

ТЕОРИЯ  
МЕТАЛЛОВ

УДК 669.24:539.12.043

МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ СМЕЩЕНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ  
НИКЕЛЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© 2020 г. Р. Е. Воскобойников\*

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

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

Поступила в редакцию 21.06.2019 г.

После доработки 02.08.2019 г.

Принята к публикации 13.08.2019 г.

Методом молекулярной динамики смоделированы каскады смещений, инициированные атомами Ni с энергиями  $E = 5, 10, 15$  и  $20$  кэВ на поверхности никеля при температуре  $T = 100, 300, 600, 900$  и  $1200$  К. Чтобы получить статистически достоверные значения числа пар Френкеля  $N_{FP}$  и доли вакансий  $\sigma_{vac}$  и междоузельных атомов  $\sigma_{SIA}$  в кластерах точечных дефектов как функции  $(E, T)$ , репрезентативная выборка из 24 каскадов смещений сгенерирована для всех значений энергии налетающих частиц и температур облучения. Установлено, что значения  $\langle N_{FP} \rangle$ ,  $\langle \sigma_{vac} \rangle$  и  $\langle \sigma_{SIA} \rangle$ , усредненные по всем поверхностным каскадам смещений с одинаковыми параметрами  $(E, T)$ , превосходят соответствующие характеристики каскадов смещений в никеле в объеме материала, смоделированные при аналогичных условиях. Точечные дефекты, создаваемые в каскадах смещений на поверхности никеля, преимущественно образуют кластеры. Основным физическим механизмом, ответственным за увеличение значений  $\langle N_{FP} \rangle$ ,  $\langle \sigma_{vac} \rangle$  и  $\langle \sigma_{SIA} \rangle$  в поверхностных каскадах, является пространственное разделение вакансий и междоузельных атомов, вызванное упругим взаимодействием точечных дефектов со свободной поверхностью.

*Ключевые слова:* никель, первичные радиационные повреждения, каскады смещений на поверхности, молекулярная динамика, пары Френкеля, кластеры точечных дефектов

DOI: 10.31857/S0015323020010180

ВВЕДЕНИЕ

Жаропрочные никелевые сплавы широко используются в ядерной энергетике для изготовления конструктивных элементов исполнительного механизма системы управления и защиты, опор, крепежных изделий, пружин, скоб и других силовых структурных компонентов активной зоны современных водо-водяных энергетических реакторов [1, 2]. Одной из наиболее печально известных форм деградации никелевых сплавов в условиях воздействия повышенных температур, водного теплоносителя, циклического нагружения и реакторного облучения является радиационно-стимулированное межкристаллитное коррозионное растрескивание (IASCC) [2, 3]. Несмотря на многочисленные исследования, до настоящего времени не удалось достоверно идентифицировать основные физические механизмы IASCC [4, 5]. Предполагается, что IASCC определяется комбинацией факторов, включающих в себя действующие внутренние напряжения, химический состав поверхности и накопленные радиационные повреждения [3–5]. Проведенное исследование посвящено моделированию первичных радиационных повре-

ждений на поверхности никеля методом молекулярной динамики (МД).

ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Смещение атомов мишени из равновесных позиций в узлах кристаллической решетки является первичным процессом, происходящим в кристаллических твердых телах, подвергаемых облучению быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии. Во время последующей релаксации каскадов смещений большинство смещенных атомов возвращается в равновесные позиции, в то время как оставшиеся атомы формируют различные междоузельные конфигурации. Как междоузельные атомы, так и вакансии могут образовывать кластеры точечных дефектов.

В силу малых линейных и временных масштабов, за образованием и эволюцией каскадов смещений невозможно наблюдать в режиме реального времени, используя современное экспериментальное оборудование. По этой причине для исследования процессов первичного радиацион-

ного дефектообразования целесообразно использовать моделирование методом МД [6, 7].

Аналитические подходы, численные методы интегрирования уравнений движения и методы идентификации и визуализации дефектной структуры, изначально разработанные для МД моделирования каскадов смещений в объеме никеля [8], подверглись тонкой настройке и использованы для моделирования первичных повреждений в приповерхностных слоях материала. Особое внимание уделили анализу морфологии поверхностных каскадов смещений, определению оптимального размера статистической выборки и подтверждению достоверности полученных количественных результатов.

### ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ ПОДХОДЫ

Полуэмпирический межатомный потенциал [9], разработанный на основе метода внедренного атома [10], использован для расчета межатомных сил взаимодействия в моделируемом кристалле никеля. Следуя процедуре, описанной в [11], на коротких расстояниях парная часть потенциала была модифицирована подстановкой универсального потенциала отталкивания ZBL [12, 13]. В качестве подгоночного параметра использовано экспериментально измеренное значение пороговой энергии смещения в никеле  $E_d = 23 \pm 2$  эВ [14, 15]. Пороговая энергия модифицированного потенциала определяется соотношением  $23 < E_d \leq 24$  эВ. Подгонка потенциала не повлияла на равновесный параметр решетки, энергию когезии  $E_0 = -4.45$  эВ, энергию образования вакансии  $E_v^f = 1.57$  эВ, упругие константы, энергию дефектов упаковки и энергию свободной поверхности.

МД-моделирование каскадов смещений на поверхности никеля проведено для температур  $T = 100, 300, 600, 900$  и  $1200$  К. Используя теорему о вириале [16, 17], определили равновесные параметры решетки, соответствующие нулевым внутренним напряжениям при выбранной температуре облучения, см. табл. 1.

Моделирование каскадов смещений на поверхности никеля выполнено в статистическом ансамбле  $NVE$ . Моделируемый кристалл имел форму параллелепипеда, ограненного кристаллографическими плоскостями  $(111)$ ,  $(11\bar{2})$  и  $(1\bar{1}0)$ . На гранях  $(11\bar{2})$  и  $(1\bar{1}0)$  использованы периодические граничные условия. Грани  $(111)$  образуют свободные поверхности.

Каскады смещений инициированы атомами Ni с энергиями  $E = 5, 10, 15$  и  $20$  кэВ. Быстрые частицы вводили над поверхностью  $(111)$  на расстоянии радиуса обрезания потенциала вдоль направления, составляющего угол  $1^\circ$  с нормалью к поверхности. Сгенерирована репрезентативная

**Таблица 1.** Температурная зависимость равновесного параметра ГЦК-структуры никеля

Температура кристалла, К	Равновесный параметр решетки $a$ , нм
0	0.352
100	0.35222
300	0.35277
600	0.35368
900	0.35472
1200	0.35585

**Таблица 2.** Число атомов в кристалле никеля, используемом для моделирования поверхностных каскадов смещений, инициированных налетающим атомом Ni с энергией  $E$

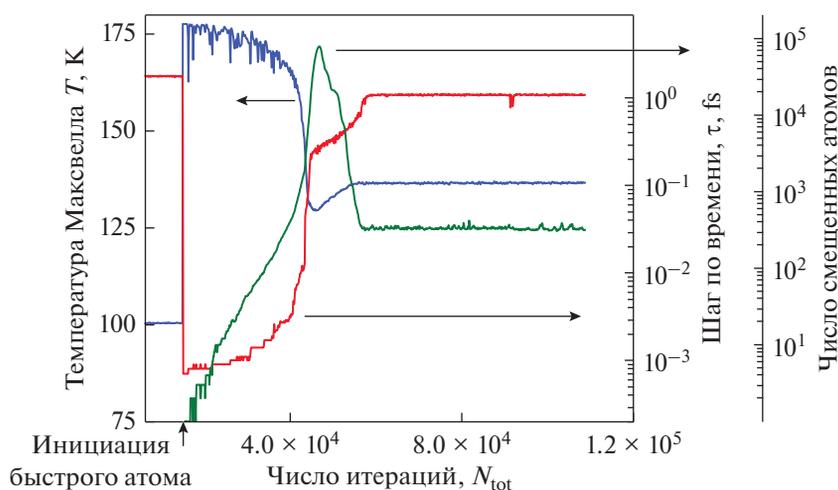
$E$ , кэВ	Число атомов никеля в моделируемом кристалле
5	501492
10	1011024
15	1498380
20	2002536

выборка из 24 каскадов смещений с одинаковыми значениями  $(E, T)$ , обеспечивающая статистическую достоверность полученных численных результатов МД-моделирования.

Размер моделируемого кристалла выбирали, исходя из энергии налетающей частицы, в пропорции  $\approx 10^{-2}$  эВ/атом, см. табл. 2. Ни один из смоделированных поверхностных каскадов не пересек боковые или “нижнюю” границу кристалла.

Перед введением быстрого атома, кристаллы были отрелаксированы при температуре облучения в течение  $1.5 \times 10^4$  МД-итераций. Моделирование проводили без контроля температуры. Пример изменения эффективной температуры Максвелла в процессе релаксации 20 кэВ каскада смещений на поверхности никеля при температуре  $T = 100$  К приведен на рис. 1. Энергия, внесенная быстрым атомом, не выводилась из моделируемой системы. Соответствующее повышение температуры после релаксации каскада смещений не превышало  $\approx 40$  К ни в одном из проведенных компьютерных экспериментов.

На начальной стадии развития каскада только небольшая часть атомов никеля движется с высокой скоростью, в то время как основная часть моделируемого кристалла остается в состоянии термодинамического равновесия при температуре облучения. Использование алгоритма скоростей Верле [18] и/или других стандартных МД-методов интегрирования уравнений движения всех атомов в кристалле при таких существенно нерав-



**Рис. 1.** Температура Максвелла  $T$ , шаг интегрирования по времени  $\tau$  и число смещенных атомов на различных стадиях эволюции каскада смещений, инициированного атомом Ni с энергией  $E = 20$  кэВ на поверхности никеля при температуре 100 К.

новесных условиях ведет к неоптимальному расходованию высокопроизводительных вычислительных ресурсов. Чтобы ускорить вычисления и оптимизировать проведение расчетов, на начальной стадии развития каскада смещений используется подход, описанный в [19]. Суть метода состоит в разделении моделируемого кристалла на две подсистемы “горячих” и “холодных” атомов, рассматриваемых раздельно. Уравнения движения “горячих атомов” интегрируются в предположе-

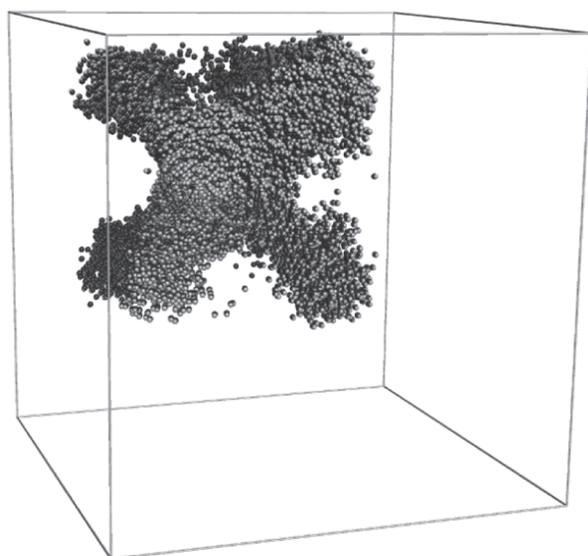
нии, что “холодные” атомы неподвижны. Ансамбль “холодных” атомов подстраивается под ансамбль “горячих” атомов через определенные временные интервалы. В процессе эволюции каскада, ансамбль “горячих” атомов растет за счет ансамбля “холодных” атомов. Законы сохранения, критерии отбора, эффективность и устойчивость алгоритма, основанного на методе [19], были протестированы ранее, а сам метод использован для моделирования первичных повреждений в алюминии [20, 21] меди [22, 23],  $\alpha$ -цирконии [23–25], интерметаллидах  $\gamma$ -TiAl [26],  $\alpha_2$ -Ti<sub>3</sub>Al [27] и  $\gamma$ -Ni<sub>3</sub>Al [28], а также при исследованиях взаимодействия каскадов смещений с винтовыми и краевыми дислокациями [29, 30].

Для идентификации и визуализации точечных дефектов и адатомов использован метод сфер Линдемманна [31], метод ячеек Вигнера–Зейтца [32] и кластерный анализ [22].

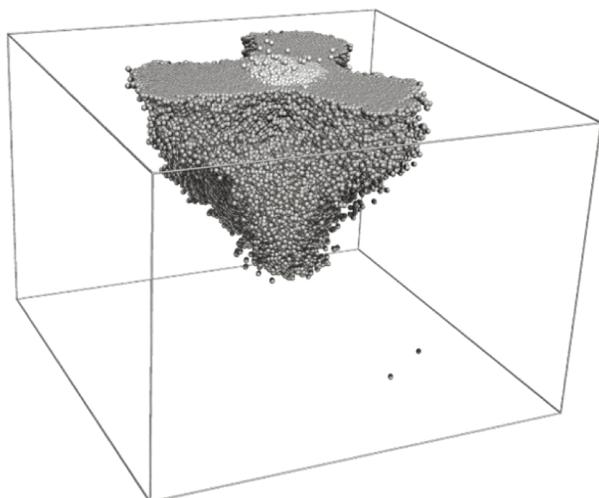
### АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ ДАННЫХ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Морфология типичных 20 кэВ каскадов смещений в никеле, инициированных в объеме и на поверхности материала, представлена на рис. 2 и 3 соответственно. Высокая плотность энергии, передаваемой от первично выбитого атома окружающим атомам мишени, в обоих случаях ведет к образованию ударной волны, которая распространяется от центра каскадной области вдоль направлений, перпендикулярных плоскостям плотной упаковки.

На рис. 4 приведено число пар Френкеля  $N_{FR}$ , образованных в поверхностных каскадах смещений, как функция  $(E, T)$ , усредненное по серии каскадов с одинаковыми значениями параметров



**Рис. 2.** Каскад смещений, инициированный первично выбитым атомом с энергией 20 кэВ в никеле в объеме материала при температуре  $T = 300$  К. Визуализация методом сфер Линдемманна. Вакансии и смещенные атомы обозначены темно-серым и светло-серым цветом соответственно.



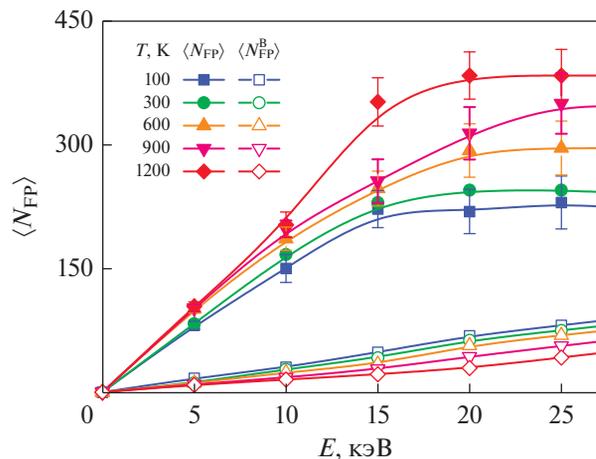
**Рис. 3.** Каскад смещений, инициированный атомом никеля с энергией 20 кэВ на поверхности никеля при температуре облучения  $T = 600$  К. Вакансии, смещенные атомы и адатомы/распыленные атомы обозначены темно-серым, светло-серым и белым цветом соответственно.

моделирования  $(E, T)$ . Также для сравнения показаны средние значения числа пар Френкеля, образованных в каскадах смещений в объеме никеля  $N_{\text{ФР}}^{\text{B}}$  при идентичных условиях облучения.

При всех условиях моделирования  $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$  существенно превосходит  $\langle N_{\text{ФР}}^{\text{B}} \rangle$ . При энергиях налетающей частицы ниже некоторого порогового значения  $E_c(T)$ , определяемого температурой облучения (рис. 4),  $\langle N_{\text{ФР}} \rangle \propto E$ , и с ростом энергии налетающих частиц  $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$  растет быстрее  $\langle N_{\text{ФР}}^{\text{B}} \rangle$ . Когда  $E \geq E_c$ ,  $\langle N_{\text{ФР}} \rangle \approx \text{const}$ .

Энергетическая зависимость  $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$  полностью определяется величиной свободного пробега налетающей частицы в облучаемом материале, пространственным разделением вакансий и междоузельных атомов и их взаимодействием со свободной поверхностью. Число пар Френкеля, образованных в поверхностных каскадах, инициированных налетающими частицами с энергиями  $E \leq E_c$ , с высокой точностью оценивается моделью Кинчина–Пиза [33, 34]  $N_{\text{ФР}} = 0.8E/2E_d$ .

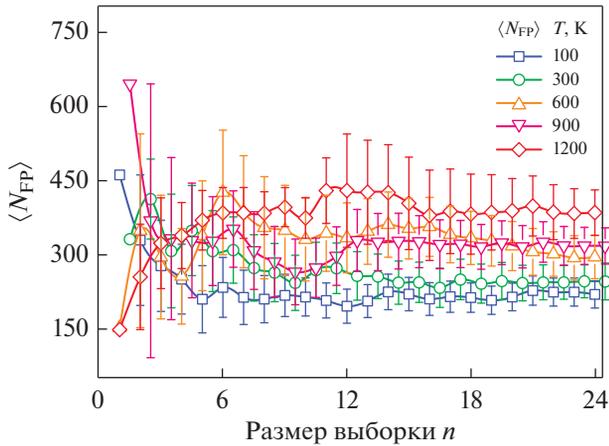
С ростом энергии налетающих частиц увеличивается их пробег в облучаемом материале и/или линейные размеры каскада смещений. Вследствие этого также увеличивается доля смещенных атомов, расположенных на существенном удалении от свободной поверхности, и с увеличением расстояния снижается их упругое взаимодействие с поверхностью облучаемого материала. Если смещенные атомы выпадают из приповерхностной области, физи-



**Рис. 4.** Среднее число пар Френкеля  $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$  и  $\langle N_{\text{ФР}}^{\text{B}} \rangle$ , образованных в каскадах смещений в никеле соответственно на поверхности и в объеме материала, как функция  $(E, T)$ . Вертикальными отрезками показана стандартная ошибка среднего.

ческие механизмы их релаксации приобретают особенности, характерные для релаксации смещенных атомов в объеме материала. В результате вклад радиационных дефектов, созданных в приповерхностной зоне материала, в суммарное значение  $N_{\text{ФР}}$  не растет и с ростом энергии  $E$  выходит на насыщение. Относительный вклад “объемных” точечных дефектов по крайней мере на порядок величины ниже, и по этой причине его можно не принимать в расчет, см. рис. 4 для сравнения.

Температурная зависимость  $N_{\text{ФР}}$  соответствует предлагаемому механизму дефектообразования в поверхностных каскадах смещений. В противоположность плавному снижению числа  $N_{\text{ФР}}^{\text{B}}$ , образованных в каскадах смещений в объеме никеля, с ростом температуры облучения [8],  $N_{\text{ФР}}$  в каскадах смещений на поверхности материала увеличивается благодаря эффективному рассеянию быстрых частиц на термических колебаниях кристаллической структуры мишени. При низкой и комнатной температурах облучения,  $T = 100$  и  $300$  К, рассеяние невелико, пробег налетающих частиц большой, и  $N_{\text{ФР}}$  достигает насыщения при относительно низких значениях  $E_c \approx 15$  кэВ. Увеличение температуры облучения до  $600$  К ведет к эффективному снижению длины цепочек замещающих сфокусированных столкновений, каналирования и фокусировки налетающих частиц. В результате насыщение  $N_{\text{ФР}}$  происходит при больших пороговых энергиях  $E_c \approx 20$  кэВ. Рассеяние на колебаниях решетки проявляется еще сильнее при  $T = 900$  К, но энергетическая зависимость  $N_{\text{ФР}}$  демонстрирует те же характерные осо-



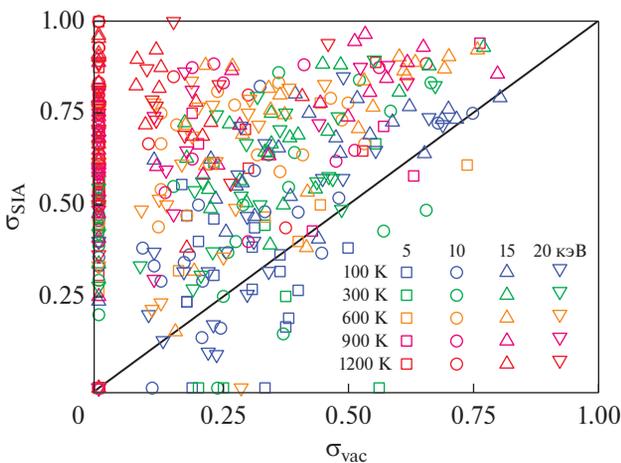
**Рис. 5.** Среднее значение числа пар Френкеля ( $\langle N_{FP} \rangle$ ) при различных температурах облучения как функция статистической выборки из  $n$  20 кэВ каскадов смещений на поверхности никеля. Вертикальными отрезками показана стандартная ошибка среднего.

бенности, включающие линейный рост при  $E \leq E_c$  и стационарный режим при  $E \geq E_c$ , где в данном случае  $E_c \approx 25$  кэВ, см. рис. 4. Гораздо более быстрый рост  $N_{FP}(E)$  с увеличением  $E$  при  $T = 1200$  К на рис. 4 связан с локальным плавлением в области каскада смещений. Согласно рис. 1, сразу после столкновения налетающей частицы с поверхностью облучаемого материала, эффективная максвелловская температура увеличивается на  $\approx 70$  К. Однако температурная зависимость, пока-

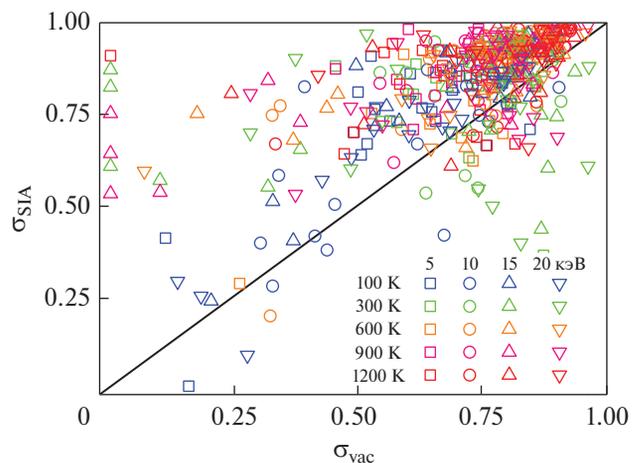
занная на рис. 1, это средняя температура по ансамблю всех атомов в кристалле. Увеличение температуры локальной области каскада смещений значительно выше, и, принимая во внимание высокую температуру облучения, суммарная температура в каскадной области на поверхности оказывается выше точки плавления никеля.

Дисперсия  $N_{FP}$  велика даже для каскадов смещений на поверхности никеля, смоделированных при одинаковых значениях параметров ( $E$ ,  $T$ ). В силу стохастической природы процессов первичного дефектообразования, для количественной оценки радиационных повреждений необходимо сгенерировать статистическую выборку достаточных размеров. Следуя подходам, использованным ранее в [20, 21], размер статистической выборки в данном исследовании обоснован *a posteriori* с использованием зависимости  $\langle N_{FP} \rangle$  от числа  $n$  каскадов смещений, смоделированных на поверхности никеля при одинаковых значениях ( $E$ ,  $T$ ). На примере, приведенном на рис. 5, средние значения  $\langle N_{FP} \rangle$  в 20 кэВ поверхностных каскадах в никеле сходятся к своим “стационарным” значениям в пределах выборки из 24 смоделированных каскадов.

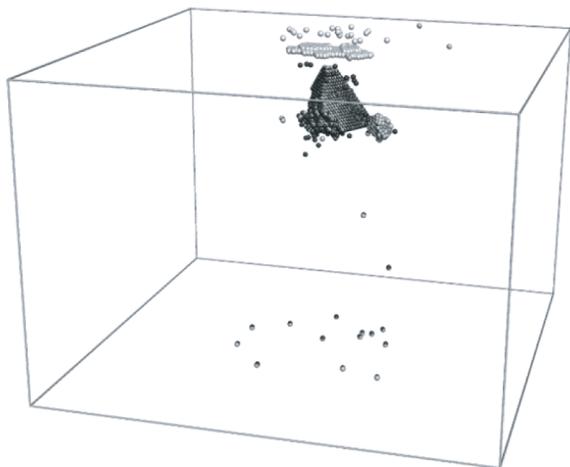
Доля вакансий  $\sigma_{vac} = \sum N_{vac} / N_{FP}$  в вакансионных кластерах размером  $N_{vac} \geq 3$  против доли междоузельных атомов  $\sigma_{SIA} = \sum N_{SIA} / N_{FP}$  в междоузельных кластерах размером  $N_{SIA} \geq 4$  в каскадах смещений, инициированных в объеме и на поверхности никеля, показаны на рис. 6 и 7 соответ-



**Рис. 6.** Доля вакансий  $\sigma_{vac}$  в вакансионных кластерах против доли междоузлий  $\sigma_{SIA}$  в междоузельных кластерах, образовавшихся в каскадах смещений в объеме никеля при различных условиях облучения. Каждая точка на диаграмме соответствует отношению  $\sigma_{vac} / \sigma_{SIA}$  в одном каскаде смещений в объеме материала. Цветная кодировка символов доступна в электронной версии статьи.



**Рис. 7.** Доля вакансий  $\sigma_{vac}$  в вакансионных кластерах против доли междоузлий  $\sigma_{SIA}$  в междоузельных кластерах, образовавшихся в каскадах смещений на поверхности никеля при различных условиях облучения. Каждая точка на диаграмме соответствует отношению  $\sigma_{vac} / \sigma_{SIA}$  в одном поверхностном каскаде смещений. Цветная кодировка доступна в электронной версии статьи.



**Рис. 8.** Релаксация каскада смещений, инициированного атомом Ni с энергией 20 кэВ на поверхности никеля при  $T = 600$  К, привела к образованию двумерного кластера из 389 адатомов, вакансионного кластера из 390 вакансий в форме тетраэдра дефекта упаковки и мобильной дислокационной петли с вектором Бюргерса  $1/2\langle 110 \rangle$ , включающей в себя 26 междоузельных атомов. Вакансии, междоузельные атомы и адатомы/распыленные атомы обозначены соответственно темно-серым, светло-серым и белым цветом.

ственно. Соотношение  $\sigma_{\text{vac}}/\sigma_{\text{SIA}} \leq 1$  выполняется в большинстве смоделированных каскадов, т.е. междоузлия имеют большую склонность к кластеризации, а междоузельные кластеры – более высокую стабильность при всех условиях облучения.

Доля вакансий  $\sigma_{\text{vac}}$  в вакансионных кластерах, образованных в каскадах смещений в объеме никеля, определяется термической стабильностью кластеров точечных дефектов. При низких температурах вакансионные кластеры стабильны, и  $\sigma_{\text{vac}}/\sigma_{\text{SIA}} \approx 1$ . Чем выше температура моделирования, тем ниже стабильность вакансионных кластеров, тем меньше  $\sigma_{\text{vac}}$  и тем дальше значения  $\sigma_{\text{vac}}/\sigma_{\text{SIA}}$  расположены от диагонали  $\sigma_{\text{vac}}/\sigma_{\text{SIA}} = 1$  на рис. 6. При низких и комнатных температурах вакансионные кластеры отсутствуют всего в нескольких каскадах смещений ( $\sigma_{\text{vac}} = 0$ ), однако с ростом температуры доля таких каскадов возрастает многократно.

В отличие от каскадов смещений в объеме никеля, в каскадах смещений на поверхности материала соотношение  $\sigma_{\text{vac}}/\sigma_{\text{SIA}} \approx 1$  выполняется в большинстве каскадов при всех условиях облучения. Образование кластеров точечных дефектов здесь определяется быстрой диффузией междоузельных атомов в направлении свободной поверхности и пространственным разделением вакансий и междоузлий. Междоузельные атомы, поглощаемые свободной поверхностью, образуют двумерные агломерации адатомов, тогда как пере-

сыщенный твердый раствор оставшихся нескомпенсированных вакансий распадается с формированием больших вакансионных кластеров в форме вакансионных петель Франка с вектором Бюргерса  $1/3\langle 111 \rangle$  или тетраэдров дефекта упаковки, см. пример на рис. 8.

## ВЫВОДЫ

Методом МД-смоделированы каскады смещений, инициируемые налетающими атомами Ni с энергией  $E = 5, 10, 15$  и  $20$  кэВ на поверхности никеля при температуре  $T = 100, 300, 600, 900$  и  $1200$  К. Для того чтобы обеспечить достоверность количественных результатов исследования, сгенерирована статистическая выборка из 24 каскадов смещений с одинаковыми значениями параметров  $(E, T)$ . Определено число пар Френкеля  $N_{\text{FP}}$  и доля вакансий  $\sigma_{\text{vac}}$  и междоузельных атомов  $\sigma_{\text{SIA}}$ , образованных в поверхностных каскадах смещений, как функция энергии налетающих частиц и температуры облучения. Проведено сравнение полученных значений с числом пар Френкеля и долей точечных дефектов в кластерах, зародившихся в каскадах смещений в никеле в объеме материала при идентичных условиях.

Сравнительный анализ результатов МД-моделирования первичных радиационных повреждений в каскадах смещений в объеме и на поверхности никеля показал, что значения  $\langle N_{\text{FP}} \rangle$ ,  $\sigma_{\text{vac}}$  и  $\sigma_{\text{SIA}}$ , в каскадах смещений на поверхности никеля, усредненные по выборке каскадов с одинаковыми параметрами моделирования  $(E, T)$ , существенно превосходят значения  $\langle N_{\text{FP}} \rangle$ ,  $\sigma_{\text{vac}}$  и  $\sigma_{\text{SIA}}$  в каскадах смещений в объеме никеля. При низких энергиях налетающих частиц,  $\langle N_{\text{FP}} \rangle \propto E$  и скорость увеличения  $\langle N_{\text{FP}}(E) \rangle$  с ростом энергии налетающих частиц в поверхностных каскадах заметно выше скорости увеличения  $\langle N_{\text{FP}}(E) \rangle$  с ростом энергии первично выбитого атома в каскадах смещений в объеме материала. В случаях, когда энергия налетающей частицы превышает некоторое пороговое значение, определяемое температурой облучения, зависимость  $\langle N_{\text{FP}}(E) \rangle$  в поверхностных каскадах выходит на стационарные значения. Заметно более быстрый рост  $\langle N_{\text{FP}}(E) \rangle$ , большие стационарные значения  $\langle N_{\text{FP}}(E_c) \rangle$ , которые достигаются при меньших пороговых энергиях  $E_c(T)$  налетающих частиц, инициирующих каскады смещений на поверхности никеля при температуре  $T = 1200$  К, вызваны локальным плавлением каскадной области.

Точечные дефекты, создаваемые в каскадах смещений на поверхности никеля, преимущественно образуют кластеры.

Кратерообразование не наблюдалось ни в одном из смоделированных поверхностных каскадов.

Пространственное разделение вакансий и междоузельных атомов, вызванное упругим взаимодействием со свободной поверхностью и высокой подвижностью междоузельных атомов, является основным движущим механизмом, приводящим к более высоким значениям  $\langle N_{FP} \rangle$ ,  $\sigma_{vac}$  и  $\sigma_{SIA}$  в каскадах смещений на поверхности никеля по сравнению с каскадами смещений в объеме материала при тех же значениях ( $E$ ,  $T$ ).

Исследования выполнены при поддержке НИЦ “Курчатовский институт”, проект № 1603. Программное обеспечение для моделирования радиационных эффектов методом МД и методы идентификации дефектной структуры материалов разработаны при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект РФФИ 17-03-01222. МД моделирование выполнено с использованием вычислительных ресурсов ЦКП “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”, <http://ckp.nrcki.ru>.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zinkle S.J., Busby J.T. Structural materials for fission & fusion energy // Mater. Today. 2009. V. 12. № 11. P. 12–19.
2. Zinkle S.J., Was G.S. Materials challenges in nuclear energy // Acta Mater. 2013. V. 61. P. 735–758.
3. Fyfe S. Corrosion and Stress Corrosion Cracking of Ni-Base Alloys, in Konings R.J.M., Allen T.R., Stoller R.E., Yamanaka E. Eds, Comprehensive Nuclear Materials 2012. V. 5. P. 69–92.
4. Andresen P.L., Was G.S. Irradiation Assisted Stress Corrosion Cracking, in Konings R.J.M., Allen T.R., Stoller R.E., Yamanaka E. Eds, Comprehensive Nuclear Materials. 2012. V. 5. P. 177–205.
5. Andresen P.L., Was G.S. A historical perspective on understanding IASCC // J. Nucl. Mater. 2019. V. 517. P. 380–392.
6. Nordlund K., Zinkle S.J., Sand A.E., Granberg F., Averback R.S., Stoller R.E., Suzudo T., Malerba L., Banhart F., Weber W.J., Willaime F., Dudarev S.L., Simeone D. Primary radiation damage: A review of current understanding and models // J. Nucl. Mater. 2018. V. 512. P. 450–479.
7. Nordlund K. Historical review of computer simulation of radiation effects in materials // J. Nucl. Mater. 2019. V. 520. P. 273–295.
8. Воскобойников П.Е. Моделирование первичных радиационных повреждений в никеле // 2020. Т. 121. № 1. <https://doi.org/10.1134/S0015323020010192>
9. Mishin Y. Atomistic modeling of the  $\gamma$  and  $\gamma'$ -phases of the Ni–Al system // Acta Mater. 2004. V. 52. P. 1451–1467.
10. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 6443–6453.
11. 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.
12. Biersack J.P., Ziegler J.F. Refined universal potentials in atomic collisions // Nucl. Instr. Meth. 1982. V. 194. P. 93–100.
13. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Matter, in Bromley D.A. Ed. Treatise on Heavy-Ion Science. Volume 6: Astrophysics, Chemistry, and Condensed Matter, Springer US, New York. 1985. P. 93–129.
14. Dimitrov C., Sitaud B., Dimitrov O. Displacement threshold energies in Ni(Al) solid solutions and in Ni<sub>3</sub>Al // J. Nucl. Mater. 1994. V. 208. P. 53–60.
15. Was G.S. Fundamentals of Radiation Materials Science – Metals and Alloys, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2007. 827 p.
16. 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.
17. Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976. 376 с.
18. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987. 408 p.
19. 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.
20. Воскобойников П.Е. Радиационные дефекты в алюминии. Моделирование первичных повреждений в каскадах смещений в объеме материала // ФММ. 2019. Т. 120. № 1. С. 3–10.
21. Воскобойников П.Е. Радиационные дефекты в алюминии. Моделирование первичных повреждений в каскадах смещений на поверхности // ФММ. 2019. Т. 120. № 1. С. 11–17.
22. 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.
23. Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J. Statistics of primary damage creation in high-energy displacement cascades in copper and zirconium // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2006. V. 242. № 1–2. P. 68–70.
24. 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.
25. Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J. Identification and morphology of point defect clusters created in displacement cascades in  $\alpha$ -zirconium // Nucl. In-

- str. Meth. Phys. Res. B. 2006. V. 242. № 1–2. P. 530–533.
26. *Voskoboinikov R.* A contribution of  $L1_0$  ordered crystal structure to the high radiation tolerance of  $\gamma$ -TiAl intermetallics // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2019. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.04.080>
27. *Voskoboinikov R.* An insight into radiation resistance of  $D0_{19}$   $Ti_3Al$  intermetallics // J. Nucl. Mater. 2019. V. 519. P. 239–246.
28. *Voskoboinikov R.* MD simulations of primary damage formation in  $L1_2$   $Ni_3Al$  intermetallics // J. Nucl. Mater. 2019. V. 522. P. 123–135.
29. *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.
30. *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.
31. *Lindemann F.A.* The calculation of molecular vibration frequencies // Zeitschrift für Physik. 1910. V. 11. P. 609–612.
32. *Nordlund K., Averback R.S.* Point defect movement and annealing in collision cascades // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. № 5. P. 2421–2431.
33. *Kinchin G.H., Pease R.S.* The Displacement of Atoms in Solids by Radiation // Rep. Prog. Phys. 1955. V. 18. P. 1–51.
34. *Norgett M.J., Robinson M.T., Torrens I.M.* A proposed method of calculating displacement dose rates // Nucl. Eng. Des. 1975. V. 33. P. 50–54.