

На правах рукописи



МАРКИДОНОВ АРТЕМ ВЛАДИМИРОВИЧ

**МЕХАНИЗМЫ КООПЕРАТИВНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ ГРУПП
АТОМОВ НА СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ В ГЦК-МЕТАЛЛАХ ПРИ
ВНЕШНИХ ВЫСОКОИНТЕНСИВНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ**

Специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Барнаул - 2016

Работа выполнена в Алтайском государственном техническом университете им. И.И.Ползунова и в филиале Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф.Горбачева в г. Новокузнецке

Научный консультант: заслуженный деятель науки РФ,
доктор физико-математических наук, профессор
Старостенков Михаил Дмитриевич

Официальные
оппоненты: Зольников Константин Петрович,
доктор физико-математических наук, ведущий
научный сотрудник лаборатории компьютерного
конструирования материалов ФГБУН «Институт
физики прочности и материаловедения СО РАН»

Гафнер Юрий Яковлевич,
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВО «Хакасский государственный
университет им. Н.Ф. Катанова», заведующий
кафедрой общей и экспериментальной физики

Курзина Ирина Александровна,
доктор физико-математических наук, доцент,
ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский
Томский государственный университет», профессор
кафедры физической и коллоидной химии

Ведущая организация: ФГБУН «Институт проблем сверхпластичности
РАН», г. Уфа

Защита состоится " ____ " _____ 2016 г. в ____ часов на заседании
диссертационного совета Д 212.004.04 при Алтайском государственном
техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656038, г. Барнаул,
пр. Ленина, 46., e-mail: veronika_65@mail.ru.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте
Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

<http://www.altstu.ru/structure/unit/odia/scienceevent/2935/>

Автореферат разослан " ____ " _____ 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  Романенко В.В.
кандидат физико-математических наук

Примечание: отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью
организаций, просим присылать в 2-х экз. на адрес университета и e-mail:
veronika_65@mail.ru

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность исследования. Современная наука с каждым годом уделяет все большее внимание вопросам, связанным с производством энергии. Несмотря на известные трагические события, в России действует программа, согласно которой доля атомной энергетики в электропроизводстве к 2030 г. должна составить 33% [1, 2]. Для повышения конкурентоспособности необходимо, чтобы новая технологическая платформа атомной энергетики отвечала ряду ключевых требований, среди которых можно выделить безопасность и экономичность. Выполнение этих требований зависит в первую очередь от конструкционных материалов эксплуатируемых и проектируемых ядерных реакторов. Так, например, для увеличения КПД необходимо использовать более высокие рабочие температуры, чем те, которые характерны для легководных реакторов, и поэтому использование в активной зоне реактора многих уже существующих материалов становится невозможным [3].

Облучение и высокая температура при эксплуатации реактора способствует кардинальному изменению микроструктуры, механических свойств, а также геометрии материала из-за явлений распухания, ползучести, охрупчивания и так далее. Именно радиационно-индуцированные явления определяют экономичность и безопасный срок эксплуатации реактора [4]. С другой стороны, целенаправленная модификация свойств твердых тел при радиационном воздействии является мощным инструментом для создания новых материалов с заранее заданными свойствами.

На сегодняшний день проблема создания конструкционных радиационностойких материалов приобретает принципиальное значение, что обусловлено как широким использованием ядерных реакторов, так и бурным развитием ракетно-космической отрасли. При разработке нового материала необходимо определить не только оптимальные комбинации основных компонентов и концентраций различных добавок, но также и режимы термомеханической обработки при которых материал сохраняет в заданных пределах свои физические и механические свойства в течение определенного времени. Данную задачу невозможно решить без понимания процессов, которые приводят к деградации изучаемых свойств.

При облучении твердого тела пучком ускоренных ионов часть из них отражается от поверхности, а вторая проникает вглубь объема материала, замедляясь в нем. В данном случае кинетическая энергия ионов растрачивается при упругих соударениях с ядрами атомов материала и при возбуждении электронной подсистемы. В результате упругих соударений атомы тела могут быть выбиты из равновесных положений, и упруго сталкиваясь с другими атомами создать поток выбитых атомов, образуя каскад атомных соударений. Атомы в каскаде расходуют энергию на образование точечных дефектов. Кроме того, возникающие сильные неравновесные флуктуации температуры приводят к образованию так называемых ударных послекаскадных волн [5]. Их возникновение

обусловлено различием между временем термализации атомных колебаний в некоторой конечной области и временем отвода из нее тепла. В результате резкого расширения сильно разогретой области формируется почти сферическая ударная волна. Возникновение наноразмерных областей энерговзрывного выделения, генерирующие ударные волны, представляет собой общее явление для любых видов корпускулярного облучения. Тем не менее, данный факт практически не учитывается при изучении поведения конденсированных сред в условиях радиационного воздействия. Поэтому обнаружение новых явлений и процессов, инициаторами которых выступают послекаскадные ударные волны, и ориентирование их на формирования уникальных модифицированных атомных структур, является перспективным и актуальным направлением радиационного материаловедения. Эффекты, связанные с распространением и генерацией ударных послекаскадных волн, получили название радиационно-динамических [5]. При этом осуществляются высокоскоростные кооперативные атомные смещения, представляющие собой процесс, протекающий со сверхзвуковой скоростью.

Цель исследования, сформировавшего основу диссертации, заключалась в выявлении механизмов воздействия высокоскоростных кооперативных атомных смещений, которые могут быть рассмотрены как ударные волны, на структурные изменения, происходящие в металлах с ГЦК-решеткой и сопровождающиеся массопереносом.

В соответствии с поставленной целью, при проведении исследования решались следующие *задачи*:

1. Построить молекулярно-динамическую модель для исследования на атомном уровне различных структурных изменений в ГЦК-металлах.
2. Исследовать процессы возникновения высокоскоростных кооперативных атомных смещений в кристаллах при образовании, аннигиляции и структурной перестройке одиночных и множественных точечных дефектов.
3. Оценить скорость массопереноса при высокоскоростном восстановлении равномерного распределения плотности материала, локальное отклонение которой от среднего значения создавалось дефектами структуры.
4. Выявить механизмы агрегатизации, трансформации и перемещения множественных точечных дефектов кристалла при взаимодействии с кооперативными атомными смещениями.
5. Исследовать возможность генерации вторичных ударных волн структурными дефектами.
6. Выявить причастность послекаскадных ударных волн к сверхглубокому проникновению радиационного фронта в кристалле.
7. Рассмотреть возможность инициации ударными волнами процесса перемещения вещества через естественные препятствия в кристалле на примере границы зерен наклона.
8. Изучить влияние послекаскадных ударных волн на процессы гомогенного зарождения, роста и структурной трансформации нанопор.

9. Определить условия, способствующие укрупнению нанопор.
10. Выявить механизмы генерации точечных дефектов ударными волнами и оценить их вклад в радиационно-стимулированную диффузию.
11. Изучить возможность изменения дислокационной структуры кристалла ударными послекаскадными волнами.
12. Определить характеристики создаваемых волн и режимы их генерации, позволяющие оказывать существенное влияние на дефекты кристаллов.
13. Выяснить различия в структурных преобразованиях дефектов при воздействии на них звуковыми и ударными волнами.

Объектом исследования являются структурные изменения в металлах с ГЦК-решеткой, а **предметом исследования** – высокоскоростные кооперативные атомные смещения, возникающие в результате внешнего высокоинтенсивного воздействия.

В связи с тем, что предмет исследования отличается малым размером изучаемой области, а также высокая скорость протекания процессов, то в качестве **метода исследования** в данном случае наиболее рациональным видится использование метода компьютерного моделирования. Компьютерное моделирование является в настоящее время таким же признанным методом исследования как экспериментальный и теоретический методы. При помощи компьютерной модели можно как проверить теоретические разработки, так и объяснить и спрогнозировать явления еще не освещенные в полной мере другими методами. В настоящей работе компьютерное моделирование было проведено по методу молекулярной динамики, несомненным преимуществом которого является возможность моделирования атомных систем при заданной температуре или при заданных скоростях атомов.

Научная новизна исследования заключается в том, что впервые с помощью метода молекулярной динамики рассмотрено непосредственное влияние ударных волн, которые на микроуровне представляют собой высокоскоростные кооперативные атомные смещения, на одиночные дефекты и их различные скопления в кристаллах с ГЦК-решеткой. Показано, что подобные атомные смещения могут инициировать восстановление равномерности распределения локальной плотности тела, представляющую собой аннигиляцию дефектов. Выполнены оценки скорости протекания процесса аннигиляции, показывающие, что она превышает скорость звуковых волн в рассматриваемом материале. Наглядно продемонстрирован и исследован процесс вынужденной миграции скопления множественных межузельных атомов, образующих комплекс краудионов. Выдвинуто предположение, что данные объекты могут быть причастны к проявлению эффекта дальнего действия, так как могут не только перемещаться на значительные расстояния, изменяя упругие поля в кристалле, но и создавать вторичные упругие волны. Показано, что под действием ударных волн возможно гомогенное зарождение нанопор, скопление которых на границе зерен наклона может вызывать ее изгиб. Высказано предположение, что

воздействием ударных волн можно инициировать миграцию границ зерен. Рассмотрен вклад создаваемых волн в процесс радиационно-стимулированной диффузии. Таковым может являться как создание точечных дефектов непосредственно во фронте волны, так и изменение упругих полей дефектных образований, активизирующих диффузию. Продемонстрирована возможность дробления, растворения и перемещения нанопор под воздействием создаваемых волн. Впервые показано раздвоение латентных треков на отдельные капилляры. Кроме того, рассмотрено скольжение краевых дислокаций под воздействием ударных волн. Высказано предположение о возможности инициирования данными волнами процессов размножения дислокаций путем активизации срабатывания источников Франка-Рида.

Практическая значимость исследования заключается в следующем. Изучение структурных превращений в металлах и сплавах при их облучении потоками заряженных частиц, способных инициировать различные процессы атомной перестройки, представляет собой большой интерес, так как механизм передачи энергии (упругое или неупругое взаимодействие, ионизация) можно целенаправленно изменять путем выбора типа и энергии облучающих частиц, что открывает широкие перспективы использования радиационного воздействия, как инструмента технологической обработки. Развиваемые в диссертации представления, возможно, найдут применение в радиационном материаловедении, при создании новых материалов с заданными свойствами, например материалов для проектируемых инновационных ядерных систем (реакторов) IV поколения, а также при усовершенствовании свойств уже известных материалов, подвергающихся различным экстремальным воздействиям в процессе эксплуатации. Решение поставленных задач, возможно, позволит внедрить в производство новые, более эффективные способы обработки металлов. В частности, по современным данным можно говорить о том, что ионная бомбардировка является альтернативой печного отжига. К примеру, известно, о радиационном способе снятия нагартовки алюминиевого проката, который в разы эффективнее трудоемкого и энергозатратного печного отжига [5]. Радиационный отжиг в алюминиевых сплавах протекает при более низких температурах, за более короткое время и при меньшем расходе энергии по сравнению с термическим отжигом. Рассмотренные процессы порообразования и структурных трансформаций пор, возможно, могут быть применены в разработке новых методов борьбы с распуханием. Явление деления цилиндрических пор может быть использовано при создании новых фильтров, детекторов или охлаждающих элементов в наноэлектронике. Исследования в данных направлениях соответствует приоритетным направлениям «Индустрия наносистем и материалов» и «Энергетика и энергосбережение» развития науки, технологий и техники Российской Федерации. Проведенные эксперименты могут послужить основой при разработке ряда математических моделей. Кроме того, возможно использование результатов компьютерного моделирования в качестве

демонстрационного материала, отображающего процессы, протекающие в кристаллических структурах, и полезного для студентов, осваивающих курс физики твердого тела.

На защиту выносятся следующие положения:

1. В случае расположения точечных дефектов в зоне спонтанной рекомбинации скорость массопереноса при их аннигиляции превышает скорость звука в рассматриваемом материале.

2. Приведенные в движение краудионные комплексы могут являться источником вторичных волн, создаваемых при встрече краудионов со структурными несовершенствами твердого тела.

3. Во фронте ударной послекаскадной волны возможно образование пар Френкеля, отдельные компоненты которых вносят вклад в радиационно-стимулированную диффузию.

4. При распространении ударной послекаскадной волны в твердом теле, содержащем высокую концентрацию вакансий, возможно гомогенное образование пор, причиной которому являются растягивающие напряжения, возникающие после прохождения фронта волны.

5. Под действием ударных полсекаскадных волн возможно разделение нанопор на несколько более мелких, изолированных друг от друга частей, которые в дальнейшем могут быть перемещены в твердом теле.

6. Ударные волны, возникающие в твердом теле при облучении, могут способствовать укрупнению нанопор, путем захвата ими ближайших малых вакансионных скоплений, а также инициировать слияние нескольких пор в единый комплекс.

7. Одной из причин изменения дислокационной структуры твердого тела при облучении являются касательные напряжения, создаваемые волной разгрузки, следующей за фронтом ударной послекаскадной волны.

Работа проводилась в рамках выполнения программы «У.М.Н.И.К. 2011» (проект №14114), гранта Губернатора Кемеровской области для поддержки молодых ученых – кандидатов наук 2014 года, а также грантов РФФИ №12-02-31135, №14-08-90416, №15-48-04127 и №15-58-04033.

Апробация работы. Основные полученные результаты были представлены на 77 научно-практических конференциях и семинарах, среди которых наиболее значимыми являются: IV Международная школа-конференция «Микромеханизмы пластичности, разрушения и сопутствующих явлений» (MPFP), Тамбов (2007); V Международная научная школа-конференция «Фундаментальное и прикладное материаловедение», Барнаул (2007); X Международная школа-семинар «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах», Бийск (2008); I Международная школа-семинар по фундаментальным проблемам микро- и наносистемной техники (MNST'2008), Новосибирск (2008); Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии», Витебск, Беларусь (2009); XVII Международная конференция «Физика прочности и пластичности материалов», Самара (2009); VI Международная научная школа-конференция «Фундаментальное и прикладное материаловедение», Барнаул (2009); III

Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов», Москва (2009); 10th International Conference on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows Proceedings, Tomsk (2010); VI Международная научная конференция «Прочность и разрушение материалов и конструкций», Оренбург (2010); IV Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов», Москва (2011); X конференция по физике высоких энергий, ядерной физике и ускорителям, Харьков, Украина (2012); Научные чтения им. чл.-корр. РАН И.А. Одингга «Механические свойства современных конструкционных материалов», Москва (2012); XIX Международная научно-практическая конференция «Современные техника и технологии», Томск (2013); V Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов», Москва (2013); I Российско-Казахстанская молодежная научно-техническая конференция, Барнаул (2013); XIV Международная научно-техническая Уральская школа-семинар металловедов-молодых ученых, Екатеринбург (2013); XLIV Международная Тулиновская конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, Москва (2014); Международные научные чтения им. чл.-корр. РАН И.А. Одингга «Механические свойства современных конструкционных материалов», Москва (2014); Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы», Уфа (2014); VIII Международная конференция «Фазовые превращения и прочность кристаллов», Черноголовка (2014); XV Международная научно-техническая Уральская школа-семинар молодых ученых, Екатеринбург (2014); XIII Всероссийская с международным участием школа-семинар по структурной макрокинетики для молодых ученых, Черноголовка (2015); International seminar «Effect of external influences on the strength and plasticity of metals and alloys», Barnaul (2015); X Всероссийская конференция молодых ученых «Наноэлектроника, нанофотоника и нелинейная физика», Саратов (2015); XII Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов» (с международным участием), Москва (2015); VI Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов», Москва (2015).

Публикации. По теме диссертации опубликованы 2 монографии, 1 глава в коллективной монографии, 109 статей, включая 36 в журналах, рекомендованных ВАК, и 30 тезисов, в которых нашли отражение теоретические принципы и результаты работы. Кроме того, в процессе работы над диссертацией было получено 1 государственное свидетельство о регистрации программы для ЭВМ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы из 428 наименований. Работа изложена на 343 страницах машинописного текста, содержит 7 таблиц и 121 рисунок.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность и практическая ценность выбранного направления исследований. Сформулирована цель диссертационной работы, описана научная новизна, 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 проблема возникновения радиационно-стимулированных явлений. Особое внимание уделено процессам в атомной системе, носящим кооперативный характер. В этой же части исследования осуществляется обзор современных представлений о радиационных дефектах, их образовании и влиянии на свойства реальных твердых тел, в частности в отдельный раздел вынесена проблема порообразования, так как радиационное распухание материала является причиной целого ряда нежелательных явлений. Кроме того, отдельно рассмотрен «эффект дальнего действия», не имеющий на сегодняшний день однозначного объяснения, и позволяющий значительно расширить границы технологического применения облучения материалов. В связи с тем, что целый ряд исследователей причиной данного эффекта называют возникающие в материале ударные волны, то были рассмотрены радиационно-динамические процессы, сопровождающие генерацию волн в твердом теле при облучении. В конце главы, в соответствии со сделанным обзором, формируются задачи исследования, позволяющие добиться поставленной цели.

Вторая глава посвящена построению компьютерной модели. В связи с тем, что исследование проводится при помощи метода компьютерного моделирования, вначале осуществляется обзор имеющихся на сегодняшний день методов моделирования, в результате которого обосновывается выбор самого метода исследования, а также делается вывод, что поставленные задачи предпочтительнее решать при помощи метода молекулярной динамики. Данный метод базируется на математической модели, состоящей из системы дифференциальных уравнений, разностной схемы, потенциала межатомного взаимодействия, начальных и граничных условий. Преимуществом метода молекулярной динамики является возможность проводить эксперименты с заданными скоростями атомов и описывать динамику исследуемых процессов в реальном времени.

После этого в отдельном разделе осуществляется более детальное описание данного метода, приводится описание этапов компьютерного эксперимента, осуществляемого по методу молекулярной динамики, а также указываются основные требования, которые предъявляются к компьютерной модели.

Далее описываются проблемы выбора потенциальной функции межатомного взаимодействия, так как исследователю приходится искать

компромисс между скоростью вычислений и достоверностью получаемых результатов.

Часть исследования была осуществлена с использованием парного центрального потенциала Морзе:

$$\varphi(r_{ij}) = D\beta e^{-\alpha r_{ij}} (\beta e^{-\alpha r_{ij}} - 2), \quad (1)$$

где D – энергетический параметр, соответствующий глубине потенциальной ямы, α – параметр, определяющий жесткость межатомных связей, $\beta = e^{\alpha r_0}$, r_0 – некоторое усредненное равновесное расстояние по координационным сферам, в которых учитывается взаимодействие между атомами. Параметры потенциала α , β , D подбираются по свойствам материала, которые определяются экспериментальным путем, и были заимствованы из работы [6]. Таким образом, энергия кристалла будет равна сумме энергий, определяемых суммами парных взаимодействий атомов:

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

Во второй части исследования использовался потенциал Джонсона [7], 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:

$$f(r) = f_e \exp\left[-\beta\left(\frac{r}{r_e} - 1\right)\right], \quad r \leq r_c \quad (3)$$

$$\varphi(r) = \varphi_e \exp\left[-\gamma\left(\frac{r}{r_e} - 1\right)\right], \quad r \leq r_c, \quad (4)$$

$$F(\rho) = -E_c \left[1 - \frac{\alpha}{\beta} \ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right) \right] \left[\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^{\alpha/\beta} - \Phi_e \left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^{\gamma/\beta} \right], \quad (5)$$

где $\alpha = 3\sqrt{\Omega B / E_c}$, Ω – атомный объем, B – модуль всестороннего сжатия, E_c – энергия связи, $\rho_e = 12f_e$, $\Phi_e = 6\varphi_e$, r_e – кратчайшее равновесное расстояние между атомами, r_c – радиус обрезания потенциала. Величина $f_e = S(E_c / \Omega)$ является постоянной масштабирования, в которой для чистых металлов S можно принять равной единице. Параметры потенциала φ_e , β , γ , r_c определяются подгонкой к параметру решетки a_0 или атомному объему Ω , энергии связи E_c , энергии образования вакансии E_v , модулю всестороннего сжатия B и модулю сдвига G . Значения параметров потенциала заимствованы из работы [7]. Потенциальная энергия кристалла в данном случае будет представляться в виде суммы энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия атомов с электронным газом:

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1(i \neq j)}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i). \quad (6)$$

Кроме того, отдельные компьютерные эксперименты были проведены с использованием потенциала, предложенным Г. Шеном (H. Sheng) с соавторами в работе [8], и рассчитанным в рамках метода погруженного атома. При построении потенциала Шена, использовалась подгонка неизвестных параметров к поверхностной энергии, определяемой из первых принципов. Три определяющие функции для этого потенциала задавались в виде сплайн-функций пятой степени.

Компьютерные эксперименты выполнялись с использованием программ [9, 10], пакета молекулярно-динамического моделирования XMD [11], разработанного Джоном Рифкиным (John Rifkin) в университете штата Коннектикут (США), а также при помощи авторской разработки. Для непосредственной визуализации атомов расчетной ячейки применялась программа RasMol [12], разработанная Роджером Сэйлом (Roger Sayle) на кафедре биомолекулярных структур Эдинбургского университета (Великобритания). При исследовании кристаллической структуры использовались визуализаторы атомных смещений, плотноупакованных рядов, а также распределения потенциальной энергии, описание которых представлено в заключительном разделе главы.

Третья глава диссертации посвящена изучению процессов генерации ударных волн в кристаллической структуре при образовании одиночных точечных дефектов и их кластеров, а также волн, возникающих в результате последующей аннигиляции этих дефектов, и их возможному влиянию на дефектную структуру кристалла. Исследование проводилось на двумерной прямоугольной расчетной ячейке, моделирующей кристаллит алюминия, стороны которой ориентировались вдоль кристаллографических направлений $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ и $\langle 11\bar{2} \rangle$. Поверхностные эффекты исключались путем использования периодических граничных условий. Межчастичное взаимодействие описывалось с помощью потенциала Морзе. Шаг интегрирования равнялся 0.01 пс.

Отметим, что использование парного потенциала при описании дефектной структуры кристалла не совсем корректно. Но так как в настоящей работе основной упор делается на выявление общих физических закономерностей, а не на вычисление энергетических характеристик дефектов, то использование данного потенциала допустимо. Кроме того, как показано в работе [6], качественные результаты, получаемые с помощью парных потенциалов, кардинально не отличаются от результатов, полученных при использовании более реалистичных, например, многочастичных потенциалов.

В первом разделе данной главы изучался отклик кристалла на сверхбыстрое образование пар Френкеля, осуществляемого в течение одного временного шага компьютерного эксперимента. Для этого рассматривался процесс первичной передачи энергии к соседним атомам путем создания в расчетной ячейке точечных дефектов с последующей возможностью свободного смещения атомов решетки без процедуры снятия теплового фона путем многократного обнуления скоростей. С помощью визуализатора,

соединяющего линиями начальные и конечные положения атомов, можно отследить весь процесс развития атомных смещений в течение эксперимента. Так, картины смещений в определенный момент компьютерного эксперимента после создания межузельного атома и вакансии изображены на рисунке 1.

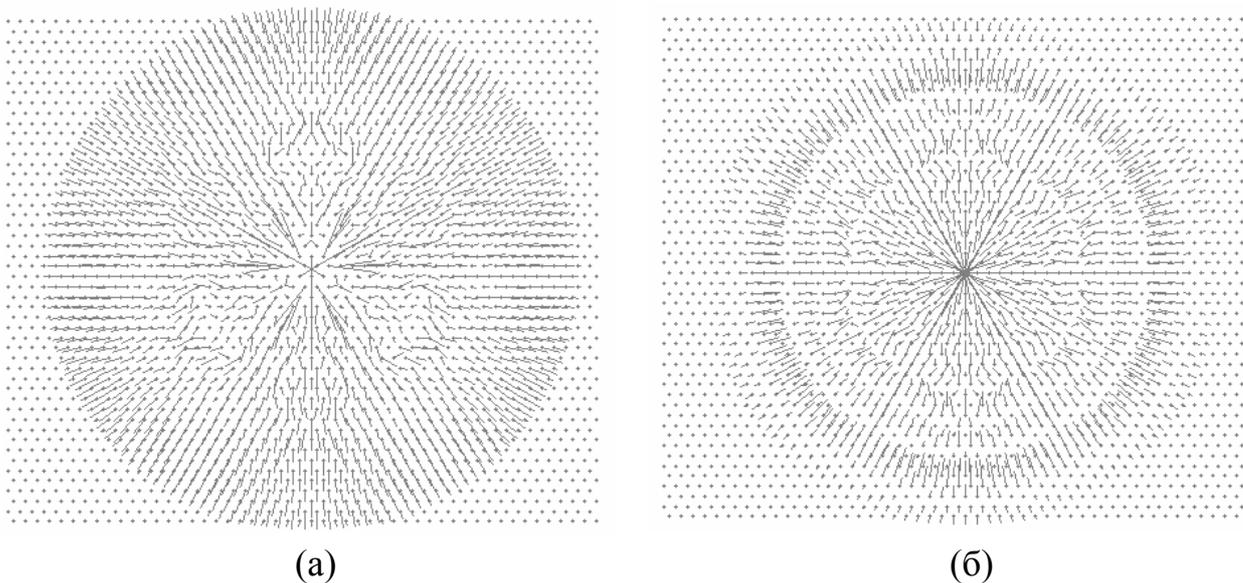


Рис.1. Картины атомных смещений, возникающих после создания межузельного атома (а) и вакансии (б) через 1 пс эксперимента. В первом случае масштаб визуализации увеличен в 20 раз, а во втором – в 500 раз

Как следует из рисунка 1, они представляют собой продольную волну, распространяющуюся радиально от места создания дефекта. Оценки скорости волны вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений показали, что сформировавшись, волна движется со сверхзвуковой скоростью, но в результате последующего расширения фронта, волна постепенно затухает, и ее скорость снижается до скорости продольной звуковой волны.

Проанализировав изменение линейной плотности цепочки атомов, а также распределение кинетической энергии в расчетной ячейке при распространении волны, возникающей в результате сверхбыстрого образования точечных дефектов, сделан вывод, что она аналогична ударной волне, которая в дальнейшем трансформируется в звуковую.

На следующем этапе изучались волны, генерируемые в результате схлопывания пар Френкеля. Межузельный атом, являющийся подвижной компонентой пары Френкеля (при температурах, недостаточных для начала миграции вакансии), в течение эксперимента движется по некоторой кривой траектории, но сблизившись с вакансией на критическое расстояние, вызывает кооперативные атомные смещения, представляющие собой динамический краудион, мигрирующий к ней вдоль плотноупакованного направления типа $\langle 110 \rangle$. В результате этого процесса дефекты

аннигилируют. С позиции массопереноса межузельный атом рассматривается носителем объема $+\omega_0$, равному атомарному объему, а вакансия – носителем объема $-\omega_0$. После рекомбинации дефектов локальная плотность кристаллической решетки восстанавливается, и, следовательно, процесс аннигиляции сопровождается переносом массы. Анализ, выполненный с помощью ячеек Вигнера-Зейтца, позволил рассчитать скорость массопереноса в момент возникновения краудина, которая оказалась выше скорости звуковых волн в рассматриваемом материале. Кинетическая энергия краудина после аннигиляции переходит в энергию генерируемой упругой волны, которая создает напряжения, достаточные для перемещения одиночной вакансии, расположенной вблизи от источника волны. В случае если компоненты пар Френкеля расположены симметрично в виде вертикальных стенок, то волна, создаваемая в результате перестройки такой упорядоченной структуры дефектов, может вызывать смещение уже небольших кластеров вакансий.

На заключительном этапе рассматривались процессы массопереноса в расчетной ячейке, содержащей области с локальной плотностью, отличной от плотности в идеальной кристаллической решетке, создаваемые кластерами точечных дефектов, которые представляли собой цепочки межузельных атомов и вакансий, сгруппированных вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений (см. рис. 2.а).

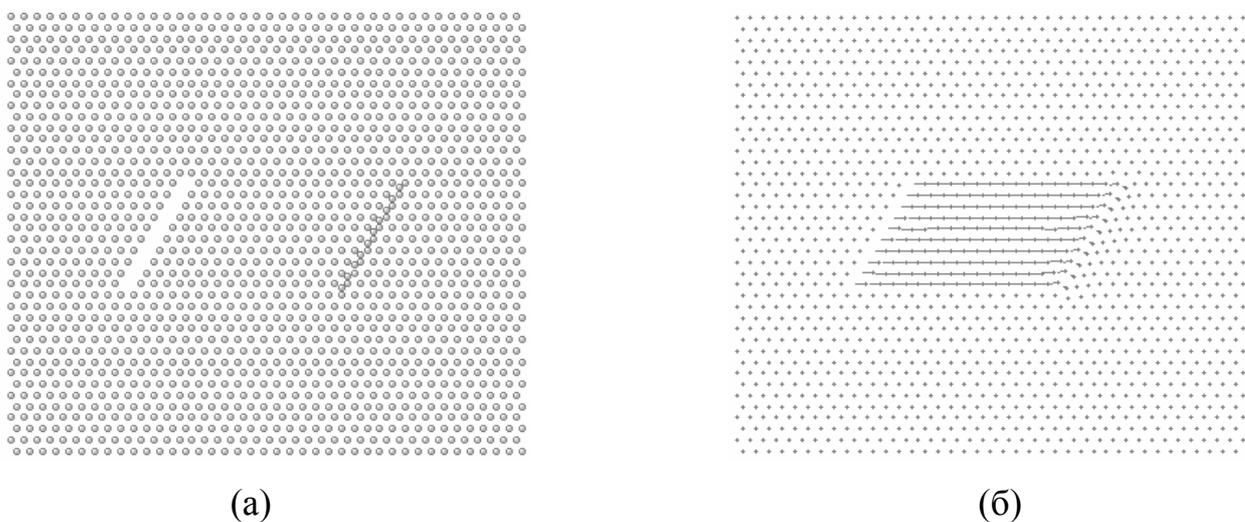


Рис.2. Расчетная ячейка, содержащая агрегаты точечных дефектов, в начале эксперимента (а) и траектории атомных смещений после аннигиляции дефектов (б)

В рамках используемой при проведении компьютерных экспериментов двумерной модели, данные дефекты рассматривались как дислокационные петли внедрения и вычитания. Проведенное исследование показало, что уже для агрегатов из двух дефектов наблюдается резкое увеличение радиуса спонтанной рекомбинации по сравнению с парой одиночных дефектов. В процессе структурной релаксации волна, создаваемая агрегатом

межузельных атомов, при достижении агрегатов вакансий инициирует кооперативные атомные смещения по направлению от области с повышенной локальной плотностью в область с пониженной плотностью, в результате чего дефекты аннигилируют. Внешний вид траекторий атомных смещений при этом совпадает с изображением, представленным на рисунке 2.б.

Проведя компьютерные эксперименты при различном расстоянии между дефектами, а также варьируя размеры агрегатов, была получена скорость массопереноса, которая в среднем составила около 10^4 м/с, что превышает скорость звуковых волн в алюминии. Очевидно, что высокая скорость массопереноса обусловлена связью этого процесса с ударными волнами, генерируемыми в результате релаксации кристаллической структуры с агрегатами дефектов. Таким образом, волны, образующиеся, например, в результате перестройки дефектной структуры кристалла, могут инициировать высокоскоростную аннигиляцию дефектов, представляющую собой кооперативный процесс, в котором задействовано множество атомов.

В *четвертой главе* рассматривались сферические волны, причиной образования которых в твердом теле может являться неравномерность тепловых полей, возникающая при воздействии высокоэнергетических частиц, и их влияние на дефектную структуру кристалла. Компьютерные эксперименты проводились на трехмерной расчетной ячейке, моделирующей кристаллит алюминия, оси которой соответствовали кристаллографическим направлениям $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ (ось X), $\langle 11\bar{2} \rangle$ (ось Y) и $\langle 111 \rangle$ (ось Z). Поверхностные эффекты исключались использованием периодических граничных условий. Взаимодействие между атомами описывалось с помощью потенциала Морзе. Шаг интегрирования уравнений движения равнялся 0.01 пс.

Для создания сферической волны в центре расчетной ячейки выбирался некоторый узел решетки, и всем соседним атомам, расположенным в узлах, образующих его группу первого окружения, присваивались скорости равные по величине, но направленные радиально от выбранного центрального узла. В результате последующих соударений атомов возникают кооперативные атомные смещения, представляющие собой волну (см. рис. 3).

Как показало проведенное исследование, наибольшая скорость атомных смещений наблюдается вдоль плотноупакованных направлений типа $\langle 110 \rangle$, что обусловлено фокусировкой атомных столкновений [13]. Смещающиеся в данных направлениях атомы являются инициаторами вторичных волн, но уже поперечных. Отметим, что при моделировании каскада атомных столкновений наибольшие атомные смещения наблюдаются именно вдоль таких плотноупакованных направлений [14].

Необходимо оговорить, что величина радиуса плотного каскада составляет несколько нанометров, и поэтому представленный выше эксперимент можно рассматривать лишь приближенно к данному явлению и с позиции качественного исследования. Тем не менее, основные выводы о распространении атомных смещений вдоль плотноупакованных

кристаллографических направлений полностью совпадают. Следовательно, в дальнейшем можно изучать влияние данной волны на агрегаты точечных дефектов путем создания высокоскоростных кооперативных атомных смещений вдоль направлений типа $\langle 110 \rangle$.

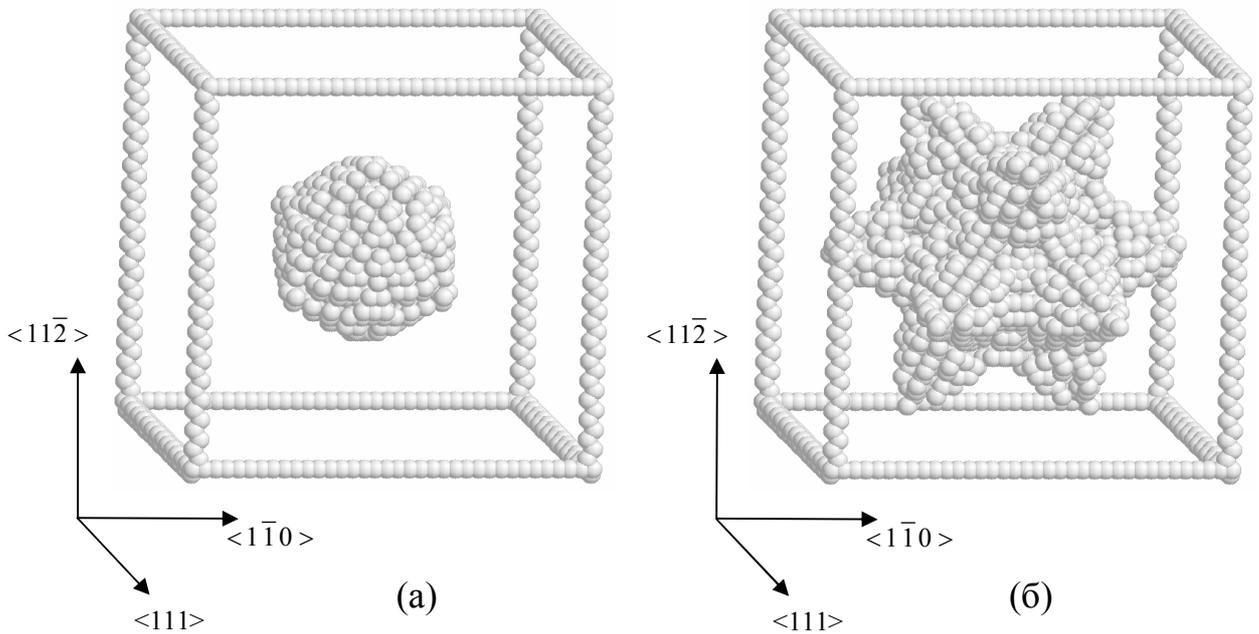


Рис.3. Поверхность волны атомных смещений в пределах расчетной ячейки, наблюдаемая через 0.5 пс компьютерного эксперимента в результате сообщения группе центральных атомов скорости c_p (а) и $1.5 \cdot c_p$ (б) м/с, где c_p – скорость продольных звуковых волн, которая для алюминия равна 6260 м/с [15]

Вначале рассмотрим влияние данных волн на различные скопления точечных дефектов. Компьютерные эксперименты показали, что в результате прохождения волн по расчетной ячейке наблюдается дрейф одиночных вакансий и перестройка малых вакансионных скоплений в тетраэдры дефектов упаковки, которые оказываются устойчивой конфигурацией, и являются стоком для вакансий, смещающихся при последующей генерации волн, и образующих таким образом зародыш поры. Так как данный процесс протекает при температурах, недостаточных для начала термоактивации диффузионных процессов, то, следовательно, именно напряжения, создаваемые проходящей волной, являются причиной гомогенного зарождения поры.

При создании волн в расчетных ячейках, содержащих скопления межузельных атомов, оказалось, что они инициирует перестройку дефектов в ориентированные по ходу распространения волн комплексы краудионов. Последующие волны вызывают смещения таких образований. Таким образом, можно предположить, что в результате генерации в расчетной ячейке серии волн краудионный комплекс будет перемещен на значительное расстояние. Возможно, подобный механизм транспортировки вещества

проявляется при эффекте дальнего действия, поэтому он требует более тщательного изучения.

Необходимо отметить, что если для одиночного краудиона в ГЦК-кристалле, как показывают расчеты *ab initio* [16], наиболее энергетически выгодной ориентацией является кристаллографическое направление $\langle 100 \rangle$, то уже в случае двух объединенных краудионов наиболее предпочтительным становится направление $\langle 110 \rangle$ [6]. Расчеты, выполненные в работе [6], показывают, что в металле с ГЦК-решеткой энергия образования двух параллельных краудионов $\langle 110 \rangle$ в плоскости $\{111\}$ оказывается ниже, по сравнению с двумя параллельными гантелями $\langle 100 \rangle$, расположенными в той же плоскости.

При проведении дальнейшего исследования рассматривались плоские и объемные краудионные комплексы, состоящие в большинстве случаев из четырех краудионов (см. рис. 4).

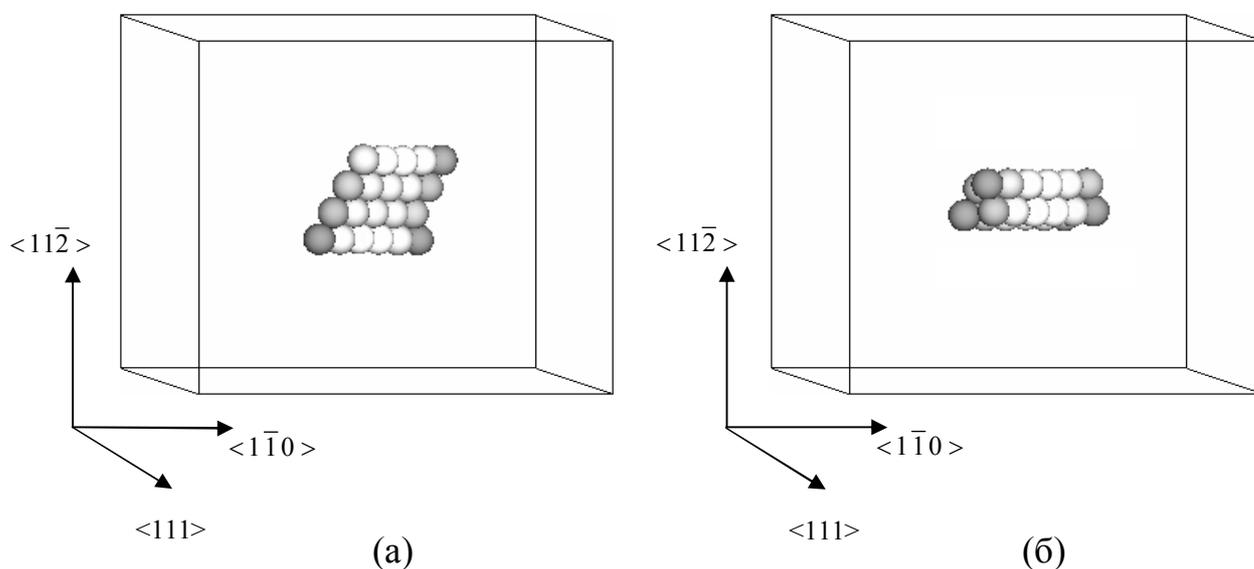


Рис.4. Изображения плоского (а) и объемного (б) комплекса, состоящего из четырех краудионов, полученные путем выделения атомов, энергия связи которых отличается от энергии связи в идеальной решетке. Светлым цветом выделены атомы, имеющие более высокую энергию по сравнению с атомами, выделенными темным цветом

Плоский комплекс представляет собой краудионы, расположенные в соседних плотноупакованных рядах плоскости $\{111\}$, а объемный комплекс – это несколько краудионов, расположенных в параллельных соседних плоскостях расчетной ячейки. Несмотря на то, что, как показано в [6], объемные краудионные комплексы имеют меньшую энергию образования, плоские комплексы также наблюдались в отдельных случаях при воздействии ударной волны на кластеры межузельных атомов, поэтому исключать их из рассмотрения нельзя. Кроме того, при малом числе краудионов энергии образования плоского и объемного комплекса различаются не значительно.

Как показало проведенное исследование, особенностью краудионных комплексов является их высокая стабильность. Подобные скопления межузельных атомов не распадаются на отдельные компоненты даже при температурах, близких к температуре плавления. Кроме того, под действием ударных волн они могут смещаться со сверхзвуковыми скоростями и на достаточно большие расстояния. При таком режиме движения наблюдаются интересные эффекты. Например, если краудионный комплекс, движущийся со звуковой скоростью, пересекает вакансию, то один из краудионов аннигилирует с ней, а оставшийся комплекс продолжает движение (см. рис. 5.а). Если же комплекс перемещается в расчетной ячейке со сверхзвуковой скоростью, то возможно безаннигиляционное преодоление вакансии (см. рис. 5.б). Кроме того, краудионы, обладающие такой скоростью, могут преодолевать упругие поля, создаваемые различными вакансионными кластерами, в отличие от более медленных краудионов, захватываемых скоплением вакансий и аннигилирующих с ними, а также области локальной деформации, создаваемой внешним воздействием.

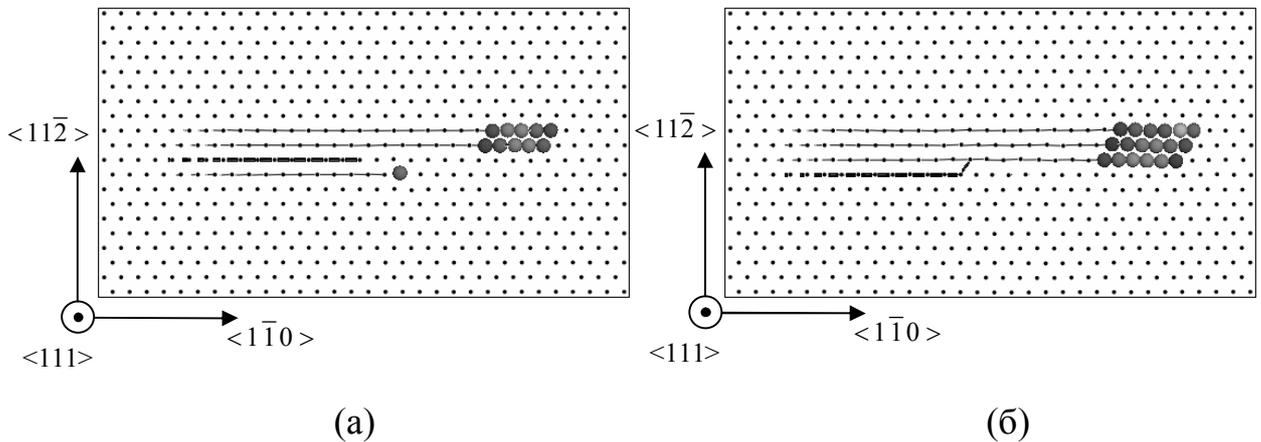


Рис.5. Фрагмент расчетной ячейки после пересечения вакансии комплексом, при присвоении ему скорости, равной c_p (а) и $1.5 \cdot c_p$ (б) м/с. Линии соединяют начальные и конечные положения атомов. Более отчетливо выделена траектория краудиона, аннигилировавшего с вакансией

Дополнительное исследование, проведенное при помощи расчетной ячейки, моделирующей поликристалл, показало, что зернограничная область не является непреодолимым препятствием для краудионных комплексов. Так, например, оценки потерь кинетической энергии краудионов при пересечении границы зерен наклона с углом разориентации θ показали, что с увеличением стартовой скорости комплекса потери энергии значительно снижаются (см. рис. 6). Основной причиной потери кинетической энергии комплекса в данном случае является ее переход в энергию упругой волны, генерируемой при торможении краудионов в зернограничной области. Подобный тормозной механизм может быть рассмотрен в рамках одной из моделей акустической эмиссии.

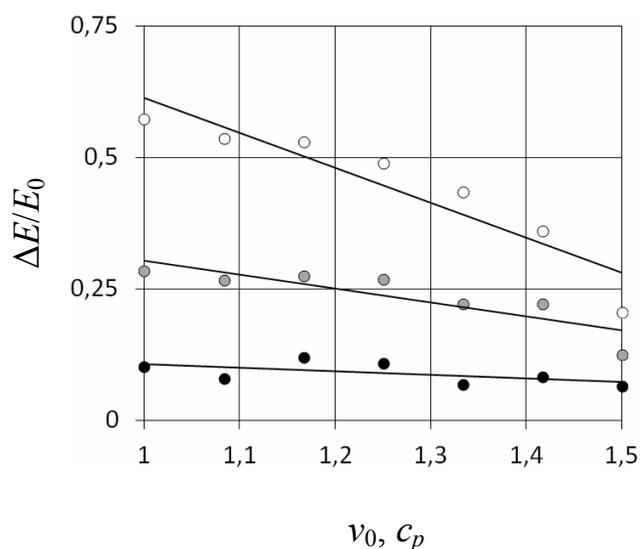


Рис.6. Доля теряемой кинетической энергии $\Delta E/E_0$ плоского краудионного комплекса при преодолении границы зерна наклона с $\theta = 5^\circ$ (●), 10° (◐) и 15° (○) в зависимости от стартовой скорости v_0 , задаваемой в единицах скорости продольной звуковой волны c_p

Также необходимо оговорить, что при рассмотрении процесса миграции краудионного комплекса в моделируемом поликристалле, значительную роль начинает играть его положение относительно ядер зернограницных дислокаций.

По-видимому, высокоскоростные динамические краудонные комплексы могут преодолевать границы зерен без генерации волн, так как согласно рисунку 6 потери кинетической энергии таких комплексов в зернограницной области оказываются незначительными. С другой стороны, вполне возможно, что комплексы, состоящие из большого числа краудионов, при пересечении границы могут породить ударные волны. Все это делает динамические краудионные комплексы теми объектами, которые могут быть рассмотрены как переносчики потенциальной энергии в модели эффекта дальнего действия, предложенной в работе [17].

В заключение данной главы рассмотрены возможные механизмы торможения краудионных комплексов. Одним из таких механизмов является радиационное торможение, обусловленное излучением комплексом упругих волн при движении в периодическом потенциале, связанным с дискретностью кристалла. При высоких скоростях, когда кинетическая энергия краудионов превосходит потенциальные барьеры, наличие периодического поля приводит к незначительным возмущениям равномерного движения комплекса, и радиационное трение убывает пропорционально квадрату скорости. Подобный механизм торможения краудионного комплекса реализуется при наиболее низких температурах, когда вымораживаются фоновые эффекты. Повышение температуры приводит к появлению фононного ветра, который обусловлен асимметрией потока фононов, рассеивающихся на динамическом краудионном комплексе.

Импульс, передаваемый фононами краудионам, пропорционален их скорости и направлен в противоположную сторону движения комплекса. При возрастании температуры до дебаевской и выше, начинает проявляться эффект релаксации «медленных» фононов. Вклад данного механизма соизмерим с вкладом фононного ветра.

Пятая глава посвящена изучению влияния ударных послекаскадных волн на дефектную структуру кристалла. Исследование проводилось на трехмерной расчетной ячейке, моделирующей кристаллит никеля. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовались потенциалы Джонсона и Шэна, рассчитанные в рамках метода погруженного атома. Шаг численного интегрирования уравнений движения равнялся 5 фс.

Особенностями ударной послекаскадной волны, отличающей ее от волн, получаемых другими способами, является большая амплитуда атомных смещений, а также малая ширина фронта, соизмеримая с параметром решетки кристалла [18]. Кроме того, размеры области термического пика, образование которой является причиной возникновения данной волны, достигают нескольких нанометров. Поэтому для ее создания в расчетной ячейке выделялась кристаллографическая плоскость $\{1\bar{1}0\}$, содержащая граничные атомы, которым присваивалась равная по величине скорость, превышающая скорость продольных звуковых волн c_p и вектор которой ориентирован по нормали к выделенной плоскости. В результате последующих эстафетных кооперативных атомных смещений формируется бегущая волна, ширина фронта которой не превышает нескольких межатомных расстояний, а амплитуда смещений атомов значительно превышает, например, амплитуду тепловых колебаний. Расстояние, проходимое ударной волной до ее вырождения в звуковую волну, зависело от стартовой скорости, сообщаемой атомам, и исчислялось десятками ангстрем. При этом дефекты в расчетной ячейке располагались таким образом, чтобы воздействие на них оказывала именно ударная волна.

В проводимых компьютерных экспериментах создаваемое фронтом ударной волны напряжение достигало значений, исчисляемых ГПа. Тем не менее, несмотря на большую величину возникающих напряжений, моделируемая кристаллическая решетка при прохождении волны оставалась упруго искаженной. Очевидно, это связано с отсутствием несовершенств решетки, которые могут являться зародышами пластических сдвигов. Кроме того, не наблюдался процесс расщепления ударной волны на упругий предвестник и следующий за ним пластический фронт, а волна состояла только из упругого компонента.

Дополнительное исследование показало, что если при создании волны стартовая скорость присваивается атомам нескольких соседних плоскостей $\{1\bar{1}0\}$, то в расчетной ячейке возможно образование точечных дефектов, которые вносят вклад в процесс самодиффузии. Для оценки данного вклада был осуществлен расчет среднеквадратических смещений атомов вдоль трех ортогональных направлений x , y и z по формулам:

$$D_x = \frac{1}{N} \frac{\sum_{i=1}^N (x_{0i} - x_i)^2}{2t}, \quad D_y = \frac{1}{N} \frac{\sum_{i=1}^N (y_{0i} - y_i)^2}{2t}, \quad D_z = \frac{1}{N} \frac{\sum_{i=1}^N (z_{0i} - z_i)^2}{2t}, \quad (7)$$

где x_{0i}, y_{0i}, z_{0i} – координаты i -го атома в начальный момент времени; x_i, y_i, z_i – координаты i -го атома в момент времени t ; N – количество атомов в расчетной ячейке. При проведении расчетов длина временного интервала задается таким образом, чтобы волна не пересекла границу расчетной ячейки. Влияние тепловых колебаний атомов исключалось путем проведения последующей процедуры многократного обнуления скоростей атомов.

Полученный в результате данных вычислений коэффициент δD , определяемый как среднее арифметическое значение D_x, D_y и D_z характеризует процесс миграции атомов, и пропорционален коэффициенту самодиффузии (δ – безразмерный коэффициент пропорциональности, зависящий от размеров расчетной ячейки и продолжительности эксперимента). Результаты вычислений представлены на рисунке 7. Для аппроксимации полученных данных использовались полиномы третьей степени.

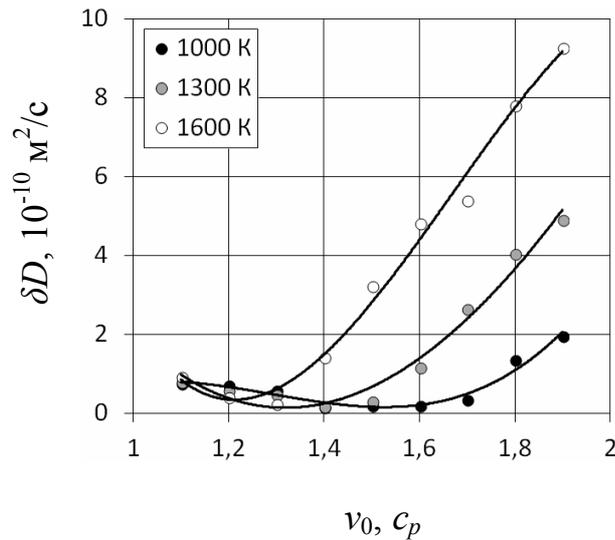


Рис.7. Зависимость коэффициента δD от начальной скорости v_0 группы атомов, генерирующей ударную волну, при различной стартовой температуре расчетной ячейки

Как следует из анализа рисунка 7, прохождение по расчетной ячейке ударной волны активизирует процесс самодиффузии, причиной чему являются пары Френкеля, зарождающиеся во фронте волны. При этом существует скоростной интервал, в котором наблюдается аномальное снижение значения коэффициента δD . Причина этого снижения следующая. Увеличение скорости волны приводит к образованию уже не одиночных, а множественных межузельных атомов, которые представляют собой краудинные комплексы. Данные образования, как уже говорилось ранее, гораздо подвижнее, чем одиночные межузельные атомы, и, кроме того, радиус спонтанной рекомбинации для таких дефектов значительно больше.

Поэтому после прохождения фронта волны краудионные комплексы рекомбинируют с вакансиями, и если краудионы двигались только вдоль одного атомного ряда, то данные смещения не будут рассматриваться как диффузионный путь. Последующее увеличение скорости волн приводит к удалению краудионных комплексов от вакансий, «связь» между ними утрачивается, и рекомбинация не наблюдается. Поэтому коэффициент δD начинает расти. Отметим, что при высоких скоростях волн рассчитанные значения коэффициента приближаются к показателям самодиффузии в жидком никеле, которые в зависимости от методики вычисления имеют значение $2.5 - 7 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ [19].

В следующем разделе главы ударные послекаскадные волны создавались в расчетной ячейке, содержащей высокую концентрацию вакансий. Как показало проведенное исследование, в данном случае наблюдается дрейф вакансий по направлению к источнику волн с последующим формированием поры (см. рис. 8), что упрощается наличием растягивающих напряжений в расчетной ячейке после прохождения фронта ударной волны.

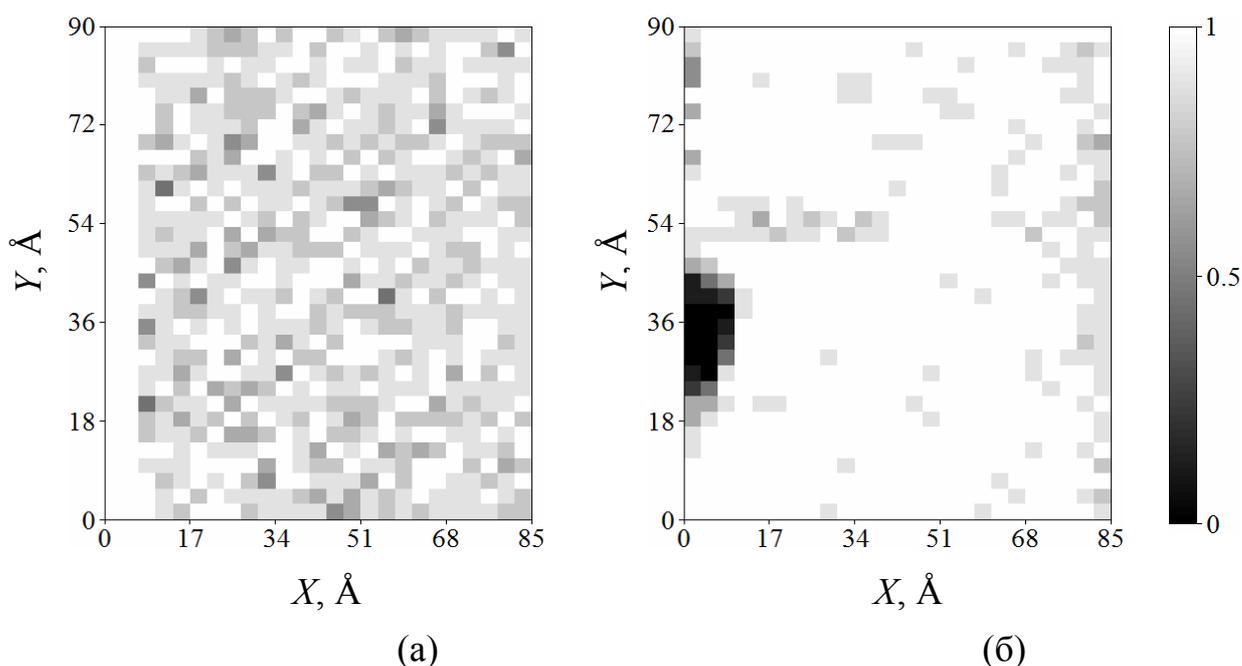


Рис.8. Визуализация степени заполнения расчетной ячейки в начале эксперимента (а) и после генерации трех ударных волн, распространяющихся слева направо относительно рисунка (б). Температура расчетной ячейки 300 К. Белый цвет соответствует идеальной кристаллической решетке, а черный – поре

В работе [20] показано, что в результате отжига ГЦК-кристалла при температурах, лежащих в интервале $(0.5 - 1) \cdot T_{пл}$, поры формируются в обедненных зонах при общей концентрации вакансий в кристалле выше 25%. В описанных выше компьютерных экспериментах зародыш поры,

формируемый под воздействием ударных волн, удалось получить при уменьшении концентрации вакансий до 10% и понижении температуры расчетной ячейки до $0.2 \cdot T_{пл}$. Необходимо отметить, что если при данных условиях выполнить компьютерный эксперимент без генерации ударных волн, то зародыш поры не образуется, а вакансии перестраиваются во фрагменты тетраэдров дефектов упаковки.

Дополнительное исследование, проведенное с помощью расчетной ячейки, моделирующей поликристалл, показало, что под действием ударных волн вакансии переносятся через границу зерен наклона, частично оседая на зернограницных дислокациях. Скопление вакансий активизирует трубочную диффузию, которая является основным диффузионным механизмом при невысоких температурах. Уменьшение числа вакансий за пределами зернограницной области в дальнейшем приводит к снижению роли объемной диффузии. Кроме того, если при проведении эксперимента дополнительно создавать растягивающие напряжения за счет изменения равновесного расстояния между атомами, то наблюдалось перемещение зернограницных дислокаций в новые положения равновесия, то есть выгибание границы, которое происходит в результате образования пор при стоке вакансий на дислокации (см. рис. 9).

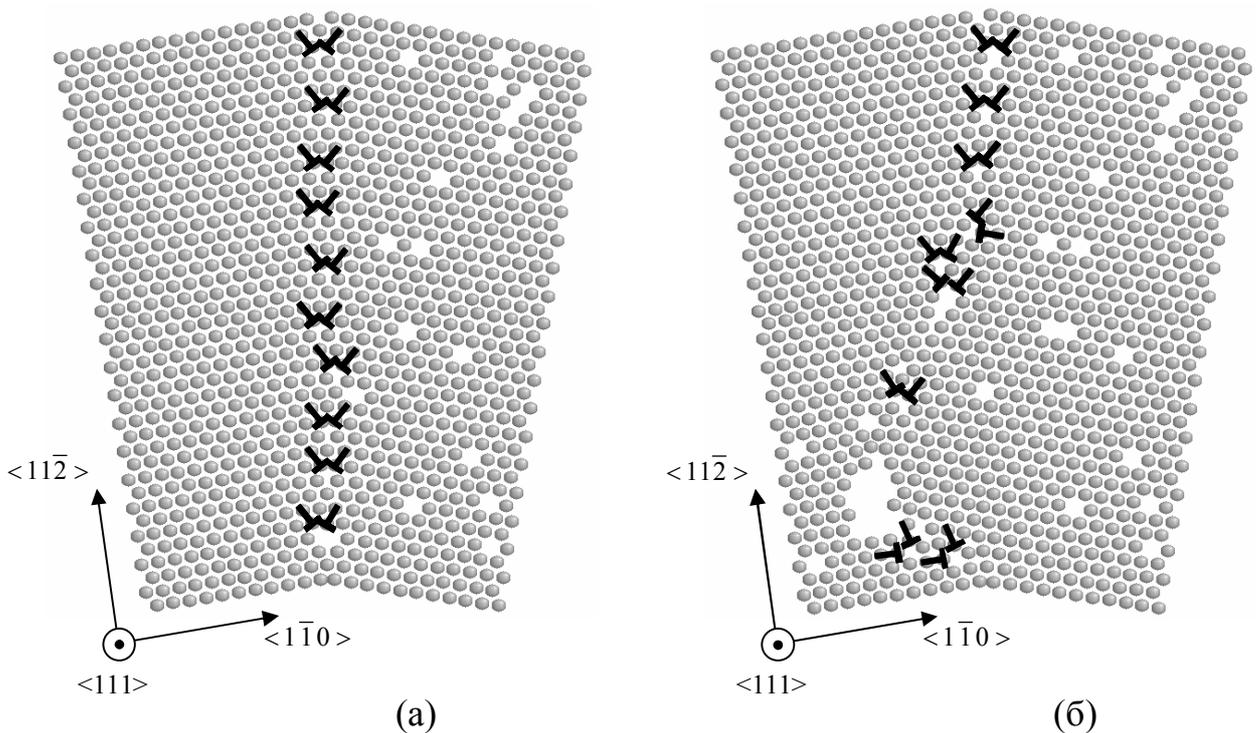


Рис.9. Фрагмент плоскости $\{111\}$ расчетной ячейки, содержащей границу зерен с углом разориентации $\theta = 18^\circ$ в начале эксперимента (а) и после прохождения десяти ударных волн, генерируемых через 2.5 пс, при всесторонней деформации, равной по величине 3% (б). Температура расчетной ячейки 300 К

В связи с тем, что борьба с набуханием материалов является одной из актуальнейших задач радиационного материаловедения, в этой же главе было проведено подробное изучение влияния ударных послекаскадных волн на нанопоры. Проведенное исследование показало, в результате воздействия ударных волн на пору возможно ее разделение на несколько частей или же разбиение на отдельные, более мелкие составляющие (см. рис. 10). Причиной этому являются напряжения, создаваемые фронтом волны, так как стартовая температура расчетной ячейки задавалась недостаточной для активизации диффузионных процессов, и поддерживалась таковой в течение эксперимента с помощью пропорционального термостата.

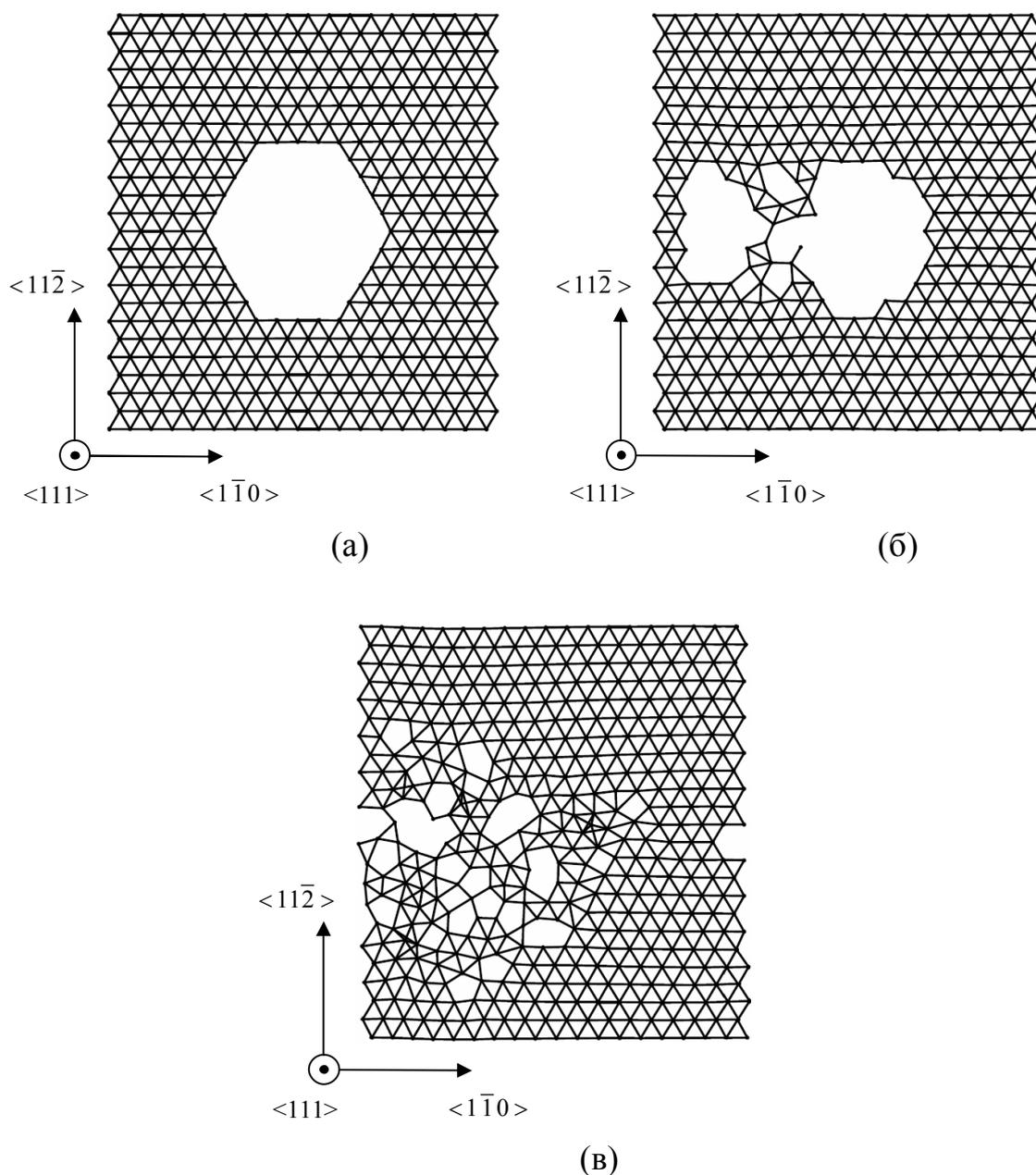


Рис.10. Структурные изменения поры, состоящей из 337 вакансий. Представлены фрагменты расчетной ячейки в начале эксперимента (а), и после прохождения четырех ударных волн при стартовой температуре 300 (б) и 600 (в) К

Дополнительное исследование показало, что стабилизация поры может быть осуществлена путем создания растягивающих напряжений в расчетной ячейке. Кроме того, компьютерные эксперименты, выполненные с использованием моделей поликристаллов, показали, что на устойчивость поры во многом влияет ее положение относительно ядер зернограничных дислокаций. Так, например, ударные послекаскадные волны могут вызывать дробление нанопоры на отдельные составляющие при расположении ее в зернограничной области, и при этом достаточно волн гораздо меньшей интенсивности по сравнению с монокристаллом. В случае же если пора пересекает ядро дислокации, то она становится более стабильной, так как в данном случае понижается удельная энергия границы зерен наклона.

При проведении компьютерных экспериментов на расчетной ячейке, моделирующей поверхность кристалла, создаваемой свободными граничными условиями вдоль одного из кристаллографических направлений, наблюдалось не только отщепление группы вакансий от поры под воздействием ударных волн, но и их последующий выход на свободную поверхность. То есть в данном случае реализуется механизм растворения поры, инициируемый волнами, причем при относительно низких температурах, например 300 К.

Помимо уменьшения размеров пор, в отдельных случаях волны могут, наоборот, вызывать их рост. Так, например, компьютерные эксперименты показали, что при изменении формы сферической нанопоры под действием ударных волн возможно поглощение ею малых вакансионных скоплений. Таким образом, можно предположить, что если источники волн располагаются в кристалле произвольно, то с течением времени все малые вакансионные скопления должны быть поглощены порой. Кроме того, если в расчетной ячейке было расположено несколько нанопор, то после прохождения серии волн наблюдалось их объединение в единый комплекс, который, как правило, представлял собой неидеальный тетраэдр дефектов упаковки. При этом инициация процессов укрупнения нанопор ударными волнами возможна при температурах, недостаточных для начала, так называемой, тепло-индуцированной коалесценции.

В заключение главы была рассмотрена возможность создания капиллярных структур в кристалле путем деления ударными волнами латентных треков, образующихся после прохождения высокоэнергетического иона через твердое тело. Для этого при выполнении компьютерных экспериментов в расчетной ячейке создавались цилиндрические нанопоры. Проведенное исследование показало, что данные поры остаются стабильными, вплоть до температуры $0.45 \cdot T_{пл}$. При более высоких температурах поры схлопываются, трансформируясь в комплексы тетраэдров дефектов упаковки. В процессе структурной релаксации тетраэдры укрупняются за счет поглощения отдельных вакансий или соседних тетраэдров. Таким образом, можно предположить, что на месте цилиндрической поры большой протяженности в кристалле может сформироваться упорядоченная система тетраэдров дефектов упаковки.

Критическая температура, при которой происходит трансформация нанопоры, может быть снижена при воздействии на пору упругих волн.

Под воздействием ударных волн цилиндрические нанопоры могут быть расщеплены на отдельные составляющие. Так, например, в комбинации с деформацией растяжения с помощью ударных волн удалось добиться разделения цилиндрической нанопоры на две отдельные поры меньшего диаметра, имеющих ту же ориентацию (см. рис. 11).

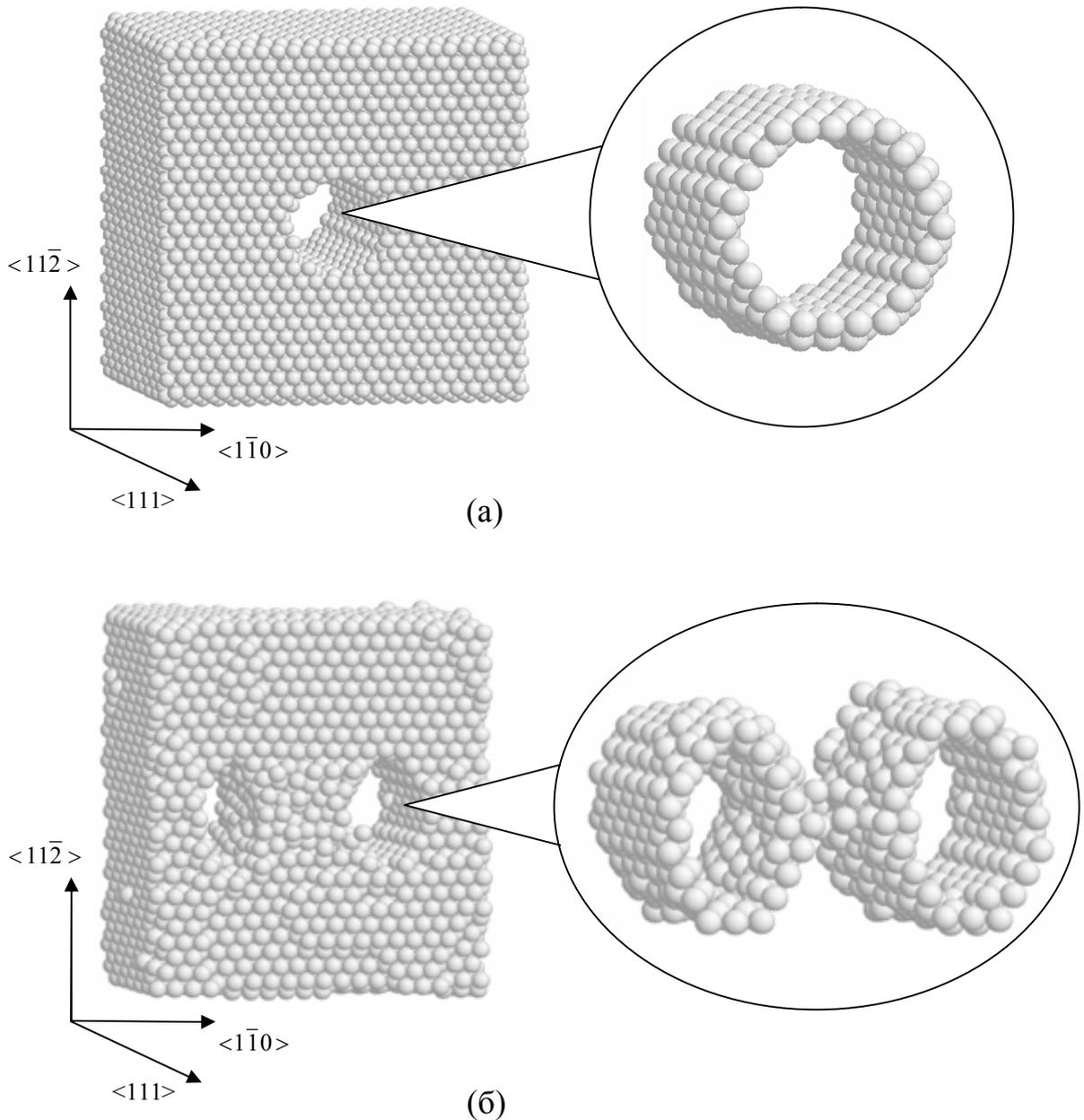


Рис.11. Фрагмент расчетной ячейки, содержащей цилиндрическую пору, в начале эксперимента (а), и после прохождения трех ударных волн в направлении $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ и того же числа волн в обратном направлении (б). В выносках изображена поверхность поры

В *шестой главе* изложены результаты экспериментов по изучению влияния ударных волн на дислокационную структуру твердого тела, при проведении которых использовалась та же компьютерная модель кристалла, что и в предыдущей главе. Для создания краевой дислокации в расчетной ячейке удалялась часть атомов двух соседних полуплоскостей $\{1\bar{1}0\}$, после чего следовала процедура релаксации при условии, что атомам позволялось смещаться лишь вдоль направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$. В результате этого происходило сближение атомных плоскостей, расположенных по разные стороны от разреза, с формированием экстраплоскости, то есть получалась краевая дислокация с вектором Бюргерса $\vec{b} = a/2 \langle 1\bar{1}0 \rangle$ и плоскостью скольжения $\{111\}$. Путем использования периодических граничных условий не только вдоль линии дислокации, но и в направлении вектора Бюргерса, создавался массив дислокаций. Данный метод, предложенный в работе [21], прост с вычислительной точки зрения и позволяет моделировать динамику дислокаций при заданной температуре. В ГЦК-решетке рассматриваемая дислокация расщепляется на две энергетические более выгодные частичные дислокации, образуя дефект упаковки. Поэтому для структурного анализа кристаллической матрицы можно использовать методы, основанные на расчетах ближайшего окружения атома, в частности, метод параметра локальной центральной симметрии [22]. Данный параметр вычисляется по формуле:

$$CS = \sum_{i=1}^{N/2} |\vec{R}_i + \vec{R}_{i+N/2}|^2, \quad (8)$$

где N – число ближайших соседей атома (для ГЦК-решетки координационное число $N = 12$), \vec{R}_i и $\vec{R}_{i+N/2}$ – векторы, связывающие центральный атом и пару противоположных соседей.

Как показало проведенное исследование, после расщепления дислокационного ядра частичные дислокации совершают колебательные симметричные движения около некоторого равновесного положения. Повышение температуры расчетной ячейки приводит к увеличению амплитуды колебаний, а также вызывает увеличение асимметрии движения. Генерация ударных волн в расчетной ячейке вызывает скольжение краевых дислокаций (см. рис. 12), что обусловлено касательными напряжениями, создающимися волной разгрузки, бегущей следом за фронтом сжатия. При рассмотрении послекаскадной ударной волны формирование волны разгрузки, по-видимому, возможно в результате остывания разогретой каскадной области. Напряжения, создаваемые волной разгрузки, оказываются достаточными для преодоления не только барьера Пайерлса, но и сил, определяющих ширину дефекта упаковки. Последующее скольжение второй частичной дислокации и восстановление равновесного расстояния, при котором поверхностное натяжение дефекта упаковки уравнивает силу взаимного отталкивания частичных дислокаций, приводит к тому, что расщепленная дислокация оказывается смещенной относительно первоначального расположения в моделируемом кристаллите.

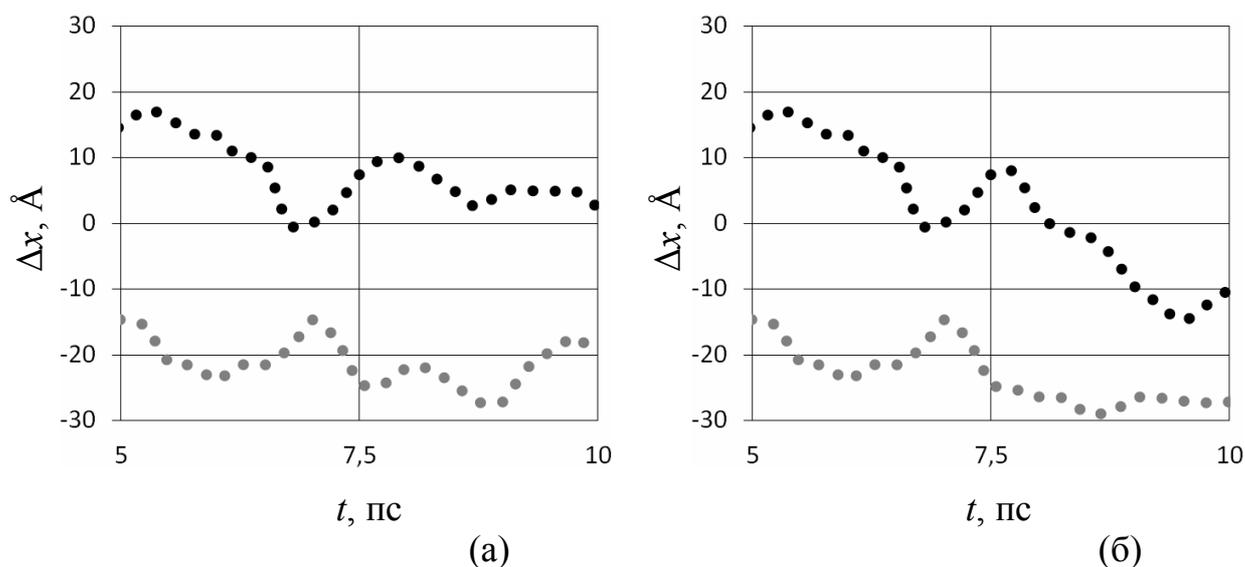


Рис.12. Изменение координат ядер частичных дислокаций Δx в течение эксперимента относительно первоначального расположения краевой дислокации, при генерации в расчетной ячейке одной (а) и двух (б) ударных волн с интервалом 2.5 пс. Температура 600 К

При наличии в расчетной ячейке закрепленных дислокаций было отмечено выгибание дислокационного сегмента под действием ударных волн, который в дальнейшем либо выпрямляется, либо сохраняет изогнутую конфигурацию, удерживаемую взаимодействием перегибов дислокационной линии. Следовательно, при прохождении ударной волны через расчетную ячейку, упругое поле напряжений вблизи дислокационного сегмента становится асимметричным из-за его изгиба (см. рис. 13).

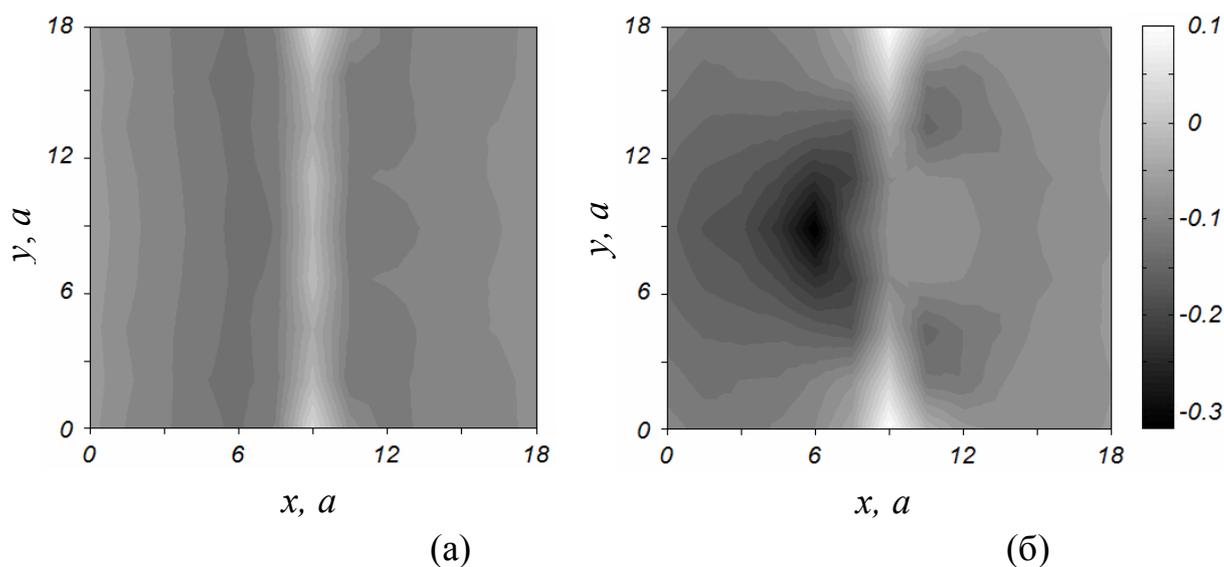


Рис.13. Карты линий уровня гидростатического напряжения σ_0 (МПа) для фрагмента расчетной ячейки, содержащей дислокационный отрезок, до (а) и после (б) прохождения ударной волны с начальной скоростью $1.5 \cdot c_p$. Температура 900 К. Размеры карт задаются в параметрах решетки a

Последующее восстановление формы сегмента делает поле напряжений нестационарным. Компьютерные эксперименты показали, что если вблизи изогнутого сегмента располагается вакансия, то она притягивается к дислокационному ядру, делокализуется, и после выпрямления отрезка вносит свой вклад в трубочную диффузию. Таким образом, ударная волна при воздействии на дислокационную структуру увеличивает радиус взаимодействия точечных дефектов и дислокаций. Следовательно, ускорение диффузии при радиационном воздействии может быть обусловлено не только перемещением дефектов вдоль линии дислокации, но и увеличением расстояния спонтанного взаимодействия точечных дефектов и дислокационной структуры. Причиной ускоренного захвата дислокациями дефектов является их изгиб в результате образования в облученной области ударных волн.

Последний раздел данной главы посвящен изучению влияния ударной волны на дислокационные ансамбли, рассмотренные с позиции их элементарных составляющих – пар дислокаций одноименных и разноименных знаков. Как показало проведенное исследование, в случае генерации в расчетной ячейке ударных волн наблюдается увеличение амплитуды колебаний дислокаций по сравнению с колебаниями при той же температуре расчетной ячейки, но без генерации волн. При повышении начальной температуры расчетной ячейки дислокации начинают смещаться по направлению к источнику волн (см. рис. 14).

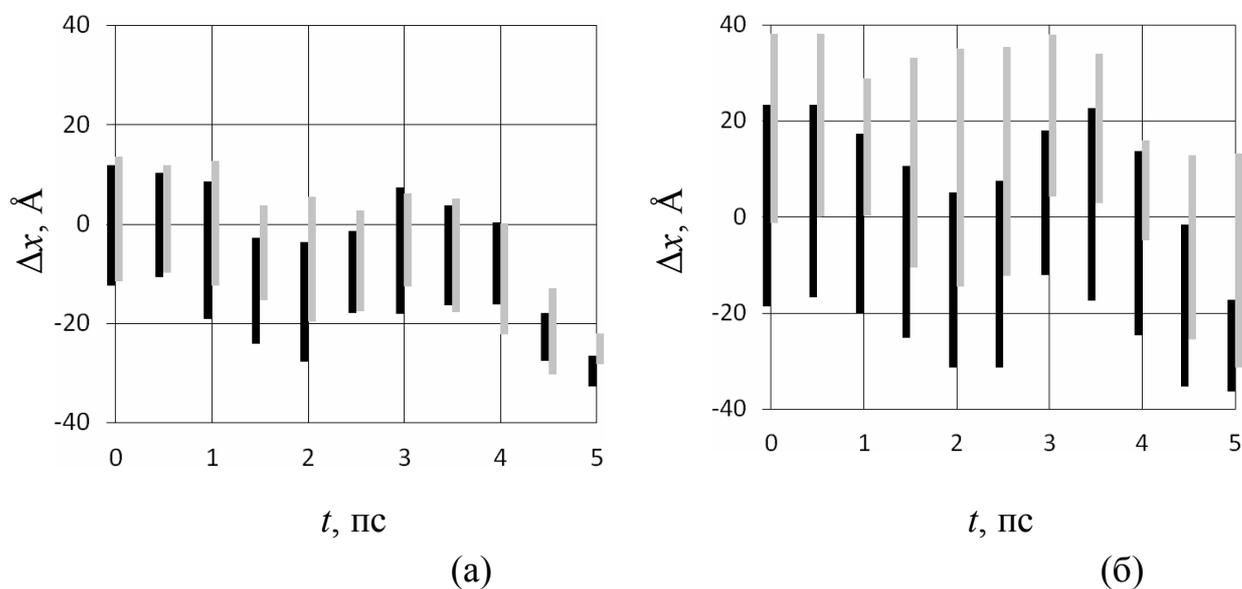


Рис.14. Изменение взаимного расположения двух расщепленных дислокаций одного (а) и противоположного (б) знака в течение эксперимента при генерации ударных волн в момент времени $t_1 = 0$ и $t_2 = 2.5$ пс. Температура расчетной ячейки 300К. Каждой расщепленной дислокации соответствует отрезок определенного цвета

Движение дислокаций в данном случае является сложным процессом. Помимо сдвиговых напряжений, при смещении дислокаций большую роль играют упругие силы, отталкивающие частичные дислокации, силы притяжения, пропорциональные ширине растянутой дислокации, силы, стремящиеся вернуть дислокации в равновесные положения и обусловленные низкой симметрией поля напряжений вокруг краевых дислокаций, а также тепловые колебания атомов. Поэтому диаграммы на рисунке 14 имеют сложную структуру. Дислокации движутся по направлению к источнику волн, но иногда оттягиваются назад, пытаясь вернуться в наиболее энергетически выгодные конфигурации. Кроме этого, скольжения дислокаций сопровождается уменьшением ширины дефекта упаковки, что позволяет начаться движению при меньшей энергии активации, по сравнению с равновесным расстоянием между ядрами частичных дислокаций. Необходимо оговорить, что уменьшение ширины растянутых дислокаций в конце эксперимента, результаты которого представлены на рисунке 14, обусловлено тем, что в данном случае кристаллическая матрица содержит область разрежения, формируемую при генерации волны, в которой атомы не успевают вернуться в первоначальные положения к моменту приближения дислокаций. Наличие растягивающих напряжений в данной области способствует сближению частичных дислокаций.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В результате проведенного исследования были сделаны следующие выводы:

1. Высокоскоростные процессы образования и аннигиляции точечных дефектов, а также структурные перестройки их комплексов, сопровождаются генерацией волн, способных активизировать миграцию отдельно взятых дефектов или их небольших скоплений.

2. Скорость массопереноса вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений при аннигиляции точечных дефектов, расположенных в зоне спонтанной рекомбинации, превышает скорость звука в рассматриваемом материале.

3. Ударная волна при встрече с кластерами межузельных атомов инициирует их перестройку в ориентированные по ходу ее распространения комплексы краудионов. Последующие волны могут вызывать смещения таких образований. Движущиеся краудионные комплексы при столкновении со структурными несовершенствами решетки становятся источниками вторичных волн. Описанные явления укладываются в рамки некоторых моделей «эффекта дальнего действия».

4. Ударные волны, распространяясь в кристалле, могут вызывать дрейф вакансий. Спонтанно образовавшиеся вакансионные скопления после прохождения ударной волны трансформируются в комплекс, представляющий собой один или несколько тетраэдров дефектов упаковки.

Одиночные вакансии могут быть притянуты к таким скоплениям в результате прохождения нескольких ударных волн, даже при температурах, недостаточных для начала диффузионных процессов.

5. Гомогенное образование поры упрощается за счет растягивающих напряжений, возникающих в кристалле после прохождения ударной волны.

6. Ударные волны оказывают влияние на структурные изменения нанопор, и могут вызывать их смещение, а также расщепление или растворение, что позволяет рассматривать волны как один из инструментов борьбы с распуханием материала.

7. При наличии в кристалле сжимающих напряжений ударные волны способствуют коалесценции соприкасающихся нанопор.

8. Формирование под воздействием ударных волн нанопоры в зернограничной области способствует укрупнению одного из зерен за счет поглощения соседнего.

9. При прохождении ударной волны через кристалл, содержащий протяженные скрытые треки, возможно их разветвление с образованием капиллярных структур.

10. Ударные волны могут активизировать различные диффузионные процессы при относительно невысоких температурах. Это может происходить в результате непосредственного создания точечных дефектов во фронте волны, инициацией направленного дрейфа уже существующих дефектов или, например, путем изменения упругого поля дислокационной структуры кристалла.

11. Волна разгрузки, следующая за волной сжатия, и создающая значительные касательные напряжения, может инициировать скольжение одиночных краевых дислокаций или их ансамблей, а также изгиб закрепленных дислокационных отрезков.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Стратегия развития атомной энергетики России в первой половине XXI в. Одобрена Решением Коллегии Министерства Российской Федерации по атомной энергии от 21. 12.1999 г., протокол №34.

2. Nigmatulin B.I. The strategy and main lines of the development of the nuclear power industry of Russia in the first half of the XX century // Thermal engineering. 2001. №1. P. 2 - 9.

3. Workshop on advanced computational materials science: application to fusion and generation IV fission reactors. Office of science and office of nuclear energy, science and technology, U.S. Department of energy, 2004 // [Electronic resource]. Mode of access: www.csm.ornl.gov/meetings/SCNEworkshop/DC-index.html.

4. Воеводин В.Н. Конструкционные материалы ядерной энергетики – вызов 21 века // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика

радиационных повреждений и радиационное материаловедение». 2007. №2. С. 10 - 22.

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

6. Полетаев Г.М. Атомные механизмы структурно-энергетических превращений в объеме кристаллов и вблизи границ зерен наклона в ГЦК металлах / Диссертация на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук. – Барнаул. 2008. - 356 с.

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

8. Sheng H.W., Kramer M.J., Cadien A., Fujita T., Chen M.W. Highly optimized embedded-atom-method potentials for fourteen FCC metals // Physical Review B. 2011. V.83. №13. P.134118-134128.

9. Полетаев Г.М. Моделирование методом молекулярной динамики структурно-энергетических превращений в двумерных металлах и сплавах (MD2). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2008610486 от 25.01.2008.

10. Полетаев Г.М. Моделирование методом молекулярной динамики структурно-энергетических превращений в трехмерных ГЦК металлах (MD3). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2008610487 от 25.01. 2008.

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

12. RasMol and OpenRasMol. Molecular graphics visualisation tool // [Electronic resource]. Mode of access: <http://www.rasmol.org/>.

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. V.122. №1. P.111-120.

14. Nordlund K., Keinonen J., Ghaly M., Averbach R.S. Coherent displacement of atoms during ion irradiation // Nature. 1999. V.398. P.49-51.

15. Григорьев И.С., Мейлихов Е.З. Физические величины: справочник. – Москва: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.

16. Dudarev S.L. Density functional theory models for radiation damage // Annual Review of Materials Research. 2013. V.43. P. 35 - 61.

17. Мартыненко Ю.В., Московкин П.Г. Эффект дальнего действия и перенос энергии в твердых телах при ионной бомбардировке // Письма в журнал технической физики. 1996. Т.22. Вып.17. С.54-58.

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

19. Cherne F.J., Baskes M.I. Properties of liquid nickel: A critical comparison of EAM and MEAM calculations // Physical Review B. 2001. V. 65(2). 024209(9).

20. Аксенов М.С., Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю., Краснов В.Ю., Старостенков М.Д. Стабильность вакансионных кластеров в ГЦК металлах //

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2005. Т.2. №4. С. 24 - 31.

21. Daw M.S., Foiles S.M., Baskes M.I. The embedded-atom method: a review of theory and applications // Materials Science Reports. 1993. V.9. №7-8. P.251-310.

22. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defects structure during surface indentation // Physical Review B. 1998. V.58. 11085.

ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Монографии

1. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д. Радиационно-динамические процессы в ГЦК кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом. – Кемерово: Кузбассвуиздат, 2014 – 191 с (ISBN 978-5-202-01244-0).

2. **Маркидонов А.В.**, Захаров П.В., Старостенков М.Д., Медведев Н.Н. Механизмы кооперативного поведения атомов в кристаллах. – Новокузнецк: филиал КузГТУ в г.Новокузнецке, 2016. – 219 с (ISBN 978-5-9907499-1-7).

Главы в коллективных монографиях

3. Старостенков М.Д., **Маркидонов А.В.** Компьютерное моделирование изменения дислокационной структуры кристалла при облучении высокоэнергетическими частицами // Многофункциональные конструкционные материалы нового поколения. – Новокузнецк: Изд. центр СибГИУ, 2015. С.162-173.

Статьи в изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ

4. Старостенков М.Д., **Маркидонов А.В.**, Тихонова Т.А., Медведев Н.Н. Высокоскоростной массоперенос в двумерном кристалле никеля при наличии дислокационных петель различной локальной плотности // Известия ВУЗов. Черная металлургия. 2009. №6. С.57-60.

5. Старостенков М.Д., **Маркидонов А.В.**, Тихонова Т.А., Потекаев А.И., Кулагина В.В. Высокоскоростной массоперенос в кристаллическом алюминии, содержащем цепочки вакансий и межузельных атомов // Известия ВУЗов. Физика. 2009. Т.52. №9/2. С.139-145.

6. Старостенков М.Д., **Маркидонов А.В.**, Медведев Н.Н., Тихонова Т.А. Моделирование переноса массы в виде рядов вакансий и межузельных атомов на примере двумерного кристалла // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Физико-математические науки». 2010. Вып.1(20). С.249-252.

7. Неверов В.В., Тихонова Т.А., **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д. Масса, переносимая при скольжении краевых дислокаций //

Известия Алтайского государственного университета. 2010. №1/1(65). С. 146-150.

8. **Маркидонов А.В.**, Тихонова Т.А., Нуркенова Б.Д., Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Воздействие продольных волн на комплексы точечных дефектов в ГЦК кристалле // Известия Алтайского государственного университета. 2010. №1/2(65). С.175-178.

9. Медведев Н.Н., Старостенков М.Д., **Маркидонов А.В.**, Захаров П.В. Фокусирующиеся и краудионные столкновения атомов Cu в трехмерной модели упорядоченного сплава CuAu со сверхструктурой $L1_1$ // Перспективные материалы. 2011. Специальный выпуск. №12. С.321-326

10. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Барчук А.А., Медведев Н.Н. Особенности динамики краудионов и их комплексов в деформированном ГЦК кристалле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. Т.8. №3. С.83-88.

11. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Барчук А.А., Бовкуш С.В. Диссипация энергии движущихся краудионов на малоугловых границах зерен наклона в алюминии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2011. Т.8. №4. С.99-103.

12. Старостенков М.Д., **Маркидонов А.В.**, Тихонова Т.А., Потеев А.И., Кулагина В.В. Высокоскоростной массоперенос в ГЦК металлах, содержащих цепочки вакансий и межузельных атомов // Известия ВУЗов. Физика. 2011. Т.54. №3. С.42-46.

13. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Потеев А.И., Медведев Н.Н., Неверова Т.И., Барчук А.А. Поведение краудионов и их комплексов в слабоустойчивом состоянии материалов // Известия ВУЗов. Физика. 2011. Т.54. №11. С.61-67.

14. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Тихонова Т.А., Барчук А.А. Механизмы трансформации краудионных комплексов при прохождении продольной волны // Нелинейный мир. 2011. Т.9. №12. С.826-835.

15. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Барчук А.А., Бовкуш С.В. Особенности динамики краудионов в кристаллах с ГЦК решеткой при различных силовых воздействиях // Химическая физика и мезоскопия. 2012. Т.14. №1. С.46-54.

16. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Барчук А.А. Взаимодействие движущихся краудионных комплексов с точечными дефектами в ГЦК кристалле // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т.9. №1. С. 108-113.

17. **Маркидонов А.В.**, Полетаев Г.М., Старостенков М.Д. Роль высокоскоростных кооперативных атомных смещений в сверхглубоком проникновении вещества при радиационном облучении материала // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т.9. №2. С. 201-208.

18. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Обидина О.В. Агрегатизация вакансий, инициированная послекасадными ударными волнами //

Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т.9. №4. С.548-555.

19. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Павловская Е.П. Влияние послекаскадных ударных волн на процессы укрупнения вакансионных пор // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т.9. №4/2. С.694-702.

20. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Захаров П.В. Рост малых вакансионных скоплений, инициированный послекаскадными ударными волнами // Письма о материалах. 2012. Т.2. Вып.2. С. 111-114.

21. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Яшин А.В. Структурные трансформации вакансионной поры при радиационном облучении материала // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т.10. №1. С.12-21.

22. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Полетаев Г.М. Низкотемпературное растворение поры вблизи поверхности кристалла под воздействием ударных волн // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т.10. №2. С.254-261.

23. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., Захаров П.В., Ситников А.А. Расщепление вакансионной поры в зернограничной области ударной послекаскадной волной // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т.10. №3. С.443-453.

24. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., Захаров П.В. Структурная трансформация вакансионных пор в деформированном кристалле под воздействием ударных волн // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т.10. №4. С.563-572.

25. Старостенков М.Д., **Маркидонов А.В.**, Павловская Е.П. Структурные превращения вакансионных пор под воздействием ударных волн // Вестник Тамбовского университета. Серия «Естественные и технические науки». 2013. Т.18. Вып.4. Ч.2. С.1743-1744.

26. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Павловская Е.П. Влияние послекаскадных ударных волн на структурные трансформации вакансионных пор // Химическая физика и мезоскопия. 2013. Т. 15. №3. С.370-377.

27. **Маркидонов А.В.** О возможности создания капиллярных структур в кристалле путем деления латентных треков ударными волнами (компьютерное моделирование) // Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2014. №1(101). С.99-103.

28. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Яшин А.В., Захаров П.В. Изучение структурных трансформаций пор цилиндрической формы методом молекулярной динамики // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т.11. №2. С. 163-173.

29. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Захаров П.В., Жилианг Жанг. Роль ударных послекаскадных волн в низкотемпературной активации

самодиффузии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т.11. №3. С.346-353.

30. **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.

31. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Сосков А.А., Полетаев Г.М. Изучение структурных трансформаций нанопор цилиндрической формы в золоте методом молекулярной динамики в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн // Физика твердого тела. 2015. Т.57. Вып.8. С.1521-1524.

32. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Захаров П.В., Обидина О.В. Порообразование в ГЦК кристалле под воздействием ударных послекаскадных волн // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т.12. №2. С.231-240.

33. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Полетаев Г.М. Трансформация нанопор в золоте в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн // Известия РАН. Серия физическая. 2015. Т.79. №9. С.1233-1237.

34. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Смирнова М.В. Процесс самодиффузии в ГЦК-кристалле, вызванный прохождением ударной волны // Известия ВУЗов. Физика. 2015. Т.58. №6. С.80-84.

35. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Захаров П.В., Обидина О.В. Перемещение дислокационных ансамблей в ГЦК кристалле при высокоэнергетическом внешнем воздействии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т.12. №3. С.373-381.

36. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д., Захаров П.В., Обидина О.В. Изучение влияния ударной послекаскадной волны на динамику краевой дислокации с возможным ускорением диффузии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2015. Т.12. №4. С.464-471.

37. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д. Коалесценция вакансионных нанопор в кристалле ГЦК решеткой под воздействием ударных послекаскадных волн // Вестник Воронежского государственного университета. Серия «Физика. Математика». 2016. №1. С.14-23.

38. Старостенков М.Д., **Маркидонов А.В.**, Табаков П.Я. Исследование высокоскоростного воздействия на динамику краевой дислокации в никеле // Деформация и разрушение материалов. 2016. №6. С.2-8.

39. **Маркидонов А.В.**, Старостенков М.Д. О возможности гомогенного зарождения поры в зернограничной области под воздействием ударных послекаскадных волн // Вопросы атомной науки и техники. Серия: «Математическое моделирование физических процессов». 2016. Вып.3. С.37-46.

Статьи, размещенные в базах данных Scopus, Web of Science

40. Starostenkov M.D., **Markidonov A.V.**, Tikhonova T.A., Potekaev A.I., Kulagina V.V. High-velocity mass transfer in FCC-metals containing chains of vacancies and interstitial atoms // Russian Physics Journal. 2011. Vol.54. №3. P.308-313.

41. **Markidonov A.V.**, Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Medvedev N.N., Neverova T.I., Barchuk A.A., Kulagina V.V. The behavior of crowdions and their complexes in weakly stable states of materials // Russian Physics Journal. 2012. Vol.54. №11. P.1241-1246.

42. **Markidonov A.V.**, Starostenkov M.D., Tabakov P.Y. Splitting vacancy voids in the grain boundary region by a post-cascade shock wave // Materials Physics and Mechanics. 2013. Vol.18. №2. P. 148-155.

43. **Markidonov A.V.** About the structural transformation of void during radiation treatment of the material // Applied Mechanics and Materials. 2014. V.682. P.25-31.

44. **Markidonov A.V.**, Starostenkov M.D., Soskov A.A., Poletaev G.M. Molecular dynamics study of structural transformations of cylindrical nanopores in gold under thermal activation conditions and under the action of acoustic and shock waves // Physics of the Solid State. 2015. V.57. №8. P.1551-1554.

45. **Markidonov A.V.**, Starostenkov M.D., Poletaev G.M. Transformation of nanopores in gold under conditions of thermoactivation and the effects of acoustic and shock Waves // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2015. V.79. №9. P.1089-1092.

46. **Markidonov A.V.**, Starostenkov M.D., Smirnova M.V. Self-diffusion process in an FCC crystal caused by the passage of a shock wave // Russian Physics Journal. 2015. V.58. №6. P.828-832.

Свидетельства о государственной регистрации

47. **Маркидонов А.В.**, Яшин А.В., Чаплыгина А.А., Сеница Н.В. Моделирование распространения ударных волн в нанобъектах методом молекулярной динамики (ВОЛНА). Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2013661857 от 17.12.2013.