

На правах рукописи



БАЯЗИТОВ АЙРАТ МАНСУРОВИЧ

**МОЛЕКУЛЯРНО–ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
СВЕРХЗВУКОВЫХ  $N$ –КРАУДИОНОВ В МЕТАЛЛАХ**

Специальность 1.3.8. – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Барнаул- 2024

Работа выполнена в Институте физики молекул и кристаллов – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского Федерального исследовательского центра Российской академии наук

**Научный руководитель:** **Дмитриев Сергей Владимирович**  
доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, г. Уфа

**Официальный оппонент:** **Маркидонов Артем Владимирович**  
зав. кафедрой, доцент, доктор физико-математических наук, Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета, г. Кемерово

**Официальный оппонент:** **Гафнер Юрий Яковлевич**  
профессор, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой, заведующий лабораторией «Нанопфизика», Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова, г. Абакан

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки, Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, г. Москва

Защита состоится « \_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2024 г. в \_\_\_ часов на заседании диссертационного совета 24.2.269.03 при ФГБОУ ВО «Алтайский государственный университет» по адресу: 656049, Россия, 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 « \_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2024 г.

Учёный секретарь  
диссертационного совета



Волков Николай Викторович

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Точечные дефекты в кристаллической решётке оказывают значительное влияние на процессы переноса массы и энергии в металлах и сплавах во время их получения или эксплуатации. Важным типом точечных дефектов являются краудионы, которые представляют собой межузельные атомы, внедрённые в плотноупакованные атомные ряды кристалла. В отличие от других конфигураций межузельных атомов краудион обладает весьма низким энергетическим барьером миграции. Согласно первопринципным и молекулярно-динамическим расчётам, нередко краудионы имеют и наименьшую энергию активации по сравнению с другими межузельными атомами. Тем самым, краудионы обладают высокой подвижностью и, помимо стационарных конфигураций, в зависимости от начальных условий, они могут двигаться со скоростью меньше или больше скорости продольного звука. Сверхзвуковые краудионы возникают при интенсивных внешних воздействиях, таких, как, облучение нейтронами, ионная имплантация, плазменная обработка поверхности, воздействие лазерного излучения. Поскольку сверхзвуковые краудионы могут возбуждаться в металлах и сплавах при облучении медленными и быстрыми нейтронами, проникающими на большую глубину материала, они ответственны за нежелательное явление - радиационное распухание металлов в ядерных реакторах. Изучение сверхзвуковых краудионов с помощью практических экспериментов сталкивается с серьёзными техническими трудностями. В данной ситуации моделирование методом молекулярной динамики является наиболее эффективным способом изучения точечных дефектов, движущихся со сверхзвуковой скоростью. В связи с этим, актуальной и важной задачей является исследование методами компьютерного моделирования способов инициации и динамики сверхзвуковых краудионов в металлах и упорядоченных сплавах.

**Степень разработанности темы исследования.** Несмотря на то, что было проведено множество исследований, направленных на изучение динамики краудионов в кристаллической решётке, существует немало нерешённых задач в этой области, например, слабо изучены различные типы сверхзвуковых краудионов, взаимодействия краудионов между собой, механизмы их возникновения в металле, что говорит о недостаточной степени разработанности темы исследования и необходимости дальнейшей работы в данном направлении.

**Цель работы:** Молекулярно-динамическое исследование сверхзвукового движения краудионов разных типов в плотноупакованных направлениях и атомов в канале октаэдрических пор в металлах.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи:**

1. Сопоставление динамики сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в кристаллической решётке ГЦК металлов;
2. Анализ особенностей динамики сверхзвуковых 2-краудионов в кристаллических решётках меди, никеля, алюминия, платины, свинца, а также интерметаллида  $Ni_3Al$ ;
3. Изучение столкновений сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в меди;
4. Моделирование сверхзвуковых кластеров 3,2-краудионов в решётке Pt в зависимости от начальной конфигурации;

5. Изучение влияния многочастичных межатомных потенциалов на длину пробега краудионов в кристаллической структуре вольфрама;
6. Моделирование сверхзвукового движения атома в канале октаэдрических пор кристаллической структуры Cu.

#### **Научная новизна:**

1. Впервые исследованы сверхзвуковые 1- и 2-краудионы в ряде ГЦК металлов и показано, что 2-краудионы более эффективно осуществляют массоперенос, поскольку длина их пробега при той же начальной энергии больше, чем у 1-краудионов;
2. Показан солитоноподобный характер столкновения сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в меди;
3. Обнаружено и изучено квазипериодическое движение сверхзвуковых 2-краудионов в ГЦК решётке Pt;
4. Выявлена устойчивая конфигурация движения сверхзвуковых 3,2-краудионов в трёхмерной решётке Pt;
5. Предложен простой метод оценки жёсткости отталкивательной части межатомных потенциалов на примере ОЦК решётки вольфрама;
6. Показано, что движение краудиона в биатомном ряду интерметаллида  $Ni_3Al$  приводит к формированию антифазной цепочки, что является дополнительным каналом его торможения, поскольку на создание данного сверхструктурного дефекта затрачивается энергия.
7. Впервые изучено движение атома в канале между плотноупакованными рядами кристаллической решётки меди. Установлено, что атом движется в канале устойчиво даже при заметном начальном отклонении положения атома от оси канала. Атом, движущийся со сверхзвуковой скоростью вдоль канала, инициирует 1-краудионы в перпендикулярном направлении.

**Теоретическая и практическая значимость работы** состоит в вычислении и сравнении длин пробега сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в ГЦК металлах и в упорядоченном сплаве  $Ni_3Al$ , в нахождении диапазона скоростей атомов, приводящих к устойчивому движению сверхзвуковых краудионов, а также в определении максимальных длин пробега краудионов в этом диапазоне. Исследована динамика сверхзвуковых 2-краудионов и 3,2-краудионов в кристалле платины. В работе было также изучено движение атома в октаэдрическом канале, которое может приводить к инициированию сверхзвуковых краудионов. Полученные результаты дают более полное представление о переносе массы и энергии в металлах и сплавах, под влиянием внешних воздействий.

#### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Для запуска сверхзвукового 2-краудиона с той же длиной пробега требуется меньше энергии по сравнению с 1-краудионом;
2. Длина пробега сверхзвукового 2-краудиона при квазипериодическом движении не зависит от начальной скорости отдельных атомов при одинаковой начальной кинетической энергии конфигурации;

3. Среди исследованных конфигураций сверхзвуковых 3,2-краудионов конфигурация параллельная плоскости  $(\bar{1}10)$  является наиболее устойчивой, поскольку в ней расстояние между 2-краудионами оказывается наибольшим и они меньше взаимодействуют друг с другом;
4. Стабильность движения сверхзвукового 2-краудиона возрастает с увеличением жесткости отталкивательной части используемого потенциала взаимодействия;
5. Движение краудиона в биатомном ряду интерметаллида  $\text{Ni}_3\text{Al}$  приводит к формированию антифазной цепочки, что является дополнительным каналом его торможения, поскольку на создание данного сверхструктурного дефекта затрачивается энергия.
6. Движения атома в октаэдрическом канале инициирует сверхзвуковые краудионы, которые распространяются перпендикулярно каналу.

**Апробация работы.** Результаты исследований представлены на российских и международных конференциях, таких как: Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (г.Уфа, 2018, 2020, 2022 гг.); V Межрегиональная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков, посвященной 100-летию Республики Башкортостан «Теоретические и экспериментальные исследования нелинейных процессов в конденсированных средах» (г.Уфа, 2019 г.); VI Межрегиональная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков, посвященной 150-летию со дня рождения В.И. Ленина «Теоретические и экспериментальные исследования нелинейных процессов в конденсированных средах» (г.Уфа, 2020 г.); Международная конференция «Физика и технологии перспективных материалов – 2021 (г.Уфа).

**Личный вклад автора работы.** В работе над диссертацией автор самостоятельно изучил и обобщил научную литературу по теме исследования, провёл исследования с использованием метода молекулярной динамики, принял непосредственное участие в интерпретации и анализе полученных результатов, формулировке выводов, подготовке научных статей и тезисов докладов к публикации. В работах, опубликованных в соавторстве, соискателю принадлежат основные результаты, посвященные динамике сверхзвуковых  $M, N$  и  $N$ -краудионов, квазипериодической динамике сверхзвукового 2-краудиона и движению атома в канале октаэдрических пор меди. Автор диссертационного исследования активно участвовал в постановке задач и обсуждении результатов.

**Публикации.** По материалам диссертационной работы опубликовано 15 статей в журналах, из них 12 в изданиях, входящих в базы данных Web of Science и Scopus, а также тезисы 8 докладов на Международных и Всероссийских конференциях.

**Финансирование работы.** Работа поддержана грантами РНФ № 21-19-00813 и № 21-12-00229.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 103 страницы с 52 рисунками и 2 таблицами. Список литературы содержит 116 наименований.

## Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость представляемой работы, изложен метод исследования.

В первой главе проведён обзор литературы по теме диссертации, описаны виды точечных дефектов, критерий самофокусировки атомных соударений, влияние краудионов на физические процессы, протекающие в кристаллах при экстремальных воздействиях, таких как лазерная обработка [1], интенсивная пластическая деформация [2], сверхбыстрое нагружение [3], облучение [4], плазменная обработка [5], которые приводят к переходу решетки в неравновесное состояние и вызывают необратимые изменения кристаллической структуры. В этих процессах атомы сильно отклоняются от своих равновесных положений решётки, и нелинейная природа межатомных связей начинает играть значительную роль. Такие экстремальные воздействия приводят к появлению аномально высокой концентрации точечных дефектов, называемых парами Френкеля (вакансии и межузельные атомы). Как было упомянуто выше, межузельный атом может существовать во многих конфигурациях, включая конфигурацию краудиона, когда он расположен в плотноупакованном атомном ряду [6; 7]. Миграционная способность краудионов намного выше по сравнению с вакансиями [2; 8] и с межузельными атомами в других конфигурациях, что делает их эффективными в осуществлении массопереноса. Высокая миграционная способность краудионов приводит к их быстрому исчезновению, затрудняя экспериментальный анализ их структуры и движения [9]. Поэтому для изучения краудионов широко используются методы компьютерного моделирования, включая методы молекулярной динамики [10], Монте-Карло [11], первопринципные расчёты [12] и многомасштабное моделирование [7; 13].

Сверхзвуковые краудионы активно изучались в связи с попытками объяснить природу треков, видимых невооруженным глазом в кристаллах слюды мусковита [14].

Интересные исследования динамики точечных дефектов проведены Маркидоновым А.В. и Старостенковым М.Д. с соавторами [15–20]. К примеру, в работе [17] были проведены исследования одиночных краудионов и их комплексов методом молекулярной динамики в ГЦК решётке. В результате чего выявлена слабоустойчивость состояния системы с одиночными краудионом, а их комплексы, напротив, занимают более энергетически выгодные межузельные положения. Даже при умеренном внешнем воздействии (термической активации или прохождении волны сжатия) одиночные краудионы образуют дефект типа гантели, в то время как комплексы краудионов представляют собой более стабильные конфигурации. При исследовании процессов самодиффузии в решётке никеля, инициированной после взаимодействия с ударной волной, было выявлено, что механизм массопереноса с помощью краудионов является основным в самодиффузии [15]. В ходе исследований определено, что зарождение и образование кластеров точечных дефектов является главным релаксацион-

ным механизмом метастабильных пор. Исследовалась динамика перестройки структуры в процессе релаксации в алюминии посредством внедрения цепочек, которые содержат в равных долях определённое число вакансий и межузельных атомов, которые, в свою очередь, расположены в плотноупакованном атомном ряду. Авторами показано, что процесс релаксации структуры носит стадийный характер, а именно, сначала происходит генерация ударных волн, следом идёт зарождение вихревых смещений атомов, и далее, происходит трансформация ударных волн в акустические, сопровождаемые коллективными смещениями атомов из межузельных положений в вакансионные; последние развиваются со скоростями, значительно превышающими скорость звука в металле [16].

В работе [21] исследовались краудионы с использованием модели Френкеля-Конторовой, в которой учитывался ангармонизм взаимодействия между соседями. В данной статье было показано, что краудионы, описываемые такой моделью, могут быть в состоянии покоя, а также двигаться с дозвуковой или сверхзвуковой скоростью. Наряду со сверхзвуковыми 1-краудионами был изучен массоперенос сверхзвуковыми  $N$ -краудионами, которые возбуждались путем придания начальной скорости  $N$  соседним атомам вдоль выбранного плотноупакованного атомного ряда [22] (см. рис.1).

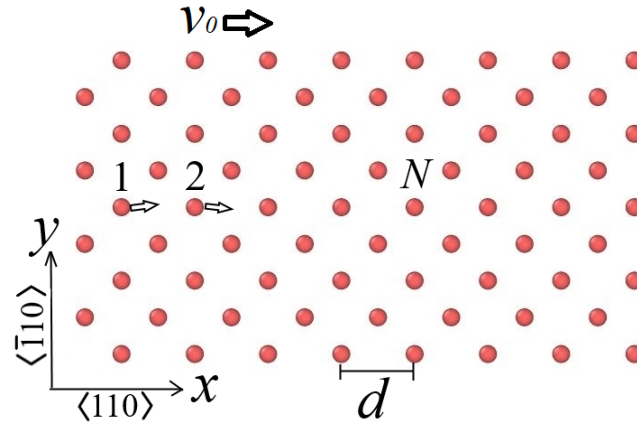


Рисунок 1 — Молекулярно-динамическая модель, используемая для запуска  $N$ -краудиона путём сообщения  $N$  атомам начальной скорости  $v_0$ . Атомы, занимающие узлы ГЦК решётки, показаны в проекции на плоскость  $(x, y)$ , где оси декартовой системы координат  $x$ ,  $y$  и  $z$  направлены вдоль кристаллографических направлений  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle \bar{1}10 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$ .

Оказалось, что сверхзвуковые  $N$ -краудионы могут возбуждаться с меньшей энергией и преодолевать гораздо большие расстояния, чем сверхзвуковые 1-краудионы. Это связано с тем фактом, что движение сверхзвуковых  $N$ -краудионов при  $N > 1$  является более самофокусирующимся, чем при  $N = 1$  [22; 23]. Столкновения атомов в плотноупакованном ряду со скоростью выше порогового уровня приводят к расфокусировке, т.е. любое небольшое отклонение вектора скорости от направления ряда будет экспоненциально увеличиваться от атома к атому [22; 23]. Столкновения со скоростями ниже порогового значения являются самофокусирующимися, и направление вектора скорости при последовательных столкновениях будет экспоненциально приближаться к направлению атомного ряда. Из этого следует, что

существует верхний предел энергии, которая может быть сообщена атому для возбуждения сверхзвукового 1-краудиона. Эта энергия может быть увеличена без увеличения скорости атомов, если возбуждается не один, а  $N$  соседних атомов, создавая сверхзвуковой  $N$ -краудион. Обладая большей энергией,  $N$ -краудион с  $N > 1$  распространяется на большее расстояние по сравнению с 1-краудионом. Одновременное возбуждение двух атомов в атомном ряду может быть легко достигнуто путем бомбардировки поверхности кристалла двухатомными молекулами [24].

Этот факт важен для таких технологических процессов, как осаждение, распыление и ионная имплантация. В связи с этим, продолжается изучение вопроса образования сверхзвуковых 2-краудионов в каскадах столкновений в металлах при облучении. Сверхзвуковые 1- и 2-краудионы несут один межузельный атом, и когда они преобразуются в дозвуковые краудионы, они становятся неразличимыми. В дальнейшем был принят новый термин  $M,N$ -краудиона, смысл которого заключается в том что,  $N$ -краудионы возбуждаются в  $M$  соседних плотноупакованных кристаллографических направлениях.  $M,N$ -краудионы, запущенные со скоростью ниже скорости звука, исследовались в кристалле Морзе [25]. В процессе исследования было обнаружено, что при повышении значения  $N$  с 1 до 2 длина пробега краудиона увеличивается в три-четыре раза, а  $M,1$ -краудионы несут внутреннюю колебательную моду, имеющую частоту выше верхней границы фононной полосы.

Особое внимание уделено влиянию межатомных потенциалов Морзе и Борна-Майера на движение краудионов [26] в двумерной треугольной решётке с межатомным расстоянием  $d$ . Наиболее важный результат проведённого исследования представлен на рисунке 2, на котором показана длина пробега краудиона  $S$ , нормированная на межатомное расстояние, в зависимости от начальной скорости возбужденных атомов  $V_0$ , рис. 2(а) и начальной энергии системы  $E_0$ , рис. 2(б).

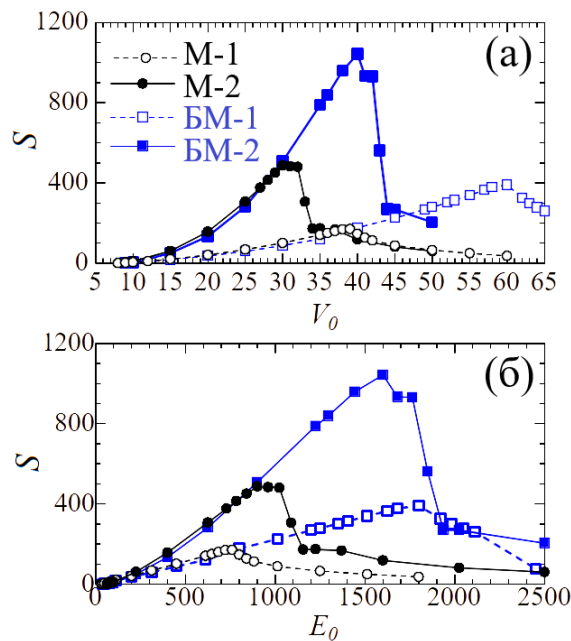


Рисунок 2 — Зависимость длины пробега 1- и 2-краудионов от (а) начальной скорости  $V_0$ , (б) от начальной энергии  $E_0$ , при использовании потенциалов Морзе и Борна-Майера.



Во всех исследуемых случаях 2-краудион распространялся дальше 1-краудиона. При задании больших значений начальных скоростей 1- и 2-краудионы движутся дальше в решётке Борн-Майера, по сравнению с решёткой Морзе, поскольку ядро потенциала Борн-Майера жёстче и лучше выполняется условие самофокусировки атомных столкновений.

**Вторая глава** посвящена динамике  $N$ -краудионов в ГЦК металлах. Используя метод молекулярной динамики при моделировании сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в ГЦК решётках Ni, Al и Cu исследован характер их движения, что продемонстрировано на рисунках 3 и 4 на примере меди.

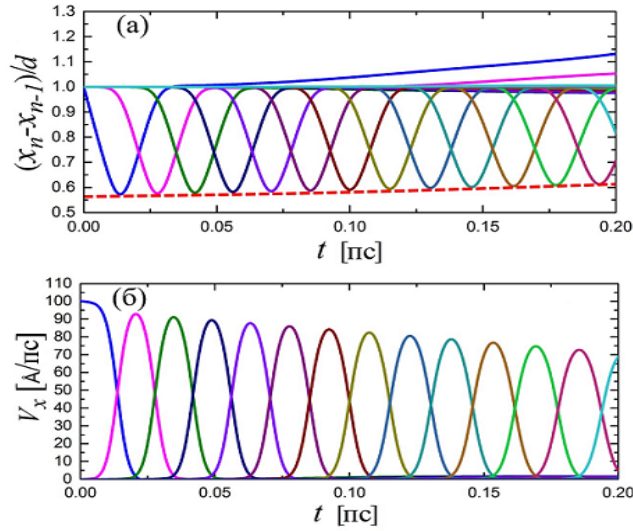


Рисунок 3 — Динамика 1-краудиона в ГЦК решётке Cu: (а) зависимость смещений атомов от времени; (б)-зависимость  $x$ -компоненты скорости атомов от времени. Начальная скорость, которая задавалась атомам, равна  $V_x^0 = 100 \text{ \AA/ps}$ .

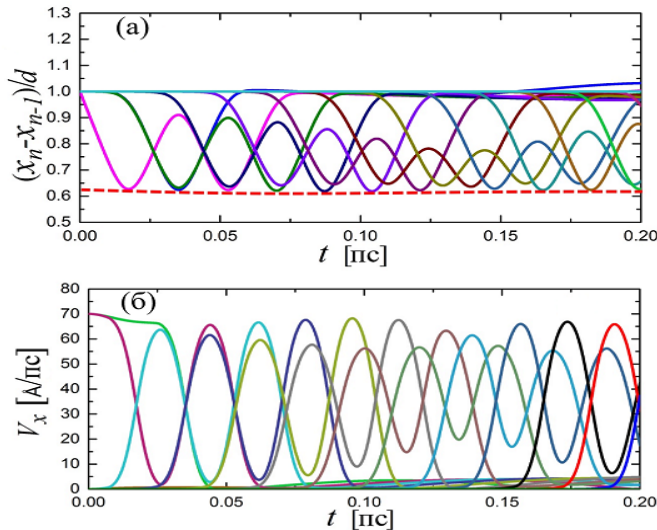


Рисунок 4 — Динамика 2-краудиона в ГЦК решётке Cu: (а) зависимость смещений атомов от времени; (б) зависимость  $x$ -компоненты скорости атомов от времени. Начальная скорость, которая задавалась атомам, равна  $V_x^0 = 70 \text{ \AA/ps}$ .

Главное отличие зависимостей скорости атомов от времени для 1- и 2-краудионов состоит в том, что при движении 1-краудиона атомы ускоряются один раз, а у 2-краудиона атомы испытывают два последовательных толчка и зависимость  $V_x(t)$  для каждого атома имеет два ярко выраженных пика.

На рисунке 5 показаны зависимости длины пробега сверхзвуковых 1-краудионов (а) и 2-краудионов (б) в трех исследованных металлах от начальной скорости атома, причем, длина пробега измерена в равновесных межатомных расстояниях  $d$ . Значения смещений в дальнейшем также будут приведены в единицах равновесного межатомного расстояния. Сравнительный анализ зависимостей на рисунке 5 показал, что наибольшая длина пробега наблюдается в меди, а наименьшая в алюминии, как для 1-краудионов, так и для 2-краудионов. Смещения атомов удовлетворяют условию самофокусировки  $d_{\min} > d/2$ .

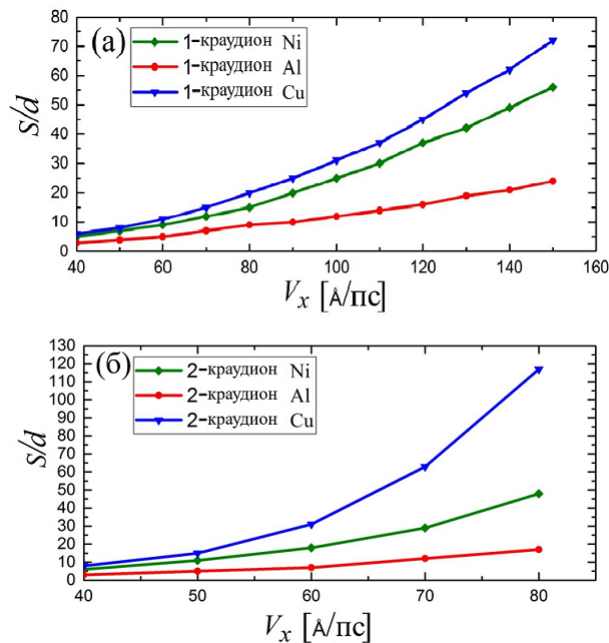


Рисунок 5 — Зависимость длины пробега (а) 1- и (б) 2-краудиона от  $x$ -компоненты начальной скорости атомов для Ni, Al, Cu в единицах межатомного расстояния  $d$ .

Далее методом молекулярной динамики инициировались краудионы в интерметаллиде  $\text{Ni}_3\text{Al}$ . Сверхзвуковые краудионы запускались в моноатомном плотноупакованном ряду, состоящем из атомов Al, и биатомном плотноупакованном ряду. Было выявлено, что в моноатомных рядах при запуске начальных атомов проявляется сильная неустойчивость, в связи с чем говорить о существовании краудионов в моноатомных рядах структуры  $\text{Ni}_3\text{Al}$  не представляется возможным. Связано это с низкой симметрией расположения атомов Al в окружающих плотноупакованных рядах.

На графиках, представленных на рисунке 6, видно, как сильно растет дальность пробега у 2-краудиона по сравнению с 1-краудионом в биатомном ряду. Это справедливо как в случае с первым атомом Al, так и в случае с первым атомом Ni.

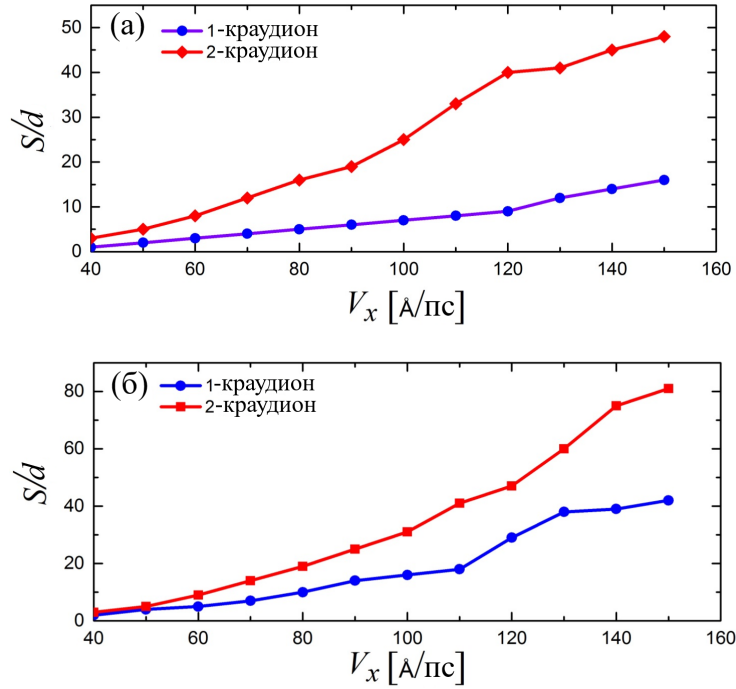


Рисунок 6 — Длина пробега 1- и 2-краудиона в биатомном ряду  $\text{Ni}_3\text{Al}$  как функция  $x$ -компоненты начальной скорости атомов. На (а) начальная скорость при возбуждении 1-краудиона задавалась атому Al, а при возбуждении 2-краудиона паре атомов Al и Ni. На (б) при возбуждении 1-краудиона начальная скорость сообщалась атому Ni, а в случае 2-краудиона паре атомов Ni и Al.

Также следует отметить, что 1- и 2-краудионы с левым атомом Ni распространяются дальше, чем аналогичные краудионы с атомом Al в качестве левого. Так, например, при начальной скорости  $130 \text{ \AA/ps}$  1-краудион с левым атомом Al преодолевает 12 межатомных расстояний, а 2-краудиона затухает после прохождения 41-го межатомного расстояния. В случае с левым атомом Ni с той же начальной скоростью, 1-краудион проходит 38 межатомных расстояний, а 2-краудион пробегает 60 межатомных расстояний.

Запуск сверхзвуковых краудионов также проводился в кристаллической структуре свинца. Результаты моделирования сверхзвуковых краудионов в свинце сравнивались с никелем, поскольку свинец обладает радиационно-защитными свойствами и важно было оценить полученные данные в сопоставлении с металлом не обладающим такими характеристиками. Длина пробега  $S$  сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в зависимости от начальной скорости  $V_x^0$ , нормирована на межатомное расстояние  $d$  и продемонстрирована на рисунке 7(а) для свинца и рисунке 7(б) для никеля. Результаты для 1-краудионов (2-краудионов) показаны синим (оранжевым) цветом. На рисунке 7(а) зеленым цветом показаны результаты с учетом движения межузельного атома после преобразования сверхзвукового 2-краудиона в сверхзвуковой 1-краудион. Длина пробега 2-краудиона в свинце при  $V_x^0 = 40$  и  $50 \text{ \AA/ps}$  также примерно в два раза превышает длину пробега 1-краудиона (см. рис. 7). С другой стороны, длина пробега сверхзвукового 2-краудиона в Ni примерно в пять раз больше, чем у сверхзвукового 1-краудиона (см. рис. 7(б)).

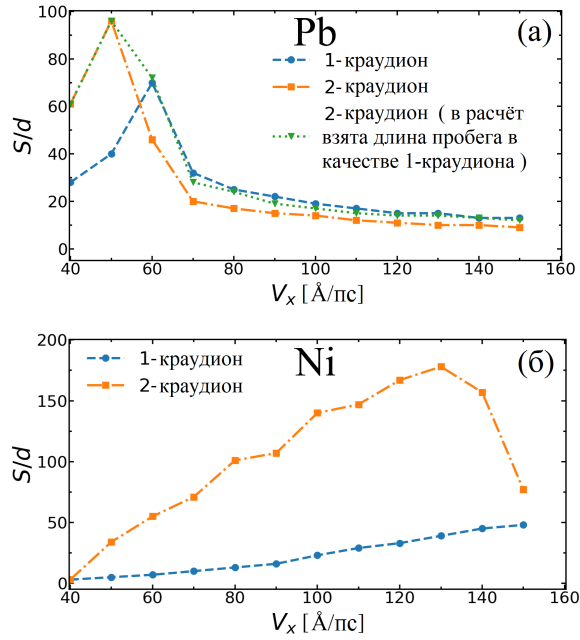


Рисунок 7 — Длина пробега сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в (а) свинце и (б) никеле в зависимости от начальной скорости атомов (нормирована на межатомное расстояние  $d$ ). Результаты для 1-краудиона показаны синим цветом, а для 2-го краудиона оранжевым. На (а) зеленым показана длина пробега с учетом расстояния, пройденного межузельным атомом после преобразования сверхзвукового 2-краудиона в сверхзвуковой 1-краудион.

Это означает, что в свинце скорость излучения энергии 2-краудионов приблизительно равна скорости излучения 1-краудионов, но в Ni она намного ниже. Это различие в скорости излучения энергии сверхзвуковых краудионов в Ni и Pb может быть вызвано различием в ветвях отталкивания их потенциалов.

Чтобы оценить влияние температуры на длину пробега, при температуре  $T = 297$  К запускаялся 2-краудион в свинце вдоль оси  $x$  с начальной скоростью  $V_x^0 = 50$  Å/ps (см. рис. 8(a)).

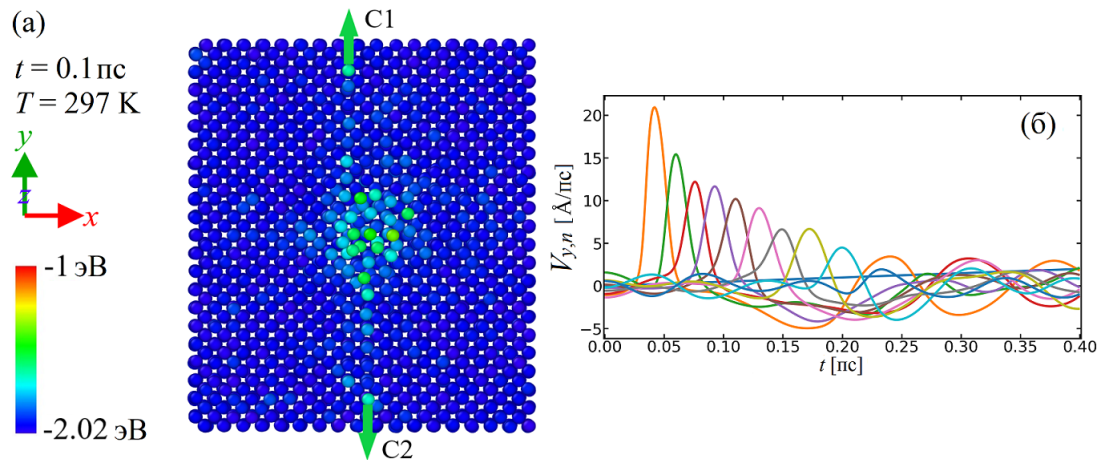


Рисунок 8 — (а) Рассеяние сверхзвукового 2-краудиона в свинце на тепловых флуктуациях при  $T = 297$  К и формирование двух сверхзвуковых 1-краудионов C1 и C2, движущихся вдоль оси  $y$ . (б) Зависимость составляющей скорости  $V_{y,n}$  для атомов в ряду, в котором перемещается краудионы, от времени моделирования.

После прохождения расстояния примерно в десяток межатомных расстояний сверхзвуковой 2-краудион исчезает, отдавая свою энергию вновь возбужденным сверхзвуковым 1-краудионам, обозначаемым как С1 и С2, движущимся вдоль оси  $y$ , т.е. в направлении, перпендикулярном направлению распространения 2-краудиона.

**В третьей главе** исследовались столкновения сверхзвуковых 1- и 2-краудионов, движущихся в одном плотноупакованном ряду в ГЦК монокристалле меди. На рисунке 9 продемонстрирован процесс столкновения 1- и 2- краудионов в различные моменты времени (начальная  $x$ -компонента скорости атомов в обоих случаях  $V_x^0 = 80 \text{ \AA}/\text{пс}$ ).

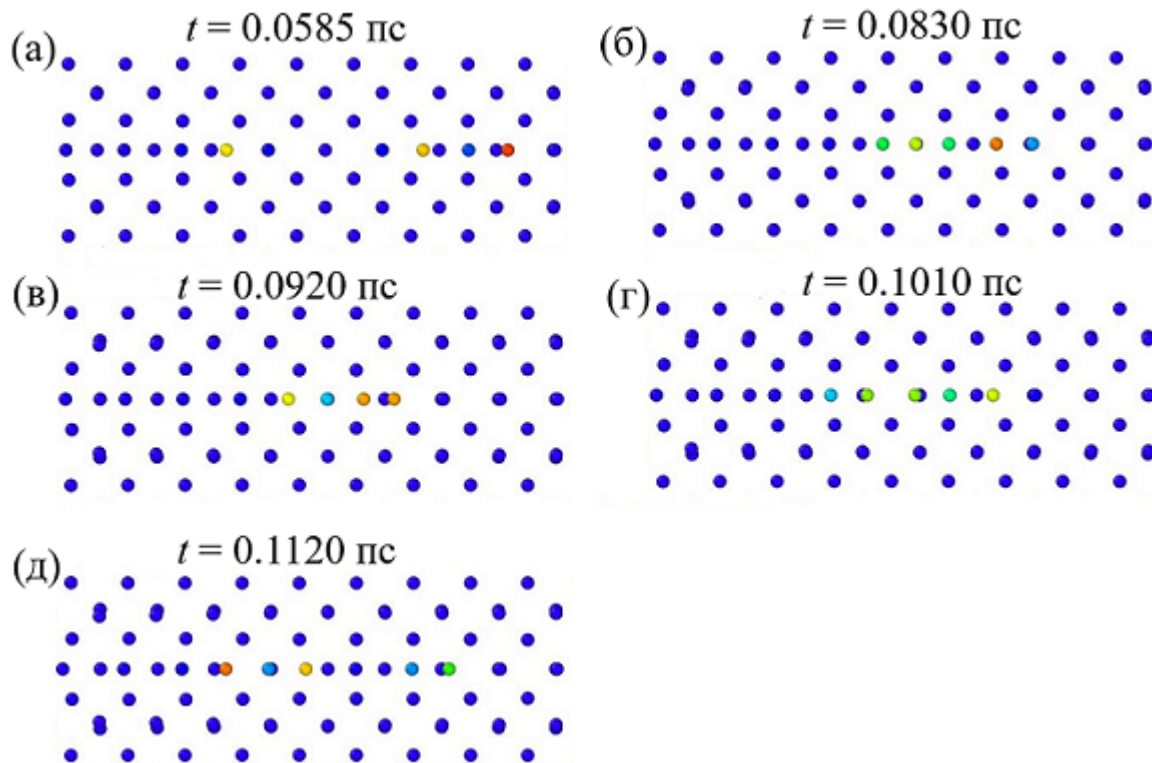


Рисунок 9 — Процесс столкновения 1- и 2-краудионов в различные моменты времени. Красный (синий) цвет соответствует максимальной (минимальной) энергии атомов.

Для более ясного представления механизма столкновения атомов 1- и 2-краудионов приведена упрощенная схема на рисунке 10. Взаимодействие краудионов можно разделить на два этапа. На первом этапе атом 1-краудиона сталкивается с первым атомом 2-краудиона, в результате чего происходит процесс отталкивания. На втором этапе первый оттолкнувшийся атом 2-краудиона сталкивается с его вторым атомом, в результате отталкивания от второго атома первый атом 2-краудиона движется вместе с атомом 1-краудиона и возникает новый 2-краудион, движущийся в том же направлении, в котором двигался начальный 2-краудион до столкновения. Данный механизм говорит о том, что при столкновениях 1- и 2-краудионов происходит рекомбинация атомов, после которой возникает новый 2-краудион и новый 1-краудион соответственно, т.е. имеет место солитоноподобный тип взаимодействия.

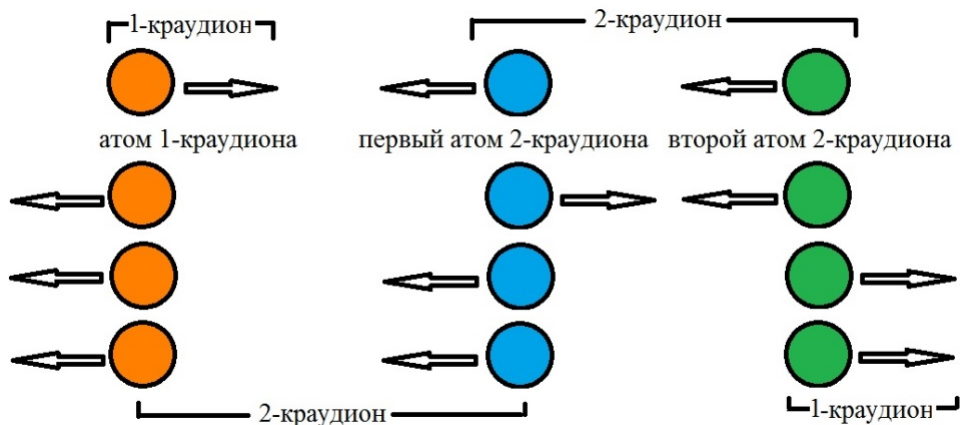


Рисунок 10 — Схематическое изображение столкновений атомов 1- и 2- краудиона.

Изучено квазипериодическое движение сверхзвуковых 2-краудионов и моделировались сверхзвуковые 3,2-краудионы в платине. Конфигурации 2-краудиона в различные моменты времени при начальных скоростях атомов  $V_x^1 = V_x^2 = 68 \text{ \AA}/\text{пс}$  представлены на рисунке 11 (скорость звука в платине равна  $27 \text{ \AA}/\text{пс}$  или  $2,7 \text{ км}/\text{с}$ ). Между двумя атомами, получающими начальную скорость, находилось  $k$  атомов с нулевой начальной скоростью.

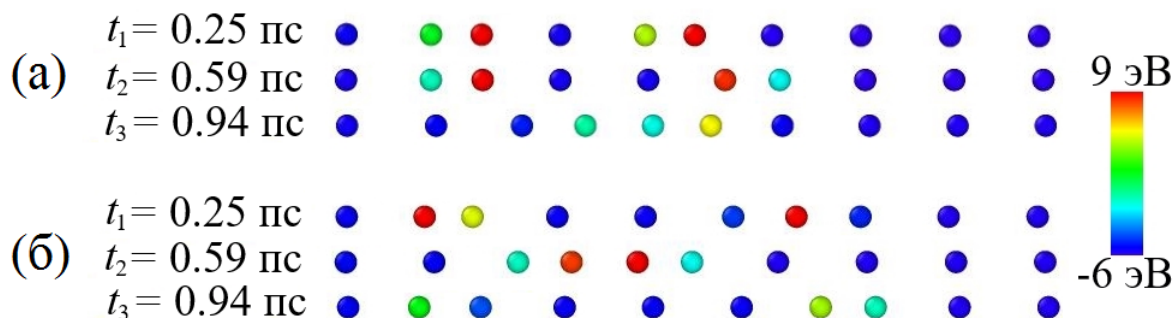


Рисунок 11 — Движение сверхзвукового 2-краудиона в плотноупакованном направлении кристаллической решётки платины для (а)  $k = 0$  и (б)  $k = 3$ . Энергия атомов показана цветом. Отметим, что расстояние между двумя атомами с высокой энергией то увеличивается, то сокращается, что трактуется как квазипериодическое брызгерное движение.

На рис. 11 показаны результаты для случаев (а)  $k = 0$  и (б)  $k = 3$ . Атомы, имеющие большую кинетическую энергию, показаны красным, а покоящиеся атомы синим. Хорошо видно, что расстояние между быстрыми атомами квазипериодически изменяется, что может быть охарактеризовано как брызгерное движение 2-краудиона. Значения смещений и изменения кинетической энергии атомов вдоль плотноупакованного ряда (вдоль оси  $x$ ) как функции времени при  $k = 0$  и при  $k = 3$  в процессе движения 2-краудиона, инициированного путем сообщения двум атомам данного ряда скорости  $V_x^0 = 68 \text{ \AA}/\text{пс}$ , продемонстрированы на рисунках 12 и 13. В обоих случаях также наблюдается квазипериодическое изменение расстояния между атомами с высокой энергией.

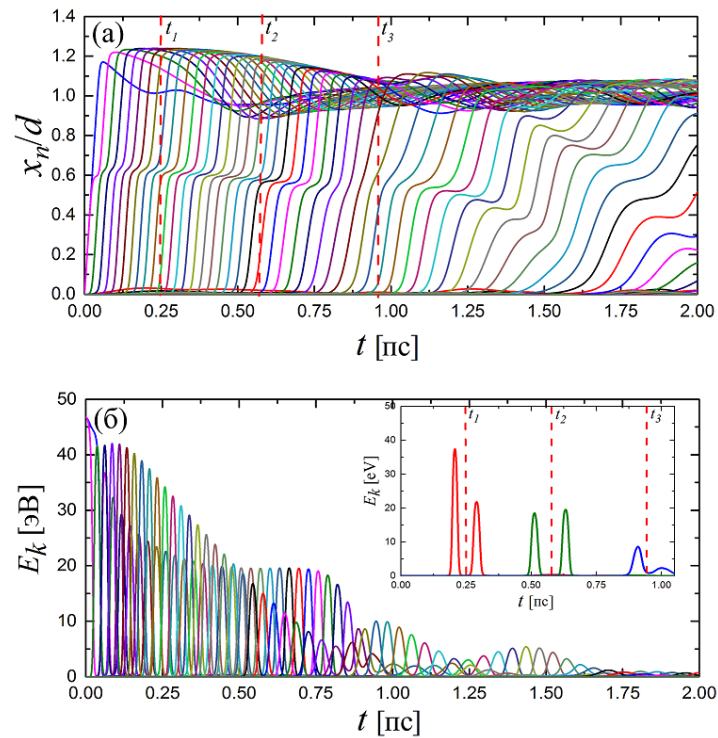


Рисунок 12 — Перемещения (а) и кинетическая энергия (б) атомов в зависимости от времени, случай  $k = 0$ .

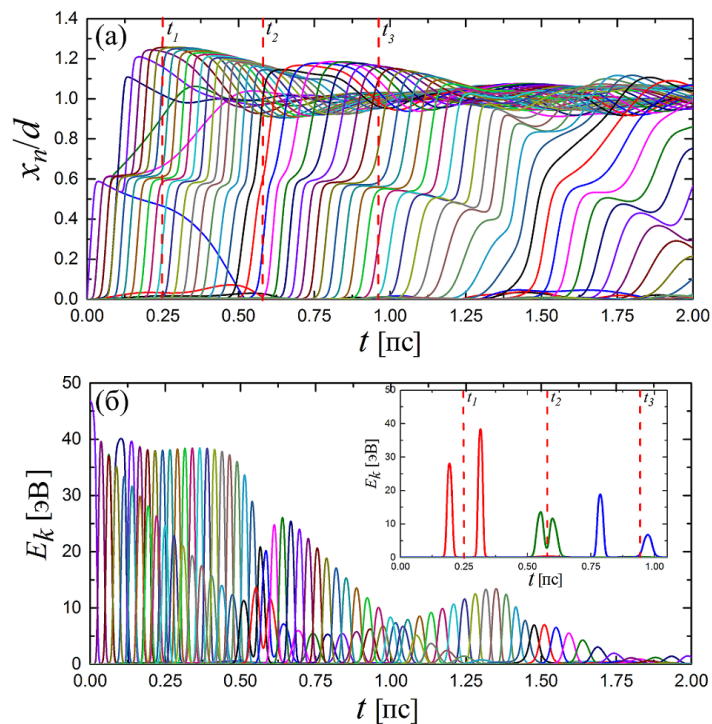


Рисунок 13 — Перемещения (а) и кинетическая энергия (б) атомов в зависимости от времени, случай  $k = 3$ .

Такая динамика формируется из двух принципов. Сначала в случае с  $k = 0$  левый атом, он же поддерживающий, передает значительную часть своей энергии правому атому (ведущему) в начальном этапе движения 2-краудина, в результате, получая значительный

импульс, правый атом начинает отрываться от левого. Затем левый атом начинает «догонять» правый, т.к. он находится в центре конусообразного возмущения, возникающего в хвосте движения правого атома. Левому атому становится легче передавать свою энергию атомам, выведенным из положения равновесия. Правый же атом напротив, не имея поддержки левого постепенно начинает замедляться, поэтому к нему и начинает приближаться левый атом. При  $k = 3$  данная динамика сохраняется.

Исследования также проводились со скоростями  $60 \text{ \AA}/\text{пс}$  и  $75 \text{ \AA}/\text{пс}$ . Рассматривались две конфигурации  $V_x^1 = 60 \text{ \AA}/\text{пс}$ ,  $V_x^2 = 75 \text{ \AA}/\text{пс}$  и  $V_x^1 = 75 \text{ \AA}/\text{пс}$ ,  $V_x^2 = 60 \text{ \AA}/\text{пс}$ , поскольку в этих случаях кинетическая энергия инициированного 2-краудиона, равна запущенному 2-краудиону со скоростями  $68 \text{ \AA}/\text{пс}$ . Квазипериодическое движение наблюдалось во всех случаях. Ниже приведена таблица, в которой показана длина пробега во всех трёх скоростных конфигурациях при  $k = 0$  и  $k = 3$ .

Таблица 1 — Длина пробега 2-краудиона (в межатомных расстояниях) в зависимости от начальной скорости двух атомов ( $V_x^0$ ) и от числа неподвижных атомов между ними ( $k$ ).

$V_x^0$ , [ $\text{ \AA}/\text{пс}$ ]	68 и 68	60 и 75	75 и 60
Длина пробега, $k=0$	51	51	51
Длина пробега, $k=3$	53	53	53

Из таблицы можно увидеть, что длины пробегов при одинаковом  $k$  не отличаются, несмотря на разные скорости левого и правого атома по отдельности. Следовательно, длина пробега зависит от кинетической энергии краудиона в целом. Важно также отметить, что при  $k = 3$  длина пробега отличалась незначительно от длины пробега при  $k = 0$ .

Далее исследуются сверхзвуковые 3,2-краудионы, которые можно рассматривать как тройки 2-краудионов, запущенные одновременно в трёх соседних параллельных плотноупакованных рядах. Рассмотрено три случая, когда 2-краудионы запускаются в трёх рядах, расположенных по вертикали, горизонтали и диагонали. В ходе исследования сверхзвуковых 3,2-краудионов, запущенных с начальной скоростью  $60 \text{ \AA}/\text{пс}$ , было обнаружено, что движение вертикальной конфигурации 3,2-краудионов обладает наиболее устойчивым характером по сравнению с горизонтальной и диагональной конфигурациями (см. рис. 14).

На интенсивность возмущений, возникающих при распространение 3,2-краудионов, влияет расстояние между плотноупакованными рядами, где запущены 2-краудионы. Расстояние в горизонтальной и диагональной конфигурации  $S_d = S_h = d \approx 2.77185 \text{ \AA}$  меньше, чем у вертикальной конфигурации  $S_v = a = 3.92 \text{ \AA}$ , вследствие чего возрастает воздействие соседних 2-краудионов друг на друга. Диагональная конфигурация имеет нарушение симметрии, поскольку начало центрального плотноупакованного ряда 3,2-краудиона находится на дальней от нас плоскости, что является дополнительным фактором, влияющим на динамику распространения сверхзвуковых 3,2-краудионов.



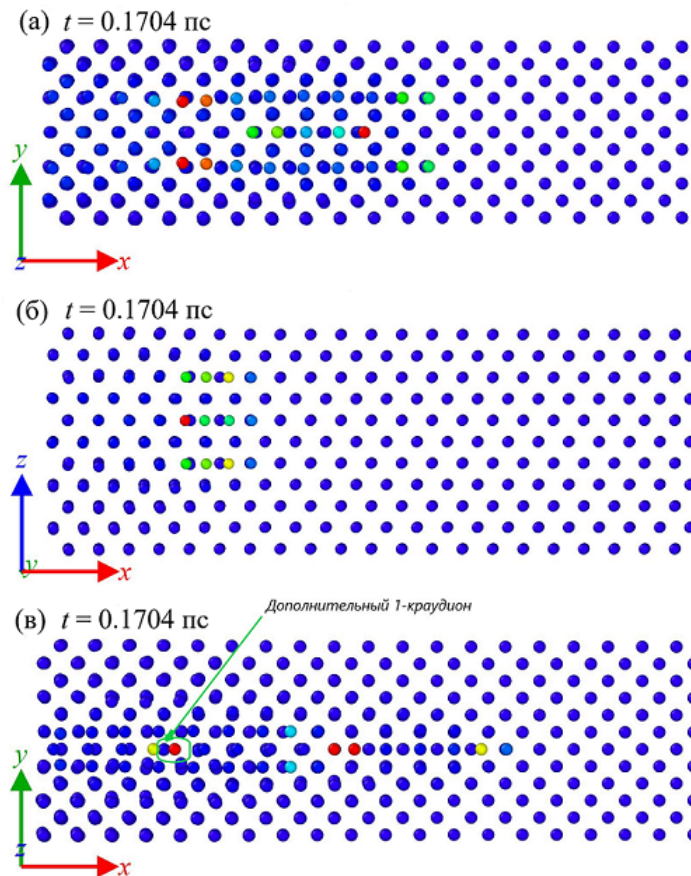


Рисунок 14 — Движение сверхзвуковых 3,2-краудионов в платине для трёх конфигураций: (а) горизонтальная, параллельная плоскости (001), (б) вертикальная, параллельная плоскости ( $\bar{1}10$ ), (в) диагональная, параллельная плоскости (111). Атомы с максимальной (минимальной) энергией показаны красным (синим) цветом.

**Четвёртая глава** посвящена влиянию многочастичных межатомных потенциалов на динамику сверхзвуковых краудионов и изучению движения атома в канале октаэдрических пор ГЦК кристалла.

Влияние межатомного потенциала на распространение сверхзвуковых 2-краудионов в вольфраме продемонстрировано на рисунке 15. Левая, средняя и правая колонки соответствуют потенциалам Экланда, Мариники и Олссона соответственно.

Начальные скорости двух соседних атомов  $V_x^0$  равны (а) 43, (д) 48, (з) 60  $\text{\AA}/\text{пс}$ ; (б) 45, (е) 60, (к) 75  $\text{\AA}/\text{пс}$ ; (в) 44, (ж) 56, (л) 68  $\text{\AA}/\text{пс}$ . Начальные скорости выбраны таким образом, что в среднем ряду рисунка 15, т.е. на (д), (е) и (ж) атомы останавливаются почти в соседних узлах решётки, в то время как в верхнем и нижнем рядах наблюдается небольшой недолёт и перелёт атомами соседних узлов. Для потенциала Экланда начальная скорость является наименьшей  $V_x^0 = 48 \text{\AA}/\text{пс}$ , а для потенциалов Мариники и Олссона  $V_x^0 = 60$  и  $V_x^0 = 56 \text{\AA}/\text{пс}$  соответственно. Более высокая начальная скорость приводит к увеличению длины пробега краудиона.

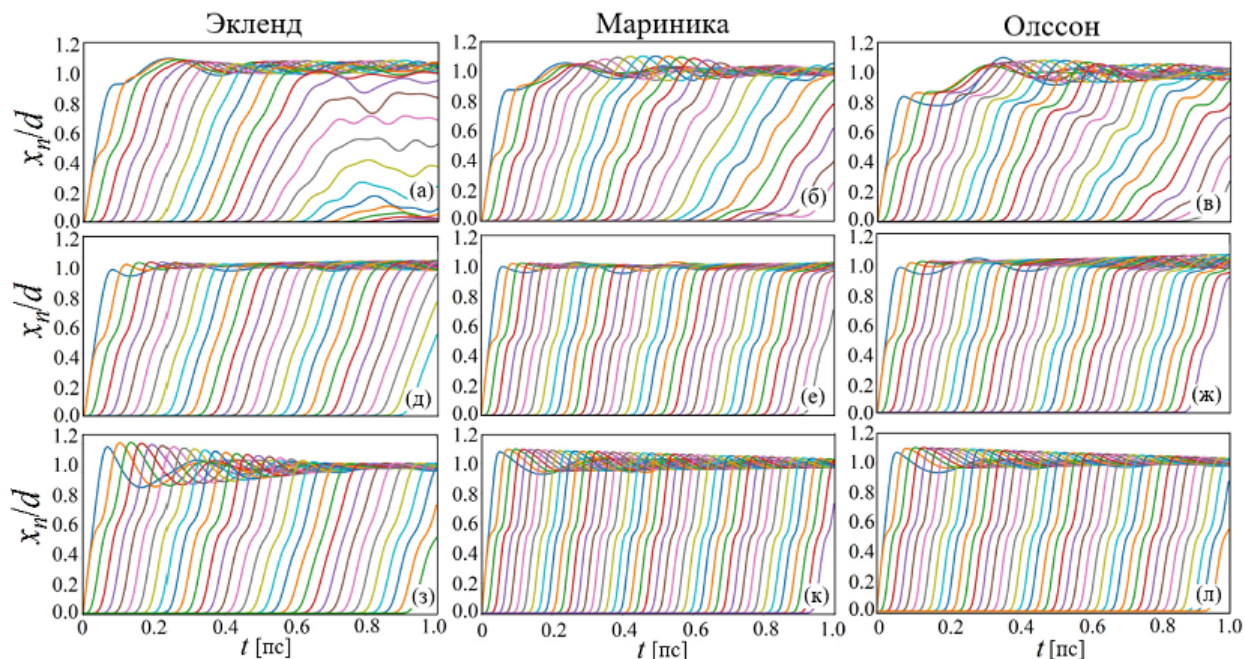


Рисунок 15 — Смещения атомов как функции времени при распространении сверхзвуковых 2-краудионов в вольфраме при использовании трех различных потенциалов: (а,д,з) Экланда [27], (б,е,к) Мариника [28] и (в,ж,л) Олссона [29]. Начальные скорости двух соседних атомов  $V_x^0$ , составляют (а) 43, (д) 48 и (з) 60 Å/пс; (б) 45, (е) 60 и (к) 75 Å/пс; (в) 44, (ж) 56 и (л) 68 Å/пс.

Далее из рисунков 14(д), 14(е) и 14(ж) оценивается скорость распространения краудионов на основе расчета количества атомов, достигших соседнего узла решётки в течение 1 пс. В случае потенциала Экланда за 1 пс в соседний узел кристаллической решётки смещаются 30 атомов. Для потенциалов Мариники и Олссона скорость распространения составляет 39 и 38 межатомных расстояний в 1 пс. Эти результаты также подтверждают, что жесткое ядро потенциала способствует распространению сверхзвуковых краудионов. Установлено, что потенциал Экланда даёт самую короткую длину пробега краудионов.

Когда поверхность материала бомбардируется ионами высокой энергии, последние могут попадать в каналы между плотноупакованными рядами атомов. Методом молекулярной динамики исследовался случай попадания атома в октаэдрический канал кристаллической решётки меди.

Если бомбардирующий атом пролетал близко к атомам октаэдрического канала, происходило возбуждение сверхзвуковых краудионов вдоль оси  $y$ , т.е. в плотноупакованном кристаллографическом направлении  $\langle \bar{1}10 \rangle$ , что проиллюстрировано на рисунке 16. Множественные краудионы могут возникать в случае высокой начальной скорости бомбардирующего атома. Результаты представлены для момента времени  $t = 0.246$  пс, начальной скорости  $V_x^0 = 450$  Å/пс и смещения по оси  $y$   $\Delta y = 0.3$  Å. На рисунке 16 указаны направления движения краудионов  $C_1$ ,  $C_2$  и  $C_3$ , их скорости равны 121.2, 95.4 и 105.0 Å/пс. При этом скорость звука вдоль кристаллографического направления  $\langle \bar{1}10 \rangle$  ГЦК решётки меди составляет 38 Å/пс (3,8 км/с), следовательно, возбуждаются сверхзвуковые краудионы.

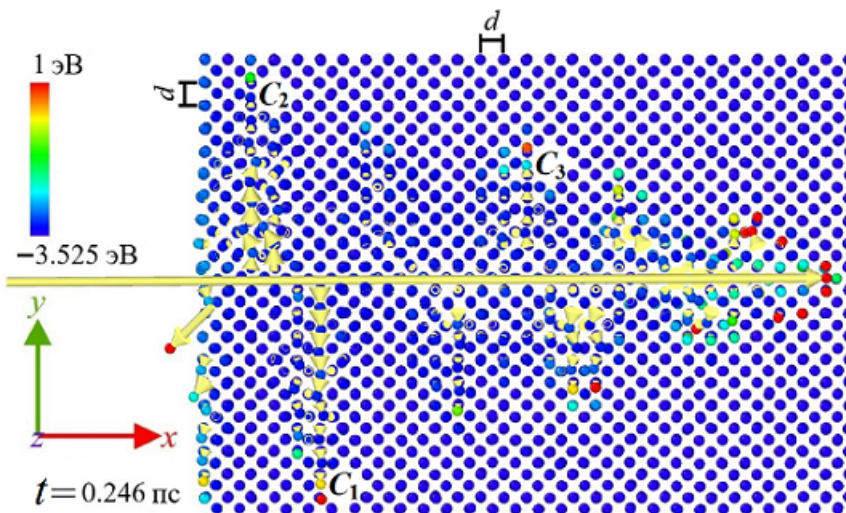


Рисунок 16 — Динамика бомбардирующего атома в ГЦК решётке меди вдоль октаэдрического канала, т.е. вдоль оси  $x$  (показана горизонтальной желтой стрелкой).

Короткие желтые стрелки вдоль оси  $y$  демонстрируют направление движения возбужденных краудионов  $C_1$ ,  $C_2$  и  $C_3$ .

**Основные результаты работы** заключаются в следующем:

1. Методом молекулярной динамики с использованием ЕАМ потенциалов изучены сверхзвуковые 1- и 2-краудионы в меди, никеле, алюминии, платине, свинце, а также в интерметаллиде  $Ni_3Al$ . В исследованном диапазоне скоростей во всех моделируемых металлах и сплавах, за исключением свинца, сверхзвуковой 2-краудион распространялся существенно дальше 1-краудиона.
2. Проведённые расчёты подтверждают, что условие самофокусировки атомных столкновений при сверхзвуковом движении 1- и 2-краудионов состоит в том, что скорость столкновения атомов не должна превышать такую, при которой расстояния между их ядрами становится меньше половины равновесного межатомного расстояния.
3. Методом молекулярной динамики продемонстрировано, что лишь в узком диапазоне скоростей (от 40 до 60 Å/пс) 2-краудион в свинце распространялся дальше 1-краудиона, в то время как при более высоких скоростях длины пробега 1- и 2-краудионов совпадали. Моделирование при температуре  $T = 297$  К показало, что 2-краудион, запущенный вдоль плотноупакованного направления, генерировал 1-краудионы в поперечном плотноупакованном направлении.
4. Обнаружен солитоноподобный тип взаимодействия при лобовом столкновении сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в одном плотноупакованном ряду кристаллической решётки меди.
5. На примере ГЦК платины было выявлено квазипериодическое бризерное движение 2-краудионов, когда наблюдалось повторяющееся сближение и отдаление высокоэнергетических атомов 2-краудиона друг от друга. Данный тип движения зависит от общей энергии краудиона, но слабо зависит от начальных скоростей двух возбуждаемых атомов при сохранении их общей энергии. Наличие статических атомов (от

нуля до трёх) между двумя возбуждаемыми атомами слабо (в пределах 4%) влияет на длину пробега 2-краудиона.

6. В ходе моделирования сверхзвуковых 3,2-краудионов показано, что вертикальная конфигурация, параллельная плоскости  $(\bar{1}10)$ , оказывается наиболее устойчивой. Устойчивость данной конфигурации объясняется большим расстоянием между составляющими 2-краудионами и, следовательно, меньшим влиянием краудионов друг на друга, по сравнению с другими исследованными конфигурациями.
7. Установлено, что краудион, движущийся в биатомном ряду интерметаллида  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , создаёт позади себя антифазную цепочку, что является дополнительным каналом его торможения, поскольку на создание данного сверхструктурного дефекта затрачивается энергия.
8. Изучалось влияние межатомных потенциалов на динамику сверхзвуковых 2-краудионов в вольфраме. Наибольшая длина пробега и высокая устойчивость движения наблюдались для потенциала с наиболее жёсткой отталкивательной ветвью.
9. Методом молекулярной динамики исследован тип массопереноса, когда бомбардирующий атом движется в канале между плотноупакованными атомными рядами. Обнаружено, что в ходе перемещения бомбардирующего атома внутри канала, запускались сверхзвуковые краудионы в направлении перпендикулярно каналу.

### Публикации автора по теме работы

1. *Shepelev I. A.* Modeling of supersonic crowdion clusters in fcc lattice: Effect of the interatomic potential / I. A. Shepelev, A. M. Bayazitov, E. A. Korznikova // Journal of Micromechanics and Molecular Physics. — 2021. — т. 6, № 1. — с. 2050019.
2. Mechanism of remote vacancy emergence by a supersonic crowdion cluster in a 2D Morse lattice / I. A. Shepelev, D. V. Bachurin, E. A. Korznikova, A. M. Bayazitov, S. V. Dmitriev // Chinese Journal of Physics. — 2021. — т. 70. — с. 355–362.
3. Supersonic motion of atoms in an octahedral channel of fcc copper / A. M. Bayazitov, D. V. Bachurin, Y. V. Bebikhov, E. A. Korznikova, S. V. Dmitriev // Materials. — 2022. — т. 15, № 20. — с. 7260.
4. Effect of interatomic potentials on mass transfer by supersonic 2-crowdions / E. A. Korznikova, I. R. Sunagatova, A. M. Bayazitov, A. S. Semenov, S. V. Dmitriev // Letters on Materials. — 2019. — т. 9, № 4. — с. 386–390.
5. Numerical modeling of 3D discrete breathers in fcc Ni / I. P. Lobzenko, P. V. Lobzenko, A. M. Bayazitov, A. P. Chetverikov, R. I. Machmutova, A. A. Kistanov // Letters on Materials. — 2016. — т. 6, № 4. — с. 304–308.
6. Scenarios of mass transfer in fcc copper: the role of point defects / A. M. Bayazitov [и др.] // IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng. — 2018. — т. 447. — с. 012040.

7. Breathing dynamics of 2-crowdions in platinum / A. M. Bayazitov, E. A. Korznikova, I. A. Shepelev, P. V. Zakharov, S. V. Dmitriev // Saratov Fall Meeting 2019: Computations and Data Analysis: from Nanoscale Tools to Brain Functions. т. 11459 / под ред. D. E. Postnov. — International Society for Optics, Photonics. SPIE, 2020. — 114590Z.
8. Features of mass transfer by N-crowdions in fcc Ni<sub>3</sub>Al lattice / A. M. Bayazitov, S. V. Dmitriev, P. V. Zakharov, I. A. Shepelev, S. Y. Fomin, E. A. Korznikova // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. т. 672. — IOP Publishing. 2019. — с. 012033.
9. Interaction of supersonic 2-crowdions in fcc platinum / A. M. Bayazitov, E. A. Korznikova, A. S. Semenov, D. I. Borisov, S. V. Dmitriev // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — 2020. — т. 1008, № 1. — с. 012068.
10. *Bayazitov A. M.* Effect of interatomic potentials on dynamics of supersonic 2-crowdions in tungsten / A. M. Bayazitov, R. T. Murzaev, Y. V. Bebikhov // AIP Conference Proceedings. — 2022. — т. 2533, № 1.
11. *Bayazitov A. M.* Simulation of the dynamics of supersonic N-crowdions in fcc lead and nickel / A. M. Bayazitov, A. S. Semenov, S. V. Dmitriev // Micro. — 2023. — т. 3, № 3. — с. 632–642.
12. Mechanical properties of cubene crystals / L. K. Galiakhmetova, I. S. Pavlov, A. M. Bayazitov, I. V. Kosarev, S. V. Dmitriev // Materials. — 2022. — т. 15, № 14. — с. 4871.
13. Shock loading of carbon nanotube bundle / L. K. Galiakhmetova, D. V. Bachurin, E. A. Korznikova, A. M. Bayazitov, A. A. Kudreyko, S. V. Dmitriev // Mechanics of Materials. — 2022. — т. 174. — с. 104460.
14. Моделирование сверхзвуковых N-краудионов в ГЦК металлах / А. М. Баязитов, Д. В. Бачурин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2020. — т. 17. — с. 155–160.
15. Динамика сверхзвуковых 2-краудионов в нелинейных двумерных решетках / И. Р. Сунагатова, А. С. Семёнов, А. М. Баязитов, Е. А. Корзникова // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2019. — т. 16. — с. 482–488.

### Список литературы

1. Laser-induced keyhole defect dynamics during metal additive manufacturing / A. M. Kiss [и др.] // Advanced Engineering Materials. — 2019. — т. 21, № 10. — с. 1900455.
2. Measurements of vacancy type defects in SPD deformed Ni / E. Korznikova, E. Schaffler, G. Steiner, M. J. Zehetbauer // TMS Annual Meeting. — 2006. — т. 2006. — с. 97–102.
3. Dynamic behaviors of body-centered cubic metals with ultrafine grained and nanocrystalline microstructures / Q. Wei [и др.] // Materials Science and Engineering: A. — 2008. — т. 493, № 1/2. — с. 58–64.

4. Self-trapped interstitial-type defects in iron / D. A. Terentyev [и др.] // *Physical Review Letters*. — 2008. — т. 100, № 14. — с. 145503.
5. Transmission electron microscopy study of hydrogen defect formation at extended defects in hydrogen plasma treated multicrystalline silicon / H. Nordmark, R. Holmestad, J. C. Walmsley, A. Ulyashin // *Journal of Applied Physics*. — 2009. — т. 105, № 3. — с. 033506.
6. *Paneth H. R.* The mechanism of self-diffusion in alkali metals / H. R. Paneth // *Phys. Rev.* — 1950. — т. 80, № 4. — с. 708—711.
7. *Derlet P. M.* Multiscale modeling of crowdion and vacancy defects in body-centered-cubic transition metals / P. M. Derlet, D. Nguyen-Manh, S. L. Dudarev // *Physical Review B*. — 2007. — т. 76, № 5. — с. 054107.
8. Ion-irradiation induced clustering in W-Re-Ta, W-Re and W-Ta alloys: An atom probe tomography and nanoindentation study / A. Xu [и др.] // *Acta Materialia*. — 2017. — т. 124. — с. 71—78.
9. Direct observation of the spatial distribution of primary cascade damage in tungsten / D. R. Mason, A. E. Sand, X. Yi, S. L. Dudarev // *Acta Materialia*. — 2018. — т. 144. — с. 905—917.
10. Molecular dynamics simulation of the behavior of typical radiation defects under stress gradient field in tungsten / J. Fang, L. Liu, N. Gao, W. Hu, H. Deng // *Journal of Applied Physics*. — 2021. — т. 130, № 12. — с. 125103.
11. Electronic energy loss assessment in theoretical modeling of primary radiation damage in tungsten / F. Cheng, Q. Zheng, Y. Li, C. Zhang, Z. Zeng // *International Journal of Modern Physics C*. — 2021. — т. 32, № 10. — с. 2150134.
12. *Dudarev S. L.* Elastic fields, dipole tensors, and interaction between self-interstitial atom defects in bcc transition metals / S. L. Dudarev, P.-W. Ma // *Physical Review Materials*. — 2018. — т. 2, № 3. — с. 033602.
13. Perspectives on multiscale modelling and experiments to accelerate materials development for fusion / M. R. Gilbert [и др.] // *Journal of Nuclear Materials*. — 2021. — т. 554. — с. 153113.
14. A supersonic crowdion in mica - ultradiscrete kinks with energy between 40K recoil and transmission sputtering / J. F. R. Archilla, Y. A. Kosevich, N. Jiménez, V. J. Sánchez-Morcillo, L. M. García-Raffi // *Springer Series in Materials Science*. — 2015. — т. 221. — с. 69—96.
15. *Markidonov A. V.* Self-diffusion process in an fcc crystal caused by the passage of a shock wave / A. V. Markidonov, M. D. Starostenkov, M. V. Smirnova // *Russian Physics Journal*. — 2015. — т. 58, № 6. — с. 828—832.
16. High-velocity mass transfer in fcc-metals containing chains of vacancies and interstitial atoms / M. D. Starostenkov, A. V. Markidonov, T. A. Tikhonova, A. I. Potekaev, V. V. Kulagina // *Russian Physics Journal*. — 2011. — т. 54, № 3. — с. 308—313.

17. The behavior of crowdions and their complexes in weakly stable states of materials / A. V. Markidonov [и др.] // Russian Physics Journal. — 2012. — т. 54, № 11. — с. 1241–1248.
18. Excitation of Soliton-Type Waves in Crystals of the  $A_3B$  Stoichiometry / P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, E. A. Korznikova, A. M. Eremin, I. S. Lutsenko, S. V. Dmitriev // Physics of the Solid State. — 2019. — т. 61, № 11. — с. 2160–2166.
19. Interaction of impurity atoms of light elements with self-interstitials in fcc metals / I. V. Zorya, G. M. Poletaev, R. Y. Rakitin, M. A. Ilyina, M. D. Starostenkov // Letters on Materials. — 2019. — т. 9, № 2. — с. 207–211.
20. *Zakharov P. V.* Energy transport in an  $A_3B$  crystal with intense external exposure at frequencies outside the crystal spectrum / P. V. Zakharov, M. D. Starostenkov, A. M. Eremin // т. 537. — 2019. — с. 022031.
21. *Kosevich A. M.* The supersonic motion of a crowdion. The one-dimensional model with nonlinear interaction between the nearest neighbours / A. M. Kosevich, A. S. Kovalev // Solid State Commun. — 1973. — т. 12. — с. 763.
22. Highly Enhanced Transport by Supersonic N-Crowdions / S. V. Dmitriev, N. N. Medvedev, A. P. Chetverikov, K. Zhou, M. G. Velarde // Physica Status Solidi (RRL)–Rapid Research Letters. — 2017. — т. 11, № 12. — с. 1700298.
23. *Garber R. I.* Focusing of atomic collisions in crystals / R. I. Garber, A. I. Fedorenko // Phys. Usp. — 1964. — т. 7, № 4. — с. 479–507.
24. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact / R. I. Babicheva, I. Evazzade, E. A. Korznikova, I. A. Shepelev, K. Zhou, S. V. Dmitriev // Computational Materials Science. — 2019. — т. 163. — с. 248–255.
25. Subsonic M,N-crowdions in 2D Morse crystal / E. A. Korznikova, I. A. Shepelev, A. P. Chetverikov, S. Y. Fomin, S. V. Dmitriev // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. — 2018. — т. 447. — с. 012030.
26. Effect of interatomic potentials on mass transfer by supersonic 2-crowdions / E. A. Korznikova, I. R. Sunagatova, A. M. Bayazitov, A. S. Semenov, S. V. Dmitirev // Letters on Materials. — 2019. — т. 9, № 4. — с. 386–390.
27. *Ackland G. J.* An improved N-body semi-empirical model for body-centred cubic transition metals / G. J. Ackland, R. Thetford // Philosophical Magazine A. — 1987. — т. 56, № 1. — с. 15–30.
28. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten / M.-C. Marinica [и др.] // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2013. — т. 25, № 39. — с. 395502.
29. *Olsson P. A. T.* Semi-empirical atomistic study of point defect properties in bcc transition metals / P. A. T. Olsson // Computational Materials Science. — 2009. — т. 47, № 1. — с. 135–145.