

УДК 538.97; 544.032.6; 534.222.2

УДАРНЫЕ ВОЛНЫ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛИТАХ ПРИ РАДИАЦИОННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

К.П. Зольников^{1,2}, А.В. Корчуганов¹, Д.С. Крыжевич^{1,2}, В.М. Чернов^{2,3}, С.Г. Псахье^{1,4,5}

¹Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Россия

²Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

³Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара, Москва, Россия

⁴Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

⁵Сколковский институт науки и технологий, Сколково, Россия

Повышение радиационной стойкости металлов является одной из наиболее актуальных задач современного материаловедения. В данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование формирования и распространения ударных волн в кристаллитах железа, связанных с генерацией в них каскадов атомных смещений при радиационном воздействии. Исследовано взаимодействие ударных волн с точечными дефектами и их кластерами. Проведена оценка параметров ударных волн, исследована их зависимость от энергии первично выбитого атома. Ударные волны генерируются в первую пикосекунду развития каскада атомных смещений и распространяются значительно дальше области первичных радиационных повреждений. Первоначально скорость распространения ударных волн превышает скорость звука, а затем быстро уменьшается до звуковой. Так как каждый субкаскад генерирует собственную ударную волну, волновой фронт имеет сложную конфигурацию. Вследствие анизотропии свойств материала фронт ударных волн отличается от сферического, вытягиваясь вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$. Максимальной скоростью и амплитудой характеризуются волны, распространяющиеся вдоль плотноупакованного направления $\langle 111 \rangle$. Исследуемые волны могут увеличивать подвижность точечных дефектов и их кластеров, вызывать их перестройку и приводить к локальному повышению температуры. В исследованном интервале температур (от 0 до 300 К) характеристики ударных волн слабо зависят от температуры. Принимая во внимание, что при генерации и развитии каскада атомных смещений образуется большое количество ударных волн, их воздействие на дефектную структуру материала может быть существенным.

Ключевые слова: кристаллит железа, каскады атомных смещений, ударные волны, точечные дефекты, молекулярная динамика.

SHOCK WAVES IN METAL CRYSTALLITES AT IRRADIATION

K.P. Zolnikov^{1,2}, A.V. Korchuganov¹, D.S. Kryzhevich^{1,2}, V.M. Chernov^{2,3}, S.G. Psakhie^{1,4,5}

¹Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russia

²National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia

³A.A. Bochvar High-Technology Scientific Research Institute for Inorganic Materials, Moscow, Russia

⁴National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

⁵Skolkovo Institute of Science and Technology, Skolkovo, Russia

Metal nuclear hardening is one of the most pressing problems in modern materials science. In this paper molecular dynamics simulation was used to study formation and propagation features of shock waves generated by atomic displacement cascades in metal crystallites exposed to radiation with iron crystallite used as an example. The shock wave characteristics dependence on the energy of primary knocked-on atom and the interaction of the shock waves with point defects and their clusters were studied. Shock waves are generated during the first picosecond of the atomic displacement cascades formation and propagate appreciably beyond the area of initial radiation damages. Originally the velocity of their propagation exceeds the speed of sound, but it lessens to the acoustic speed rapidly. Since every subcascade generates its own shock wave and due to material properties anisotropy, wave front has complicated configuration. It stretches along the directions $\langle 111 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$. The waves propagating along the close-packed direction $\langle 111 \rangle$ have maximum velocity and peak amplitude. The shock waves may lead to mobility increase and rearrangement of point defects and their clusters and give rise to local temperature. The shock wave characteristics weakly depend on temperature within the temperature interval 0—300 K. Because of large quantity of shock waves generated, their influence on the defect material structure may be essential.

Key words: metal crystallites, atomic displacement cascades, shock waves, point defects, molecular dynamics.

ВВЕДЕНИЕ

Разработка материалов для атомной и термоядерной энергетики тесно связана с изучением вопросов образования и развития в них первичной радиационной повреждаемости, обусловленной генерацией пар Френкеля и каскадов атомных смещений [1—4]. Следует отметить, что в области генерации каскадов атомных смещений материал локально разогревается, при этом формируются ударные волны, которые могут распространяться на достаточно большие расстояния от центра каскада [5—7].

Согласно [8, 9] радиационное облучение может способствовать увеличению подвижности точечных дефектов, имеющих в материале. В [8] был предложен механизм радиационно-ускоренной диффузии («радиационная тряска»), посредством которого генерация и аннигиляция неустойчивых пар Френкеля приводят к миграции собственных межузельных атомов (СМА). Суть его заключается в том, что при генерации и аннигиляции пары Френкеля в материале формируются волны упругих напряжений, связанные с локальным изменением атомного объёма. Взаимодействие этих волн с дефектами понижает их миграционные барьеры и способствует их перемещению. Отметим, что описанный механизм радиационно-ускоренной диффузии моделировался в железе на основе метода молекулярной динамики [9, 10]. При этом в [9] исследовалось поведение «дефекта-свидетеля» (межузельной гантели, ориентированной в направлении $\langle 110 \rangle$) при генерации и аннигиляции вблизи него пары Френкеля. Моделировались два способа образования неустойчивой френкелевской пары: диффузионный подход СМА к вакансии и выбивание атома из узла решётки с последующей генерацией и аннигиляцией пары Френкеля. В первом случае после аннигиляции пары Френкеля межузельная гантель переориентировалась в направлении $\langle 111 \rangle$ и формировала статический краудион, что можно рассматривать как элементарный диффузионный прыжок СМА. Во втором случае пара Френкеля генерировалась путём передачи импульса одному из атомов вдоль направления $\langle 111 \rangle$. Вследствие смещения ПВА формировался динамический краудион с вакансией на месте ПВА и межузельной гантелью на расстоянии вторых соседей от вакансии. Так как энергии, сообщенной ПВА, недостаточно для создания стабильной пары Френкеля, краудион вскоре аннигилировал. Аналогично первому случаю «дефект-свидетель» смещался под действием упругой волны и образовывал краудион.

При больших значениях энергии первично выбитого атома (ПВА) каскады атомных смещений расщепляются на субкаскады [11], которые, в свою очередь, также могут генерировать ударные волны. Взаимодействие этих волн друг с другом может оказывать влияние не только на имеющиеся в материале дефекты структуры, но и на эволюцию самого каскада атомных смещений. Изучение влияния данных волн на эволюцию каскадов атомных смещений проводилось в [6, 7, 12]. Авторы [6] связывают образование больших кластеров СМА на периферии каскада с взаимодействием сверхзвуковых ударных волн, образованных каскадом атомных смещений. Как показывают их расчёты, в каскаде за время менее 0,1 пс после инициирования ПВА могут возникать сверхзвуковые выбитые атомы. Данные атомы обгоняют ударную волну от основного каскада и генерируют свою собственную. Когда эти волны встречаются, волна от основного каскада выталкивает атомы в области с низкой плотностью, которые образованы сверхзвуковыми выбитыми атомами. При последующем восстановлении структуры кристаллита вытесненные атомы становятся межузельными и образуют кластер. В работе [7] моделировались каскады атомных смещений в тонких плёнках меди и никеля. В некоторых расчётах авторы наблюдали коллективные смещения атомов в результате генерации каскада, расположенного достаточно далеко от поверхности кристаллита. Анализ результатов моделирования показал, что каскад атомных смещений разогревает радиационно-повреждённую зону, что приводит к возникновению больших внутренних напряжений в окрестности этой области. Благодаря этим напряжениям в образце формируется межузельная дислокационная петля, которая выходит на поверхность плёнки и образует островок адсорбированных атомов. В работе [12] исследовалось влияние каскадов атомных смещений на существующие дефекты в меди, алюминии, золоте, платине и кремнии. Результаты моделирования показали, что каскады практически не меняют распределение существующих дефектов за пределами жидкого ядра каскада, хотя в ГЦК-металлах наблюдается миграция СМА из-за того, что каскад разогревает кристаллит.

На примере кристаллита железа в настоящей работе проведено изучение особенностей взаимодействия ударных волн, сгенерированных каскадами атомных смещений, с дефектами структуры (точечные дефекты и их кластеры) облучаемого материала. Будут рассчитаны параметры ударных волн, сформированных при генерации ПВА с различной энергией, в зависимости от температуры кристаллита и направления импульса ПВА и изучено их влияние на подвижность и перестройку точечных дефектов и их кластеров, удалённых от каскадов. Все расчёты проводились на суперкомпьютере СКИФ Cyberia Томского государственного университета с использованием программного пакета LAMMPS, который позволяет эффективно распараллеливать вычислительный процесс.

ФОРМАЛИЗМ

В качестве исследуемого материала было выбрано железо, сплавы которого широко используются в атомной энергетике. Все расчёты проводились в рамках метода молекулярной динамики с использованием пакета LAMMPS [13]. Для описания межатомного взаимодействия использовался парный центрально-симметричный потенциал [14], учитывающий вклад многочастичных взаимодействий в приближении газа валентных электронов. Выбранный потенциал позволяет с высокой точностью описывать упругие характеристики материала, энергии образования и миграции точечных дефектов, параметр решётки и т.д., что является важным условием для корректного моделирования первичной радиационной повреждаемости. Временной шаг интегрирования выбирался из условия, чтобы за один шаг атом с максимальной скоростью перемещался менее чем на $0,01 \text{ \AA}$. Моделируемые кристаллиты имели форму параллелепипедов и содержали от 200 тыс. до 10 млн атомов. По всем направлениям задавались периодические граничные условия. Энергия ПВА варьировалась от 15 эВ до 40 кэВ. Температура образцов составляла от 0 до 300 К. Напряжение для каждого атома рассчитывалось как одна третья суммы диагональных компонентов тензора σ_{ab} :

$$\sigma_{ab}(i) = -\frac{1}{V_{at}(i)} \left[m(i)v_a(i)v_b(i) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_p} [r_a(i)F_b(ij) + r_a(j)F_b(ji)] \right],$$

где компоненты тензора a и b принимают значения x, y и z ; V_{at} — атомный объём; $m(i)$ — масса атома i ; $v_a(i)$ — a -й компонент скорости атома i ; $r_a(i)$ — a -й компонент радиус-вектора атома i ; $F_b(ij)$ — b -й компонент силы, с которой атом i действует на атом j ; суммирование производится по N_p соседям атома i .

УДАРНЫЕ ВОЛНЫ ПРИ ПЕРВИЧНОМ РАДИАЦИОННОМ ПОВРЕЖДЕНИИ

Отметим, что генерация ударных волн всегда происходит на атомном уровне при элементарном акте радиационного воздействия — генерации и аннигиляции пары Френкеля. Изучение этих волн мотивировано тем, что генерация и аннигиляция пар Френкеля на баллистической и последующих стадиях развития каскада носит лавинообразный характер и во многом определяет формирование дефектной структуры. Можно предположить, что ударные волны от образования-схлопывания дислокационных петель и пор будут большими по величине, и их изучение может стать предметом отдельного исследования. В настоящей работе формирование пары Френкеля моделировалось заданием импульса одному из атомов в образце. Расчёты проводились для трёх направлений импульса ПВА: $[100]$, $[110]$ и $[111]$. Величина энергии ПВА (15 эВ) выбиралась таким образом, чтобы быть немного меньше минимальной пороговой энергии смещения для рассматриваемых направлений импульса ПВА (минимальное значение составляет 16 эВ для направления $[100]$). Температура кристаллитов составляла от 0 до 300 К.

На рис. 1 показано распределение напряжений во фрагменте моделируемого кристаллита железа в различные моменты времени после генерации в нем ПВА.

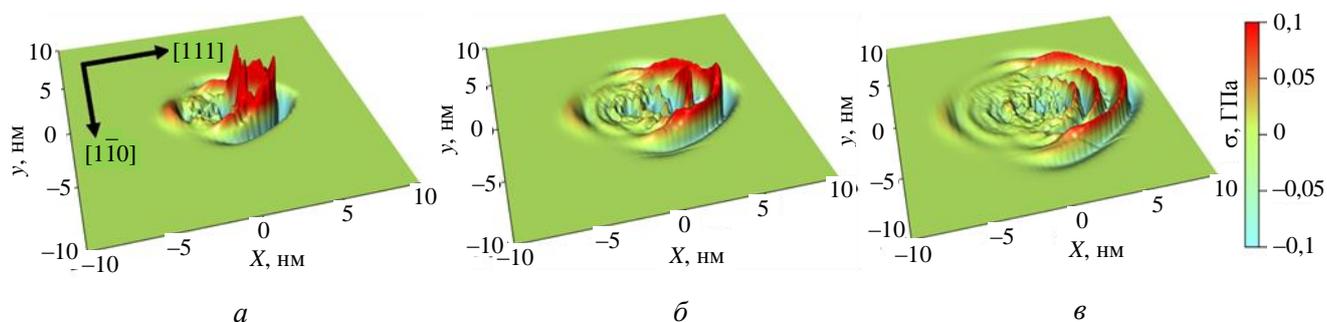


Рис. 1. Распределение напряжений в фрагменте структуры кристаллита в разные моменты времени: 0,5 (а); 0,75 (б); 1 пс (в). Направление импульса ПВА $[111]$. Температура кристаллитов 0 К

Рассматриваемый фрагмент структуры содержал ПВА и представлял собой слой, состоящий из трёх атомных плоскостей. Импульс ПВА совпадает с направлением оси X . Задание импульса ПВА приводит к

возникновению ударных волн. При этом впереди распространяется ударная волна сжатия (синий цвет — отрицательные напряжения), за ней следует волна растяжения (красный цвет — положительные напряжения) и более слабые возмущения. Следует отметить, что фронт ударных волн распространяется с разными скоростями вдоль разных направлений, поэтому его форма отличается от сферической [15—19]. В наших расчётах для импульсов ПВА, ориентированных вдоль [110] и [111], фронт волны вытягивается в тех же направлениях, а при смещении ПВА вдоль [100] волна распространяется с наибольшей скоростью по плотно упакованным направлениям $[1\pm 1\pm 1]$.

Вследствие внутреннего трения и расширения фронта сгенерированных волн их амплитуда со временем уменьшается (рис. 2). Наибольшей амплитудой и наименьшим затуханием характеризуется волна, инициированная ПВА, импульс которого ориентирован вдоль плотно упакованного направления [111].

В этом случае в течение 0,3 пс образуется динамический краудион. При этом ударная волна фокусированно распространяется вдоль направления [111] со сверхзвуковой скоростью $\sim 12\,500$ м/с на расстояние около 50 \AA . После рекомбинации краудиона инициированная ударная волна распространяется с звуковой скоростью (6200 м/с). При смещении ПВА вдоль [100] волна фокусированно распространяется по цепочке атомов вдоль данного направления в течение 0,15 пс со сверхзвуковой скоростью ~ 9500 м/с. После того, как атомы в цепочке возвращаются в свои узлы, скорость волны уменьшается до звуковой. Другое поведение материала наблюдается при задании импульса ПВА вдоль [110], в частности, не возникает фокусирования ударной волны. В течение первых 0,05 пс импульс ПВА передаётся атомам в направлениях [110], [111] и $[11\bar{1}]$, после чего ПВА возвращается

в свой узел. При этом инициированная волна на протяжении всего времени расчёта распространяется с звуковой скоростью. Следует отметить, что вплоть до температуры 300 К вид полученных кривых почти не отличается от аналогичных для 0 К, за исключением того, что на участке линейного затухания амплитуды волны значения для высоких температур меньше на 2—5 ГПа. Прежде всего это связано с воздействием тепловых флуктуаций на процесс генерации и распространения ударных волн.

ФОРМИРОВАНИЕ УДАРНЫХ ВОЛН ПРИ ГЕНЕРАЦИИ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ

Энергия ПВА в облучённом материале варьируется в широком интервале вплоть до нескольких сотен кэВ [11]. При этом чем выше энергия ПВА, тем большее число ударных волн и с большей амплитудой будет сформировано в материале. Характерное распределение напряжений в кристаллите железа после генерации в нём каскада атомных смещений с энергией ПВА 40 кэВ представлено на рис. 3. Расчёты показали, что формирование ударных волн в кристаллите происходит в первую пикосекунду развития каскада атомных смещений на баллистической стадии. Первоначально фронт волны имеет сферическую форму, затем он искажается вследствие анизотропности упругих свойств моделируемого кристаллита, вытягиваясь в направлениях типа $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ [15—19]. Так, скорость распространения звуковой волны от каскада 40 кэВ при температуре 10 К вдоль $\langle 111 \rangle$ составляет ~ 7000 м/с, вдоль $\langle 110 \rangle$ — ~ 6900 м/с,

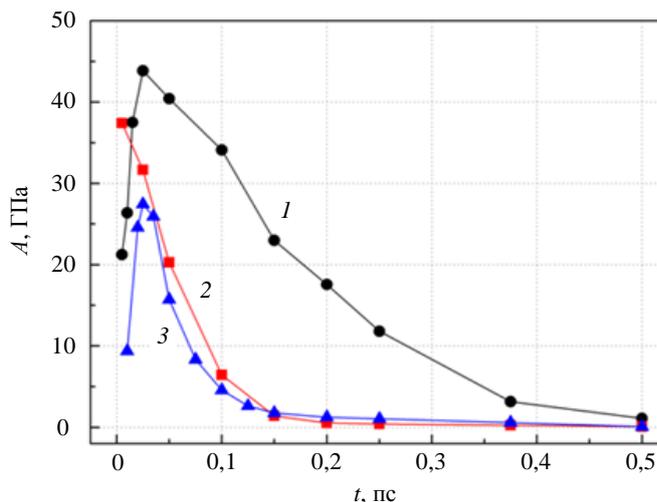


Рис. 2. Зависимость амплитуд волн сжатия при формировании и аннигиляции пары Френкеля от времени для различных направлений импульса ПВА: 1 — [111]; 2 — [100]; 3 — [110]

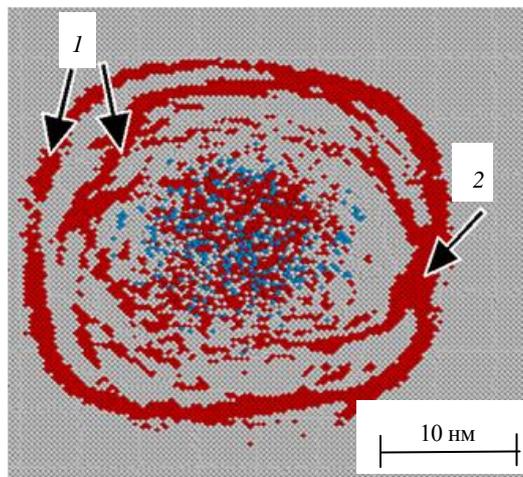


Рис. 3. Проекция фрагмента структуры кристаллита на плоскость (110) через 1 пс после генерации в нём каскада атомных смещений. Красный цвет атомов соответствует сжимающим напряжениям, синий — растягивающим, серый — нулевым

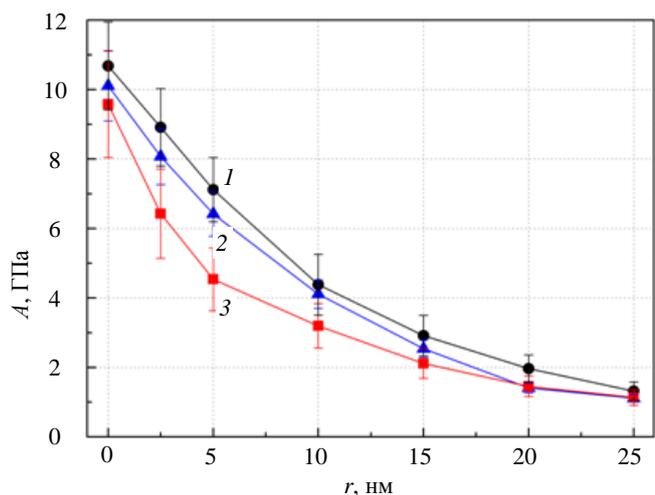


Рис. 4. Зависимость амплитуды волны сжатия от расстояния, пройденного волной вдоль различных направлений: 1 — направление [111], 2 — [110], 3 — [100]

энергии ПВА выше 20 кэВ каскады атомных смещений расщепляются на субкаскады [11]. При этом каждый субкаскад генерирует собственную ударную волну. На рис. 3 положение ударных волн отмечено стрелками 1 и выделено красным цветом, стрелкой 2 показана область, в которой такие волны взаимодействуют друг с другом.

$\langle 100 \rangle$ — ~ 6300 м/с. По мере распространения амплитуды волны затухают вследствие тепловых флуктуаций и расширения фронта. Зависимость амплитуды волн от пройденного ими расстояния для каскада с энергией 40 кэВ при температуре кристаллита 10 К показана на рис. 4. Независимо от направления распространения амплитуда волны уменьшается почти с одинаковой скоростью по экспоненциальному закону. Отметим, что расстояния, на которые распространяются ударные волны, существенно больше размера радиационно-поврежденной зоны. Следовательно, они могут оказывать влияние на эволюцию структурных дефектов, расположенных вне области развития каскада атомных смещений.

В моделируемом кристаллите железа при

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УПРУГИХ ВОЛН С ТОЧЕЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ И ИХ КЛАСТЕРАМИ

В используемых на практике материалах всегда содержится большое количество дефектов различного типа, включая кластеры точечных дефектов. Поэтому представляет интерес исследовать особенности взаимодействия волн, сгенерированных каскадом атомных смещений, с имеющимися в кристаллите дефектами. Для этого в работе моделировалось поведение образцов при взаимодействии ударных волн с вакансионными кластерами. Моделируемые кристаллиты имели размер $5 \times 5 \times 20$ нм, температура которых составляла 10 К. Как отмечалось ранее, каскады атомных смещений с высокой энергией ПВА могут генерировать несколько последовательно распространяющихся ударных волн. Для генерации ударных волн слою образца, содержащему 5 атомных плоскостей, дважды с интервалом 0,5 пс сообщалась скорость 700 м/с. Слой располагался на расстоянии 3 нм от вакансионного кластера. В результате такого воздействия в кристаллите формировались две ударные волны с амплитудой 400 м/с. Конфигурация вакансионных кластеров, содержащихся в образце, изображена на рис. 5, а: четыре вакансии располагаются в вершинах одной грани (010) элементарной ОЦК-ячейки, а пятая вакансия находится в центре ячейки. На рис. 5, б, в, г представлена проекция фрагмента структуры кристаллита на плоскость (100), содержащего данные кластеры, в различные моменты времени после генерации ударных волн вдоль направления [010]. Основание кластеров ориентировано перпендикулярно к направлению распространения волны, а вершина направлена в сторону распространения волны.

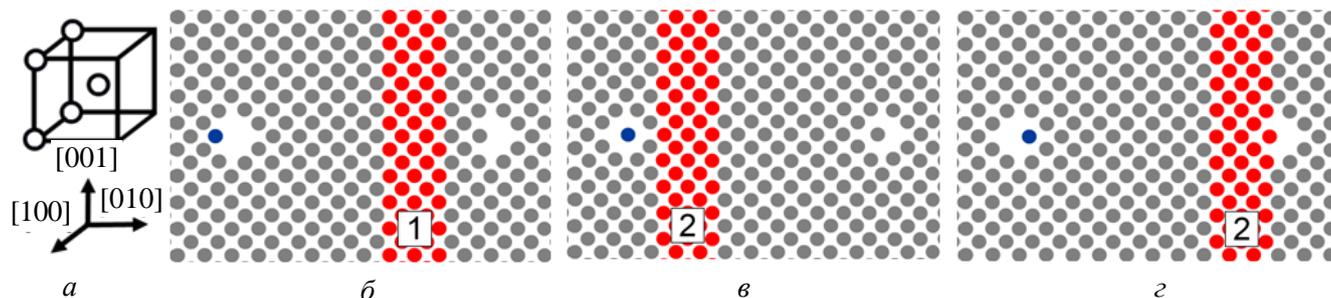


Рис. 5. Схематическое расположение вакансий в моделируемых кластерах (а), фрагмент структуры кристаллита, содержащий вакансионные комплексы, в различные моменты времени после генерации в нём упругих волн: 0,6 (б); 0,9 (в); 1,2 пс (г). Красным цветом и цифрой отмечено положение ударной волны и её номер по порядку соответственно

В результате прохождения первой волны кластеры не поменяли свою конфигурацию, хотя их ближайшее атомное окружение претерпело существенные смещения (см. рис. 5, б). После прохождения второй волны через левый кластер атом, отмеченный синим цветом, выбивается в область вакансионного кластера (см. рис. 5, в) и занимает место вакансии в вершине кластера (см. рис. 5, з). Отметим, что после прохождения второй волны через правый кластер его структура осталась неизменной. Анализ распределения атомных скоростей в окрестности вакансионных кластеров показал, что рассматриваемые волны вызывают локальное повышение температуры. Так, после прохождения волны температура ближайшего атомного окружения вакансионного кластера повысилась до 60 К с последующим охлаждением до 15 К за 1 пс.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере модельного кристаллита железа показано, что при формировании пар Френкеля или каскадов атомных смещений генерируются ударные волны. При этом каждый субкаскад генерирует собственную ударную волну, вследствие чего волновой фронт имеет сложную конфигурацию. Первоначально скорость распространения ударных волн превышает скорость звука, а затем достаточно быстро уменьшается до звуковой. Ударные волны генерируются в первую пикосекунду развития каскада атомных смещений и распространяются значительно дальше области первичных радиационных повреждений. Вследствие анизотропии свойств исследуемого материала форма фронта ударных волн отличается от сферической, вытягиваясь вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$. Максимальной скоростью и амплитудой характеризуются волны, распространяющиеся вдоль плотно упакованного направления $\langle 111 \rangle$. В исследуемом интервале (от 0 до 300 К) характеристики ударных волн слабо зависят от температуры.

Взаимодействие исследуемых волн с точечными дефектами и их кластерами может приводить к перестройке их структуры и локальному повышению температуры образца. Принимая во внимание, что в процессе генерации и развития каскада атомных смещений формируется большое количество ударных волн, их воздействие на дефектную структуру материала может быть существенным.

Работа выполнена при финансовой поддержке государственного контракта Н.4х44.90.13.1082 с Государственной корпорацией по атомной энергии «Росатом» в рамках ФЦП «Ядерные энерготехнологии нового поколения» и программы повышения конкурентоспособности Национального исследовательского Томского государственного университета.

REFERENCES

1. Ciupiski L., Ogorodnikova O., Plociski T., Andrzejczuk M., Rasiski M., Mayer M., Kurzydowski K. TEM observations of radiation damage in tungsten irradiated by 20 MeV W ions. — Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 2013, vol. 317, Part A, pp. 159—164.
2. Yi X., Jenkins M., Briceno M., Roberts S., Zhou Z., Kirk M. In situ study of self-ion irradiation damage in W and W—5Re at 500 °C. — Phil. Mag., 2013, vol. 165, issue 93, pp. 1715—1738.
3. Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Zheleznyakov A.V., Chernov V.M. The atomic collisions cascades in the crystallites of vanadium with intergranular boundaries. — Fiz. mezomekh. (Phys. mesomech.), 2008, vol. 11, issue 4, pp. 5—13 (in Russian).
4. Psakhie S.G., Zolnikov K.P., Kryzhevich D.S., Zheleznyakov A.V., Chernov V.M. The development of atomic collisions cascades in the crystal of vanadium with internal structure. — Kristallografiya (Crystallography), 2009, vol. 54, issue 6, pp. 1053—1062 (in Russian).
5. Bringa E., Wirth B., Caturla M., Stilken J., Kalantar D. Metals far from equilibrium: From shocks to radiation damage. — Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, 2003, vol. 202, pp. 56—63.
6. Calder A., Bacon D., Barashev A., Osetsky Y. On the origin of large interstitial clusters in displacement cascades. — Philos. Mag., 2010, vol. 90, pp. 863—884.
7. Nordlund K., Keinonen J., Ghaly M., Averback R.S. Coherent displacement of atoms during ion irradiation. — Nature, 1999, vol. 398, pp. 49—51.

8. **Indenbom V.L.** A new hypothesis on the mechanism of radiation-induced processes. — *Pis'ma v ZhTF* (Letters to JTPH), 1979, vol. 5, № 9, pp. 489—492 (in Russian).
9. **Zhetbaeva M.P., Indenbom V.L., Kirsanov V.V., Chernov V.M.** Defects migration, stimulated by formation and collapse of unstable Frenkel pair. — *Pis'ma v ZhTF* (Letters to JTPH), 1979, vol. 5, № 19, pp. 1157—1161 (in Russian).
10. **Kirsanov V.V., Zhetbaeva M.P.** Impurity migration stimulated by generation and recombination of Frenkel pair. — *Solid State Commun.*, 1982, vol. 42, pp. 343—346.
11. **Stoller R.E.** The role of cascade energy and temperature in primary defect formation in iron. — *J. Nucl. Mater.*, 2000, vol. 276, pp. 22—32.
12. **Nordlund K., Averback R.S.** Point defect movement and annealing in collision cascades. — *Phys. Rev. B*, 1997, vol. 56, pp. 2421—2431.
13. **Plimpton S.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. — *J. Comp. Phys.*, 1995, vol. 117, pp. 1—19.
14. **Romanov V.A., Sivak A.B., Chernov V.M.** Crystallographic, energetic and kinetic properties of self-point defects and their clusters in bcc iron. — *VANT. Ser. Materialovedenie i novye materialy* (Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Material authority and new materials), 2006, vol. 1(66), pp. 129—232 (in Russian).
15. **Arvidsson T.E., Gupta Y.M., Duvall G.E.** Precursor decay in 1060 aluminum. — *J. Appl. Phys.*, 1975, vol. 46, pp. 4474—4478.
16. **Jones O., Holland J.** Effects of grain size on dynamic yielding in explosively loaded mild steel. — *Acta Metallurgica*, 1968, vol. 16, pp. 1037—1045.
17. **Meyers M., Carvalho M.** Shock-front irregularities in polycrystalline metals. — *Mater. Sci. Eng.*, 1976, vol. 24, pp. 131—135.
18. **Meyers M.A.** A model for elastic precursor waves in the shock loading of polycrystalline metals. — *Mater. Sci. Eng.*, 1977, vol. 30, pp. 99—111.
19. **Barber J. L., Kadau K.** Shock-front broadening in polycrystalline materials. — *Phys. Rev. B*, 2008, vol. 77, p. 144106—10.

AUTHORS

Zolnikov K.P. Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, pr. Akademicheskii 2/4, 634021 Tomsk, Russia; National Research Tomsk State University, Lenin Prospect 36, 634050 Tomsk, Russia; kost@ispms.tsc.ru

Korchuganov A.V. Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, pr. Akademicheskii 2/4, 634021 Tomsk, Russia; avkor@ispms.tsc.ru

Kryzhevich D.S. Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, pr. Akademicheskii 2/4, 634021 Tomsk, Russia; National Research Tomsk State University, Lenin Prospect 36, 634050 Tomsk, Russia; kryzhev@ispms.tsc.ru

Chernov V.M. National Research Tomsk State University, Lenin Prospect 36, 634050 Tomsk, Russia; JSC «A.A. Bochvar High-Technology Research Institute of Inorganic Materials», Rogova ul. 5a, 123060 Moscow, Russia; VMChernov@bochvar.ru

Psakhie S.G. Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, pr. Akademicheskii 2/4, 634021 Tomsk, Russia; Tomsk Politechnical University, pr. Lenina 30, 634050 Tomsk, Russia; Skolkovo Institute of Science and Technology, Novaya str. 100, 143025 Moscow region, Odintsovo district, Skolkovo, Russia; sp@ispms.tsc.ru