УДК 538.911

КОАЛЕСЦЕНЦИЯ ВАКАНСИОННЫХ НАНОПОР В КРИСТАЛЛЕ С ГЦК РЕШЕТКОЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УДАРНЫХ ПОСЛЕКАСКАДНЫХ ВОЛН

А. В. Маркидонов¹, М. Д. Старостенков²

¹ — Кузбасский государственный технический университет им. Т. Ф. Горбачева, филиал КузГТУ в г. Новокузнецке,

² — Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова

Поступила в редакцию 08.01.2016 г.

Аннотация. Методом молекулярной динамики выполнено исследование процессов укрупнения вакансионных нанопор под воздействием ударных волн, возникающих при радиационном облучении твердых тел. Компьютерные эксперименты показали, что в результате прохождения ударных волн через нанопоры, имеющие одинаковые размеры, возможно их слияние в единый комплекс. Кроме того, в определенных случаях наблюдается рост нанопор за счет поглощения более мелких вакансионных скоплений. Создаваемые в расчетной ячейке внешние сжимающие напряжения вызывают структурные трансформации нанопор, упрощающие процесс их укрупнения. Исследуемые процессы могут протекать при температурах, недостаточных для активизации диффузии.

Ключевые слова: пора, волна, дефект упаковки, температура, деформация, метод молекулярной динамики, метод погруженного атома.

COALESCENCE OF VACANCY NANOPORES IN CRYSTALS WITH THE FCC LATTICE UNDER THE INFLUENCE OF SHOCK POST-CASCADE WAVE A. V. Markidonov, M. D. Starostenkov

Abstract. Molecular dynamics method is used to study processes of nanopores consolidation vacancy under the influence of shock waves, radiation exposure arising from the solids. Computer experiments have shown that as a result of passage of shock waves through the nanopore having the same size may merge to form a single complex. In addition, in certain cases, an increase in the nanopore by absorbing smaller vacancy clusters. Created in computational cell external compressive stresses cause the structural transformation of the nanopores to simplify the process of enlargement. The test processes can occur at temperatures insufficient to activate the diffusion.

Keywords: pore, wave, stacking faults, temperature, strain, molecular dynamics method, the embedded atom method.

[©] Маркидонов А. В., Старостенков М. Д., 2016

введение

Известно, что воздействие концентрированных потоков энергии при корпускулярном или лазерном излучении на кристаллические структуры приводит к образованию точечных дефектов, при этом их концентрация может значительно превосходить равновесную концентрацию. Основным механизмом релаксации метастабильных ансамблей таких дефектов является нуклеация и кластеризация, и, в частности, образование пор из пересыщенного раствора вакансий [1]. Образование пор может приводить к изменению механических свойств материала, а также его объема. Поэтому изучение процессов образования и эволюции кластеров точечных дефектов является актуальным. В особенности процессы кластеризации необходимо учитывать при прогнозировании поведения конструкционных узлов, эксплуатирующихся при различных экстремальных условиях (высокая температура, радиационное облучение, ударные нагрузки, резкие перепады температур и т.д.). Кроме того, разработка технологий, позволяющих управлять процессами кластеризации, крайне полезна при синтезе новых материалов с заранее заданными свойствами.

Радиационные поры делят на два типа: гетерогенные, которые образуются на различных кристаллических дефектах, и гомогенные, возникающие из спонтанных вакансионных скоплений. Для роста поры необходимо наличие достаточно высокого вакансионного пересыщения, подвижности вакансий и стабильности вакансионного скопления. Очевидно, что для выполнения последних двух условий, температура, при которой происходит рост поры, должна быть достаточной для дрейфа вакансий, но не должна вызывать разрушение вакансионного скопления. Поры образуются практически во всех металлических материалах при радиационном облучении в температурном интервале $(0.3 - 0.5) \cdot T_{пл}$.

Заключительной стадией диффузионной эволюции ансамбля вакансионных пор является созревание или коалесценция, движущей силой которой является стремление к уменьшению свободной поверхности пор [2, 3]. Физический механизм, лежащий в основе данного процесса, представляет собой термоактивированное испарение вакансий порами, при этом мелкие поры испаряются интенсивнее, чем крупные, и в итоге растворяются. Коалесценция пор заметно происходит в тех случаях, когда поры находятся на достаточном удалении от границ кристаллов. При длительных выдержках в кристаллах наблюдаются только крупные поры, расположенные в центре, а вдоль границ образуется беспористая корочка [4].

Рассмотренный выше механизм тепло-индуцированной коалесценции хорошо описывает позднюю стадию процесса диффузионного распада твердых растворов при высоких температурах, но он не может объяснить уменьшение плотности пор при более низких температурах. В данном случае предлагается радиационно-индуцированный механизм [5], согласно которому коалесценция является следствием предпочтения (преференса) поглощения порами собственных межузельных атомов, а не отдельных вакансий, за счет более сильного упругого взаимодействия. Мелкие поры поглощают межузельные атомы интенсивнее и в результате этого растворяются, а большие поры поглощают избыток вакансий и растут.

Необходимо отметить, что в результате воздействия концентрированных потоков энергии в твердом теле могут возникать малые области перегрева, в которых реализуются температуры до нескольких тысяч градусов и давления в десятки гигапаскалей. В таком нелокальном термоупругом пике формируется мощный акустический импульс, влияющий на кинетические процессы на значительном расстоянии от падающего иона [6], а в отдельных случаях даже ударная волна, получившая название послекаскадной [7].

Целью настоящей работы является исследование влияния ударных волн на процессы укрупнения вакансионных пор.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Рассматриваемые в работе процессы отличает высокая скорость протекания, что затрудняет прямые наблюдения. Поэтому наиболее рациональным видится использование методов компьютерного моделирования. В качестве метода компьютерного моделирования был выбран метод молекулярной динамики, в связи с тем, что он позволяет проводить эксперименты с заданными скоростями атомов и описывать динамику исследуемых процессов в реальном времени. Исследование проводилось с помощью пакета МД-моделирования XMD [8], очевидным преимуществом которого является широкий набор поддерживаемых потенциалов, сравнительная простота использования и открытость исходных кодов.

В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома (EAM) [9]. Температура расчетной ячейки задавалась путем присвоения атомам случайных скоростей в соответствии с распределением Максвелла-Больцмана для указанной температуры. Для фиксации заданной температуры использовался пропорциональный термостат. Шаг численного интегрирования уравнений движения равнялся 5 фс.

В настоящей работе исследование проводилось на расчетной ячейке, моделирующей кристаллит золота, и имеющей форму параллелепипеда, состоящего из 27 000 атомов. Ориентация расчетной ячейки задавалась следующим образом: ось X была направлена вдоль кристаллографического направления $< 1\overline{10} >$, ось Y – вдоль $< 11\overline{2} >$, а Z – < 111 >. Параметр решетки равнялся 3.52 Å. Для исключения поверхностных эффектов использовались периодические граничные условия.

Для создания поры в кристаллической структуре задавалась сфера с некоторым радиусом. Затем центр сферы совмещался с одним из узлов решетки, и удалялись все атомы, попадающие в эту сферу. Необходимо оговорить, что простой шарообразной формой может обладать только пора, образовавшаяся в аморфном теле. В кристалле поверхностная энергия является функцией кристаллографического направления, и для некоторых сингоний различия ее значений в зависимости от ориентации могут достигать 50 % [10]. Факторами, влияющими на форму поры, являются также кинетика ее роста и кристаллографическая анизотропия взаимодействия вакансий с порами. Согласно расчетам [11] в ГЦК-решетке поверхностная энергия минимальна для тетрадекаэдров. Поэтому после удаления атомов осуществлялась структурная релаксация расчетной ячейки до прихода системы в состояние с минимальной энергией.

Особенностями ударной послекаскадной волны, отличающей ее от волн, получаемых другими методами, является большая амплитуда атомных смещений, а также малая ширина фронта, соизмеримая с параметром решетки кристалла [12]. Поэтому для создания волны группе атомов в приграничной области расчетной ячейки присваивалась скорость, в два раза превышающая скорость продольных звуковых волн, вдоль кристаллографического направления $< 1\overline{10} >$. Плотноупакованное направление было выбрано потому, что из-за наличия механизмов фокусировки энергии, сферическая волна трансформируется во фрагменты плоских волн, распространяющихся именно вдоль плотноупакованных направлений [13]. В результате последующих эстафетных атомных смещений формируется бегущая волна, ширина фронта которой не превышает нескольких межатомных расстояний, а амплитуда смещений атомов значительно превышает, например, амплитуду тепловых колебаний.

Использование периодических граничных условий в направлении оси X приводит к тому, что при генерации ударной волны на границе расчетной ячейки возникающая волна разгрузки распространяется навстречу ударной волны с противоположной границы. Чтобы избежать этого координаты атомов противоположной границы расчетной ячейки фиксировались. Таким образом, при моделировании, по сути, использовалась комбинация периодических и жестких границ. Отметим, что влияние на дислокацию волны, отраженной от закрепленной границы, можно не учитывать, так как волна к этому моменту претерпевает значительное затухание.

После выполнения заданного количества шагов компьютерного эксперимента следовала структурная релаксация системы, путем многократного обнуления скоростей атомов. Для исследования получившейся структуры использовался визуализатор атомных смещений, который представляет собой линии, соединяющие начальное и конечное положение атомов, а также визуализатор наложения плотноупакованных рядов, состоящий из линий, соединяющих атомы в трех плотноупакованных направлениях.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При использовании описанной выше методики создания волны в проводимых компьютерных экспериментах удавалось достичь давления во фронте волны, исчисляемого десятками ГПа. Данное значение во многом зависит от количества граничных атомов, которым присваивается скорость для генерации волны. Несмотря на большое давление, кристаллическая решетка оставалось упругой. Кроме того, не наблюдался процесс расщепления ударной волны на упругий предвестник и следующий за ним пластический фронт, а волна состояла только из упругого компонента. Очевидно, это связано с отсутствием несовершенств решетки, которые могут являться зародышами пластических сдвигов. Так, в работах [14, 15] показано, что идеальная кристаллическая решетка меди остается упругой вплоть до давления 30 ГПа, в то время как при включении точечных дефектов уже при 5 ГПа начинают образовываться дефекты упаковки. Кроме этого, в работе [16] также говорится о том, что пластическая деформация, связанная с образованием и движением дислокационных диполей, достигается при более низких температурах и гораздо меньших одноосных деформациях, если в кристаллической структуре содержатся точечные дефекты. Отсутствие расщепления ударной волны в идеальном кристалле при компьютерном моделировании также зафиксировано в работе [17]. В связи с вышесказанным поведение генерируемой в проводимых экспериментах ударной волны и отклик моделируемой кристаллической структуры не противоречат известным данным.

Для начала рассмотрим процесс слияния двух вакансионных пор равного размера. Для этого в расчетной ячейке создадим две сферические нанопоры, состоящие из 38 вакансий, таким образом, чтобы они имели общее ребро (см. рис. 1.а). Напомним, что, несмотря на



Рис. 1.

использование термина "сферические", рассматриваемые поры в ГЦК решетке имеют форму тетрадекаэдров. Создаваемая конфигурация нанопор остается стабильной вплоть до $0.45 \cdot T_{\text{пл}}$. При более высоких температурах наблюдается перестройка пор в единый комплекс, представляющий собой недостроенный тетраэдр дефектов упаковки (см. рис. 1.б), в котором грани представляют собой дефекты упаковки вычитания в плоскостях {111}, а ребра – вершинные дислокации с вектором Бюргерса a/6 < 110>. Как правило, в нашем случае нарушение симметрии тетраэдра заключалось в неполном построении какого-либо ребра или в отсутствии идеальности одной из вершин.

Проведем теперь исследование процессов коалесценции пор под воздействием ударных

волн. Компьютерные эксперименты показали, что воздействие таких волн на поры не приводит к образованию единого комплекса, а наблюдается перестройка поры, расположенной ближе к источнику волн, в практически идеальный тетраэдр дефектов упаковки, и при этом вторая пора не претерпевает значительных структурных изменений (см. рис. 2).

Отметим, что структурные изменения наблюдаются при относительно больших временных интервалах между генерацией волн. Это связано с тем, что ударные волны приводят к частичному разрушению пор, и в том случае, если между отдельными волнами проходит значительное количество шагов



компьютерного эксперимента, только тогда вакансии успевают образовать тетраэдры, которые остаются стабильными при воздействии ударных волн.

Известно, что вакансионная пора может быть стабилизирована атомами гелия, являющимися продуктами ядерных реакций, или локальными растягивающими напряжениями. Сжимающие напряжения, наоборот, уменьшают стабильность сферической полости. В связи с этим перейдем к рассмотрению влияния ударных волн на процесс структурной трансформации вакансионной поры в расчетной ячейке, подверженной упругому деформированию, которое задается путем изменения равновесного расстояния между атомами. Ранее проведенное исследование показало, что кроме дробления поры на отдельные составляющие, ударные волны могут инициировать структурную перестройку двух пор в сдвоенные тетраэдры дефек-



Рис. 3.

ВЕСТНИК ВГУ. СЕРИЯ: ФИЗИКА. МАТЕМАТИКА. 2016. № 1

Коалесценция вакансионных нанопор в кристалле...

тов упаковки. Очевидно, что напряжения, создаваемые в результате деформации расчетной ячейки, могут способствовать процессу коалесценции пор. Для подтверждения вышесказанного проведем следующий эксперимент. В расчетной ячейке, подверженной одноосной деформации, создадим две близко расположенные поры, состоящие из 38 вакансий, так же как показано на рисунке 1.а. После чего сгенерируем ударные волны с интервалом 10 пс, задав начальную температуру расчетной ячейки 300 К. Структурные изменения вакансионных пор после прохождения трех ударных волн представлены на рисунке 3. Из полученных изображений видно, что в расчетной ячейке, подверженной сжатию, наблюдается процесс слияния пор с образованием тетраэдров дефектов упаковки (см. рис. 3.а). Подобные результаты получены в независимости от оси сжатия расчетной ячейки. Отметим, объединение пор в единый комплекс при деформации наблюдается только после генерации ударных волн, так как температуры расчетной ячейки было не достаточно для термоактивации данного процесса. Растягивающие напряжения препятствуют слиянию пор, но под воздействием ударных волн



Рис. 4.

ВЕСТНИК ВГУ. СЕРИЯ: ФИЗИКА. МАТЕМАТИКА. 2016. № 1

они начинают смещаться (см. рис.3.б). Так если предположить что источники волн в кристалле расположены произвольным образом, то под воздействием нескольких волн возможно постепенное удаление пор друга от друга, что замедлит процесс коалесценции, и, возможно, приведет к снижению распухания материала.

В описанных выше компьютерных экспериментах рассматривались нанопоры равного размера. Очевидно, что вероятность ситуации, когда две одинаковые поры оказываются поблизости, не высока. Тем не менее, данное упрощение позволяет получить необходимые качественные выводы. Гораздо реальнее ситуация, когда вблизи поры оказывается отдельная вакансия или небольшой вакансионный комплекс. В результате поглощения таких дефектов увеличивается размер поры. В качестве одного из механизмов роста поры под воздействием ударных волн может быть предложен следующий процесс. В работе [18] был предложен механизм роста малых вакансионных скоплений за счет увлечения волнами отдельных вакансий. Согласно проведенному исследованию, малые вакансионные скопления, представляющие собой сдвоенный тетраэдр дефектов упаковки, являются наиболее устойчивой конфигурацией вакансий при прохождении через кристаллическую структуру ударных волн, при этом волны преодолевают их с минимальными потерями энергии. Чем крупнее вакансионное скопление, тем большим препятствием оно становится для волны. Как показано в [18], при встрече волн с крупными порами происходит отщепление части вакансий от "родительской" поры, которые в дальнейшем увлекаются последующими волнами. Таким образом, в случае если вблизи от поры будет расположено малое вакансионное скопление, то оно сольется с отщепленными вакансиями. Проверим данное предположение экспериментально. Вблизи от нанопоры, состоящей из 236 вакансий, расположим комплекс из 4 вакансий (см. рис. 4.а). Вакансии расположим с фронтальной стороны поры, то есть со стороны, обращенной к источнику волн. После прохождения через пору трех ударных волн (волны генерировались через 2.5 пс компьютерного эксперимента) наблюдается частичный захват порой малого вакансионного скопления (см. рис. 4.6). В процессе последующей структурной релаксации пора окончательно поглощает вакансии. Например, в описываемом эксперименте пора поглощает три вакансии из четырех (см. рис. 4.в). Таким образом, можно предположить, что если источники волн располагаются в кристалле произвольно, то с течением времени все малые вакансионые скопления должны быть поглощены порой.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное исследование показало возможность инициации процессов укрупнения вакансионных нанопор упругими волнами при температурах, недостаточных для начала, так называемой, тепло-индуцированной коалесценции. При сжимающих напряжениях возрастает роль поверхностной энергии поры, благодаря чему волны активизируют процессы ее структурных трансформаций, которые в ряде случаев могут приводить к слиянию отдельных пор. Растяжение расчетной ячейки стабилизирует пору, в результате чего ударные волны могут вызывать ее смещение без разрушения.

Развиваемые положения могут найти свое применение, как в радиационном материаловедении, так и при прогнозировании поведения материалов, эксплуатируемых в экстремальных условиях.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-58-04033 Бел_мол_а и БРФФИ в рамках проекта № Т15РМ-090

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мирзоев, Ф. Х. Кинетика нуклеации кластеров и формирование наноструктур в конденсированных средах / Ф. Х. Мирзоев // Сборник трудов ИПЛИТ РАН "Современные лазерноинформационные и лазерные технологии", 2005. — С. 62–78. 2. Слезов, В. В. Диффузионный распад твердых растворов / В. В. Слезов, В. В. Сагалович // Успехи физических наук. — 1987. — Т. 151, № 1. — С. 67–104.

3. Остапчук, П. Н. Обобщенный формализм коалесценции в теории вакансионного распухания металлов / П. Н. Остапчук // Вопросы атомной науки и техники. — 2012. — № 2(78). — С. 9–15.

4. Гегузин, Я. Е. Поверхностная энергия и процессы на поверхности твердых тел / Я. Е. Гегузин, Н. Н. Овчаренко // Успехи физических наук. — 1962. — Т. 76, № 2. — С. 283–328.

5. Дубинко, В. И. Теория диффузионной эволюции ансамбля пор в кристаллах под облучением / В. И. Дубинко, П. Н. Остапчук, В. В. Слезов // Физика металлов и металловедение. — 1988. — Т. 65, № 1. — С. 32–43.

6. Калиниченко, А. И. Упругие волны, возбуждаемые при ионной имплантации, и их влияние на процессы в облучаемом материале / А. И. Калиниченко, В. Е. Стрельницкий // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (88). — 2005. — № 5. — С. 159–163.

7. Овчинников, В. В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред / В. В. Овчинников // Успехи физических наук. — 2008. — Т. 178, № 9. — С. 991–1001.

8. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics // [Electronic resource]. Mode of Access: http://xmd.sourceforge.net/about.html.

9. Johnson, R. A. Analytic Nearest-Neighbor Model for FCC Metals / R. A. Johnson // Physical Review B. − 1988. − V. 37, № 8. − P. 3924–3931.

10. Черемской, П. Г. Поры в твердом теле / П. Г. Черемской, В. В. Слезов, В. И. Бетехтин. — М.: Энергоатомиздат, 1990. — 376 с.

11. Палатник, Л. С. Поры в пленках / Л. С. Палатник, П. Г. Черемской, М. Я. Фукс. — М.: Энергоатомиздат, 1982. — 216 с.

12. Zhukov, V. P. Elastic-wave generation in the evolution of displacement peaks / V. P. Zhukov, A. A. Boldin // Atomic Energy. — 1987. — V. 68. — P. 884–889.

13. Chudinov, V. G. Kinetics of the diffuse processes within a cascade region in the sub-threshold stages of F.C.C. and H.C.P. Metals / V. G. Chudinov, R.M.J. Cotterill, V. V. Andreev // Physica Status Solidi (a). -1990. - V. 122, $N^{\circ} 1. - P. 111-120$.

14. Могилевский, М. А. Поведение кристаллической решетки при сильном одномерном сжатии / М. А. Могилевский, В. В. Ефремов, И. О. Мынкин // Физика горения и взрыва. — 1977. — № 5. — С. 750–754.

15. Могилевский, М. А. Влияние точечных дефектов на одномерное сжатие решетки / М. А. Могилевский, И. О. Мынкин // Физика горения и взрыва. — 1978. — № 5. — С. 159– 163.

16. Исследование самодиффузии в одноосно деформированных двумерных кристаллах / М. С. Аксенов, Г. М. Полетаев, Р. Ю. Ракитин, М. Д. Старостенков // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2005. — № 2. — С. 64–67.

17. Кривцов, А. М. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения / А. М. Кривцов // Физика твердого тела. — 2004. — Т. 46, вып. 6. — С. 1025–1030.

18. Маркидонов, А. В. Радиационно-динамические процессы в ГЦК кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом / А. В. Маркидонов, М. Д. Старостенков. — Кемерово: Кузбассвузиздат, 2014 — 191 с.

REFERENCES

1. Mirzoev F. Ch. The kinetics of nucleation clusters and the formation of nanostructures in condensed matter. [Mirzoev F. Ch. Kinetika nukleacii klasterov i formirovanie nanostructur

ВЕСТНИК ВГУ. СЕРИЯ: ФИЗИКА. МАТЕМАТИКА. 2016. № 1

v kondensirovannich sredach]. Sbornik trudov "Sovremennie lazerno-informacionnie i lazernie technologii" — Proceedings of the "Modern laser and information and laser technologies", 2015, pp. 62–78.

2. Slezov V. V., Sagalovich V. V. Diffusive decomposition of solid solutions. [Slezov V. V., Sagalovich V. V. Diffusionnii raspad tverdich rastvorov]. Uspechi fizicheskich nauk – Successes of physical sciences, 1987, vol. 151, no. 1, pp. 67–104.

3. Ostapchuk P.N. The generalized formalism coalescence theory vacancy swelling of metals. [Ostapchuk P.N. Obochennii formalism koalescencii v teorii vakansionnogo raspuchania metallov]. Voprosi atomnoi nauki i techniki — Problems of Atomic Science and Technology, 2012, no. 2(78), pp. 9–15.

4. Geguzin Ya.E., Ovcharenko N.N. Surface energy and processes on solid surfaces. [Geguzin Y.E., Ovcharenko N.N. Poverchnostnaia energia i processi na poverchnosti tverdich tel]. Uspechi fizicheskich nauk — Successes of physical sciences, 1962, vol. 76, no. 2, pp. 283–328.

5. Dubinko V.I., Ostapchuk P.N., Slezov V.V. The theory of diffusion evolution of an ensemble of pores in the crystals under irradiation. [Dubinko V.I., Ostapchuk P.N., Slezov V.V. Teoria diffusionnoi evoliucii ansamblia por v kristallach pod oblucheniem]. *Fizika metallov i metallovedenie* – *Physics of Metals and Metallography*, 1988, vol. 65, no. 1, pp. 32–43.

6. Kalinichenko A.I., Strelnicki V.E. Elastic waves generated by ion implantation, and their influence on the processes in the irradiated material. [Kalinichenko A.I., Strelnicki V.E. Uprugie volni, vozbuzhdaemie pri ionnoi implantacii, i ich vlianie na processes v obluchaemom materiale]. *Voprosi atomnoi nauki i techniki – Problems of Atomic Science and Technology*, 2005, no. 5, pp. 159–163.

7. Ovchinnikov V.V. Radiation-thermal effects. Potential for unique properties and structural states of condensed matter. [Ovchinnikov V.V. Radiacionno-dinamicheskie effecti. Vozmozhnosti formirovania unikalnich strukturnich sostoianii i svoistv kondensirovannich sred]. Uspechi fizicheskich nauk — Successes of physical sciences, 2008, vol. 178, no. 9, pp. 991–1001.

8. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics. [Electronic resource]. Mode of Access: http://xmd.sourceforge.net/about.html.

9. Johnson R.A. Analytic Nearest-Neighbor Model for FCC Metals. Physical Review B, 1988, vol. 37, no. 8, pp. 3924–3931.

10. Cheremskoi P.G., Slezov V.V., Betechtin V.I. The pores in the solid. [Cheremskoi P.G., Slezov V.V., Betechtin V.I. Pori v tverdom tele]. Moscow: Energoatomizdat, 1990, 376 p.

11. Palatnik L.S., Cheremskoi P.G., Fuks M.Ya. The pores in the films. [Palatnik L.S., Cheremskoi P.G., Fuks M.Y. Pori v plenkach]. Moscow: Energoatomizdat, 1982, 216 p.

12. Zhukov V.P., Boldin A.A. Elastic-wave generation in the evolution of displacement peaks. Atomic Energy, 1987, vol. 68, pp. 884–889.

13. Chudinov V.G., Cotterill R.M.J., Andreev V.V. Kinetics of the diffuse processes within a cascade region in the sub-threshold stages of F.C.C. and H.C.P. Metals. Physica Status Solidi (a), 1990, vol. 122, no. 1, pp. 111–120.

14. Mogilevski M.A., Efremov V.V., Minkin I.O. The behavior of the crystal lattice with a strong one-dimensional compression. [Mogilevski M.A., Efremov V.V., Minkin I.O. Povedenie kristalicheskoi reshetki pri silnom odnomernom szhatii]. *Fizika gorenia i vzriva – Physics of combustion and explosion*, 1977, no. 5, pp. 750–754.

15. Mogilevski M.A., Minkin I.O. Influence of point defects on the one-dimensional lattice compression. [Mogilevski M.A., Minkin I.O. Vliyanie tochechnich defektov na odnomernoe szhatii reshetki]. *Fizika gorenia i vzriva — Physics of combustion and explosion*, 1978, no. 5, pp. 159–163.

16. Aksenov M.S., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu, Starostenkov M.D. The study of self-diffusion in uniaxially deformed two-dimensional crystals. [Aksenov M.S., Poletaev G.M., Rakitin R.Yu, Starostenkov M.D. Issledovanie samodiffusii v odnoosno deformirovannich dvumernich kristallach].

Fundamentalnie problemi sovremennogo materialovedenia – Fundamental problems of modern materials science, 2005, no. 2, pp. 64–67.

17. Krivcov A.M. Description plastic effects at the molecular dynamics simulation of spall fracture. [Krivcov A.M. Opisanie plasticheskich effectov pri molekularno-dinamicheskom nodelirovanii otkolnogo razrushenia]. *Fizika tverdogo tela — Solid State Physics*, 2004, vol. 46, no. 6, pp. 1025–1030.

18. Markidonov A.V., Starostenkov M.D. Radiation-dynamic processes in fcc crystals, accompanied by a high mass transfer. [Markidonov A.V., Starostenkov M.D. Radiacionno-dynamicheskie processi v GCK kristallach, soprovozhdayuzhiesya visokoskorostnim massoperenosom]. Kemerovo: Kuzbassvuzizdat, 2014, 191 p.

Маркидонов Артем Владимирович, доцент филиала Кузбасского государственного технического университета в г. Новокузнецке, кандидат физико-математических наук, Новокузнецк, Россия E-mail: markidonov_artem@mail.ru Teл.: (3843)46-64-47

Старостенков Михаил Дмитриевич, заведующий кафедрой физики Алтайского государственного технического университета, доктор физико-математических наук, профессор, Барнаул, Россия E-mail: genphys@mail.ru Teл.: (3852)29-08-52 Markidonov Artem Vladimirovich, associate professor of the branch of Kuzbass state technical university in Novokuznetsk, PhD, Novokuznetsk, Russia E-mail: markidonov_artem@mail.ru Tel.: (3843)46-64-47

Starostenkov Mikhail Dmitrievich, head of the department of physics of Altai state technical university, Dr.Sci., professor, Barnaul, Russia E-mail: genphys@mail.ru Tel.: (3852)29-08-52