

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
НАУЧНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ УФИМСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ
НАУК (УФИЦ РАН)

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ МОЛЕКУЛ И КРИСТАЛЛОВ - ОБОСОБЛЕННОЕ
СТРУКТУРНОЕ ПОДРАЗДЕЛЕНИЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
УФИМСКОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИФМК УФИЦ РАН)

На правах рукописи

Баязитов Айрат Мансурович

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ
В МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ**

Специальность 1.3.8. «Физика конденсированного состояния»

Научный доклад

Уфа - 2023

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

Научный руководитель: Дмитриев Сергей Владимирович
доктор физико-математических наук,
профессор,
заведующий лабораторией

Оглавление

	Стр.
Введение	4
Основное содержание работы	7
1. Краудионы и их влияние на физические процессы в кристаллах .	7
2. Динамика сверхзвуковых N -краудионов в ГЦК металлах и упорядоченном сплаве Ni_3Al	10
3. Исследование квазипериодического движения сверхзвуковых 2-краудионов и моделирование в сверхзвуковых 3,2-краудионов в структуре платины.	16
4. Движение атома в октаэдрическом канале.	19
Выводы	21
Основные публикации автора по теме диссертации	22
Список литературы	23

Введение

Актуальность диссертационной работы. Точечные дефекты в кристаллической решётке оказывают значительное влияние на процессы переноса массы и энергии в металлах и сплавах. Одной из подгрупп точечных дефектов являются краудионы, которые являются межузельными атомами, внедрёнными в плотноупакованные направления кристалла. В зависимости от скорости с которой запускаются краудионы они делятся на стационарные, дозвуковые или сверхзвуковые. Сверхзвуковые краудионы активно возникают при интенсивных внешних воздействиях, таких, как, облучение медленными нейтронами, пластическая деформация, высокотемпературный нагрев. Ионная имплантация и плазменная обработка поверхности также являются причиной возбуждения сверхзвуковых краудионов в материале. Поскольку сверхзвуковые краудионы могут возбуждаться в металлах и сплавах при бомбардировке поверхности тяжёлыми частицами, особый интерес вызывает проблема радиационного набухания металлов в ядерных реакторах. Изучение сверхзвуковых краудионов с помощью практических экспериментов сталкивается с серьёзными техническими трудностями. В данной ситуации моделирование методом молекулярной динамики является наиболее эффективным способом изучения точечных дефектов, движущихся со сверхзвуковой скоростью. В связи с этим, актуальной и важной задачей является исследование численными методами способов инициации и динамики сверхзвуковых краудионов в металлах и упорядоченных сплавах.

Цель работы: Молекулярно-динамическое исследование сверхзвукового движения краудионов и атомов в октаэдрическом канале в металлах.

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

1. Исследование сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в кристаллической решётке ГЦК металлов. Моделирование столкновений сверхзвуковых краудионов в кристаллической решётке меди.
2. Исследование квазипериодической динамики сверхзвуковых 2-краудионов в решётке платины.

3. Моделирование сверхзвуковых кластеров 3,2-краудионов в решётке платины. Анализ динамики кластеров в зависимости от начальной конфигурации.
4. Изучение сверхзвукового движения атома в октаэдрическом канале кристаллической структуры меди и сопутствующей инициации краудионов.

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

Апробация работы. Результаты исследований представлены на российских и международных конференциях, таких как:

- Открытая школа-конференция стран СНГ «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы» (г.Уфа, 2018, 2020, 2022 гг.);
- V Межрегиональной школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков, посвященной 100-летию Республики Башкортостан «Теоретические и экспериментальные исследования нелинейных процессов в конденсированных средах» (г.Уфа, 2019 г.);
- VI Межрегиональной школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых-физиков, посвященной 150-летию со дня рождения В.И. Ленина «Теоретические и экспериментальные исследования нелинейных процессов в конденсированных средах» (г.Уфа, 2020 г.);
- Международной конференции «Физика и технологии перспективных материалов – 2021 (г.Уфа).

Личный вклад автора работы. Автор принимал активное участие в изучении и обобщении научной литературы по теме диссертации, проведении исследований методом молекулярной динамики, интерпретации и анализе полученных результатов, формулировании выводов, подготовке научных ста-

тей и тезисов докладов к публикации. В совместных публикациях автору принадлежат основные результаты, посвященные динамике сверхзвуковых M, N и N -краудионов, квазипериодической динамике сверхзвукового 2-краудиона в платине и движению атома в октаэдрическом канале. Автор также принимал активное участие в постановке задачи и обсуждение результатов.

Публикации. По материалам диссертационной работы опубликовано 8 статей в журналах, из них 7 статей в журналах, рекомендованных ВАК РФ (в том числе 6 в изданиях, входящих в базы данных Web of Science и Scopus), а также тезисы 8 докладов на Международных и Всероссийских конференциях.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения. Объем работы составляет 96 страниц с 49 рисунками. Список литературы содержит 101 наименование.

Автор выражает **благодарность** всем соавторам и коллегам, принимавшим участие в проведение исследований, послуживших основой для данной работы Дмитриеву Сергею Владимировичу, Корзниковой Елене Александрович, Бачурину Дмитрию Владимировичу.

Основное содержание работы

1. Краудионы и их влияние на физические процессы в кристаллах

Экстремальные воздействия, такие как лазерная обработка [1], интенсивная пластическая деформация [2], сверхбыстрое нагружение [3; 4], облучение [5–10], плазменная обработка [11] и т.д., вызывают необратимые изменения кристаллической структуры и приводят к переходу решетки в неравновесное состояние. В этих процессах атомы сильно отклоняются от своих равновесных положений решетки, и нелинейная природа межатомных связей начинает играть значительную роль. Такие экстремальные воздействия приводят к появлению аномально высокой концентрации точечных дефектов, называемых парами Френкеля (вакансии и межузельные атомы). Межузельный атом может существовать во многих конфигурациях, включая конфигурацию краудиона, когда он расположен в плотноупакованном атомном ряду [12–14]. Миграционная способность краудионов намного выше по сравнению с вакансиями [2; 15; 16] и с межузельными атомами в других конфигурациях, что делает их эффективными в осуществлении массоопереноса. Высокая миграционная способность краудионов приводит к их быстрому исчезновению, затрудняя экспериментальный анализ их структуры и движения [17]. Поэтому для изучения краудионов широко используются методы компьютерного моделирования, включая методы молекулярной динамики [18–24], Монте-Карло [25; 26], первопринципные расчёты [27; 28] и многомасштабное моделирование [13; 29–31]. В работе [32] исследовались краудионы с использованием модели Френкеля-Конторовой, в которой учитывался ангармонизм взаимодействия между соседями. В данной статье было показано, что краудионы, описываемые такой моделью, могут быть в состоянии покоя, а также двигаться со дозвуковой или сверхзвуковой скоростью. Модель Френкеля-Конторовой также использовалась в работе [33], где исследовалась структура и динамика краудионов, кластеров краудионов в объемно-центрированных кубических (ОЦК) решетках металлов, таких как вольфрам, ванадий, хром, молибден, ниобий. В результате исследования получено, что кластеры краудионов (они же призматические дислокационные петли)

могут перемещаться в ОЦК кристаллической решетке практически беспрепятственно, не учитывая диссипацию.

Если атом в плотноупакованном ряду получает достаточно большой импульс вдоль ряда, он может заменить соседний атом и инициировать последовательность замещающих столкновений, создавая движущийся краудион и вакансию [34]. Таким образом образуется пара Френкеля, и движущийся межузельный атом переносит массу. Если начальная энергия ниже пороговой энергии смещения, то реализуется последовательность фокусонных столкновений [34]. После релаксации фокусона восстанавливается идеальная кристаллическая структура. В большинстве исследований анализируются статические или медленно движущиеся краудионы, которые создают поля упругих напряжений [27; 31; 35; 36]. Однако междоузлия, образующиеся при вышеупомянутых экстремальных воздействиях, могут распространяться вдоль плотноупакованных атомных рядов со скоростью, превышающей скорость продольного звука.

Интерес к исследованию движущихся возбуждений в кристаллах возрос в связи с экспериментально обнаруженным эффектом отжига дефектов глубоко внутри монокристалла германия при поверхностной плазменной обработке [37]. Сверхзвуковое движение краудиона изучалось в двумерной треугольной решетке [38; 39], в ГЦК решетках [28; 40; 41], в интерметаллическом соединении Ni_3Al [42] и в ОЦК решетке [43]. Металлы с ОЦК решеткой, такие как вольфрам и ванадий, представляют особый интерес в связи с тем, что их планируется широко использовать в Международном экспериментальном термоядерном реакторе (ИТЭР) [44]. Вольфрам рассматривается как отводящий материал [45; 46], а ванадиевые сплавы являются перспективными материалами для первой стенки и разделительного слоя реактора из-за их выдающихся термических свойств [47; 48]. Это является причиной активных исследований дефектов в W [7–10; 18; 49–53] и V [33; 47; 54–56]. Было показано, что сверхзвуковые краудионы могут нести электрический заряд [57]. Краудионы могут вносить заметный вклад в массоперенос, наблюдаемый при интенсивной пластической деформации (ИПД) металлов и сплавов. В ходе исследований обнаружилось, что ИПД способна стимулировать фазовые превращения при комнатной температуре, которые в отсутствие деформации протекающие при значительно более высоких температурах [58–61]. Эти фазовые переходы происходят очень быстро и сопровождаются ускоренным массопереносом, который невозможно

объяснить только обычными механизмами типа объемной и зернограничной диффузии, пусть и в присутствии повышенной концентрации вакансий. Наряду со сверхзвуковыми 1-краудионами был изучен массоперенос сверхзвуковыми N -краудионами, которые возбуждались путем придания начальной скорости N соседним атомам вдоль выбранного плотноупакованного атомного ряда [38; 40; 41] (см. рис.1).

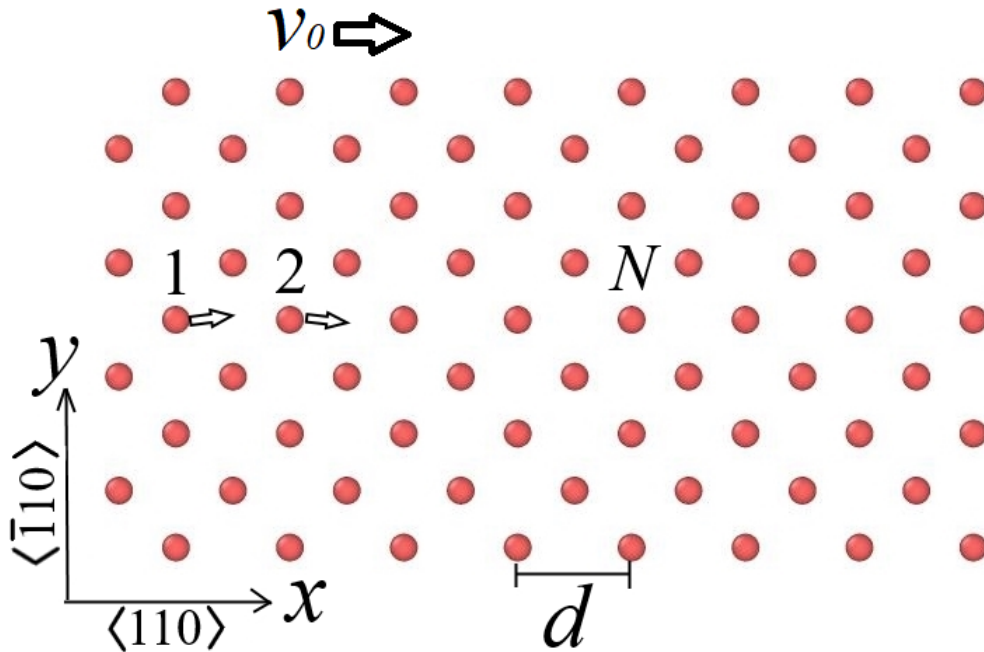


Рисунок 1 — Молекулярно-динамическая модель запуска N -краудиона, путём сообщения N атомам начальной скорости v_0 , в кристаллической решётке металла. Атомы занимают узлы ГЦК решётки, в проекции на плоскость (x, y) , где оси декартовой системы координат x, y и z направлены вдоль кристаллографических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

Оказалось, что сверхзвуковые N -краудионы могут возбуждаться с меньшей энергией и преодолевать гораздо большие расстояния, чем сверхзвуковые 1-краудионы. Это связано с тем фактом, что движение сверхзвуковых N -краудионов при $N > 1$ является более самофокусирующимся, чем при $N = 1$ [40; 62]. Столкновения атомов в плотноупакованном ряду со скоростью выше порогового уровня приводят к расфокусировке, т.е. любое небольшое отклонение вектора скорости от направления ряда будет экспоненциально увеличиваться от атома к атому [40; 62]. Столкновения со скоростями ниже порогового значения являются самофокусирующимися, и направление вектора скорости при последовательных столкновениях будет экспоненциально приближаться к

направлению атомного ряда. Из этого следует, что существует верхний предел энергии, которая может быть сообщена атому для возбуждения сверхзвукового 1-краудиона. Эта энергия может быть увеличена без увеличения скорости атомов, если возбуждается не один, а N соседних атомов, создавая сверхзвуковой N -краудион. Обладая большей энергией, N -краудион с $N > 1$ распространяется на большее расстояние по сравнению с 1-краудионом. Одновременное возбуждение двух атомов в атомном ряду может быть легко достигнуто путем бомбардировки поверхности кристалла двухатомными молекулами [41]. Этот факт важен для таких технологических процессов, как осаждение, распыление и ионная имплантация. Изучается вопрос образования сверхзвуковых 2-краудионов в каскадах столкновений в металлах при облучении. Сверхзвуковые 1- и 2-краудионы несут один межузельный атом, и когда они преобразуются в дозвуковые краудионы, они становятся неразличимыми. В дальнейшем было введено понятие M, N -краудиона, когда N -краудионы инициируются в нескольких соседних плотноупакованных кристаллографических направлениях. Дозвуковые M, N -краудионы исследовались в кристалле Морзе в работе [63]. В процессе исследования было обнаружено, что при повышении значения N с 1 до 2 длина пробега краудиона увеличивается в три-четыре раза, а $M, 1$ -краудионы несут внутреннюю моду, колеблющуюся с частотой выше верхней границы фононного спектра.

2. Динамика сверхзвуковых N -краудионов в ГЦК металлах и упорядоченном сплаве Ni_3Al

Используя метод молекулярной динамики при моделировании сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в ГЦК решётках Ni, Al и Cu получены данные, с помощью которых был исследован характер движения сверхзвуковых 1- и 2-краудионов (см. 2 и 3), а также построены зависимости длины пробега от начальной скорости краудионов (см. рис. 4). Главным отличием зависимостей скорости атомов от времени для 1- и 2-краудионов состоит в том, что при движении 1-краудиона атомы ускоряются один раз, а у 2-краудиона атомы испытывают два последовательных толчка и зависимость $V_x(t)$ имеет два ярко выраженных пика.

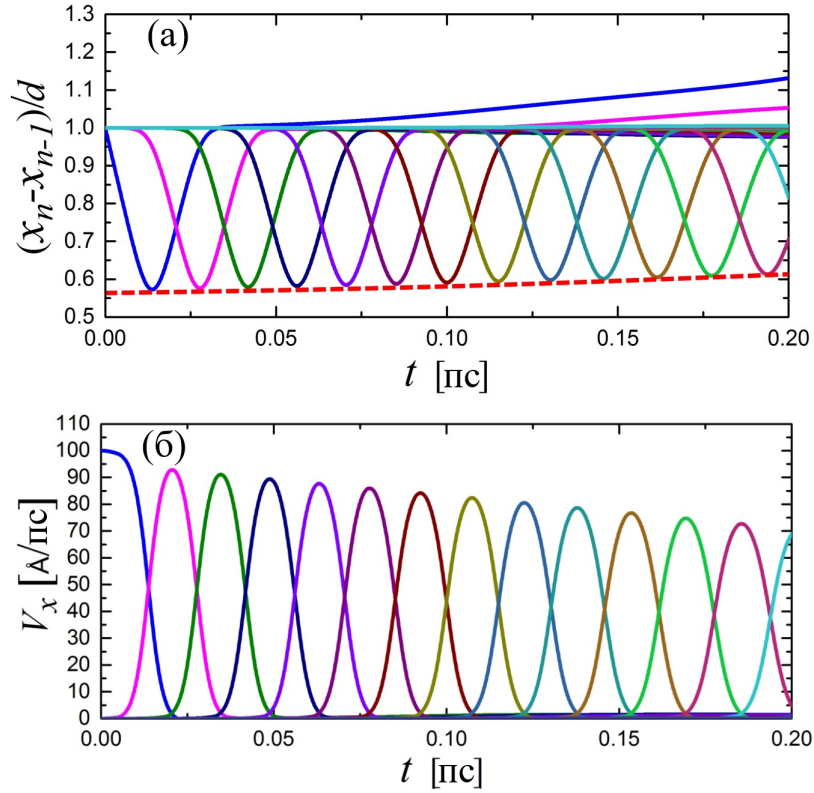


Рисунок 2 — Динамика 1-краудииона в ГЦК решётке Cu: (а) зависимость смещения от времени; (б)-зависимость компоненты скорости по оси x от времени. Начальная скорость, которая задавалась атомам $V_x^0 = 100 \text{ \AA}/\text{пс}$.

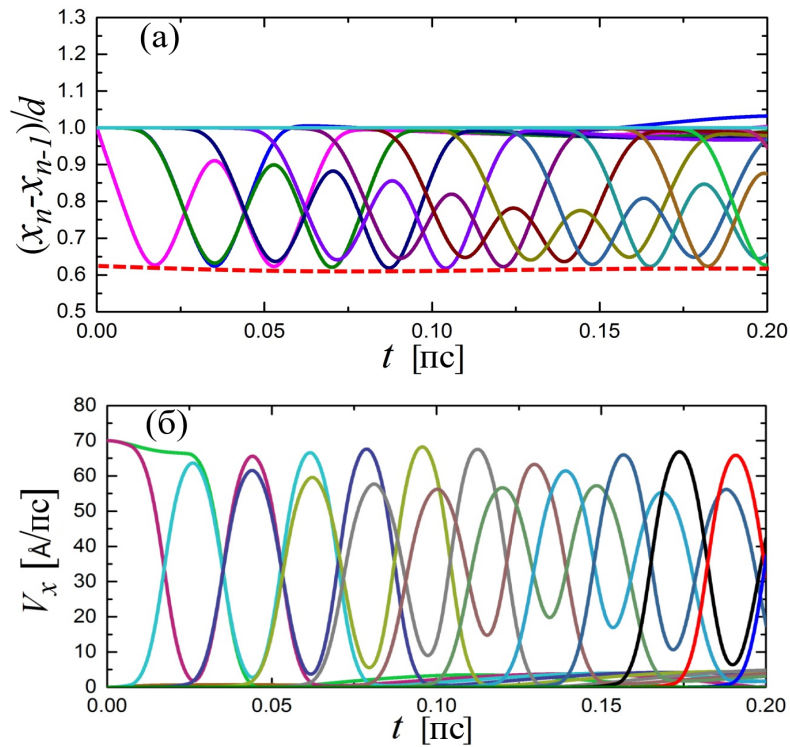


Рисунок 3 — Динамика 2-краудииона в ГЦК решётке Cu: (а) зависимость смещения от времени; (б) зависимость компоненты скорости по оси x от времени. Начальная скорость, которая задавалась атомам $V_x^0 = 70 \text{ \AA}/\text{пс}$.

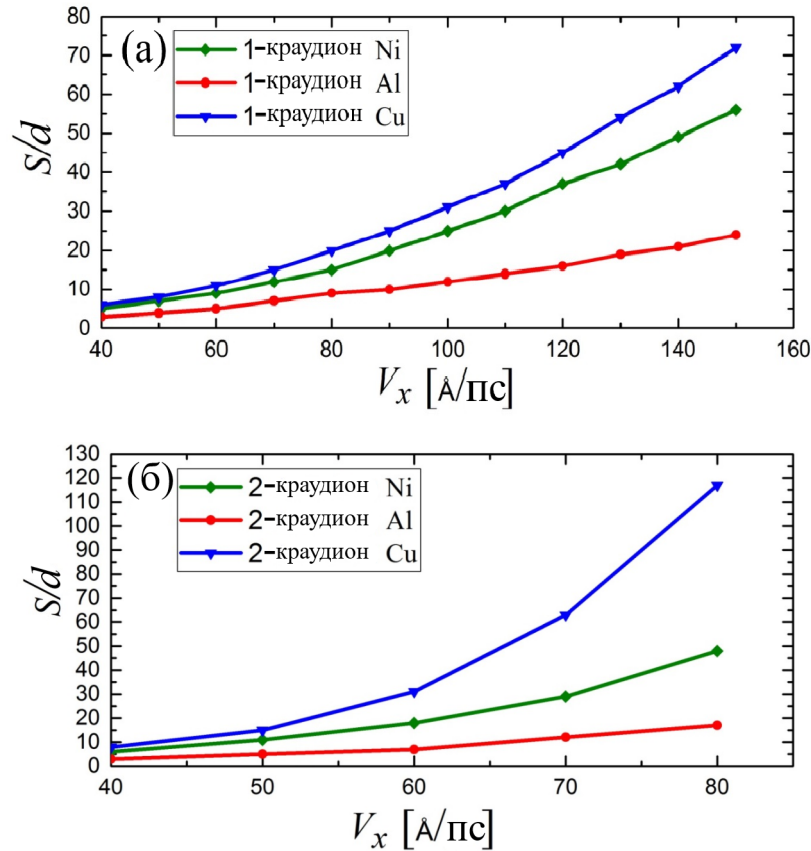


Рисунок 4 — Зависимость дальности пробега от x -компоненты начальной скорости атомов для Ni, Al, Cu в единицах межатомного расстояния.

Результаты для (а) 1-краудиона, (б) 2-краудиона.

Важно отметить, что длина пробега 2-краудиона больше, чем у 1-краудиона. Наибольшая длина пробега наблюдалась в меди, а наименьшая в алюминии (см. 4). В дальнейшем методом молекулярной динамики инициировались краудионы в интерметаллиде Ni_3Al . Сверхзвуковые краудионы запускались в моноатомном плотноупакованном ряду, состоящем из атомов Al, и биатомном плотноупакованном ряду. В ходе исследований было выявлено, что в моноатомных рядах при запуске начальных атомов проявляется сильная неустойчивость, в связи с чем говорить о возникновении сверхзвуковых краудионов в моноатомных рядах структуры Ni_3Al представляется маловероятным. Связано это с низкой симметрией расположения атомов Al в окружающих плотноупакованных рядах.

На рисунке 5 можно увидеть, что 2-краудион в целом при одинаковой скорости с 1-краудионом преодолевает большее расстояние, как в случае с левым атомом Al, так и в случае с левым атомом Ni. Также следует отметить, что

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

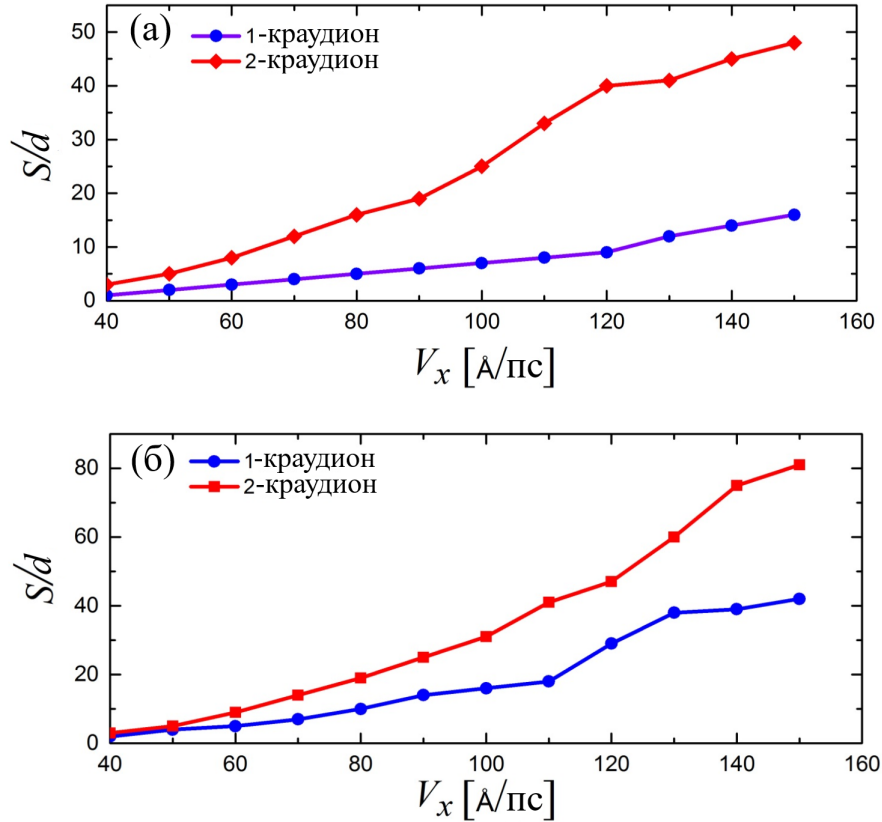


Рисунок 5 — Зависимость дальности пробега 1- и 2- краудиона от x -компоненты начальной скорости атомов. На рисунке (а) представлены результаты, когда начальная скорость в случае 1-краудиона придавалась атому Al, а в случае 2-краудиона левый атом Al а правый – Ni; (б) Начальная скорость в случае 1-краудиона придавалась атому Ni, а в случае 2-краудиона левый атом Ni, а правый – Al.

Исследовались столкновения сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в одном плотноупакованном направлении в монокристалле меди. На рисунке 6 продемонстрирован процесс данного столкновения в зависимости от времени. Начальная компонента скорости по оси x для сверхзвуковых 1- и 2-краудионов равна $V_x^0 = 80 \text{ \AA}/\text{пс}$.

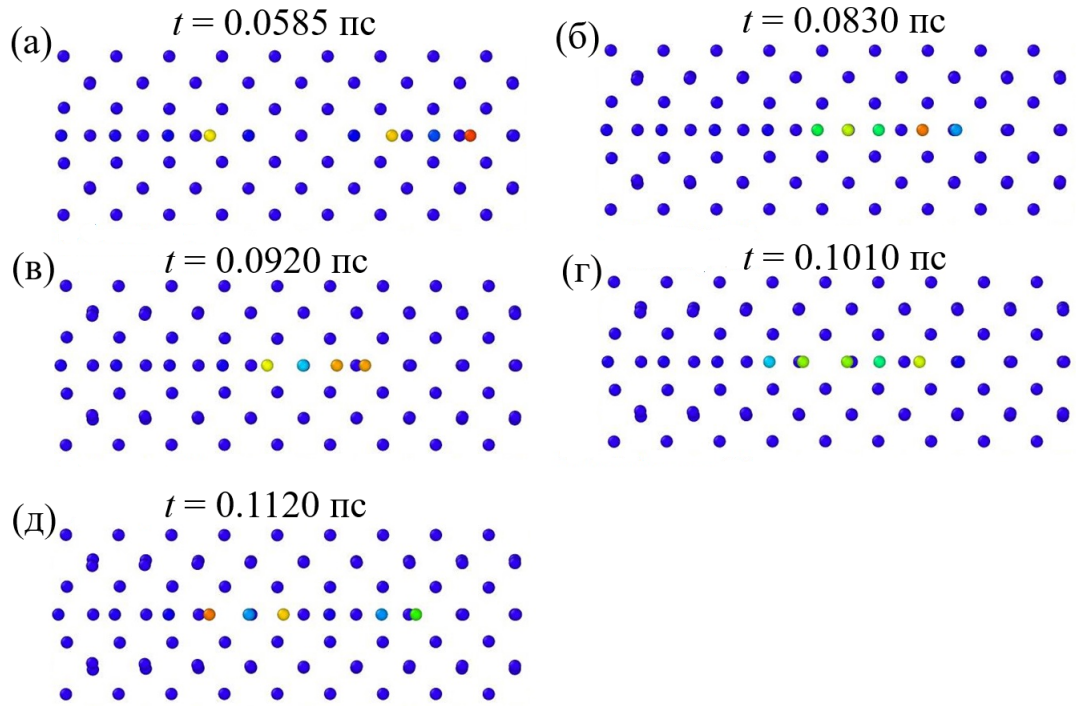


Рисунок 6 — Процесс столкновения 1- и 2-краудионов в зависимости от времени.

Схематическое изображение для более полного понимания механизма столкновения атомов 1- и 2-краудионов приведено на рисунке 7.

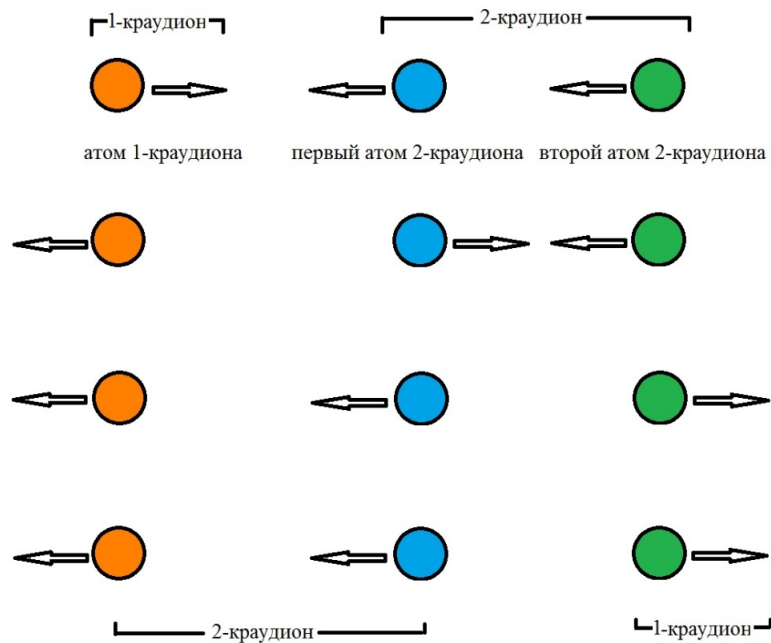


Рисунок 7 — Схематическое изображение столкновений атомов 1- и 2-краудиона.

Запуск сверхзвуковых краудионов проводился в кристаллической структуре свинца. Результаты моделирования сверхзвуковых краудионов в свинце

сравнивались с никелем, поскольку свинец обладает радиационно-защитными свойствами и важно было оценить полученные данные на фоне металла не способным защищать от гамма-излучения.

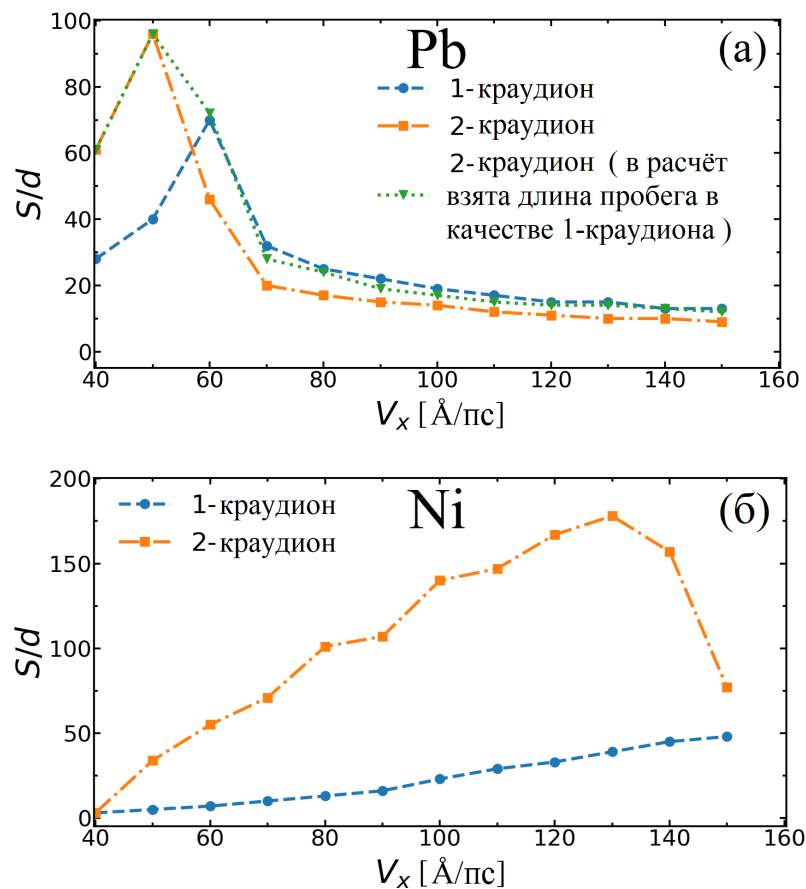


Рисунок 8 — Расстояние распространения сверхзвуковых 1- и 2-краудионов в (а) свинце и (б) никеле в зависимости от начальной скорости. Длина пробега нормализовано к межатомному расстоянию. Результаты для 1-краудиона показаны синим цветом, а результаты для 2-го краудиона показаны оранжевым. В (а) зеленым цветом показано длина пробега, учитывающее расстояние, пройденное межузельным атомом после преобразования сверхзвукового 2-краудиона в сверхзвуковой 1-краудион.

При моделировании сверхзвукового 2-краудиона в свинце в определённый момент времени он преобразовывался в 1-краудион и продолжал своё движение. На графике 8(а) длина пробега для данного случая выделена зелёным цветом. Из результатов продемонстрированных на графиках 8 можно выделить, что в диапазоне начальных скоростей от 90 до 150 Å/пс краудионы распространяются приблизительно на 20 межатомных расстояний. Различия в длине пробега между сверхзвуковыми 1- краудионами и 2-краудионами становятся незначи-

тельными. При этом в диапазоне от 60 до 80 Å/пс длина пробега сверхзвукового 1-краудиона больше, чем длина пробега 2-краудиона без учёта движения в качестве сверхзвукового 1-краудиона, но практически равна длине пробега 2-краудиона если взять в расчёт его длину пробега после преобразования в 1-краудион. Классическая динамика наблюдалась лишь в диапазоне от 40 до 60 Å/пс, где длина пробега сверхзвукового 2-краудиона больше длины пробега сверхзвукового 1-краудиона (см. рис. 8(б)).

3. Исследование квазипериодического движения сверхзвуковых 2-краудионов и моделирование в сверхзвуковых 3,2-краудионов в структуре платины.

Квазипериодическое движение исследовалось для двух случаев, когда $k = 0$ (см. рис. 9(а)) и $k = 3$ (см. рис. 9(б)), то есть когда между атомами с ненулевой начальной скоростью либо нет атомов с нулевой скоростью, либо их количество равняется трём. Начальные скорости в обоих случаях были равны $V_x^1 = V_x^2 = 68$ Å/пс, где V_x^1 скорость первого атома сверхзвукового 2-краудиона, а V_x^2 второго атома.

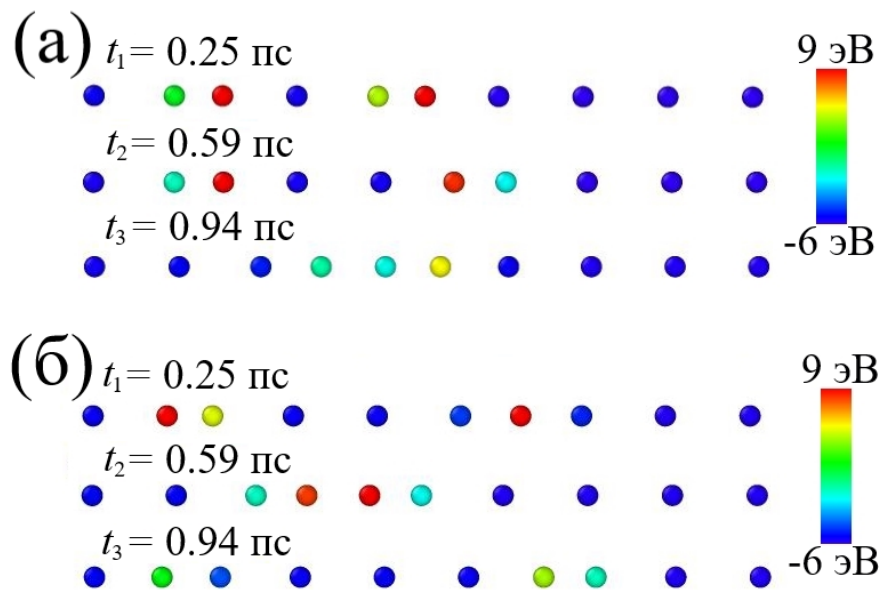


Рисунок 9 — Динамика движения 2-краудиона в плотноупакованном направлении кристаллической решётки платины.

Атомы, имеющие большую кинетическую энергию показаны красным, а покоящиеся атомы – синим. Хорошо видно, что расстояние между быстрыми атомами квазипериодически изменяется, что может быть охарактеризовано как «бризерное» движение 2-краудиона.

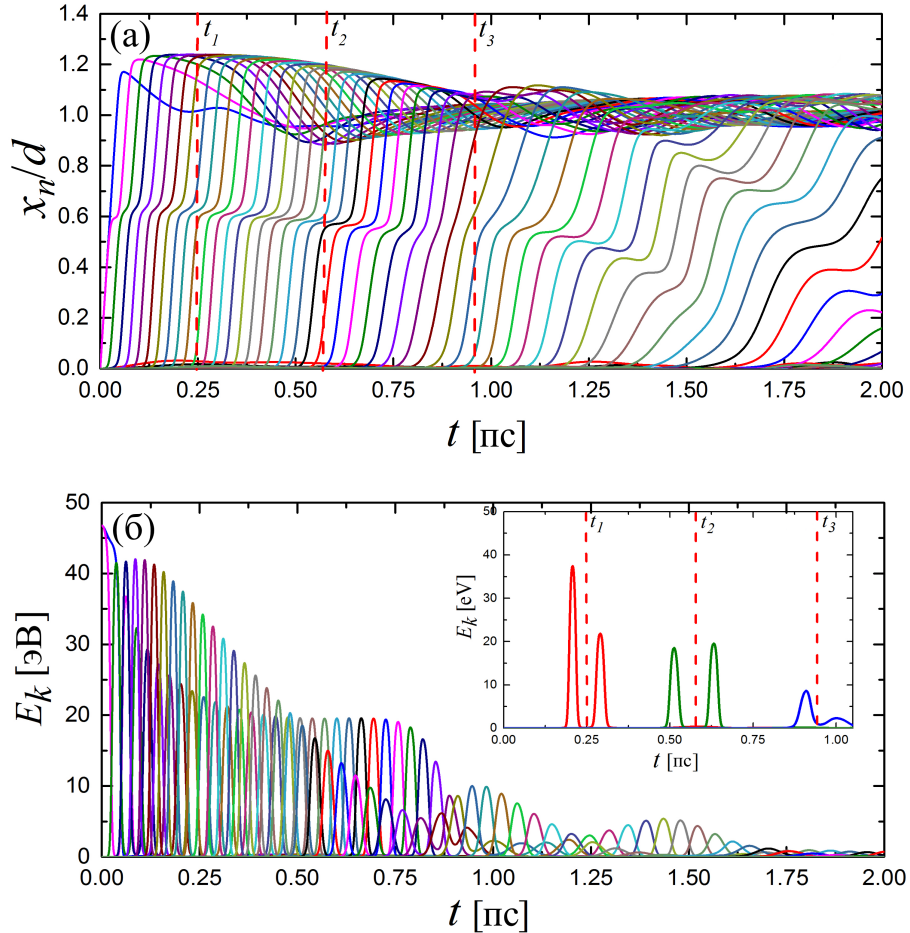


Рисунок 10 — Перемещения атомов (а) и кинетическая энергия (б) как функции времени при движении 2-краудиона, запущенного путем сообщения двум атомам плотноупакованного ряда скорости $V_x^0 = 68 \text{ \AA}/\text{пс}$, $k = 0$.

Такая динамика формируется из двух принципов, с начала в случае с $k = 0$ левый атом, он же поддерживающий атом, передает значительную часть своей энергии правому атому (ведущему) в начальном этапе движения 2-краудиона, следовательно правый атом начинает отрываться от левого. Затем левый атом начинает «догонять» правый, т.к. он находится в центре конусообразного возмущения, возникающего в хвосте движения правого атома. Левому атому становится легче передавать свою энергию атомам выведенным из положения равновесия. Правый же атом напротив, не имея поддержки левого постепенно

начинает замедляться, поэтому к нему и начинает приближаться левый атом. При $k = 3$ данная динамика сохраняется.

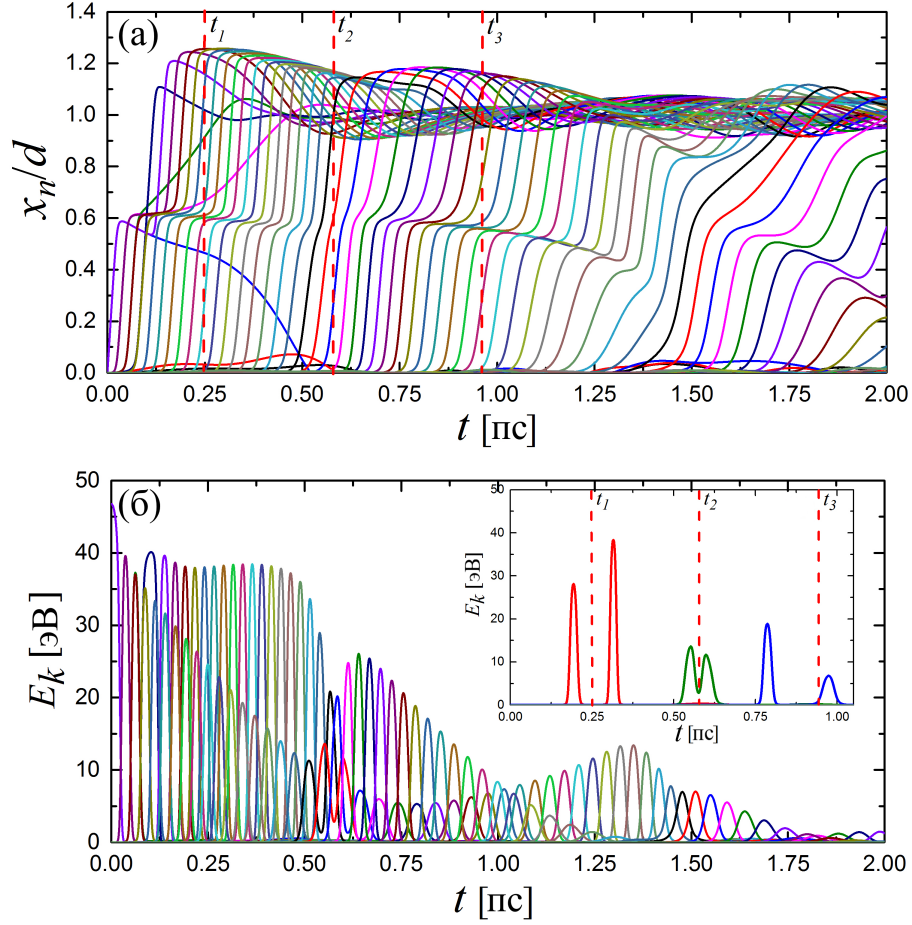


Рисунок 11 — Перемещения атомов (а) и кинетическая энергия (б) как функции времени при движении 2-краудиона, запущенного путем сообщения двум атомам плотноупакованного ряда скорости $V_x^0 = 68 \text{ \AA}/\text{пс}$, $k = 3$.

В ходе молекулярно-динамического моделирования 3,2-краудионов с начальной скоростью $60 \text{ \AA}/\text{пс}$ было выявлено, что вертикальная конфигурация 3,2-краудионов показывает себя наиболее устойчивой по сравнению с горизонтальной и диагональной конфигурациями (см. рис. 12). Степень неустойчивости зависит от расстояния между плотноупакованными рядами, где запущены 2-краудионы, в случае горизонтальной и диагональной конфигурации расстояние $S_d = S_h = d \approx 2.77185 \text{ \AA}$ меньше, чем в при вертикальной конфигурации $S_v = a = 3.92 \text{ \AA}$, следовательно в данных конфигурациях усиливается влияние соседних 2-краудионов друг на друга. Диагональная конфигурация имеет

нарушение симметрии, что является дополнительным фактором, влияющим на динамику распространения сверхзвуковых 3,2-краудионов.

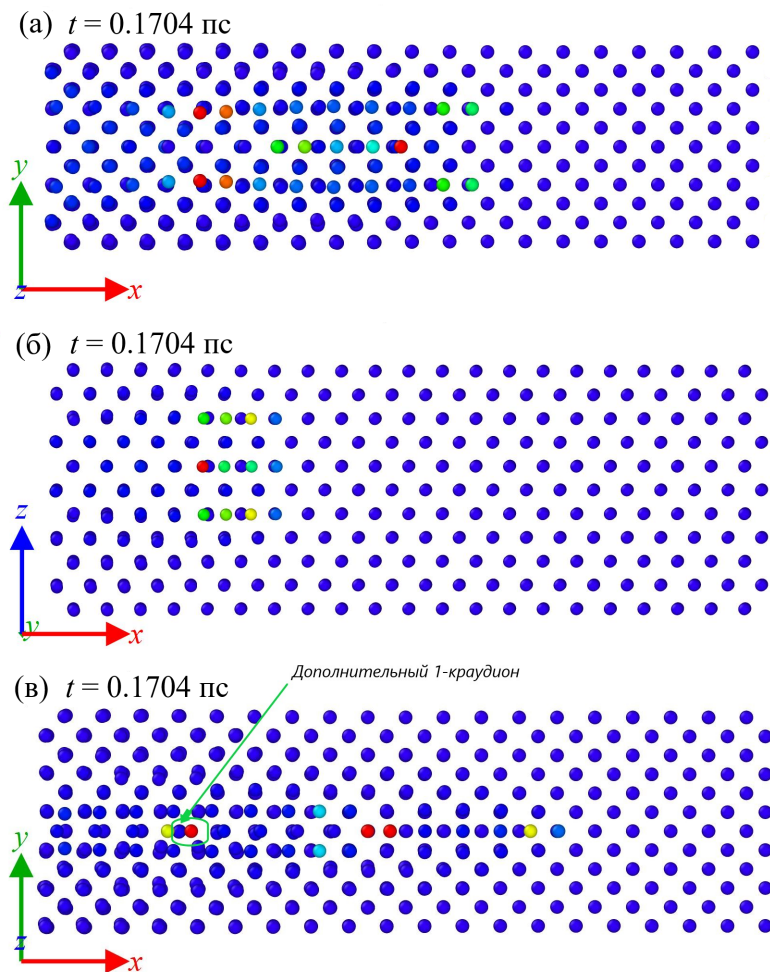


Рисунок 12 — Динамика исследуемых конфигураций кластеров сверхзвуковых 2-краудионов; (а) горизонтальная, (б) вертикальная, (в) диагональная конфигурации.

4. Движение атома в октаэдрическом канале.

Когда поверхность материала бомбардируется частицами высокой энергии, последние могут сталкиваться с поверхностными атомами и могут попадать в промежутки и каналы между атомами. Методом молекулярной динамики исследуется случай попадания атома в октаэдрический канал кристаллической решётки меди. Когда бомбардирующий атом находился близко к атомам октаэдрического канала, то есть при относительно больших начальных отклонениях

от центра канала, происходили заметные смещения атомов канала из их равновесных участков решетки. Последние приводят к возбуждению сверхзвуковых краудионов вдоль оси y , т.е. в кристаллографическом направлении плотной упаковки $\langle \bar{1}10 \rangle$, как показано на рисунке 13. При высоких начальных скоростях бомбардирующего атома могут образовываться множественные краудионы.

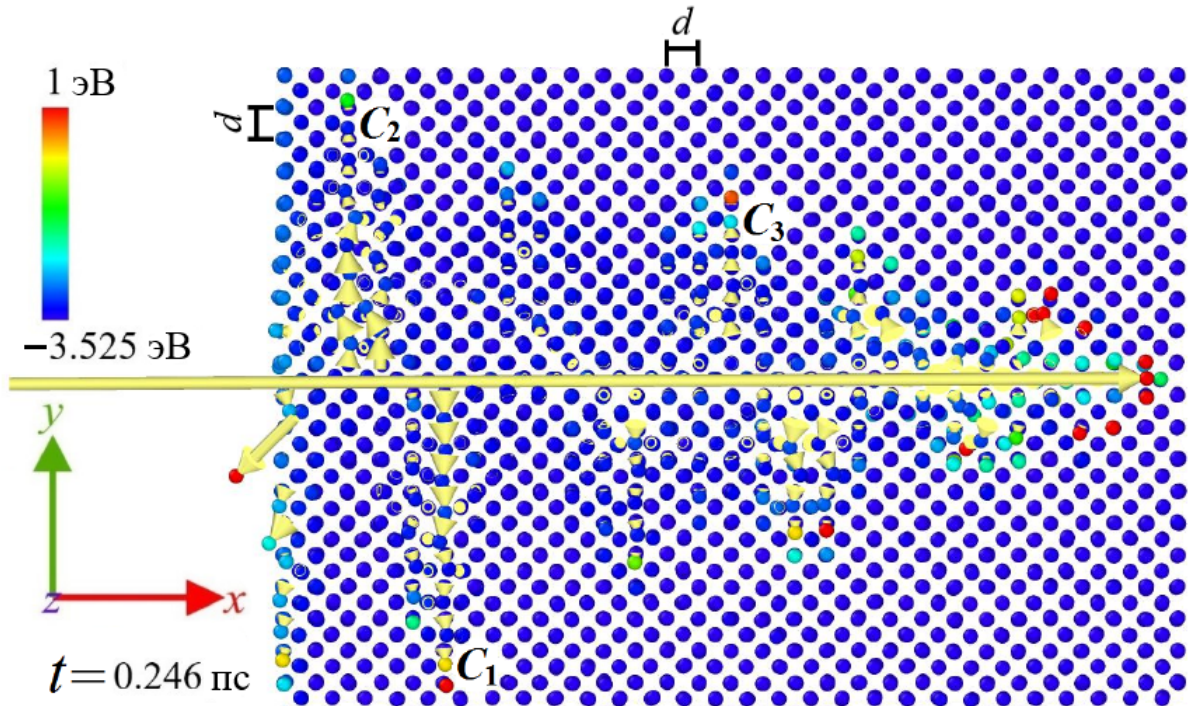


Рисунок 13 — Динамика бомбардирующего атома в ГЦК решётке меди вдоль октаэдрического канала, т.е. вдоль оси x (показана горизонтальной желтой стрелкой). Короткие желтые стрелки вдоль оси y демонстрируют направление движения возбужденных краудионов C_1 , C_2 и C_3 . Результаты представлены для момента времени $t = 0.246$ пс. Для этого конкретного случая, $V_x^0 = 450 \text{ \AA}/\text{пс}$ и $\Delta y = 0.3 \text{ \AA}$.

Образование краудионов в указанном кристаллографическом направлении было обусловлено тем, что для данной ориентации монокристалла эти плотноупакованные направления были наиболее благоприятными и оказались перпендикулярными вектору начальной скорости бомбардирующего атома. Средние скорости краудионов, обозначенных как C_1 , C_2 , C_3 на рисунке 13, составили 121.2 , 95.4 и $105.0 \text{ \AA}/\text{пс}$ соответственно. Скорость звука вдоль кристаллографического направления $\langle \bar{1}10 \rangle$ в ГЦК решётке меди, смоделированной с использованием межатомного потенциала, равна $38 \text{ \AA}/\text{пс}$, что позволяет нам утверждать, что возбуждаются сверхзвуковые краудионы.

Выводы

1. Рассчитаны длины их пробегов в зависимости от начальной скорости атомов для меди, никеля и алюминия. Продемонстрировано, что длина пробега 2-краудиона больше, чем у 1-краудиона. Наибольшая длина пробега наблюдалась в меди, а наименьшая в алюминии. Было успешно промоделировано возбуждение сверхзвуковых краудионов в биатомном плотноупакованном ряду структуры Ni_3Al . Обнаружена особенность заключающаяся в том, что сверхзвуковой краудион, где левым атомом является атом Ni распространяется дальше, чем краудион с левым атомом Al. Наблюдался солитоноподобный тип взаимодействия при моделировании столкновения сверхзвуковых 1- и 2-краудионами между собой.
2. При симуляции запуска сверхзвуковых краудионов в свинце установлено, что дальность распространения сверхзвуковых 2-краудионов в свинце больше, чем у сверхзвуковых 1-краудионов только при относительно низких скоростях распространения (см. рис. 8(а)), в то время как во всех других исследованных материалах 2-краудионы распространяются на большие расстояния в более широком диапазоне скоростей по сравнению с 1-краудионом (см. рис. 8(б) для никеля).
3. Смоделировано квазипериодическое движение сверхзвукового 2-краудиона в кристаллической решётке платины, определен принцип по которому проявляется данная динамика.
4. Методом молекулярной динамики инициированы сверхзвуковые 3,2-краудионы в структуре платины в ходе которого обнаружена более высокая устойчивость вертикальной конфигурации 3,2 -краудионов по сравнению с диагональной и горизонтальной конфигурацией в связи с зависимостью от расстояния между плотноупакованными рядами.
5. Исследована динамика бомбардирующего атома внутри октаэдрического канала в монокристалле ГЦК меди. При высоких начальных скоростях бомбардирующего атома возбуждались сверхзвуковые краудионы вдоль плотноупакованного $\langle \bar{1}10 \rangle$ направления, перпендикулярные вектору начальной скорости.

Основные публикации автора по теме диссертации

1. Scenarios of mass transfer in fcc copper: the role of point defects / A. M. Bayazitov [и др.] // IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng. — 2018. — т. 447. — с. 012040.
2. Breathing dynamics of 2-crowdions in platinum / A. M. Bayazitov [и др.] // Saratov Fall Meeting 2019: Computations and Data Analysis: from Nanoscale Tools to Brain Functions. т. 11459 / под ред. D. E. Postnov. — International Society for Optics, Photonics. SPIE, 2020. — 114590Z.
3. Features of mass transfer by N-crowdions in fcc Ni₃Al lattice / A. M. Bayazitov [и др.] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. т. 672. — IOP Publishing. 2019. — с. 012033.
4. Interaction of supersonic 2-crowdions in fcc platinum / A. M. Bayazitov [и др.] // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — 2020. — т. 1008, № 1. — с. 012068.
5. Моделирование сверхзвуковых N-краудионов в ГЦК металлах / А. М. Баязитов [и др.] // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. — 2020. — т. 17. — с. 155—160.
6. *Bayazitov A. M., Murzaev R. T., Bebikhov Y. V.* Effect of interatomic potentials on dynamics of supersonic 2-crowdions in tungsten // AIP Conference Proceedings. — 2022. — т. 2533, № 1.
7. Supersonic Motion of Atoms in an Octahedral Channel of fcc Copper / A. M. Bayazitov [и др.] // Materials. — 2022. — т. 15, № 20.
8. *Bayazitov A. M., Semenov A. S., Dmitriev S. V.* Simulation of the Dynamics of Supersonic N-Crowdions in fcc Lead and Nickel // Micro. — 2023. — т. 3, № 3. — с. 632—642.

Список литературы

1. Laser-Induced Keyhole Defect Dynamics during Metal Additive Manufacturing / A. M. Kiss [и др.] // *Advanced Engineering Materials*. — 2019. — т. 21, № 10. — с. 1900455.
2. Measurements of vacancy type defects in SPD deformed Ni / E. Korznikova [и др.] // *TMS Annual Meeting*. — 2006. — т. 2006. — с. 97—102.
3. Dynamic behaviors of body-centered cubic metals with ultrafine grained and nanocrystalline microstructures / Q. Wei [и др.] // *Materials Science and Engineering: A*. — 2008. — т. 493, № 1/2. — с. 58—64.
4. Shock waves in graphene and boron nitride / I. A. Shepelev [и др.] // *Computational Materials Science*. — 2020. — т. 177. — с. 109549.
5. Self-trapped interstitial-type defects in iron / D. A. Terentyev [и др.] // *Physical Review Letters*. — 2008. — т. 100, № 14. — с. 145503.
6. *Terentyev D. A., Malerba L., Hou M.* Dimensionality of interstitial cluster motion in bcc-Fe // *Physical Review B*. — 2007. — т. 75, № 10. — с. 104108.
7. *Zhang Z., Yabuuchi K., Kimura A.* Defect distribution in ion-irradiated pure tungsten at different temperatures // *Journal of Nuclear Materials*. — 2016. — т. 480. — с. 207—215.
8. Transport, dissociation and rotation of small self-interstitial atom clusters in tungsten / W. H. Zhou [и др.] // *Journal of Nuclear Materials*. — 2014. — т. 453, № 1—3. — с. 202—209.
9. *Granberg F., Byggmästar J., Nordlund K.* Molecular dynamics simulations of high-dose damage production and defect evolution in tungsten // *Journal of Nuclear Materials*. — 2021. — т. 556.
10. Investigating the formation mechanism of void lattice in tungsten under neutron irradiation: from collision cascades to ordered nanovoids / Z.-Z. Li [и др.] // *Acta Materialia*. — 2021. — т. 219.

11. Transmission electron microscopy study of hydrogen defect formation at extended defects in hydrogen plasma treated multicrystalline silicon / H. Nordmark [и др.] // Journal of Applied Physics. — 2009. — т. 105, № 3. — с. 033506.
12. *Paneth H. R.* The mechanism of self-diffusion in alkali metals // Phys. Rev. — 1950. — т. 80, № 4. — с. 708—711.
13. *Derlet P. M., Nguyen-Manh D., Dudarev S. L.* Multiscale modeling of crowdion and vacancy defects in body-centered-cubic transition metals // Physical Review B. — 2007. — т. 76, № 5. — с. 054107.
14. *Bhardwaj U., Sand A., Warriar M.* Graph theory based approach to characterize self interstitial defect morphology // Computational Materials Science. — 2021. — т. 195.
15. Ion-irradiation induced clustering in W-Re-Ta, W-Re and W-Ta alloys: An atom probe tomography and nanoindentation study / A. Xu [и др.] // Acta Materialia. — 2017. — т. 124. — с. 71—78.
16. Ion irradiation induced changes in defects of iron thin films: Electron microscopy and positron annihilation spectroscopy / K. Xu [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2019. — т. 526. — с. 151774.
17. Direct observation of the spatial distribution of primary cascade damage in tungsten / D. R. Mason [и др.] // Acta Materialia. — 2018. — т. 144. — с. 905—917.
18. Molecular dynamics simulation of the behavior of typical radiation defects under stress gradient field in tungsten / J. Fang [и др.] // Journal of Applied Physics. — 2021. — т. 130, № 12.
19. *Wang J., Hou Q., Zhang B. L.* Migration behavior of self-interstitial defects in tungsten and iron // Solid State Communications. — 2021. — т. 325.
20. Effect of collision cascades on dislocations in tungsten: A molecular dynamics study / B. Q. Fu [и др.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2017. — т. 393. — с. 169—173.

21. On the classification and quantification of crystal defects after energetic bombardment by machine learned molecular dynamics simulations / F. J. Domínguez-Gutiérrez [и др.] // Nuclear Materials and Energy. — 2020. — т. 22.
22. *Chartier A., Marinica M.-C.* Rearrangement of interstitial defects in alpha-Fe under extreme condition // Acta Materialia. — 2019. — т. 180. — с. 141—148.
23. Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and W-Re alloys / J. Fu [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2019. — т. 524. — с. 9—20.
24. Energetics, kinetics and dynamics of self-interstitial clusters in bcc tungsten / J. Wang [и др.] // Molecular Simulation. — 2019. — т. 45, № 8. — с. 666—671.
25. Electronic energy loss assessment in theoretical modeling of primary radiation damage in tungsten / F. Cheng [и др.] // International Journal of Modern Physics C. — 2021. — т. 32, № 10.
26. On the onset of void swelling in pure tungsten under neutron irradiation: An object kinetic Monte Carlo approach / N. Castin [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2017. — т. 493. — с. 280—293.
27. *Dudarev S. L., Ma P.-W.* Elastic fields, dipole tensors, and interaction between self-interstitial atom defects in bcc transition metals // Physical Review Materials. — 2018. — т. 2, № 3.
28. Ab initio study of the propagation of a supersonic 2-crowdion in fcc Al / E. A. Korznikova [и др.] // Computational Materials Science. — 2022. — т. 204. — с. 111125.
29. Perspectives on multiscale modelling and experiments to accelerate materials development for fusion / M. R. Gilbert [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2021. — т. 554.
30. *Ma P.-W., Mason D. R., Dudarev S. L.* Multiscale analysis of dislocation loops and voids in tungsten // Physical Review Materials. — 2020. — т. 4, № 10.
31. A multi-scale model for stresses, strains and swelling of reactor components under irradiation / S. L. Dudarev [и др.] // Nuclear Fusion. — 2018. — т. 58, № 12.

32. *Kosevich A. M., Kovalev A. S.* The supersonic motion of a crowdion. The one-dimensional model with nonlinear interaction between the nearest neighbours // *Solid State Commun.* — 1973. — т. 12. — с. 763.
33. *Fitzgerald S. P.* Structure and dynamics of crowdion defects in bcc metals // *Journal of Micromechanics and Molecular Physics.* — 2018. — т. 3, 03n04. — с. 1840003.
34. *Becquart C., Souidi A., Hou M.* Replacement collision and focuson sequences revisited by full molecular dynamics and its binary collision approximation // *Philosophical Magazine.* — 2005. — т. 85, 4–7 SPEC. ISS. — с. 409–415.
35. *Natsik V., Smirnov S.* Dislocations and crowdions in two-dimensional crystals. Part III: Plastic deformation of the crystal as a result of defect movement and defect interaction with the field of elastic stresses // *Low Temp. Phys.* — 2016. — т. 42, № 3. — с. 207–218.
36. *Starikov S. A., Kuznetsov A. R., Sagaradze V. V.* Crowdion in deformed fcc metal. Atomistic Modeling // *Physics of Metals and Metallography.* — 2021. — т. 122, № 12. — с. 1207–1212.
37. Long range annealing of defects in germanium by low energy plasma ions / J. Archilla [и др.] // *Physica D.* — 2015. — т. 297. — с. 56.
38. *Dmitriev S. V., Korznikova E. A., Chetverikov A. P.* Supersonic N-crowdions in a two-dimensional Morse crystal // *Journal of Experimental and Theoretical Physics.* — 2018. — т. 126, № 3. — с. 347–352.
39. Supersonic crowdion clusters in 2D Morse lattice / I. A. Shepelev [и др.] // *Physics Letters A.* — 2020. — т. 384, № 1. — с. 126032.
40. Highly Enhanced Transport by Supersonic N-Crowdions / S. V. Dmitriev [и др.] // *Physica Status Solidi (RRL)–Rapid Research Letters.* — 2017. — т. 11, № 12. — с. 1700298.
41. Low-energy channel for mass transfer in Pt crystal initiated by molecule impact / R. I. Babicheva [и др.] // *Computational Materials Science.* — 2019. — т. 163. — с. 248–255.
42. Features of mass transfer by N-crowdions in fcc Ni₃Al lattice / A. M. Bayazitov [и др.] // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* т. 672. — IOP Publishing. 2019. — с. 012033.

43. Highly efficient energy and mass transfer in bcc metals by supersonic 2-crowdions / I. A. Shepelev [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2022. — т. 568. — с. 153841.
44. Recent progress in research on tungsten materials for nuclear fusion applications in Europe / M. Rieth [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2013. — т. 432, № 1–3. — с. 482–500.
45. *Pintsuk G., Hasegawa A.* Tungsten as a Plasma-Facing Material // Comprehensive Nuclear Materials: Second Edition. — 2020. — т. 6. — с. 19–53.
46. *Abernethy R. G.* Predicting the performance of tungsten in a fusion environment: a literature review // Materials Science and Technology (United Kingdom). — 2017. — т. 33, № 4. — с. 388–399.
47. Present status of vanadium alloys for fusion applications / T. Muroga [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2014. — т. 455, № 1–3. — с. 263–268.
48. Development of coatings for fusion power applications / D. Smith [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2002. — т. 307–311, 2 SUPPL. — с. 1314–1322.
49. Relaxation volumes of microscopic and mesoscopic irradiation-induced defects in tungsten / D. R. Mason [и др.] // Journal of Applied Physics. — 2019. — т. 126, № 7.
50. Radiation damage in tungsten from cascade overlap with voids and vacancy clusters / A. Fellman [и др.] // Journal of Physics Condensed Matter. — 2019. — т. 31, № 40.
51. Annealing of radiation-induced defects in tungsten: Positron annihilation spectroscopy study / O. V. Ogorodnikova [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2019. — т. 517. — с. 148–151.
52. Irradiation effect on mechanical properties of tungsten from molecular dynamic simulation / L. Chen [и др.] // Materials Letters. — 2019. — т. 241. — с. 27–30.
53. Microstructural evolution of pure tungsten neutron irradiated with a mixed energy spectrum / T. Koyanagi [и др.] // Journal of Nuclear Materials. — 2017. — т. 490. — с. 66–74.

54. *Björkas C., Nordlund K., Dudarev S.* Modelling radiation effects using the ab-initio based tungsten and vanadium potentials // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. — 2009. — т. 267, № 18. — с. 3204–3208.
55. Interatomic potential for vanadium suitable for radiation damage simulations / S. Han [и др.] // Journal of Applied Physics. — 2003. — т. 93, № 6. — с. 3328–3335.
56. Unusual lattice dynamics of vanadium under high pressure / W. Luo [и др.] // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. — 2007. — т. 104, № 42. — с. 16428–16431.
57. *Kosevich Y.* Charged ultradiscrete supersonic kinks and discrete breathers in nonlinear molecular chains with realistic interatomic potentials and electron-phonon interactions // Journal of Physics: Conference Series. т. 833. — IOP Publishing. 2017. — с. 012021.
58. Grain boundary films in Al–Zn alloys after high pressure torsion / B. Straumal [и др.] // Scripta Materialia. — 2014. — т. 70. — с. 59–62.
59. *Straumal B., Korneva A., Zięba P.* Phase transitions in metallic alloys driven by the high pressure torsion // Archives of Civil and Mechanical Engineering. — 2014. — т. 14, № 2. — с. 242–249.
60. *Straumal B., Kilmametov A.R. and Kucheev Y. e. a.* Transformation of Hume-Rothery phases under the action of high pressure torsion // Jetp Lett. — 2014. — т. 100. — с. 376–379.
61. Tuning the magnetic properties of pure hafnium by high pressure torsion / C. Cepeda-Jiménez [и др.] // Acta Materialia. — 2017. — т. 123. — с. 206–213.
62. *Garber R. I., Fedorenko A. I.* Focusing of atomic collisions in crystals // Phys. Usp. — 1964. — т. 7, № 4. — с. 479–507.
63. Subsonic M,N-crowdions in 2D Morse crystal / E. A. Korznikova [и др.] // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. — 2018. — т. 447. — с. 012030.