

ОПИСАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО Al ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.Ю. Куксин, Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов, А.В. Янилкин

*Объединенный институт высоких температур РАН, Москва
Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный*

Аннотация

В работе представлена кинетическая модель разрушения при высокоскоростном растяжении, основанная на данных молекулярно-динамических расчетов о скорости зарождения полостей и скорости их роста. Кинетические параметры для модели как функции степени растяжения и температуры получены путем усреднения по наборам молекулярно-динамических траекторий. В рамках модели погруженного атома для межатомного взаимодействия в алюминии установлено, что а) процесс разрушения монокристаллического алюминия в области температур, близких к температуре плавления, состоит из локального гомогенного плавления и дальнейшего образования и роста полости внутри расплава; б) среди возможных механизмов роста полости аморфизация решетки преобладает над ростом за счет формирования плоскостей сдвига. На основе развитой модели проведен расчет динамической откольной прочности Al. Сравнение с экспериментальными данными показало хорошее согласие при температуре около 900 К, ухудшающееся с понижением температуры.

MODEL OF Al CRYSTAL FRACTURE UNDER HIGH-RATE STRAIN BASED ON MOLECULAR-DYNAMIC SIMULATIONS

The kinetic model of fracture under high-rate strain based on the results of molecular dynamic (MD) simulations is presented. Kinetic parameters for the model as functions of strain and temperature are obtained via statistical averaging over sets of multiple MD runs of (a) void nucleation in a crystal and (b) void growth under stretching. Within the EAM model of single crystal Al at the temperature close to the melting point it is shown that: (a) the void formation is a two-stage process of crystal homogeneous melting and further cavitation in the melt formed; (b) lattice amorphisation predominates over dislocations emission in the mechanism of the void growth. With the help of the model developed dynamic spall strength of the defect free Al crystal is calculated. While the good agreement with the experimental data is observed in the high-temperature region, it becomes worse when temperature decreases. This fact could manifest the increasing role of defects.

1. ВВЕДЕНИЕ

Высокие давления и температуры, возникающие в ходе высокоскоростного деформирования, доступного в ударных волнах и волнах разрежения, позволяют получать и изучать широкий спектр метастабильных состояний вещества. Сопряженные с ними проблемы предсказания времени жизни вещества в таких состояниях и прочности материалов важны с точки зрения практического использования и широко изучаются теоретически, экспериментально и с помощью численного моделирования [1–5].

В данной работе изучаются механизм и кинетика разрушения монокристаллических металлов при повышенных температурах, динамическая откольная прочность в таких условиях. В ходе быстрого процесса растяжения материал достигает отрицательное давление ниже величины $p_{melt}(T)$, соответствующей линии плавления. Это эквивалентно перегреву. Предметом особого интереса является влияние плавления на сопротивление разрушению.

Молекулярно-динамические расчеты позволили детально проследить механизмы роста пор на микроуровне, рассчитать кинетические характеристики их появления и скорости роста. Полученные таким образом кинетические зависимости составляют основу предлагаемой модели разрушения, относящейся к моделям типа нуклеации и роста несплошностей (NAG, nucleation and growth) [5].

При молекулярно-динамическом моделировании алюминий описывается в рамках модели погруженного атома (EAM, embedded atom method). В основном используется потенциал межатомного взаимодействия [6], проводится сопоставление с данными, полученными при использовании потенциала [7]. Они оба достаточно хорошо воспроизводят упругие постоянные, энергии образования дефектов решетки и поверхности.

Большинство расчетов проведено с помощью молекулярно-динамической программы LAMMPS [8].

2. ГОМОГЕННОЕ ЗАРОЖДЕНИЕ ПОЛОСТЕЙ

При моделировании зарождения полостей проводились расчеты двух типов: а) всестороннее растяжение расчетной ячейки с кристаллом с постоянной скоростью деформирования; б) ожидание спонтанного возникновения полостей в растянутом образце при фиксированном объеме расчетной ячейки. В обоих случаях зарождение полости в однородном кристалле происходило в результате локальной флуктуации плотности.

При температуре, близкой к температуре плавления, в кристалле наблюдается высокий уровень флуктуаций параметра порядка, что в результате приводит к локальному расплавлению решетки. Образовавшийся зародыш жидкой фазы начинает медленно расти, однако внешние условия таковы, что жидкость является менее прочной, чем кристалл, что в конечном итоге приводит к тому, что полость зарождается в жидкой

фазе. Таким образом, в области высоких температур можно выделить два этапа в процессе появления полостей: плавление и кавитация.

Зарождение полости в кристаллической фазе не происходит, по-видимому, из-за того, что флуктуации плотности в кристалле при таких параметрах еще малы. Действительно, спиноподобная кристаллической фазы в смысле $(\partial p/\partial \rho)_T = 0$ не достигается, граница устойчивости кристалла обусловлена в этом случае плавлением.

В области низких температур жидкость становится нестабильной значительно раньше кристалла, благодаря чему локальное разупорядочение решетки сопровождается большим изменением плотности. В результате сопряженных флуктуаций параметра порядка и плотности происходит зарождение полости размера, достаточного для ее дальнейшего роста. Типичный размер полости, способной расти, наблюдавшийся при моделировании, составляет несколько постоянных решеток.

Частота зарождения полости J (определение, а также примеры расчета из теоретических и экспериментальных данных можно найти в [9]) рассчитывается с помощью методики статистического усреднения времени жизни метастабильного кристалла. Подробности методики изложены в [10,11]. Время жизни кристаллической структуры до ее распада (формирования сверхкритической полости или расплава) усредняется по ансамблю независимых начальных микросостояний, соответствующих однородному кристаллу при фиксированных степени растяжения и температуре. Зародышеобразование сопровождается заметным быстрым изменением температуры. Таким образом, время жизни для одной молекулярно-динамической траектории совпадает с длительностью стационарного участка траектории. Частота нуклеации рассчитывается как $J = 1/(N\tau)$, где N – число частиц в системе и τ – среднее время жизни.

С помощью вышеописанной процедуры определяется частота появления полости в однородном кристалле при фиксированных температуре T и степени растяжения, задаваемой либо плотностью ρ , либо постоянной решетки a , либо давлением p . На рис. 1 показана частота гомогенной нуклеации $J(a, T)$ в логарифмическом масштабе в зависимости от постоянной решетки для четырех значений температуры. Типичная величина времени жизни варьируется от 10^0 до 10^3 пс. Наклон кривых практически не зависит от температуры в области высоких температур, применима линейная зависимость: $\log J/J_0 = A(a - a_{lim})$. В этом случае A – постоянная, а $a_{lim}(T)$ описывает температурный сдвиг кинетической границы устойчивости. Обработка данных в области высоких температур дает $A = 66.53 \text{ \AA}^{-1}$ и $a_{lim}(T) = 4.538 - 0.000218 \times T$ (в \AA).

Можно отметить, что наклон изотермы $T = 300 \text{ K}$ значительно отличается от наклона кривых при высоких температурах. В области низких температур предельное значение на границе устойчивости $a_{lim}(T)$ слабо меняется с температурой (сравни точки при 300 и 700 K). Это согласуется с общей тенденцией кинетической границы устойчивости идеального кристалла к постоянной величине плотности с понижением температуры, наблюдающейся в МД расчетах как для алюминия, так и для системы с потенциалом межчастичного взаимодействия Леннарда–Джонса [12,13].

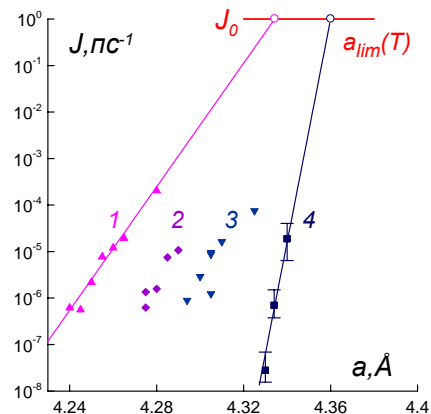


Рис. 1. Изотермы скорости гомогенной нуклеации $J(a)$: 1 - 935, 2 - 800, 3 - 700, 4 - 300 K.

3. РОСТ ПОЛОСТЕЙ

При изучении закономерностей кинетики роста полостей в большинстве расчетов полость создавалась в кристаллической системе искусственно. Для использованных в данной работе потенциалов межчастичного взаимодействия алюминия наблюдается, что рост полости в монокристалле Al происходит за счет аморфизации кристаллической решетки вокруг растущей поры. Наблюдаются также варианты, когда рост происходит в некоторых определенных направлениях, тогда аморфизация происходит у фронта растущей полости. Типичные микроструктуры показаны на рис. 2а-с. Показан тонкий срез расчетной ячейки. Атомы, локальное окружение которых соответствует ГЦК структуре (определялось по величине параметра центральной симметрии [14]) не показаны. В то время, как при 300 и 700 K образующиеся дислокационные петли распространяются далеко от полости (рис. 2а,б), при 935 K дислокации вообще не образуются (рис. 2с).

Аморфизация на поверхности полости особенно активно происходит на стыках растущих дислокаций. Рост аморфной фазы происходит быстро, что приводит к тому, что дислокационные петли все больше удаляются от поверхности полости (рис. 2а). Это и приводит к значительной роли аморфизации в процессе роста, увеличивающейся с ростом температуры.

Даже при низкой температуре (300 K) появление дислокаций мало сказывается на росте полости, что отличается от ситуации, выявленной при молекулярно-динамическом моделировании в меди [3,4]. В то время как типичные времена, размеры полостей, тип возникающих дислокаций в обоих случаях одинаковы, изначально сферическая полость приобретает в меди форму восьмигранника, ориентация которого определяется кристаллической решеткой. Полости же, образующиеся в алюминии, имеют различную форму, зачастую далекую от октаэдрической.

Опишем теперь схему расчета скорости роста полости. Первая стадия – это вывод на равновесие кристалла без полости, далее происходит вырезание полости небольшого размера (диаметром около трех периодов решетки, т.е. примерно 12 \AA). На второй стадии происходит рост полости. В процессе роста полости происходит релаксация напряжений и нагрев системы вследствие диссипации энергии, выделившейся за счет разрыва связей при образовании новой поверхности.

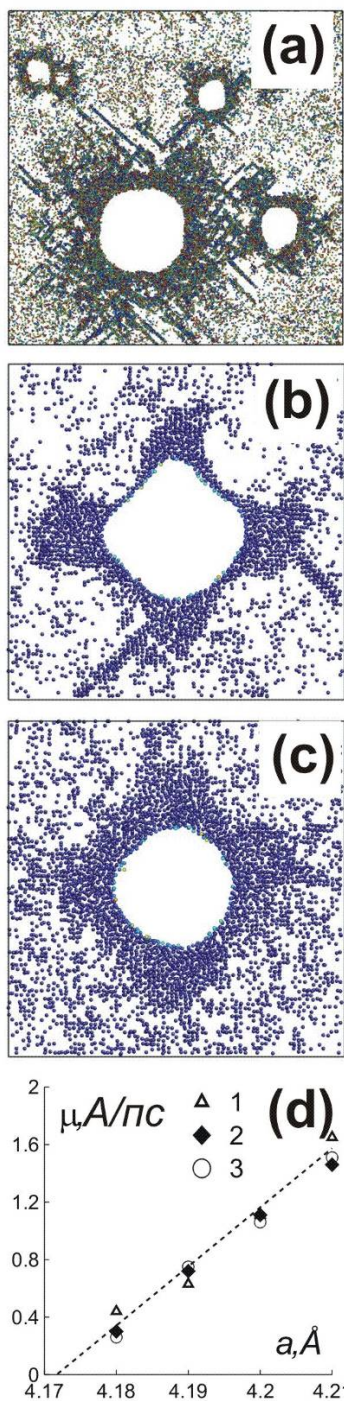


Рис. 2. Рост полостей в монокристалле алюминия.

- (a) $T = 300$ К, $200 \times 200 \times 20$ эл. ячеек, исходная постоянная решетки $a_0 = 4.31$ Å, скорость растяжения $\dot{\epsilon} = 2 \times 10^8$ с⁻¹. Спонтанное зарождение полостей.
- (b) $T = 700$ К, $40 \times 40 \times 40$ эл. ячеек, $a = 4.23$ Å, объем ячейки фиксирован, начальный радиус полости $r_0 \approx 2.1$ нм.
- (c) $T = 935$ К, $40 \times 40 \times 40$ эл. ячеек, $a = 4.23$ Å, объем ячейки фиксирован, начальный радиус полости $r_0 \approx 2.1$ нм.
- (d) Зависимость скорости роста полости μ от постоянной решетки монокристалла a : 1 - 1000 К, 2 - 935 К, 3 - 800 К.

Изменения напряжений и температуры оказывают заметное влияние на скорость роста полости, поэтому в расчете использовались баростат и термостат для контроля постоянных внешних условий. Действие баростата таково, что прирост объема расчетной ячейки равен изменению объема полости, таким образом: $v = \Delta V_{\text{box}}$.

Для расчета скорости роста полости использовалась тонкая трехмерная модель ($150 \times 150 \times 2$ элементарных ячеек гцк решетки). Для проверки идентичности поведения полости в процессе роста в случае тонкой и кубической расчетных ячеек были проведены тестовые расчеты. В случае квази-двумерной модели эффективный радиус полости можно ввести по формуле: $r(t) = \sqrt{s(t)/\pi} = \sqrt{\Delta V_{\text{box}}/2a\pi}$, где a – постоянная решетки. При различных степенях растяжения наблюдается линейная зависимость радиуса полости от времени, что соответствует постоянной скорости роста. Такое поведение отличается от экспоненциального закона вязкостного роста [2]. Скорость роста практически не зависит от температуры, линейно убывает с уменьшением степени растяжения, достигая нулевого значения около величины постоянной решетки $a = 4.17$ Å.

Данные по величине предельно достижимого напряжения в процессе растяжения монокристалла с порой при температуре $T = 300$ К приведены на рис. 3.

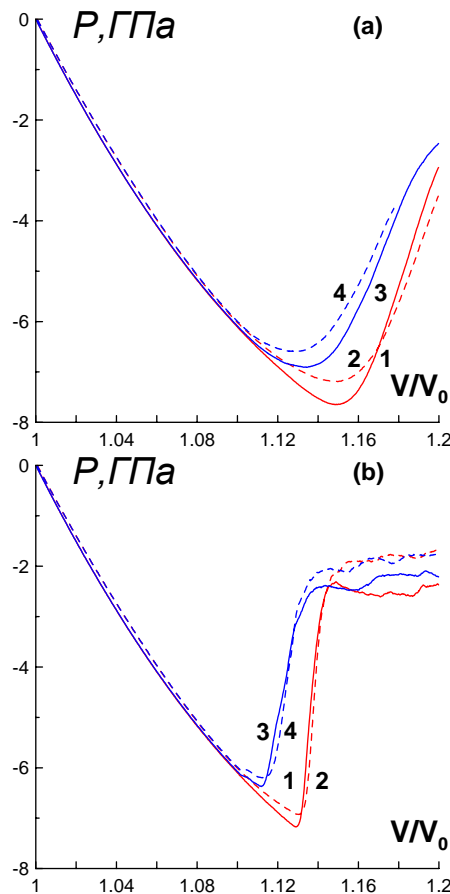


Рис. 3. Диаграммы деформации монокристалла Al с порой при $T = 300$ К. Размер системы $40 \times 40 \times 40$ эл. ячеек. Скорости деформирования $\dot{\epsilon}$: а) 4×10^9 с⁻¹, б) 4×10^8 с⁻¹.

- 1 – потенциал [6], радиус поры $r_0 = 0.5$ нм;
- 2 – потенциал [7], радиус поры $r_0 = 0.5$ нм;
- 3 – потенциал [6], радиус поры $r_0 = 1.0$ нм;
- 4 – потенциал [7], радиус поры $r_0 = 1.0$ нм.

Диаграммы растяжения в области низких температур очень похожи для разных потенциалов, за исключением области вблизи самой величины предельного давления. Активный рост полости начинается в модели с потенциалом [7] (соответствующие кривые нанесены на рис. 3 пунктиром) несколько раньше, при

меньшем по модулю давлении. Отметим, что эта разница уменьшается с уменьшением скорости растяжения. Таким образом, два рассмотренных потенциала практически одинаково описывают кинетику роста полостей в монокристалле при растяжении в области температур, далеких от температуры плавления.

Большее различие между двумя рассмотренными потенциалами взаимодействия проявляется при повышенной температуре. В процессе растяжения достигается линия плавления и материал начинает плавиться. В ходе молекулярно-динамических расчетов обнаружено, что прочность жидкости для потенциала [7] заметно больше. Потому полость может «заплавиться» и растяжение жидкой фазы может продолжаться еще долго, так что давление разрыва достигает больших отрицательных величин. При использовании потенциала [6] аморфная фаза менее прочная и, расплавившись, вещество быстро теряет однородность, происходит разрастание полости, окруженной расплавом.

В расчетах с потенциалом [7] последний сценарий также изредка реализуется, что легко объясняется стохастичностью процесса кавитации (в расплаве): зарождение полости критического размера, приводящее к ее росту, определяется случайными флуктуациями плотности. Поэтому такое различие при достаточно больших объемах системы и временах наблюдения за ней (при малой скорости деформирования) выглядит просто как количественное: полость образуется раньше, либо позже. Таким образом, имеет место различие в скорости кавитации в жидкой фазе для моделей алюминия с разными потенциалами, что заметно сказывается, например, на величине предела прочности при всестороннем растяжении.

4. КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В данном разделе будет изложена модель, позволяющая описывать процесс образования несплошностей в материале на макроскопическом уровне. Рассмотрим процесс динамического растяжения образца с постоянной скоростью деформирования. Суммарный объем полостей V_v в произвольном объеме вещества V_0 в момент времени t может быть найден по формуле:

$$V_v(t) = \int_0^t v(t-\tau) \dot{n}(\tau) d\tau. \quad (1)$$

Здесь $v(t-\tau)$ – объем одной полости, образовавшейся в момент времени τ , а $\dot{n}(\tau)$ – частота зарождения полостей в момент времени τ . Выражая первую величину через эффективный радиус полости

$$v(t) = \frac{4\pi}{3} \left(\int_0^t \mu[a(\xi)] d\xi \right)^3,$$

а вторую через частоту гомогенной нуклеации $\dot{n}(\tau) = J[a(\tau)]V$, получим:

$$\frac{V_v(t)}{V_0} = \int_0^t \frac{4\pi}{3} \left(\int_\tau^t \mu[a(\xi)] d\xi \right)^3 J[a(\tau)] d\tau. \quad (2)$$

На рис. 4 представлен график зависимости рассчитанной величины откольной прочности в динамическом режиме деформирования (растяжение с постоянной скоростью) от скорости растяжения. В полулогарифмическом масштабе зависимость приблизительно линейная, поскольку разрушение определяется про-

цессом гомогенной нуклеации полостей, скорость которого экспоненциально зависит от степени деформации. На рис. 4 также показаны данные по откольной прочности из экспериментов с ударными волнами [1]. В области высоких температур наблюдается довольно хорошее согласие, которое ухудшается с понижением температуры. Вероятно, это связано с увеличением роли дефектов в процессе разрушения при данной скорости растяжения. При меньших температурах заметное значение частоты нуклеации достигается лишь при больших растягивающих напряжениях. Однако столь большие значения напряжения не реализуются, поскольку разрушение инициируется при меньшем растяжении на дефектах кристаллической решетки.

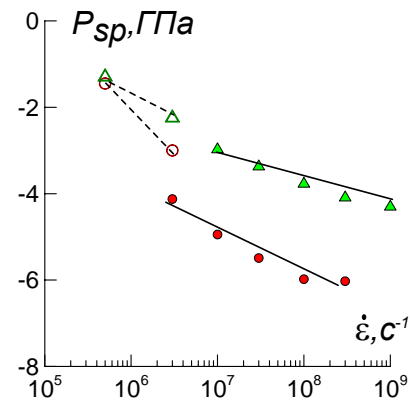


Рис. 4. Зависимость откольной прочности монокристаллического алюминия p_{sp} в динамическом режиме от скорости деформирования $\dot{\epsilon}$. Расчет по кинетической модели: 1 - 935 К; 2 - 800 К. Данные из эксперимента [1]: 3 - 920 К; 4 - 820 К.

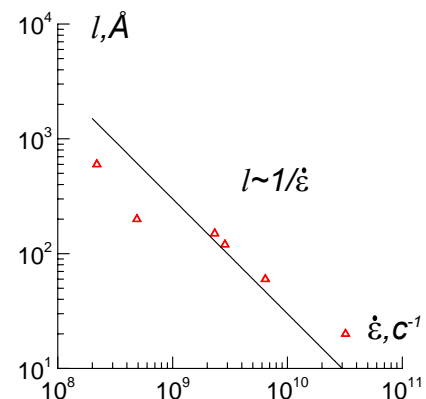


Рис. 5. Зависимость среднего расстояния между полостями l от скорости растяжения $\dot{\epsilon}$.

Момент откола приблизительно можно определить по достижению объема полостей величины начального объема сплошной среды V_0 . Тогда, зная зависимость степени растяжения от времени $a(t)$ для рассматриваемого режима растяжения и уравнение состояния $p(a, T)$ можно рассчитать величину откольной прочности p_{sp} .

Представленный здесь способ расчета величины прочности основывается на предположении о заранее заданной истории нагружения $a(t)$ и является оценочным. Реальная временная зависимость деформации и напряжений может быть получена в рамках моделирования процесса методами гидродинамики с учетом приведенных здесь кинетических уравнений для роста полостей.

5. РАССТОЯНИЕ МЕЖДУ ПОЛОСТЯМИ

Помимо зарождения и роста полостей, еще несколько процессов сопровождают поздние стадии разрушения (такие как влияние полостей на рост друг друга, слияние полостей), которые могут оказаться существенными в более подробных континуальных моделях. Однако некоторые закономерности этих процессов могут быть установлены на основании молекулярно-динамического моделирования и теории зародышеобразования. Рассмотрим в качестве примера влияние релаксации напряжений в ходе роста пор на возникновение новых полостей.

Будем считать, что релаксация напряжений в системе начинается на поверхности пор, а далее волна сжатия распространяется от них в объем вещества со скоростью порядка скорости звука. В областях, где релаксация напряжений началась, вероятность образования новых полостей значительно уменьшается, так как частота гомогенного зародышеобразования сильно зависит от степени метастабильности. Начальная величина растягивающего напряжения существенно уменьшается за время порядка времени распространения звука на среднее расстояние между полостями. В ходе дальнейшей релаксации уменьшается и скорость роста полостей. Распределение полостей по размерам соответствует их временам зарождения: полости, появившиеся раньше, достигают больших размеров.

Среднее расстояние между полостями (средний размер полостей) определяется скоростью релаксации метастабильной фазы (скоростью роста пор) и характерной частотой зарождения полостей, достигаемой в процессе растяжения с постоянной скоростью деформирования $\dot{\varepsilon}$. Характерное время появления полостей в стационарном процессе зародышеобразования, достижимое при изменяющихся внешних условиях (при растяжении или, например, охлаждении с некоторой постоянной скоростью), зависит от скорости их изменения $\dot{\varepsilon}$ по формуле [9]:

$$\tau_{nucl} = \left(\dot{\varepsilon} \frac{d \ln J}{d\varepsilon} \right)^{-1} \quad (3)$$

Используя эту формулу, можно оценить характерное расстояние между полостями:

$$l \approx c \tau_{nucl} \approx c \left(\dot{\varepsilon} \frac{d \ln J}{d\varepsilon} \right)^{-1} \quad (4)$$

Таким образом, получаем, что расстояние между полостями обратно пропорционально скорости деформирования, что наблюдалось в молекулярно-динамических расчетах как для алюминия (см. рис. 5), так и для меди [3].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведена попытка построить кинетическую модель разрушения кристаллического алюминия в области отрицательных давлений. Кинетические параметры для модели получаются путем моделирования а) распада алюминия по процессу гомогенной нуклеации и б) роста полости в растянутом кристалле. На основе этой модели исследована откольная прочность монокристаллического алюминия в области высоких температур в динамическом режиме деформирования.

Выявлено, что основной вклад в зависимости от скорости растяжения дает частота гомогенной нуклеации новых полостей, а не скорость их последующего роста.

Рост полости в монокристаллическом алюминии сопровождается аморфизацией материала около полости. Конкурентный механизм роста за счет зарождения плоскостей сдвига на полости практически не реализуется. С увеличением температуры зарождение плоскостей сдвига в Al сильно подавляется и практически не наблюдается при росте полости вблизи температуры плавления. Два рассмотренных потенциала практически одинаково описывают механизмы и кинетику роста полостей в монокристалле при растяжении в области температур, далеких от температуры плавления. Большое различие между ними при повышенной температуре, по-видимому, обусловлено различием в скорости кавитации в жидкой фазе.

Расчеты выполнены на кластере МФТИ-60 кафедры информатики МФТИ (ГУ), на кластере МСЦ РАН.

Авторы выражают признательность Г.И.Канелю за полезные обсуждения и интерес к данной работе. Работа выполнена при финансовой поддержке по программам фундаментальных исследований РАН №3 и №9, Межсекционная программа ОЭММПУ РАН, гранту РФФИ №05-08-65423, а также в рамках проектов Министерства образования и науки РФ РНП2.1.1.712 и 2007-3-1.3-25-01-397 и контракта с Национальными лабораториями Сандия по программе US DOE/NNSA ASC.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

МД – молекулярная динамика;
 T – температура;
 p – давление;
 a – постоянная кристаллической решетки;
 ρ – плотность;
 N – число частиц в системе;
 τ – среднее время жизни;
 J – частота нуклеации полостей;
 J_0 – предельная частота гомогенной нуклеации полостей;
 r – эффективный радиус полости;
 s – эффективная площадь полости;
 v – объем полости;
 μ – скорость роста полости;
 n – число полостей в системе;
 V_v – суммарный объем полостей в системе;
 V_0 – объем системы до начала растяжения;
 ε – степень растяжения $\varepsilon = V/V_0$;
 $\dot{\varepsilon}$ – скорость растяжения
 l – среднее расстояние между полостями;
 c – скорость звука.

Индексы:

melt – на линии плавления;
lim – на границе устойчивости фазы;
sp – относящийся к отколу;
nucl – относящийся к нуклеации полостей;

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kanel G.I., Razorenov S.V., Fortov V.E. Shock-wave compression and tension of solids at elevated temperatures: superheated crystal states, pre-melting, and anomalous growth of the yield strength // J. Phys.: Condensed Matter V. 16. 2004. S1007–S1016.

2. Dekel E., Eliezer S., Henis Z., Moshe E., Ludmirsky A., Goldberg I.B. Spallation model for the high strain rates range // *J. Appl. Phys.* V. 84. 1998. P. 4851.
3. Belak J. On the nucleation and growth of voids at high strain-rates // *J. Comp.-Aided Mater. Design* V. 5. 1998. P. 193–206.
4. Belak J. Multi-scale applications to high strain-rate dynamic fracture // *ibidem* V. 9. 2002. P. 165–172.
5. Barbee T.W., Seaman J.L., Crewdson R.J., Curran D.R. Dynamic Fracture Criteria for Ductile and Brittle Metals // *Materials*. V. 7. 1972. № 3. P. 393.
6. Mishin Y., Farkas D., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations // *Phys. Rev. B*. V. 59. 1999. P. 3393–3407.
7. Liu X.-Y., Ercolessi F., Adams J.B. Aluminium interatomic potential from density functional theory calculations with improved stacking fault energy // *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* 2004. № 12. P. 665.
8. Plimpton S.J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comp. Phys.* V. 117. 1995. P. 1–19. <http://lammmps.sandia.gov/index.html>
9. Скрипов В.П., Файзуллин М.З. Фазовые переходы кристалл-жидкость-пар и термодинамическое подобие. // М.: Физматлит, 2003. 160 с.
10. Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Гомогенная нуклеация в перегретом кристалле. Молекулярно-динамический расчет // *ДАН*. Т. 386. № 3. 2002. С. 328.
11. Norman G.E., Stegailov V.V. Simulation of Ideal Crystal Superheating and Decay // *Mol. Simul.* V. 30. 2004. P. 397–406.
12. Baidakov V.G., Protsenko S.P. Singular Point of a System of Lennard-Jones Particles at Negative Pressures // *Phys. Rev. Lett.* V. 95. 2005. P. 015701.
13. Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Фазовая диаграмма и спиноподобный распад метастабильных состояний Леннард-Джонсовской системы // *ТВТ* Т. 45. 2007. С. 43.
14. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // *Phys. Rev. B* V. 58. 1998. P. 11085.