



*На правах рукописи*

ЛИПУНОВ ВЯЧЕСЛАВ НИКОЛАЕВИЧ

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

Специальность 1.3.8 «Физика конденсированного состояния»

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Барнаул - 2024

Работа выполнена в Кузбасском гуманитарно-педагогическом институте  
ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»

Научный руководитель: **Маркидонов Артем Владимирович**, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина КГПИ ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет»

Официальные оппоненты: **Зольников Константин Петрович**, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН «Институт физики прочности и материаловедения СО РАН», главный научный сотрудник лаборатории компьютерного конструирования материалов, г. Томск;

**Гафнер Юрий Яковлевич**, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова», заведующий кафедрой математики, физики и информационных технологий, г. Абакан.

Ведущая организация: ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», г. Томск

Защита состоится «17» апреля 2024 г. в 10:00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.269.03 при ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет» по адресу: 656049, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, д. 61, ауд. 416.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет», [https://www.asu.ru/science/dissert/physic\\_diss/](https://www.asu.ru/science/dissert/physic_diss/)

Автореферат разослан «\_\_» \_\_\_\_\_ 2024г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета,  
кандидат физико-математических наук



Н.В. Волков

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность исследования.** 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 набуханием материала, что значительно ухудшает его эксплуатационные свойства. Например, набухание 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.

**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 распуханием конструкционных узлов и создание радиационнотойких 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: X

Международная научно-инновационная молодежная конференция «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент», Тамбов (2018); XVII Международная научно-практическая конференция «Природные и интеллектуальные ресурсы Сибири. СИБРЕСУРС 2018», Кемерово (2018); национальная конференция «Актуальные вопросы современной науки: теоретические и практические аспекты», Новокузнецк (2018, 2020); XVII Всероссийская с международным участием школа-семинар по структурной макрокинетике для молодых ученых имени академика А.Г. Мержанова, Черноголовка (2019); III Международная научно-практическая конференция «Инновации в информационных технологиях, машиностроении и автотранспорте», Кемерово (2019); I Всероссийская междисциплинарная научная конференция «Познание и деятельность: от прошлого к настоящему», Омск (2019); XI Международная научно-инновационная молодежная конференция «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент», Тамбов (2019); VII Российско-Казахстанская молодежная научно-техническая конференция «Новые материалы и технологии», Барнаул (2019); XII Международная научно-инновационная молодежная конференция «Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент», Тамбов (2020); XVI Международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Барнаул (2020); III Всероссийская научно-практическая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых с международным участием, посвященная 100-летию ФГБОУ ВО «ГГНТУ им. акад. М.Д. Миллионщикова», Грозный (2020); VI междисциплинарный научный форум с международным участием «Новые материалы и перспективные технологии», Москва (2020); VIII Российско-Казахстанская молодежная научно-техническая конференция «Новые материалы и технологии», Барнаул (2020); XXII Всероссийская научно-техническая конференция «Механики XXI века», Братск (2023).

**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.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы из 137 наименований. Работа изложена на 121 страницах машинописного текста, содержит 3 таблицы и 50 рисунков.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность выбранного направления исследования. Сформулирована цель диссертационной работы, поставлены задачи, описана научная новизна, теоретическая и практическая значимость. Приведены основные защищаемые положения и краткое содержание работы по главам.

**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. При проведении исследования использовался потенциал Джонсона [1], рассчитанный в рамках метода погруженного атома. В данном потенциале функциональный вид электронной плотности  $f(r)$ , парного потенциала  $\varphi(r)$  и энергии внедрения  $F(\rho)$  задаются следующим образом:

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

$$\varphi(r) = \varphi_e \exp\left[-\gamma\left(\frac{r}{r_e} - 1\right)\right], \quad r \leq r_c, \quad (2)$$

$$F(\rho) = -E_c \left[1 - \frac{\alpha}{\beta} \ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)\right] \left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^{\alpha/\beta} - \Phi_e \left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^{\gamma/\beta}, \quad (3)$$

где  $\alpha = 3\sqrt{\Omega B/E_c}$ ,  $\Omega$  – 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. Величина  $f_e = S(E_c/\Omega)$  является постоянной масштабирования, в которой для чистых металлов  $S$  равна единице. Параметры потенциала  $\varphi_e$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $r_c$  определяются подгонкой к

параметру решетки  $a_0$  или атомному объему  $\Omega$ , энергии связи  $E_c$ , энергии образования вакансии  $E_v$ , модулю всестороннего сжатия  $B$  и модулю сдвига  $G$ . Значения параметров потенциала представлены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры потенциала Джонсона [1]

Металл	$f_e$	$\varphi_e$ , эВ	$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$r_c$ , 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

Исследование проводилось на расчетных ячейках, состоящих из 32000 частиц, имитирующих ГЦК кристаллы никеля (результаты представлены в главе 3) и золота (главы 4 и 5). Шаг численного интегрирования уравнений движения с применением алгоритма Верле равнялся 5 фс. Моделировался канонический ансамбль частиц, и при этом для фиксации температуры использовался термостат Берендсена.

При расчетах применялся некоммерческий пакет молекулярно-динамического моделирования XMD [2], распространяемый как программное обеспечение с открытым исходным кодом по лицензии GPL. Для визуализации полученных результатов использовался пакет OVITO [3], предназначенный для анализа и постобработки крупномасштабных наборов данных, полученных в результате моделирования.

В завершении главы описывается процесс построения используемой при проведении исследования модели и методика создания ударной волны, заключающаяся в выделении кристаллографической плоскости  $\{1\bar{1}0\}$  расчетной ячейки, содержащей граничные атомы, и присвоении им равной по величине скорости, превышающей скорость продольных звуковых волн и вектор которой ориентирован по нормали к выделенной плоскости.

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. По мере увеличения концентрации вакансий  $n$  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. 1.а). Дальнейшее увеличение создаваемых вакансий приводит к порообразованию в кристалле (см. рис. 1.б).



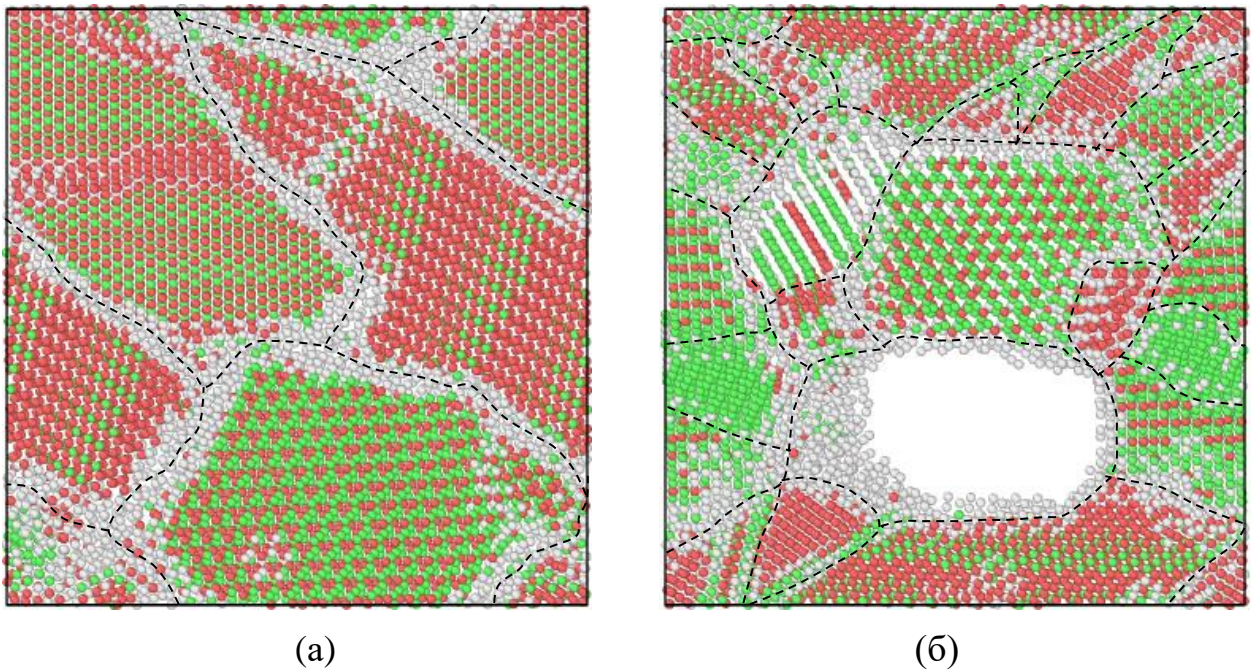


Рис. 1. Структура моделируемого кристалла через 10 пс моделируемого времени: (а)  $n = 15\%$ ,  $T = 1200$  К; (б)  $n = 20\%$ ,  $T = 300$  К. Цветовая визуализация соответствует распределению локального окружения атомов: зеленый – ГЦК, красный – ГПУ, бесцветный – не определено. Выделены межзеренные границы

При создании ударной волны 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. Сравнительный анализ показал, что для кристалла, в котором были сгенерированы волны, характерно уменьшение доли атомов, принадлежащих ГПУ-фазе.

Анализ дислокационной структуры расчетной ячейки показал, что после релаксации в моделируемой системе содержатся преимущественно вершинные дислокации с вектором Бюргера  $\vec{b} = 1/6\langle 110 \rangle$  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 (см. рис. 2). В расчетных ячейках с 15%-й концентрацией вакансий под воздействием волн наблюдается укрупнение зерен и при этом распределенный свободный объем начинает локализоваться в области генерации волн (см. рис. 3).

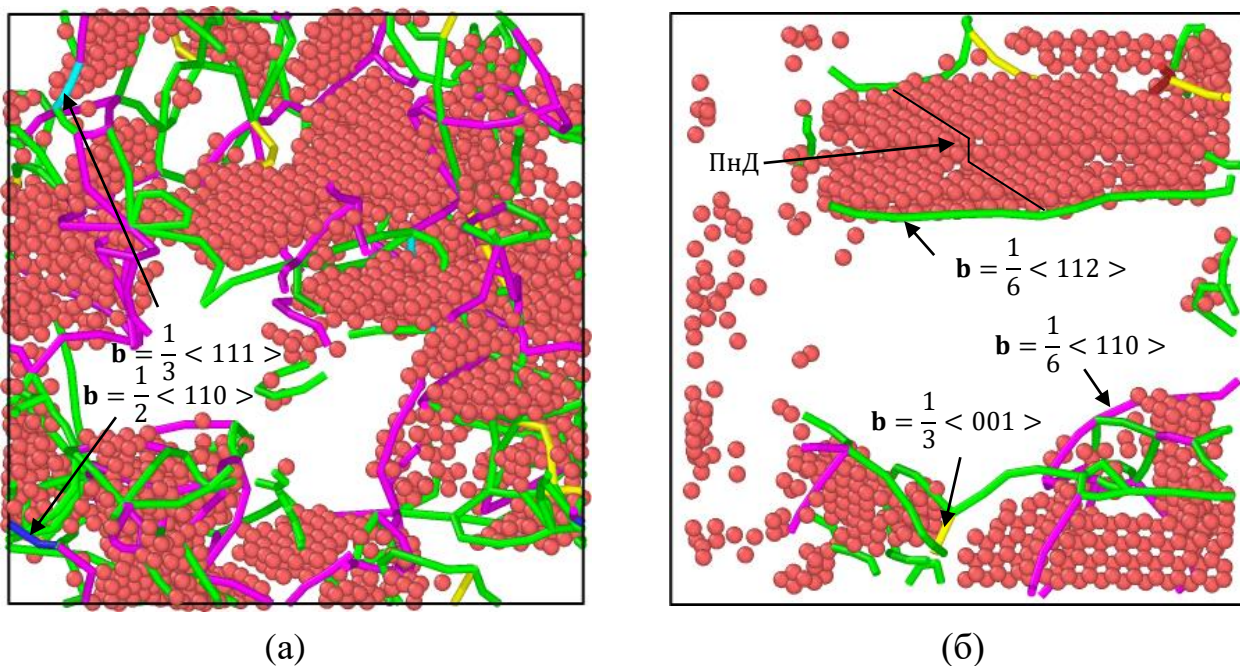


Рис. 2. Распределение дислокационных сегментов в расчетной ячейке после 75 пс моделирования ( $n = 5\%$ ,  $T = 900$  К): (а) – без генерации ударных волн; (б) – после прохождения пяти ударных волн. Цветовая визуализация дислокационных линий: зеленый – частичная дислокация Шокли; фиолетовый, желтый – вершинная дислокация; голубой – дислокация Франка; синий – полная дислокация. Дополнительно обозначен порог на дислокации (ПнД)

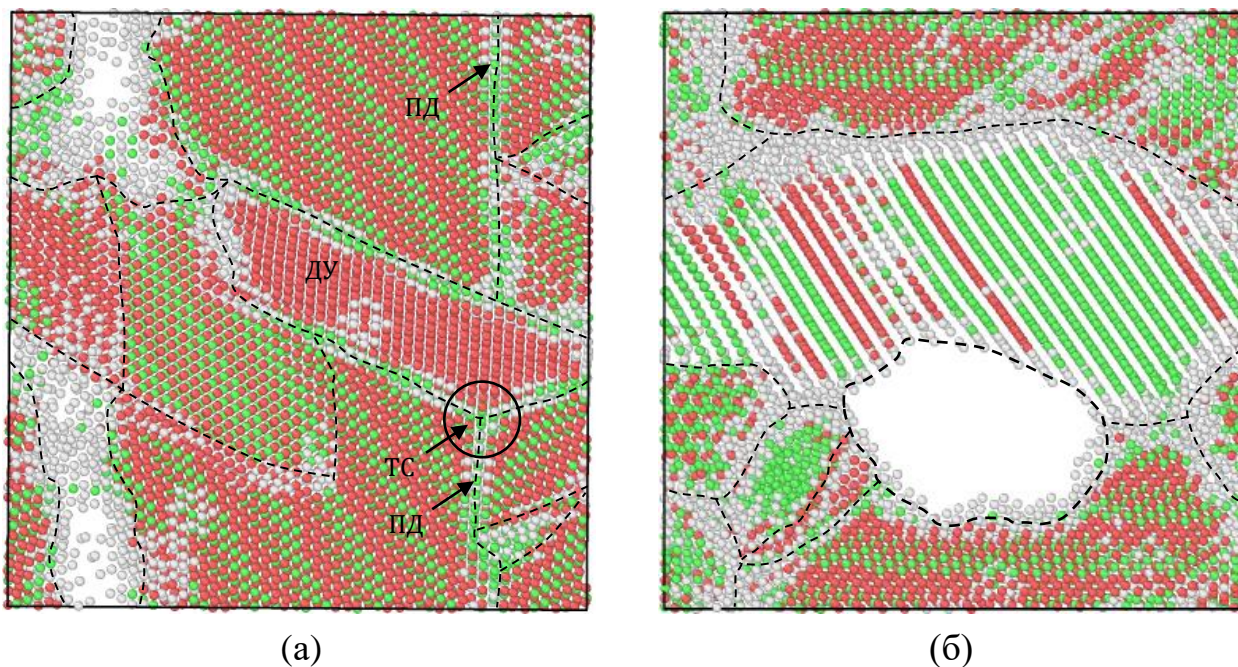


Рис. 3. Структура моделируемого кристалла (плоскость  $XZY$ ) после прохождения пяти ударных волн, генерируемых через 3 000 вычислительных шагов: (а)  $n = 15\%$ ,  $T = 1200$  К; (б)  $n = 20\%$ ,  $T = 300$  К. Визуализация выполнена аналогично рисунку 1. Дополнительно обозначен дефект упаковки (ДУ), плоскость двойникования (ПД), тройной стык (ТС)

Таким образом, проведенное исследование, результаты которого изложены в данной главе, показало, что ударные послекасадные 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.

В *четвертой главе* рассматривались структурные изменения, происходящие в кристалле, содержащем свободный объем, локализованный в виде сферических нанопор, при внешнем температурном и силовом воздействии. Расчеты показали, что при 300 К пора сохраняет сферическую форму и значительные структурные изменения не происходят. При 600 К в расчетной ячейке наблюдаются дислокации Ломер-Коттрелла, источником образования которых является поверхность поры. При 900 К наблюдается частичное растворение поры, а при 1200 К анализатор структуры уже не определяет атомы, соответствующие поверхности, что свидетельствует о полном растворении поры.

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

На следующем этапе исследования напряженное состояние в расчетной ячейке, с отличной от нуля девиаторной компонентой тензора напряжений  $\tau$ , достигалось путем сдвигового деформирования. Среди множества возможных способов реализации сдвиговой деформации был выбран сдвиг параллельно плоскости (111) вдоль направления  $[1\bar{1}0]$ .

Расчет касательных напряжений при различных углах сдвига (см. рис. 4.а) показал, что начиная с некоторого значения угла наблюдается понижение напряжений, что обусловлено перестройкой структуры моделируемого кристалла, являющейся ответом на внешнее воздействие.

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.б.

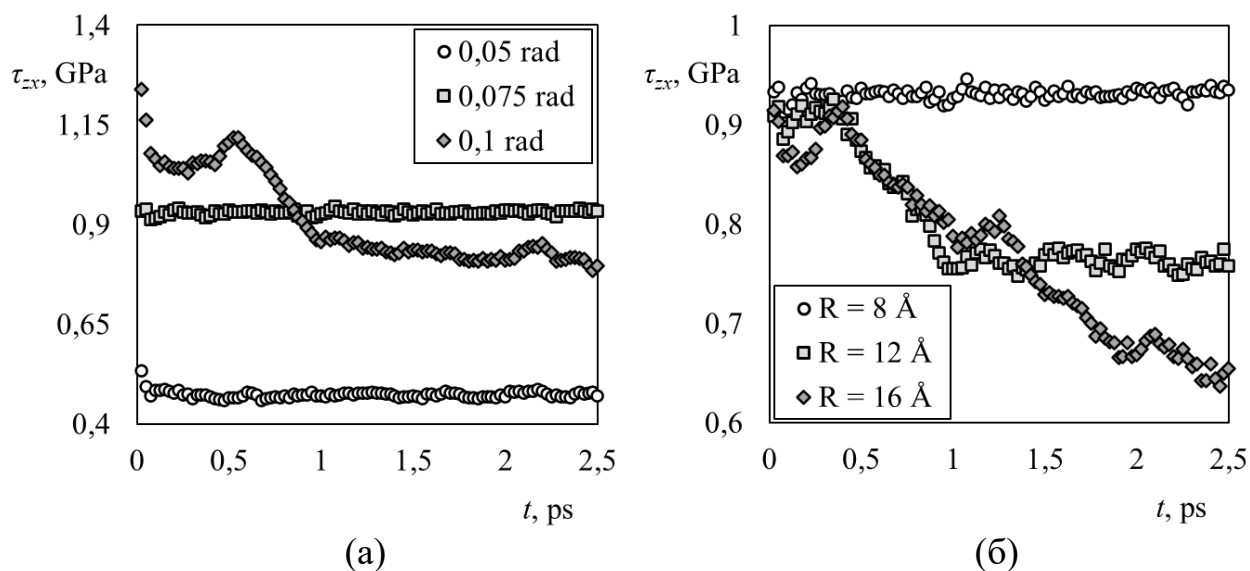


Рис. 4. Изменение касательных напряжений в расчетной ячейке, содержащей пору радиусом  $12 \text{ \AA}$ , в течение процесса релаксации при различных углах сдвига  $\gamma$  (а), и в расчетной ячейке, содержащей пору различного радиуса, в течение процесса релаксации при угле сдвига  $0.075 \text{ рад}$

Как следует из графиков, представленных на рисунке 4, 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. 5).

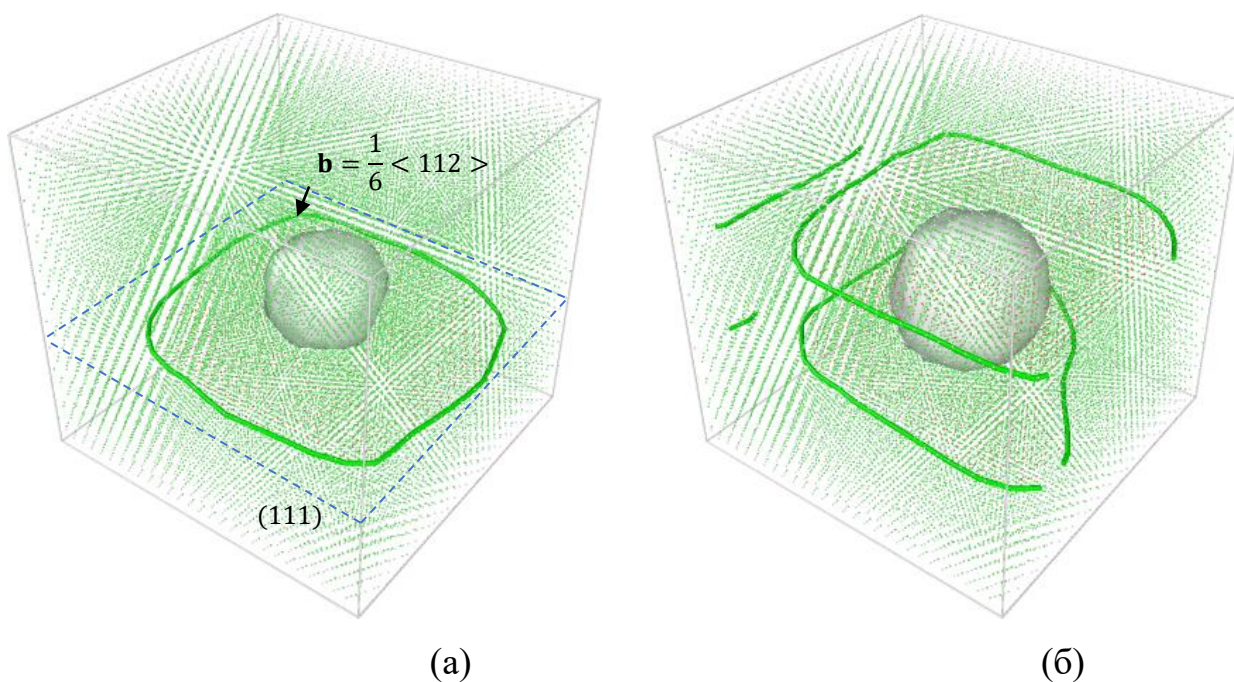


Рис. 5. Визуализация дислокационных линий через  $2.5 \text{ пс}$  модельного времени в расчетной ячейке, содержащей пору с радиусом  $12 \text{ (а)}$  и  $16 \text{ (б)} \text{ \AA}$  (угол сдвига  $0.075 \text{ рад}$ )

Очевидно, что при недостаточной деформации зарождение петли станет возможным, если в расчетной ячейке создать дополнительные источники касательных напряжений. Так в работе [4] 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. При этом наблюдался процесс зарождения петель на поверхности поры, часть из которых после угасания возмущений, вызванных сгенерированной волной, стягивалась обратно к поре, но общая протяженность дислокационных линий продолжала увеличиваться до некоторой равновесной длины, при которой сила линейного натяжения петли уравнивается силой Пича-Келлера, обусловленной внешним напряжением.

Исследование показало, что повышение температуры расчетной ячейки приводит к увеличению общей протяженности генерируемых дислокационных петель (см. рис. б.а) и уменьшению объема поры. Для того чтобы охарактеризовать процесс структурных преобразований был рассчитан удельный объем «фазы вещества», представляющий собой отношение объема, занятого частицами системы, к общему объему расчетной ячейки. Результаты вычислений приведены на рисунке б.б.

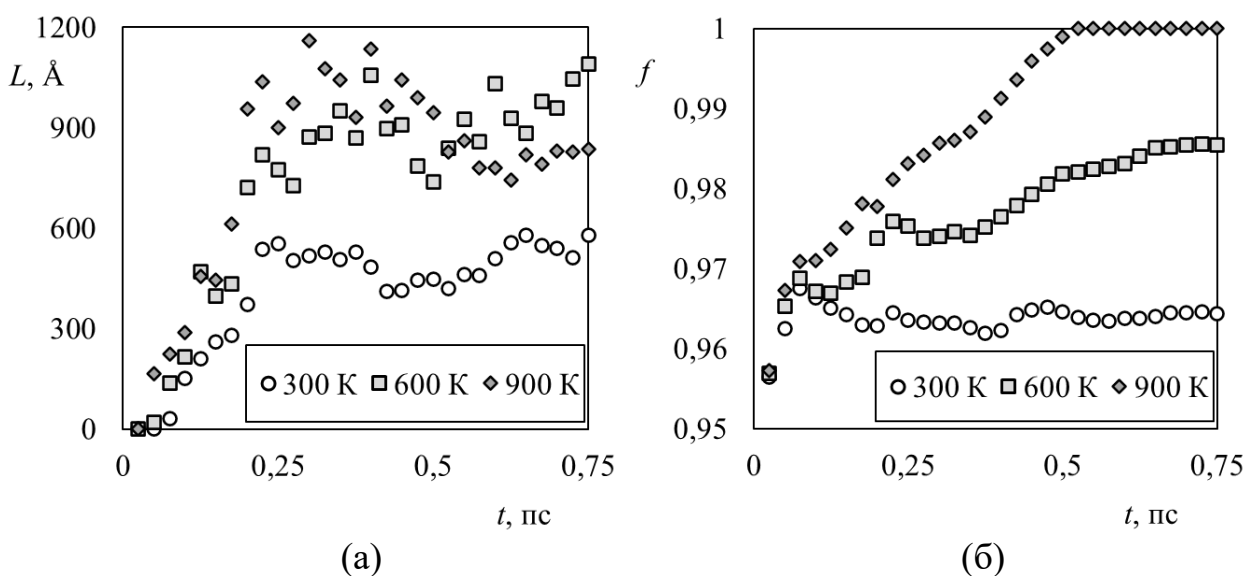


Рис. 7. Изменение длины дислокационных петель (а) и удельного объема «фазы вещества» (б) в расчетной ячейке, содержащей пору с радиусом 16 анг., в случае генерации ударной волны (угол сдвига 0.06 рад, температура расчетной ячейки 300 К)

Как следует из рисунка 6 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.

Целью последующих исследований, результаты которых представлены в данной главе, являлось установление механизмов залечивания ансамбля пор, находящегося в деформированном кристалле, под воздействием ударных волн. 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. 7.а). 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. 7.б).

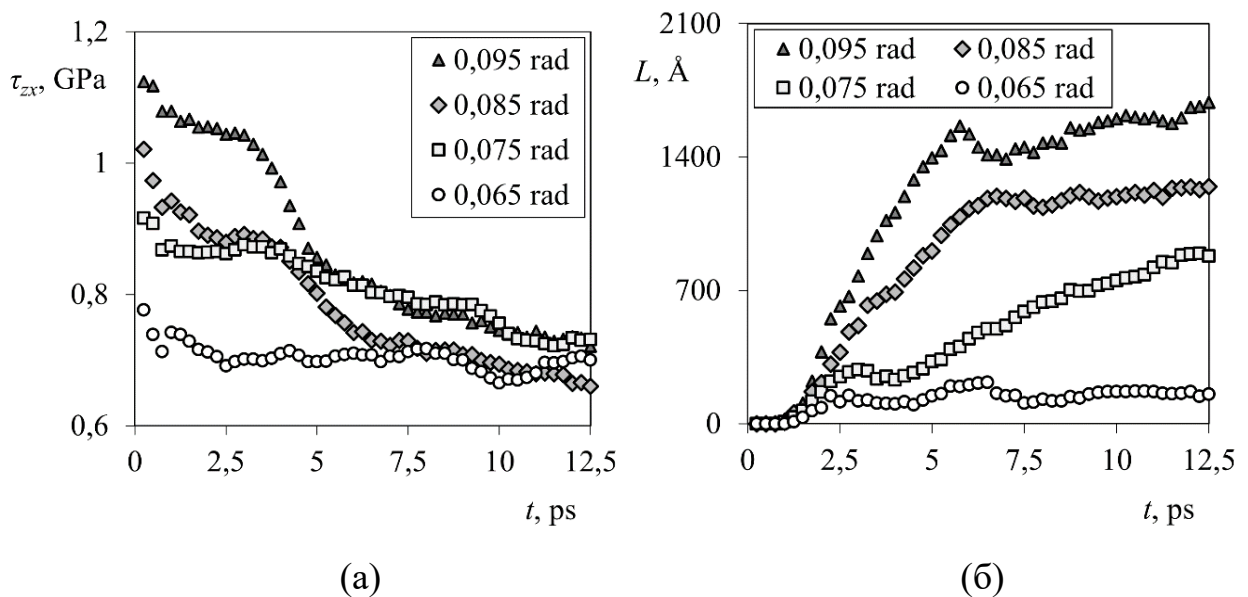


Рис. 8. Изменение касательных напряжений и суммарной длины  $L$  дислокационных петель в расчетной ячейке в процессе моделирования при различных углах сдвига  $\gamma$

Визуализация структуры, продемонстрировала образование на порах дислокационных петель сдвига, располагающихся в плоскостях семейства  $\{111\}$  (см. рис. 8). Как следует из рисунка 8.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. 9).

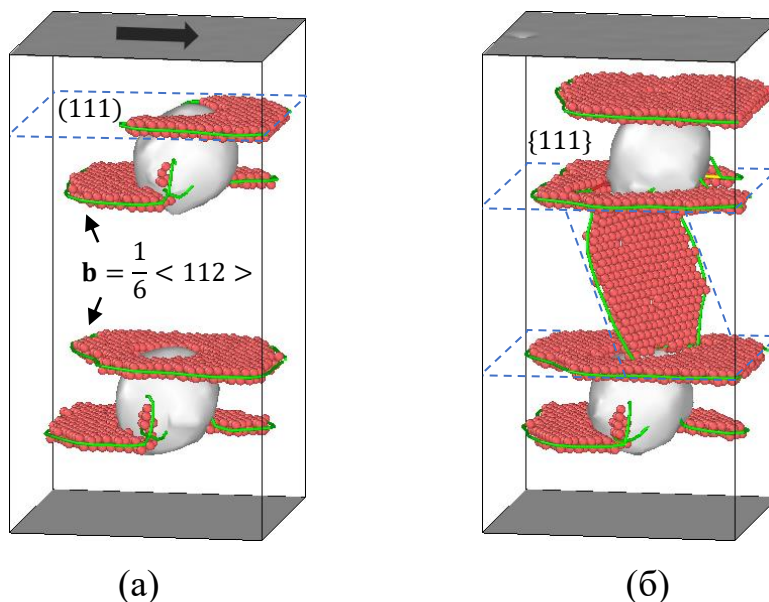


Рис. 8. Визуализация дислокационной структуры через 12.5 пс модельного времени при углах сдвига  $\gamma = 0.075$  (а) и  $0.08$  (б) рад. Показаны атомы, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке. Стрелкой обозначено направление сдвига

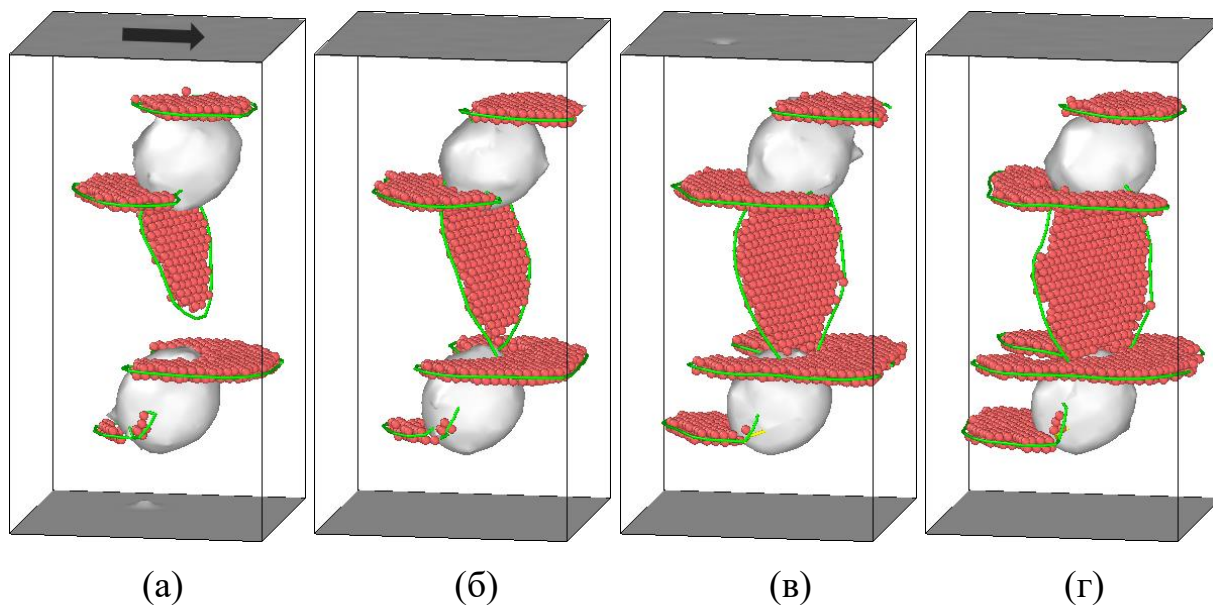


Рис. 9. Визуализация дислокационной структуры через 4.5 (а), 5 (б), 6.25 (в) и 7.5 (г) пс модельного времени при угле сдвига  $\gamma = 0.08$  рад

Подобный процесс взаимодействия ансамбля пор наблюдается и при других радиусах моделируемых пор (см. рис. 10). 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  $2a_0$ , где  $a_0$  – равновесный параметр решетки).

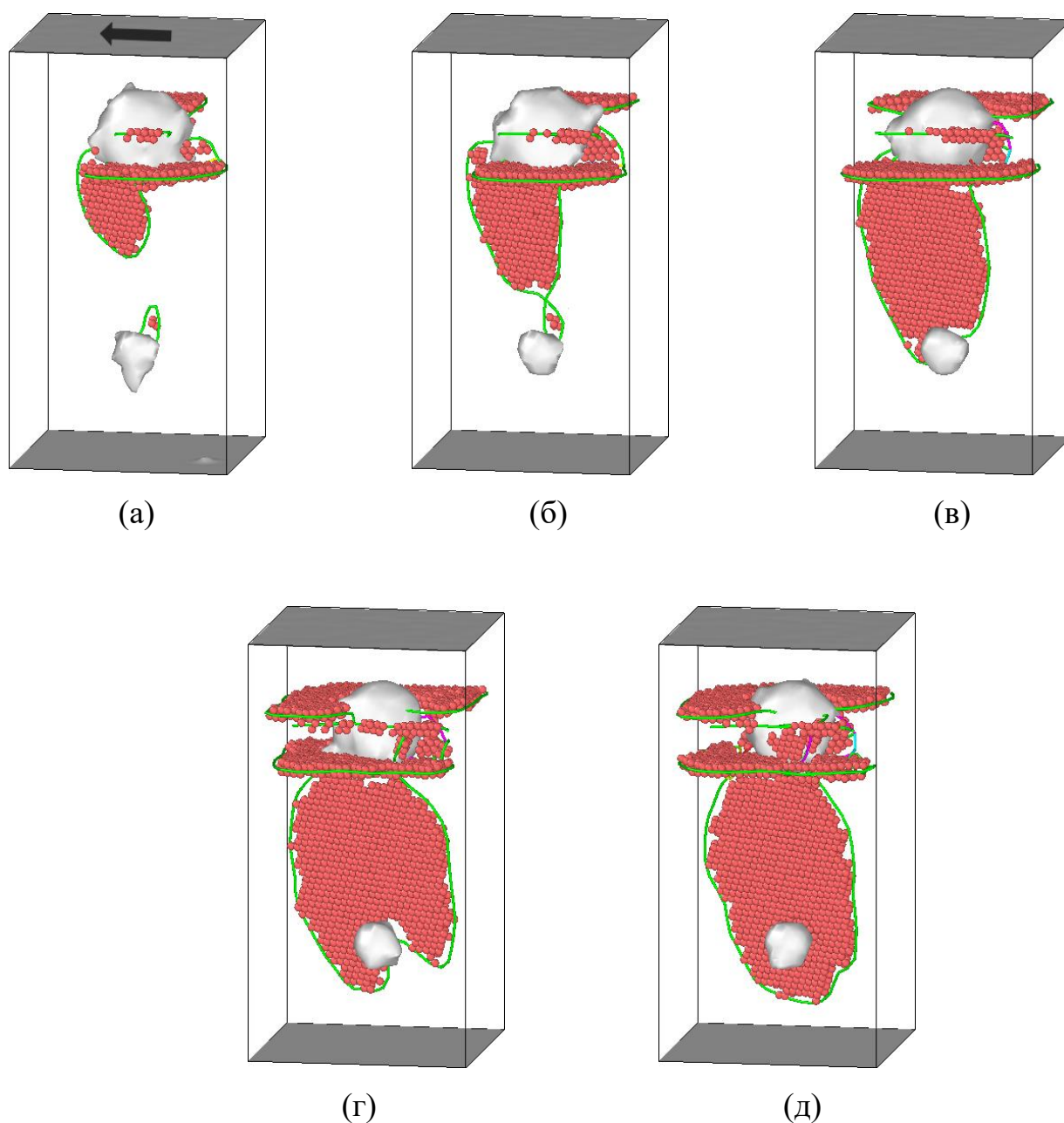


Рис. 10. Визуализация дислокационной структуры через 4.75 (а), 5.75 (б), 7.5 (в), 12 (г) и 15 (д) пс модельного времени при угле сдвига  $\gamma = 0.085$  рад и порах разного радиуса



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  $\gamma$  величина удельного объема «фазы вещества»  $f$  также растет (см. рис. 11.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. 11.б). В данном случае развитие дислокационной структуры оценивается с помощью доли атомов, локальное окружение которых соответствует ГПУ-решетке.

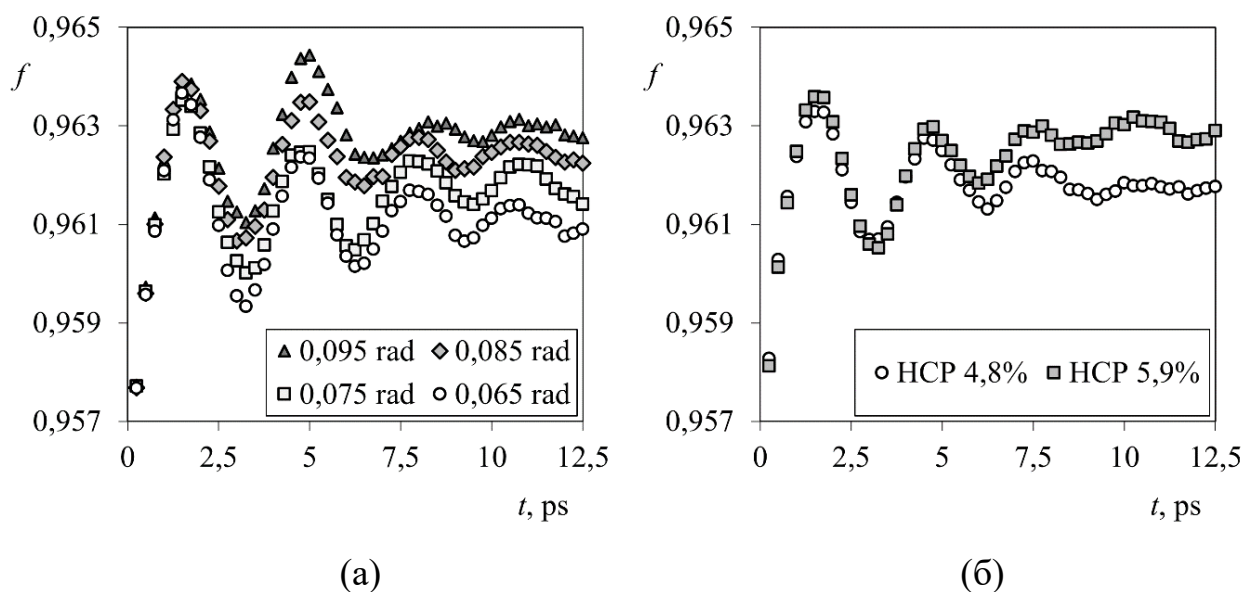


Рис. 11. Изменение объемной доли «фазы вещества»  $f$  при различных углах сдвига  $\gamma$  (а) и при различном развитии дислокационной структуры (б) (угол сдвига  $\gamma = 0.08$  рад)

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

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 (из-за использования процедуры термостатирования). Так на рисунке 12 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.

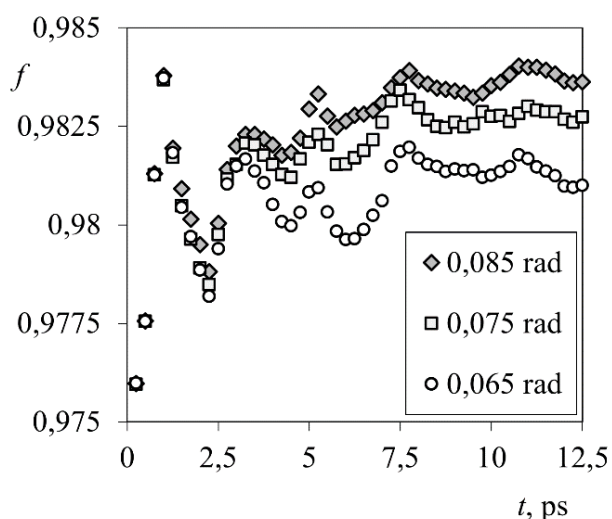


Рис. 12. Изменение объемной доли «фазы вещества»  $f$  при различных углах сдвига  $\gamma$  в случае генерации в расчетной ячейке ударной волны (поры различного размера)

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.

При проведении компьютерных экспериментов, результаты которых изложены в *пятой главе*, рассматривались структурные изменения, происходящие в кристалле, содержащем поры цилиндрической формы. Подобного рода дефекты могут представлять собой треки, формирующиеся после прохождения через кристалл высокоэнергетических ионов, или, например, при выходе на поверхность перегретых замкнутых включений жидкости (маточного раствора) [5].

Исследование показало, что подобного рода дефекты являются источником гетерогенного зарождения дислокационных петель (см. рис. 13), способствующих снижению касательных напряжений в моделируемой структуре.

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 14.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. 14.б).

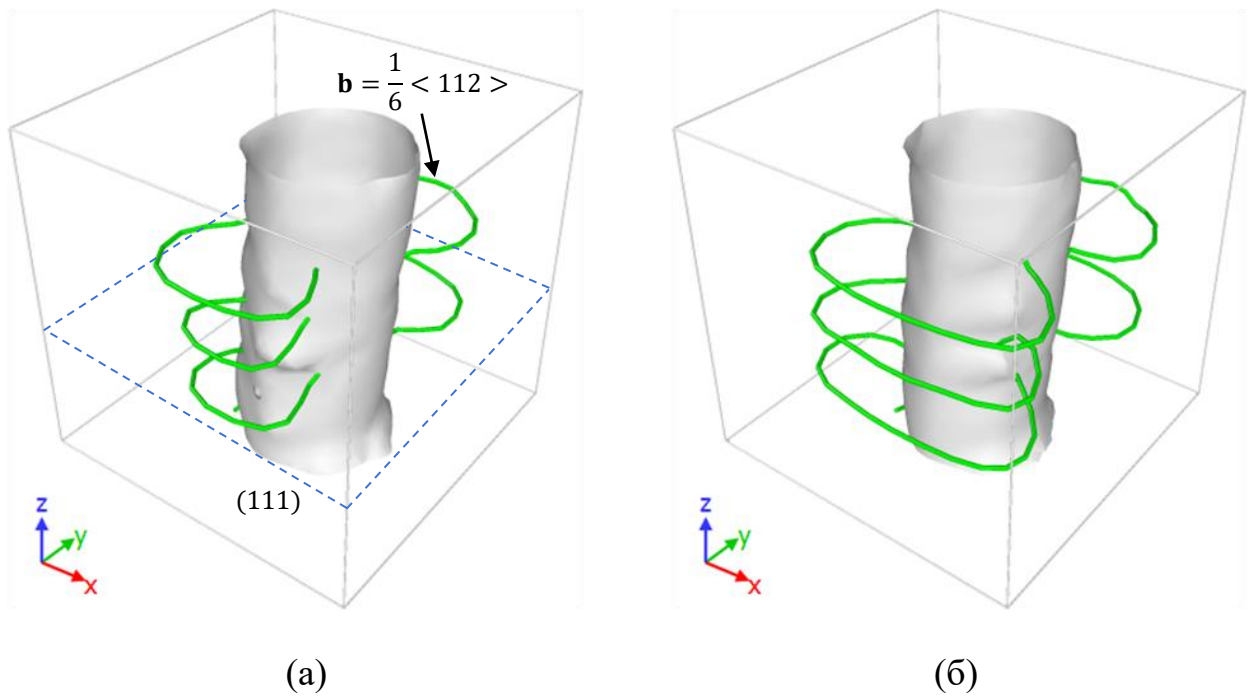


Рис. 13. Визуализация развития дислокационной структуры в процессе моделирования через 7.5 (а) и 25 (б) пс. Угол сдвига  $\gamma = 0.1$  рад,  $T = 300$  К

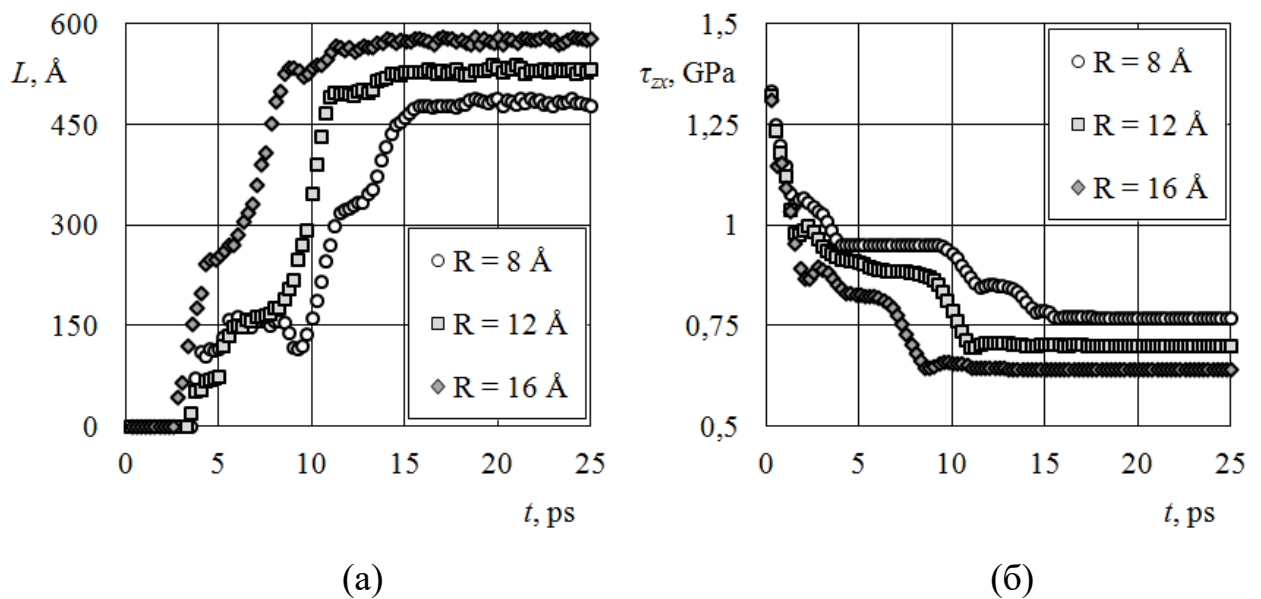


Рис. 14. Изменение суммарной длины  $L$  дислокационных петель (а) и касательных напряжений в расчетной ячейке (б) в процессе моделирования при различных радиусах основания цилиндрических пор  $R$ .

Угол сдвига  $\gamma = 0.1$  рад

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 15.а. 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 неотожженным образцам реальных металлов.

При увеличении температуры, как правило, плотность дислокаций должна уменьшаться, что обусловлено активизацией процессов скольжения и переползания дислокаций, способствующих их аннигиляции [6]. В нашем случае плотность также уменьшается (см. рис. 15.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.

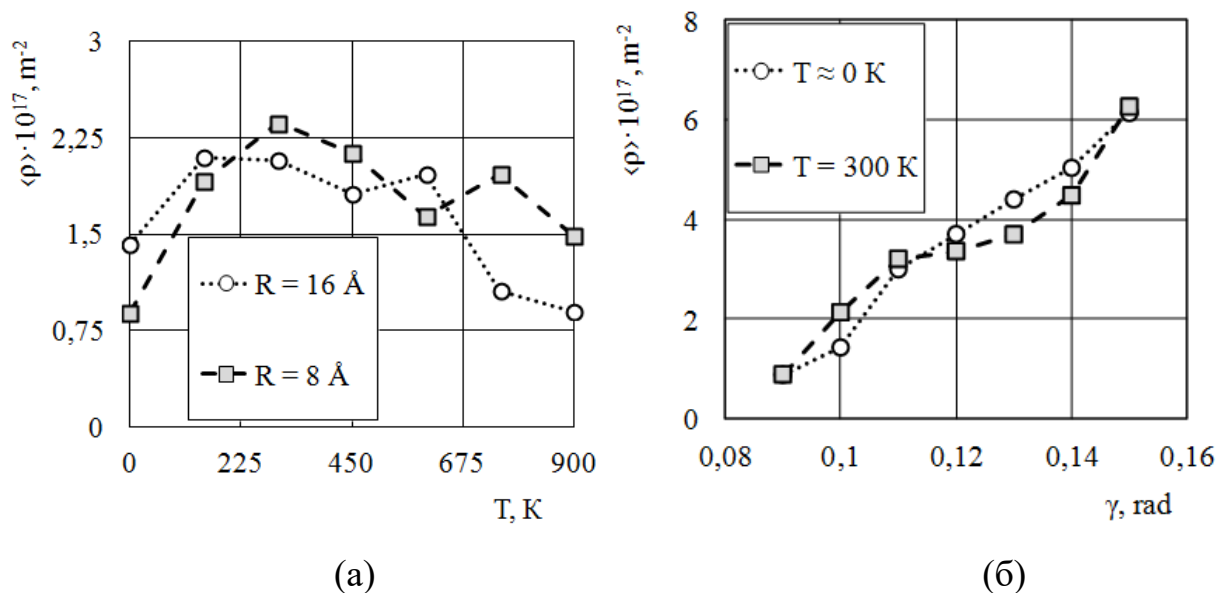


Рис. 15. Изменение средней плотности дислокаций  $\langle \rho \rangle$  при различных углах сдвига ( $R = 16 \text{ \AA}$ ) (а) и различной температуре расчетной ячейки ( $\gamma = 0.1 \text{ рад}$ ) (б), вычисленной на временном интервале 12.5...15 пс

На следующем этапе исследования проводилось моделирование с генерированием ударных волн в расчетной ячейке. При этом будем рассматривать деформацию с углом сдвига, при котором не происходит образование дислокационных петель ( $\gamma = 0.07 \text{ рад}$ ). Результаты моделирования показали, что под воздействием волн на поверхности поры начинают зарождаться дислокационные петли. Так на рисунке 16 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.

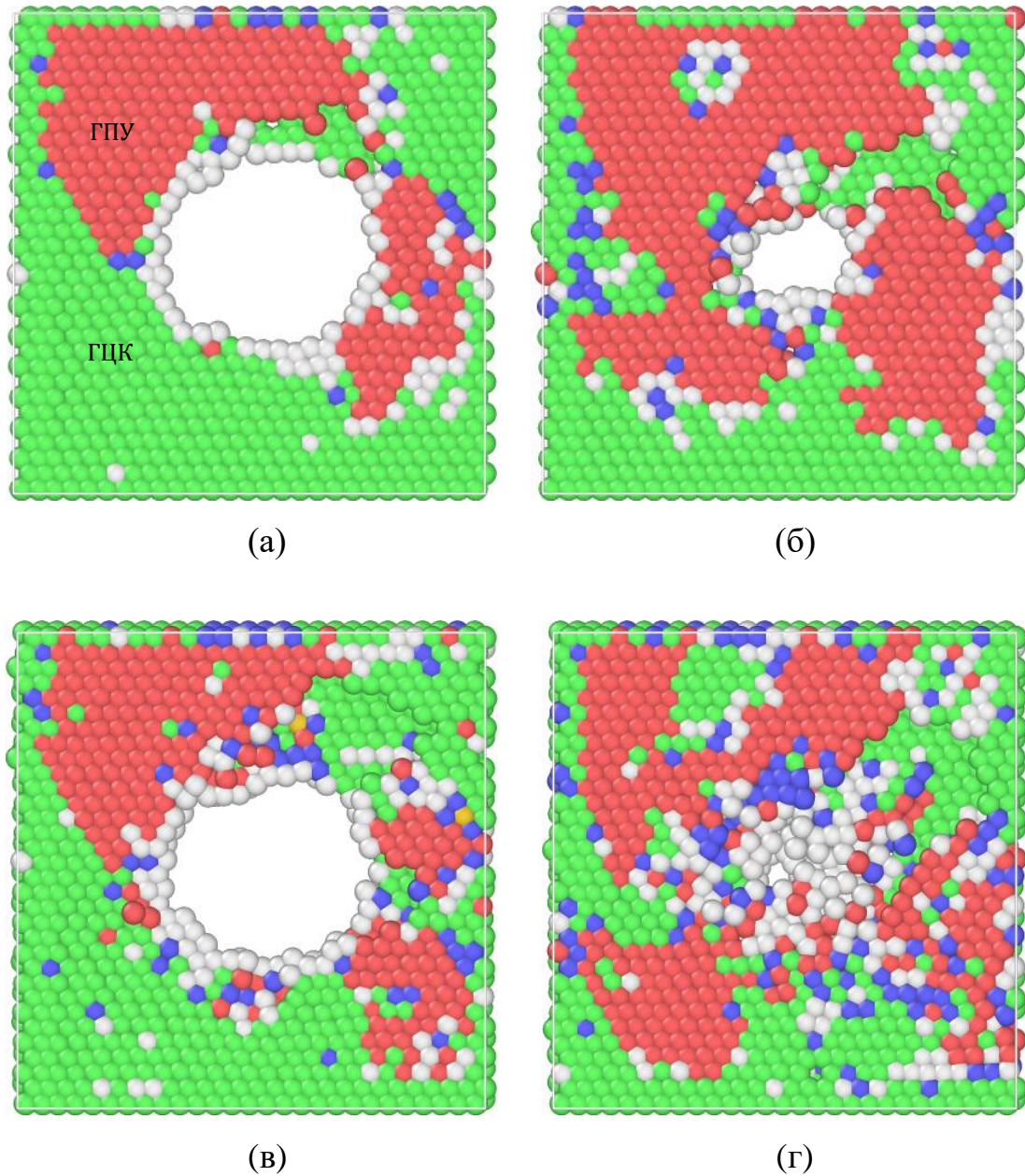


Рис. 16. Фрагмент плоскости (111) расчетной ячейки, содержащей пору с радиусом основания 16 анг. (а, в) и 8 анг. (б, г), через 5 пс после генерации ударной волны. Температура расчетной ячейки  $T = 300$  К (а, б) и 600 К (в, г). Цветовая визуализация соответствует распределению локального окружения атомов: зеленый – ГЦК, красный – ГПУ, синий – ОЦК, бесцветный – не определено

На рисунке 17.а 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.

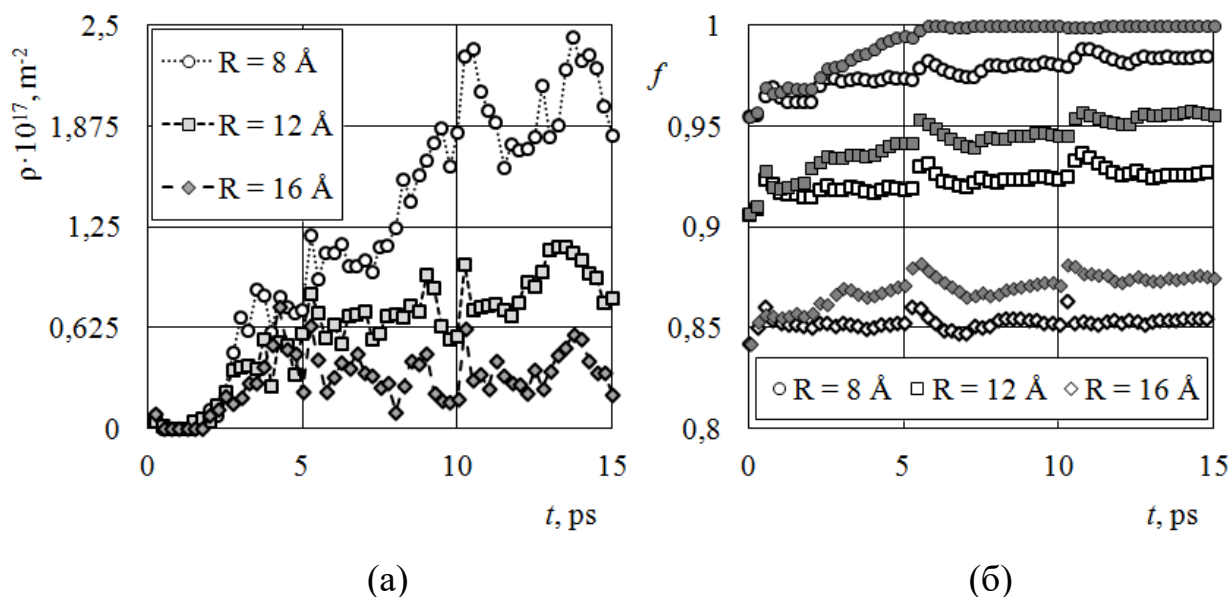


Рис. 17. Изменение плотности дислокаций  $\rho$  ( $T = 300 \text{ K}$ ) (а) и объемной доли «фазы вещества»  $f$  (светлые маркеры –  $T = 300 \text{ K}$ , темные маркеры –  $T = 600 \text{ K}$ ) (б), при прохождении ударных волн, генерируемых в расчетной ячейке с интервалом 5 пс. Угол сдвига  $\gamma = 0.07$  рад

Результаты вычислений удельного объема «фазы вещества» приведены на рисунке 17.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 растворяется (удельный объем «фазы вещества» становится равным 1). Следовательно, наблюдается делокализация свободного объема.

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

вкупе с термическим воздействием способны инициировать процесс залечивания пор.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В результате проведенного исследования были сделаны 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.

## ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Johnson R.A. Alloy models with the embedded-atom method // Physical Review B. 1989. V.39. №17. P. 12554 - 12559.

2. XMD – Molecular dynamics for metals and ceramics // [Electronic resource]. Mode of access: <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.

3. 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.

4. 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.

5. 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.

6. 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.

## ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### *Статьи, опубликованные в изданиях, рекомендованных ВАК*

1. 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.



2. 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.

3. **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.

4. 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.

5. 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.

#### *Статьи, включенные в базу данных Scopus*

1. 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. Vol. 129. Pp.985–989.

2. 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.

#### *Статьи и тезисы, опубликованные в трудах научных конференций*

1. **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.

2. 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.

3. 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 конфе-

ренции «Актуальные вопросы современной науки: теоретические и практические аспекты». Новокузнецк. 2018. С.134-136.

4. **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. Черногловка. 2019. С.47-49.

5. 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.

6. **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.

7. **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.

8. **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.

9. **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.

10. 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.

11. **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.

12. 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.

13. 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. Том 1. С.657-660.

14. **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.

15. **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.