

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 669.018

А.И. ПОТЕКАЕВ*, М.Д. СТАРОСТЕНКОВ**, Н.В. СИНИЦА**, А.В. ЯШИН**, Е.Г. ХАРИНА**, В.В. КУЛАГИНА***

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРНОЙ ПЕРЕСТРОЙКИ В НАНОВОЛОКНЕ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА Ni_3Al , СОДЕРЖАЩЕГО ДЛИННОПЕРИОДИЧЕСКИЕ ПАРНЫЕ ТЕРМИЧЕСКИЕ АНТИФАЗНЫЕ ГРАНИЦЫ, В ПРОЦЕССЕ ВЫСОКОСКОРОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ОДНООСНОГО РАСТЯЖЕНИЯ В НАПРАВЛЕНИИ $\langle 001 \rangle$

Методом молекулярной динамики исследованы особенности структурной перестройки в нановолокне интерметаллида Ni_3Al с длиннопериодическими парными термическими (неконсервативными) антифазными границами (АФГ) в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения в направлении $\langle 001 \rangle$. Выделены четыре основные стадии деформации (квазиупругая, пластическая, течения и разрушения), на каждой из которых реализуются характерные для нее особенности структурно-энергетических превращений. Наличие в длиннопериодической наноструктуре планарных периодических термических дефектов (термических антифазных границ смешанного типа) существенно влияет на изменение времени начала стадии пластической деформации. Изменение типа термических парных АФГ в длиннопериодической структуре значительно влияет на изменение времени полного разрыва нановолокна при пластической деформации. В случае термических АФГ $AA \frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ при увеличении количества слоев между АФГ время до полного разрыва незначительно снижается, а в случае термических АФГ $AB \frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ значительно увеличивается.

Ключевые слова: *длиннопериодическая структура, деформация, структурная перестройка, стадии деформации, предельная прочность.*

Введение

В настоящее время в физике конденсированного состояния наибольший интерес вызывают конденсированные системы с периодическими структурными неоднородностями наномасштаба. Это, прежде всего, полупроводниковые системы, которые могут явиться в перспективе основой принципиально нового уровня электроники – наноэлектроники. Другие важные системы – металлы и сплавы на их основе, которые в наноструктурном состоянии имеют уникальные свойства как конструкционные или функциональные материалы. Особый интерес с точки зрения выбора объекта исследования представляют упорядоченные сплавы с длиннопериодической структурой [1–10], в которых периодическим дефектом структуры является АФГ [1, 11–22].

Цель настоящей работы состоит в исследовании особенностей структурно-энергетических превращений, происходящих в металлическом нановолокне с длиннопериодическими парными термическими (неконсервативными) АФГ в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения.

1. Модель и методика компьютерного эксперимента

Исследуются механизмы структурной перестройки в металлическом нановолокне, содержащем периодические планарные дефекты, в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения. В качестве объекта исследования выберем модель нановолокна интерметаллида Ni_3Al (рис. 1, а), содержащего парные равноудаленные термические АФГ (ТАФГ) $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ типа AA и AB (расстояние между АФГ варьируется от 3 до 17 слоев между АФГ) (рис. 1, б). Антифазные границы будем вводить поочередно равноудаленно друг от друга в направлении $\langle 001 \rangle$ так, чтобы их расположение соответствовало геометрической равноудаленности от жестких границ (захватов) и геометрического центра нановолокна. Данная модель соответствует сверхструктуре типа $L1_2(M)$ [1, 11, 12, 15, 22].

Исследование проведем методом молекулярной динамики с использованием парных потенциальных функций Морза [23–25], так как интерес представляют именно принципиальные физические закономерности структурных преобразований. Радиус обрезания для парного взаимодействия между атомами выберем равным 0,494 нм.

Потенциальную энергию системы N атомов приведем в виде

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1, i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \varphi_{KL}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (1)$$

где φ_{KL} – потенциал взаимодействия атомов сортов K и L , находящихся в узлах с радиус-векторами \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j , т.е. i -го и j -го атомов.

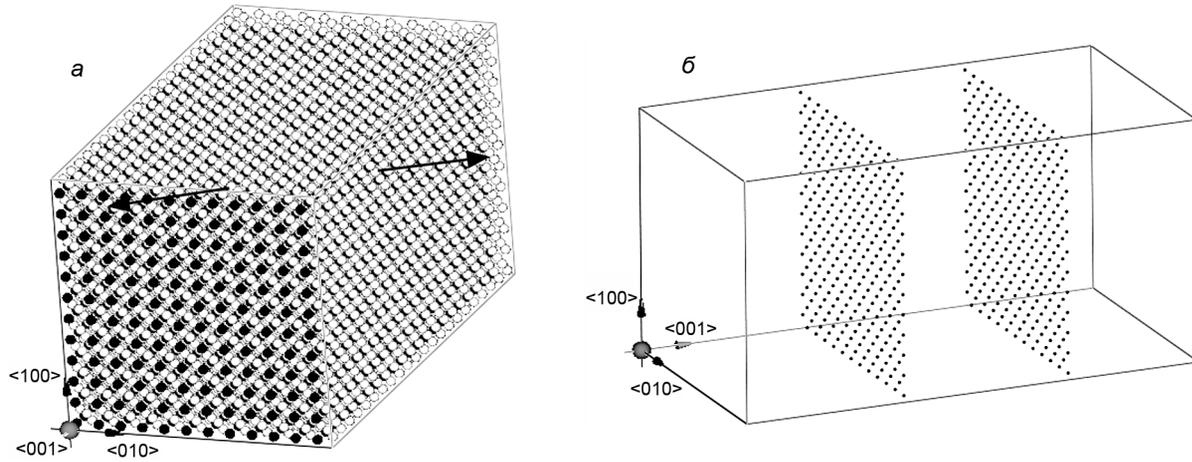


Рис. 1. Модель нановолокна Ni_3Al : a – идеальное нановолокно до введения АФГ; b – схема введения двух ТАФГ $AB \frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$

Использовался метод молекулярной динамики [26–28]. Для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений применяется численный метод Эйлера с полушагом.

Для учета эффектов энергетического обмена моделируемой системы с внешней средой использовался специальный алгоритм пересчета скоростей – термостат Берендсена [27].

Расчетный блок нановолокна представлялся в виде прямоугольного параллелепипеда с квадратным основанием в плоскости (001) и высотой (осью нановолокна), соответствующей направлению $\langle 001 \rangle$. Размер расчетного блока равнялся $12 \times 12 \times 18$ элементарных ячеек ($4,07 \times 4,07 \times 6,20 \text{ нм}^3$). Общее количество атомов составляло 10368. К границам расчетного блока прикладывались смешанные граничные условия: свободные в направлениях $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$ и жесткие в направлении $\langle 001 \rangle$.

Динамическая одноосная деформация растяжения моделировалась посредством поступательного смещения всех атомов, составляющих жесткие границы, вдоль оси $\langle 001 \rangle$ на $0,002 \text{ нм}$ через $0,1 \text{ пс}$, что соответствовало скорости деформации $3,2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$. Компьютерный эксперимент выполнялся при температурах 10, 300 и 1100 К.

Для анализа эволюции дефектной структуры на атомном уровне использовался визуализатор трехмерного расчетного блока нановолокна с возможностями поворота, масштабирования и выделения атомных плоскостей и смещений атомов как относительно начального момента времени, так и произошедших смещений между двумя выбранными моментами.

2. Результаты и их обсуждение

2.1. Влияние периода антифазности на механизмы деформации, происходящие в длиннопериодической наноструктуре

Ранее [29, 30] были выявлены стадии деформации нановолокон чистых металлов Ni и Al и интерметаллида Ni_3Al с длиннопериодическими сдвиговыми АФГ [22]. В настоящей работе проследим высокоскоростную одноосную деформацию растяжения нановолокна интерметаллида Ni_3Al с различной плотностью длиннопериодических парных термических (неконсервативных) АФГ.

Структурную перестройку в процессе деформации отражают зависимости запасенной энергии деформации и напряжения на захватах от времени (рис. 2). Расчеты при температурах 10, 300 и 1100 К привели к аналогичным результатам.

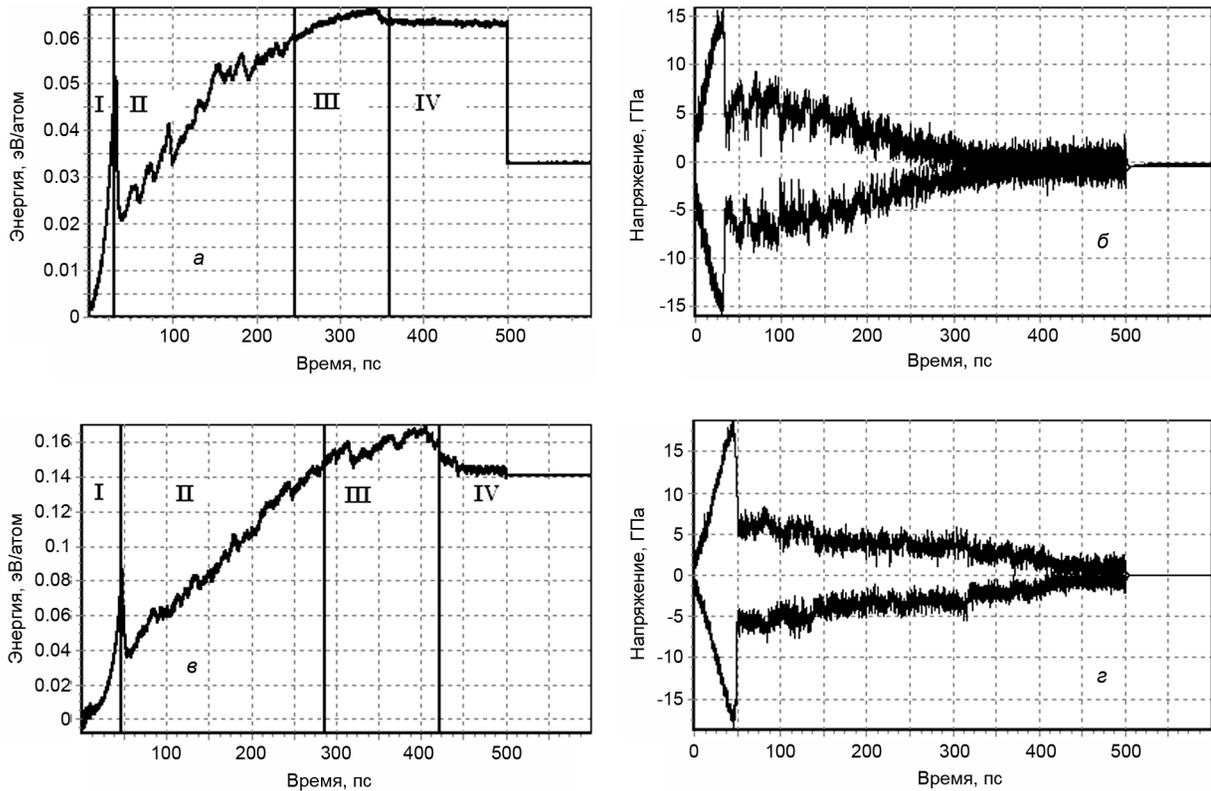


Рис. 2. Зависимости от времени эксперимента запасенной энергии деформации нановолокна с парными на расстоянии 9 слоев ТАФГ $AA\ 1/2\langle 110\rangle\{001\}$ – (а) и ТАФГ $AB\ 1/2\langle 110\rangle\{001\}$ (в) и соответствующих напряжений на захватах (б и г) при температуре 300 К

Рассмотрим стадии деформации, наблюдавшиеся при расчетах.

Первая стадия – квазиупругая деформация. Первая стадия деформации характеризуется смещением атомов относительно начального положения равновесия, причем необратимых структурных перестроек не наблюдается, происходит непрерывный рост напряжения на захватах. В центральной части нановолокна отмечается уменьшение сечения (рис. 3). При смене типа внедренных парных ТАФГ $1/2\langle 110\rangle\{001\}$ с AA на AB длительность первой стадии незначительно изменяется в пределах 1–5 пс. Так, при внедренной парной ТАФГ $AA\ 1/2\langle 110\rangle\{001\}$ квазиупругая деформация длится 30 пс, при ТАФГ $AB\ 1/2\langle 110\rangle\{001\}$ – 34 пс.

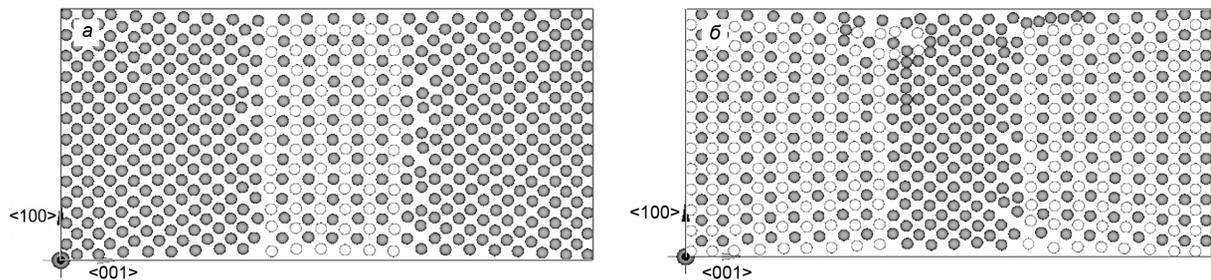


Рис. 3. Структурная деформация нановолокна при парной ТАФГ $AB\ 1/2\langle 110\rangle\{001\}$ на расстоянии 9 слоев на первом этапе: а – на 33 пс, плоскость типа $\{010\}$; б – на 35 пс, плоскость типа $\{010\}$

Анализ зависимости напряжения на захватах от времени (рис. 2, б и г) при различных температурах показал, что окончание первой стадии характеризуется значительным падением напряжения. Снижение напряжения к окончанию первой стадии наблюдается при всех типах неконсервативных АФГ. В конце первой стадии значение напряжения на захватах уменьшается с ростом температуры, причем также с ростом температуры уменьшается и глубина падения запасенной энергии деформации. Падение напряжения сочетается по времени со сбросом запасенной энергии деформации (рис. 2).

Окончание стадии квазиупругой деформации характеризуется появлением разряженных областей зарождения пластической деформации (рис. 4, *a*) и сдвигом частей нановолокна друг относительно друга, что проявляется на поверхности выходом ступеньки сдвиговых дислокаций (рис. 4, *б*). Происходит интенсивное образование антифазных доменов (АФД), движение границ которых осуществляется преимущественно по плоскостям $\{111\}$. При 7 и более слоях между внедренными парными АФГ в местах скольжения АФД, при полном проскальзывании АФД на одну плоскость относительно оси деформации наблюдается восстановление ГЦК-структуры.

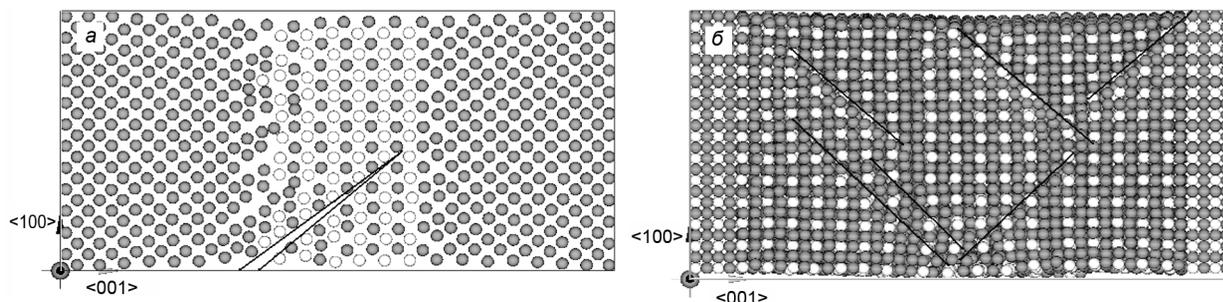


Рис. 4. Области зарождения деформации на 31 пс эксперимента при 300 К (*a*), появление линий скольжения в нановолокне на 35 пс при 300 К (*б*)

При увеличении расстояния между внедренными АФГ область зарождения деформации всегда находится на одной из ТАФГ $1/2\langle 110 \rangle \{001\}$, причем на АФГ типа *AB* область зарождения находится в 100 % экспериментов, в отличие от случая с внедренными АФГ типа *AA*, в котором процент зарождения области деформации находится в интервале значений 70–85 %.

Отметим, что при увеличении плотности АФГ область зарождения деформации всегда находится на стыке двух планарных дефектов – на антифазной границе. Таким образом, область деформации локализуется вблизи АФГ, ближайшей к месту зарождения деформации (рис. 5).

Вторая стадия – пластическая деформация. Как известно, в основе пластической деформации лежит процесс скольжения. Начало второй стадии характеризуется процессом скольжения частей нановолокна друг относительно друга, наблюдается появление на поверхности линий скольжения – ступенек, т.е. вышедших на поверхность сдвиговых дислокаций (рис. 6, *a*). Из рис. 6, *б* несложно видеть интенсивный процесс скольжения преимущественно по плоскостям $\{111\}$, т.е. идет процесс активной перестройки атомной структуры.

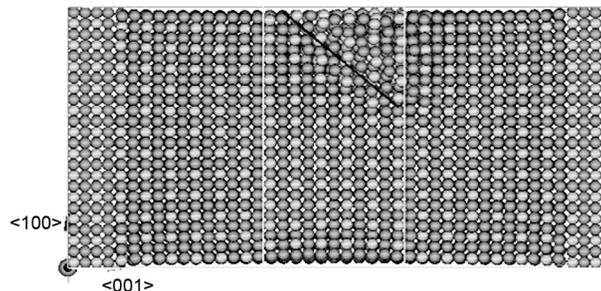


Рис. 5. Области локализации деформации при парной ТАФГ $1/2\langle 110 \rangle \{001\}$ на расстоянии 9 слоев

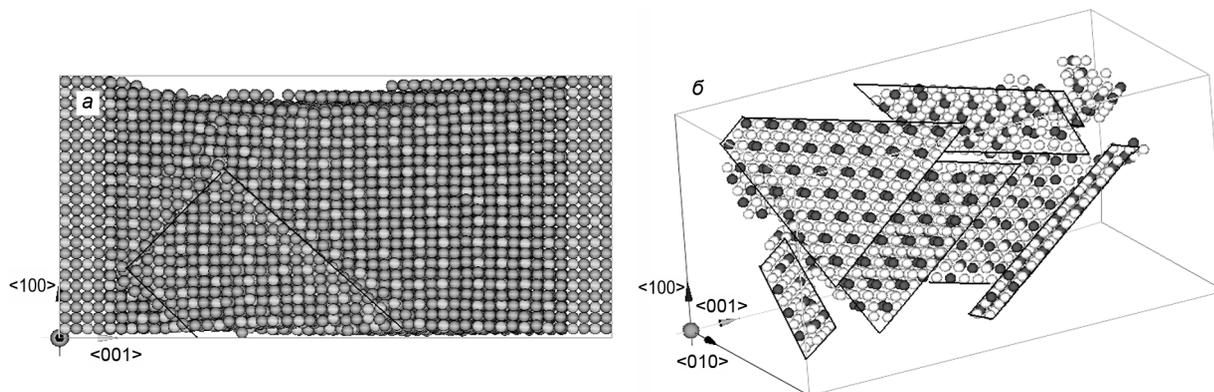


Рис. 6. Перестройка атомной структуры на 50 пс с парной ТАФГ $1/2\langle 110 \rangle \{001\}$ при температуре 300 К на расстоянии 7 слоев: плоскость $\{010\}$ (*a*) и скольжение частей нановолокна по плоскостям $\{111\}$ (*б*)

Протекающие структурно-энергетические превращения на стадии пластической деформации хорошо отражает временная зависимость (рис. 7) числа атомов, отвечающих ГПУ (кривая 1) и промежуточной (кривая 2) координациям ближайших соседей.

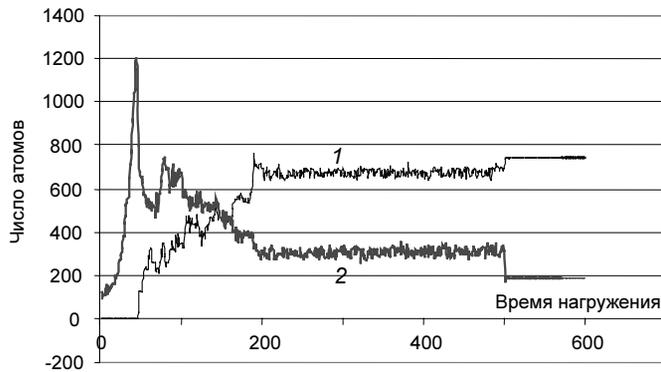


Рис. 7. Зависимости числа атомов с ГПУ (кр. 1) и промежуточным (кр. 2) окружением ближайших соседей от времени в нановолокне Ni_3Al с 7 слоями между внедренными ТАФГ $AA \frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ при температуре 300 К

внедренных ТАФГ AA и AB отмечается цикличное проскальзывание частей нановолокна и восстановление ГЦК-структуры.

Особенности перестройки во время пластической деформации выглядят следующим образом. В области деформации реализуется преимущественное проскальзывание по плоскостям $\{111\}$. Если происходит внедрение АФГ типа AB, то зарождение и последующие сдвиги в области деформации наблюдаются на одной из АФГ (рис. 9). В случае, если на пути сдвига находится вторая длиннопериодическая АФГ, то проскальзывание локализуется на данной границе. Происходит смещение АФД относительно плоскости $\{111\}$ с последующим восстановлением ГЦК-структуры в области скольжения (рис. 10). Если на пути сдвига находится одна длиннопериодическая АФГ, то проскальзывание локализуется на ней, при этом происходит смещение АФД относительно плоскости $\{111\}$ с последующим восстановлением ГЦК-структуры в области скольжения.

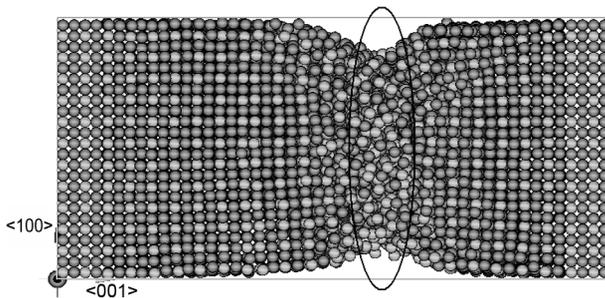


Рис. 9. Локализация сдвига на АФГ типа AB в ГЦК-структуре на 125 пс с 7 слоями между ТАФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ при температуре 300 К

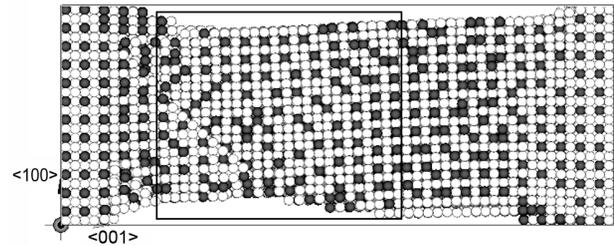


Рис. 8. Частичное восстановление ГЦК-структуры на 140 пс с 5 атомными слоями между ТАФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ при температуре 300 К

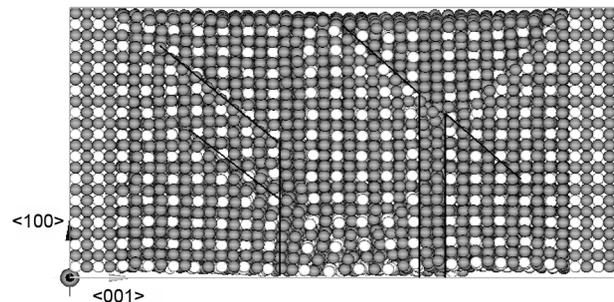


Рис. 10. Проскальзывание ГЦК-структуры на 120 пс с 7 слоями между ТАФГ $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ при температуре 300 К

Если область деформации располагается между двумя длиннопериодическими АФГ, то происходит проскальзывание части волокна только в пределах данных дефектов (рис. 9) с последующим восстановлением ГЦК-структуры. Данная особенность наблюдается для всей серии компьютерных экспериментов с различным количеством длиннопериодических АФГ.

Таким образом, при проскальзывании частей нановолокна деформация локализуется на ближайших АФГ и не выходит за их пределы. На данной стадии реализуется циклический процесс, который включает в себя «проскальзывание частей нановолокна – локализацию сдвига на длиннопериодических АФГ – восстановление ГЦК-структуры». Следует подчеркнуть, что при количестве слоев между АФГ менее 7 влияние периодичности границ на проскальзывание во время структурной перестройки в нановолокне на стадии пластической деформации не наблюдается, что можно объяснить незначительной энергией данного планарного дефекта.

Третья стадия – течение. На третьей стадии деформации (течение) структурные перестройки происходят только в области образовавшейся шейки, изменений внутри материала не наблюдается. Запасенная энергия деформации во время течения изменяется не более чем на 0,01 эВ/атом. На 350 пс нановолокно разрушается (рис. 11). Влияния периода антифазности на структурные перестройки на стадии течения не наблюдается.

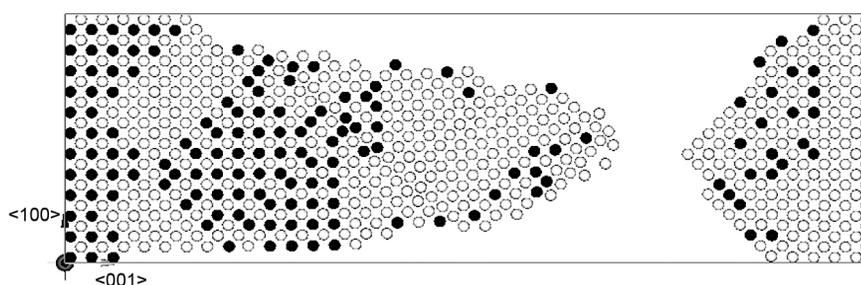


Рис. 11. Разрушение нановолокна на 350 пс при 7 атомных слоях между парными ТАФГ AA 1/2<110>{001} при температуре 300 К

Четвертая стадия – разрушение. После разрушения и релаксации путем сверхбыстрого охлаждения до 0 К в исследуемом нановолокне присутствуют АФД, образовавшиеся ранее на стадии пластической деформации. После релаксации доля атомов с ГПУ-окружением не превышает 2,5 % от общего их числа. Общее число атомов, имеющих ГЦК-окружение после релаксации, составляет 95 %, что указывает на почти полное восстановление ГЦК-структуры и исчезновение дефектов упаковки.

Следует отметить, что особенности деформационного поведения металлического нановолокна интерметаллида Ni₃Al, содержащего длиннопериодические парные термические (неконсервативные) АФГ, очень близки к соответствующему поведению того же волокна с длиннопериодическими сдвиговыми (консервативными) АФГ [22].

2.2. Влияние периода антифазности на временные интервалы начала стадии пластической деформации и время до полного разрыва нановолокна с длиннопериодической структурой

Для исследования влияния периодических термических АФГ на временные особенности деформации в наноструктуре были рассчитаны временные интервалы начала стадии пластической деформации и времени полного разрыва нановолокна с различной плотностью АФГ (таблица).

Временные интервалы стадий деформации

Время	Тип слоев	3 слоя	5 слоев	7 слоев	9 слоев	11 слоев	13 слоев	15 слоев	17 слоев
Начало стадии пластической деформации	AA	31	31	31	31	30	30	30	30
	AB	35	34	35	32	33	34	34	34
Разрыв нановолокна	AA	340	385	390	370	325	330	350	325
	AB	470	480	470	460	490	560	560	550

Анализ полученных данных показал, что значение времени начала стадии пластической деформации составляет 31–34 пс, причем максимальное отклонение не превышает 2–4 пс, т.е. составляет не более 0,5 % от максимального времени деформации. Картина структурно-энергетических превращений к 31–34 пс стадии квазиупругой деформации выглядит следующим образом. В ходе квазиупругой деформации происходят симметричные смещения атомов из на-

чальных положений, обусловленные прилагаемой нагрузкой. К началу стадии пластической деформации в нановолокне образуются точечные дефекты (вакансии, межузельные атомы и точечные дефекты замещения). Напряжения на захватах растут линейно и к 30–33 пс в нановолокне достигается наибольшее деформирующее напряжение. Происходит проскальзывание частей нановолокна с образованием новых дефектов.

Сравнение времен начала стадии пластической деформации с данными [29] обнаруживает, что в идеальном нановолокне время начала второй стадии деформации больше (52–55 пс). Время разрыва волокна, содержащего термические (неконсервативные) АФГ, превышает соответствующее время волокна, содержащего сдвиговые (консервативные) АФГ [22].

Таким образом, наличие периодических планарных дефектов в виде парных термических АФГ AA и AB в длиннопериодической структуре незначительно влияет на изменение времени начала стадии пластической деформации. При увеличении количества атомных слоев между внедренными парными ТАФГ AA $1/2\langle 110 \rangle\{001\}$ происходит незначительное снижение времени стадии квазиупругой деформации. Вместе с тем при внедрении ТАФГ смешанного типа изменение количества слоев между термическими АФГ в нановолокне влияет на увеличение времени начала стадии пластической деформации.

Другой важной характеристикой процесса деформации является время разрыва нановолокна. В таблице приведено время до полного разрыва нановолокна с различной плотностью АФГ. Несложно видеть, что с увеличением числа слоев между ТАФГ AA $1/2\langle 110 \rangle\{001\}$ наблюдается незначительное уменьшение времени до полного разрыва. Так, при трех слоях между внедренными АФГ время до полного разрыва составляет 340 пс, а при 17 слоях – 325 пс. С изменением типа внедренной АФГ с AA на AB увеличивается время до полного разрыва. Так, при 3 слоях оно составляет 470 пс, а при 17 слоях – уже 550 пс.

Таким образом, изменение типа термических парных АФГ в длиннопериодической структуре значительно влияет на изменение временных интервалов полного разрыва нановолокна при пластической деформации. В случае внедренной ТАФГ AA $1/2\langle 110 \rangle\{001\}$ при увеличении количества слоев между АФГ время до полного разрыва незначительно снижается, а в случае ТАФГ AB $1/2\langle 110 \rangle\{001\}$ значительно увеличивается.

Заключение

На основании анализа структурно-энергетических превращений, происходящих в длиннопериодической структуре нановолокна интерметаллида Ni_3Al с периодическими парными термическими (неконсервативными) АФГ в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения, выявлено четыре основных стадии деформации: квазиупругая, пластическая, течения, разрушения. Структурно-энергетические превращения в нановолокне интерметаллида Ni_3Al с периодическими парными термическими (неконсервативными) АФГ в процессе высокоскоростной деформации одноосного растяжения очень близки к соответствующим превращениям в том же волокне с длиннопериодическими сдвиговыми АФГ [22].

Наличие периодических планарных дефектов в виде парных термических АФГ AA и AB в длиннопериодической структуре незначительно влияет на изменение времени начала стадии пластической деформации. При увеличении количества атомных слоев между внедренными парными ТАФГ AA $1/2\langle 110 \rangle\{001\}$ происходит незначительное уменьшение временного интервала стадии квазиупругой деформации. Однако в случае ТАФГ смешанного типа изменение количества атомных слоев между АФГ заметно влияет на увеличение времени начала стадии пластической деформации.

Изменение типа термических парных АФГ в длиннопериодической структуре значительно влияет на изменение времени полного разрыва нановолокна при пластической деформации. В случае внедренной ТАФГ AA $1/2\langle 110 \rangle\{001\}$ при увеличении количества атомных слоев между АФГ время до полного разрыва незначительно снижается, а в случае ТАФГ AB $1/2\langle 110 \rangle\{001\}$ – значительно увеличивается.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Потекаев А.И., Наумов И.И., Кулагина В.В. и др. Естественные длиннопериодические наноструктуры / под общ. ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2002. – 260 с.
2. Потекаев А.И., Клопотов А.А., Козлов Э.В., Кулагина В.В. Слабоустойчивые предпороговые структуры в никелиде титана / под общ. ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2004. – 296 с.

3. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Глезер А.М. и др. Структурно-фазовые состояния и свойства металлических систем / под общ. ред. А.И. Потекаева. – Томск: Изд-во НТЛ, 2004. – 356 с.
4. Громов В.Е., Потекаев А.И., Старостенков М.Д. Структурно-фазовые состояния перспективных материалов. – Новокузнецк: Изд-во НПК, 2009. – 613 с.
5. Удодов В.Н., Потекаев А.И., Кулагина В.В. и др. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах. – Абакан: Изд-во Хакас. ун-та, 2008. – 135 с.
6. Дмитриев С.В., Медведев Н.Н., Потекаев А.И. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2008. – № 8. – С. 73–79.
7. Потекаев А.И., Кулагина В.В. // Изв. вузов. Физика. – 2080. – № 11/3. – С. 148–150.
8. Дмитриев С.В., Потекаев А.И., Назаров А.А. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2009. – № 2. – С. 21–26.
9. Потекаев А.И., Дудник Е.А., Старостенков М.Д., Попова Л.А. // Изв. вузов. Физика. – 2008. – № 10. – С. 53–62.
10. Дмитриев С.В., Потекаев А.И., Самсонов А.В. // Изв. вузов. Физика. – 2009. – № 6. – С. 68–82.
11. Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 1995. – № 6. – С. 3–21.
12. Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 1996. – № 6. – С. 22–40.
13. Наумов И.И., Олемской А.И., Потекаев А.И. // ФММ. – 1993. – Т. 75. – Вып. 6. – С. 47–57.
14. Potekaev A.I. // Phys. Stat. Sol. (a). – 1992. – V. 134. – P. 317–334.
15. Великохатный О.И., Еремеев С.В., Потекаев А.И., Наумов И.И. // Письма в ЖЭТФ. – 1999. – Т. 69. – Вып. 8. – С. 548–554.
16. Velikokhatnyi O.I., Eremeev S.V., Potekaev A.I., and Naumov I.I. // J. Experim. Theor. Phys. – 2004. – V. 98. – No. 3. – P. 565–574.
17. Velikokhatnyi O.I., Eremeev S.V., Potekaev A.I., and Naumov I.I. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2002. – No. 14. – P. 8763–8769.
18. Velikokhatnyi O.I., Eremeev S.V., Potekaev A.I., and Naumov I.I. // Comput. Mater. Sci. – 2000. – V. 19. – No. 1–4. – P. 275–284.
19. Velikokhatnyi O.I., Eremeev S.V., Potekaev A.I., and Naumov I.I. // Phys.: Condens. Matter. – 2000. – V. 12. – No. 41. – P. 8825–8830.
20. Великохатный О.И., Еремеев С.В., Потекаев А.И., Наумов И.И. // ЖЭТФ. – 2000. – Т. 117. – Вып. 3. – С. 548–558.
21. Velikokhatnyi O.I., Eremeev S.V., Potekaev A.I., and Naumov I.I. // J. Experim. Theor. Phys. – 2000. – V. 90. – No. 3. – P. 479–487.
22. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Сеница Н.В. и др. // Изв. вузов. Физика. – 2010. – № 8. – С. 47–54.
23. Царегородцев А.И., Горлов Н.В., Демьянов Б.Ф., Старостенков М.Д. // ФММ. – 1984. – Т. 58. – № 2. – С. 336.
24. Еремеев С.В., Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 2005. – № 6. – С. 82–90.
25. Козлов Э.В., Попов Л.Е., Старостенков М.Д. // Изв. вузов. Физика. – 1972. – № 3. – С. 107–108.
26. Кулагина В.В., Еремеев С.В., Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 2005. – № 2. – С. 16–23.
27. Старостенков М.Д., Маркидонов А.В., Тихонова Т.А., Потекаев А.И. // Изв. вузов. Физика. – 2009. – № 9/2. – С. 139–144.
28. Berendsen H.J.C. et al. // J. Chem. Phys. – 1984. – V. 81. – No. 8. – P. 3684–3690.
29. Старостенков М.Д., Яшин А.В., Дудник Е.А. и др. // Перспективные материалы. – 2009. – № 7. – С. 383–388.
30. Starostenkov M.D., Yashin A.V., Sinitsa N.V., and Dudnik E.A. // CD disk, Proceedings of 12th International Conference on Fracture. – Ottawa, Ontario, Canada, 2009. – fin00236. – P. 1–9.
31. Фридель Ж. Дислокации. – М.: Мир, 1967. – 644 с.

*Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова
Томского государственного университета, г. Томск, Россия

Поступила в редакцию 22.07.10.

**Алтайский государственный технический университет, г. Барнаул, Россия

***Сибирский государственный медицинский университет, г. Томск, Россия

E-mail: kanc@spti.tsu.ru; genphys@mail.ru

Потекаев Александр Иванович, д.ф.-м.н., профессор, директор;
Старостенков Михаил Дмитриевич, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. общей физики;
Сеница Никита Викторович, аспирант каф. общей физики;
Яшин Александр Вячеславович, аспирант каф. общей физики;
Харина Евгения Геннадьевна, аспирантка каф. общей физики;
Кулагина Валентина Васильевна, к.ф.-м.н., доцент.