

**Received:** 10.04.2022

**Revised:** 12.05.2022


**Accepted:** 24.06.2022



**DOI:** 10.17804/2410-9908.2022.3.036-046

## ATOMISTIC DETERMINATION OF STRESS FIELDS IN SAMPLES WITH DEFECTS

K. A. Mushankova<sup>a)\*</sup> and L. V. Stepanova<sup>b)</sup>

*Samara National Research University, 34 Moskovskoe Shosse, Samara, Russian Federation*

<sup>a)</sup>  karina-mush21@mail.ru;

<sup>b)</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6693-3132>  stepanovalv2015@yandex.ru

\*Corresponding author. E-mail: karina-mush21@mail.ru

Address for correspondence: st. Moskovskoye Shosse, 34, Samara, 443086, Russian Federation

The main goal of the study is the atomistic determination of the static stress-strain state at the crack tip in isotropic and anisotropic linearly elastic materials by the molecular dynamics method implemented in the open source LAMMPS (Large-scale Atomistic/Molecular Massively Parallel Simulator). An extensive class of computational experiments has been carried out for a single-crystal copper specimen with a central crack in the LAMMPS. The circumferential distributions of the stress tensor components obtained by molecular dynamics are compared with the angular distributions of brittle fracture continuum mechanics, i.e. with Williams' analytical solution to the problem of an infinite plate loaded with a central crack in a linearly elastic isotropic material. The comparison of the angular distributions of the stress tensor components gained in the framework of atomistic modeling and the angular distributions obtained from the classical solution of continuum mechanics has shown that, at the nanoscale level, the stress fields are in good agreement with their macroscopic values.

**Keywords:** molecular dynamics approach, classical fracture mechanics, embedded atom potential (EAM), crack propagation.

### References

1. Hello G., Tahar M.B., Roelandt J.-M. Analytical determination of coefficients in crack-tip stress expansions for a finite crack in an infinite plane medium. *International Journal of Solids and Structures*, 2012, vol. 49 (3–4), pp. 556–566. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2011.10.024.
2. Stepanova L.V., Yakovleva E.M. Mixed-mode loading of the cracked plate under plane stress conditions. *Vestnik PNIPU. Mekhanika*, 2014, No. 3, pp. 129–162. DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.08. (In Russian).
3. Rashidi Moghaddam M., Ayatollahi M.R., Berto F. The application of strain energy density criterion to fatigue crack growth behavior of cracked components. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2018, vol. 97, pp. 440–447. DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.014.
4. Razavi M.J., Aliha M.R.M., Berto F. Application of an average strain energy density criterion to obtain the mixed mode fracture load of granite rock tested with the cracked asymmetric four-point bend specimen. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*, 2018, vol. 97, pp. 419–425. DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.004.
5. Малюков Л., Веселъ В., Сеитл С. Estimation of the crack propagation direction in a mixed-mode geometry via multi-parameter fracture criteria. *Frattura ed Integrita Strutturale*, 2015, 9 (33), 25–32. DOI: 10.3221/igf-esis.33.04.

6. Chandra S., Kumar N.N., Samal M.K., Chavan V.M., Patel R.J. Molecular dynamics simulation of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies. *Computational Materials Science*, 2016, vol. 117, pp. 518–526. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.02.032.
7. Andric P., Curtin W.A. New theory for Mode I crack-tip dislocation emission. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, vol. 106, pp. 315–337. DOI: 10.1016/j.jmps.2017.06.006.
8. Gao Ying-jun, Deng Qian-qian, Huang Li-lin, Ye Li, Wen Zhen-chuan, Luo Zhi-rong. Atomistic modeling for mechanism of crack cleavage extension on nano-scale. *Computational Materials Science*, 2017, vol. 130, pp. 64–75. DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.01.003.
9. Cui C.B., Beom H.G. Molecular dynamics simulation of edge cracks in copper and aluminum single crystals. *Materials Science and Engineering A*, 2014, vol. 609, pp. 102–109. DOI: 10.1016/j.msea.2014.04.101.
10. Stepanova L.V., Roslyakov P.S. Multi-parameter description of the crack-tip stress field: analytic determination of coefficients of crack-tip stress expansions in the vicinity of the crack tips of two finite cracks in an infinite plane medium. *International Journal of Solids and Structures*, 2016, vols. 100–101, pp. 11–28. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2016.06.032.
11. Hardy R.J. Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: shock waves. *Journal Chemical Physics*, 1982, vol. 76, pp. 622–628. DOI: 10.1063/1.442714.
12. Berinskii I.E., Dvas N.G., Krivtsov A.M., et al. *Uprugie i teplovye svoystva idealnykh kristallov* [Theoretical Mechanics. Elastic Properties of Monoatomic and Diatomic Crystals: educational book, ed., A.M. Krivtsov]. St. Petersburg, Izd-vo Politekhn. Un-ta, 2009. (In Russian).
13. Gaillac Romain, Pullumbi Pluton and Coudert Francois-Xavier. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, vol. 28 (27), 275201. DOI: 10.1088/0953-8984/28/27/275201.

Подана в журнал: 10.04.2022


УДК 539.42



DOI: 10.17804/2410-9908.2022.3.036-046

## АТОМИСТИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ В ОБРАЗЦАХ С ДЕФЕКТАМИ

К. А. Мушанкова<sup>а)</sup>\*, Л. В. Степанова<sup>б)</sup>

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева,  
Московское шоссе, 34, г. Самара, Российская Федерация*

<sup>а)</sup>  karina-mush21@mail.ru;

<sup>б)</sup>  <https://orcid.org/0000-0002-6693-3132>  stepanova1v2015@yandex.ru

\*Ответственный автор. Электронная почта: karina-mush21@mail.ru

Адрес для переписки: ул. Московское шоссе, д. 34, г. Самара, 443086, Российская Федерация

Основная цель исследования – атомистическое определение напряженно-деформированного состояния у вершины трещины в изотропном и анизотропном линейно упругих материалах методом молекулярной динамики, реализованным в открытом коде LAMMPS (Large-scale Atomistic/Molecular Massively Parallel Simulator).

Выполнен широкий класс вычислительных экспериментов для пластины из монокристаллической меди с центральной трещиной в LAMMPS. Окружные распределения компонент тензора напряжений, найденные с использованием молекулярно-динамического моделирования, сравниваются с угловыми распределениями континуальной механики хрупкого разрушения – с аналитическим решением М. Уильямса задачи о нагружении бесконечной пластинки с центральным разрезом в изотропном линейно упругом материале. Сопоставление окружных распределений компонент тензора напряжений, извлеченных из атомистического моделирования, и угловых распределений, полученных из классического решения механики сплошных сред, показало, что на наноразмерном уровне поля напряжений хорошо согласуются с их макроскопическими величинами.

**Ключевые слова:** метод молекулярной динамики, классическая механика разрушения, потенциал погруженного атома, распространение трещины.

### 1. Введение

Работа посвящена атомистическому моделированию полей напряжений вблизи вершины трещины в условиях нормального отрыва. Нахождение полей напряжений, деформаций и перемещений было и остается актуальной задачей современной континуальной механики деформируемого твердого тела [1–5]. Однако, очевидно, что процессы разрушения и нелинейного деформирования, происходящие на макроскопическом уровне и описываемые в настоящее время при помощи математического аппарата механики сплошных сред, обусловлены кристаллической структурой рассматриваемого материала. Поскольку механика сплошных сред исходит из концепции сплошности, она не может описать кристаллическую структуру материала. В настоящее время стали применять подход молекулярной динамики для подсчета параметров моделей механики разрушения [6–9]. Цель исследования – определение напряженно-деформированного состояния на атомистическом уровне при помощи молекулярно-динамического моделирования структуры материала, в качестве которого была выбрана монокристаллическая медь.

Задачи исследования – определение упругих свойств монокристаллической меди методом молекулярной динамики и сравнение упругих свойств, полученных этим методом,

с известными значениями из макроскопических экспериментов, а также определение компонент тензора напряжений вблизи вершины трещины в условиях нормального отрыва.

## 2. Постановка задачи и методы решения

Первым этапом нашего исследования является определение упругих свойств монокристалла меди методом молекулярной динамики, реализованным в LAMMPS. Это необходимо для того, чтобы убедиться, что взятый нами потенциал (файл Cu\_u3.eam) правильно моделирует свойства исследуемого нами материала.

Определить тензор упругих модулей можно, используя потенциальную энергию атомов, которая зависит от компонент тензора деформаций и может быть разложена в ряд Тейлора:

$$E(\varepsilon) = E(0) + \sum_{i=1}^6 \frac{\partial E}{\partial \varepsilon_i} \varepsilon_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^6 \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \varepsilon_i \varepsilon_j,$$

где  $E(0)$  – энергия исходного состояния равновесия;  $\varepsilon_i$  и  $\varepsilon_j$  – компоненты тензора деформаций в нотации Фойгта.

Компоненты тензора упругих модулей рассчитываются по формуле:

$$C_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j}.$$

Для нахождения полей напряжений в непосредственной окрестности вершины трещины использованы два подхода: теоретический подход континуальной механики разрушения (ряд М. Уильямса) и вычислительный метод молекулярной динамики.

Компоненты тензора напряжений в окрестности вершины трещины при помощи разложения М. Уильямса – асимптотического представления поля напряжений в условиях нормального отрыва и/или в условиях смешанного нагружения – определяются формулой [1]:

$$\sigma_{ij}(r, \theta) = \sum_{m=1}^2 \sum_{k=1}^{\infty} a_k^m r^{k/2-1} f_{m,ij}^{(k)}(\theta),$$

где индекс  $m$  соответствует виду нагружения и принимает значение 1 при нормальном отрыве, значение 2 – при поперечном сдвиге;  $a_k^m$  – амплитудные множители, связанные с геометрической конфигурацией, типом и уровнем нагрузки и видом приложенной нагрузки;  $f_{m,ij}^{(k)}(\theta)$  – угловые распределения компонент напряжений.

Приведем формулы для функций, зависящих от угла, присутствующих в компонентах тензора напряжений при нормальном отрыве, представленные в работах [1, 10]:

$$f_{1,11}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \left[ \left( 2 + k/2 + (-1)^k \right) \cos(k/2 - 1)\theta - (k/2 - 1) \cos(k/2 - 3)\theta \right];$$

$$f_{1,22}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \left[ \left( 2 - k/2 - (-1)^k \right) \cos(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1) \cos(k/2 - 3)\theta \right];$$

$$f_{1,12}^{(k)}(\theta) = \frac{k}{2} \left[ - \left( k/2 + (-1)^k \right) \sin(k/2 - 1)\theta + (k/2 - 1) \sin(k/2 - 3)\theta \right].$$

Приведем выражения для амплитудных множителей (коэффициентов ряда М. Уильямса) поля напряжений в изотропной линейно упругой бесконечной пластине, ослабленной центральной трещиной длины  $2a$  при нормальном отрыве [1]:

$$a_{2n+1}^1 = (-1)^{n+1} \frac{(2n)! \sigma_{22}^\infty}{2^{3n+1/2} (n!)^2 (2n-1) a^{n-1/2}};$$

$$a_2^1 = -\sigma_{22}^\infty / 4; \quad a_{2n}^1 = 0.$$

Ранее [3–5] была показана необходимость сохранения высших приближений в асимптотическом представлении М. Уильямса, мы будем удерживать 20 слагаемых при нахождении компонент тензора напряжений этим методом.

Следующий подход – метод молекулярной динамики, реализованный в пакете LAMMPS. В данном методе компоненты тензора напряжений вычисляются по формуле [11]:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_i \left[ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (r_\alpha^j - r_\alpha^i) f_\beta^{ij} - m^i v_\alpha^i v_\beta^i \right],$$

где  $\alpha, \beta$  – индексы декартовой прямоугольной системы координат;  $V$  – полный объем системы;  $r_\alpha^i$  и  $r_\alpha^j$  – координаты атома  $i$  и атома  $j$ ;  $f_\beta^{ij}$  – компонента силы, действующая на атом  $i$  со стороны атома  $j$ ;  $m^i$  – масса  $i$ -го атома;  $v_\alpha^i$  и  $v_\beta^i$  – скорости атома  $i$  вдоль направлений  $\alpha$  и  $\beta$  соответственно.

### 3. Детали моделирования и результаты

Для определения компонент тензора упругих модулей гранецентрированной кубической меди были рассмотрены образцы кубической формы, включающие в себя 32 000 атомов. Для задания межатомного взаимодействия использовался файл Cu\_u3.eam. Временной шаг моделирования был равен  $t_{step} = 0,001$  пс. Система приводилась в равновесное состояние при помощи NVE ансамбля в течение 2 пс. Был выбран этот ансамбль, так как для рассматриваемых условий нет отличий в результатах исследования при моделировании с NVE или NVT ансамблями. Затем для поддержания температуры в 0,1 К использовался термостат Но́зе–Гувера в каноническом NVT ансамбле, реализованный в программном пакете LAMMPS командой fix nvt. Используя команду erate, задавалась постоянная скорость деформации  $\dot{\varepsilon}_{ij}^0 = 0,01$  1/пс, соответствующая различным компонентам тензора деформации. При  $i = j$  компоненты тензора деформации  $\varepsilon_{ii}$  определялись формулой  $\varepsilon_{ii} = \dot{\varepsilon}_{ii}^0 t$ , где  $t$  – время моделирования на соответствующем шаге. Компоненты тензора деформации  $\varepsilon_{ij}$  определялись формулой  $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \dot{\varepsilon}_{ij}^0 t$ . Время моделирования куба для определения упругих модулей было равным 30 пс.

Задавая таким образом различные компоненты тензора деформации в программном пакете LAMMPS, записывали выходной файл со значениями энергии, компонент тензора деформации и объема. Затем полученные значения обрабатывали кодом, написанным на языке Python, где по значениям энергии и соответствующим им деформациям строили аппроксимирующую полиномиальную кривую и выводили ее коэффициенты, для нахождения упругих констант. На рис. 2 представлена зависимость потенциальной энергии от компоненты тензора деформации  $\varepsilon_{11}$  для расчета  $C_{11}$ .

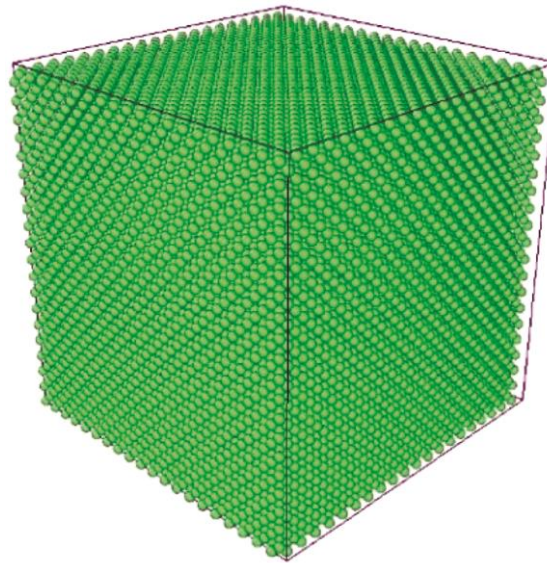


Рис. 1. Визуализация в программе OVITO блока атомов при  $t = 0$

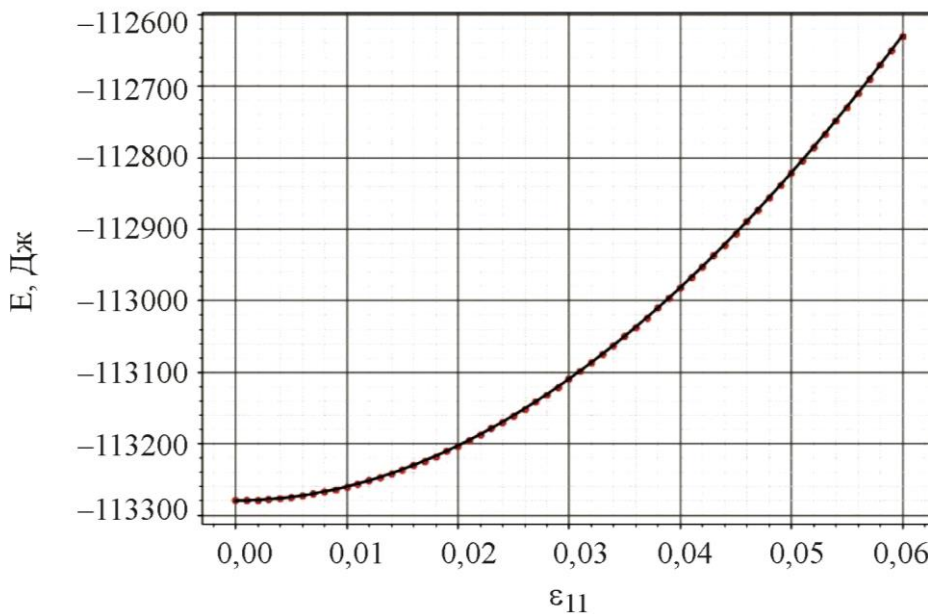


Рис. 2. Зависимость потенциальной энергии блока атомов от компоненты тензора деформации  $\epsilon_{11}$  для расчета  $C_{11}$ . Красные точки – результат молекулярно-динамического моделирования; черная линия – аппроксимирующая полиномиальная кривая

Таким образом, мы получили тензор упругих модулей исследуемого материала, который содержит три независимых упругих константы, что отвечает кубической кристаллической решетке:

$$\begin{bmatrix} 162 & 115 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 115 & 162 & 115 & 0 & 0 & 0 \\ 115 & 115 & 162 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 81 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 81 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 81 \end{bmatrix}.$$

Компоненты тензора упругих модулей представлены в ГПа. Полученный результат с достаточной точностью согласуется с известными макроскопическими значениями [12].

При использовании онлайн-инструмента ELATE [13] по тензору упругих модулей был построен график распределения модуля Юнга. Получившаяся геометрическая фигура иллюстрирует относительное удлинение по каждому направлению для гранецентрированной кубической меди.

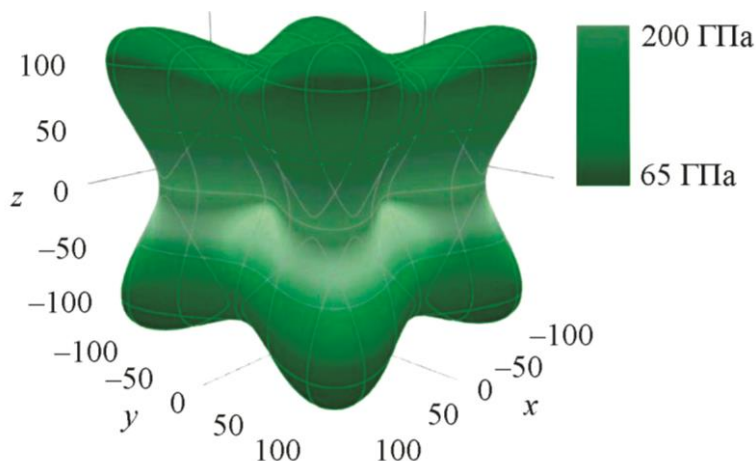


Рис. 3. Модуль Юнга ГЦК-меди

Следующий этап исследования – сопоставление классического решения континуальной механики деформируемого твердого тела с результатами, полученными атомистическим подходом.

При помощи программы LAMMPS моделировалась пластинка размерами  $398,6\text{\AA} \times 398,6\text{\AA} \times 11,96\text{\AA}$ , состоящая из 200 000 атомов, с центральной трещиной размером  $36,5\text{\AA}$ , полученной путем исключения выбранной группы атомов. Материалом пластинки является гранецентрированная кубическая медь с параметром решетки  $3,6150$ . Задавались периодические граничные условия. Временной шаг моделирования был равен  $t_{step} = 0,001$  пс. Система приводилась в равновесное состояние при использовании NVE ансамбля в течение 2 пс. Использовался потенциал погруженного атома (файл Cu\_u3.eam). Для поддержания температуры в  $0,1$  К использовался термостат Нозе–Гувера в каноническом NVT ансамбле.

Температура считалась равной  $0,1$  К для минимизации влияния пластической деформации и максимального удержания пластинки в упругом состоянии, поскольку целью настоящего исследования было сравнение полей напряжений, полученных методом молекулярной динамики, с полями напряжений, полученными с помощью линейной механики разрушения. Была необходимость, чтобы все эффекты, связанные с пластическим деформированием, появлялись как можно позже. С увеличением температуры, появляются дислокации и эффекты затупления вершины трещины гораздо раньше, и тогда временной диапазон, на котором мы можем сравнить решение континуальной механики и решение молекулярной динамики, существенно сузится, поэтому температура была выбрана максимально низкой.

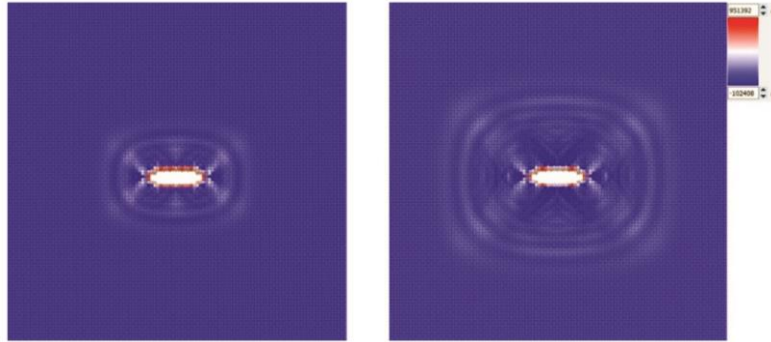


Рис. 4. Распределение компоненты тензора напряжений  $\sigma_{11}$  при  $t = 0,2$  пс и  $t = 0,6$  пс

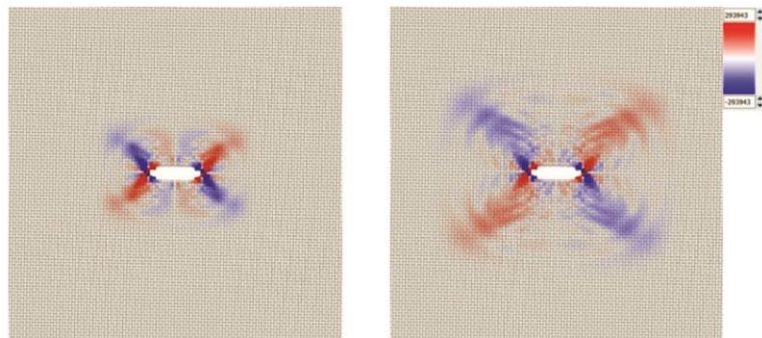


Рис. 5. Распределение компоненты тензора напряжений  $\sigma_{12}$  при  $t = 0,2$  пс и  $t = 0,6$  пс

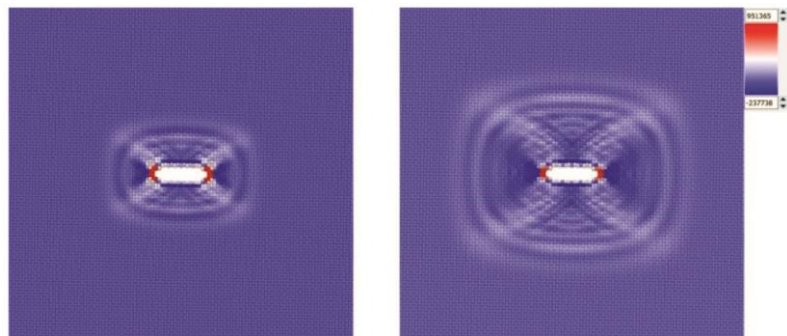


Рис. 6. Распределение компоненты тензора напряжений  $\sigma_{22}$  при  $t = 0,2$  пс и  $t = 0,6$  пс

Пластина растягивалась с постоянной скоростью деформации  $\dot{\varepsilon}_{22}^0 = 0,01$  1/пс, заданной командой `erate` (тем самым задавалась скорость деформирования вдоль оси  $x_2$ ). Длина пластины  $L$  менялась с течением времени по закону  $L(t) = L_0(1 + \dot{\varepsilon}_{22}^0 t)$ , где  $t$  – прошедшее время (в пикосекундах);  $L_0$  – исходная длина пластины. Моделирование пластины с центральной трещиной проводилось в течение 8 пс, поскольку в этот временной промежуток трещина не распространялась, по этой причине мы можем сравнить решение молекулярной динамики и решение классической механики разрушения для неподвижной трещины. Записывался выходной файл, содержащий компоненты тензора напряжений и координаты всех атомов в разные моменты времени. В программном пакете визуализации OVITO были получены рис. 4–6, демонстрирующие распределения составляющих тензора напряжений в разные моменты времени.

В пакете OVITO выбирали контур с центром в вершине трещины и записывали новый выходной файл, содержащий координаты атомов и значения компонент тензора напряжений в выбранной области (рис. 7).



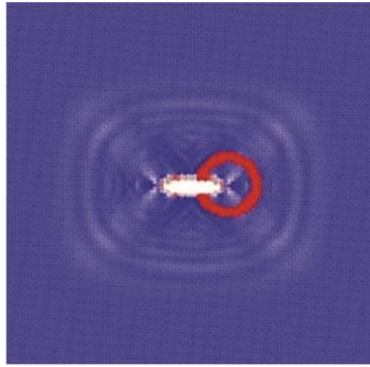


Рис. 7. Выбор кольцевой области с внешним радиусом 18 Å и внутренним радиусом 12 Å на примере с распределением компоненты тензора напряжений  $\sigma_{11}$  в момент времени  $t = 0,6$  пс

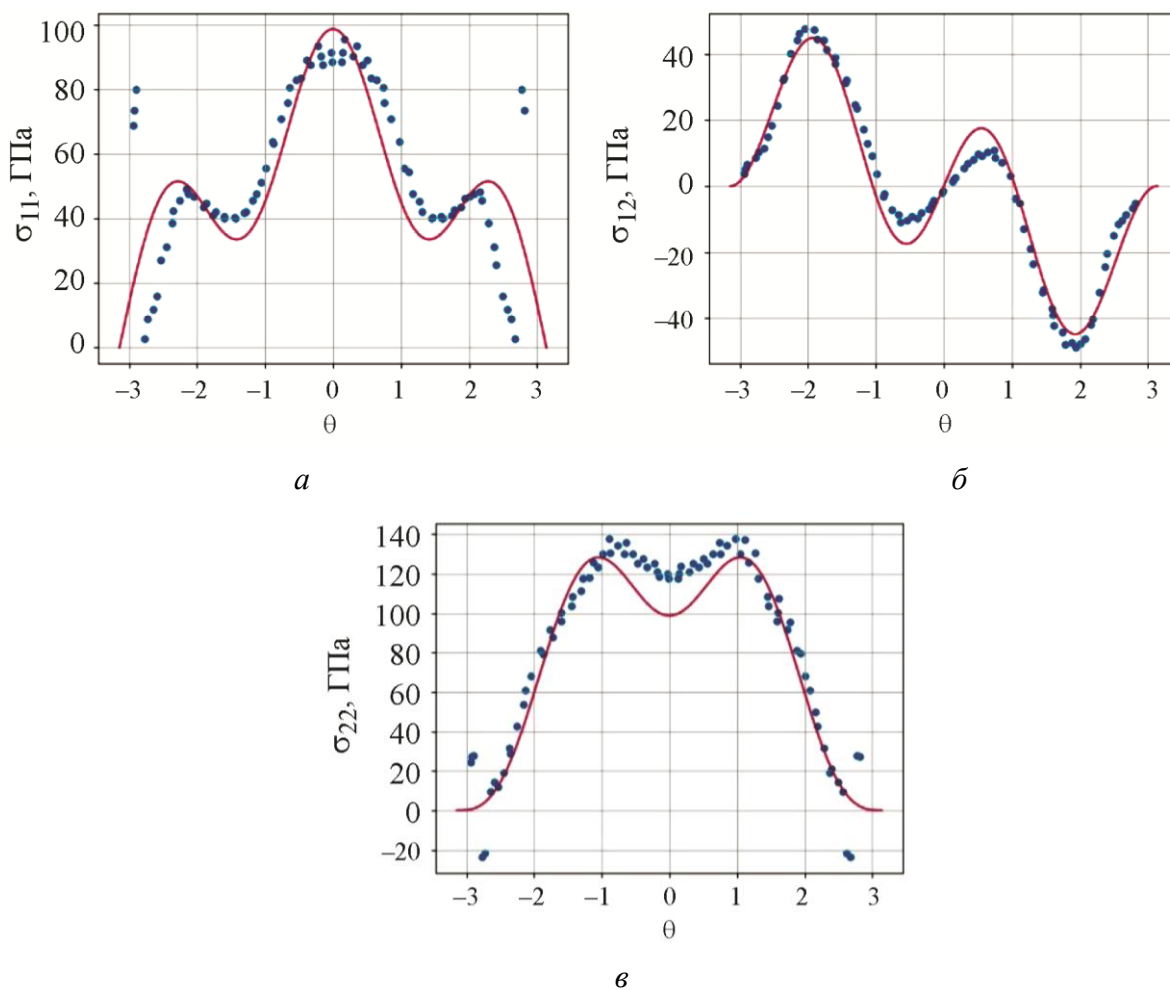


Рис. 8. Характерные окружные распределения компонент  $\sigma_{11}$  (а);  $\sigma_{12}$  (б);  $\sigma_{22}$  (в) вокруг вершины трещины. Точки – угловые распределения компонент тензора напряжений, получаемых методом МД; сплошная линия – угловые распределения компонент тензора напряжений, полученных при использовании разложения Уильямса, содержащего 20 слагаемых

Полученный в OVITO файл обрабатывался кодом, написанным на языке Python. Для значений, полученных методом молекулярной динамики, декартовы координаты переводились

лись в полярные и строились зависимости компонент тензора напряжений  $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}$  от полярного угла  $\theta$ . Также на этих графиках строились зависимости компонент тензора напряжений  $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}$ , полученные при использовании классического решения Уильямса, содержащего 20 слагаемых, от полярного угла  $\theta$ , изменяющегося от  $-\pi$  до  $\pi$ .

#### 4. Заключение

Сопоставление окружных распределений компонент тензора напряжений, полученных в рамках атомистического моделирования, и угловых распределений, полученных аналитическими решениями механики сплошных сред, показало, что на наноразмерном уровне поля напряжений хорошо согласуются с их макроскопическими величинами и, следовательно, классическая механика разрушения может применяться на атомистическом уровне и известные параметры могут быть использованы для создания связи между моделями на атомистическом и макроскопическом уровнях.

#### Литература

1. Hello G., Tahar M. B., Roelandt J.-M. Analytical determination of coefficients in crack-tip stress expansions for a finite crack in an infinite plane medium // *International Journal of Solids and Structures*. – 2012. – Vol. 49 (3–4). – P. 556–566. – DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2011.10.024.
2. Степанова Л. В., Яковлева Е. М. Смешанное деформирование пластины с трещиной в условиях плоского напряженного состояния // *Вестник ПНИПУ. Механика*. – 2014. – № 3. – С. 129–162. – DOI: 10.15593/perm.mech/2014.3.08.
3. Rashidi Moghaddam M., Ayatollahi M., Berto F. The application of strain energy density criterion to fatigue crack growth behavior of cracked components // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. – 2018. – Vol. 97. – P. 440–447. – DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.014.
4. Razavi M. J., Aliha M. R. M., Berto F. Application of an average strain energy density criterion to obtain the mixed mode fracture load of granite rock tested with the cracked asymmetric four-point bend specimen // *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*. – 2018. – Vol. 97 – P. 419–425. – DOI: 10.1016/j.tafmec.2017.07.004.
5. Малнковб L., Veselэ V., Seitl S. Estimation of the crack propagation direction in a mixed-mode geometry via multi-parameter fracture criteria // *Frattura ed Integrita Strutturale*. – 2015. – 9 (33). – P. 25–32. – DOI: 10.3221/igf-esis.33.04.
6. Molecular dynamics simulation of crack growth behavior in Al in the presence of vacancies / S. Chandra, N. N. Kumar, M. K. Samal, V. M. Chavan, R. J. Patel // *Computational Materials Science*. – 2016. – Vol. 117. – P. 518–526. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.02.032.
7. Andric P., Curtin W. A. New theory for Mode I crack-tip dislocation emission // *Journal of Mechanics and Physics of Solids*. – 2017. – Vol. 106. – P. 315–337. – DOI: 10.1016/j.jmps.2017.06.006.
8. Atomistic modeling for mechanism of crack cleavage extension on nano-scale / Ying-jun Gao, Qian-qian Deng, Li-lin Huang, Li Ye, Zhen-chuan Wen, Zhi-rong Luo // *Computational Materials Science*. – 2017. – Vol. 130. – P. 64–75. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.01.003.
9. Cui C. B., Beom H. G. Molecular dynamics simulation of edge cracks in copper and aluminum single crystals // *Materials Science and Engineering A*. – 2014. – Vol. 609. – P. 102–109. – DOI: 10.1016/j.msea.2014.04.101.
10. Stepanova L. V., Roslyakov P. S. Multi-parameter description of the crack-tip stress field: analytic determination of coefficients of crack-tip stress expansions in the vicinity of the crack tips of two finite cracks in an infinite plane medium // *International Journal of Solids and Structures*. – 2016. – Vols. 100–101. – P. 11–28. – DOI: 10.1016/j.jmps.2017.06.006.
11. Hardy R. J. Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: shock waves // *The Journal of Chemical Physics*. – 1982. – Vol. 76. – P. 622–628. – DOI: 10.1063/1.442714.

12. Теоретическая механика. Упругие и тепловые свойства идеальных кристаллов: учеб. пособие / И. Е. Беринский, Н. Г. Двас, А. М. Кривцов, А. М. Кударова, В. А. Кузькин, А. А. Ле-Захаров, О. С. Лобода, И. И. Нейгебауэр, Е. А. Подольская. / под ред. А. М. Кривцова. – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2009. – 144 с. – ISBN 978-5-7422-2342-9.
13. Gaillac R., Pullumbi P., Coudert F.-X. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2016. – Vol. 28 (27). – 275201. – DOI: 10.1088/0953-8984/28/27/275201.