



Оригинальная статья

УДК 538.911

DOI 10.17073/0368-0797-2021-6-427-434



## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАЛЕЧИВАНИЯ ПОР ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УДАРНЫХ ВОЛН В КРИСТАЛЛЕ, ПОДВЕРГНУТОМ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ

А. В. Маркидонов<sup>1,2</sup>, М. Д. Старostenkov<sup>3</sup>, Д. А. Лубяной<sup>4</sup>,  
П. В. Захаров<sup>5</sup>, В. Н. Липунов<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Сибирский государственный индустриальный университет (Россия, 654007, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Кирова, 42)

<sup>2</sup> Новокузнецкий институт (филиал) Кемеровского государственного университета (Россия, 654041, Кемеровская обл. – Кузбасс, Новокузнецк, ул. Циолковского, 23)

<sup>3</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46)

<sup>4</sup> Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевск (Россия, 653039, Кемеровская обл. – Кузбасс, Прокопьевск, ул. Ноградская, 32)

<sup>5</sup> Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет им. В.М. Шукшина (Россия, 659333, Алтайский край, Бийск, ул. Короленко, 53)

**Аннотация.** Объемные дефекты в кристаллах ухудшают эксплуатационные свойства конструкционных материалов, поэтому проблема уменьшения количества несплошностей в твердом теле является одной из важнейших в современном материаловедении. Изложены результаты компьютерного моделирования. Возможно схлопывание пор в кристалле, пребывающем в состоянии сдвиговой деформации, под воздействием ударных волн. Подобные волны могут возникать в твердом теле при внешнем высокоинтенсивном воздействии. Например, в зоне распространения каскада смещений существуют области, в которых имеется несоответствие времен термализации атомных колебаний и отвода от них тепла. В результате расширения такой области возникает ударная послекаскадная волна. Моделирование проведено по методу молекулярной динамики с использованием потенциала, рассчитанного в рамках метода погруженного атома. В качестве объемного дефекта рассмотрены протяженные поры цилиндрической формы, которые могут формироваться после прохождения через кристалл высокоэнергетических ионов или при выходе на поверхность перегретых замкнутых включений жидкости (маточного раствора). Исследования показали, что подобного рода дефекты являются источником гетерогенного зарождения дислокационных петель, способствующих снижению касательных напряжений в моделируемой структуре. Установлены зависимости средней плотности дислокаций от угла сдвига и температуры расчетной ячейки, выполнена оценка скорости роста петель. Генерируемые ударные волны создают дополнительные касательные напряжения, способствующие образованию дислокационных петель, поэтому в таком случае наблюдаются дислокации даже при малой сдвиговой деформации. Если в ходе моделирования увеличивается тепловое воздействие, то осуществляется схлопывание поры.

**Ключевые слова:** кристалл, пора, волна, температура, сдвиг, молекулярная динамика, потенциал

**Для цитирования:** Маркидонов А.В., Старostenkov М.Д., Лубяной Д.А., Захаров П.В., Липунов В.Н. Моделирование процесса залечивания пор цилиндрической формы под воздействием ударных волн в кристалле, подвергнутом сдвиговой деформации // Известия вузов. Черная металлургия. 2021. Т. 64. № 6. С. 427–434. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2021-6-427-434>

Original article

## MODELING OF HEALING PORES OF CYLINDRICAL FORM UNDER THE ACTION OF SHOCK WAVES IN A CRYSTAL SUBJECTED TO SHEAR DEFORMATION

A. V. Markidonov<sup>1,2</sup>, M. D. Starostenkov<sup>3</sup>, D. A. Lubyanoi<sup>4</sup>,  
P. V. Zakharov<sup>5</sup>, V. N. Lipunov<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Siberian State Industrial University (42 Kirova Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654007, Russian Federation)

<sup>2</sup> Novokuznetsk Branch of Kemerovo State University (23 Tsiolkovskogo Str., Novokuznetsk, Kemerovo Region – Kuzbass 654041, Russian Federation)

<sup>3</sup> Polzunov Altai State Technical University (46 Lenina Ave., Barnaul, Altai Territory 656038, Russian Federation)

<sup>4</sup> Prokopyevsk Branch of the Kuzbass State Technical University named after T.F. Gorbachev (32 Nogradskaya Str., Prokopyevsk, Kemerovo Region – Kuzbass 653039, Russian Federation)

<sup>5</sup> Shukshin Altai State Humanitarian and Pedagogical University (53 Korolenko Str., Biysk, Altai Territory 659333, Russian Federation)

**Abstract.** Volumetric defects in crystals worsen operational properties of structural materials; therefore, the problem of reducing discontinuities in solid is one of the most important in modern materials science. In the present work, the results of computer simulation are presented that demonstrate possibility of collapse of pores in a crystal in state of shear deformation under the influence of shock waves. Similar waves can occur in a solid under external high-intensity exposure. For example, in the zone of propagation of displacement cascade, there are regions in which occurs a mismatch between the thermalization times of atomic vibrations and the removal of heat from them. As a result of the expansion of such a region, a shock after-cascade wave arises. The simulation was carried out based on molecular dynamics method using the potential calculated by means of immersed atom method. As a bulk defect, we considered extended pores of cylindrical shape, which can be formed after passing of high-energy ions through a crystal, or, for example, when superheated closed fluid inclusions (mother liquor) reach the surface. The study has shown that such defects are the source of heterogeneous nucleation of dislocation loops, contributing to a decrease in the shear stresses in simulated structure. Dependences of the average dislocation density on the shear angle and temperature of the designed cell were established, and the loop growth rate was estimated. Generated shock waves create additional tangential stresses that contribute to the formation of dislocation loops; therefore, in this case, dislocations are observed even with a small shear strain. If during simulation the thermal effect increases, the pore collapses.

**Keywords:** crystal, pore, wave, temperature, shear, molecular dynamics, potential

**For citation:** Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Lubyanoi D.A., Zakharov P.V., Lipunov V.N. Modeling of healing pores of cylindrical form under the action of shock waves in a crystal subjected to shear deformation. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*. 2021, vol. 64, no. 6, pp. 427–434. (In Russ.). <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2021-6-427-434>

## ВВЕДЕНИЕ

Структурные несовершенства кристаллического строения тела (и в особенности объемные) играют важную роль в изменении его физико-механических свойств. Так, например, при внешних высокоинтенсивных воздействиях (радиационных, лазерных и т. д.) в твердом теле происходит интенсивное порообразование, что значительно ухудшает эксплуатационные свойства материала. Высокая пористость материалов после спекания является причиной склонности к коррозии изделий, изготовленных методами порошковой металлургии. Именно поэтому уменьшение несплошностей является одной из важнейших задач современного материаловедения.

Существует ряд технологий, направленных на восстановление сплошности материалов, эти технологии включают в себя воздействие высоких температур или давлений [1]. Выбор применяемых технологий во многом определяется положением пор в твердом теле. Так, например, использование только температурного воздействия для залечивания пор, имеющих выход на поверхность, является малоэффективным, так как в таком случае требуются очень высокие температуры, которые приводят к значительным структурным изменениям. Более эффективным является применение обеих технологий. Кроме того, при внешнем высокоинтенсивном воздействии на твердое тело существует еще один фактор, способствующий значительным структурным изменениям, – ударные волны [2–5]. В работах [6–10] проведены исследования, подтверждающие возможность структурных трансформаций нанопор под воздействием подобного рода волн. При этом наблюдается перераспределение свободного объема, изначально локализованного в виде пор. Основным механизмом залечивания пустот в кристаллических телах при внешнем силовом воздействии является эмиссия дислокационных петель. И если в работе [10] рассматривали процессы зарождения дислокаций на поверхности сферических пор, то в настоящей работе рассмотрены поры

цилиндрической формы. Подобного рода дефекты могут представлять собой треки, формирующиеся после прохождения через кристалл высокоэнергетических ионов [11], или, например, при выходе на поверхность перегретых замкнутых включений жидкости (маточного раствора) [12]. Также к этой категории можно отнести любые протяженные дефекты, создающие свободную поверхность в объеме металла (например, свищи, возникающие при выделении газа в процессе сварки).

Целью настоящей работы является установление механизмов залечивания цилиндрических пор под воздействием ударных волн и определение параметров необходимого для этого внешнего воздействия.

## МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Наиболее подходящим методом исследования для достижения поставленной цели является компьютерное моделирование.

Исследования проводили с помощью метода молекулярной динамики на расчетной ячейке, моделирующей гранецентрированный кубический (ГЦК) кристалл, включающей в себя 32 000 частиц. Ориентацию расчетной ячейки в пространстве задавали таким образом, чтобы ось  $X$  совпадала с кристаллографическим направлением  $[1\bar{1}0]$ , ось  $Y$  – с направлением  $[11\bar{2}]$ , а  $Z$  – с  $[111]$ . Бесконечную протяженность модели имитировали при помощи периодических граничных условий. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовали потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома [13], параметры которого были вычислены для золота. Для интегрирования уравнений движения, описывающих поведение системы частиц, использовали скоростной алгоритм Верле с временным шагом 5 фс. Для выполнения расчетов использовали пакет XMD [14]. Визуализацию результатов моделирования осуществляли при помощи пакета визуализации OVITO [15].

Для создания поры в расчетной ячейке выделяли область в виде цилиндра, ось которого располагалась

перпендикулярно плоскости (111), после чего удаляли принадлежащие ей атомы. Затем следовала процедура структурной релаксации, реализуемая путем запуска вычислительного алгоритма, но с обнулением скоростей атомов. Полученную в итоге структуру использовали для дальнейшего моделирования.

Ударную волну в расчетной ячейке создавали следующим образом. Выделяли плоскость ( $1\bar{1}0$ ), содержащую граничные атомы, которым присваивали скорость, превышающую скорость звуковых волн, вдоль плотноупакованного направления. В результате этого в кристалле формировались чередующиеся области сжатия и растяжения, распространяющиеся по кристаллу. При этом возникала необходимость снятия излишков температурного фона путем использования процедуры термостатирования [16]. В настоящей работе использовали пропорциональный термостат.

## РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Создаваемый в расчетной ячейке дефект обладает стабильностью и для активации его структурной перестройки требуется внешнее воздействие. Для реализации залечивания пор по дислокационному механизму необходимы касательные напряжения, способствующие зарождению дислокационных петель. Напряженное состояние в расчетной ячейке, с отличной от нуля девиаторной компонентой тензора напряжений, достигалось путем сдвигового деформирования параллельной плоскости (111) вдоль направления  $[1\bar{1}0]$ . Геометрию расчетной ячейки при этом поддерживали с помощью комбинации жестких и периодических граничных условий. Моделирование показало, что при таком заданном внешнем воздействии начинают активно образовываться частичные дислокации Шокли в виде дислокационных петель (рис. 1).

На рис. 1 представлена поверхность, образуемая цилиндрической порой, расположенной в расчетной ячейке, и множество сегментов дислокаций. Для идентификации дислокационных линий в моделируемой кристаллической структуре и последующей их визуализации использовали метод, основанный на тесселяции и триангуляции Делоне [17, 18]. При построении изображения поры использовали метод поверхностной сетки, базирующийся на тетраэдризации Делоне [19].

Размеры дислокационных петель увеличиваются в процессе моделирования до тех пор, пока не достигнут значений, при которых равнодействующая всех сил, действующих на дислокацию, станет равной нулю. При этом, как следует из зависимости (рис. 2, а), суммарная длина дислокационных петель возрастает при увеличении радиуса основания цилиндрических нанопор, и, как следствие, увеличиваются площади свободной поверхности в расчетной ячейке. Эти площади являются источником гетерогенного зарождения дислокаций. Развитие дислокационных петель способствует падению касательных напряжений в расчетной ячейке (рис. 2, б).

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

Для того, чтобы охарактеризовать формирующуюся дислокационную структуру, была вычислена плотность дислокаций, равная отношению суммарной длины

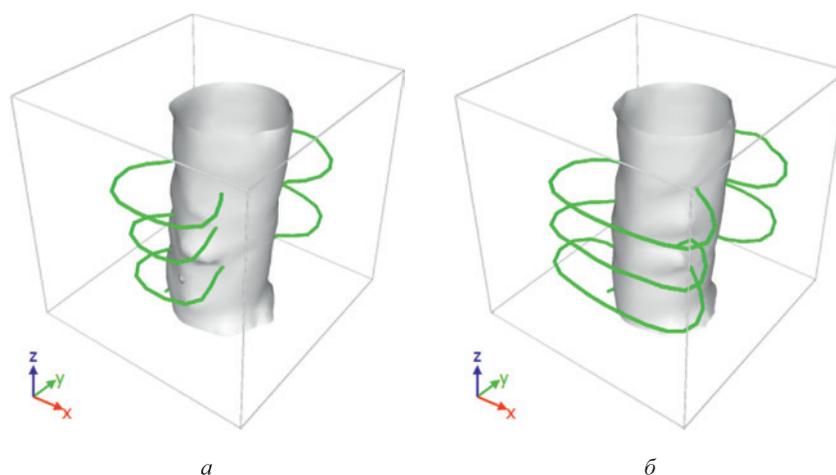


Рис. 1. Визуализация развития дислокационной структуры в процессе моделирования через 1500 (а) и 5000 (б) шагов вычислений. Угол сдвига  $\gamma = 0,1$  рад

Fig. 1. Visualization of development of the dislocation structure during modeling through 1500 (а) and 5000 (б) calculation steps. Shear angle  $\gamma = 0.1$  rad

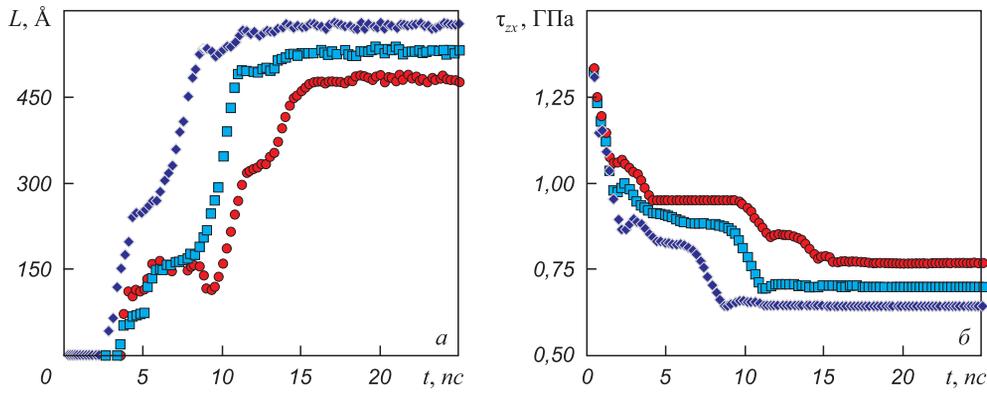


Рис. 2. Изменение суммарной длины  $L$  дислокационных петель (а) и касательных напряжений в расчетной ячейке (б) в процессе моделирования при радиусах  $R$  основания цилиндрических пор 8 Å (●), 12 Å (■) и 16 Å (◆). Угол сдвига  $\gamma = 0,1$  рад

Fig. 2. Change in total length  $L$  of dislocation loops (a) and shear stresses in the computational cell (b) during modeling at different radii  $R$  of the base of cylindrical pores 8 Å (●), 12 Å (■) and 16 Å (◆). Shear angle  $\gamma = 0.1$  rad

дислокационных сегментов к объему расчетной ячейки, заполненному частицами. Изменение плотности дислокаций при различных углах сдвига представлено на рис. 3, а. Угол сдвига  $\gamma$  задавали дискретно с шагом 0,01 рад (в рассматриваемом случае зарождение дислокаций начинало наблюдаться при  $\gamma = 0,09$  рад). Вычисления проводили двумя способами: со снятием теплового фона и при поддержании постоянной температуры. В первом случае построенная зависимость близка к линейной, а во втором – имеет пологий участок. Для обоих случаев расчетные значения плотности, полученные в ходе моделирования, соответствуют сильнодеформированным неотожженным образцам реальных металлов. При проведении моделирования с установленной температурой расчетной ячейки наблюдается зарождение на поверхности поры множества неустойчивых «зародышей» дислокационных петель, механизм образования которых носит термический характер [20]. Данные зародыши стягиваются обратно

к поверхности при образовании устойчивых дислокационных петель, число которых превышает количество петель при моделировании со снятием теплового фона. Пологий участок кривой обусловлен тем, что в этом случае релаксация касательных напряжений реализуется не путем развития дислокационной системы, а иным способом – образованием дополнительных пустот [21].

При увеличении температуры плотность дислокаций должна уменьшаться, что обусловлено активизацией процессов скольжения и переползания дислокаций, способствующих их аннигиляции [22]. В рассматриваемом случае плотность также уменьшается (рис. 3, б), но при этом реализуется иной механизм. По мере роста температуры начинается процесс аморфизации структуры в области, окружающей цилиндрическую пору, и дислокационные линии в ней не идентифицируются. Возможным механизмом приповерхностной аморфизации является пониженное внутреннее давление в кристалле вблизи свободной поверхности [23]. Более

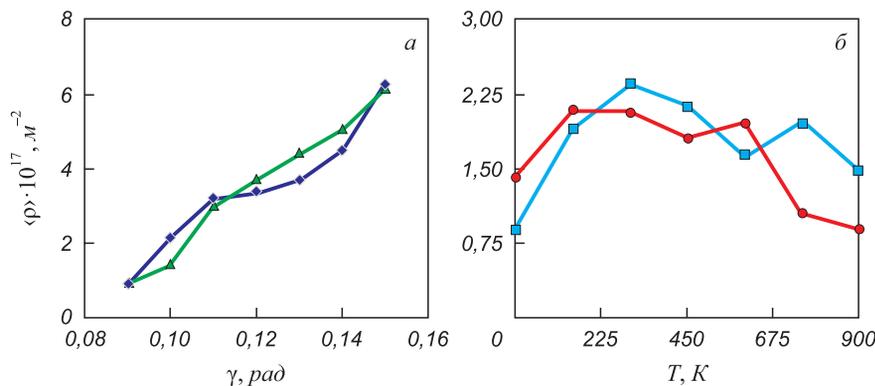


Рис. 3. Изменение средней плотности дислокаций  $\langle \rho \rangle$  при различных углах сдвига ( $R = 16 \text{ \AA}$ ) (а) при 0 К (▲) и 300 К (◆) и при различной температуре расчетной ячейки ( $\gamma = 0,1$  рад) (б), вычисленной на временном интервале 12,5 – 15,0 пс, и при радиусе основания цилиндрических пор 16 Å (●), 8 Å (■)

Fig. 3. Change in average dislocation density  $\langle \rho \rangle$  for various shear angles ( $R = 16 \text{ \AA}$ ) (a) at 0 K (▲) and 300 K (◆) and different temperature of the computational cell ( $\gamma = 0.1$  rad) (b) calculated over a time interval of 12.5 – 15.0 ps and at the radius of the base of cylindrical pores 16 Å (●), 8 Å (■)

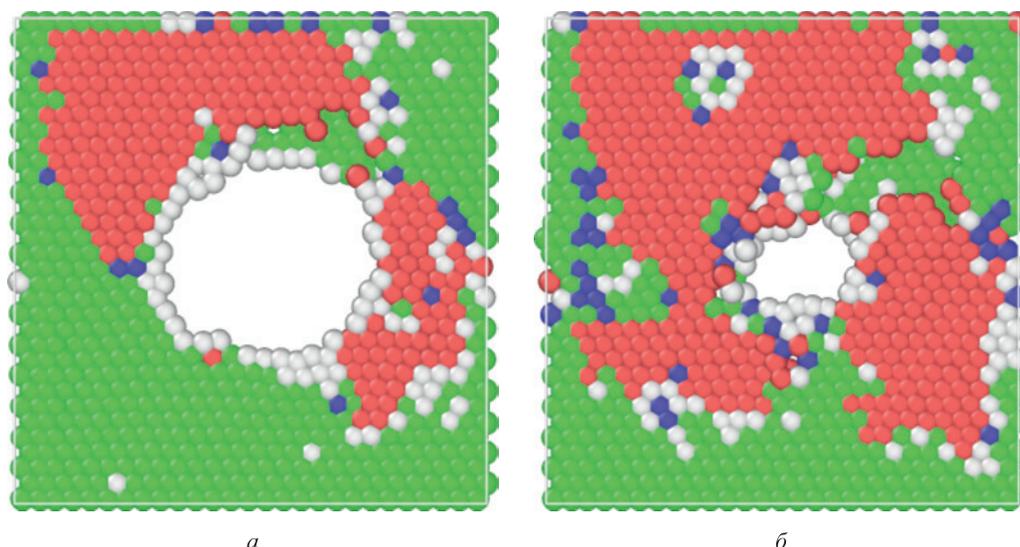


Рис. 4. Фрагмент плоскости (111) расчетной ячейки, содержащей пору с радиусом основания 16 Å (а) и 8 Å (б), через 5 пс после генерации ударной волны при  $T = 300$  К. Цветовая визуализация соответствует распределению локального окружения атомов: ГЦК (зеленый), ГПУ (красный), ОЦК (синий), не определено (белый)

Fig. 4. A fragment of the (111) plane of computational cell containing a pore with base radius 16 Å (a) and 8 Å (b), 5 ps after generation of the shock wave at  $T = 300$  K. Color visualization corresponds to distribution of atoms local environment: FCC (green), HCP (red), BCC (blue), not defined (white)

высокое значение плотности дислокаций при меньшем размере диаметра поры обусловлено тем, что при повышении температуры происходит «схлопывание» поры и на ее месте формируется дополнительная дислокационная структура [24].

При построении графиков (рис. 3) брали средние значения длины дислокационных линий, вычисленные за 500 шагов моделирования, так как из-за тепловых колебаний атомов петли меняют свои размеры.

На следующем этапе исследования проводили моделирование с генерированием ударных волн в расчетной ячейке. Прохождение фронта волны создает касательные напряжения [25, 26], достаточные для инициации процесса скольжения краевых дислокаций [27]. Интерес представляет изучение возможного влияния ударных волн на процесс структурных изменений, происходящих с порой. При этом необходимо рассматривать деформацию с углом сдвига, при котором не образуются дислокационные петли, например,  $\gamma = 0,07$  рад (рис. 3, а).

Результаты моделирования показали, что под воздействием волн на поверхности поры начинают зарождаться дислокационные петли. На рис. 4 представлена цветовая визуализация атомов, выполненная после структурного анализа, заключающегося в идентификации локального окружения частиц с использованием метода углов и связей Экланда-Джонса [28], на момент 5 пс после прохождения одной ударной волны. Такая визуализация позволяет успешно выявлять дефекты упаковки. Как следует из рис. 3, при меньшем радиусе поры доля атомов с локальным гексагонально плотноупакованным (ГПУ) окружением превышает аналогич-

ную долю для расчетной ячейки, содержавшей пору с большим радиусом.

На рис. 5, а представлены результаты вычислений плотности дислокаций при различных радиусах основания цилиндрической поры. Плотность дислокаций увеличивается более значительно в случае наименьшего из рассмотренных радиусов. Это свидетельствует о наибольших происходящих структурных изменениях, заключающихся в растворении поры под воздействием волн.

Чтобы охарактеризовать процесс структурных преобразований, с помощью алгоритма [19] был рассчитан объем поры, меняющийся в ходе моделирования. Но более наглядной является такая величина, как удельный объем «фазы вещества»: отношение объема, занятого частицами системы, к общему объему расчетной ячейки. Аналогичная терминология используется в физике спекания («фаза вещества», «фаза пустоты») или при исследовании металлических стекол [29, 30]. Результаты вычислений приведены на рис. 5, б: удельный объем скачкообразно растет через некоторое время после генерации волны. Эти скачки обусловлены изменением формы поры (сдавливание поры фронтом сжатия волны) и последующим ее восстановлением. Формируемая в дальнейшем волна разгрузки создает касательные напряжения, способствующие зарождению дислокаций. Последующее увеличение удельного объема «фазы вещества» свидетельствует об активизации процесса залечивания пор. При повышении температуры волны инициируют отрыв части вакансий, в результате чего пора с наименьшим моделируемым радиусом ( $R = 8$  Å) теряет устойчивость и частично или полностью раство-

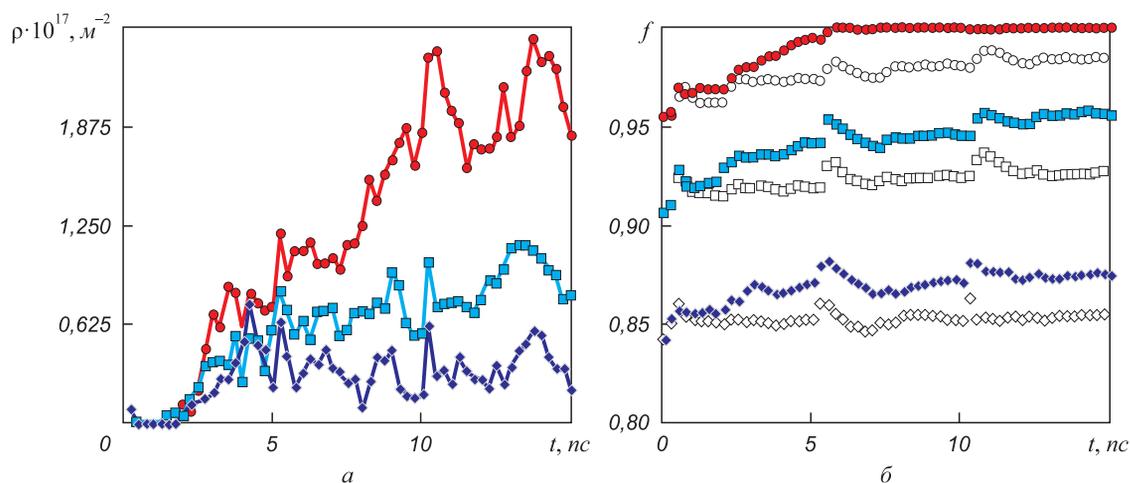


Рис. 5. Изменение плотности дислокаций  $\rho$  ( $T = 300$  К) (а) и объемной доли «фазы вещества»  $f$  (при  $T = 300$  К (○, □, ◇) и  $T = 600$  К (●, ■, ◆)) (б), при прохождении ударных волн, генерируемых в расчетной ячейке с интервалом 5 пс (угол сдвига  $\gamma = 0,07$  рад): ● – 8 Å; ■ – 12 Å; ◆ – 16 Å

Fig. 5. Change in dislocation density  $\rho$  ( $T = 300$  К) (а) and volume fraction of the “phase of the substance”  $f$  (at  $T = 300$  К (○, □, ◇) and  $T = 600$  К (●, ■, ◆)) (б), during the passage of shock waves generated in the computational cell with an interval of 5 ps (shear angle  $\gamma = 0.07$  rad): ● – 8 Å; ■ – 12 Å; ◆ – 16 Å

рется (удельный объем «фаза вещества» становится равным 1). Следовательно, наблюдается делокализация свободного объема.

## Выводы

Ударные волны могут инициировать образование дислокационных петель на поверхности цилиндрических пор, повышая плотность дислокаций в кристалле. Это влияет на прочностные свойства металла. Такой процесс

реализуется при сдвиговой деформации, недостаточной для зарождения дислокаций. В условиях моделирования при температуре 600 К наблюдается растворение поры в расчетной ячейке. Это свидетельствует о том, что ударные волны вкпе с термическим воздействием способны инициировать процесс залечивания пор.

Результаты проведенного исследования могут найти применение в радиационном материаловедении, при ультразвуковой обработке материалов или в нанотехнологии.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

## REFERENCES

1. Бетехтин В.И. Пористость и механические свойства твердых тел // Вестник Томского государственного университета. 1998. Т. 3. № 3. С. 209–210.
2. Ovchinnikov V.V. Radiation-dynamic effects. Potential for producing condensed media with unique properties and structural states // *Physics-Uspekhii*. 2008. Vol. 51. No. 9. P. 955–964. <http://dx.doi.org/10.1070/PU2008v051n09ABEH006609>
3. Calder A.F., Bacon D.J., Barashev A.V., Osetsyky Yu.N. On the origin of large interstitial clusters in displacement cascades // *Philosophical Magazine*. 2010. Vol. 90. No. 7-8. P. 863–884. <https://doi.org/10.1080/14786430903117141>
4. Кривцов А.М. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // *Физика твердого тела*. 2004. Т. 46. № 6. С. 1025–1030.
5. Зольников К.П., Корчуганов А.В., Крыжевич Д.С., Чернов В.М., Псахье С.Г. Ударные волны в металлических кристаллитах при радиационном воздействии // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Термоядерный синтез»*. 2015. Т. 38. № 2. С. 68–74.
6. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Поletaev Г.М. Низкотемпературное растворение поры вблизи поверхности кристалла под воздействием ударных волн // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2013. Т. 10. № 2. С. 254–260.
7. Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Медведев Н.Н., Захаров П.В. Структурная транс-

1. Betekhtin V.I. Porosity and mechanical properties of solids. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta*. 1998, vol. 3, no. 3, pp. 209–210. (In Russ.).
2. Ovchinnikov V.V. Radiation-dynamic effects. Potential for producing condensed media with unique properties and structural states. *Physics-Uspekhii*. 2008, vol. 51, no. 9, pp. 955–964. <http://dx.doi.org/10.1070/PU2008v051n09ABEH006609>
3. Calder A.F., Bacon D.J., Barashev A.V., Osetsyky Yu.N. On the origin of large interstitial clusters in displacement cascades. *Philosophical Magazine*. 2010, vol. 90, no. 7-8, pp. 863–884. <https://doi.org/10.1080/14786430903117141>
4. Krivtsov A.M. Molecular dynamics simulation of plastic effects upon spalling. *Physics of the Solid State*. 2004, vol. 46, no. 6, pp. 1055–1060. (In Russ.). <https://doi.org/10.1134/1.1767244>
5. Zol'nikov K.P., Korchuganov A.V., Kryzhevich D.S., Chernov V.M., Psakh'e S.G. Shock waves in metal crystallites under radiation exposure. *Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Seriya "Termoyaderniy sintez"*. 2015, vol. 38, no. 2, pp. 68–74. (In Russ.).
6. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Pavlovskaya E.P., Yashin A.V., Poletaev G.M. Low-temperature dissolution of a pore near the crystal surface under the influence of shock waves. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya*. 2013, vol. 10, no. 2, pp. 254–260. (In Russ.).
7. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Pavlovskaya E.P., Yashin A.V., Medvedev N.N., Zakharov P.V. Structural transformation of va-

- формация вакансионных пор в деформированном кристалле под воздействием ударных волн // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2013. Т. 10. № 4. С. 563–571.
8. Маркидонов А.В., Старostenkov М.Д., Захаров П.В., Обидина О.В. Порообразование в ГЦК кристалле под воздействием ударных послескакадных волн // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2015. Т. 12. № 2. С. 231–240.
  9. Маркидонов А.В., Старostenkov М.Д., Поletaev Г.М. Трансформация нанопор в золоте в условиях термоактивации и воздействия звуковых и ударных волн // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2015. Т. 79. № 9. С. 1233. <https://doi.org/10.7868/S0367676515090136>
  10. Маркидонов А.В., Старostenkov М.Д., Захаров П.В., Лубяной Д.А., Липунов В.Н. Эмиссия дислокационных петель нанопорами в ГЦК-кристалле под воздействием ударных послескакадных волн при сдвиговой деформации // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2019. Т. 156. № 6 (12). С. 1078–1083. <https://doi.org/10.1134/S0044451019120046>
  11. Barbu A., Dunlop A., Lesueur D., Averbach R.S. Latent tracks do exist in metallic materials // *Europhysics Letters*. 1991. Vol. 15. No. 1. P. 37–42. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/15/1/007>
  12. Прокофьев М.А., Бердоносова Д.Г., Мелихов И.В., Бердонос С.С. О возможности получения кристаллических материалов, содержащих протяженные цилиндрические поры // *Вестник Московского университета. Серия 2. Химия*. 2010. Т. 51. № 4. С. 325–330.
  13. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // *Physical Review B*. 1986. Vol. 33. No. 12. P. 7983–7991. <https://doi.org/10.1103/physrevb.33.7983>
  14. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics. [Electronic resource]. Available at URL: <http://xmd.sourceforge.net/about.html> (Accessed 30.01.2020).
  15. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation Materials Science and Engineering*. 2010. Vol. 18. Article 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
  16. Andersen H.C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature // *The Journal of Chemical Physics*. 1980. Vol. 72. No. 4. P. 2384–2393. <https://doi.org/10.1063/1.439486>
  17. Stukowski A., Albe K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. Vol. 18. No. 8. Article 085001. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/8/085001>
  18. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2012. Vol. 20. No. 8. Article 085007. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/20/8/085007>
  19. Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals // *JOM*. 2014. Vol. 66. No. 3. P. 399–407. <https://doi.org/10.1007/s11837-013-0827-5>
  20. Норман Г.Э., Янилкин А.В. Гомогенное зарождение дислокаций // *Физика твердого тела*. 2011. Т. 53. № 8. С. 1536–1541.
  21. Xue L. Constitutive modeling of void shearing effect in ductile fracture of porous materials // *Engineering Fracture Mechanics*. 2008. Vol. 75. No. 11. P. 3343–3366. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2007.07.022>
  22. Козлов Э.В., Тришкина Л.И., Конева Н.А. Скалярная плотность дислокаций и её компоненты, накапливаемые при деформации в малокоцентрированных твердых растворах Cu – Al // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2011. Т. 8. № 1. С. 52–60.
  23. Скуратов В.А., Сайфулин М.М., Аралбаева Г.М., О’Коннелл Ж.Г., ван Вуурен А.Д. Повреждение диоксида титана вблизи поверхности после облучения быстрыми тяжелыми ионами // *Вестник Карагандинского университета. Физика*. 2017. № 1 (85). С. 47–54.
  24. Жилиев П.А., Куksин А.Ю., Норман Г.Э., Стариков С.В., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. Влияние микроструктуры материала cancy pores in a deformed crystal under the action of shock waves. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya*. 2013, vol. 10, no. 4, pp. 563–571. (In Russ.).
  8. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Obidina O.V. Pore formation in an FCC crystal under the action of post-cascade shock waves. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya*. 2015, vol. 12, no. 2, pp. 231–240. (In Russ.).
  9. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Poletaev G.M. Transformation of nanopores in gold under conditions of thermal activation and exposure to sound and shock waves. *Izvestiya Rossiiskoi akademii nauk. Seriya fizicheskaya*. 2015, vol. 79, no. 9, pp. 1233. (In Russ.). <https://doi.org/10.7868/S0367676515090136>
  10. Markidonov A.V., Starostenkov M.D., Zakharov P.V., Lubyanoi D.A., Lipunov V.N. Emission of dislocation loops by nanopores in FCC crystal under the action of post-cascade shock waves upon shear deformation. *Zhurnal eksperimental'noi i teoreticheskoi fiziki*. 2019, vol. 156, no. 6 (12), pp. 1078–1083. (In Russ.). <https://doi.org/10.1134/S0044451019120046>
  11. Barbu A., Dunlop A., Lesueur D., Averbach R.S. Latent tracks do exist in metallic materials. *Europhysics Letters*. 1991, vol. 15, no. 1, pp. 37–42. <https://doi.org/10.1209/0295-5075/15/1/007>
  12. Prokof'ev M.A., Berdonosova D.G., Melikhov I.V., Berdonosov S.S. On the possibility of obtaining crystalline materials containing extended cylindrical pores. *Moscow University Chemistry Bulletin*. 2010, vol. 65, no. 4, pp. 269–273. (In Russ.). <https://doi.org/10.3103/S0027131410040115>
  13. Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical Review B*. 1986, vol. 33, no. 12, pp. 7983–7991. <https://doi.org/10.1103/physrevb.33.7983>
  14. XMD – Molecular Dynamics for Metals and Ceramics. [Electronic resource]. Available at URL: <http://xmd.sourceforge.net/about.html> (Accessed 30.01.2020).
  15. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation Materials Science and Engineering*. 2010, vol. 18, article 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
  16. Andersen H.C. Molecular dynamics simulations at constant pressure and/or temperature. *The Journal of Chemical Physics*. 1980, vol. 72, no. 4, pp. 2384–2393. <https://doi.org/10.1063/1.439486>
  17. Stukowski A., Albe K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010, vol. 18, no. 8, article 085001. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/8/085001>
  18. Stukowski A., Bulatov V.V., Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2012, vol. 20, no. 8, article 085007. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/20/8/085007>
  19. Stukowski A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals. *JOM*. 2014, vol. 66, no. 3, pp. 399–407. <https://doi.org/10.1007/s11837-013-0827-5>
  20. Norman G.E., Yanilkin A.V. Homogeneous nucleation of dislocations. *Physics of the Solid State*. 2011, vol. 53, no. 8, pp. 1614–1619. (In Russ.). <https://doi.org/10.1134/S1063783411080221>
  21. Xue L. Constitutive modeling of void shearing effect in ductile fracture of porous materials. *Engineering Fracture Mechanics*. 2008, vol. 75, no. 11, pp. 3343–3366. <https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2007.07.022>
  22. Kozlov E.V., Trishkina L.I., Koneva N.A. Scalar dislocation density and its components accumulated during deformation in low-concentration Cu – Al solid solutions. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya*. 2011, vol. 8, no. 1, pp. 52–60. (In Russ.).
  23. Skuratov V.A., Saifulin M.M., Aralbaeva G.M., O'Connell J.H., van Vuuren A.J. Damage of titanium dioxide near the surface after irradiation with fast heavy ions. *Vestnik Karagandinskogo universiteta. Fizika*. 2017, no. 1 (85), pp. 47–54. (In Russ.).
  24. Zhilyaev P.A., Kuksin A.Yu., Norman G.E., Starikov S.V., Stegai-  
lov V.V., Yanilkin A.V. Influence of material microstructure on

- на динамическую пластичность и прочность: молекулярно-динамическое моделирование // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2010. Т. 9. № 1. С. 104–109.
25. Kositski R., Steinberger D., Sandfeld S., Mordehai D. Shear relaxation behind the shock front in <110> Molybdenum – From the Atomic Scale to Continuous Dislocation Fields // *Computational Materials Science*. 2018. Vol. 149. P. 125–133. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.02.058>
  26. Tang J.F., Xiao J.C., Deng L., Li W., Zhang X.M., Wang L., Xiao S.F., Deng H.Q., Hu W.Y. Shock wave propagation, plasticity, and void collapse in open-cell nanoporous Ta // *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2018. Vol. 20. No. 44. P. 28039–28048. <https://doi.org/10.1039/C8CP05126G>
  27. Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Маркидонов А.В., Кулагина В.В., Гринкевич Л.С. Динамика краевых дислокаций в слабоустойчивом состоянии ГЦК-системы при облучении высокоэнергетическими частицами // *Известия вузов. Физика*. 2016. Т. 59. № 3. С. 105–112.
  28. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // *Physical Review B*. 2006. Vol. 73. No. 5. Article 054104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.054104>
  29. Терехов С.В., Лимановский А.И. «Фаза пустоты» и размытый фазовый переход // *Физика и техника высоких давлений*. 2018. Т. 28. № 3. С. 65–74.
  30. Терехов С.В. Размытый фазовый переход в аморфном сплаве Fe<sub>40</sub>Ni<sub>40</sub>P<sub>14</sub>B<sub>6</sub>: термодинамика фаз и кинетика кристаллизации // *Физика и техника высоких давлений*. 2019. Т. 29. № 2. С. 24–39.
  - dynamic plasticity and strength: Molecular dynamics modelling. *Fiziko-khimicheskaya kinetika v gazovoi dinamike*. 2010, vol. 9, no. 1, pp. 104–109. (In Russ.).
  25. Kositski R., Steinberger D., Sandfeld S., Mordehai D. Shear relaxation behind the shock front in <110> Molybdenum – From the Atomic Scale to Continuous Dislocation Fields. *Computational Materials Science*. 2018, vol. 149, pp. 125–133. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.02.058>
  26. Tang J.F., Xiao J.C., Deng L., Li W., Zhang X.M., Wang L., Xiao S.F., Deng H.Q., Hu W.Y. Shock wave propagation, plasticity, and void collapse in open-cell nanoporous Ta. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2018, vol. 20, no. 44, pp. 28039–28048. <https://doi.org/10.1039/C8CP05126G>
  27. Starostenkov M.D., Potekaev A.I., Markidonov A.V., Kulagina V.V., Grinkevich L.S. Dynamics of edge dislocations in a low-stability FCC-system irradiated by high-energy particles. *Russian Physics Journal*. 2017, vol. 59, no. 9, pp. 1446–1453. (In Russ.).
  28. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation. *Physical Review B*. 2006, vol. 73, no. 5, article 054104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.054104>
  29. Terekhov S.V., Limanovskii A.I. “Phase of emptiness” and diffuse phase transition. *Fizika i tekhnika vysokikh davlenii*. 2018, vol. 28, no. 3, pp. 65–74. (In Russ.).
  30. Terekhov S.V. Fuzzy phase transition in amorphous Fe<sub>40</sub>Ni<sub>40</sub>P<sub>14</sub>B<sub>6</sub>: alloy: Thermodynamics of phases and kinetics of crystallization. *Fizika i tekhnika vysokikh davlenii*. 2019, vol. 29, no. 2, pp. 24–39. (In Russ.).

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

#### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

**Артем Владимирович Маркидонов**, д.ф.-м.н., доцент кафедры естественнонаучных дисциплин имени проф. В.М. Финкеля, Сибирский государственный индустриальный университет, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. В.К. Буторина, Новокузнецкий институт (филиал) Кемеровского государственного университета

ORCID: 0000-0002-4566-528X

E-mail: markidonov\_artem@mail.ru

**Михаил Дмитриевич Старостенков**, д.ф.-м.н., заведующий кафедрой физики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

ORCID: 0000-0002-6326-7613

E-mail: genphys@mail.ru

**Дмитрий Анатольевич Лубяной**, к.т.н., доцент кафедры технологии и комплексной механизации горных работ, Филиал Кузбасского государственного технического университета им. Т.Ф. Горбачева в г. Прокопьевске

ORCID: 0000-0001-9773-3558

E-mail: lubjanoy@yandex.ru

**Павел Васильевич Захаров**, д.ф.-м.н., профессор кафедры математики, физики, информатики, Алтайский государственный гуманитарно-педагогический университет

ORCID: 0000-0002-6410-1594

E-mail: zakharovpvl@rambler.com

**Вячеслав Николаевич Липунов**, аспирант кафедры физики, Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

ORCID: 0000-0001-7143-9000

E-mail: sl222527@mail.ru

**Artem V. Markidonov**, Dr. Sci. (Phys. –Math.), Assist. Prof. of the Chair of Sciences named after prof. V.M. Finkel, Siberian State Industrial University, Head of the Chair of Informatics and Computer Engineering, Novokuznetsk Branch of Kemerovo State University

ORCID: 0000-0002-4566-528X

E-mail: markidonov\_artem@mail.ru

**Mikhail D. Starostenkov**, Dr. Sci. (Phys. –Math.), Prof., Head of the Chair of Physics, Altai State Technical University

ORCID: 0000-0002-6326-7613

E-mail: genphys@mail.ru

**Dmitrii A. Lubyanoi**, Cand. Sci. (Eng.), Assist. Prof. of the Chair of Technologies and Integrated Mechanization of Mining, Prokopyevsk Branch of the Kuzbass State Technical University

ORCID: 0000-0001-9773-3558

E-mail: lubjanoy@yandex.ru

**Pavel V. Zakharov**, Dr. Sci. (Phys.–Math.), Prof. of the Chair of Mathematics, Physics, Informatics, Altai State Humanitarian and Pedagogical University

ORCID: 0000-0002-6410-1594

E-mail: zakharovpvl@rambler.com

**Vyacheslav N. Lipunov**, Postgraduate of the Chair of Physics, Altai State Technical University

ORCID: 0000-0001-7143-9000

E-mail: sl222527@mail.ru

Поступила в редакцию 31.01.2020

После доработки 25.03.2020

Принята к публикации 26.03.2020

Received 31.01.2020

Revised 25.03.2020

Accepted 26.03.2020