

ТЕОРИЯ
МЕТАЛЛОВ

УДК 669.71:539.1.043

РАДИАЦИОННЫЕ ДЕФЕКТЫ В АЛЮМИНИИ. МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПЕРВИЧНЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ В КАСКАДАХ СМЕЩЕНИЙ
В ОБЪЕМЕ МАТЕРИАЛА

© 2019 г. Р. Е. Воскобойников*

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”,
123182 Россия, Москва, пл. академика Курчатова, 1

*e-mail: roman.voskoboynikov@gmail.com

Поступила в редакцию 02.03.2018 г.

После доработки 17.05.2018 г.

Методом молекулярной динамики смоделированы каскады смещений, создаваемые первично выбитыми атомами (ПВА) с энергией $E_{\text{ПВА}} = 5, 10, 15$ и 20 кэВ в алюминии, находящемся при температуре $T = 100, 300$ и 600 К. Для каждой пары параметров ($E_{\text{ПВА}}, T$) смоделирована серия из 24 каскадов, обеспечивающая репрезентативную статистическую выборку. В результате проведенных исследований получено число пар Френкеля, доля вакансий ϵ_{vac} и междоузлий ϵ_{SIA} в кластерах точечных дефектов, средний размер вакансионных $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ и междоузельных $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ кластеров, среднее число вакансионных $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$ и междоузельных $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ кластеров на каскад и среднее время релаксации τ_c каскада как функция ($E_{\text{ПВА}}, T$). Показано, что каскады смещений в алюминии распадаются на несколько субкаскадов, расположенных вдоль траектории ПВА. Именно с такой пространственной структурой каскадов связано отсутствие зависимости значений $\langle \epsilon_{\text{vac}} \rangle$, $\langle \epsilon_{\text{SIA}} \rangle$, $\langle N_{\text{vac}} \rangle$, $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ и τ_c от энергии ПВА.

Ключевые слова: алюминий, первичные повреждения, каскады смещений, компьютерное моделирование, молекулярная динамика, вакансии, междоузельные атомы, кластеры точечных дефектов

DOI: 10.1134/S0015323018110219

ВВЕДЕНИЕ

Из ≈ 200 МэВ энергии, высвобождаемой при делении одного ядра ^{235}U , только $\approx 3\%$ приходится на кинетическую энергию испускаемых нейтронов, тогда как более 80% выделяется в виде тепла. В отличие от ядерных энергетических установок, предназначенных для производства электроэнергии, в исследовательских реакторах тепловыделение является побочным продуктом генерации нейтронов, а эффективный теплоотвод – одной из инженерных задач, которую необходимо решить при эксплуатации таких “нейтронных фабрик”.

Благодаря уникальному сочетанию физических свойств, алюминий и его сплавы широко применяются в исследовательских реакторах, в частности, в топливных элементах. Алюминий здесь используется как в качестве теплопроводящей матрицы, в которую инкапсулированы делящиеся материалы, так и для изготовления защитной оболочки. Основные усилия при разработке топливных элементов направлены на увеличение глубины выгорания, продолжительности топлив-

ного цикла и повышение плотности потока нейтронов.

Высокая плотность потока нейтронов, необходимая для проведения материаловедческих исследований и ускоренной наработки изотопов, ведет к повышенному энерговыделению в активной зоне, эффективный теплоотвод из которой достигается увеличением отношения поверхности топливных элементов к их объему. Толщина топливных элементов ряда исследовательских реакторов составляет всего 1.27 мм, а толщина оболочки – 0.25 мм.

С ростом удельной доли поверхности возрастает вклад поверхностных радиационных эффектов в общий уровень создаваемых радиационных повреждений. Анализу дефектообразования на поверхности алюминия, подвергаемого облучению быстрыми частицами, посвящена данная работа. В этой статье представлены данные компьютерного моделирования радиационных повреждений в объеме материала, необходимые для проведения сравнительного анализа результатов моделирования поверхностных каскадов, опубликованных в [1].

Таблица 1. Равновесные параметры ГЦК-решетки алюминия, использованные при МД-моделировании каскадов смещений

Температура кристалла, К	Равновесный параметр решетки a , нм
0	0.405
100	0.405648
300	0.40687
600	0.4093

Таблица 2. Число атомов в моделируемом кристалле, выбранное в зависимости от энергии $E_{\text{ПВА}}$

$E_{\text{ПВА}}$, кэВ	Число атомов в кристалле
5	500000
10	1048576
15	1492992
20	2048000

ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Первичным процессом, происходящим в материалах, подвергаемых облучению быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии, является смещение атомов мишени из равновесных позиций в каскадах, инициированных первично выбитыми атомами (ПВА) с энергией $E_{\text{ПВА}}$ больше ~ 1 кэВ. Каскад смещений занимает область $\sim 10\text{--}30$ нм и протекает за время $\sim 1\text{--}20$ пс. В настоящее время не существует экспериментальных методов прямого исследования первичного дефектообразования в каскадах смещений, и моделирование методом молекулярной динамики (МД) является единственным способом изучения этого процесса.

Каскад смещений – стохастический процесс. Число пар Френкеля, форма, размер и число кластеров точечных дефектов и т.п. варьируются в широких пределах даже для каскадов, инициированных при одинаковой температуре T и энергии ПВА, $E_{\text{ПВА}}$. Чтобы получить статистически достоверные результаты моделирования, необходимо определить репрезентативный размер статистической выборки. В данной работе минимально необходимое число каскадов смещений в серии с одинаковым набором параметров ($E_{\text{ПВА}}$, T) определено *a posteriori*.

Изучение первичного радиационного дефектообразования при облучении быстрыми частицами в проводимом исследовании, таким образом, сводится к моделированию серии каскадов смещений при различных значениях ($E_{\text{ПВА}}$, T) с последующим анализом дефектной микрострук-

туры и статистической обработкой полученных результатов.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ МЕТОДЫ

Для вычисления межатомных сил взаимодействия в алюминии использован потенциал [2], модифицированный на коротких расстояниях подставкой потенциала Зиглера–Бирсака–Литтмарка [3], следуя процедуре [4]. Для подгонки использованы экспериментальные значения пороговой энергии смещения в алюминии $E_d = 16 \pm 3$ эВ [5, 6]. Полученный потенциал имеет пороговую энергию смещения $13 \leq E_d \leq 14$ эВ. Модификация потенциала не повлияла на равновесный параметр решетки, энергию связи $E_0 = -3.36$ эВ, энергию образования вакансии $E_v^f = 0.68$ эВ, упругие константы, энергии дефекта упаковки и свободной поверхности.

Моделирование первичных повреждений в алюминии проведено при температуре материала $T = 100, 300$ и 600 К. Используя теорему о вириале [7], для всех значений T определены равновесные параметры решетки, соответствующие нулевым внутренним напряжениям (табл. 1). Все расчеты проводились в статистическом ансамбле NVE . Моделируемый кристалл имел форму куба, грани которого совпадают с плоскостями $\{100\}$. На всех гранях использованы периодические граничные условия.

Моделирование каскадов смещений в алюминии выполнено для четырех энергий ПВА, $E_{\text{ПВА}} = 5, 10, 15$ и 20 кэВ. Для имитации случайного пространственного и временного распределения ПВА вводили в различных местах кристалла в различные моменты времени в кристаллографических направлениях типа $\langle 123 \rangle$. Для каждой пары ($E_{\text{ПВА}}$, T) смоделировано 24 каскада.

Размер кристалла выбирали в зависимости от энергии $E_{\text{ПВА}}$ (табл. 2). Перед введением ПВА кристалл был отрелаксирован в течение 10^4 итераций при температуре моделирования. Температура кристалла не контролировалась. На рис. 1 показано типичное изменение эффективной максвелловской температуры в процессе релаксации каскада смещений, инициированного ПВА с энергией 20 кэВ в алюминии при температуре $T = 100$ К. После остывания каскада нагрев кристалла, вызванный введением ПВА, не превышал ≈ 40 К ни в одном из проведенных компьютерных экспериментов.

На начальной стадии развития каскада смещений относительно небольшое число атомов кристалла движется с высокой скоростью, в то время как основной объем материала находится в состоянии равновесия. В методе скоростей Верле [8], использованном для интегрирования уравнений движения, для сходимости решения шаг интегри-

рования по времени τ выбирается, исходя из энергии самого быстрого атома. Сразу после введения ПВА, шаг интегрирования τ , обеспечивающий сходимость, падает на три порядка величины (см. рис. 1). Таким образом, прямое интегрирование уравнений движения всего ансамбля ведет к неэффективному использованию вычислительных ресурсов.

Для оптимизации вычислений на начальной стадии развития каскадов смещений использован метод [9]. Устойчивость алгоритма [9] протестирована ранее, а сам метод применялся при моделировании радиационных повреждений в меди [10], цирконии [11] и при исследованиях взаимодействия каскадов смещений с дислокациями [12, 13].

Для идентификации дефектов использованы критерий Линдемманна [14], метод ячеек Вигнера–Зейтса [15] и кластерный анализ [10].

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ, АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ

Число пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$, образующихся в каскадах, является важной характеристикой радиационной стойкости материала. На рис. 2 показаны значения $N_{\text{ФР}}$ для всех смоделированных каскадов и зависимость среднего значения $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ от $(E_{\text{ПВА}}, T)$.

При всех смоделированных температурах $\langle N_{\text{ФР}} \rangle \propto E_{\text{ПВА}}$. Наиболее резкое увеличение $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ с ростом $E_{\text{ПВА}}$ наблюдается при низких T . Простая функциональная зависимость $\langle N_{\text{ФР}}(E_{\text{ПВА}}) \rangle$ позволяет легко экстраполировать ее в область $E_{\text{ПВА}} > 20$ кэВ. С увеличением температуры происходит монотонное снижение $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$, причем наиболее резкое падение $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ наблюдается при больших энергиях ПВА.

Число $N_{\text{ФР}}$ варьируется в широких пределах даже для одинаковых значений $(E_{\text{ПВА}}, T)$. Дисперсия $N_{\text{ФР}}$ растет с увеличением $E_{\text{ПВА}}$ и падением T (см. рис. 2). Важным фактором, определяющим достоверность количественных результатов в таких задачах, является размер статистической выборки.

Необходимый размер выборки позволяет определить зависимость $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ от числа n каскадов смещений в серии с одинаковыми значениями $(E_{\text{ПВА}}, T)$. Пример такой зависимости для $E_{\text{ПВА}} = 20$ кэВ и трех температур моделирования показан на рис. 3, из которого следует, что оптимальное число каскадов в серии в данном случае $18 \leq n < 24$.

Примеры 20 кэВ каскадов смещений, в алюминии при температурах $T = 100, 300$ и 600 К доступны по ссылкам [16–18] соответственно. Морфология каскадных областей в алюминии при различных температурах принципиально не отличается. Как видно из [16–18] и рис. 4, каскад

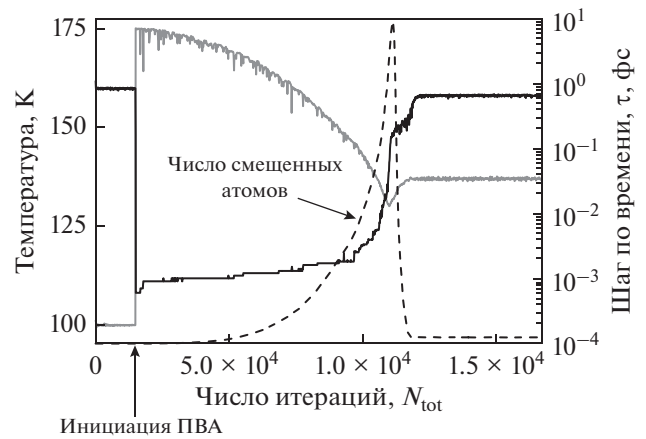


Рис. 1. Характерное изменение температуры T (серая кривая) и шага интегрирования τ (черная кривая) на различных стадиях развития 20 кэВ каскада смещений в алюминии при температуре $T = 100$ К. Штриховой линией качественно показано изменение числа смещенных атомов.

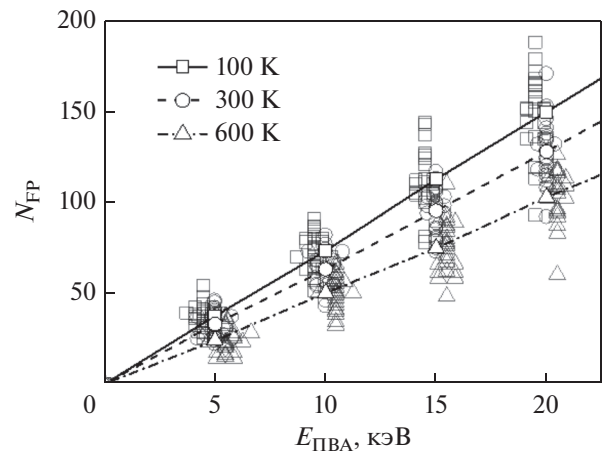


Рис. 2. Зависимость числа пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$ от $(E_{\text{ПВА}}, T)$. Каждая точка соответствует одному каскаду. Линиями соединены средние значения $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$, соответствующие одной температуре.

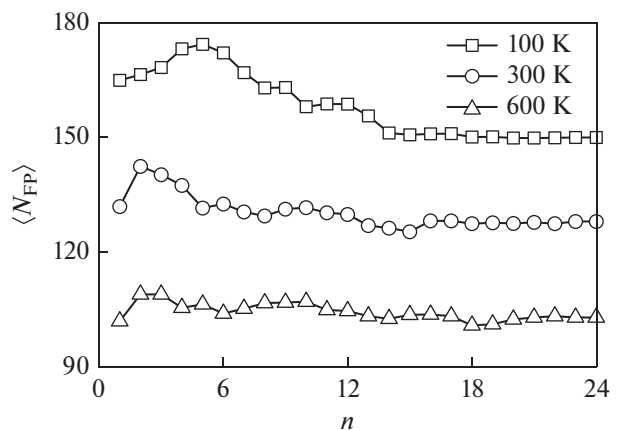


Рис. 3. Зависимость $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ от числа n каскадов в статистической выборке. Каскады инициированы ПВА с энергией $E_{\text{ПВА}} = 20$ кэВ.

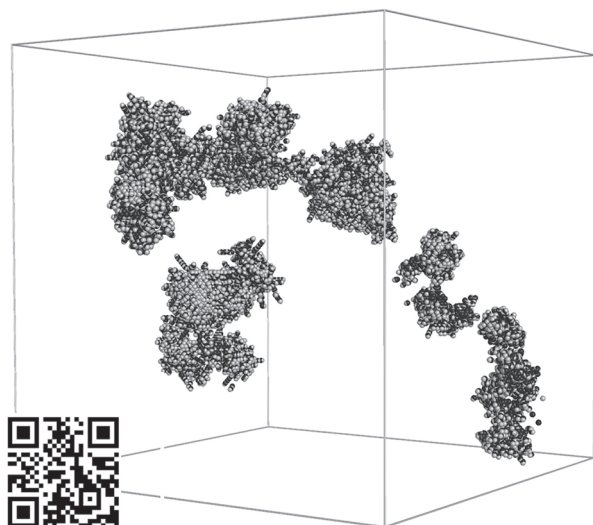


Рис. 4. Типичная морфология 20 кэВ каскада смещений в алюминии при $T = 300$ К. Белым и черным цветом обозначены смещенные атомы и вакансии соответственно. QR-код содержит ссылку [17].

смещений вытянут вдоль траектории ПВА и распадается на несколько субкаскадов. Пространственная плотность каскадов в алюминии невелика, особенно если сравнивать с каскадами смещений в более тяжелой меди [10] и α -цирконии [11].

На рис. 5 представлено пространственное распределение дефектов, оставшихся после релаксации каскада на рис. 4. Междоузельные атомы имеют форму гантели вдоль $\langle 100 \rangle$. Такая конфигурация

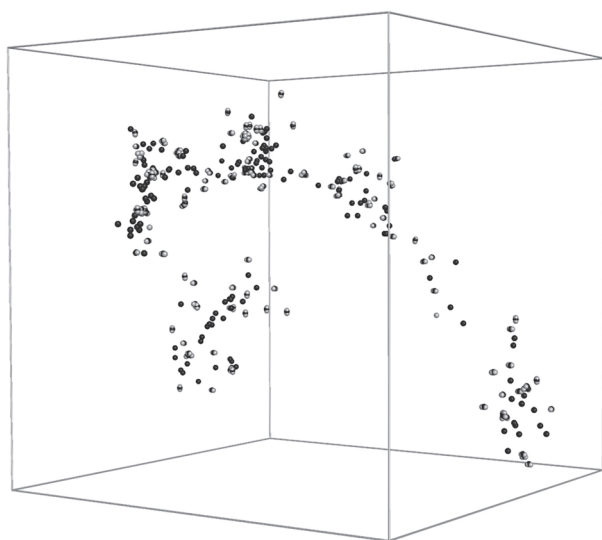


Рис. 5. Пространственное распределение дефектов, созданных в каскаде смещений, показанном на рис. 4. Белым и черным цветом обозначены смещенные атомы и вакансии соответственно.

междоузлий в алюминии наблюдается экспериментально [19, 20], и согласно квантовомеханическим расчетам [21], является самой стабильной вне зависимости от использованных приближений. Это единственная конфигурация междоузельных атомов, обнаруженная нами в каскадах смещений в алюминии при всех условиях моделирования.

На рис. 6 и 7 показаны финальные конфигурации 20 кэВ каскадов смещений в алюминии при температурах $T = 100$ и 600 К соответственно. Пространственное распределение радиационных дефектов в них во многом идентично рис. 5. Кластеры точечных дефектов на рис. 5 и 6 состоят из нескольких атомов или вакансий и практически неразличимы. Напротив, при $T = 600$ К междоузельные кластеры, зародившиеся в каскадах, уже легко идентифицировать (см. рис. 7), где в центре расположена дислокационная петля Франка с вектором Бюргерса $1/3\langle 111 \rangle$, состоящая из 21 атома. Петли Франка наблюдали экспериментально в алюминиевых фольгах, облученных α -частицами [22] и электронами [23, 24]. В [22] был также определен критический размер, при достижении которого петли Франка превращаются в призматические петли с вектором Бюргерса $1/2\langle 110 \rangle$.

Модель пространственного разделения вакансий и междоузлий в каскадах [25] активно используется для описания структурно-фазовых превращений в облучаемых материалах, см., напр., [26, 27]. Однако, как видно из примеров на рис. 5–7 и [16–18], структура каскадной области с пересыщенным вакансиями ядром и междоузель-

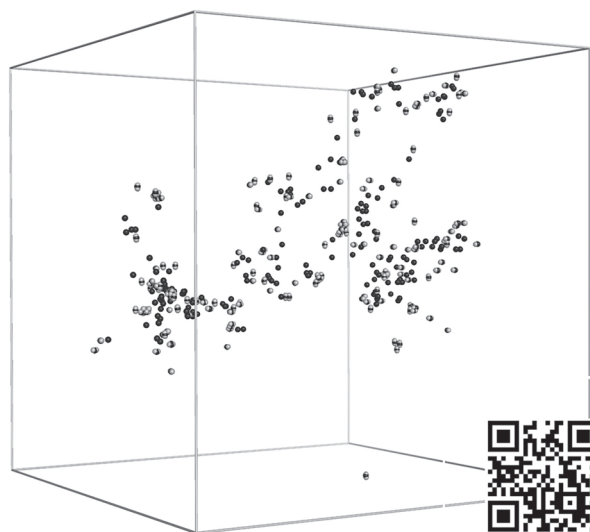


Рис. 6. Радиационные дефекты, оставшиеся после релаксации 20 кэВ каскада смещений в алюминии при температуре $T = 100$ К. Белым и черным цветом обозначены смещенные атомы и вакансии соответственно. QR-код соответствует [16].

ными атомами на периферии не реализуется в случае алюминия.

Для каждого каскада получены доля $\epsilon_{vac} = \sum N_{vac}/N_{FP}$ вакансий в вакансионных кластерах размером $N_{vac} \geq 3$ и доля $\epsilon_{SIA} = \sum N_{SIA}/N_{FP}$ междоузлий в междоузельных кластерах размером $N_{SIA} \geq 4$. На рис. 8 приведены средние значения $\langle \epsilon_{vac} \rangle$ и $\langle \epsilon_{SIA} \rangle$ как функция $(E_{ПВА}, T)$. Как $\langle \epsilon_{vac} \rangle$, так и $\langle \epsilon_{SIA} \rangle$ не зависят от энергии ПВА, если не считать небольшое снижение $\langle \epsilon_{SIA} \rangle$ с увеличением $E_{ПВА}$ при высоких температурах. При $T = 100$ К доли вакансий и междоузлий в кластерах примерно равны $\langle \epsilon_{vac} \rangle \approx \langle \epsilon_{SIA} \rangle \approx 0.15$. С увеличением температуры $\langle \epsilon_{SIA} \rangle$ линейно растет, достигая $\approx 0.4-0.5$ при $T = 600$ К, тогда как $\langle \epsilon_{vac} \rangle$ падает. Снижение $\langle \epsilon_{vac} \rangle$ с увеличением температуры вызвано снижением термической стабильности вакансионных кластеров в алюминии, которые отжигаются при $T = 170-200^\circ\text{C}$ [22].

С ростом температуры сокращается длина цепочек сфокусированных атомных столкновений, см. [16–18], растет диффузионная подвижность вакансий и увеличивается время релаксации каскадов, что приводит к ускоренной рекомбинации изолированных точечных дефектов и увеличению доли междоузлий в междоузельных кластерах. Изменение $\langle \epsilon_{vac} \rangle$ и $\langle \epsilon_{SIA} \rangle$ при различных условиях облучения может быть также связано с изменением размеров кластеров и/или изменением их числа.

Средние размеры вакансионных $\langle N_{vac} \rangle$ и междоузельных $\langle N_{SIA} \rangle$ кластеров, образовавшихся в каскадах, не зависят от $E_{ПВА}$ (см. рис.9), что связано с морфологией каскадной области. Как видно из рис. 4, каскады смещений в алюминии вытянуты вдоль траектории ПВА и распадаются на несколько субкаскадов. Если $E_{ПВА}$ превышает пороговую энергию образования субкаскадов, ее увеличение просто ведет к росту их числа. Среднее число кластеров на каскад, таким образом, должно быть пропорционально $E_{ПВА}$.

Средний размер вакансионных кластеров $\langle N_{vac} \rangle \approx 3.5$ не зависит также и от температуры. Стабильные вакансионные кластеры с $N_{vac} = 3, 4$ и 6 экспериментально обнаружены в облученном алюминии [19]. DFT-расчеты [28] также указывают на высокую стабильность вакансионных кластеров, состоящих из 4 и 7 вакансий (энергия связи 0.56 и 1.55 эВ соответственно), по сравнению с дивакансиями (энергия связи 0.22 эВ). Распад этих кластеров оказывается энергетически невыгоден.

Средний размер $\langle N_{SIA} \rangle$ варьируется от ≈ 5 до ≈ 8 в зависимости от температуры. Междоузельные кластеры в алюминии малы по сравнению с кластерами, возникающими в каскадах в более тяжелых металлах при аналогичных условиях модели-

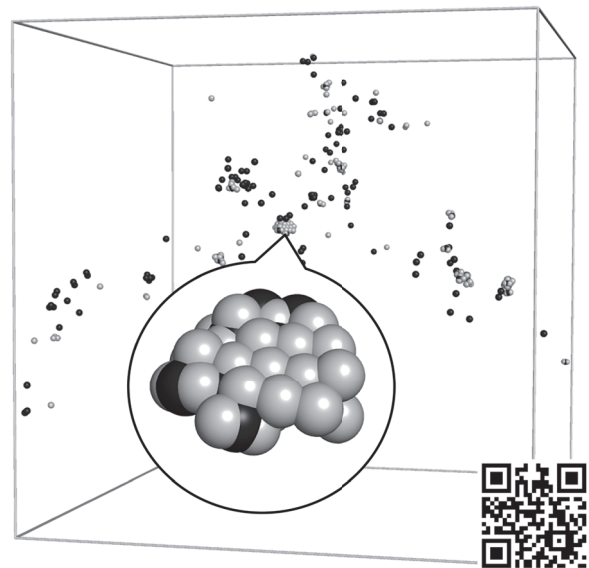


Рис. 7. Радиационные дефекты, оставшиеся после релаксации 20 кэВ каскада смещений в алюминии при температуре $T = 600$ К. В центре и справа видны небольшие междоузельные кластеры. Крупно показана дислокационная петля Франка из 21 междоузлия. QR-код соответствует [18].

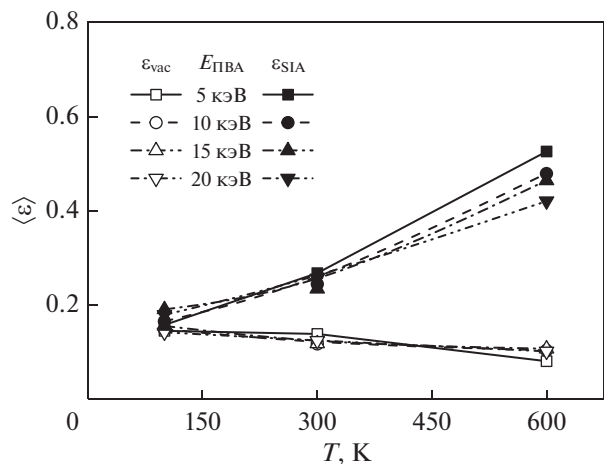


Рис. 8. Зависимость средних значений $\langle \epsilon_{vac} \rangle$ и $\langle \epsilon_{SIA} \rangle$ от $(E_{ПВА}, T)$.

рования [10, 11]. Небольшой размер междоузельных кластеров в алюминии связан со значительно большей областью рассеяния междоузлий, и одновременно меньшим временем жизни каскадов τ_c . С ростом температуры увеличивается диффузионная подвижность дефектов и время релаксации каскадов, ведущие к росту $\langle N_{SIA} \rangle$.

На рис. 10 показано среднее число вакансионных $\langle Y_{vac} \rangle$ и междоузельных $\langle Y_{SIA} \rangle$ кластеров, зародившихся в каскадах при различных $(E_{ПВА}, T)$. Линейный рост $\langle Y_{vac} \rangle$ и $\langle Y_{SIA} \rangle$ с увеличением $E_{ПВА}$

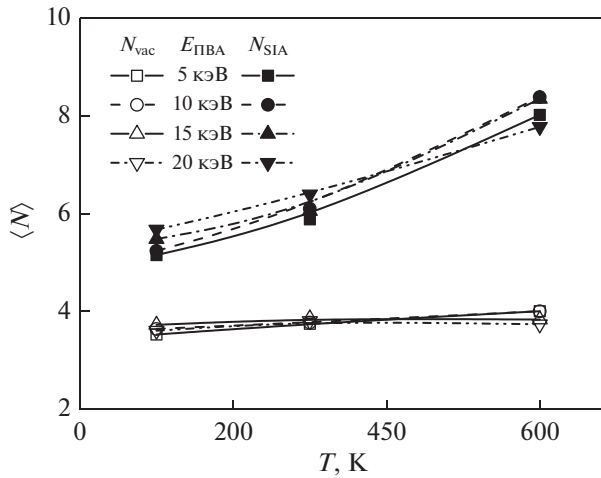


Рис. 9. Зависимость среднего размера вакансионных ($\langle N_{vac} \rangle$) и междоузельных ($\langle N_{SIA} \rangle$) кластеров от (E_{PVA} , T).

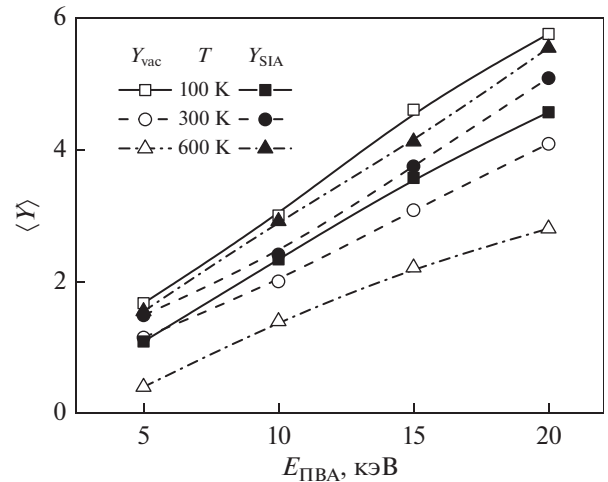


Рис. 10. Среднее число вакансионных ($\langle Y_{vac} \rangle$) и междоузельных ($\langle Y_{SIA} \rangle$) кластеров, образовавшихся в каскадах смещений, как функция (E_{PVA} , T).

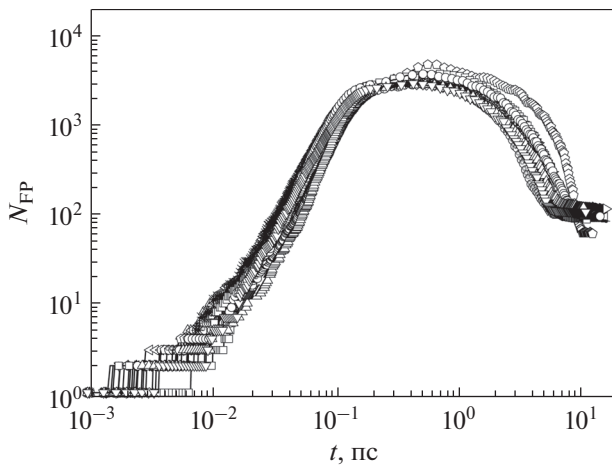


Рис. 11. Зависимость N_{FP} от времени t эволюции 20 кэВ каскадов смещений в алюминии при температуре $T = 600$ К. Каждая кривая отражает изменение $N_{FP}(t)$ во время релаксации одного каскада.

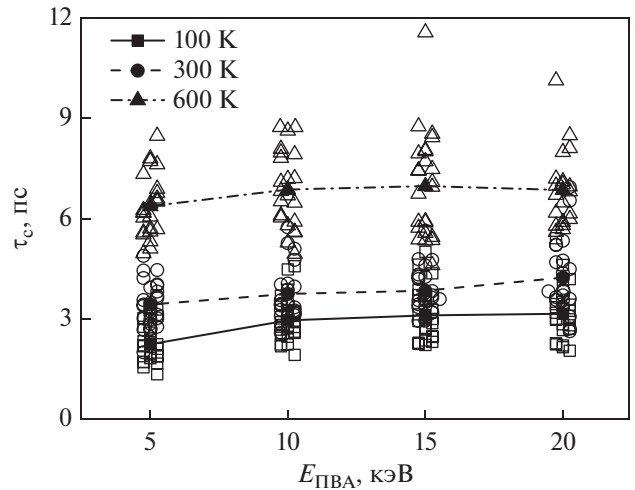


Рис. 12. Время релаксации τ_c каскадов смещений в алюминии. Каждая точка соответствует одному каскаду. Кривыми показано среднее время жизни каскада как функция (E_{PVA} , T).

связан с образованием субкаскадов. Падение числа вакансионных кластеров с ростом T вызвано снижением их стабильности [22]. Формирование менее рассеянных каскадов при высоких температурах благодаря снижению эффектов каналирования, фокусировки, сокращению длины цепочек атомных столкновений и увеличению τ_c , ведет к росту $\langle Y_{SIA} \rangle$.

Значение τ_c легко определить, проанализировав зависимость N_{FP} от времени эволюции t каскадной области. На рис. 11 показана такая зависимость для 20 кэВ каскадов в алюминии при температуре $T = 600$ К. Используя данные $N_{FP}(t)$,

полученные для всех пар (E_{PVA} , T), мы определили времена релаксации смоделированных каскадов и вычислили их средние значения как функцию (E_{PVA} , T), см. рис. 12.

Отсутствие зависимости τ_c от E_{PVA} только на первый взгляд выглядит парадоксальным. Как видно из примера на рис. 4 и [16–18], каскадная область в алюминии вытянута вдоль траектории ПВА и распадается на субкаскады. Размер каскада на рис. 4 составляет ≈ 30 нм, а время τ_{PVA} , за которое ПВА преодолевает это расстояние, много меньше времени релаксации каскада τ_c . Вкладом τ_{PVA} в τ_c , можно пренебречь, что эквивалентно одновре-

менному зарождению всех субкаскадов. Таким образом, время релаксации каскада τ_c оказывается равным времени релаксации субкаскадов. Поскольку увеличение $E_{\text{ПВА}}$ просто увеличивает их число, τ_c не зависит от энергии ПВА (при условии, что $E_{\text{ПВА}}$ больше пороговой энергии образования субкаскадов).

В бесконечной изотропной среде, находящейся при температуре T , температура T_c в центре теплового импульса в момент времени τ_c определяется соотношением $T_c - T \propto \tau_c^{-2/3}$ [29]. Несмотря на влияние дефектообразования на процесс остывания каскада, см. рис. 1, фундаментальное решение уравнения теплопроводности [29] может быть использовано для объяснения увеличения времени релаксации τ_c с ростом температуры облучения T .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом МД исследовано дефектообразование в алюминии при облучении быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии. Смоделированы каскады смещений, инициированные ПВА с энергией $E_{\text{ПВА}} = 5, 10, 15$ и 20 кэВ при температуре $T = 100, 300$ и 600 К. Для каждой пары $(E_{\text{ПВА}}, T)$ смоделирована серия из 24 каскадов.

Обработка результатов моделирования позволила определить число пар Френкеля $N_{\text{Фр}}$, долю вакансий ϵ_{vac} и междоузлий ϵ_{SIA} в кластерах точечных дефектов, средний размер кластеров $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ и $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$, зародившихся в каскадах смещений, число вакансионных $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$ и междоузельных $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ кластеров на каскад и время релаксации каскадов τ_c как функцию $(E_{\text{ПВА}}, T)$. Определен размер выборки, обеспечивающей достоверные результаты моделирования.

Каскады смещений в алюминии распадаются на субкаскады вдоль траектории ПВА. Отсутствие зависимости $\langle \epsilon_{\text{vac}} \rangle$, $\langle \epsilon_{\text{SIA}} \rangle$, $\langle N_{\text{vac}} \rangle$, $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ и τ_c от $E_{\text{ПВА}}$ связано с образованием субкаскадов. По той же причине $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$ и $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ линейно зависят от $E_{\text{ПВА}}$.

Исследования выполнены при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект РФФИ № 17-03-01222а, с использованием вычислительных ресурсов центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт” (субсидия Минобрнауки идентификатор работ RFMEFI62117X0016), <http://ckp.nrcki.ru>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Воскобойников Р.Е.* Радиационные дефекты в алюминии. Моделирование первичных повреждений в каскадах смещений на поверхности // ФММ. 2018. Т. 119. № 12. С. 1–8.
2. *Zope R.R., Mishin Y.* Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system // Phys. Rev. B 2003. V. 68. P. 024102-1-024102-14.
3. *Biersack J.P., Ziegler J.F.* Refined universal potentials in atomic collisions // Nucl. Instr. Meth. 1982. V. 194. P. 93–100.
4. *Gärtner K., Stock D., Weber B., Betz G., Hautala M., Hobler G., Hou M., Sarite S., Eckstein W., Jiménez-Rodríguez J.J., Pérez-Martín A.M.C., Andribet E.P., Konoplev V., Gras-Marti A., Posselt M., Shapiro M.H., Tombrello T.A., Urbassek H.M., Hensel H., Yamamura Y., Takeuchi W.* Round robin computer simulation of ion transmission through crystalline layers // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1995. V. 102. P. 183–197.
5. *Dawson H.I., Iseler G.W., Mehner A.S., Kauffman J.W.* Determination of stage I recovery in pure aluminum following electron irradiation // Phys. Lett. 1965. V. 18. P. 247–248.
6. *Iseler G.W., Dawson H.I., Mehner A.S., Kauffman J.W.* Production Rates of Electrical Resistivity in Copper and Aluminum Induced by Electron Irradiation // Phys. Rev. 1966. V. 146. P. 468–471.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика: Учеб. Пособие. – В 10-ти т. Т. I. Механика – 4-е изд., испр. М.: Наука, 1988. 216 с.
8. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987. 408 p.
9. *Marques L.A., Rubio J.E., Jaraiz M., Enriquez L., Barbolla J.* An improved molecular dynamics scheme for ion bombardment simulations // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1995. V. 102. P. 7–11.
10. *Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J.* Computer simulation of primary damage creation in displacement cascades in copper. I. Defect creation and cluster statistics // J. Nucl. Mater. 2008. V. 377. P. 385–395.
11. *Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J.* Atomic-scale simulation of defect cluster formation in high-energy displacement cascades in zirconium // ASTM STP1475. 2006. P. 299–314.
12. *Voskoboinikov R.E.* MD simulations of collision cascades in the vicinity of a screw dislocation in aluminium // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2013. V. 303. P. 104–107.
13. *Voskoboinikov R.E.* Interaction of collision cascades with an isolated edge dislocation in aluminium // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2013. V. 303. P. 125–128.
14. *Lindemann F.A.* The calculation of molecular vibration frequencies // Zeitschrift für Physik 1910 V.11. P. 609–612.
15. *Nordlund K., Averback R.S.* Point defect movement and annealing in collision cascades // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. № 5. P. 2421–2431.
16. 20 keV collision cascade in aluminum at $T = 100$ K, <https://youtu.be/9DmsxklFGc4>.
17. 20 keV collision cascade in aluminum at $T = 300$ K, <https://youtu.be/VfUytxjRfg>.
18. 20 keV collision cascade in aluminum at $T = 600$ K, https://youtu.be/_a4VfQz72oQ.
19. *Swanson M.L., Howe L.M., Moore J.A., Quenneville A.F.* Defect complexes in ion-irradiated aluminum // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1983. V. 209/210. P. 1029–1034.

20. *Ehrhart P., Schilling W.* Investigation of interstitials in electron-irradiated aluminum by diffuse-X-ray scattering experiments // *Phys. Rev. B.* 1973. V. 8. P. 2604–2621.
21. *Qiu R., Lu H., Ao B., Huang L., Tang T., Chen P.* Energetics of intrinsic point defects in aluminium via orbital-free density functional theory // *Philos. Mag. A* 2017. V. 97. № 25. P. 2164–2181.
22. *Mazey D. J., Barnes R.S., Howie A.* On interstitial dislocation loops in aluminium bombarded with alpha-particles // *Philos. Mag.* 1962. V. 7. № 83. P. 1861–1870.
23. *Howe J., Sarikaya M.* Observation of Radiation-Induced Defect Formation in Aluminum by High-Resolution Transmission Electron Microscopy // *Mat.Res. Soc. Symp. Proc.* 1988. V. 138. P. 41–45.
24. *Kiritani M., Yoshida N., Takata H.* Interstitial Clusters in Electron Irradiated Aluminum // *J. Phys. Soc. Japan.* 1974. V. 36. № 3. P. 720–729.
25. *Seeger A.* On the Theory of Radiation Damage and Radiation Hardening // *Proceedings of the 2nd United Nations International Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva.* 1958. V. 6. P. 250–273.
26. *Williams J.S., Wong-Leung J.* Voids and Nanocavities in Silicon, in *H. Bernas* (Ed.): *Materials Science with Ion Beams, Topics Appl. Physics.* Springer-Verlag, Berlin. 2010. V. 116. P. 113–146.
27. *Yu J.* Interstitial Dislocation Loop Nucleation and Growth and Swelling Produced By High-Energy Cascades // *ASTM STP 955.* 1987. P. 393–413.
28. *Gavini V., Bhattacharya K., Ortiz M.* Vacancy clustering and prismatic dislocation loop formation in aluminum // *Phys. Rev. B.* 2007. V. 76. № 18. P. 180101(R).
29. *Араманович И.Г., Левин В.И.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1969. 288 с.