

СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ЖЕЛЕЗЕ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ СЖАТИИ И РАСТЯЖЕНИИ. ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

*В. В. Стегайлов**, *А. В. Янилкин***

*Институт теплофизики экстремальных состояний
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт (государственный университет)
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 8 ноября 2006 г.

На основе молекулярно-динамического моделирования распространения ударной волны в направлении [100] в мишени, соответствующей ОЦК-монокристаллу железа, исследованы структурные превращения в областях сжатия и разгрузки и механизмы разрушения путем откола. Проанализированы особенности структурных превращений вблизи боковой поверхности мишени.

PACS: 62.20.Fe, 62.20.Mk, 62.50.+p, 83.10.Mj, 83.60.Uv

1. ВВЕДЕНИЕ

В связи с изучением процессов разрушения твердых тел в импульсных процессах возникает необходимость исследования структурных превращений на атомистическом уровне. Метод молекулярной динамики (МД) является эффективным инструментом для таких исследований [1–9]. В работе [1] были исследованы механизмы разрушения твердой пленки после воздействия фемтосекундного лазерного импульса в результате взаимодействия волн разгрузки в неоднородно нагретой мишени. Были проведены исследования структуры ударной волны в твердой фазе [2], плавления [3] и полиморфных превращений [4] при ударно-волновом нагружении. В работах [5, 6] и [10, 11] были исследованы механизмы образования несплошностей при сверхбыстром гидростатическом и одноосном растяжении кристаллов меди и железа.

В данной работе метод МД [12, 13] используется для исследования взаимодействия плоского ударника и мишени в рамках трехмерной модели: пла-

стических деформаций в ударной волне и в волне разгрузки, завершающихся формированием откола. Формулировка МД-модели имитирует постановку эксперимента [14–16]. Аналогичные МД-модели ударник–мишень рассматривались ранее преимущественно в рамках двумерных моделей [7–9].

Специфика рассматриваемых в работе процессов зарождения повреждений и разрушения заключается в очень коротких субнаносекундных временах действия нагрузки. При этом практически отсутствуют эффекты, связанные с взаимным влиянием отдельных участков нагружаемого тела. Известный кинетический подход к проблеме прочности твердых тел [17, 18] не может адекватно описать кинетику разрушения при малых временах долговечности (менее 10^{-5} с) [19].

В качестве материала ударника и мишени в данной работе рассматривается монокристаллическое железо с ОЦК-структурой. Имеется большой объем данных по фазовой диаграмме железа, известной своей сложностью [20]. В процессе ударно-волнового сжатия происходит полиморфное превращение α -фазы (ОЦК) в ϵ -фазу (ГПУ), которое начинается при давлении 13 ГПа на адиабате Гю-

*E-mail: stegailov@ihed.ras.ru

**E-mail: yanilkin@ihed.ras.ru

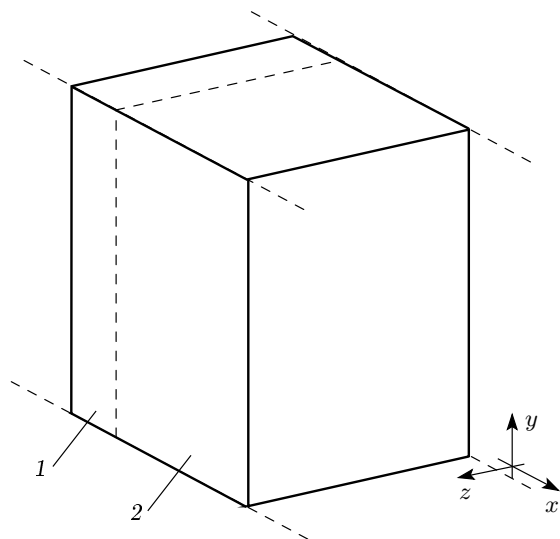


Рис. 1. Иллюстрация начальной конфигурации молекулярно-динамической модели: 1 — ударник, 2 — мишень. Движение атомов в направлении x ничем не ограничено. В случае модели в двумерных периодических граничных условиях (ПГУ) ПГУ применяются в направлениях y и z . В случае модели в одномерных ПГУ соответствующие граничные условия применяются только к граням расчетной ячейки в направлении z

гоию. Такое же давление α - ϵ -превращения получено в расчетах *ab initio* [21]. Вследствие возможности существования метастабильных состояний, скорость данного структурного превращения сильно зависит от давления [22].

Фазовая диаграмма и структурные превращения в железе при отрицательных давлениях изучены относительно мало. Так, в экспериментах по измерению откольной прочности не было зафиксировано области аномальной сжимаемости при отрицательных давлениях, предсказанной на основе расчетов *ab initio* [23]. Переход ОЦК-структуры твердого железа в ГЦК имеет место при растяжении, что было показано в расчетах *ab initio* [24] (для одноосного растяжения) и в МД-расчетах с использованием классических потенциалов межатомного взаимодействия [10, 11].

2. МОДЕЛЬ И МЕТОД РАСЧЕТА

Молекулярно-динамическая модель, рассматриваемая в данной работе, описывает взаимодействие ударника и мишени субмикронной толщины. Начальная конфигурация соответствует моменту соприкосновения налетающего со скоростью u_{imp} в

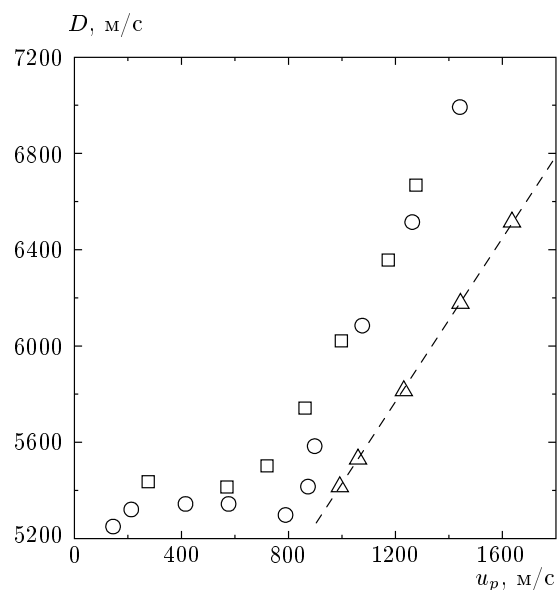


Рис. 2. Зависимость скорости распространения волны сжатия от массовой скорости частиц за фронтом волны. МД-расчет для направления удара [100]: □ — настоящая работа, ○ — МД-расчет [4], △ — экспериментальные результаты для поликристаллов [31]

направлении оси x ударника и неподвижной мишени (рис. 1). Ударник и мишень представляют собой монокристаллы с ОЦК-решеткой с ориентацией направления [100] вдоль оси x . Внешние поверхности ударника и мишени являются свободными (т. е. граничат с вакуумом).

В работе рассмотрены две модели, различающиеся граничными условиями в плоскости y - z , перпендикулярной оси удара. В разд. 3 рассмотрена модель в двумерных периодических граничных условиях (ПГУ) в направлениях y и z . Полные размеры рассмотренных модельных систем $300 \times 30 \times 30$, $800 \times 20 \times 20$ и $1200 \times 10 \times 10$ элементарных ОЦК-ячеек (в направлениях соответственно x , y и z). Данная модель описывает поведение вещества вдали от боковых поверхностей ударника и мишени. В разд. 4 рассмотрена модель, в которой периодические граничные условия наложены только в одном направлении z . Рассмотрены системы из $300 \times 100 \times 5$ и $900 \times 300 \times 5$ элементарных ячеек. В этом случае модель позволяет рассмотреть влияние боковой свободной поверхности (в направлении y) на процесс ударно-волновой деформации мишени. Соотношения размеров ударника и мишени в обоих случаях 1 : 3.

Для описания межатомного взаимодействия в железе используется многочастичный потенци-

ал погруженного атома (embedded atom method potential). Данное семейство потенциалов позволяет в рамках классической молекулярной динамики описать характер взаимодействия атомов в металлах на качественно лучшем уровне по сравнению с парными межатомными потенциалами (см. [7, 25, 26]). В данной работе используется потенциал 4, из предложенных в работе [27], обеспечивающий хорошее количественное согласие с широким набором экспериментальных и *ab initio*-данных для железа, включая постоянную решетки α -Fe для нескольких температур, модули упругости, энергии точечных дефектов, энергию ОЦК–ГЦК-перехода, плотность и структурный фактор жидкой фазы, температуру плавления.

Для формирования начальной конфигурации система предварительно приводится к состоянию равновесия при заданной температуре T_0 и нулевых значениях тензора напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$, $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$. После этого для каждого атома ударника к соответствующей тепловой скорости прибавляется скорость ударника \mathbf{u}_{imp} , направленная вдоль оси x . В результате взаимодействия ударника с мишенью возникает волна сжатия.

Для диагностики процесса распространения ударной волны система разбивалась на ячейки вдоль оси x , в каждой из которых вычислялись мгновенные усредненные значения массовой скорости \mathbf{u}_p , температуры T и тензора напряжений $\sigma_{\alpha\beta}$:

$$\mathbf{u}_p = \frac{1}{N_L} \sum_{i \in L} \mathbf{v}_i,$$

$$T = \frac{m}{3k_B N_L} \sum_{i \in L} (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}_p)^2,$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V_L} \sum_{i \in L} \left(m(v_{i\alpha} - u_{p\alpha})(v_{i\beta} - u_{p\beta}) - \sum_{j \neq i} (r_{i\alpha} - r_{j\alpha}) F_{ij\beta} \right),$$

где k_B — постоянная Больцмана, m — масса атома, \mathbf{r}_i и \mathbf{v}_i — координата и скорость i -го атома на текущем шаге интегрирования, N_L — число атомов в ячейке, V_L — объем ячейки L , \mathbf{F}_{ij} — сила, действующая на атом i со стороны атома j .

Для анализа структурных превращений и визуализации изменений кристаллической структуры в последовательные моменты времени для каждого атома рассчитываются число соседей K в

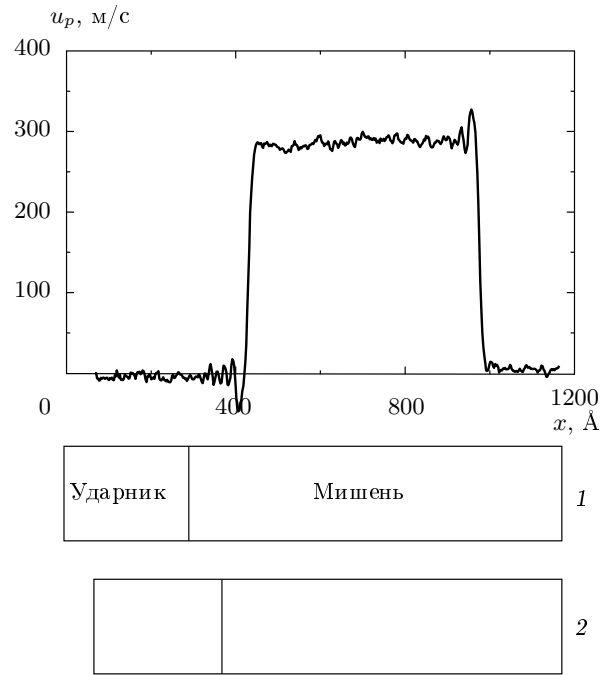


Рис. 3. Профиль массовой скорости вдоль направления распространения ударной волны через $t = 12$ пс после взаимодействия ударника с мишенью. Скорость ударника $u_{imp} = 560$ м/с, размер системы $400 \times 20 \times 20$ периодов решетки. Под графиком в соответствии с осью x схематично показаны положения границ системы ударник–мишень с вакуумом и их контактной поверхности в момент соударения $t = 0$ (1) и в момент $t = 12$ пс (2)

координационной сфере радиуса r_K и параметр симметричности локального окружения C [28, 29]. Удобно выбрать радиус координационной сферы $r_K = (r_2 + r_3)/2$, где r_2 и r_3 — расстояния до вторых и третьих ближайших соседей в исходной недеформированной ОЦК-решетке, что соответствует $K = 14$. Количественной мерой симметрии расположения относительно i -го атома соседних для него атомов служит параметр

$$C_i = \frac{\sum D_{im}}{\sum_n 2|\mathbf{d}_{in}|^2},$$

где \mathbf{d}_{in} — расстояние до n -го ближайшего соседа i -го атома, $|\mathbf{d}_{in}| \leq r_K$, $D_{im} = |\mathbf{d}_{in'} + \mathbf{d}_{in''}|$ соответствует m -й паре противоположащих ближайших соседей n' и n'' .

Расчеты выполнены с использованием пакета LAMMPS [30].

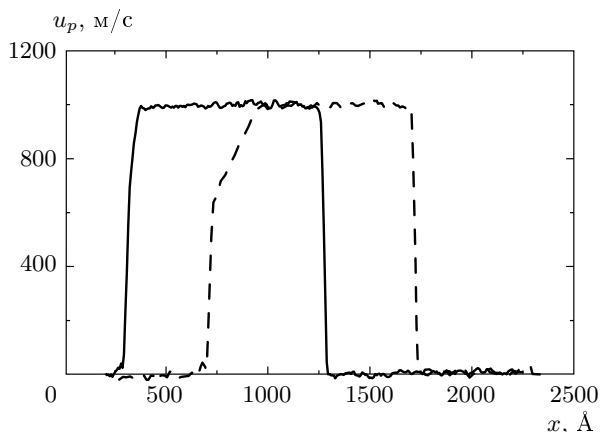


Рис. 4. Профили массовой скорости вдоль направления распространения импульса сжатия в два момента времени: сплошная линия — $t = 12$ пс, штриховая — $t = 20$ пс. Скорость ударника $u_{imp} = 1980$ м/с, размер системы $800 \times 10 \times 10$ периодов решетки

3. МОДЕЛЬ С ДВУМЕРНЫМИ ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

3.1. Волна сжатия

В данной модели ударник и мишень находятся в периодических граничных условиях вдоль поперечных направлений, моделируя бесконечные плоские пластины, поэтому распространение волн сжатия и разрежения имеет квазиодномерный характер. В начальный момент при столкновении ударника и мишени возникают две волны сжатия, распространяющиеся в противоположных направлениях. В результате отражения волны сжатия от свободной поверхности ударника возникает волна разрежения. Суперпозиция волн приводит к прямоугольному импульсу сжатия.

При небольших скоростях ударника u_{imp} и, соответственно, при низких массовых скоростях u_p волна сжатия распространяется со скоростью звука. С увеличением скорости ударника происходит увеличение скорости распространения импульса сжатия D . Полученная зависимость скорости D от u_p близка к линейной (рис. 2). Эта зависимость близка к данным, полученным в расчетах адиабаты Гюгонио с использованием другого потенциала межатомного взаимодействия [4], и несколько отличается от экспериментальных данных для поликристаллов [31].

При скорости ударника $u_{imp} = 560$ м/с и, соответственно, максимальном среднем напряжении

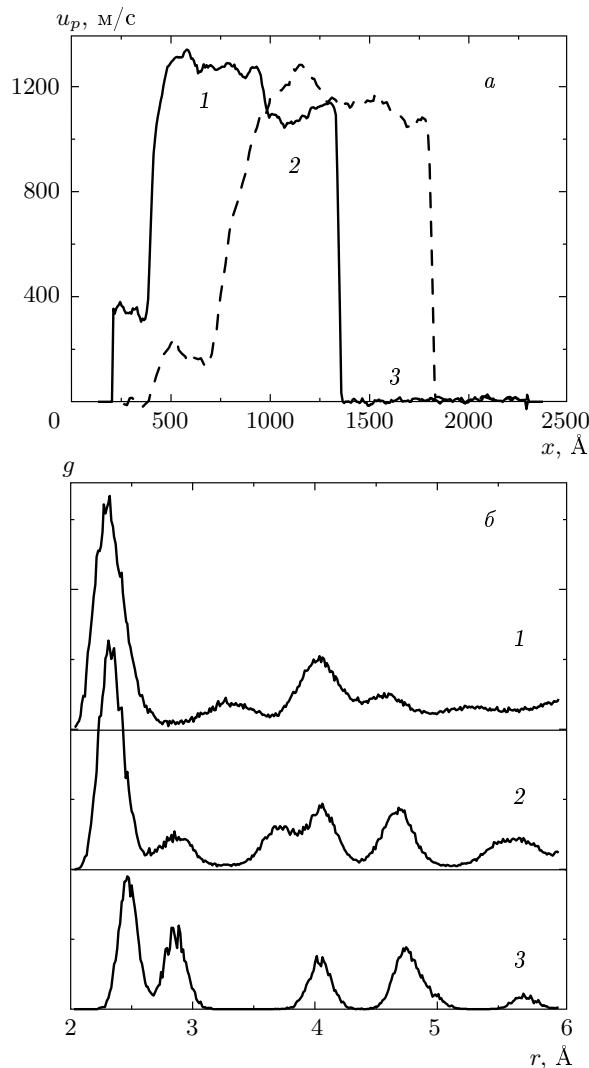


Рис. 5. а) Профили массовой скорости вдоль направления распространения ударной волны в два момента времени: сплошная линия — $t = 12$ пс, штриховая — $t = 20$ пс. На профиле массовой скорости в момент $t = 12$ пс цифрами отмечены области с различной структурой. Скорость ударника $u_{imp} = 2550$ м/с, размер системы $800 \times 10 \times 10$ периодов решетки. б) Соответствующие радиальные функции распределения $g(r)$ трех типов структур: 1 — образующаяся в волне сжатия плотноупакованная структура, 2 — деформированная ОЦК-решетка за фронтом ударной волны, 3 — недеформированная ОЦК-решетка

$\sigma_{xx} \approx 12$ ГПа импульс сжатия имеет прямоугольную форму с затухающими осцилляциями на переднем и заднем фронтах (рис. 3). Период этих осцилляций, вычисленный по профилю скорости задней

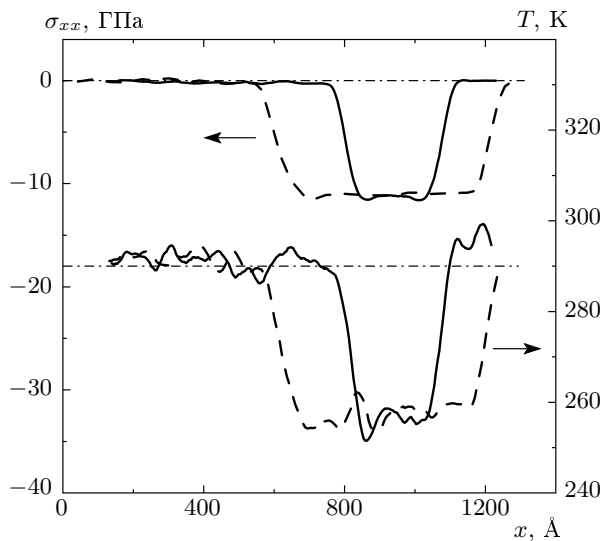


Рис. 6. Профили напряжения σ_{xx} и температуры вдоль направления распространения ударной волны в два момента времени: сплошная линия — $t = 24$ пс, штриховая — $t = 28$ пс. Скорость ударника $u_{imp} = 560$ м/с, размер системы $400 \times 20 \times 20$ периодов решетки

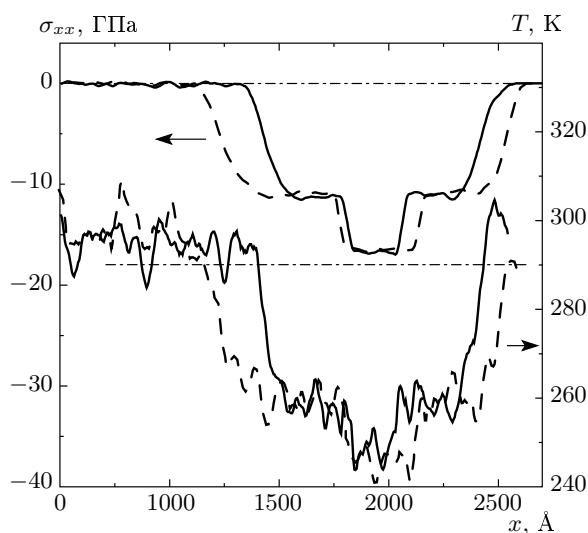


Рис. 7. Профили напряжения σ_{xx} и температуры вдоль направления распространения ударной волны в два момента времени: сплошная линия — $t = 52$ пс, штриховая — $t = 60$ пс. Скорость ударника $u_{imp} = 1130$ м/с, размер системы $800 \times 10 \times 10$ периодов решетки

поверхности, составляет примерно $\tau \approx 0.5$ пс. Подобная структура фронта ударной волны наблюдалась в структуре с ГЦК-решеткой и потенциалом взаимодействия Леннарда – Джонса [2].

С ростом интенсивности ударной волны (при больших скоростях ударника) осцилляции в структуре фронта волны сжатия пропадают. Начинает проявляться эффект размытия заднего фронта импульса сжатия, т. е. волны разгрузки, образовавшейся в результате отражения одной из ударных волн (левой) от свободной тыльной поверхности ударника (рис. 4).

При повышении интенсивности ударной волны до значений максимального среднего напряжения $\sigma_{xx} \approx 48$ ГПа происходит расщепление волны сжатия (рис. 5). Для рассмотренных в работе МД-моделей не было обнаружено зависимости указанного порогового значения σ_{xx} от размера системы. Образующаяся плотноупакованная структура представляет собой смесь двух структур с ГЦК- и ГПУ-решетками, что следует из анализа радиальной функции распределения для атомов в области образующейся фазы. Следует отметить, что различие по энергии между плотноупакованными ГЦК- и ГПУ-фазами не может быть хорошо описано в рамках формализма потенциала погруженного атома [4], поэтому относительное количество ГЦК- и ГПУ-фаз может не иметь смысла по отношению к эксперименту. Экспериментальное значение давления, при котором начинается переход в плотноупакованную фазу, в железе равно 13 ГПа. Можно указать две возможных причины различия экспериментального значения критического давления 13 ГПа и величины критического напряжения в МД-модели 48 ГПа. Как было отмечено в работе [4], причиной такого расхождения может быть, вообще говоря, плохое описание используемым потенциалом межатомного взаимодействия кривой холодного сжатия ОЦК-решетки. Однако это не имеет места для используемого в данной работе потенциала [27], при разработке которого учитывались результаты расчетов *ab initio* нулевой изотермы и энергия ОЦК–ГЦК-перехода. В данном случае вероятной причиной может быть возможность существования пересжатого метастабильного состояния ОЦК-решетки в ударно сжатом веществе [22]. Относительно маленький размер МД-системы может приводить к тому, что нуклеационный процесс образования новой плотноупакованной фазы может не успевать начаться за время прохождения волны сжатия по мишени. Лишь при больших интенсивностях ударной волны

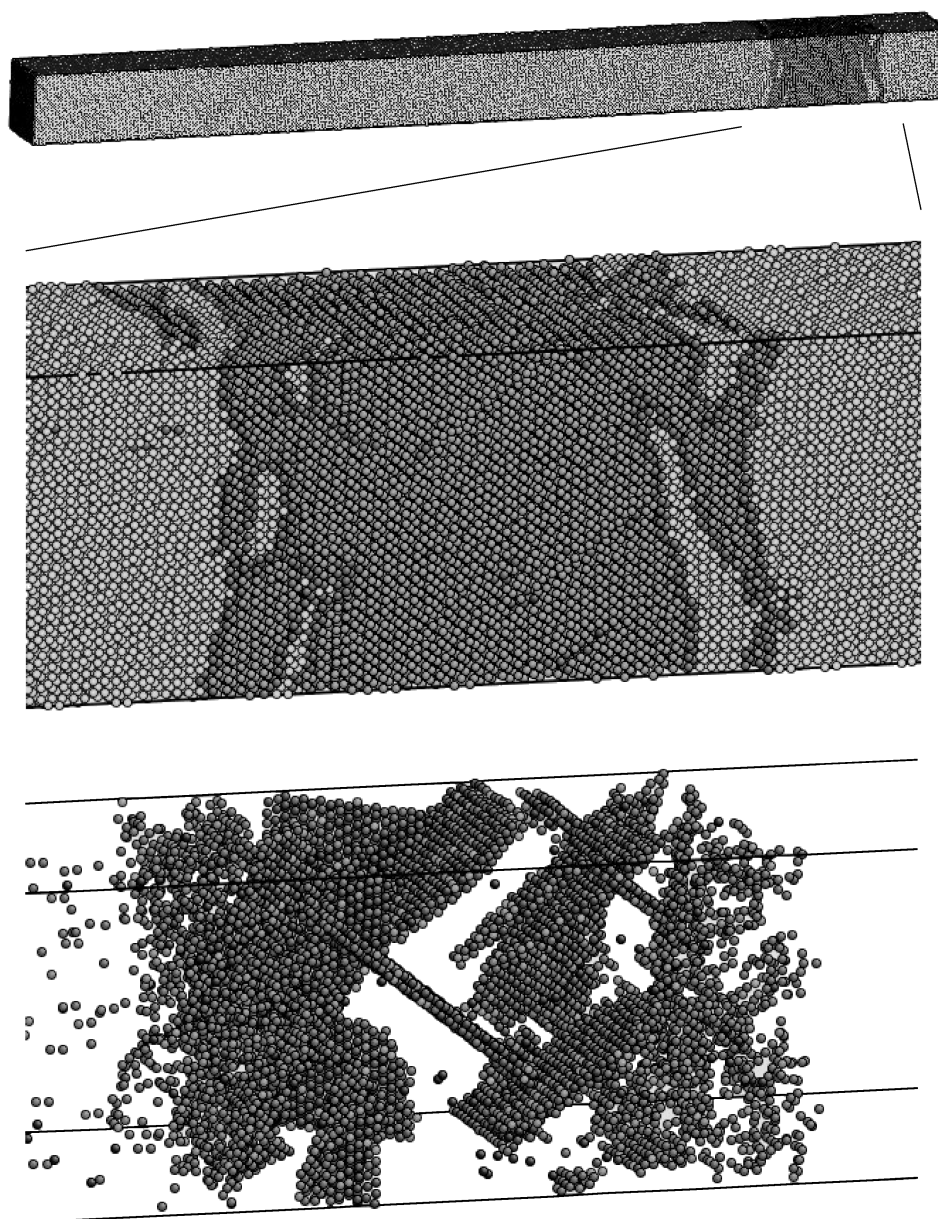


Рис. 8. Сверху показана вся расчетная МД-ячейка в момент прохождения волны разрежения. Атомы раскрашены соответственно координационному числу ($r_K = 3.1 \text{ \AA}$): светлые — ОЦК-структура ($K = 14$), темные — плотноупакованная структура ($K = 12$). Среднее и нижнее изображения показывают область структурного превращения более подробно. На нижнем изображении показаны только атомы с нарушенной симметрией локального окружения $C > 0.04$. Скорость ударника $u_{imp} = 1130 \text{ м/с}$, размер системы $400 \times 30 \times 30$ периодов решетки

и соответствующих высоких степенях метастабильности пересжатой ОЦК-фазы скорость образования плотноупакованной фазы становится настолько большой, что переход успевает развиваться за время расчета.

3.2. Волна разгрузки

При выходе волны сжатия на свободную поверхность формируется волна разрежения, распространяющаяся в противоположном направлении. После прохождения половины длины исходного импульса возникают растягивающие напряжения. При неболь-

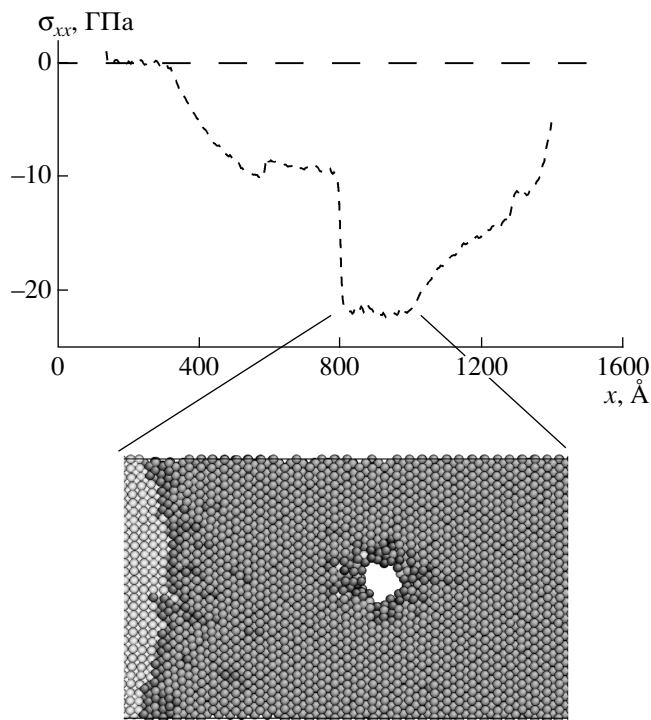


Рис. 9. Профиль напряжения σ_{xx} в волне разрежения. Показана структура части расчетной ячейки, соответствующая стрелке на профиле напряжения. При этом для визуализации появления полости на рисунке показан срез структуры в расчетной ячейке в плоскости $x-y$ толщиной 10 Å. Раскраска по координационному числу (см. рис. 8). Скорость ударника $u_{imp} = 1700$ м/с, размер системы $400 \times 30 \times 30$ периодов решетки

ших скоростях ударника в начале импульс растяжения имеет прямоугольную форму (рис. 6). При этом волна разрежения распространяется как упругая волна, не происходит никаких структурных превращений. Поскольку скорость упругой волны падает с уменьшением плотности, волны с меньшим растяжением распространяются быстрее волн с большим растяжением и происходит размытие импульса.

Структура фронта волны изменяется при напряжениях больших $\sigma_{xx} = -12$ ГПа (рис. 7). При этом происходит расщепление волны разрежения. Фронт первой волны соответствует упругой части. Фронт второй волны представляет собой резкий скачок давления и плотности на расстоянии порядка нескольких периодов решетки, который движется со скоростью меньшей скорости звука. Во фронте второй волны происходит быстрый структурный переход из деформированной ОЦК- в ГЦК-структуру (рис. 8),

которая возникает в результате растяжения вдоль направления [100] исходной ОЦК-решетки и образуется из исходной структуры в результате послойного превращения мартенситного типа [10]. Аналогичный переход ОЦК- в ГЦК-фазу при одноосном растяжении в железе был проанализирован в расчетах *ab initio* [24].

Образующаяся ГЦК-структура не является устойчивой и в ней образуются плоскости сдвига (рис. 8). Структурное превращение ОЦК в ГЦК практически не зависит от параметров модели: длины импульса и поперечных размеров системы. Образование плоскостей сдвига, требующее послойного смещения атомов, напротив, зависит от поперечного размера (принимая во внимание ПГУ) и времени действия растягивающего импульса.

Возникающие неоднородности (в особенности, пересечения плоскостей сдвига) могут служить центрами гетерогенного образования несплошностей и зародышей микротрещин [10]. В данной модели, однако, откол происходит при напряжении $\sigma_{xx} = -22$ ГПа в результате гомогенного образования микропор (рис. 9). При меньших значениях растягивающих напряжений в волне разгрузки не наблюдалось необратимых структурных превращений. После прохождения растягивающего импульса ГЦК-решетка трансформировалась обратно в ОЦК-структуру, практически не содержащую дефектов.

4. МОДЕЛЬ С ОДНОМЕРНЫМИ ПЕРИОДИЧЕСКИМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

Для исследования влияния свободной боковой поверхности была построена модель, в которой вдоль поперечного направления y не используются периодические граничные условия, благодаря чему возможна релаксация свободных поверхностей мишени в этом направлении (вдоль направления z использовались периодические граничные условия). На рис. 10 показан пример расчета для системы из 2.7 млн. атомов в основной расчетной ячейке.

На рисунке показан момент, когда волна сжатия отразилась от свободной поверхности и обратно распространяется волна разрежения. В большей части мишени волна сжатия практически ничем не отличается от случая, когда используется модель с двумерными периодическими граничными условиями при той же скорости ударника. Различие возникает на периферии, где возможна поперечная релаксация. Разница напряжений вдоль направления удара и нормальной составляющей к поверхности ока-

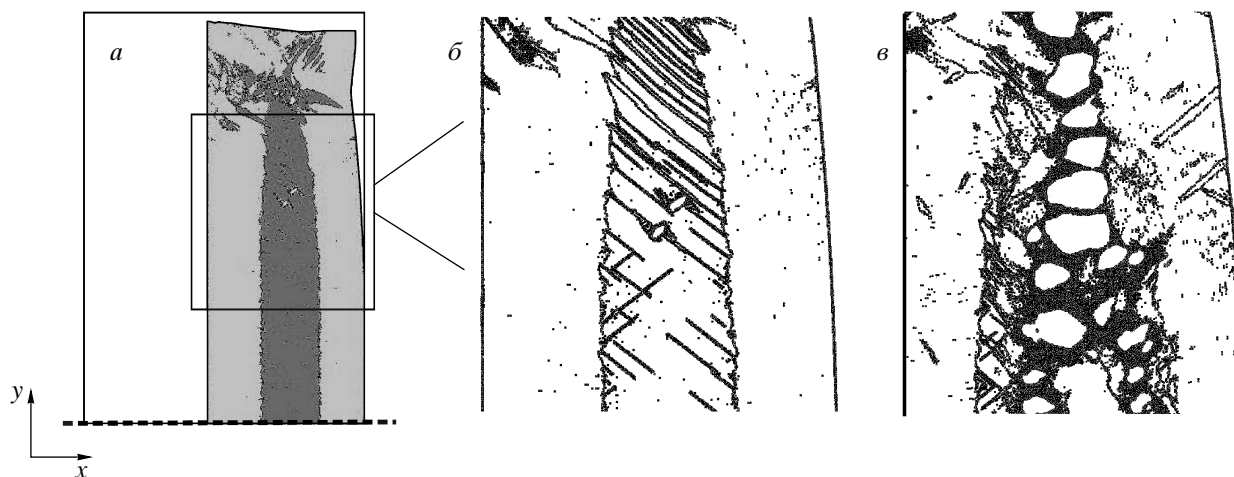


Рис. 10. Структурные превращения в модели ударник–мишень со свободными боковыми границами в направлении y (показана верхняя правая четверть расчетной ячейки, симметричная нижней части): a — структура волны разрежения в момент начала образования несплошностей (раскраска атомов, как на рис. 8, штриховой линией показана плоскость симметрии модели); b — увеличена область расчетной ячейки, близкая к свободной боковой поверхности мишени (показаны только атомы с нарушенной симметрией локального окружения $C > 0.04$); c — развитие откола через 5 пс после момента, соответствующего a и b . Скорость ударника $u_{imp} = 1400$ м/с, полный размер системы $900 \times 300 \times 5$ периодов решетки (2.7 млн. атомов)

зывается очень высокой, что приводит к существенной деформации. На рис. 10б она показана темными пятнами. При возникновении отрицательных напряжений происходит расщепление волны разрежения в результате структурного превращения растянутой ОЦК-решетки в ГЦК. Это превращение происходит в большей части мишени, за исключением периферии, где в результате прохождения волны сжатия исходная структура потеряла однородность. Потеря однородности на периферии критически сказывается на устойчивости кристаллической структуры. В этой области при возникновении растягивающих напряжений происходит зарождение полостей на неоднородностях кристаллической решетки. В центральной части образование полостей происходит позже, поскольку она является более однородной. Однородность нарушают возникающие в волне разгрузки в образующейся ГЦК-структуре плоскости сдвига. Образование областей сдвига происходит с границы раздела двух фаз (деформированной ОЦК и ГЦК), с продвижением границы происходит их рост, причем плоскости сдвига в начальный момент образуются ближе к периферии и только позже в центральной части мишени. Эти неоднородности являются центрами образования полостей (рис. 10в). Далее происходит рост полостей и слияние в единую отколную трещину.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Молекулярно-динамическая модель распространения ударной волны в мишенях субмикронной толщины из монокристаллического железа описывает структурные превращения в волне сжатия (α - ϵ -переход) и в отраженной волне разрежения (ОЦК-ГЦК-переход).

Результаты расчетов свидетельствуют о существенной роли метастабильных состояний при переходе в плотноупакованную фазу в волне сжатия. В частности, различие пороговых напряжений α - ϵ -перехода в эксперименте и в МД-модели объясняется кинетикой распада пересжатой метастабильной ОЦК-фазы.

Показано, что в волне разрежения большой интенсивности ($\sigma_{xx} < -12$ ГПа) происходят переход растянутой ОЦК-решетки в ГЦК-структуру и соответствующее расщепление волны разгрузки. Образование несплошностей, приводящих к отколу, начинается как гетерогенный процесс на плоскостях сдвига, появляющихся в области ГЦК-структуры. При напряжениях в волне разрежения $\sigma_{xx} < -22$ ГПа образование пор может проходить по механизму гомогенной нуклеации (в эксперименте по отколу в монокристаллах железа достигнуты отрицательные давления меньше или порядка -10 ГПа [23]).

Высокие скорости развития процесса откола определяют локальность процесса образования несплошностей. В частности, сильная деформация вблизи свободной боковой поверхности мишени несущественна по отношению к структурным превращениям в центральной части мишени.

Авторы выражают признательность Г. И. Канелю за полезные обсуждения и интерес к данной работе. Расчеты выполнены в МСЦ РАН и на вычислительном кластере ФМБФ МФТИ, предоставленном Немецкой службой академических обменов (DAAD). В. В. С. благодарит за поддержку Фонд некоммерческих программ «Династия». Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 04-02-17065, 05-08-65423), в рамках программ фундаментальных исследований РАН № 3 (разд. 2) и № 14 (разд. 1) и проекта РНП.2.1.1.712 аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы (2006–2008 годы)».

ЛИТЕРАТУРА

- С. И. Анисимов, В. В. Жаховский, Н. А. Иногамов, К. Нишихара, А. М. Опарин, Ю. В. Петров, Письма в ЖЭТФ **77**, 731 (2003).
- V. V. Zhakhovskii, S. V. Zybin, K. Nishihara, and S. I. Anisimov, Phys. Rev. Lett. **83**, 1175 (1999).
- A. V. Belonoshko, Science **275**, 955 (1997).
- K. Kadau, T. C. Germann, P. S. Lomdahl, and B. L. Holian, Phys. Rev. B **72**, 064120 (2005).
- J. F. Belak, J. Computer-Aided Mater. Design **5**, 193 (1998).
- R. E. Rudd and J. F. Belak, Comput. Mater. Sci. **24**, 148 (2002).
- N. J. Wagner, B. L. Holian, and A. F. Voter, Phys. Rev. A **45**, 8457 (1992).
- W. C. Morrey and L. T. Wille, Comput. Mater. Sci. **10**, 432 (1998).
- А. М. Кривцов, ФТТ **46**, 1025 (2004).
- Г. Э. Норман, В. В. Стегайлов, А. В. Янилкин, ДАН **404**, 757 (2005).
- Г. Э. Норман, В. В. Стегайлов, А. В. Янилкин, ТВТ **45**, № 2 (2006).
- M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Clarendon Press, Oxford (1989).
- А. А. Валуев, Г. Э. Норман, В. Ю. Подлипчук, в сб. *Математическое моделирование. Физико-химические свойства вещества*, под ред. А. А. Самарского и Н. Н. Калиткина, Наука, Москва (1989), с. 5.
- Г. И. Канель, С. В. Разоренов, А. В. Уткин, В. Е. Фортов, *Ударно-волновые явления в конденсированных средах*, Янус-К, Москва (1996).
- T. Antoun, L. Seaman, D. R. Curran, G. I. Kanel, S. V. Razorenov, and A. V. Utkin, *Spall Fracture*, Springer, New York (2003).
- Д. Батани, В. И. Вовченко, Г. И. Канель, А. В. Кильпио, И. К. Красюк, И. В. Ломоносов, П. П. Пашинин, А. Ю. Семенов, В. Е. Фортов, В. Е. Шашков, ДАН **389**, 328 (2003).
- В. Регель, А. Слуцкер, Э. Томашевский, *Кинетическая природа прочности твердых тел*, Наука, Москва (1974).
- И. И. Новиков, В. А. Ермишкин, *Физическая механика реальных материалов*, Наука, Москва (2003).
- Б. Л. Глушак, В. Ф. Куропатенко, С. А. Новиков, *Исследование прочности материалов при динамических нагрузках*, Наука, Новосибирск (1992).
- А. И. Фунтиков, ТВТ **41**, 954 (2003).
- K. J. Caspersen, A. Lew, M. Ortiz, and E. A. Carter, Phys. Rev. Lett. **93**, 115501 (2004).
- J. C. Boettger and D. C. Wallace, Phys. Rev. B **55**, 2840 (1997).
- С. В. Разоренов, Г. И. Канель, В. Е. Фортов, Письма в ЖЭТФ **80**, 395 (2004).
- D. M. Clatterbuck, D. C. Chrzan, J. W. Morris Jr., Acta Mater. **51**, 2271 (2003).
- M. S. Daw and M. I. Bases, Phys. Rev. B **29**, 6443 (1984).
- Д. К. Белашенко, *Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ*, МИСиС, Москва (2005).
- M. I. Mendeleev, S. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun, and M. Asta, Phil. Mag. **83**, 3977 (2003).
- C. L. Kelchner, S. J. Plimpton, and J. C. Hamilton, Phys. Rev. B **58**, 11085 (1998).
- J. Li, Modelling Simulation Mater. Sci. Eng. **11**, 173 (2003).
- S. J. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
- J. M. Brown, J. N. Fritz and R. S. Hixson, J. Appl. Phys. **88**, 5496 (2000).