1 \%$

На следующем этапе исследования напряженное состояние в расчетной ячейке, с отличной от нуля девиаторной компонентой тензора напряжений τ , достигалось путем сдвигового деформирования. Среди множества возможных способов реализации сдвиговой деформации был выбран сдвиг параллельно плоскости (111) вдоль направления $[1\bar{1}0]$. Геометрия расчетной ячейки при этом поддерживалась с помощью комбинации жестких и периодических граничных условий. После создания напряженного состояния следовала процедура релаксации моделируемой системы при 300 К, и полученная таким образом система частиц использовалась в последующем исследовании.

Рассмотрим процесс деформирования расчетной ячейки, не содержащей дефекты кристаллической структуры. Расчет касательных напряжений при различных углах сдвига (см. рис. 4.5) показал, что начиная с некоторого значения угла наблюдается понижение напряжений, что обусловлено перестройкой структуры моделируемого кристалла, являющейся ответом на внешнее воздействие.

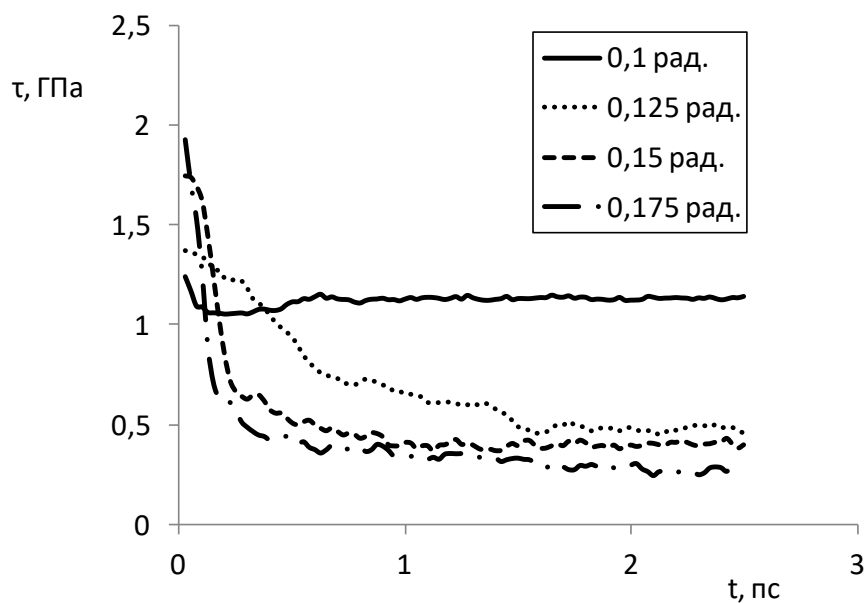


Рис. 4.5. Изменение касательных напряжений в расчетной ячейке в течение процесса релаксации при различных углах сдвига

Структурная перестройка моделируемого кристалла сопровождается образованием дислокационных петель. Частичные дислокации Шокли, идентифицируемые в моделируемой структуре с помощью алгоритма ДХА, представлены на рисунке 4.6.

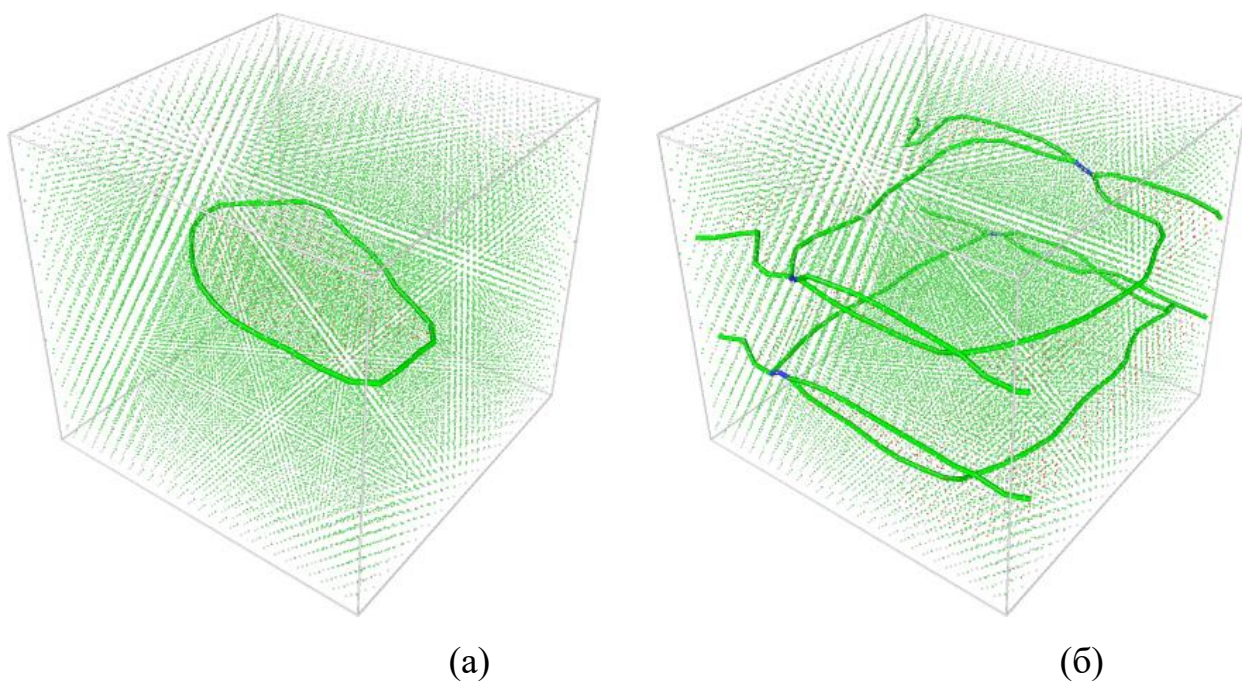


Рис. 4.6. Визуализация дислокационных линий через 0,175 (а) и 1,325 (б) пс моделируемого времени (угол сдвига 0,125 рад)

Для сравнения на рисунке 4.7 приведены дислокационные линии, наблюдаемые в моделируемой структуре при большем угле сдвига. В данном случае в процессе релаксации структуры уменьшается число идентифицируемых частичных дислокаций Шокли и увеличивается доля полных дислокаций (выделены синим цветом).

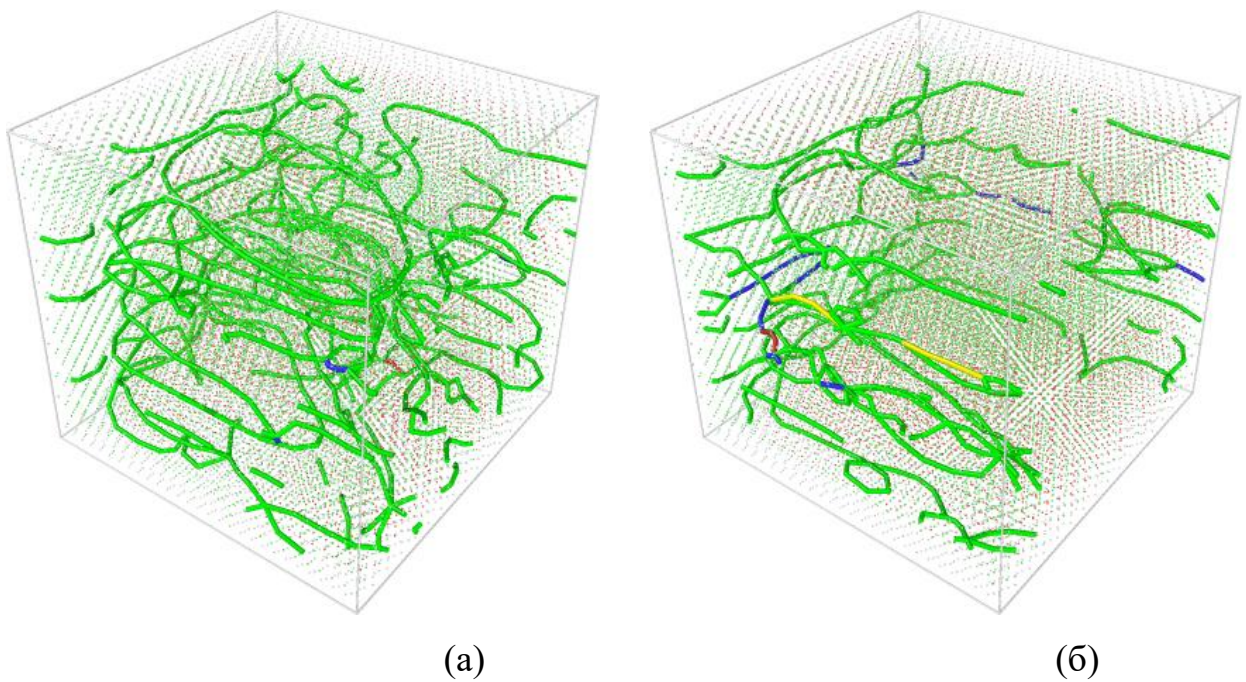


Рис. 4.7. Визуализация дислокационных линий через 0.175 (а) и 1.325 (б) пс моделируемого времени (угол сдвига 0.175 рад)

На рисунке 4.8 представлено изменение длин частичных дислокаций Шокли в процессе моделирования при различном угле сдвига. Как следует из приведенного графика, скорость роста дислокационных петель растет при увеличении угла сдвига.

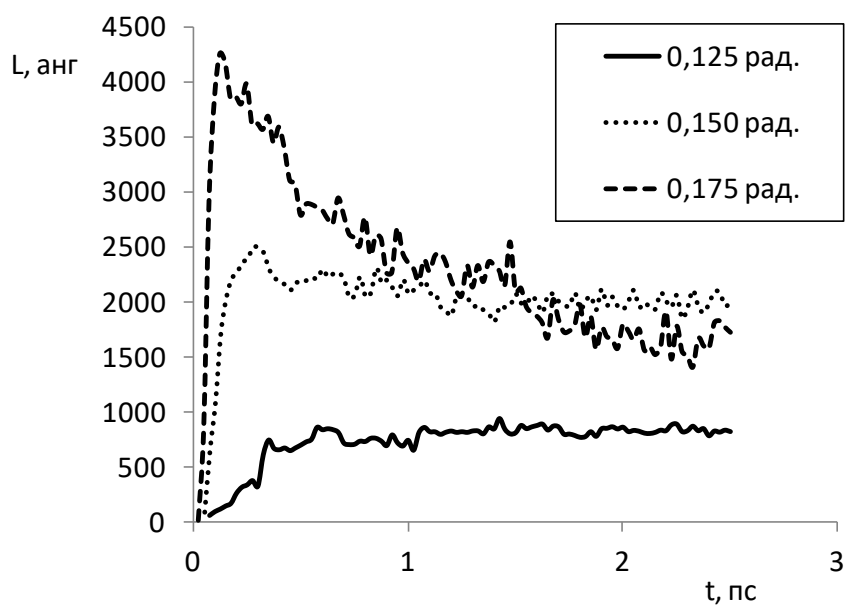


Рис. 4.8. Изменение длины частичных дислокаций Шокли в расчетной ячейке в течение процесса релаксации при различных углах сдвига

На следующем этапе исследованы процессы образования дислокационных петель в кристалле, начальная конфигурация которого содержит сферическую нанопору радиусом 8 Å. Также был выполнен расчет сдвиговых напряжений при различном угле сдвига (см. рис. 4.9).

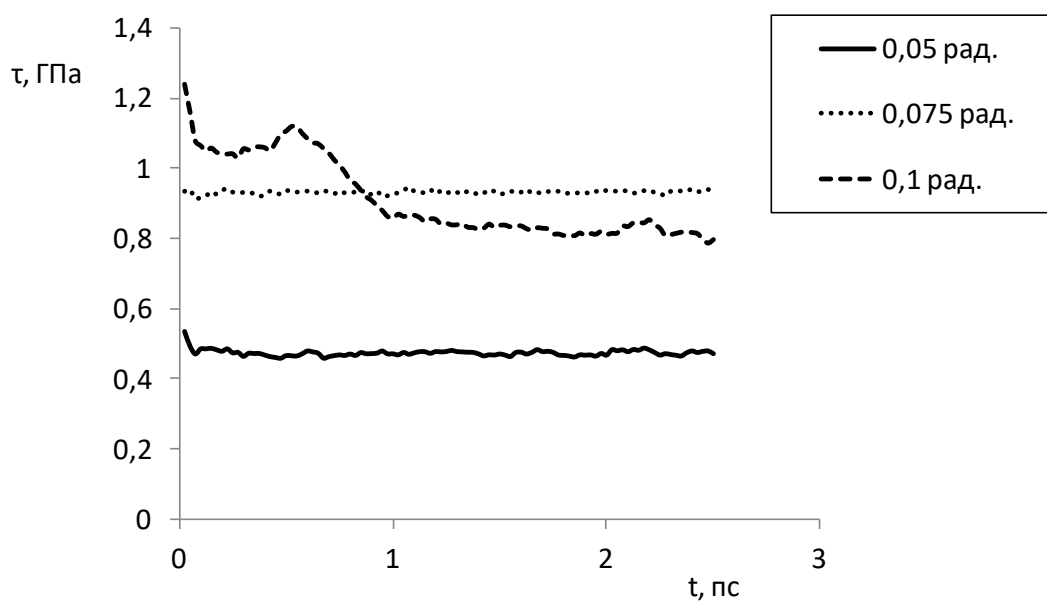


Рис. 4.9. Изменение касательных напряжений в расчетной ячейке, содержащей пору, в течение процесса релаксации при различных углах сдвига

Расчет показал, что в случае создания поры образование дислокаций наблюдается при меньшем угле сдвига. В данном случае поверхность поры является источником дислокационных петель, зарождающихся попарно (см. рис. 4.10).

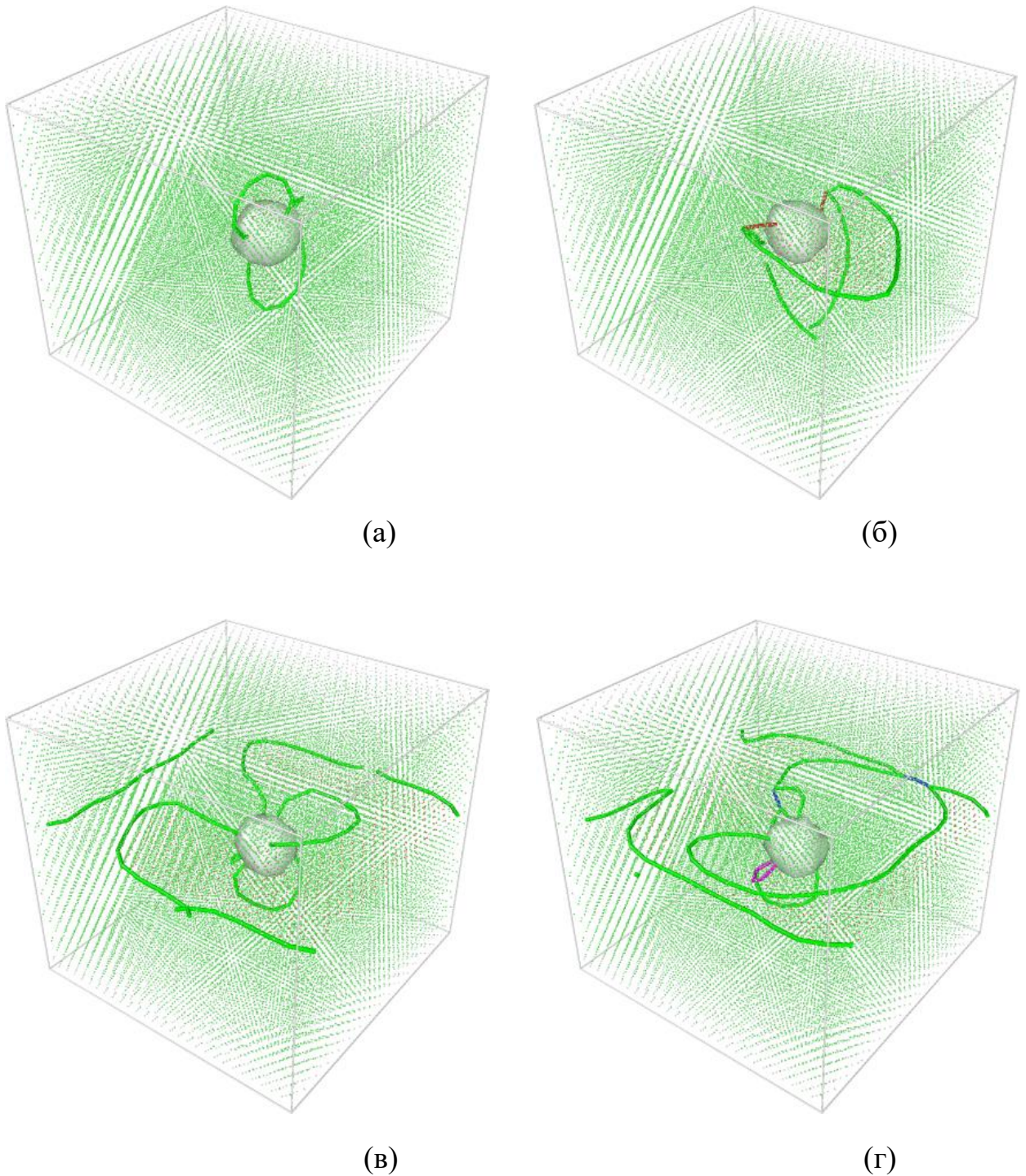


Рис.4.10. Визуализация дислокационных линий через 0.225 (а), 0.625 (б), 0.9 (в) и 1.85 (г) пс моделируемого времени (угол сдвига 0.1 рад)

Зарождение дислокационной петли реализуется по следующему механизму. Под воздействием касательных напряжений у поверхности поры формируются области напряжений, в которых наблюдается локальное искажение кристаллической решетки. Далее в этих областях осуществляется смещение группы атомов (в плоскости плотнейшей упаковки) по направлению к поре, с зарождением частичной дислокации и формированием дефекта упаковки, который продолжает расти и расширяться, пока не достигнет границы расчетной ячейки. Описанный механизм зарождения дислокационной петли на поверхности поры, предполагающий кооперативный сдвиг группы атомов, согласуется с механизмом, изложенным в работе [121]. Авторы данной работы делают вывод, что для ГЦК металлов испускание порами дислокаций путем наноскопического идеального сдвига является энергетически выгодным процессом.

На следующем этапе было проведено исследование процесса образования дислокационных петель при различном радиусе создаваемой поры. Результаты вычислений касательных напряжений для данного эксперимента представлены на рисунке 4.11.

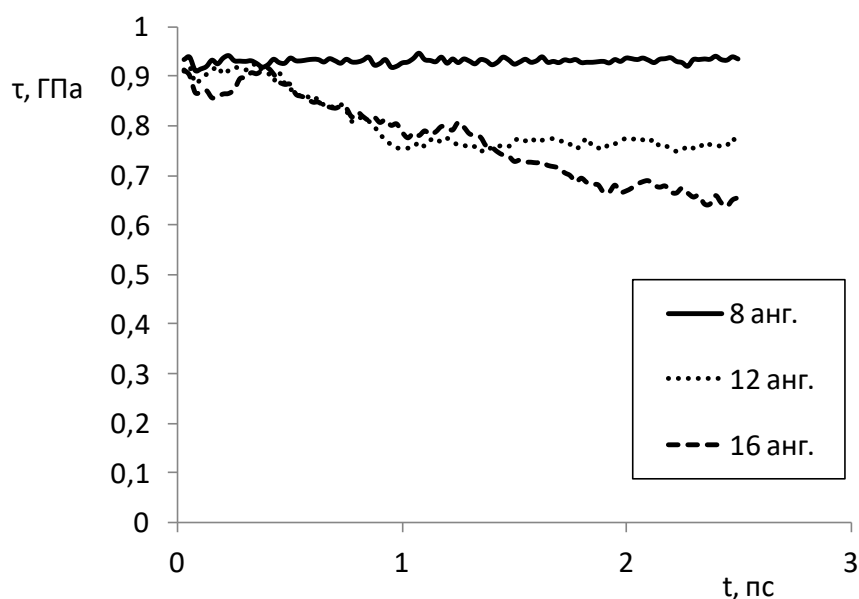


Рис. 4.11. Изменение касательных напряжений в расчетной ячейке, содержащей пору различного радиуса, в течение процесса релаксации при угле сдвига 0.075 рад.

Как следует из графиков, представленных на рисунке 4.11, создание поры большего радиуса приводит к большему снижению касательных напряжений в ходе структурной релаксации системы. Кроме того, пора большего радиуса является источником образования более протяженных дислокационных линий (см. рис. 4.12).

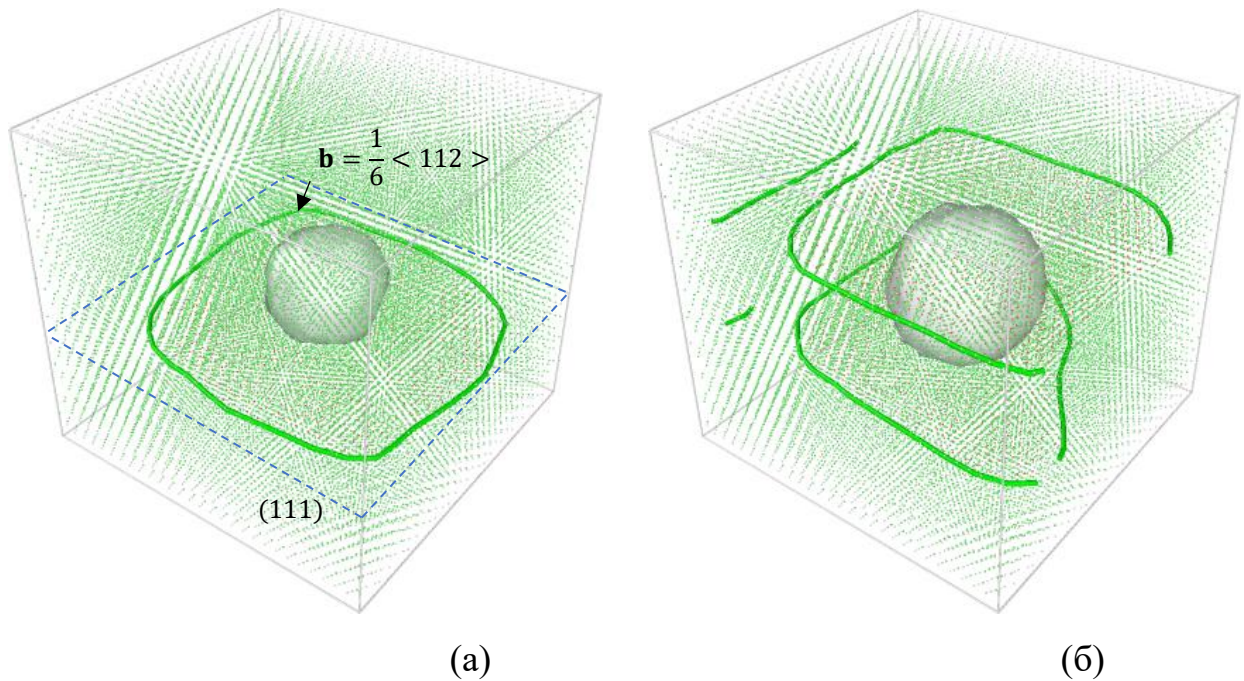


Рис. 4.12. Визуализация дислокационных линий через 2.5 пс модельного времени в расчетной ячейке, содержащей пору с радиусом 12 (а) и 16 (б) Å (угол сдвига 0.075 рад)

На рисунке 4.13 представлен график зависимости длины дислокационных петель от времени моделирования для пор разных радиусов. Как следует из данного рисунка, скорость роста дислокационной петли не зависит от размеров рассматриваемых пор.

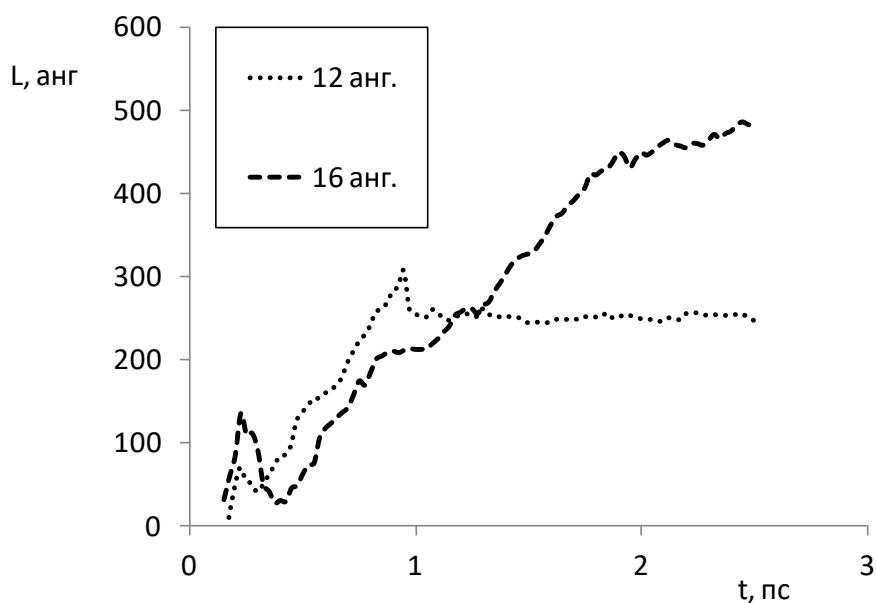


Рис. 4.13. Изменение длины дислокационных петель в расчетной ячейке, содержащей пору различного радиуса, в течение процесса релаксации при угле сдвига 0.075 рад.

4.3. Исследование влияния ударных волн на структурные изменения поры

В рамках построенной модели для зарождения дислокационных петель при температуре расчетной ячейки 300 К необходимо создаваемое касательное напряжение величиной $\tau \approx 1$ ГПа, достигаемое за счет сдвиговой деформации. Очевидно, что при недостаточной деформации зарождение петли станет возможным, если в расчетной ячейке создать дополнительные источники касательных напряжений. Так в работе [122] было показано, что при генерации в кристалле ударной волны и формированием после этого волны разгрузки касательные напряжения достигают значений, достаточных для смещения краевой дислокации. Поэтому было проведено исследование влияния ударных волн, создаваемых в расчетной ячейке, подвергнутой сдвигу, на процесс зарождения дислокационных петель при наличии поры.

Проведенное исследование показало, что при встрече фронта волны с порой от нее отщепляется группа вакансий, которые в дальнейшем перестраиваются в тетраэдр дефектов упаковки, чему способствует

используемый в построенной модели металл (золото), обладающий низкой энергией образования дефекта упаковки. При этом наблюдался процесс зарождения петель на поверхности поры (рис. 4.14.а), часть из которых после угасания возмущений, вызванных сгенерированной волной, стягивалась обратно к поре, но общая протяженность дислокационных линий продолжала увеличиваться до некоторой равновесной длины (рис. 4.14.б) при которой сила линейного натяжения петли уравнивается силой Пича-Келлера, обусловленной внешним напряжением.

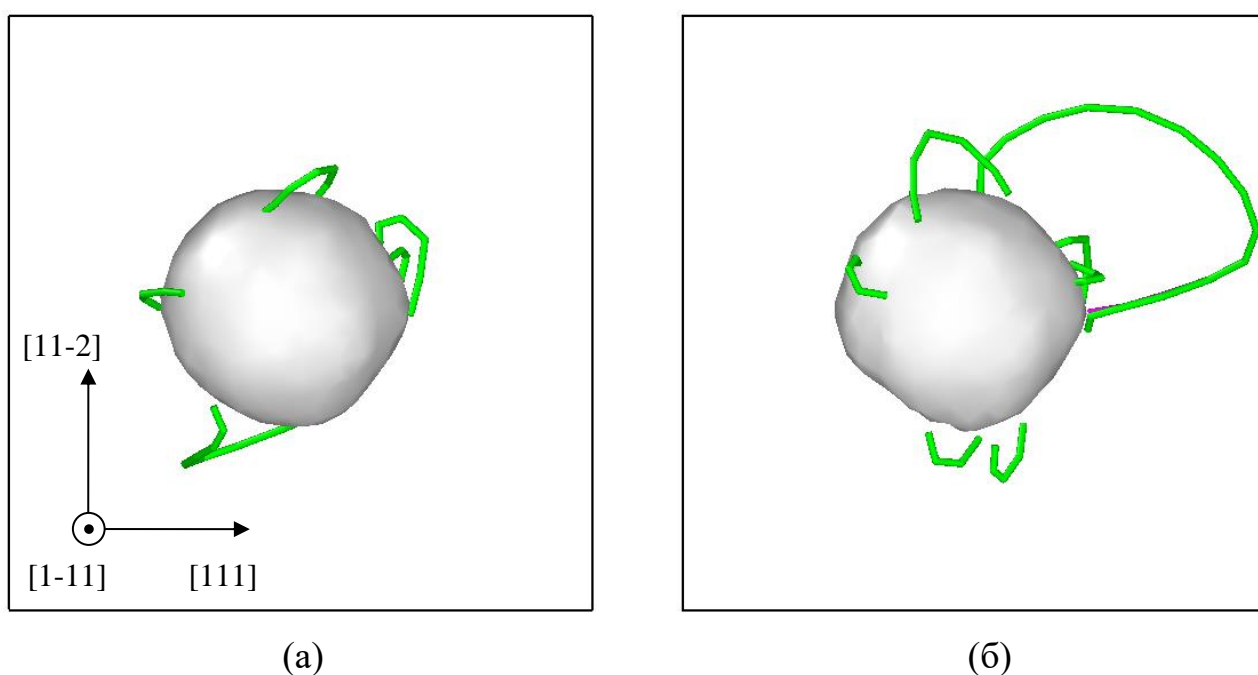
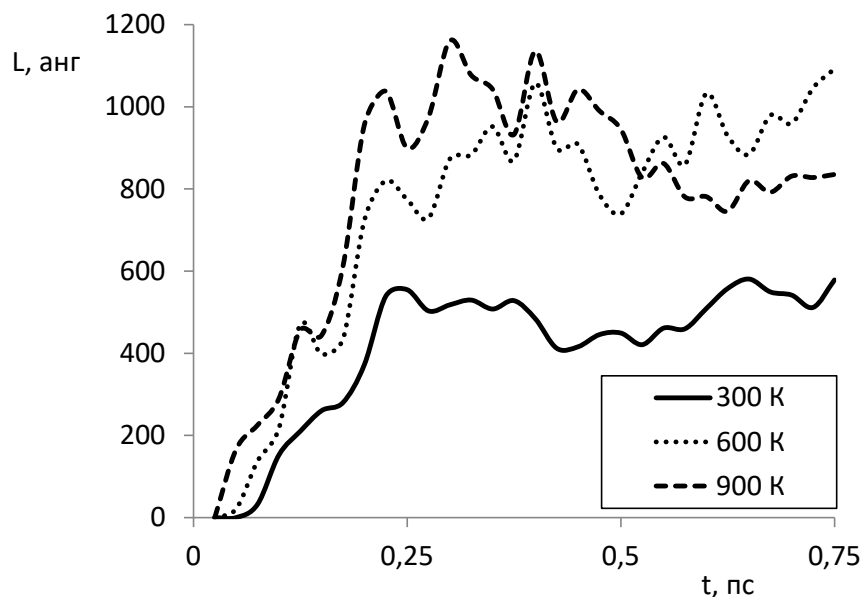


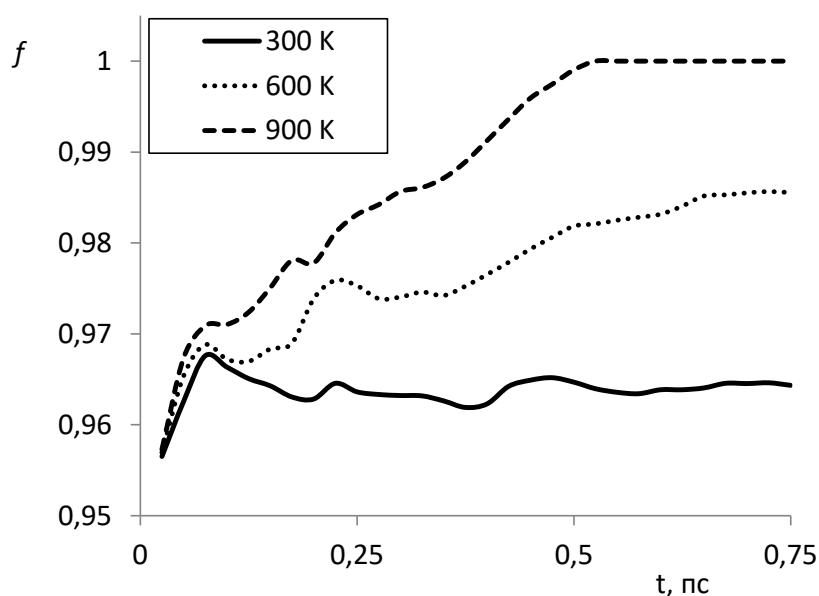
Рис. 4.14. Визуализация дислокационных линий через 0.25 (а) и 0.5 (б) по модельного времени в расчетной ячейке, содержащей пору с радиусом 16 Å, в случае генерации ударной волны (угол сдвига 0.06 рад, температура расчетной ячейки 300 К)

Исследование показало, что повышение температуры расчетной ячейки приводит к увеличению общей протяженности генерируемых дислокационных петель (см. рис. 4.15.а) и уменьшению объема поры за счет выноса «пустоты» [123]. Для того чтобы охарактеризовать процесс структурных преобразований был рассчитан объем поры, меняющийся в ходе моделирования, с помощью алгоритма, изложенного в [106]. Но на наш взгляд более наглядной является

такая величина как удельный объем «фазы вещества», представляющий собой отношение объема, занятого частицами системы, к общему объему расчетной ячейки. Аналогичная терминология используется, например, в физике спекания («фаза вещества», «фаза пустоты») или при исследовании металлических стекол [124, 125]. Результаты вычислений приведены на рисунке 4.15.б.



(a)



(б)

Рис. 4.15. Изменение длины дислокационных петель (а) и удельного объема «фазы вещества» (б) в расчетной ячейке, содержащей пору с радиусом 16 анг., в случае генерации ударной волны (угол сдвига 0.06 рад, температура расчетной ячейки 300 К)

Как следует из рисунка 4.15 длина дислокационных петель достигает некоторого максимума, а затем с небольшими отклонениями остается постоянной. Изменение удельного объема «фазы вещества» происходит более плавно, увеличиваясь постепенно. При температуре расчетной ячейки 900 К наблюдается полное схлопывание поры ($f = 1$). При этом если в начале моделирования общая протяженность дислокационных петель превышает результаты, полученные при более низких температурах, то после схлопывания поры она начинает снижаться, что обусловлено процессом аннигиляции петель.

Варьируя направления распространения волны в расчетной ячейке, было установлено, что эмиссия дислокационной петли осуществляется в том случае, если фронт волны пересекает области напряжений у поверхности поры, в которых осуществляется в дальнейшем сдвиг группы атомов. Для того чтобы максимально сконцентрировать воздействие волны на данные области, уменьшалось число граничных атомов, которым присваивалась скорость, и генерировалось две волны, бегущие навстречу друг другу от противоположных границ расчетной ячейки. При таком способе генерирования волны наблюдается одновременное зарождение четырех частичных дислокационных петель, располагающихся симметрично в различных плоскостях (см. рис. 4.16.а). При последующей релаксации моделируемой системы петли стягиваются, а на месте двух областей напряжений у поверхности поры формируются дислокации Ломер-Коттрелла (см. рис. 4.16.б). Как показано в работе [126] подобные дислокации стабилизируют пору.

Распространение ударных волн в различных направлениях может осуществляться при наличии в кристалле нескольких источников их образования, но его модельная реализация приводит к затруднениям при визуализации структуры и интерпретации результатов, поэтому в дальнейшем не рассматривается.

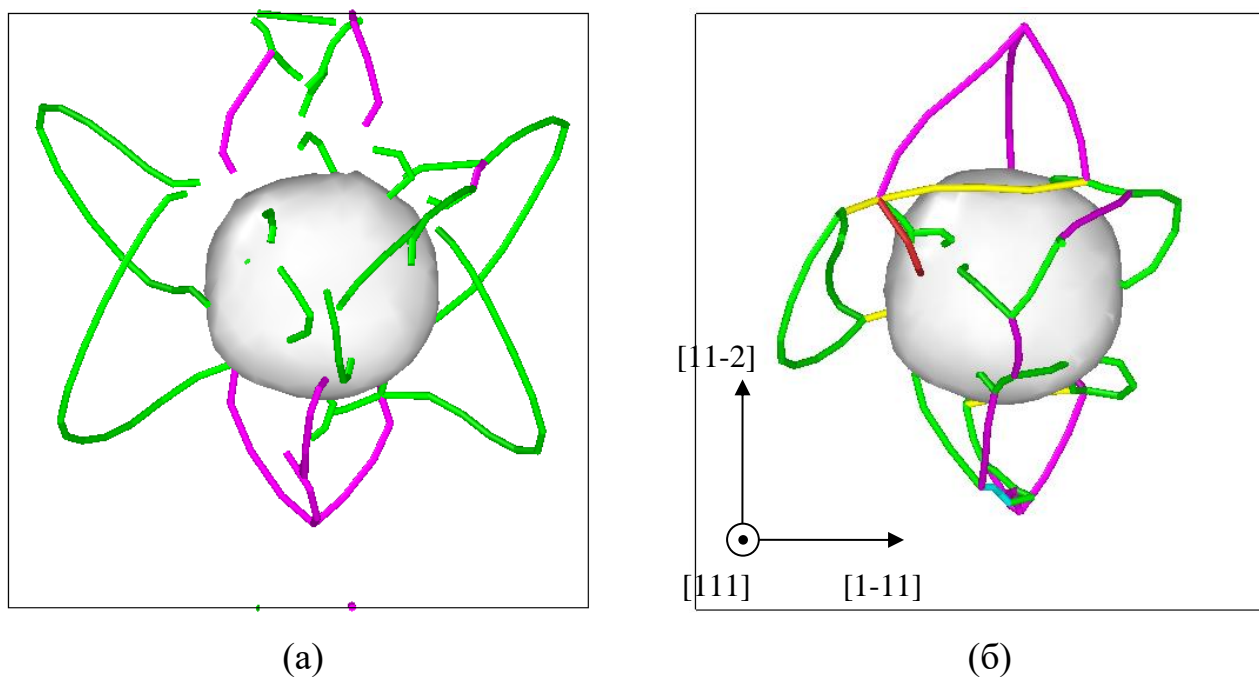


Рис. 4.16. Визуализация частичных дислокационных петель (а), образование которых осуществляется после прохождения ударной волны, и дислокаций Ломер-Коттрелла (б), сформировавшихся в процессе релаксации структуры (угол сдвига 0.06 рад, температура расчетной ячейки 600 К)

Проведенное исследование показало, что при сдвиговой деформации у поверхности поры образуются две области повышенного напряжения, которые являются источниками для формирования дислокационных петель. Подобная перестройка дефектной структуры моделируемой системы является энергетически выгодной. В качестве механизма дислокационной эмиссии рассматривается кооперативный сдвиг группы атомов, что соответствует литературным источникам. При недостаточной величине касательных напряжений эмиссию дислокационных петель и дислокаций Ломер-Коттрелла может инициировать ударная волна. Одним из необходимых условий для образования устойчивой дислокационной петли является воздействие фронта распространяющейся волны на области повышенного напряжения у поверхности поры.

4.4. Исследование влияния внешнего силового воздействия на ансамбль пор

Целью моделирования, результаты которого представлены в данном разделе, являлось установление механизмов залечивания ансамбля пор, находящегося в деформированном кристалле, под воздействием ударных волн.

Исследование проводилось на расчетной ячейке, содержащей две поры радиусом $4a_0$ ($\approx 16 \text{ \AA}$), где a_0 – равновесный параметр решетки, подверженной сдвиговой деформации параллельно кристаллографической плоскости (111) вдоль направления $[\bar{1}\bar{1}0]$. После деформирования расчетной ячейки, ее геометрия сохраняется при помощи дополнительного использования жестких граничных условий, и затем следует процедура отжига при заданной температуре 300 К. Такая температура не позволяет активизироваться диффузионным процессам растворения поры, и, следовательно, позволяет исследовать дислокационный механизм. Выполненные расчеты показали, что касательные напряжения в расчетной ячейке в процессе моделирования начинают понижаться, что свидетельствует о происходящих структурных изменениях, при этом по мере увеличения угла сдвига в течение нескольких пикосекунд модельного времени наблюдается наибольший спад (см. рис. 4.17.a).

Кроме того, дополнительно была подсчитана суммарная длина дислокационных линий, идентифицируемых в расчетной ячейке, что позволило оценить развитие дислокационной структуры при различных углах сдвига (см. рис. 4.17.б).

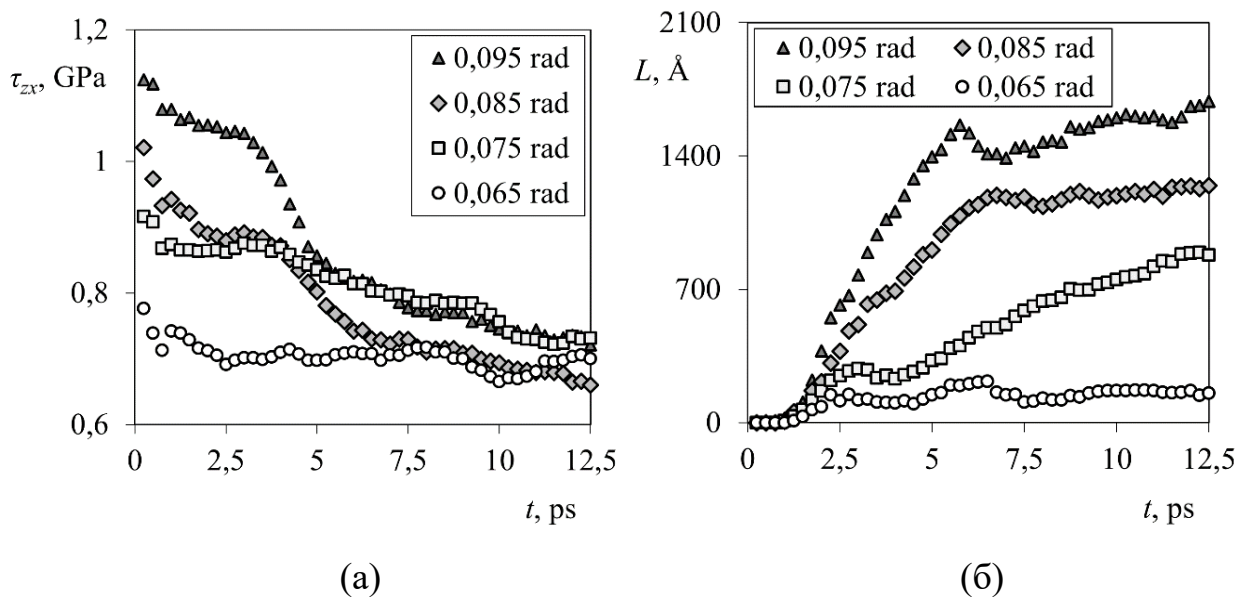


Рис. 4.17. Изменение касательных напряжений и суммарной длины L дислокационных петель в расчетной ячейке в процессе моделирования при различных углах сдвига γ

Визуализация структуры, продемонстрировала образование на порах дислокационных петель сдвига, располагающихся в плоскостях семейства $\{111\}$ (см. рис. 4.18). При построении данного изображения выделялась свободная поверхность в объеме расчетной ячейки, т.е. пора, атомы, локальное окружение которых отлично от ГЦК (дефекты упаковки), и дислокационные линии.

Как следует из рисунка 4.18.б при угле сдвига $\gamma = 0.08$ рад формируется дислокационная петля, примыкающая к обоим порам. Более детальное исследование показало, что в данном случае, петля сдвига, зародившаяся на поверхности одной из пор, постепенно увеличивается в размерах, но при этом, в отличие от других образовавшихся петель, после преодоления критического положения, с точки зрения источника Франка-Рида, не расширяется вокруг места образования, а вытягивается по направлению к поверхности соседней поры (см. рис. 4.19).

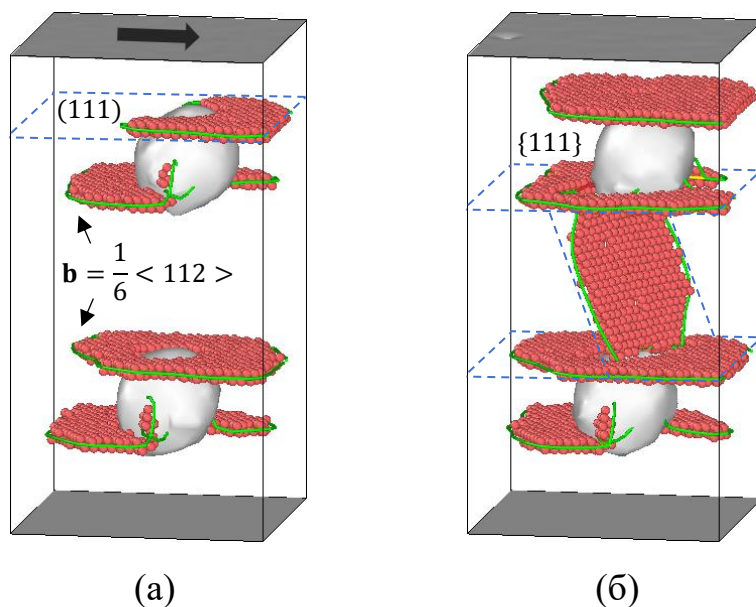


Рис. 4.18. Визуализация дислокационной структуры через 12.5 пс модельного времени при углах сдвига $\gamma = 0.075$ (а) и 0.08 (б) рад. Показаны атомы, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке. Стрелкой обозначено направление сдвига

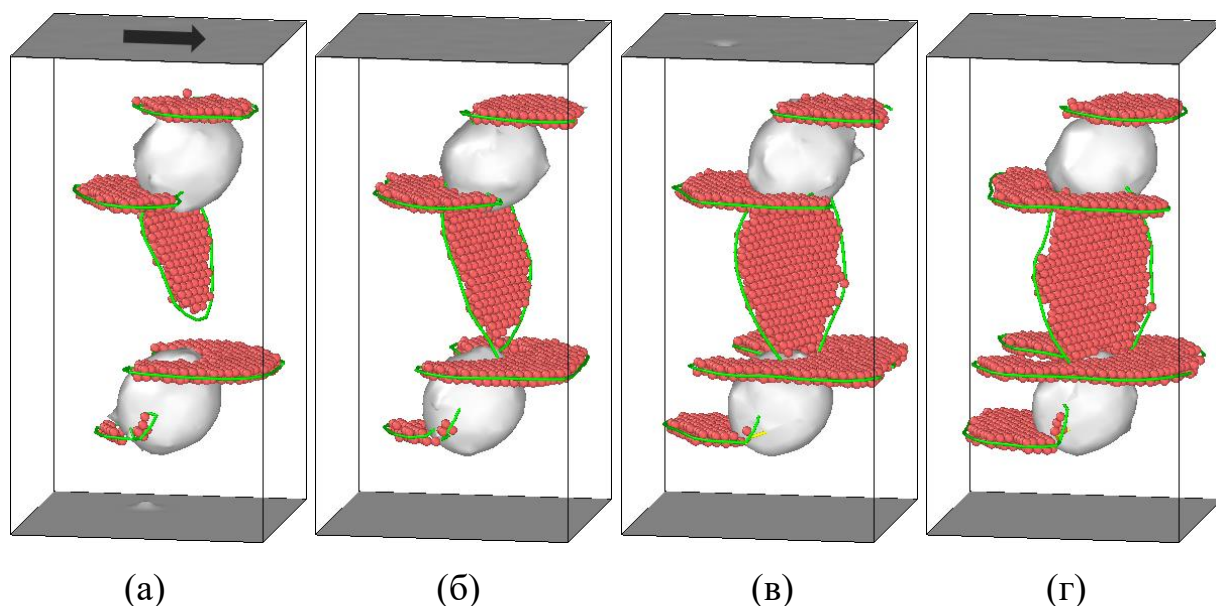


Рис. 4.19. Визуализация дислокационной структуры через 4.5 (а), 5 (б), 6.25 (в) и 7.5 (г) пс модельного времени при угле сдвига $\gamma = 0.08$ рад

Подобный процесс взаимодействия ансамбля пор наблюдается и при других радиусах моделируемых пор (см. рис. 4.20). При этом формируются дислокационные петли, имеющие участки с противоположными знаками винтовой ориентации. Благодаря этому они притягиваются и аннигилируют, образуя единую петлю, которая, продолжая расширяться, пересекает меньшую пору (в данном случае с радиусом $2a_0$).

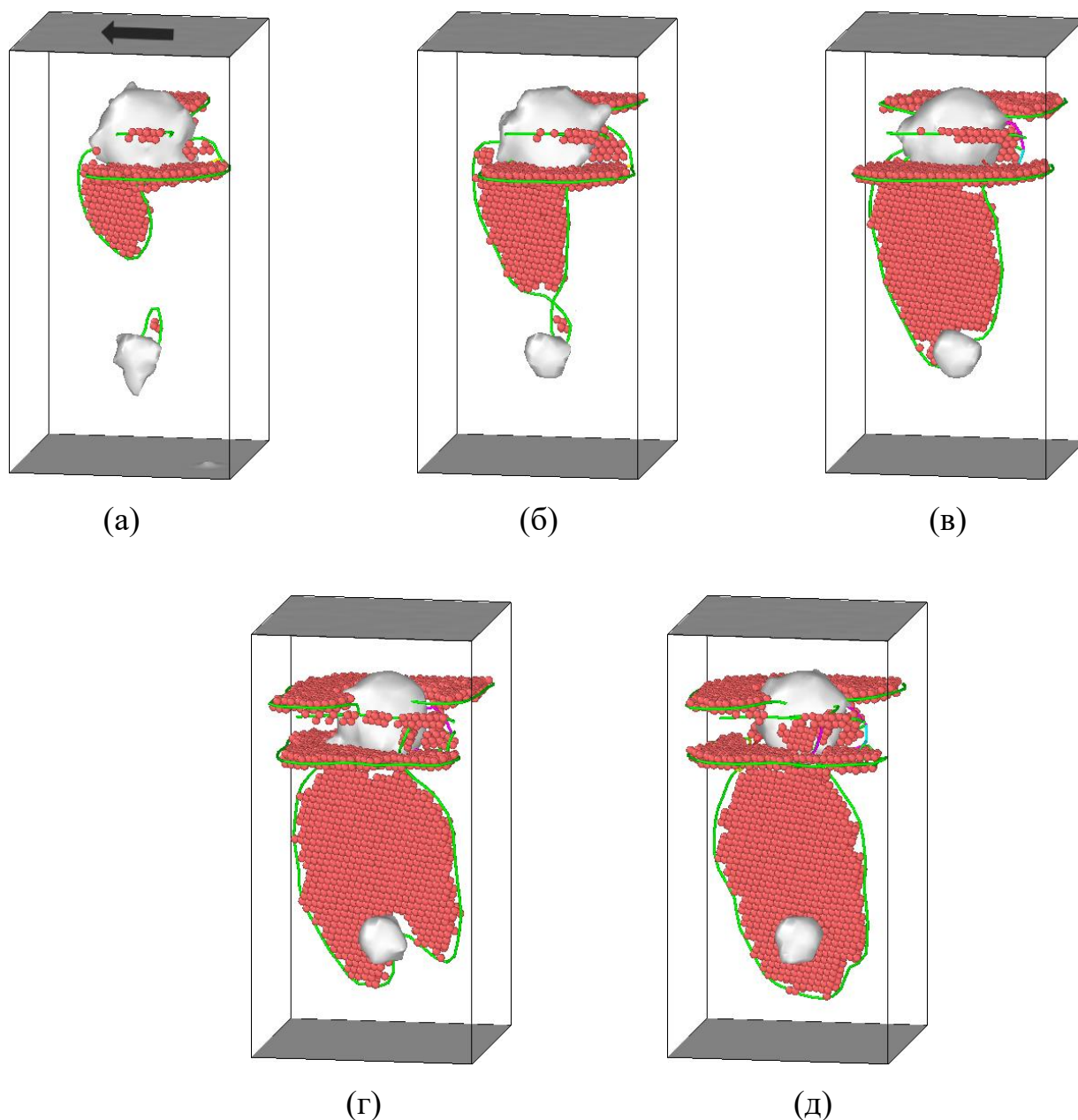


Рис. 4.20. Визуализация дислокационной структуры через 4.75 (а), 5.75 (б), 7.5 (в), 12 (г) и 15 (д) пс модельного времени при угле сдвига $\gamma = 0.085$ рад и порах разного радиуса

Создаваемая сдвиговая деформация и последующее развитие дислокационной структуры приводит к уменьшению свободного объема расчетной ячейки, локализованного в виде пор. Проведенное исследование показало, что при росте угла сдвига γ величина удельного объема «фазы вещества» f также растет (см. рис. 4.21.а).

Увеличивая расстояние между порами, удается добиться ситуации, при которой не формируется петля, их охватывающая. Таким образом, дислокационная структура оказывается менее развитой и величина f при этом оказывается ниже (см. рис. 4.21.б). В данном случае развитие дислокационной структуры оценивается с помощью доли атомов, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке.

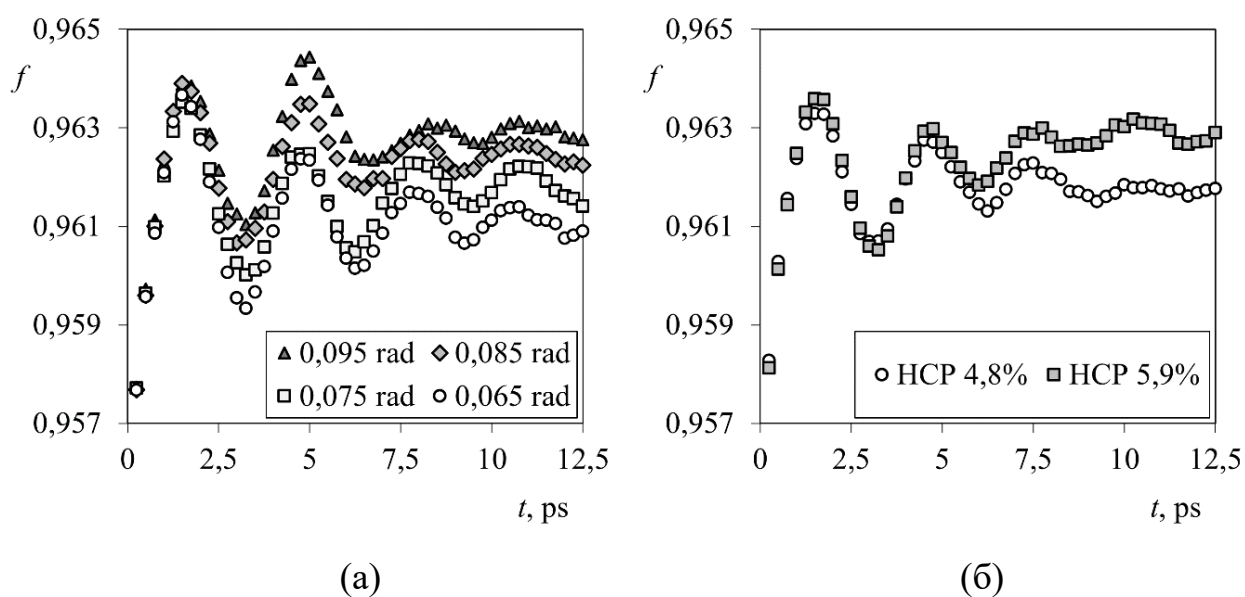


Рис. 4.21. Изменение объемной доли «фазы вещества» f при различных углах сдвига γ (а) и при различном развитии дислокационной структуры (б) (угол сдвига $\gamma = 0.08$ рад)

Следовательно, можно сделать вывод, что формирование единой дислокационной петли, охватывающей ансамбль пор, вносит значительный вклад в процесс уменьшения свободного объема, локализованного в кристалле.

Если дополнительно повышать температуру расчетной ячейки, то активизируются диффузионные процессы и поры начинают растворяться. Для наглядности на рисунке 4.22 приведены результаты вычисления f при различной температуре расчетной ячейки, содержащей ансамбль пор радиусом $4a_0$ и $2a_0$. В данном случае при начальной температуре $T_0 = 600$ К наблюдается залечивание поры с меньшим радиусом, а при $T_0 = 900$ К залечиваются уже обе поры и f становится равной 1.

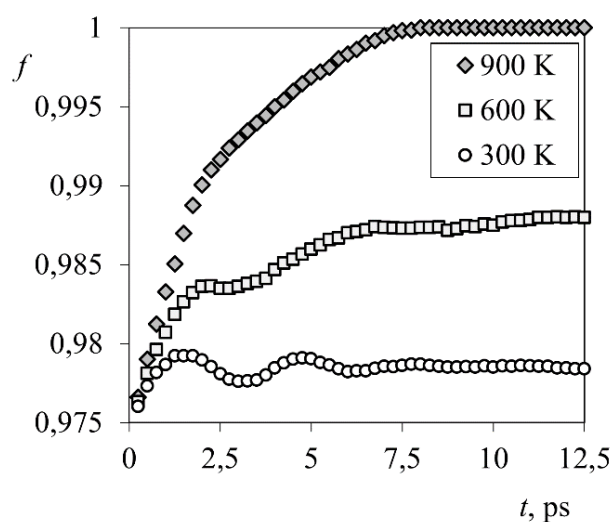


Рис. 4.22. Изменение объемной доли «фазы вещества» f при различной температуре расчетной ячейки (угол сдвига $\gamma = 0.075$ рад, поры различного размера)

Интерес вызывает исследование влияния ударной волны на ансамбль пор. Исследование показало, что создание в расчетной ячейке ударной волны приводит к уменьшению свободного объема за счет схлопывания пор, что достигается благодаря росту касательных напряжений, а не температуры как в случае, рассмотренном на рисунке 4.22 (из-за использования процедуры термостатирования). Так на рисунке 4.23 представлено изменение величины f при различных углах сдвига в случае создания ударной волны. Рост f при углах сдвига 0.075 и 0.085 рад обусловлен схлопыванием малой поры (радиус $2a_0$) через 11 и 6.25 пс соответственно.

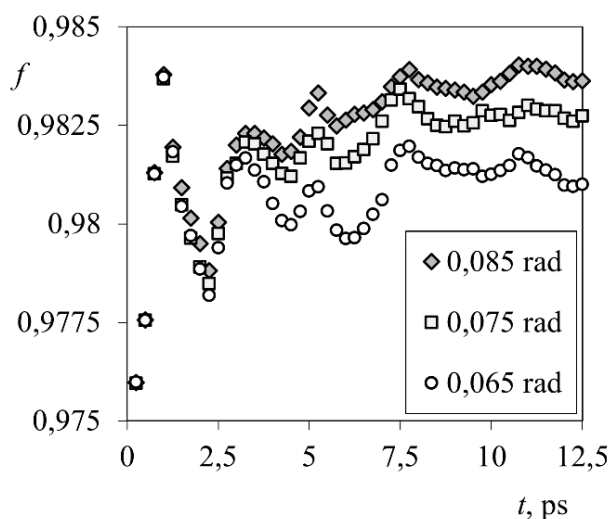


Рис. 4.23. Изменение объемной доли «фазы вещества» f при различных углах сдвига γ в случае генерации в расчетной ячейке ударной волны (поры различного размера)

Структурный анализ расчетной ячейки показал, что волна инициирует более интенсивное развитие дислокационных петель сдвига (см. рис. 4.24.а), по сравнению с ранее проведенными модельными экспериментами (см. для сравнения рис. 4.23). При этом после схлопывания поры в расчетной ячейке продолжают структурные перестройки и формируются дислокации Ломера-Коттрелла (см. рис. 4.24.б).

Таким образом, проведенное исследование показало, что одним из основных механизмов залечивания пор, расположенных в непосредственной близости друг от друга, является формирование охватывающей эти поры дислокационной петли, которая возникает в результате взаимодействия отдельных петель, зарождающихся на поверхностях пор, под воздействием сдвиговой деформации. Кроме того, образование подобной петли под воздействием ударной волны может приводить к схлопыванию отдельных пор даже при температурах, недостаточных для начала активизации диффузионных процессов.

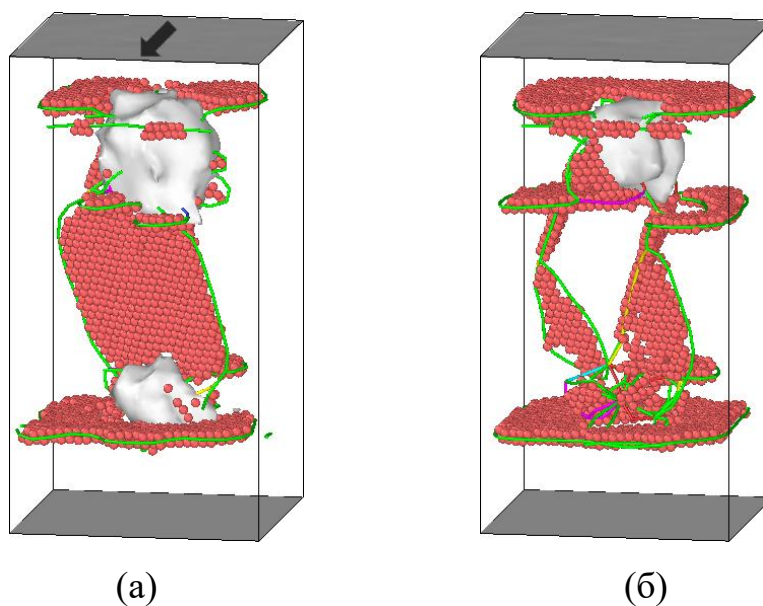


Рис. 4.24. Визуализация дислокационной структуры через 5.5 (а) и 14.25 (б) пс модельного времени при угле сдвига $\gamma = 0.085$ рад и порах разного радиуса в случае генерации в расчетной ячейке ударной волны

Результаты моделирования, приведенные в данной главе, свидетельствуют о том, что ударная волна, генерируемая в расчетной ячейке, способствует делокализации избыточного свободного объема, присутствующего в кристалле изначально в виде сферических нанопор, перераспределяя его в расчетной ячейке.

5. СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ НАНОПОР В КРИСТАЛЛЕ ПРИ ВНЕШНЕМ ВОЗДЕЙСТВИИ

В предыдущей главе рассматривались процессы зарождения дислокаций на поверхности сферических пор. В данной главе рассматриваются поры цилиндрической формы. Подобного рода дефекты могут представлять собой треки, формирующиеся после прохождения через кристалл высокоэнергетических ионов [127], или, например, при выходе на поверхность перегретых замкнутых включений жидкости (маточного раствора) [128]. Также к этой категории можно отнести, по сути, любые протяженные дефекты, создающие свободную поверхность в объеме металла, например, свищи, возникающие при выделении газа в процессе сварки.

Целью компьютерных экспериментов, результаты которых приведены в данной главе и опубликованы в работах [129-132], является установление механизмов залечивания цилиндрических пор под воздействием ударных волн и определения параметров необходимого для этого внешнего воздействия (температурного и силового) на кристалл (на примере золота).

Для создания поры в расчетной ячейке выделялась область в виде цилиндра, ось которого располагалась перпендикулярно плоскости (111), после чего удалялись атомы, принадлежащие ей. Затем следовала процедура структурной релаксации, реализуемая путем запуска вычислительного алгоритма, но с обнулением скоростей атомов, и полученная в итоге структура использовалась для дальнейшего моделирования.

5.1. Исследование влияния температуры на структурные изменения цилиндрической поры

На начальном этапе исследовались структурные изменения, происходящих в кристалле, содержащем поры цилиндрической формы, при температурном воздействии. В ходе исследования было установлено, что

данные дефекты обладают стабильностью в кристаллической решетке. При этом рассматривались поры различного радиуса: 8, 12 и 16 Å. Так на рисунке 5.1 представлены результаты вычислений потенциальной энергии моделируемой системы в течение процесса моделирования.

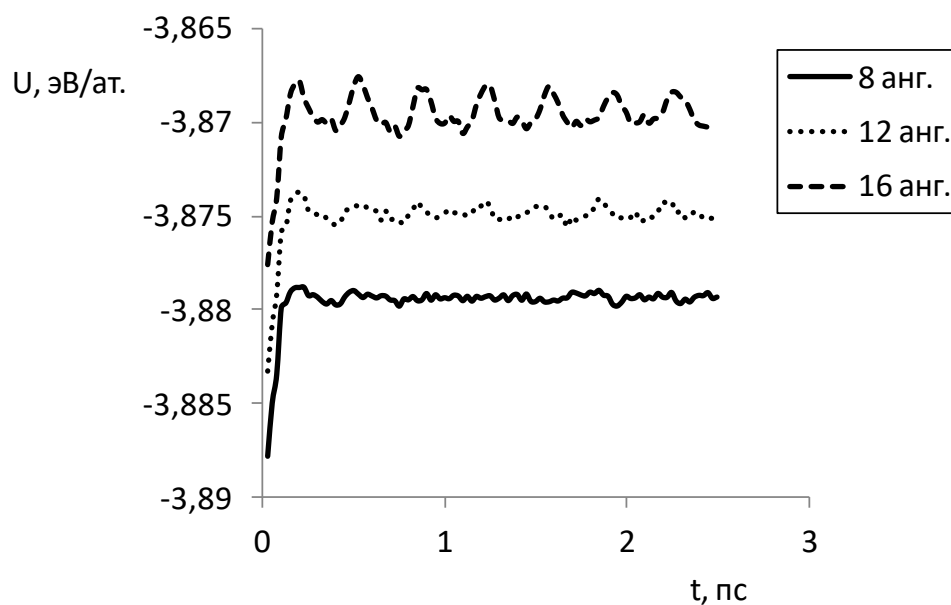


Рис. 5.1. Изменение потенциальной энергии моделируемой системы в течение процесса моделирования при различных радиусах поры. Температура расчетной ячейки 300 К

Как следует из рисунка 5.1 значение энергии колеблется около некоторого равновесного значения, что свидетельствует об отсутствии структурных перестроек в кристалле. Имеются относительно большие флуктуации энергии при радиусе поры 16 анг., которые обусловлены небольшими колебаниями поверхностных атомов поры.

Для того чтобы инициировать структурные преобразования в данном случае необходимо внешнее воздействие. Так, например, в ходе последовательного увеличения температуры моделируемой системы с шагом 100 К было установлено, что при 600 К на поверхности поры начинают зарождаться частичные дислокации Шокли. На рисунке 5.2 представлено

изображение поверхности поры в кристаллической матрице и линии дислокации (16 сегментов, общая длина $\approx 300 \text{ \AA}$).

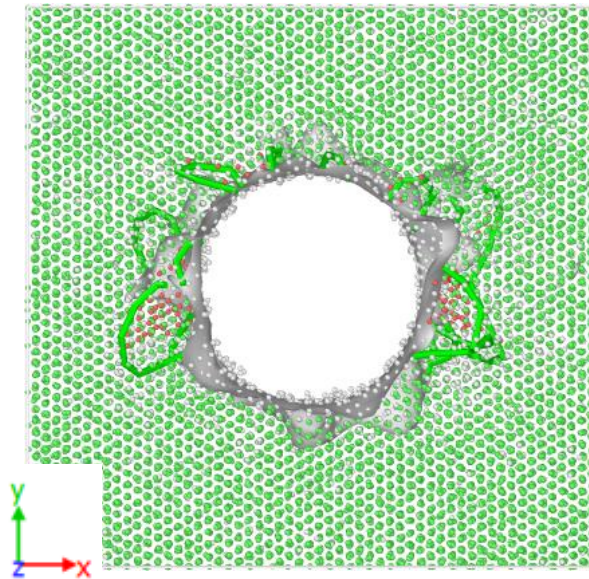


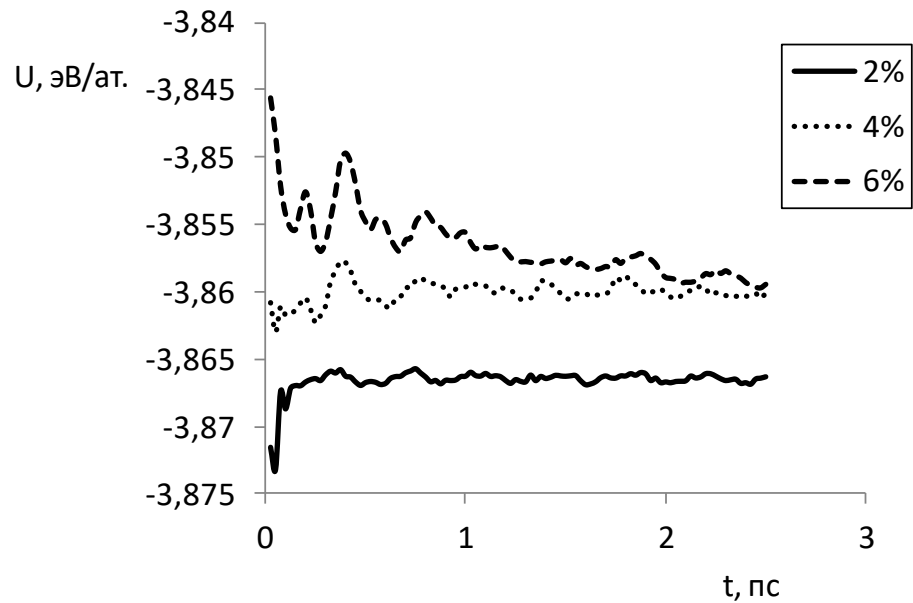
Рис. 5.2. Визуализация поверхности поры ($R = 16 \text{ \AA}$) и дислокационных линий при температуре моделируемой системы 600 К через 6.25 пс с начала симуляции

Таким образом, можно сделать вывод, что рассматриваемые цилиндрические поры являются стабильными дефектами, сохраняющими свою устойчивость при достаточно высоких температурах (температура плавления золота 1337,33 К) и для активации их структурной перестройки требуется внешнее силовое воздействие.

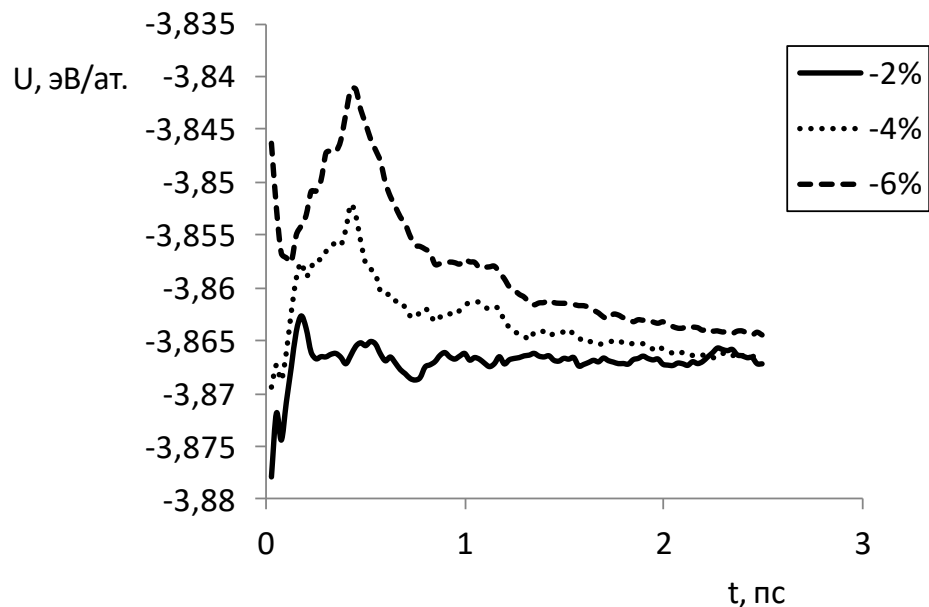
5.2. Исследование влияния деформации на структурные изменения цилиндрической поры

Известно, что растягивающие напряжения стабилизируют пору, а сжимающие напряжения, наоборот, способствуют ее схлопыванию. Поэтому на следующем этапе было проведено исследование влияния одноосной деформации (вдоль оси X) на структурные изменения цилиндрической поры. Деформация создавалась путем изменения равновесного расстояния между атомами вдоль выбранной оси расчетной ячейки.

Расчет потенциальной энергии моделируемой системы показал, что по мере возрастания величины деформации в процессе моделирования наблюдается понижение потенциальной энергии системы (см. рис. 5.3), что свидетельствует о структурных изменениях, являющимися ответом на внешнее воздействие.



(а)



(б)

Рис. 5.3. Изменение потенциальной энергии моделируемой системы в течение процесса моделирования при различной величине одноосной деформации растяжения (а) и сжатия (б)

Структурный анализ показал, что в данном случае наблюдается образование дислокационных петель, источником которых является поверхность поры (см. рис. 5.4). Кроме того, при создании деформации сжатия наблюдается образование дислокаций Ломер-Коттрела.

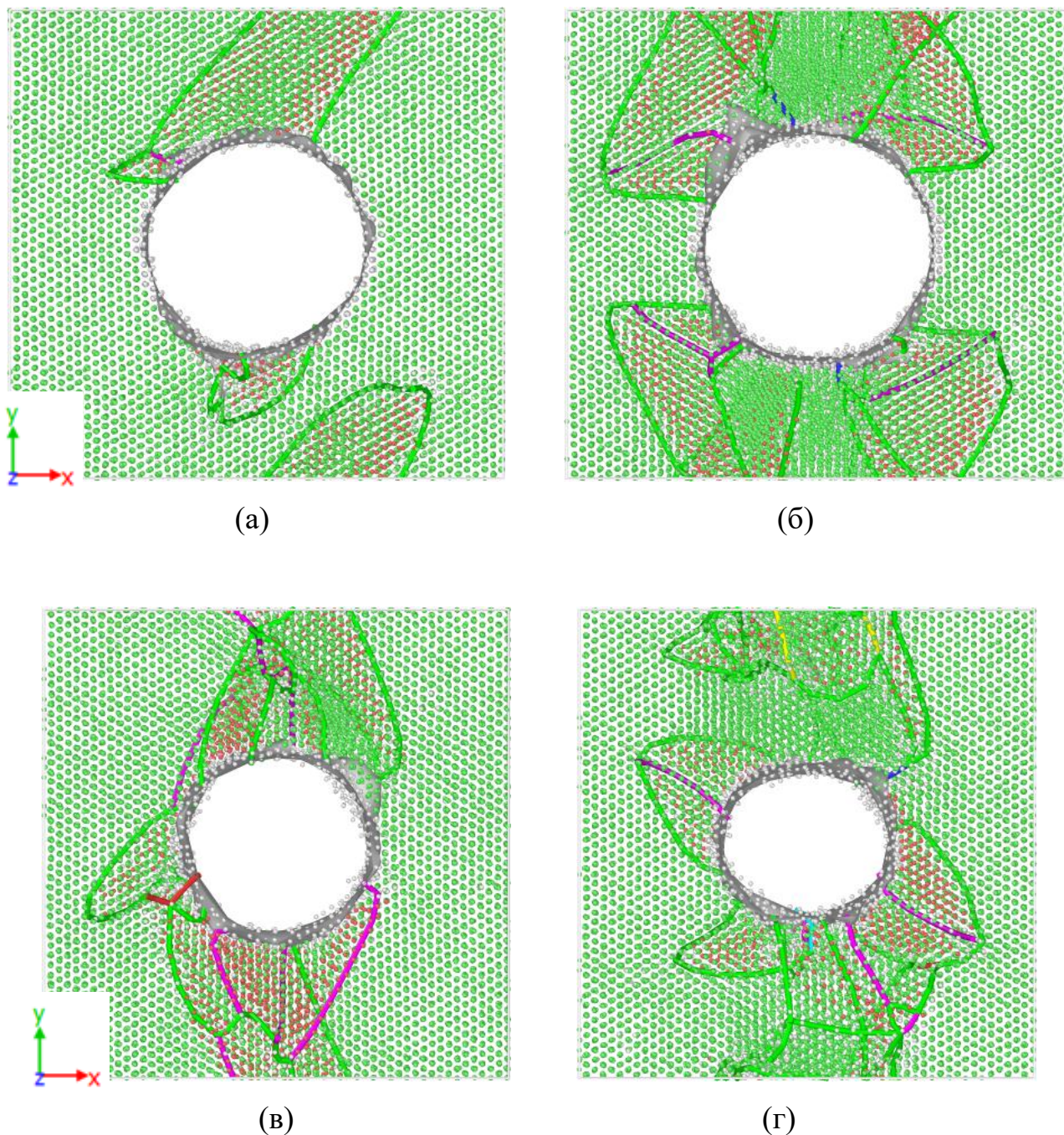


Рис. 5.4. Визуализация поверхности поры и дислокационных линий при одноосной деформации величиной $\epsilon_{xx} = 4$ (а), 6 (б), -2 (в) и -4 (г) % через 25 пс модельного времени ($R = 16 \text{ \AA}$, $T = 300 \text{ K}$)

Для реализации залечивания пор по дислокационному механизму необходимы касательные напряжения, способствующие зарождению дислокационных петель, поэтому на следующем этапе исследовались структурные изменения, происходящие при сдвиговой деформации. Напряженное состояние в расчетной ячейке, с отличной от нуля девиаторной компонентой тензора напряжений, достигалось путем сдвигового деформирования параллельно плоскости (111) вдоль направления $[1\bar{1}0]$. Геометрия расчетной ячейки при этом поддерживалась с помощью комбинации жестких и периодических граничных условий.

Расчет потенциальной энергии показал, что снижение потенциальной энергии, свидетельствующей о структурных изменениях, наблюдается при наибольшем из рассмотренных углов сдвига (см. рис. 5.5).

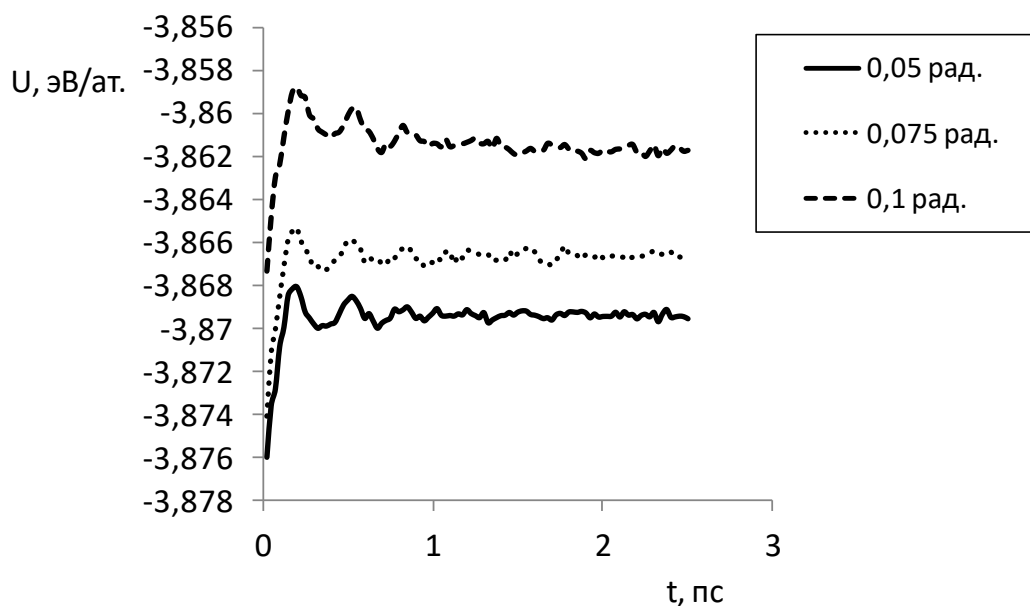


Рис. 5.5. Изменение потенциальной энергии моделируемой системы в течение процесса моделирования при различном угле сдвига

Дополнительно был проведен расчет касательных напряжений в расчетной ячейке (см. рис. 5.6), который подтвердил ранее сделанный вывод.

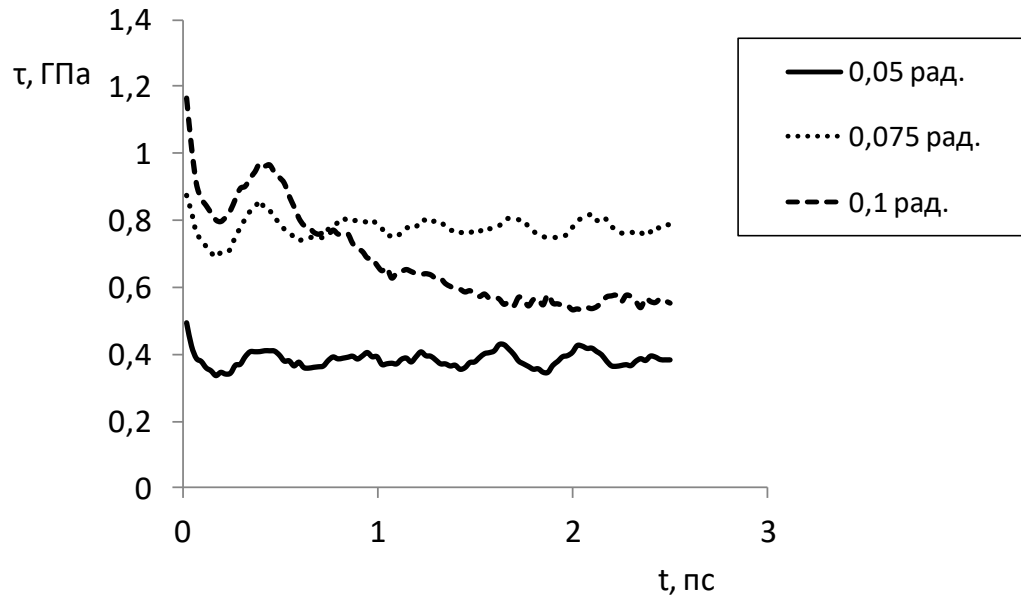


Рис. 5.6. Изменение касательных напряжений в расчетной ячейке в течение процесса релаксации при различных углах сдвига

Визуализация структуры, подверженной сдвиговой деформации показало, что в плоскости (111) расчетной ячейки образуются частичные дислокации Шокли в виде дислокационных петель, источником которых является поверхность цилиндрической поры (см. рис. 5.7).

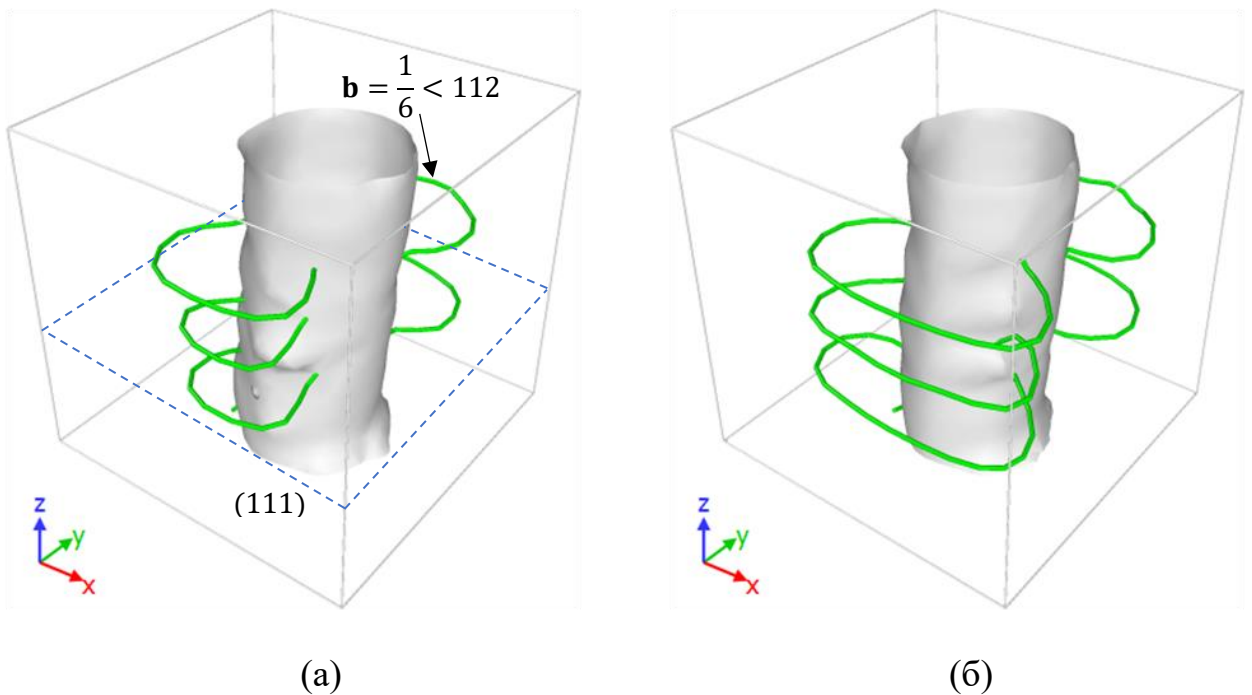


Рис. 5.7. Визуализация развития дислокационной структуры в процессе моделирования через 7,5 (а) и 25 (б) пс. Угол сдвига $\gamma = 0,1$ рад, $T = 300$ К

На рисунке 5.8 представлены результаты того же числового эксперимента, но изображена цветовая визуализация атомов, которая выполнена после структурного анализа, который представляет собой идентификацию локального окружения частиц при использовании метода углов и связей Экланда-Джонса, как наиболее наглядный способ визуализации для дальнейшего исследования. Данная визуализация позволяет успешно выявлять дефекты упаковки.

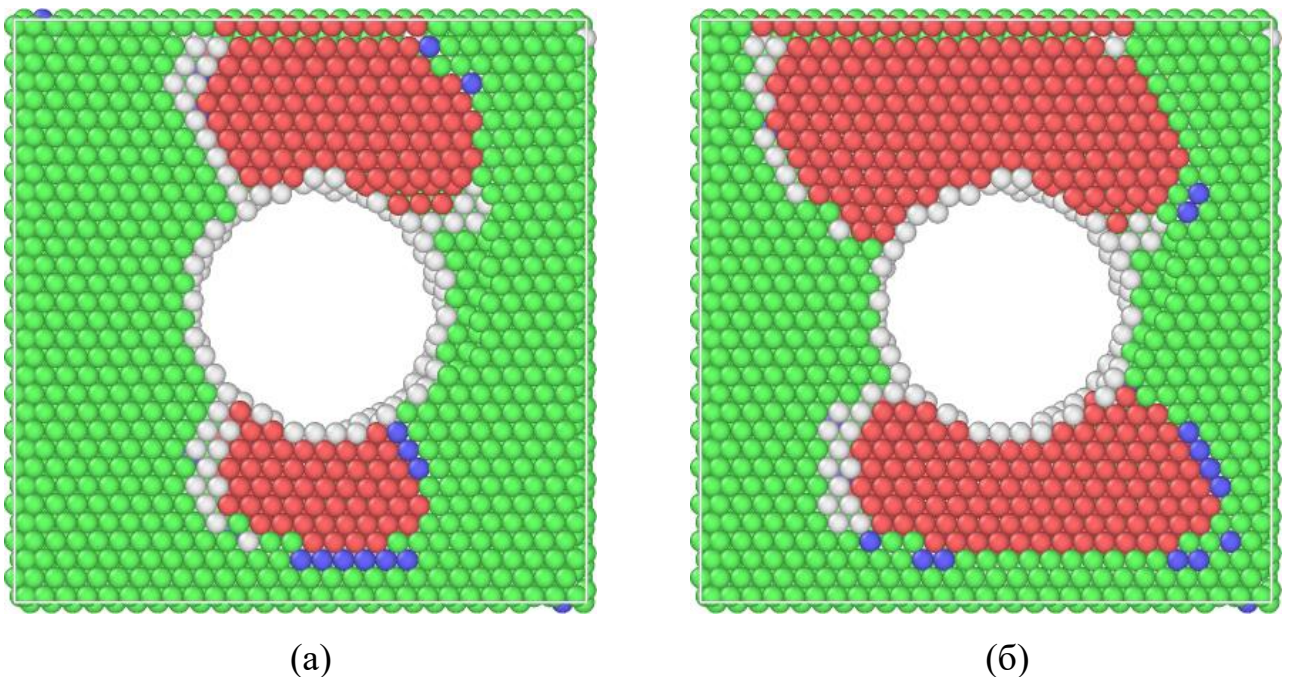


Рис. 5.8. Фрагмент плоскости (111) расчетной ячейки, содержащей пору с радиусом основания 12 анг. через 7.5 (а) и 25 (б) пс модельного времени. Температура расчетной ячейки $T = 300$ К. Угол сдвига $\gamma = 0.1$ рад. Цветовая визуализация соответствует распределению локального окружения атомов: зеленый – ГЦК, красный – ГПУ, синий – ОЦК, белый – не определено

Размеры дислокационных петель увеличиваются в процессе моделирования до тех пор, пока не достигнут значений, при которых равнодействующая всех сил, действующих на дислокацию, станет равной нулю. При этом, как следует из зависимости, представленной на рисунке 5.9.а, суммарная длина дислокационных петель возрастает при увеличении радиуса

основания создаваемых цилиндрических нанопор, и, как следствие, площади свободной поверхности в расчетной ячейке, являющейся источником гетерогенного зарождения дислокаций. Развитие дислокационных петель способствует падению касательных напряжений в расчетной ячейке (см. рис. 5.9.б).

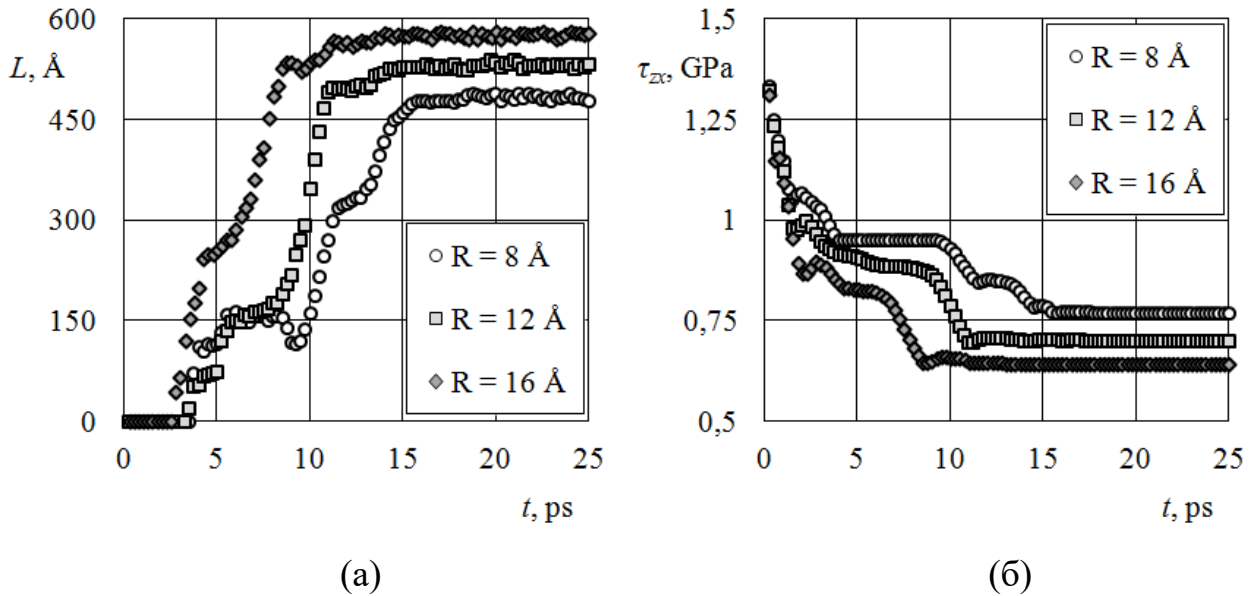


Рис. 5.9. Изменение суммарной длины L дислокационных петель (а) и касательных напряжений в расчетной ячейке (б) в процессе моделирования при различных радиусах основания цилиндрических пор R . Угол сдвига $\gamma = 0.1$ рад

Оценки показывают, что скорость, с которой осуществляется рост дислокационных петель, достигает ≈ 1600 м/с (для сравнения скорость продольных упругих волн в золоте 3240 м/с). Но нужно учитывать, что описанные выше результаты получены при проведении моделирования с постоянным снятием теплового фона путем обнуления скоростей атомов. В случае проведения моделирования при поддерживаемой температуре скорость роста петель увеличивается, что способствует более быстрой релаксации сдвиговых напряжений.

Очевидно, что при увеличении размеров расчетной ячейки высота цилиндрической поры будет также увеличиваться и, следовательно, будет

увеличиваться число зарождающихся дислокаций. Поэтому для того, чтобы охарактеризовать формирующуюся дислокационную структуру была вычислена плотность дислокаций, равная отношению суммарной длины дислокационных сегментов к объему расчетной ячейки, заполненного частицами (для сферической поры такая характеристика не требуется).

Изменение плотности дислокаций при различных углах сдвига представлено на рисунке 5.10.а. Угол сдвига γ задавался дискретно с шагом 0.01 рад (в данном случае зарождение дислокаций начинало наблюдаться при $\gamma = 0.09$ рад). Вычисления проводились двумя способами: со снятием теплового фона и при поддержании постоянной температуры. В первом случае построенная зависимость близка к линейной, а во втором – имеет пологий участок. Для обоих случаев расчетные значения плотности, полученные в ходе моделирования, соответствуют сильнодеформированным неотоженным образцам реальных металлов. При проведении моделирования с установленной температурой расчетной ячейки наблюдается зарождение на поверхности поры множества неустойчивых «зародышей» дислокационных петель, механизм образования которых носит термический характер [133]. Данные зародыши стягиваются обратно к поверхности при образовании устойчивых дислокационных петель, число которых превышает количество петель при моделировании со снятием теплового фона. Пологий участок кривой обусловлен тем, что в данном случае релаксация касательных напряжений реализуется не путем развития дислокационной системы, а иным способом – образованием дополнительных пустот [134].

При увеличении температуры, как правило, плотность дислокаций должна уменьшаться, что обусловлено активизацией процессов скольжения и переползания дислокаций, способствующих их аннигиляции [135]. В нашем случае плотность также уменьшается (см. рис. 5.10.б), но при этом реализуется иной механизм. По мере возрастания температуры начинается процесс аморфизации структуры в области, окружающей цилиндрическую пору, и дислокационные линии в ней не идентифицируются. Возможным механизмом

приповерхностной аморфизации является пониженное внутренне давление в кристалле вблизи свободной поверхности [136]. Более высокое значение плотности дислокаций при меньшем размере диаметра поры обусловлено тем, что в данном случае при повышении температуры происходит «схлопывание» поры и на ее месте формируется дополнительная дислокационная структура [137].

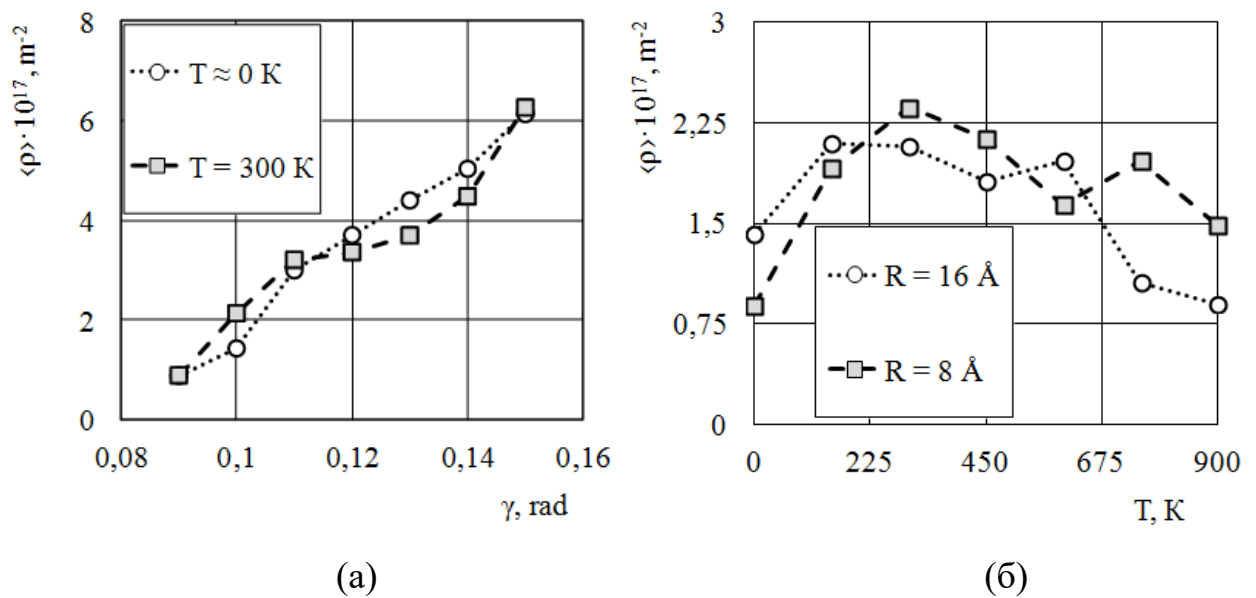


Рис. 5.10. Изменение средней плотности дислокаций $\langle \rho \rangle$ при различных углах сдвига ($R = 16 \text{ \AA}$) (а) и различной температуре расчетной ячейки ($\gamma = 0.1 \text{ рад}$) (б), вычисленной на временном интервале 12.5...15 пс

Отметим, что при построении графиков на рисунке 5.10 брались средние значения длины дислокационных линий, вычисленные за 500 шагов моделирования, так как из-за тепловых колебаний атомов петли меняют свои размеры.

5.3. Исследование влияния ударных волн на структурные изменения цилиндрической поры

На следующем этапе исследования проводилось моделирование с генерированием ударных волн в расчетной ячейке. Как показано ранее,

прохождение фронта волны создает касательные напряжения, достаточные, в частности, для инициации процесса образования частичных дислокаций. Поэтому интерес представляет изучение возможного влияния ударных волн на процесс структурных изменений, происходящих с цилиндрической порой. При этом будем рассматривать деформацию с углом сдвига, при котором не происходит образование дислокационных петель, например, $\gamma = 0.07$ рад (см. рис. 5.10.a).

Результаты моделирования показали, что под воздействием волн на поверхности поры начинают зарождаться дислокационные петли. Так на рисунке 5.11 представлена цветовая визуализация атомов, на момент 5 пс после прохождения одной ударной волны. Как следует из представленного рисунка, при более малом радиусе поры доля атомов с локальным ГПУ-окружением превышает аналогичную долю для расчетной ячейки, содержащей пору с бóльшим радиусом. Кроме того, повышение температуры расчетной ячейки способствует схлопыванию поры малого радиуса.

На рисунке 5.12.a представлены результаты вычислений плотности дислокаций при различных радиусах основания цилиндрической поры. Как следует из рисунка, плотность дислокаций увеличивается более значительно в случае наименьшего из рассмотренных радиусов, что свидетельствует о наибольших происходящих структурных изменениях, заключающихся в растворении поры под воздействием волн.

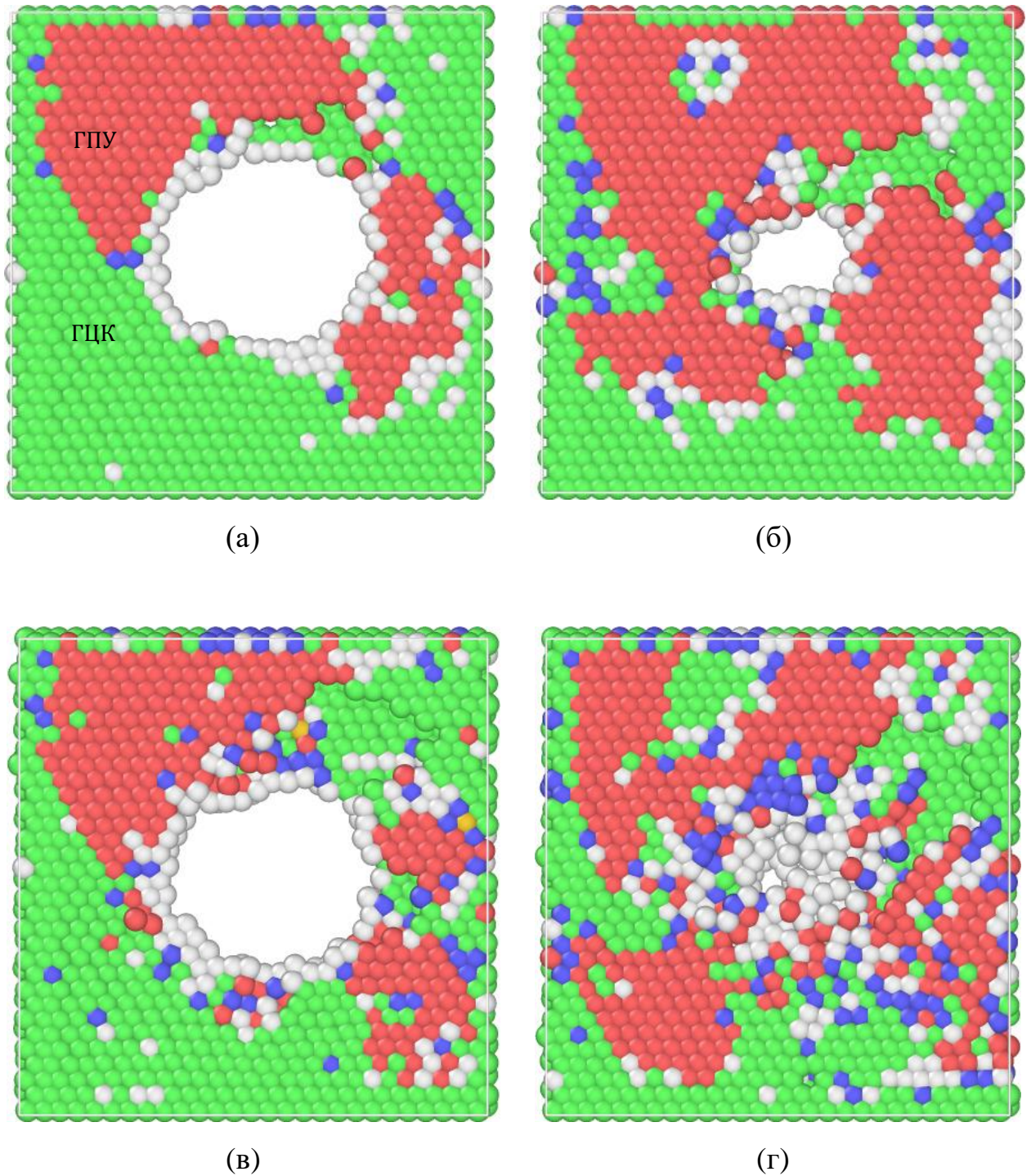


Рис. 5.11. Фрагмент плоскости (111) расчетной ячейки, содержащей пору с радиусом основания 16 Å (а, в) и 8 Å (б, г), через 5 пс после генерации ударной волны. Температура расчетной ячейки $T = 300$ К (а, б) и 600 К (в, г)

Результаты вычислений удельного объема «фазы вещества» приведены на рисунке 5.12.б. Как следует из представленных зависимостей, удельный объем скачкообразно растет через некоторое время после генерации волны. Эти скачки обусловлены изменением формы поры (сдавливание поры фронтом сжатия волны) и последующим ее восстановлением. Формируемая в дальнейшем волна разгрузки создает касательные напряжения, способствующие зарождению дислокаций. Последующее увеличение удельного объема «фазы вещества» свидетельствует об активизации процесса залечивания пор. При повышении температуры волны инициируют отрыв части вакансий, в результате чего пора с наименьшим моделируемым радиусом ($R = 8 \text{ \AA}$) теряет устойчивость и частично или полностью залечивается (удельный объем «фазы вещества» становится равным 1). Следовательно, наблюдается делокализация свободного объема.

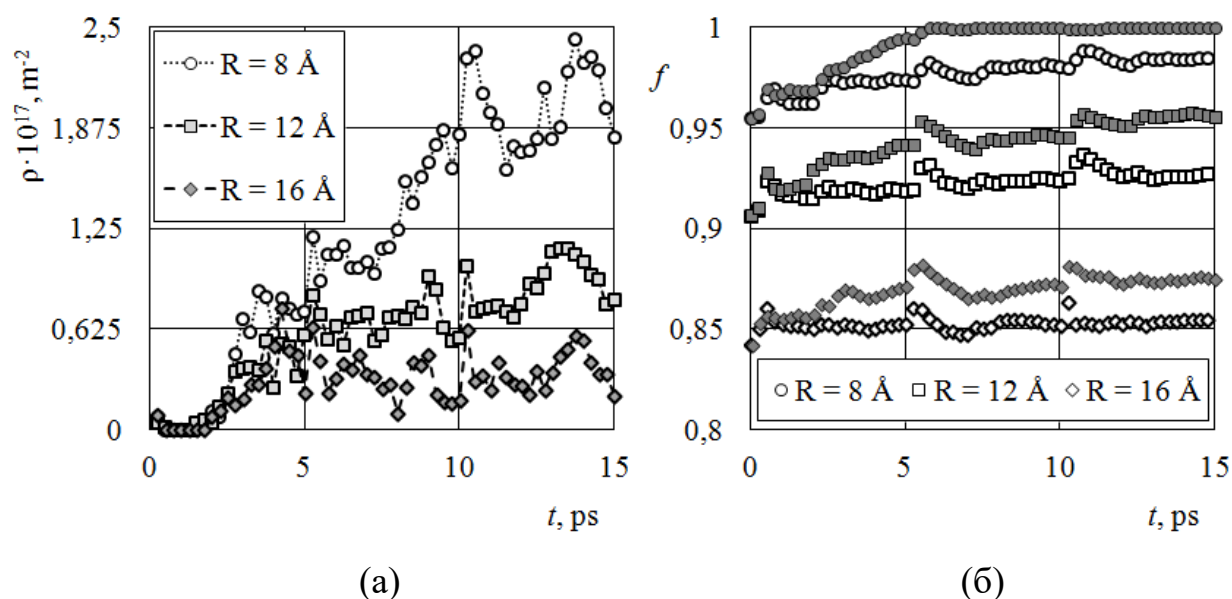


Рис. 5.12. Изменение плотности дислокаций ρ ($T = 300 \text{ K}$) (а) и объемной доли «фазы вещества» f (светлые маркеры – $T = 300 \text{ K}$, темные маркеры – $T = 600 \text{ K}$) (б), при прохождении ударных волн, генерируемых в расчетной ячейке с интервалом 5 пс. Угол сдвига $\gamma = 0.07 \text{ рад}$

Таким образом, проведенное исследование показало, что ударные волны могут инициировать образование дислокационных петель на поверхности цилиндрических пор, повышая плотность дислокаций в кристалле, что влияет на прочностные свойства металла. Данный процесс реализуется при сдвиговой деформации, недостаточной для зарождения дислокаций. В условиях моделирования при температуре 600 К наблюдается растворение поры в расчетной ячейке. Это свидетельствует о том, что ударные волны вместе с термическим воздействием способны инициировать процесс залечивания пор.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенного исследования можно сделать следующие выводы:

1. При релаксации моделируемой системы, представляющей собой ГЦК кристалл и содержащей малую концентрацию вакансий (рассматривалась 5% концентрация), идентифицируются атомы, принадлежащие ГПУ-фазе, т.е. дефекты упаковки, и развитая дислокационная структура, включающая преимущественно вершинные дислокации. При последующей генерации ударных волн наблюдается уменьшение протяженности дислокационных сегментов, с доминированием в структуре частичных дислокаций Шокли.

2. В процессе структурной релаксации расчетной ячейки, содержащей обедненную зону, избыточный свободный объем растворяется на формируемых межзеренных границах. В результате генерации ударных волн наблюдается перераспределение растворенного свободного объема, и локализация его в виде нанопор. Механизмом такого перераспределения является инициация перескоков вакансий при прохождении фронта сжатия волны и их последующая агрегатизация.

3. Значение порогового касательного напряжения, необходимого для образования дислокационной петли, снижается при создании поры в расчетной ячейке. Поверхность сферических нанопор является источников образования дислокаций при различном тепловом и силовом воздействии на расчетную ячейку. В качестве механизма дислокационной эмиссии рассматривается кооперативный сдвиг группы атомов.

4. При создании в расчетной ячейке касательных напряжений, величина которых недостаточна для образования дислокаций на поверхности нанопор, их эмиссия может быть инициирована генерируемой ударной волной. Причиной образования дислокаций, представляющих собой частичные дислокации Шокли, в данном случае являются касательные напряжения, создаваемые

волной разгрузки, следующей за фронтом ударной волны.

5. Ударная волна способствует уменьшению объема нанопор даже при температурах, недостаточных для активизации диффузионных процессов. Иницируемое волной гетерогенное образование дислокационных петель и их последующий рост приводит к выносу «пустоты» из объема нанопоры.

6. Если моделирование проводится при высокой температуре, в том числе близкой к температуре плавления, то длина формирующихся дислокационных петель увеличивается, а также дополнительно начинает проявляться механизм диффузионного растворения поры, в результате чего осуществляется ее залечивание в расчетной ячейке.

7. При моделировании ансамбля нанопор равного размера формирующиеся под воздействием внешнего приложенного касательного напряжения дислокационные петли, имеющие участки с противоположными знаками винтовой ориентации, притягиваются друг к другу и объединяются в петлю, охватывающую поры, что приводит к уменьшению их объема. При моделировании ансамбля нанопор различного размера наблюдается пересечение малой поры формируемой единой петлей. Дополнительные касательные напряжения, создаваемые генерируемой ударной волной, вызывают перестройку дислокационной структуры с формированием дислокаций Ломер-Коттрелла и залечиванием малой поры.

8. Механизмы делокализации свободного объема, реализуемые при моделировании сферических пор, остаются справедливыми при моделировании пор цилиндрической формы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Черемской П.Г., Слезов В.В., Бетехтин В.И. Поры в твердом теле. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 376 с.
2. Орлов В. Л., Орлов А. В., Малышкина А. Г. Образование нанометровых упорядоченных структур радиационных пор в металлах // Известия ВУЗов. Физика. 2003. №2. С.31-35.
3. Косяков В.И., Шестаков В.А. Структуры с вакансионными подрешетками на основе ГЦК и ОЦК упаковок сфер и их стабильность при отрицательных давлениях // Журнал структурной химии. 2009. Т.50. №6. С.1166-1173.
4. Палатник Л.С., Черемской П.Г., Фукс М.Я. Поры в пленках. – М.: Энергоатомиздат, 1982. – 216 с.
5. Гегузин Я.Е. Почему и как исчезает пустота. – М.: Наука, 1983. – 191 с.
6. Ленченко В.М., Логинов Ю.Ю. Генерация и накопление вакансий в кристалле, выращиваемом из расплава // Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2009. №3(24). С.14-16.
7. Каблов Е.Н., Орлов М.Р., Оспенникова О.Г. Механизмы образования пористости в монокристаллических лопатках турбины и кинетика их устранения при горячем изостатическом прессовании // Авиационные материалы и технологии. 2012. № S. С. 117-129.
8. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. – М.: Металлургия, 1983. – 232 с.
9. Кирсанов В.В., Орлов А.Н. Моделирование на ЭВМ атомных конфигураций дефектов в металлах // Успехи физических наук. 1984. Т.142. №2. С.219-264.

10. Аксенов М.С., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю., Краснов В.Ю., Старостенков М.Д. Стабильность вакансионных кластеров в ГЦК металлах // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2005. Т.2. №4. С.24-31.
11. Романов В.А., Сивак А.Б., Чернов В.М. Кристаллографические, энергетические и кинетические свойства собственных точечных дефектов и их кластеров в ОЦК железе. 4. Вакансионные кластеры // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Материаловедение и новые материалы*. 2006. №1 (66). С.188-201.
12. Орлов В.Л., Малышкина А.Г., Орлов А.В. Зарождение пор в металлах при радиационном воздействии // *Известия Томского политехнического университета*. 2002. Т.305. Вып.3. С.314-318.
13. Орлов В.Л., Орлов А.В., Аль-Самави А.Х., Евстигнеев В.В. Образование зародыша радиационной поры // *Известия ВУЗов. Физика*. 2004. Т.47. №3. С.25-28.
14. Слезов В.В., Сагалович В.В. Диффузионный распад твердых растворов // *Успехи физических наук*. 1987. Т.151. Вып.1. С.67-104.
15. Редьков А.В. Рост ограненных пор в кристалле по механизму Бартона-Кабреры-Франка // *Физика твердого тела*. 2019. Т.61. Вып.12. С.2385-2389.
16. Маничев В.М., Рязанов А.И., Миронова Е.Г., Сокурский Ю.Н., Уваров Н.В. Пространственно неоднородный характер развития пористости вблизи границ зерен в никеле при нейтронном облучении // *Атомная энергия*. 1991. Т.70. Вып.1. С.20-24.
17. Власов Н.М., Зазноба В.А. Диффузионные процессы в окрестности тройных стыков специальных границ зерен // *Физика твердого тела*. 1999. Т.41. №1. С.64-67.
18. Перевезенцев В.Н., Пупынин А.С., Огородников А.Е. Анализ кинетики эволюции нанопор при отжиге субмикроструктурных материалов // *Журнал технической физики*. 2018. Т.88. Вып.10. С.1539-1543.

19. Овчаренко А.М., Чернов И.И., Голубов С.И. Моделирование коалесценции газовых пор при отжиге // Атомная энергия. 2010. Т.109. Вып.6. С.315-324.
20. Остапчук П.Н. Обобщенный формализм коалесценции в теории вакансионного распухания металлов // Вопросы атомной науки и техники. 2012. №2(78). С.9-15.
21. Дубинко В.И., Остапчук П.Н., Слезов В.В. Теория диффузионной эволюции ансамбля пор в кристаллах под облучением // Физика металлов и металловедение. 1988. Т.65. №1. С. 32-43.
22. Бетехтин В.И. Пористость и механические свойства твердых тел // Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки. 1998. Т.3. Вып.3. С.209-210.
23. Бетехтин В.И., Бахтибаев А.Н., Кадомцев А.Г., Амосова О.В., Нарыкова М.В. Влияние эволюции микроскопических пор и трещин на механические свойства металлических материалов // Металловедение и термическая обработка металлов. 2013. №1(691). С.51-55.
24. Поляков В.В., Егоров А.В., Турецкий В.А. Влияние структуры пористых металлов на магнитные характеристики // Известия Алтайского государственного университета. 1996. №1(1). С.45-49.
25. Поляков В.В., Турецкий В.А. Влияние структуры на электропроводность пористых псевдосплавов // Физика металлов и металловедение. 1999. Т.87. №3. С.26-29.
26. Поляков В.В., Егоров А.В., Турецкий В.А. Модули упругости пористых псевдосплавов // Известия Алтайского государственного университета. 2004. №1(31). С.119-121.
27. Зеленский В.Ф., Нехлюдов И.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и распухание металлов. – К.: Наукова думка, 1988. – 296 с.
28. Трушин Ю.В. Влияние предвыделений вторичной фазы на радиационное распухание распадающихся твердых растворов. I. Общая теория // Журнал технической физики. 1992. Т.62. Вып.4. С.1-12.

29. Neklyudov I.M., Voyevodin V.N. Radiation swelling of modified austenitic steels. Russian Physics Journal. 2008. V.51. P.400-413.
30. Тофпенец Р.Л., Соколов Ю.В., Залужный Г.И., Попок Д.А. Механизм и кинетика залечивания пор при ТЦО напыленных покрытий // Весці НАН Беларусі. Сер.Фіз.-тэхн.навук. 1999. №2. С.10-13.
31. Бетехтин В.И., Кадомцев А.Г., Амосова О.В. Природа залечивания пористости в твердых телах // Научные ведомости БелГУ. Сер. Физика. 2001. №1(14). С.70-75.
32. Бетехтин В.И., Кадомцев А.Г., Амосова О.В. Закономерности залечивания пористости в некоторых кристаллических и аморфных материалах // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия. 2003. №8. С.65-67.
33. Петров А.И., Разуваева М.В. Начальная стадия процесса залечивания пор и трещин в поликристаллических металлах в условиях всестороннего сжатия // Физика твердого тела. 2005. Т.47. Вып.5. С.880-885.
34. Баранов Ю.В., Сахвадзе Г.Ж., Столяров В.В. Импульсные технологии обработки наноструктурных материалов с целью залечивания дефектов // Вестник научно-технического развития. 2010. №10(38). С.12-17.
35. Дроздов А.Ю. Моделирование динамики развития нанодефектов в металлах при ионной имплантации и деформации: дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Ижевск, 2007. – 160 с.
36. Тепловые, гидродинамические и плазменные эффекты при взаимодействии лазерного излучения с веществом: монография / под общей ред. Н.С. Захарова, В.Д. Урлина, Н.И. Шенцева. – Саров: ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ», 2004. – 425 с.
37. Анисимов С.И., Прохоров А.М., Фортов В.Е. Применение мощных лазеров для исследования вещества при сверхвысоких давлениях // Успехи физических наук. 1984. Т.142. Вып.3. С.395-434.
38. Штремель М.А. Прочность сплавов. Часть I. Дефекты решетки. – М.: МИСИС, 1999. – 384 с.

39. Biersack J.P., Hagmark L.G. A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets // *Nuclear Instruments and Methods*. 1980. V.174. №1-2. P.257-269.
40. Махинько Ф.Ф. Восстановление пластичности алюминиевых сплавов с использованием динамических эффектов дальнего действия при ионной бомбардировке: дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Екатеринбург, 2014. – 150 с.
41. Овчинников В.В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // *Успехи физических наук*. 2008. Т.178. №9. С. 991-1001.
42. Гарбер Р.И., Федоренко А.И. Фокусировка атомных столкновений в кристаллах // *Успехи физических наук*. 1964. Т.83. Вып.3. С. 385-432.
43. Chudinov V.G., Cotterill R.M.J., Andreev V.V. Kinetics of the diffuse processes within a cascade region in the sub-threshold stages of F.C.C. and H.C.P. metals // *Physica Status Solidi (a)*. 1990. V.122. №1. P.111-120.
44. Валяев А.Н., Погребняк А.Д., Братушка С.Н., Лаврентьев В.И., Волков С.Н., Плотников С.В. Влияние градиента давления ударной волны в α -железе, облученном мощным ионным пучком, на появление максимума микротвердости // *Письма в журнал технической физики*. 1998. Т.24. №20. С.72-77.
45. Блейхер Г.А., Кривобоков В.П., Пащенко О.В. Теплоперенос в твердом теле под воздействием мощных пучков заряженных частиц. – Новосибирск: Наука, 1999. – 176 с.
46. Вершинин Г.А., Геринг Г.И., Субочева Т.В. Волновой механизм массопереноса в металлических системах при многократном импульсном воздействии // *Вестник Омского университета*. 2001. №4. С.22-24.
47. Гущина Н.В. Исследование закономерностей фазовых и структурных превращений в сплавах на основе алюминия при облучении ионами средних энергий: дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Екатеринбург, 2008. – 200 с.

48. Можаровский С.М. Разработка ионно-пучковых методов модификации свойств алюминиевых сплавов на основе использования радиационно-динамических эффектов: дис. ... док. тех. наук. – Томск, 2011. – 280 с.
49. Holian B.L. Modeling shock-wave deformation via molecular dynamics // *Physical Review A*. 1988. V.37. No.7. P.2562–2568.
50. Holian B.L. Atomistic computer simulations of shock waves // *Shock Waves*. 1995. V.5(3). P.149-157.
51. Jiang S., Sewell T.D., Thompson D.L. Molecular dynamics simulations of shock wave propagation through the crystal–melt interface of (100)-oriented nitromethane // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2016. V.120. No.40. P.22989-23000.
52. Chen Y., Jian Z., Xiao S., Wang L., Li X., Wang K., Deng H., Hu W. Molecular dynamics simulation of shock wave propagation and spall failure in single crystal copper under cylindrical impact // *Applied Physics Express*. 2021. V.14. No.7 P.075504.
53. Захаров П.В., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д., Чередниченко А.И. Моделирование прохождения ударных волн через границу раздела двудольных биметаллических частиц Ni-Al // *Письма о материалах*. 2017. Т.7. Вып.3. С.296-302.
54. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Радиационно-динамические процессы в ГЦК кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом. – Кемерово: Кузбассвузиздат, 2014 – 191 с.
55. Корчуганов А.В. Зарождение и развитие локальных структурных трансформаций в упругодеформированной кристаллической решетке ОЦК железа при радиационном воздействии: дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Томск, 2016. – 95 с.
56. Patra I., Abdulhadi A.M., Fahim F.S. The effects of temperature and impact velocity on the shock wave response of pore-embedded metallic glasses // *Advances in Materials Science and Engineering*. 2022. V.2022. P.1-8.

57. Wood M.A., Kittell D.E., Yarrington C.D., Thompson A.P. Multiscale modeling of shock wave localization in porous energetic material // *Phys. Rev. B*. 2018. V.97. No.1. 014109.
58. Sharma A., Dubey D.K. Effect of porosity on shock propagation behaviour of single crystal aluminium: A molecular dynamics investigation // *Mechanics of Materials*. 2023. V.177. 104535.
59. Long Y., Chen J. Theoretical study of the critical dynamic behaviors for pore collapse in explosive // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2021. V.29. No.5. 055009.
60. Eason R.M., Sewell T.D. Molecular dynamics simulations of the collapse of a cylindrical pore in the energetic material α -RDX // *Journal of Dynamic Behavior of Materials*. 2015. V.1. P.423-438.
61. Xiang M., Cui J., Yang Y., Liao Y., Wang K., Chen Y., Chen J., Shock responses of nanoporous aluminum by molecular dynamics simulations // *International Journal of Plasticity*. 2017. V.97. P.24-45.
62. Adhikari U., Goliaei A., Berkowitz M.L. Mechanism of membrane poration by shock wave induced nanobubble collapse: a molecular dynamics study // *The Journal of Physical Chemistry B*. 2015. V.119. No.20. P.6225-6234.
63. Кулеш М.А. Машинное моделирование деформационных свойств металлов. – Пермь, 1997. – 76 с.
64. Калинин Б.А. Физическое материаловедение. Том 4. – Москва: МИФИ, 2008. – 696 с.
65. Плишкин Ю.М. Методы машинного моделирования в теории дефектов кристаллов / В кн.: Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ. – Л.: Наука, 1980. С. 77-99.
66. Звонарев С. В., Кортов В.С., Штанг Т.В. Моделирование структуры и свойств наносистем. – Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2014. – 120 с.
67. Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем. – Санкт-Петербург : Лань, 2010. – 384 с.

68. Серый С.В., Кабалдин Ю.Г., Просолович А.А., Бурдасов Е.Н. Квантово-механические расчеты в математическом моделировании наноструктур // Вестник Дальневосточного государственного технического университета. 2010. № 1(3). С.84-89.
69. Шилов М.А., Веселов В.В. Компьютерное моделирование молекулярных систем методом молекулярной динамики. – Иваново: ИГТА, 2010. – 168 с.
70. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журнал ДВО РАН. 2002. Т.3. №2. С. 254-276.
71. Мажукин В.И., Шапранов А.В. Математическое моделирование процессов нагрева и плавления металлов. Часть I. Модель и вычислительный алгоритм // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 31. – 27 с.
72. Маркидонов А.В. Механизмы кооперативного воздействия групп атомов на структурные изменения в ГЦК-металлах при внешних высокоинтенсивных воздействиях: дис. ... док. физ.-мат. наук. – Барнаул, 2016. – 343 с.
73. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
74. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Physical Review. 1967. V.159. №1. P.98-103.
75. Нагорных И.Л. Молекулярно-динамическое моделирование поведения системы железо-водород при деформировании: дис. ... канд. физ.-мат. наук. – Ижевск, 2011. – 130 с.
76. Фёдоров А.С., Сорокин П.Б., Аврамов П.В., Овчинников С.Г. Моделирование свойств, электронной структуры ряда углеродных и неуглеродных нанокластеров и их взаимодействия с легкими элементами [Электронный ресурс]. – Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2006. – Режим доступа: <http://test.kirensky.ru/master/articles/monogr/Book/>.

77. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. Molecular-Dynamics with Coupling to an External Bath // *Journal of Chemical Physics*. 1984. V.81. №8. P.3684-3690.
78. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого никеля // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2014. №41. – 20 с.
79. Богатиков Е.В., Битюцкая Л.А., Шебанов А.Н. Моделирование нанокластеров методом молекулярной динамики. – Воронеж : Издательско-полиграфический центр ВГУ, 2013. – 41 с.
80. Назаров А.А., Мулюков Р.Р. Атомистическое моделирование материалов, наноструктур и процессов нанотехнологии. – Уфа : РИО БашГУ, 2010. – 156 с.
81. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals // *Physical Review B*. 1984. V.29. №12. P.6443-6453.
82. Johnson R.A. Analytic Nearest-Neighbor Model for FCC Metals // *Physical Review B*. 1988. V.37. №8. P.3924-3931.
83. Johnson R.A. Alloy Models with the Embedded-atom Method // *Physical Review B*. 1989. V.39. №17. P. 12554-12559.
84. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation Materials Science and Engineering*. 2010. V.18. 015012.
85. Zhukov V.P., Boldin A.A. Elastic-wave generation in the evolution of displacement peaks // *Atomic Energy*. 1987. V.68. P.884-889.
86. Могилевский М.А., Ефремов В.В., Мынкин И.О. Поведение кристаллической решетки при сильном одномерном сжатии // *Физика горения и взрыва*. 1977. №5. С.750-754.
87. Могилевский М.А., Мынкин И.О. Влияние точечных дефектов на одномерное сжатие решетки // *Физика горения и взрыва*. 1978. №5. С.159-163.

88. Кривцов А.М. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // Физика твердого тела. 2004. Т.46. Вып.6. С.1025-1030.
89. Granberg F., Byggmatar J., Sand A.E., Nordlund K. Cascade debris overlap mechanism of $\langle 100 \rangle$ dislocation loop formation in Fe and FeCr // Europhysics Letters. 2017. V.119. No.5. 56006.
90. Osetsky Yu.N., Victoria M., Serra A., Golubov S.I., Priego V. Computer simulation of vacancy and interstitial clusters in bcc and fcc metals // Journal of Nuclear Materials. 1997. V.251. P.34-48.
91. Бакаев А.В., Журкин Е.Е. Характеристики радиационных дефектов в аустенитных сплавах // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. 2014. №2(194). С.37-45.
92. Kadoyoshi T., Kaburaki H., Shimizu F., Kimizuka H., Jitsukawa S., Li J. Molecular dynamics study on the formation of stacking fault tetrahedra and unfauling of Frank loops in fcc metals // Acta Materialia. 2007. V.55. No.9. P.3073-3080.
93. Li R., Chew H.B. Closed and open-ended stacking fault tetrahedra formation along the interfaces of Cu–Al nanolayered metals // Philosophical Magazine. 2015. V. 95. No.25. P.2747–2763.
94. Zhang L., Lu C., Michal G., Deng G., Tieu K. The formation and destruction of stacking fault tetrahedron in FCC metals: A molecular dynamics study // Scripta Materialia. 2017. V.136. P.78-82.
95. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Лубяной Д.А., Липунов В.Н., Обидина О.В. Влияние ударных послекаскадных волн на структурные изменения, происходящие в обедненной зоне ГЦК-кристалла // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2019. Т.16. №2. С.256-263.
96. Маркидонов А.В., Лубяной Д.А., Липунов В.Н., Липунова Д.А. Компьютерное моделирование процессов радиационного воздействия на

структуру твердого тела // Сборник материалов XVII Международной научно-практической конференции «Природные и интеллектуальные ресурсы Сибири. СИБРЕСУРС 2018». Кемерово. 2018. С.809.1-809.7.

97. Маркидонов А.В., Липунов В.Н., Захаров П.В. Изменение распределения свободного объема в обедненной зоне ГЦК-кристалла под воздействием ударных послекаскадных волн // Сборник тезисов национальной конференции «Актуальные вопросы современной науки: теоретические и практические аспекты». Новокузнецк. 2018. С.134-136.

98. Маркидонов А.В., Липунов В.Н. Моделирование процесса перераспределения свободного объема в зернограничной области ГЦК кристалла при радиационном воздействии // Сборник материалов III Международной научно-практической конференции «Инновации в информационных технологиях, машиностроении и автотранспорте». Кемерово. 2019. С.165-168.

99. Липунов В.Н., Маркидонов А.В., Старостенков М.Д. Влияние ударных послекаскадных волн на структурные изменения, происходящие в обедненной зоне ГЦК-кристалла // Сборник научных статей VII Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии». Барнаул. 2019. С.144-152.

100. Липунов В.Н., Маркидонов А.В. Моделирование дислокационной структуры, формируемой в обедненной зоне облученного никеля // Материалы XII Международной научно-инновационной молодежной конференции «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент». Тамбов, 2020. С.174-176.

101. Маркидонов А. В., Липунов В. Н. Компьютерное моделирование структурных изменений, происходящих в обедненной зоне кристалла // Сборник тезисов национальной конференции «Актуальные вопросы современной науки: теоретические и практические аспекты». Новокузнецк. 2020. С.163-167.

102. Липунов В.Н., Старостенков М.Д., Кустов С.Л., Маркидонов А.В. Моделирование роста зерен под воздействием ударных волн при наличии свободного объема в зернограничной области кристалла // Сборник научных статей VIII Российско-Казахстанской молодежной научно-технической конференции «Новые материалы и технологии». Барнаул, 2020. С.117-124.
103. Липунов В.Н., Маркидонов А.В. Моделирование формирования дислокационной структуры в кристалле, содержащем обедненную зону // Научное периодическое издание по материалам XXII Всероссийской научно-технической конференции «Механики XXI века». 2023. №22. С.243-248.
104. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // Physical Review B. 2006. V.73. No.5. 054104.
105. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2012. V.20. No.8. 085007.
106. Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals // The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society. 2014. V.66. No.3. P.399-407.
107. Edelsbrunner H., Mücke E. Three-dimensional alpha shapes // ACM Transactions on Graphics. 1994. V.13. №1. P.43-72.
108. Taubin G. A signal processing approach to fair surface design // Proceedings of the 22nd annual conference on Computer graphics and interactive techniques «SIGGRAPH '95». – ACM New York, NY, USA, 1995. P.351-358.
109. Петров А.И., Разуваева М.В., Синани А.Б., Никитин В.В. Влияние статистического и динамического сжатия на залечивание пор в меди // Журнал технической физики. 1998. Т.68. №11. С.125-127.
110. Davila L.P., Erhart P., Bringa E.M., Meyers M.A., Lubarda V.A., Schneider M.S., Becker R., Kumar M. Atomistic modeling of shock-induced void collapse in copper // Applied Physics Letters. 2005. V.86. No.16. 161902.

111. Hatano T. Dislocation nucleation in shocked fcc solids: effects of temperature and preexisting voids // *Physical Review Letters*. 2004. V.93. No.8. 085501.

112. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Захаров П.В., Лубяной Д.А., Липунов В.Н. Эмиссия дислокационных петель нанопорами в ГЦК-кристалле под воздействием ударных послекаскадных волн при сдвиговой деформации // *Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики*. 2019. Т.156. Вып.6. С.1078-1083.

113. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Lubyanoi D.A., Lipunov V.N. Emission of dislocation loops from nanovoids in an FCC crystal subjected to shear deformation under post-cascade shock waves // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2019. V.129. P.985–989.

114. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Липунов В.Н., Лубяной Д.А., Захаров П.В. Молекулярно-динамическое исследование развития дислокационной структуры ГЦК-кристалла, содержащего ансамбль сферических пор, при внешнем силовом воздействии // *Физика твердого тела*. 2023. Т.65. Вып.5. С.711-716.

115. Липунов В.Н., Липунова Д.А., Маркидонов А.В. О возможном механизме роста вакансионной поры при радиационном облучении материала // *Сборник материалов X Международной научно-инновационной молодежной конференции «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент»*. Тамбов. 2018. С.358-360.

116. Липунов В.Н., Маркидонов А.В., Лубяной Д.А. Компьютерное моделирование структурных изменений пор под воздействием ударных волн // *Сборник научных материалов XVII Всероссийской с международным участием школы – семинара по структурной макрокинетике для молодых ученых имени академика А.Г. Мержанова*. Черноголовка. 2019. С.47-49.

117. Липунов В.Н., Маркидонов А.В. Структурные трансформации нанопор в кристалле при радиационном воздействии // *Материалы I*

Всероссийской междисциплинарной научной конференции «Познание и деятельность: от прошлого к настоящему». Омск. 2019. С.375-378.

118. Липунов В.Н., Маркидонов А.В. Моделирование образования дислокационных петель на порах в ГЦК кристалле при внешнем воздействии // Материалы XI Международной научно-инновационной молодежной конференции «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент». Тамбов. 2019. С.259-261.

119. Липунов В.Н., Маркидонов А.В. Моделирование снижения радиационной пористости материала под воздействием ударных волн // Материалы III Всероссийской научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием, посвященной 100-летию ФГБОУ ВО «ГГНТУ им. акад. М.Д. Миллионщикова». Грозный. 2020. С.134-137.

120. Маркидонов А.В., Липунов В.Н., Лубяной Д.А. Зарождение дислокационных петель на поверхности нанопор при внешнем высокоинтенсивном воздействии // Сборник материалов шестого междисциплинарного научного форума с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии». Москва. 2020. Т.1. С.657-660.

121. Бобылев С.В., Морозов Н.Ф., Овидько И.А. Испускание дислокаций порами в нанокристаллических металлах // Физика твердого тела. 2007. Т.49. Вып.6. С.1044-1049.

122. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Смирнова М.В., Коваленко В.В., Захаров П.В. Влияние ударных послекаскадных волн на динамику краевой дислокации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т.11. №4. С.461-469.

123. Гегузин Я.Е. Физика спекания. – М.: Наука, 1984. – 312 с.

124. Терехов С.В., Лимановский А.И. «Фаза пустоты» и размытый фазовый переход // Физика и техника высоких давлений. 2018. Т.28. №3. С.65-74.

125. Терехов С.В. Размытый фазовый переход в аморфном сплаве $\text{Fe}_{40}\text{Ni}_{40}\text{P}_{14}\text{B}_6$: термодинамика фаз и кинетика кристаллизации // Физика и техника высоких давлений. 2019. Т.29. №2. С.24-39.
126. Marian J., Knap J., Ortiz M. Nanovoid deformation in aluminum under simple shear // Acta Materialia. 2005. V.53. P.2893-2900.
127. Barbu A., Dunlop A., Lesueur D., Averbach R.S. Latent tracks do exist in metallic materials // Europhysics Letters. 1991. V.15. P.37-42.
128. Prokof'ev M.A., Berdonosova D.G., Melikhov I.V., Berdonosov S.S. On the possibility of obtaining crystalline materials containing extended cylindrical pores // Moscow University Chemistry Bulletin. 2010. V.65. No.4. P.269-273.
129. Липунов В.Н., Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Лубяной Д.А., Захаров П.В., Коваленко В.В., Медведев Н.Н. Моделирование зарождения дислокационных петель на поверхности цилиндрических пор в ГЦК кристалле при внешнем воздействии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2020. Т.17. №4. С.437-442.
130. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Лубяной Д.А., Захаров П.В., Липунов В.Н. Моделирование процесса залечивания пор цилиндрической формы под воздействием ударных волн в кристалле, подвергнутом сдвиговой деформации // Известия ВУЗов. Черная металлургия. 2021. Т.64. №6. С.427-434.
131. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Lubyanoi D.A., Zakharov P.V., Lipunov V.N. Modeling of Healing Cylindrical Cavities Exposed to Shock Waves in Crystal Subjected to Shear Deformation // Steel in Translation. 2022. Vol.52. No.2. Pp.208-214.
132. Маркидонов А.В., Липунов В.Н., Старостенков М.Д., Захаров П.В. Моделирование структурных изменений в ГЦК кристалле, содержащем протяженные поры цилиндрической формы, под воздействием ударных послекаскадных волн и сдвиговой деформации // Сборник тезисов XVI Международной школы-семинара «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах». Барнаул. 2020. С.44-45.

133. Norman G.E., Yanilkin A.V. Homogeneous nucleation of dislocations // *Physics of the Solid State*. 2011. V.53. No.8. P.1614-1619.

134. Xue L. Constitutive modeling of void shearing effect in ductile fracture of porous materials // *Engineering Fracture Mechanics*. 2008. V.75. No. 11. P.3343-3366.

135. Козлов Э.В., Тришкина Л.И., Конева Н.А. Скалярная плотность дислокаций и её компоненты, накапливаемые при деформации в малоцентрированных твердых растворах Cu–Al // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2011. Т.8. №1. С.52-60.

136. Скуратов В.А., Сайфулин М.М., Аралбаева Г.М., О'Коннелл Ж.Г., Ван Вуурен А.Д. Повреждение диоксида титана вблизи поверхности после облучения быстрыми тяжелыми ионами // *Вестник Карагандинского университета. Серия «Физика»*. 2017. №1(85). С.47-54.

137. Жияев П.А., Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Стариков С.В., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. Влияние микроструктуры материала на динамическую пластичность и прочность: молекулярно-динамическое моделирование // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2010. Т.9. №1. С.104-109.