

УДК 538.911

О ВОЗМОЖНОСТИ ГОМОГЕННОГО ЗАРОЖДЕНИЯ ПОРЫ В ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ОБЛАСТИ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УДАРНЫХ ПОСЛЕКАСКАДНЫХ ВОЛН

А. В. Маркидонов, М. Д. Старостенков
(Филиал КузГТУ в г. Новокузнецке; АлтГТУ, г. Барнаул)

Исследование, проведенное методом молекулярной динамики, показало, что под действием ударных послекаскадных волн возникает направленный поток вакансий, приводящий к зарождению пор за счет растягивающих напряжений, возникающих за фронтом волны. Образование пор на зернограничных дислокациях с последующим их смещением под действием ударных волн приводит к росту одного из зерен за счет поглощения соседнего зерна. Описываемые явления наблюдаются при температурах, недостаточных для начала диффузионных процессов.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, метод молекулярной динамики, метод погруженного атома, ударная волна, дефекты, вакансия, пора, граница зерен наклоне, вершинная дислокация.

Введение

Материалы, из которых изготавливаются различные конструкционные узлы, как правило, являются поликристаллами, состоящими из отдельных зерен. Под воздействием облучения в зернах образуются точечные дефекты и различные трасмутанты, например, инертных газов. При низких температурах межузельные атомы, обладающие большей подвижностью по сравнению с вакансиями, мигрируют к стокам, которыми являются границы зерен, и образуют примесные сегрегации, закрепляющие дислокации. В результате этого повышается предел текучести материала. Повышение температуры приводит к увеличению диффузионной подвижности вакансий, и образование пористости на границах зерен является причиной радиационного охрупчивания [1]. Таким образом, границы зерен играют немаловажную роль при рассмотрении различных радиационно-стимулированных явлений.

Проблемам радиационного порообразования в материалах посвящен целый ряд известных работ [1–4]. Было проведено исследование влияния на радиационное порообразование различных факторов: температуры, интенсивности облучения, флюенса, наличия структурных несовершенств, присутствия газов и негазообразных

примесей. Накопленный обширный экспериментальный материал позволил построить модели рассматриваемого явления, сформировать основы теории, согласно которой зарождение поры представляет собой результат распада неустойчивой системы избыточных вакансий, образованных в результате облучения материала. Рост поры возможен благодаря асимметрии взаимодействия различных несовершенств кристаллической структуры с точечными дефектами и определяется наличием локальных потоков вакансий, направленных на пору. Необходимая для этого восходящая диффузия может возникать, например, в полях упругих напряжений, создаваемых объемными радиационными дефектами кластерного типа.

Тем не менее с позиции квазитермодинамического подхода к описанию образования новой фазы в конденсированной среде в работах [5–7] сформулирована основная проблема гомогенного зарождения поры, заключающаяся в следующем. Если рассматривать пору как *фазу пустоты*, то образование флуктуационным путем зародыша такой новой фазы с размером, превышающим некоторое критическое значение, определяемое удельной поверхностной энергией, маловероятно.

Для разрешения этой проблемы разработана феноменологическая теория, согласно которой объединение вакансий в поры происходит под действием упругих растягивающих напряжений, источником которых служат сами избыточные вакансии. Согласно предложенной модели диффузионно-деформационной неустойчивости снижение энергии Гиббса при учете этих напряжений приводит к возникновению явлений восходящей диффузии и, как следствие, появлению пор. Данная модель призвана преодолеть трудности, возникающие при описании начальной стадии поробразования, а также объяснить причины, по которым вакансионное пресыщение реализуется в виде пор, а не вакансионных петель.

Известно, что воздействие потока высокоэнергетических частиц на твердое тело сопровождается образованием ударных послекаскадных волн [8], формирующихся в результате скачка давления в каскадной области из-за различий времени термализации атомных колебаний в некоторой конечной области и времени отвода из нее тепла. Роль таких волн в инициации восходящей диффузии ранее не оценивалась. Авторами были проведены исследования [9–11], в которых получены результаты, свидетельствующие о возможности модификации дефектной структуры кристалла ударными послекаскадными волнами путем перемещения отдельных дефектов даже при температурах, когда диффузионные процессы не активны.

Таким образом, исследование иницирования ударными послекаскадными волнами восходящей диффузии вакансий с возможностью последующего формирования поры в зернограничной области является актуальным, так как этот процесс оказывает значительное влияние на процессы зернограничного проскальзывания, а также кинетику роста зерен. Его дополнительное изучение может послужить основой для разработки ряда новых математических моделей, уточнив тем самым уже существующую теорию.

Описание методики математического моделирования

Рассматриваемые в работе процессы отличаются высокая скорость протекания, что затрудняет прямые наблюдения. Поэтому наиболее рациональным видится использование методов компьютерного моделирования. Из них был выбран

метод молекулярной динамики в связи с тем, что он позволяет проводить эксперименты с заданными скоростями атомов и описывать динамику исследуемых процессов в реальном времени. Исследование проводилось с помощью пакета МД-моделирования XMD [12], очевидными преимуществами которого является широкий набор поддерживаемых потенциалов, сравнительная простота использования и открытость исходных кодов. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома [13]. Температура расчетной ячейки задавалась путем присвоения атомам случайных скоростей в соответствии с распределением Максвелла–Больцмана для указанной температуры. Шаг численного интегрирования уравнений движения равнялся 5 фс. Использовался однопроцессорный режим вычислений.

Компьютерный эксперимент проводился на расчетной ячейке в форме параллелепипеда, моделирующей кристалл никеля и состоящей из 20 000 атомов. Ориентация ячейки задавалась следующим образом: ось X была направлена вдоль кристаллографического направления $\langle 1\bar{1}0 \rangle$, ось Y — вдоль $\langle 11\bar{2} \rangle$, а Z — вдоль $\langle 111 \rangle$. Для исключения влияния поверхностных эффектов использовались периодические граничные условия.

Особенностями ударной послекаскадной волны, отличающей ее от волн, получаемых другими способами, являются большая амплитуда атомных смещений, а также малая ширина фронта, соизмеримая с параметром решетки кристалла [14]. Кроме того, размеры области термического пика, образование которого является причиной генерации данной волны, достигают нескольких нанометров. Поэтому для создания волны в расчетной ячейке выделялась кристаллографическая плоскость $\{1\bar{1}0\}$, содержащая единичный слой граничных атомов, которым присваивалась одинаковая по значению скорость, превышающая скорость продольных звуковых волн c_p (для никеля $c_p = 5630$ м/с [15]), направленная по нормали к выделенной плоскости. Плотнупакованное направление было выбрано потому, что из-за наличия механизмов фокусировки энергии сферическая волна трансформируется во фрагменты плоских волн, распространяющихся именно вдоль плотноупакованных направлений [16]. В результате последующих эстафетных кооперативных атомных смещений формируется бегущая волна, ширина

фронта которой не превышает нескольких меж-
атомных расстояний, а амплитуда смещений ато-
мов значительно превышает, например, ампли-
туду тепловых колебаний.

Так как использование описанного выше спо-
соба генерации ударной волны (УВ) неизбежно
приводит к росту температуры расчетной ячей-
ки, для ее сохранения использовался пропорци-
ональный термостат. Таким образом, при про-
ведении компьютерного эксперимента модели-
ровался канонический ансамбль (NVT). Кроме
того, при длительном эксперименте УВ может
достичь противоположной границы расчетной
ячейки, в результате чего возможно ее повторное
прохождение через рассматриваемую область.
Чтобы этого избежать, к атомам противополож-
ной границы прикладывалась вязкая сила, моде-
лирующая отток энергии из расчетной области в
окружающую среду.

Результаты моделирования и их обсуждение

Сначала выполнялся расчет термодинамиче-
ских параметров УВ, создаваемой в проводи-
мых компьютерных экспериментах. Для этого
расчетная ячейка разбивалась на элементарные
объемы таким образом, чтобы после структур-
ной релаксации каждый из объемов содержал
одну атомную плоскость $\{1\bar{1}0\}$. Затем, после
старта компьютерного эксперимента, для каж-
дого объема производился расчет. Полученное
таким образом распределение относительных па-
раметров вдоль оси X при температуре расчет-
ной ячейки 600 К и стартовой скорости гранич-
ных атомов $1,5c_p$ представлено на рис. 1.

Отметим, что проведение компьютерного экс-
перимента при постоянной температуре приво-
дит к достаточно быстрому затуханию УВ. По-
этому нет смысла рассматривать распределение
термодинамических параметров на протяжении
всей расчетной ячейки, а достаточно рассмот-
реть малую область возмущения.

Наиболее важным параметром УВ является
давление. В проводимых компьютерных экспе-
риментах удавалось достичь на фронте волны
его значения, составляющего десятки гигапаска-
лей. Данное значение во многом зависит от ко-
личества граничных атомов, которым присваи-
вается скорость при генерации волны. Несмот-
ря на большое давление, кристаллическая ре-
шетка оставалась упругой. Кроме того, не на-

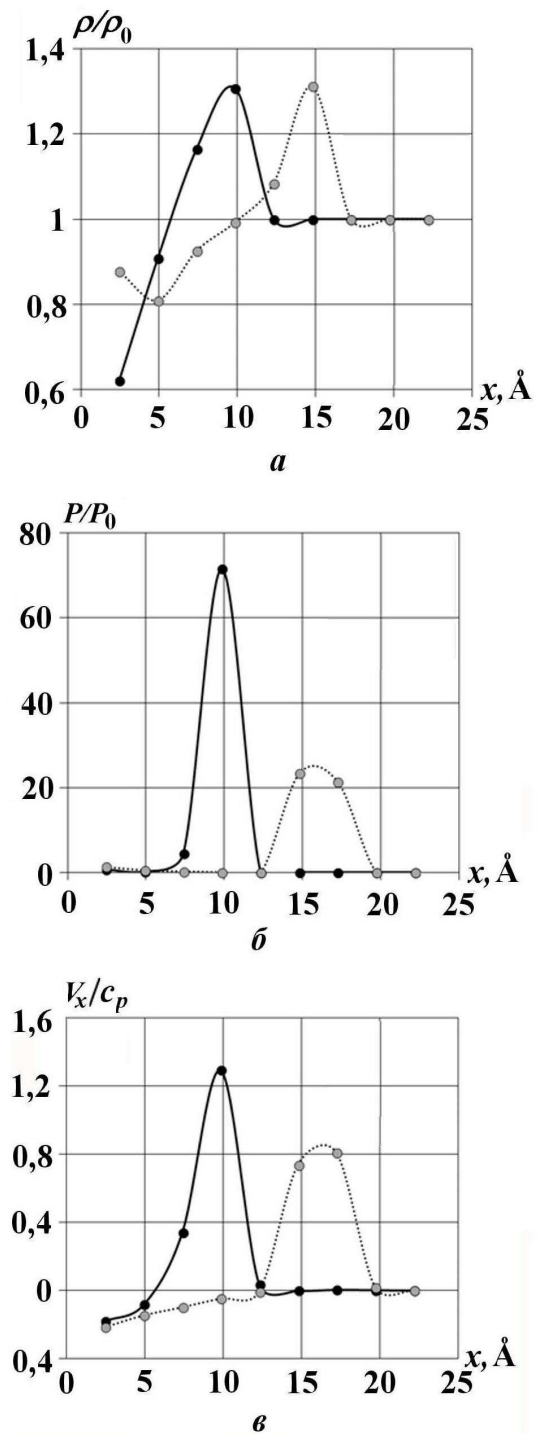


Рис. 1. Распределение относительных термодинами-
ческих параметров вдоль оси X при прохождении
УВ: a — линейная плотность (ρ_0 — плотность иде-
альной решетки); $б$ — давление (P_0 — внутреннее
давление решетки при заданной температуре); $в$ —
проекция скорости (c_p — скорость продольных зву-
ковых волн); —●— — $t = 0,05$ пс; ...●... — $t = 0,1$ пс

блюдалось процесса расщепления УВ на упругий предвестник и следующий за ним пластический фронт, а волна состояла только из упругого компонента. Очевидно, это связано с отсутствием несовершенств решетки, которые могут являться зародышами пластических сдвигов. Так, в работах [17, 18] показано, что идеальная кристаллическая решетка меди остается упругой вплоть до давления 30 ГПа, в то время как при включении точечных дефектов уже при 5 ГПа начинают образовываться дефекты упаковки. Кроме того, и в [19] говорится о том, что пластическая деформация, связанная с образованием и движением дислокационных диполей, достигается при более низких температурах и гораздо меньших одноосных деформациях, если в кристаллической структуре содержатся точечные дефекты. Отсутствие расщепления УВ в идеальном кристалле при компьютерном моделировании ранее было зафиксировано в работе [20]. В связи с вышесказанным поведение генерируемой в проводимых экспериментах УВ и отклик моделируемой кристаллической структуры не противоречат известным данным.

Перейдем к рассмотрению компьютерных экспериментов, в которых УВ генерируется в расчетной ячейке, содержащей границу зерен наклоне, для моделирования которой применялась методика, изложенная в [21]. Граница зерен общего типа создавалась путем разбиения расчетной ячейки на два блока и их поворота друг относительно друга на некоторый угол $\theta/2$ вдоль кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$. Получившиеся зерна сближались на расстояние, при котором потенциальная энергия расчетного блока минимальна, после чего следовала процедура релаксации. Для сохранения геометрии расчетного блока использовалась комбинация жестких (в направлениях X и Y) и периодических граничных условий.

Будем проводить исследование на расчетных ячейках, содержащих границы зерен с углами разориентации $\theta_1 = 9^\circ$ и $\theta_2 = 18^\circ$. Согласно классификации, предложенной в работе [22], в первом случае речь идет о малоугловой границе, во втором случае — о большеугловой.

Основные характеристики границ представлены в табл. 1. Удельная энергия, отнесенная к единице площади границы, вычислялась как разность энергии расчетного блока, содержащего границу зерна, и энергии идеального расчетного блока, состоящего из того же числа атомов. Избыточный объем рассчитывался как ли-

Структурные характеристики моделируемых границ зерен

Характеристика	Угол разориентации		Данные из источников
	9°	18°	
Удельная энергия, Дж/м ²	0,648	0,972	0,690 ÷ 0,840 [23]
Избыточный объем, а	0,101	0,113	0,094 ÷ 0,125 [24]

нейное расширение в направлении, перпендикулярном границе, выраженное в долях параметра решетки. Отметим, что данные, приведенные в последнем столбце таблицы, указаны в том числе и для границ специального типа. Поэтому непосредственное сравнение полученных характеристик с известными данными не вполне корректно, тем не менее можно утверждать, что они этим данным не противоречат.

Проведем следующий эксперимент. В одном из зерен создадим некоторое число вакансий, распределенных случайным образом, а во втором зерне сгенерируем УВ. Исследование влияния волны на вакансионное скопление будем проводить при температуре, недостаточной для термоактивации диффузии.

Для анализа пространственного распределения вакансий необходимо ввести некоторую безразмерную характеристику, которая допускала бы наглядную визуальную интерпретацию. В качестве таковой можно использовать степень заполнения Π — величину, обратную пористости материала. Для расчета степени заполнения определяется число вакансий в атомном ряду, и если они отсутствуют, принимается $\Pi = 1$, а если в ряду отсутствуют атомы, то $\Pi = 0$. В результате получается матрица, каждый элемент которой равен степени заполнения отдельного атомного ряда расчетного блока. После этого строится изображение, на котором каждому элементу матрицы соответствует прямоугольник, раскрашенный в определенный оттенок серого. В предельных случаях, если $\Pi = 1$, прямоугольник раскрашивается в белый цвет, а если $\Pi = 0$, — в черный.

Компьютерный эксперимент показал, что после прохождения волны наблюдается смещение вакансий по направлению к границе зерен. Отметим, что граница не является непреодолимым препятствием для волн. Так, например, в работе [25] показано, что при пересечении грани-

цы зерен специального типа $\Sigma 7$ только около 20 % энергии уединенной волны рассеивается в зернограничной области. Если в рассматриваемом случае сгенерировать несколько волн, то вакансии начинают оседать на зернограничных дислокациях с последующей их делокализацией. На рис. 2, а, в представлены расчетные ячейки с различными углами разориентации зерен и концентрацией вакансий 2 %. Температура расчетной ячейки 300 К. Вертикальные черные элементы в центре изображений соответствуют стенке ядер зернограничных дислокаций. Волны распространяются слева направо. После прохождения двенадцати УВ, генерируемых с интервалом в 2,5 пс, кроме осевших на дислокациях вакансий, наблюдается группа, расположенная во втором зерне, прошедшая при этом между ядрами дислокаций (рис. 2, б).

Отметим, что при проведении эксперимента с большеугловой границей зерен число вакансий, переместившихся в соседнее зерно, значительно меньше (см. рис. 2, в, г). Скопление вакансий на зернограничных дислокациях активизирует трубчатую диффузию, которая является основным диффузионным механизмом при невысоких температурах. Уменьшение числа вакансий за пределами зернограничной области в дальнейшем приводит к снижению роли объемной диффузии.

Необходимо заметить, что в компьютерных экспериментах наблюдалось "переползание" дислокаций за счет поглощения вакансий. Данный механизм может быть реализован, если имеется постоянный приток вакансий [26], который в рассматриваемом случае обеспечивает серия УВ.

Теперь перейдем к описанию компьютерных экспериментов, в которых расчетные ячейки подвергались деформации всестороннего растяжения, создаваемого путем изменения равновесного расстояния между атомами. В качестве стартового использовалось распределение вакансий, представленное на рис. 2, а, в. После создания нескольких УВ и последующей релаксации структуры наблюдалось перемещение зернограничных дислокаций в новые положения равновесия, т. е. выгибание границы, которое происходит в результате образования пор при стоке вакансий на дислокации. Полноценной миграции границы препятствует использование жестких граничных условий в направлении Y . Подобные выгибания, как показано в работе [27], могут приводить к распаду всей границы в случае, если значения внешних напряжений будут

достаточны для значительного удаления одной из дислокаций от границы. Последующее смещение группы освобожденных решеточных дислокаций вызывает локальную пластическую деформацию и образование удлиненного зерна.

Рассмотрим результаты описанного выше эксперимента более подробно. На рис. 3, а представлен фрагмент плоскости $\{111\}$ расчетной ячейки (при температуре 300 К), содержащей границу зерен с $\theta = 18^\circ$. Для наглядности на рисунке выделены зернограничные дислокации, которые объединены попарно и представляют собой вершинные дислокации с вектором Бюргерса $b = a/6\langle 110 \rangle^*$. В случае всесторонней деформации расчетного блока $\varepsilon = 3\%$ сток вакансий на одну из дислокаций под действием УВ приводит к формированию поры, которая в результате воздействия последующей серии волн начинает смещаться по направлению к источнику возмущений.

После того как под действием волн происходит перемещение вакансий, осевших на дислокационном ядре, экстраплоскость дислокации "прорастает" вглубь кристалла, что значительно упрощается в условиях растяжения, увлекая за собой парную дислокацию. После этого начинается скольжение дислокаций, удаленных от поры, стремящихся выстроиться в вертикальную стенку. Данный процесс приводит к укрупнению правого зерна за счет поглощения левого (см. рис. 3, б).

Известно, что движение дислокации определяется девятикомпонентной тензорной напряженностью. Расчет напряжений в расчетной ячейке показал, что необходимые для смещения дислокаций касательные напряжения достигают максимальных значений при прохождении через дислокацию волны разгрузки, следующей за фронтом УВ. В проводимых компьютерных экспериментах волна разгрузки формируется при восстановлении идеальности расчетной ячейки после генерации УВ. При рассмотрении послекаскадной УВ формирование волны разгрузки, по-видимому, возможно в результате остывания разогретой каскадной области. В работе [28] при изучении эволюции области разупорядочивания (пика смещений) в континуальном приближении показано, что давление в этой области, имеющее изначально высокое значение, с течением времени выравнивается с давлением в объеме всего образца, а затем понижается до отрицательных

* а — параметр решетки, для никеля равный 3,52 Å

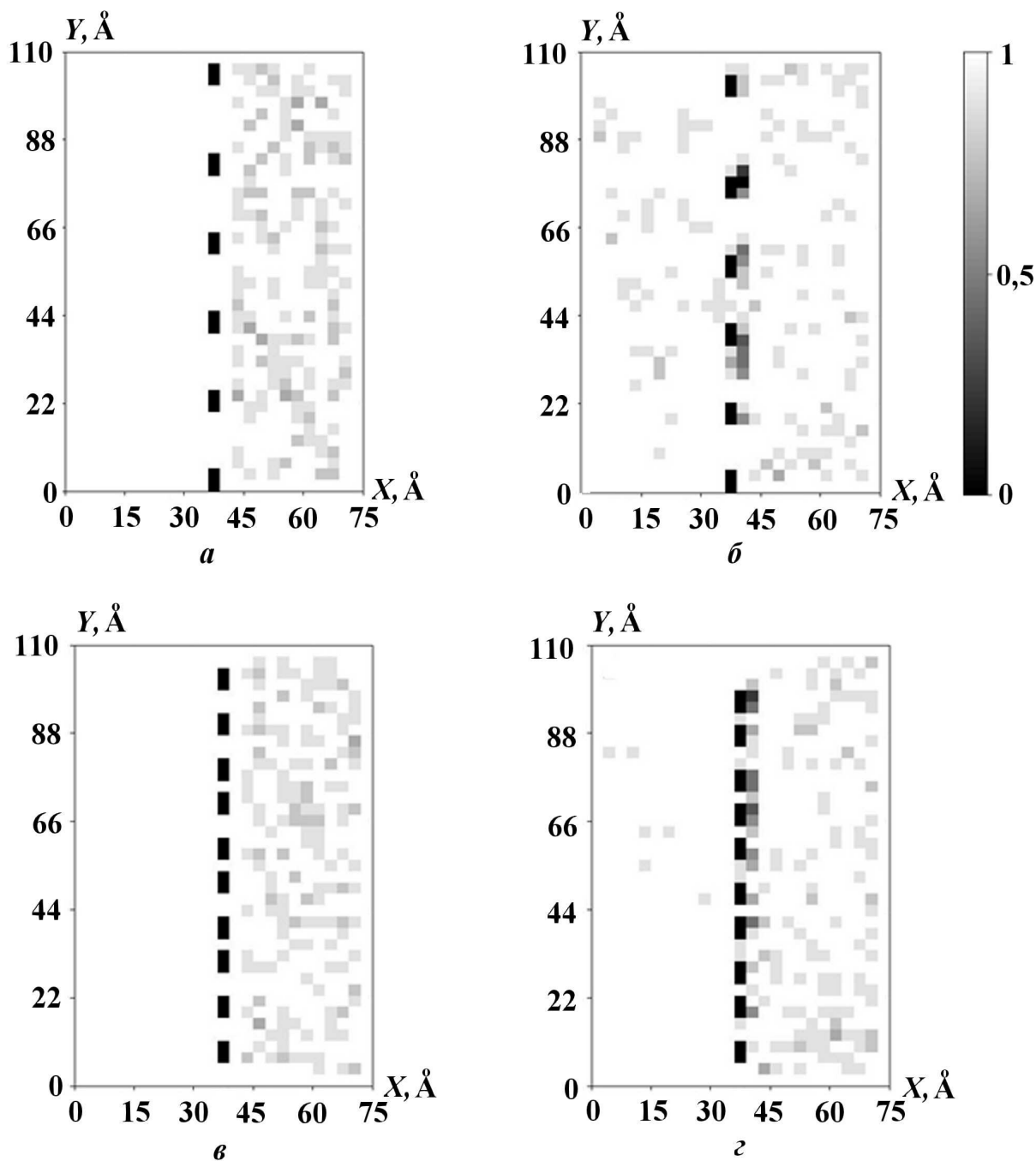


Рис. 2. Визуализация степени заполнения расчетной ячейки, содержащей границу зерен с углом разориентации $\theta = 9^\circ$ (*а, б*) и $\theta = 18^\circ$ (*в, г*), в начале эксперимента (*а, в*) и после прохождения двенадцати УВ (*б, г*)

значений. Таким образом, смещение материала в эту область может привести к формированию волны разгрузки.

Отметим одну особенность. Вершинные дислокации располагаются под углом $\pi/3$ к плос-

кости скольжения, и для их смещения требуются значительные энергетические затраты. Но, как показано в [22], перемещение таких дислокаций представляет собой процесс, затрагивающий целую группу атомов. При этом вероят-

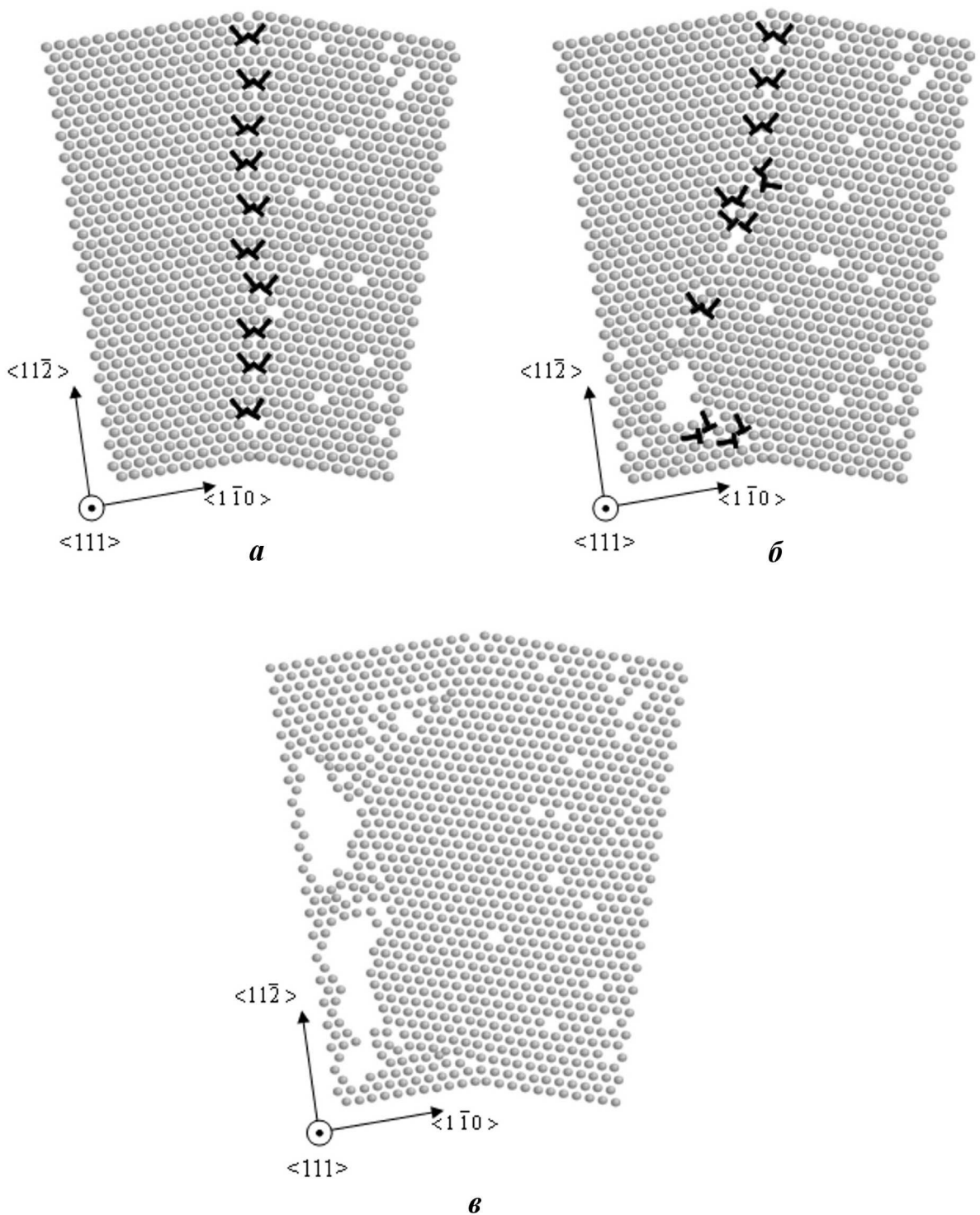


Рис. 3. Фрагмент плоскости $\{111\}$ расчетной ячейки, содержащей границу зерен с углом разориентации $\theta = 18^\circ$ в начале эксперимента (а) и после прохождения десяти УВ, генерируемых с интервалом в 2,5 пс, при всесторонней деформации $\varepsilon = 3\%$ (б) и $\varepsilon = 4\%$ (в)

ность появления данного процесса тем больше, чем меньше угол разориентации θ . И действительно, при проведении компьютерного экспери-

мента с расчетной ячейкой, имеющей $\theta = 9^\circ$, и при условиях, аналогичных эксперименту, описанному выше, наблюдается значительно боль-

ший изгиб границы, обусловленный перемещением зернограницных дислокаций на более протяженные расстояния. Кроме того, как показало дополнительное исследование, наиболее интенсивно групповые атомные смещения протекают вблизи создаваемой поры.

Также необходимо отметить, что при проведении компьютерного эксперимента без создания вакансий или при уменьшении деформации скольжение дислокаций не наблюдается. При увеличении деформации до $\varepsilon = 4\%$ пора формируется на месте стыка зерен. Кроме того, вблизи поры наблюдается локальная аморфизация зернограницного слоя, в связи с чем выявить ядра зернограницных дислокаций не представляется возможным. В результате последующего смещения поры под действием волн также наблюдается рост зерна (см. рис. 3, в). При такой деформации формирование поры наблюдается даже без создания вакансий в одном из зерен.

Известно, что размеры пор лимитируются удельной поверхностной энергией, и после преодоления некоторого критического размера пора схлопывается с образованием дислокационной петли, так как сферическая форма становится энергетически невыгодной. Стабилизация поры осуществляется в результате заполнения ее ядрами гелия, являющимися продуктами ядерных реакций, или в случае компенсации поверхностной энергии — локальными растягивающими напряжениями. Очевидно, что под воздействием таких напряжений зародыши пор могут формироваться при гораздо меньшей концентрации неравновесных вакансий. Кроме того, свободный объем границы, отделяющий зерна друг от друга, эквивалентен существованию напряжения всестороннего растяжения [29], что также упрощает порообразование.

В работе [13] показано, что в результате отжига гранецентрированного кубического кристалла при температурах в интервале $0,5T_{пл} \div T_{пл}$ (для никеля $T_{пл} = 1726$ К) поры формируются в обедненных зонах при общей концентрации вакансий в кристалле выше 25%. Авторами было проведено дополнительное исследование с расчетными ячейками, моделирующими кристаллит, в котором удалось получить зародыш поры, формируемый благодаря области разрежения, возникающей за фронтом волны, при уменьшении концентрации вакансий до 10% и понижении температуры расчетного блока до $0,2T_{пл}$. Отметим, что если при данных условиях выполнить компьютерный эксперимент без генерации УВ, то зародыша поры не образуется, а вакансии перестраиваются во фрагменты тетраэдров дефектов упаковки. При создании в расчетной ячейке деформации всестороннего растяжения $\varepsilon = 5\%$ и температуре 300 К зародыши поры в проводимых компьютерных экспериментах формируются при 8% концентрации вакансий, а в случае генерации УВ удается получить поры при уменьшении концентрации вакансий до 5%. Как было показано выше, образование поры в зернограницной области под воздействием УВ возможно при 2% концентрации вакансий.

Заключение

Образование и рост пор является характерным признаком структурных изменений при радиационном воздействии на твердое тело. Кроме того, по современным представлениям, для различных видов корпускулярного облучения материалов характерно образование областей взрывного энерговыделения с испусканием наноударных волн [8]. Ранее проведенные исследования показали, что УВ вызывают преобразования пор, заключающиеся в их росте, перемещении, дроблении на отдельные вакансии, а также расщеплении на более мелкие составные части [11].

Компьютерные эксперименты, описанные в представленной работе, свидетельствуют о возможности гомогенного зарождения пор в области растягивающих напряжений, возникающей за фронтом УВ. Направленный поток вакансий, возникающий под воздействием серии волн, приводит к оседанию вакансий на естественных стоках, например зернограницных дислокациях, причем температура, при которой наблюдается этот процесс, является недостаточной для его термоактивации. Под воздействием создаваемых извне растягивающих напряжений в зернограницной области формируются поры, смещение которых УВ приводит к росту зерен.

Результаты проведенного исследования могут быть использованы в радиационном материаловедении, нанотехнологии, при ультразвуковой обработке материалов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований в рамках научного проекта № 15-58-04033 Бел_мол_a и Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований в рамках проекта № T15PM-090.

Список литературы

1. *Ибрагимов Ш. Ш., Курсанов В. В., Пятилетов Ю. С.* Радиационные повреждения металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1985.
2. *Паршин А. М.* Структура и радиационное распухание сталей и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1983.
3. *Паршин А. М.* Структура, прочность и радиационная повреждаемость коррозионно-стойких сталей и сплавов. Челябинск: Металлургия, 1988.
4. *Зеленский В. Ф., Неклюдов Н. М., Черняева Т. П.* Радиационные дефекты и распухание металлов. Киев: Наукова думка, 1988.
5. *Орлов В. Л., Малышкина А. Г.* Образование нанометровых упорядоченных структур радиационных пор // Известия вузов. Физика. 2003. Т. 46, № 2. С. 31–35.
6. *Орлов В. Л., Орлов А. В., Аль-Самави А. Х., Евстигнеев В. В.* Образование зародыша радиационной поры // Там же. 2004. Т. 47, № 3. С. 25–28.
7. *Орлов В. Л., Орлов А. В., Аль-Самави А. Х., Гребеньков А. А.* Температурный интервал радиационного распухания // Там же. № 6. С. 27–30.
8. *Овчинников В. В.* Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред // УФН. 2008. Т. 178, № 9. С. 991–1001.
9. *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.
10. *Маркидонов А. В., Старостенков М. Д., Смирнова М. В. и др.* Влияние ударных послекаскадных волн на динамику краевой дислокации // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2014. Т. 11, № 4. С. 461–469.
11. *Маркидонов А. В., Старостенков М. Д.* Радиационно-динамические процессы в ГЦК-кристаллах, сопровождающиеся высокоскоростным массопереносом. Кемерово: Кузбассвузиздат, 2014.
12. XMD—Molecular Dynamics for Metals and Ceramics. <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.
13. *Johnson R. A.* Analytic nearest-neighbor model for FCC metals // Physical Review B. 1988. Vol. 37, No 8. P. 3924–3931.
14. *Zhukov V. P., Boldin A. A.* Elastic-wave generation in the evolution of displacement peaks // Atomic Energy. 1987. Vol. 68. P. 884–889.
15. *Григорьев И. С., Мейлихов Е. З.* Физические величины: справочник. М.: Энергоатомиздат, 1991.
16. *Chudinov V. G., Cotterill R. M. J., Andreev V. V.* Kinetics of the diffuse processes within a cascade region in the sub-threshold stages of F.C.C. and H.C.P. metals // Physica Status Solidi (a). 1990. Vol. 122, No 1. P. 111–120.
17. *Могилевский М. А., Ефремов В. В., Мынкин И. О.* Поведение кристаллической решетки при сильном одномерном сжатии // ФГВ. 1977. № 5. С. 750–754.
18. *Могилевский М. А., Мынкин И. О.* Влияние точечных дефектов на одномерное сжатие решетки // Там же. 1978. № 5. С. 159–163.
19. *Аксенов М. С., Полетаев Г. М., Ракитин Р. Ю., Старостенков М. Д.* Исследование самодиффузии в одноосно деформированных двумерных кристаллах // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2005. № 2. С. 64–67.
20. *Кривцов А. М.* Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // Физика твердого тела. 2004. Т. 46. Вып. 6. С. 1025–1030.
21. *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, No 2. P. 148–155.
22. *Ракитин Р. Ю.* Исследование механизмов диффузии по границам зерен наклона в ГЦК-металлах: Автореф. дис. канд. физ.-мат. наук. Барнаул, 2006.

23. Орлов А. Н., Перевезенцев В. Н., Рыбин В. В. Границы зерен в металлах. М.: Металлургия, 1980.
24. Chen S. P., Srolovitz D. J., Voter A. F. Computer simulation on surfaces and [001] symmetric tilt grain boundaries in Ni, Al, and Ni₃Al // J. of Materials Research. 1989. Vol. 4, No 1. P. 62—77.
25. Псахье С. Г., Зольников К. П., Кадиров Р. И. О возможности формирования солитообразных импульсов при ионной имплантации // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. Вып. 6. С. 7—12.
26. Овидько И. А., Рейзис А. Б. Переползание зернограницных дислокаций и диффузия в нанокристаллических твердых телах // Физика твердого тела. 2001. Т. 43. Вып. 1. С. 35—38.
27. Бобылев С. В. Теоретические модели испускания дислокаций границами зерен в деформируемых нанокристаллических материалах // Materials Physics and Mechanics. 2011. Vol. 12, No 2. P. 126—160.
28. Zhukov V. P., Demidov A. V. Calculation of the displacement peaks in the continuum approximation // Atomic Energy. 1985. Vol. 59. P. 568—573.
29. Орлов А. В., Лысков Л. В., Орлов В. Л. Условия восходящей диффузии в концентрированных сплавах // Вестник Югорского гос. ун-та. 2008. Вып. 1(8). С. 102—105.

Статья поступила в редакцию 26.12.15.

ON A POSSIBILITY OF HOMOGENEOUS PORE ORIGINATION IN A GRAIN-BOUNDARY REGION UNDER THE IMPACT OF POST-CASCADE SHOCK WAVES / A. V. Markidonov, V. D. Starostenkov (KuzSTU branch, Novokuznetsk; AltSTU, Barnaul).

The molecular dynamics studies demonstrate that a directed flux of vacancies resulting in the origination of pores due to tensile stresses behind the shock wave front occurs under the impact of post-cascade shock waves. Pores originated at the grain-boundary dislocations and their further displacement under the impact of shock waves cause the growth of one grain owing to the absorption of the neighboring grain. The described phenomena are observed at temperatures, which are insufficiently high to start the diffusion process.

Keywords: computer simulation, the molecular dynamics method, the embedded atom method, shock wave, defects, vacancy, pore, grain boundary, stair rod dislocation.
