

ТЕОРИЯ
МЕТАЛЛОВ

УДК 669.24:539.12.043

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ
ПОВРЕЖДЕНИЙ В НИКЕЛЕ

© 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 06.08.2019 г.

Принята к публикации 20.08.2019 г.

Методом молекулярной динамики исследован процесс радиационного дефектообразования в каскадах смещений, инициированных первично выбитыми атомами (ПВА) с энергией $E_{\text{ПВА}} = 5, 10, 15$ и 20 кэВ в никеле при температуре $T = 100, 300, 600, 900$ и 1200 К. Чтобы обеспечить статистическую достоверность результатов, для каждой пары параметров $(E_{\text{ПВА}}, T)$ смоделирована серия из 24 каскадов. Анализ результатов моделирования позволил определить число пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$, долю вакансий σ_{vac} и междоузельных атомов (SIA) σ_{SIA} в кластерах точечных дефектов, средний размер вакансионных $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ и междоузельных $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ кластеров и среднее число вакансионных $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$ и междоузельных $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ кластеров, образованных в каскадах смещений, как функцию энергии ПВА и температуры моделирования $(E_{\text{ПВА}}, T)$. Показано, что соотношение $\langle N_{\text{ФР}} \rangle = 2 \pm 0.9 \times E_{\text{ПВА}}^{1.1 \pm 0.1}$ выполняется при всех смоделированных условиях облучения. Величины $\langle \sigma_{\text{vac}} \rangle$ и $\langle \sigma_{\text{SIA}} \rangle$ демонстрируют идентичную функциональную зависимость от $E_{\text{ПВА}}$. При этом $\langle \sigma_{\text{vac}} \rangle$ повторяет зависимость $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$, тогда как $\langle \sigma_{\text{SIA}} \rangle$ определяется $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ и подвижностью междоузлий. Значение $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ зависит от температуры облучения и термической устойчивости вакансионных кластеров. Вакансионные кластеры стабильны при $T \leq 300$ К, и $\langle N_{\text{vac}} \rangle \propto E_{\text{ПВА}}$, тогда как при $600 \text{ К} \leq T \leq 900 \text{ К}$ $\langle N_{\text{vac}} \rangle \approx 6$ и 10 , что соответствует размерам регулярных тетраэдров дефекта упаковки. Число $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ пропорционально $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$, а значит, и $E_{\text{ПВА}}$ во всем диапазоне энергий ПВА.

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

DOI: 10.31857/S0015323020010192

ВВЕДЕНИЕ

Высокая температура эксплуатации разрабатываемых энергетических реакторов четвертого поколения по сравнению с действующими водородными энергетическими реакторами второго и третьего поколения [1] позволяет практически вдвое (до $\approx 60\%$) увеличить эффективность конверсии тепловой энергии в механическую за счет комбинирования термодинамических циклов Брайтона и Ранкина [2]. Однако повышение рабочей температуры реакторов зависит от создания новых конструкционных материалов, способных функционировать в условиях одновременного интенсивного термического воздействия, приложенных напряжений, в химически активной/окислительной среде под действием реакторного облучения. Благодаря своей исключительной по сравнению с аустенитными и мартенситно-ферритными сталя-

ми коррозионной стойкости и сопротивлению термической ползучести, жаропрочные никелевые сплавы рассматриваются в качестве основных конструкционных материалов для использования в трех из шести существующих дизайнов ядерных энергетических установок четвертого поколения [1, 3].

Для того чтобы сертифицировать использование существующих и разрабатываемых никелевых сплавов в предполагаемых экстремальных условиях, необходимо количественно измерить негативное воздействие операционной среды на их эксплуатационные свойства. Проведение экспериментальных исследований, направленных на решение этой задачи, часто требует больших временных и материальных затрат. Более того, в силу линейных и временных масштабов, не все протекающие процессы и явления могут быть исследованы экспериментальными методами. По этой

причине представляется важным дополнить экспериментальные исследования радиационных эффектов в облучаемых материалах компьютерным моделированием.

Существующие программы моделирования радиационных эффектов в никеле (см., напр., [4, 5]), не рассматривают влияние температуры облучения на уровень остаточных радиационных повреждений и статистику кластерообразования. Чтобы восполнить этот пробел, был смоделирован процесс первичного радиационного дефектообразования в каскадах смещений в никеле в широком диапазоне температур облучения и энергий первично выбитых атомов (ПВА).

ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

Каскады смещений инициируются ПВА с энергиями $E_{\text{ПВА}} \geq 1$ кэВ и являются основным источником радиационных повреждений, создаваемых в материалах, подвергаемых облучению быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии. Оценка характерных линейных размеров и времени релаксации каскадов смещений составляет ≈ 5 –30 нм и ≈ 2 –20 пс соответственно в зависимости от материала мишени, энергии ПВА и температуры облучения. Малые времена и размеры не позволяют исследовать процессы, протекающие в каскадах, экспериментальными методами, но первичное дефектообразование в каскадах смещений может быть смоделировано методом молекулярной динамики (МД).

Формирование радиационных повреждений в каскадах смещений – это стохастический процесс, для статистически корректного описания которого необходима репрезентативная выборка. Для определения минимального необходимого размера статистической выборки использована простая процедура, предложенная и опробованная ранее [6, 7]. Исследование первичного дефектообразования в никеле, подвергаемом облучению быстрыми частицами, таким образом, сводится к моделированию серии каскадов смещений методом МД в широком диапазоне значений энергий ПВА и температур облучения с последующей статистической обработкой результатов моделирования и визуализацией дефектной микроструктуры материала.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ

Для вычисления сил межатомного взаимодействия в никеле использован межатомный потенциал [8], построенный по методу внедренного атома. На коротких расстояниях парная часть потенциала модифицирована подстановкой универсального потенциала Зиглера–Бирсака–Литмарка [9]. Экспериментально измеренная пороговая энергия

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

смещения в никеле $E_d = 23 \pm 2$ эВ [10, 11] использована в качестве подгоночного параметра. Пороговая энергия смещения модифицированного потенциала составляет $23 < E_d \leq 24$ эВ. Для подгонки потенциала использовали процедуру, описанную в [12]. Подгонка потенциала никак не повлияла на равновесный параметр решетки, энергию когезии $E_0 = -4.45$ эВ, энергию образования вакансии $E_y^f = 1.57$ эВ, модули упругости, энергию дефектов упаковки, энергию свободной поверхности и т.п.

Каскады смещений в никеле смоделированы для температур $T = 100, 300, 600, 900$ и 1200 К. Теорема о вириале [13] использована для определения температурной зависимости равновесных параметров решетки, соответствующих нулевым внутренним напряжениям. Значения равновесных параметров решетки при температурах моделирования приведены в табл. 1.

Статистический ансамбль NVE использован для моделирования радиационных повреждений в каскадах смещений. Моделируемые кристаллы никеля имели кубическую форму с гранями $\{100\}$. Периодические граничные условия использованы на всех гранях кристалла.

Каскады смещений инициированы ПВА с энергией $E_{\text{ПВА}} = 5, 10, 15$ и 20 кэВ. Чтобы смоделировать изотропное пространственное и случайное временное распределение ПВА, их вводили в разных местах кристалла вдоль одного из кристаллографических направлений $\langle 123 \rangle$ в различные моменты времени. Для каждой пары значений параметров ($E_{\text{ПВА}}, T$) была смоделирована серия из 24 каскадов смещений.

Размер моделируемого кристалла масштабировали в зависимости от энергии ПВА в пропорции $\approx 10^{-2}$ эВ/атом (см. табл. 2) так, чтобы каскады смещений не пересекали границы кристалла. Перед введением ПВА кристалл никеля приводили в состояние термодинамического равновесия для температуры моделирования в течение 1×10^4 МД-итераций. МД-моделирование проводили без контроля температуры. Пример характерного изменения

Таблица 2. Число атомов $N_{\text{бок}}$ в кристалле никеля, используемом для моделирования каскадов смещений, инициированных ПВА с энергией $E_{\text{ПВА}}$

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

эффективной температуры Максвелла на разных стадиях эволюции каскада смещений, инициированного ПВА с энергией $E_{\text{ПВА}} = 20$ кэВ, в никеле при температуре облучения $T = 100$ К показан на рис. 1. Энергия, вносимая ПВА, не извлекалась из системы, а соответствующее повышение температуры кристалла после релаксации каскада смещений не превышало ≈ 40 град ни в одном из смоделированных кристаллов.

На начальной стадии развития каскада смещений относительно небольшое число атомов кристалла движется с большой скоростью, в то время как основной объем материала продолжает находиться в состоянии термодинамического равновесия. В методе скоростей Верле [14], использованном для интегрирования уравнений движения в этой работе, для сходимости решения шаг интегрирования 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 [15]. Устойчивость алгоритма [15] протестирована ранее, а сам метод неоднократно применяли при моделировании радиационных повреждений в алюминии [16, 17], меди [18, 19], α -цирконии [19, 20], интерметаллидах γ -TiAl [21], α_2 -Ti₃Al [22] и γ -Ni₃Al [23], а также при исследовании взаимодействия каскадов смещений с дислокациями [24, 25].

Для идентификации и визуализации радиационных дефектов использованы критерий Линдемманна [26], метод ячеек Вигнера–Зейтса [27] и кластерный анализ [18]. Пороговый радиус, использованный в критерии Линдемманна, равен $0.3a$, где a – это равновесный параметр решетки. Радиус первой координационной сферы $a/\sqrt{2}$ применяли при определении кластеров точечных дефектов в кластерном анализе.

АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Число пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$, образованных в индивидуальных каскадах смещений в никеле, и соответствующие средние значения $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ как функция ($E_{\text{ПВА}}$, T) приведены на рис. 2. Зависимость $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ от $E_{\text{ПВА}}$ близка к линейной при всех смоделированных условиях облучения. Если энергия ПВА задана в единицах кэВ, среднее число пар Френкеля аппроксимируется соотношением $\langle N_{\text{ФР}} \rangle = 2 \pm 0.9 \times E_{\text{ПВА}}^{1.1 \pm 0.1}$. Простая функциональная форма позволяет легко экстраполировать зависимость $\langle N_{\text{ФР}}(E_{\text{ПВА}}) \rangle$ в область $E_{\text{ПВА}} > 20$ кэВ. С увеличением $E_{\text{ПВА}}$ наиболее резкий рост $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ происходит при низкой температуре облучения. Увеличение температуры ведет к постепенному снижению

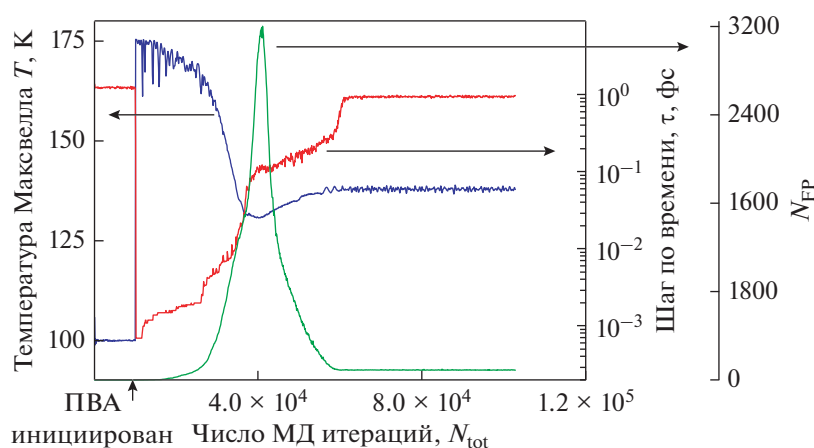


Рис. 1. Эффективная температура Максвелла T , шаг интегрирования по времени τ и число пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$ на различных этапах эволюции каскада смещений, инициированного ПВА с энергией $E_{\text{ПВА}} = 20$ кэВ в никеле при температуре 100 К.

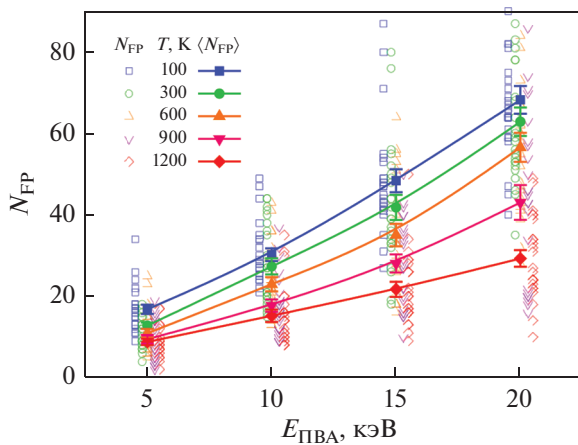


Рис. 2. Число пар Френкеля N_{FP} , образованных в каскадах смещений в никеле. Открытыми символами показаны значения N_{FP} после релаксации отдельных каскадов (показано со смещением). Соответствующие средние значения $\langle N_{FP} \rangle$ в серии каскадов с одинаковыми параметрами ($E_{ПВА}$, T) показаны закрасненными символами. Вертикальными отрезками здесь и далее обозначены стандартные ошибки среднего.

$\langle N_{FP} \rangle$, и наиболее резкое падение наблюдается при высоких энергиях ПВА.

Дисперсия значений N_{FP} велика даже для каскадов смещений, смоделированных при одинаковых значениях параметров ($E_{ПВА}$, T). Разброс N_{FP} увеличивается с ростом $E_{ПВА}$ и снижением T . Чтобы получить статистически достоверные значения N_{FP} в зависимости от ($E_{ПВА}$, T), следует определить минимально необходимый размер статистической выборки. В проводимом исследовании для определения размера выборки использована зависимость N_{FP} от числа n смоделированных каскадов в серии с одинаковыми значениями ($E_{ПВА}$, T) (см. пример на рис. 3). С ростом n , $\langle N_{FP} \rangle$ сходится к своему “стационарному” значению, определяя минимально необходимый размер \tilde{n} выборки (в примере на рис. 3 соответствует соотношению $\tilde{n} \geq 18$).

Доля $\sigma_{vac} = \sum N_{vac} / N_{FP}$ вакансий в вакансионных кластерах размером $N_{vac} \geq 3$ и $\sigma_{SIA} = \sum N_{SIA} / N_{FP}$ междуузлий (SIAs) в междуузельных кластерах размером $N_{SIA} \geq 4$ определены и усреднены по серии каскадов с одинаковыми значениями ($E_{ПВА}$, T), рис. 4. Как $\langle \sigma_{vac} \rangle$, так и $\langle \sigma_{SIA} \rangle$ демонстрируют похожую зависимость от $E_{ПВА}$ при всех условиях моделирования. Единственное исключение – это постоянное значение $\langle \sigma_{vac} \rangle \approx 0.06-0.07$ при $T = 1200$ К, т.е. фактическое отсутствие кластерообразования и доминирование изолированных вакансий и дивакансий в облученном никеле при высоких температурах.

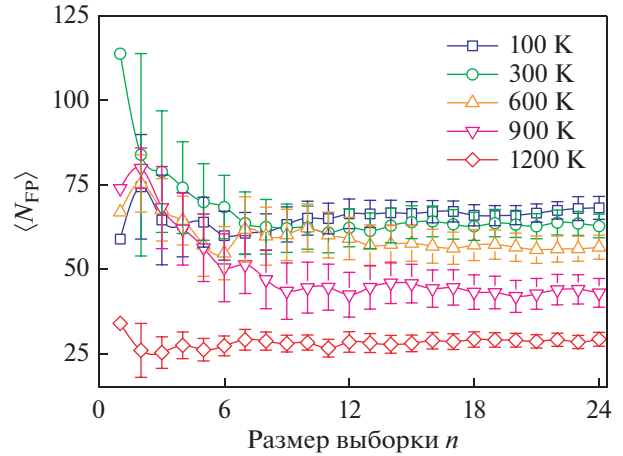


Рис. 3. Зависимость $\langle N_{FP} \rangle$ от числа n каскадов в статистической выборке. Каскады инициированы ПВА с энергией $E_{ПВА} = 20$ кэВ.

Зависимость $\langle \sigma_{vac} \rangle$ повторяет зависимость среднего числа вакансионных кластеров (Y_{vac}) на каскад (см. рис. 5 для сравнения). Число создаваемых радиационных дефектов в 5 кэВ каскадах смещений мало при всех температурах облучения за исключением $T = 100$ К (см. рис. 2). По этой причине как $\langle \sigma_{vac} \rangle$, так и $\langle Y_{vac} \rangle$ малы при $300 \leq T \leq 1200$ К и относительно велики при низкой температуре.

Увеличение $\langle N_{FP} \rangle$, вызванное увеличением $E_{ПВА}$ от 5 до 10 кэВ, сопровождается увеличением $\langle Y_{vac} \rangle$ и $\langle \sigma_{vac} \rangle$ при температуре $300 \leq T \leq 900$ К. Такое же увеличение энергии ПВА при $T = 100$ К не приводит к росту $\langle Y_{vac} \rangle$ в силу того, что число создаваемых вакансий просто недостаточно для образования более одного кластера. Однако дальнейшее увеличение энергии ПВА и, следовательно, N_{FP}

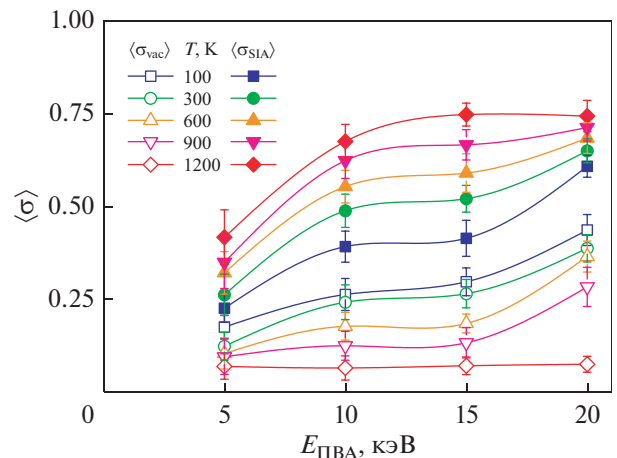


Рис. 4. Доля вакансий $\langle \sigma_{vac} \rangle$ и междуузлий $\langle \sigma_{SIA} \rangle$ в кластерах точечных дефектов в зависимости от ($E_{ПВА}$, T).

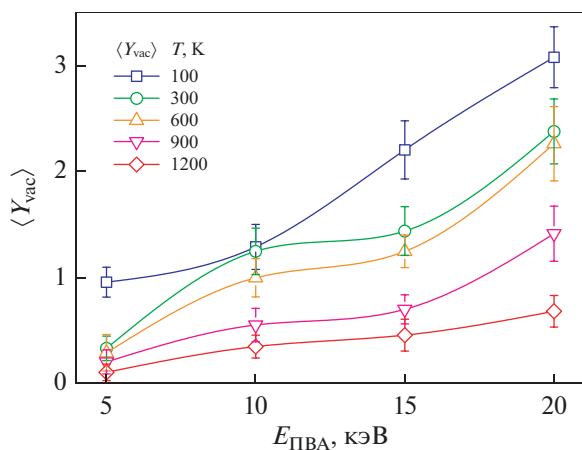


Рис. 5. Зависимость среднего числа вакансионных кластеров на каскад $\langle Y_{vac} \rangle$ от условий моделирования ($E_{ПВА}$, T).

ведет к устойчивому росту как $\langle Y_{vac} \rangle$, так и $\langle \sigma_{vac} \rangle$ в каскадах смещений при $T = 100$ К.

Величины $\langle Y_{vac} \rangle$ и $\langle \sigma_{vac} \rangle$ принимают одни и те же значения при моделировании каскадов смещений, инициированных ПВА с энергиями $10 \leq E_{ПВА} \leq 15$ кэВ при температуре моделирования в диапазоне $300 \leq T \leq 900$ К. Согласно рис. 2, число $\langle N_{FP} \rangle$, создаваемое ПВА с этими энергиями при температуре $300 \leq T \leq 900$ К приблизительно равно числу $\langle N_{FP} \rangle$, создаваемому ПВА с энергиями $5 \leq E_{ПВА} \leq 10$ кэВ, но при температуре $T = 100$ К. Таким образом, в каскадах смещений в никеле зависимость $\langle Y_{vac} \rangle$ от $\langle N_{FP} \rangle$ имеет три стадии: рост с увеличением $\langle N_{FP} \rangle$ при низких значениях $\langle N_{FP} \rangle$, стационарное состояние при промежуточных значениях $\langle N_{FP} \rangle$, когда число образованных дефектов недостаточно для образования более одного вакансионного кластера, и дальнейший рост при больших значениях $\langle N_{FP} \rangle$. Доля вакансий в вакансионных кластерах $\langle \sigma_{vac} \rangle$ повторяет функциональную зависимость $\langle Y_{vac} \rangle$ от ($E_{ПВА}$, T).

Средний размер вакансионных кластеров $\langle N_{vac} \rangle$, зародившихся в каскадах смещений в никеле, как функция ($E_{ПВА}$, T) показан на рис. 6. Три характерных типа зависимости $\langle N_{vac} \rangle(E_{ПВА})$ определяются температурой облучения и термической стабильностью вакансионных кластеров. При температуре $T = 100$ и 300 К вакансионные кластеры стабильны, $\langle N_{vac} \rangle \propto \langle N_{FP} \rangle$ и, следовательно, $\propto E_{ПВА}$. При температуре $T = 1200$ К вакансионные кластеры нестабильны, средний размер $\langle N_{vac} \rangle$ мал и практически не зависит от $E_{ПВА}$. При температурах $T = 600$ и 900 К стабильность вакансионных кластеров определяется их размером и степенью совершенства.

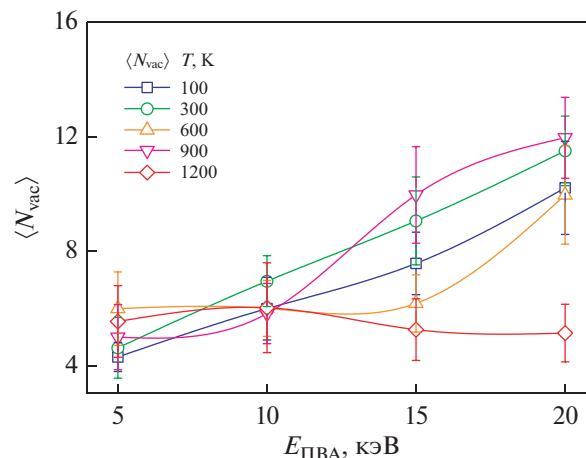


Рис. 6. Зависимость среднего размера вакансионных кластеров $\langle N_{vac} \rangle$ от параметров ($E_{ПВА}$, T).

В никеле и никелевых сплавах экспериментально наблюдается два типа вакансионных кластеров (см, напр., [28, 29]). Маленькие вакансионные кластеры преимущественно образуют тетраэдры дефекта упаковки, которые с ростом вакансионных кластеров превращаются в вакансионные петли Франка с вектором Бюргерса $1/3\langle 111 \rangle$. Термическая стабильность тетраэдров дефекта упаковки сильно зависит от их размера и уровня совершенства. Тетраэдры дефекта упаковки правильной формы с числом вакансий $N_{vac} = (k + 1)k/2$, $k = 2, 3, 4, \dots$ непропорционально более стабильны по сравнению с нерегулярными тетраэдрами дефекта упаковки, число вакансий в которых отклоняется от этих “магических чисел”. По этой причине при температуре $T = 600$ К в каскадах смещений, инициируемых ПВА с энергиями $5 \leq E_{ПВА} \leq 15$ кэВ и $E_{ПВА} = 20$ кэВ, преимущественно зарождаются вакансионные кластеры размером $\langle N_{vac} \rangle = 6$ и 10 соответственно, рис. 6. По той же самой причине вакансионные кластеры с $\langle N_{vac} \rangle \approx 6$ и 10 образуются в каскадах смещений при $T = 900$ К, однако их среднее число $\langle Y_{vac} \rangle$ оказывается вдвое меньше, чем в каскадах смещений при температуре $T = 600$ К (см. рис. 5).

Зависимость $\langle \sigma_{SIA} \rangle$ на рис. 4 совпадает с $\langle \sigma_{vac} \rangle$, однако в отличие от $\langle \sigma_{vac} \rangle$, $\langle \sigma_{SIA} \rangle$ определяется средним числом междоузлий $\langle N_{SIA} \rangle$ в междоузельных кластерах (рис. 7). При низких энергиях ПВА $\langle N_{SIA} \rangle \approx 7$. Это число соответствует размеру икосаэдрического междоузельного кластера в ГЦК-структуре [30]. Увеличение $E_{ПВА}$ ведет к увеличению N_{FP} и вызывает рост $\langle N_{SIA} \rangle$. Немонотонный рост $\langle N_{SIA} \rangle$ связан с образованием нескольких стабильных междоузельных кластеров размером $\langle N_{SIA} \rangle = 7, 10, 13, 15$ и 19 междоузлий.

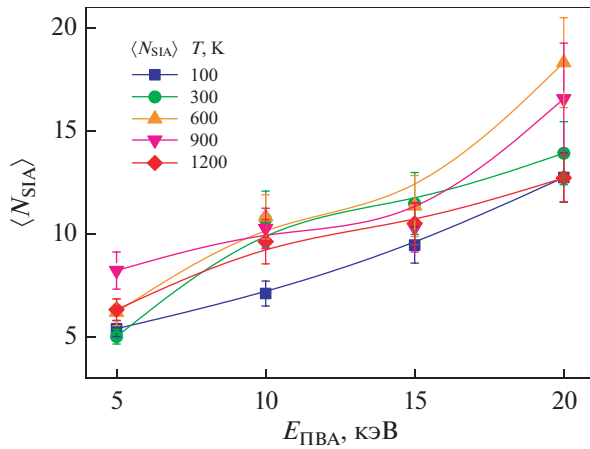


Рис. 7. Зависимость среднего размера междуузельных кластеров $\langle N_{SIA} \rangle$ от $(E_{ПВА}, T)$.

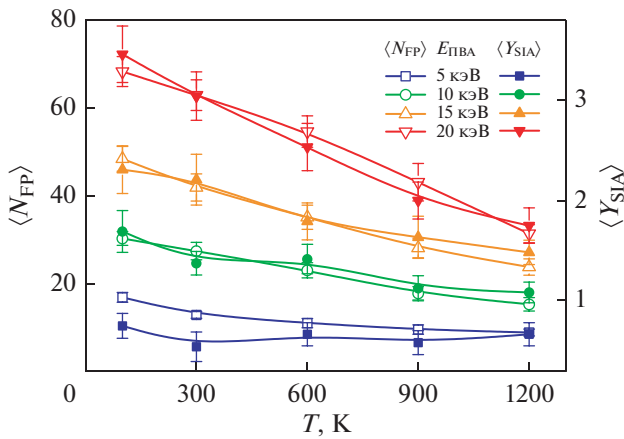


Рис. 8. Величины $\langle Y_{SIA} \rangle$ и $\langle N_{FP} \rangle$ как функции $(E_{ПВА}, T)$.

Термоактивируемое превращение неподвижных междуузлий, имеющих конфигурацию гантели вдоль $\langle 100 \rangle$, в подвижную конфигурацию вдоль $\langle 110 \rangle$ подавлено при температуре $T = 100$ К. Из-за низких температур не наблюдается изменение размеров междуузельных кластеров в сторону ближайшей стабильной конфигурации, и $\langle N_{SIA} \rangle$ изменяется пропорционально как $\langle N_{FP} \rangle$, так и $E_{ПВА}$.

Среднее число междуузельных кластеров на каскад $\langle Y_{SIA} \rangle$ в зависимости от $(E_{ПВА}, T)$ показано на рис. 8. Чтобы сделать корреляцию между $\langle Y_{SIA} \rangle$ и $\langle N_{FP} \rangle$ еще более очевидной, результаты моделирования, показанные на рис. 2, были перегруппированы и добавлены к зависимости $\langle Y_{SIA} \rangle$ на рис. 8, из которого видно, что $\langle Y_{SIA} \rangle \propto \langle N_{FP} \rangle$ при всех смоделированных условиях облучения $(E_{ПВА}, T)$.

ВЫВОДЫ

Компьютерное моделирование методом МД использовано для исследования процесса первичного дефектообразования в каскадах смещений в

никеле, подвергаемом облучению быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии. Были смоделированы каскады смещений, инициированные ПВА с энергиями $5 \leq E_{ПВА} \leq 20$ кэВ в материале при температуре $100 \leq T \leq 1200$ К. Число пар Френкеля, доля вакансий и междуузлий в кластерах точечных дефектов, средний размер вакансионных и междуузельных кластеров, и среднее число кластеров на каскад определены как функция $(E_{ПВА}, T)$. Чтобы получить статистически достоверные количественные результаты, для каждой пары $(E_{ПВА}, T)$, смоделирована серия из 24 каскадов смещений.

Зависимость $\langle N_{FP} \rangle$ от энергии ПВА аппроксимируется близкой к линейной показательной функцией $\langle N_{FP} \rangle = 2 \pm 0.9 \times E_{ПВА}^{1.1 \pm 0.1}$ при всех смоделированных параметрах $(E_{ПВА}, T)$. Установлено, что как $\langle \sigma_{vac} \rangle$, так и $\langle \sigma_{SIA} \rangle$ демонстрируют похожую функциональную зависимость от $E_{ПВА}$, однако физические механизмы, определяющие их поведение, различны. Значение $\langle \sigma_{vac} \rangle$ повторяет функциональную зависимость $\langle Y_{vac} \rangle$ при всех условиях облучения $(E_{ПВА}, T)$. Величина $\langle \sigma_{SIA} \rangle$ определяется размером междуузельных кластеров $\langle N_{SIA} \rangle$ и диффузионной подвижностью междуузлий. При температуре $T = 100$ К подвижность междуузлий подавлена, и $\langle \sigma_{SIA} \rangle \propto E_{ПВА}$. При $T \geq 300$ К, междуузлия образуют как небольшие междуузельные дислокационные петли с вектором Бюргерса $1/2\langle 110 \rangle$, так и икосаэдрические кластеры с $N_{SIA} = 7$ [30] или кластеры, производные от икосаэдрических [31].

Размеры вакансионных кластеров $\langle N_{vac} \rangle$ определяются температурой облучения и термической стабильностью тетраэдров дефекта упаковки. При температурах $T \leq 300$ К все вакансионные кластеры стабильны, $\langle N_{vac} \rangle \propto E_{ПВА}$. При температурах $600 \leq T \leq 900$ К стабильны преимущественно вакансионные кластеры с $N_{vac} = 6$ и 10, размер которых соответствует регулярным тетраэдрам дефекта упаковки. Значения $\langle Y_{SIA} \rangle \propto \langle N_{FP} \rangle$ и, следовательно, $\propto E_{ПВА}$ при всех условиях облучения.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Handbook of Generation IV Nuclear Reactors 1st Edition / Pioro I. Eds. Woodhead Publishing Series in Energy: Number 103, Woodhead Publishing, Duxford, UK, 2016. 907 p.
2. *Dominic B.* Comparison of efficiency and power output of various power products / Keynote talk. 1997 International Gas Turbine Institute (IGTI) Turbo Expo.
3. IAEA Advanced Reactors Information System (ARIS), <https://aris.iaea.org/default.html>
4. *Nordlund K., Ghaly M., Averbach R.S., Caturla M., Diaz de la Rubia T., Tarus J.* Defect production in collision cascades in elemental semiconductors and fcc metals // *Phys. Rev. B.* 1998. V. 57. P. 7556–7570.
5. *Zarkadoula E., Samolyuk G., Xue H., Bei H., Weber W.J.* Effects of two-temperature model on cascade evolution in Ni and NiFe // *Scr. Mater.* 2016. V. 124. P. 6–10.
6. *Воскобойников П.Е.* Радиационные дефекты в алюминии. Моделирование первичных повреждений в каскадах смещений в объеме материала // *ФММ.* 2019. Т. 120. № 1. С. 3–10. <https://doi.org/10.1134/S0015323018110219>
7. *Воскобойников П.Е.* Радиационные дефекты в алюминии. Моделирование первичных повреждений в каскадах смещений на поверхности // *ФММ.* 2019. Т. 120. № 1. С. 11–17. <https://doi.org/10.1134/S0015323019010066>
8. *Mishin Y.* Atomistic modeling of the γ and γ' -phases of the Ni–Al system // *Acta Mater.* 2004. V. 52. P. 1451–1467.
9. *Biersack J.P., Ziegler J.F.* Refined universal potentials in atomic collisions // *Nucl. Instr. Meth.* 1982. V. 194. P. 93–100.
10. *Dimitrov C., Sitaud B., Dimitrov O.* Displacement threshold energies in Ni(Al) solid solutions and in Ni₃Al // *J. Nucl. Mater.* 1994. V. 208. P. 53–60.
11. *Was G.S.* Fundamentals of Radiation Materials Science – Metals and Alloys, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2007. 827p.
12. *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., Tombrrello 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.
13. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика / Учеб. пособие. В 10 т. Т. I. Механика. 4-е изд., испр. М.: Наука, 1988. 216 с.
14. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987. 408 p.
15. *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.
16. *Voskoboinikov R.E.* Radiation Defects in Aluminum: MD Simulations of Collision Cascades in the Bulk of Material // *Phys. Met. Metallogr.* 2019. V. 120. № 1. P. 1–8.
17. *Voskoboinikov R.E.* Radiation Defects in Aluminum. Simulation of Primary Damage in Surface Collision Cascades // *Phys. Met. Metallogr.* 2019. V. 120. № 1. P. 9–15.
18. *Voskoboinikov R.E., Osetsy 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.
19. *Voskoboinikov R.E., Osetsy 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.
20. *Voskoboinikov R.E., Osetsy 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.
21. *Voskoboinikov R.* A contribution of L1₀ ordered crystal structure to the high radiation tolerance of γ -TiAl intermetallics // Article in press. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 2019. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2019.04.080>
22. *Voskoboinikov R.* An insight into radiation resistance of D0₁₉ Ti₃Al intermetallics // *J. Nucl. Mater.* 2019. V. 519. P. 239–246.
23. *Voskoboinikov R.* MD simulations of primary damage formation in L1₂ Ni₃Al intermetallics // *J. Nucl. Mater.* 2019. V. 522. P. 123–135.
24. *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.
25. *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.
26. *Lindemann F.A.* The calculation of molecular vibration frequencies // *Zeitschrift für Physik.* 1910. V. 11. P. 609–612.
27. *Nordlund K., Averbach R.S.* Point defect movement and annealing in collision cascades // *Phys. Rev. B.* 1997. V. 56. № 5. P. 2421–2431.
28. *Judge C.D.* The Effects of Irradiation on Inconel X-750. PhD Thesis. McMaster University. 2015. 258 p. <http://hdl.handle.net/11375/18091>
29. *Zhang H.K., Yao Z., Morin G., Griffiths M.* TEM characterization of in-reactor neutron irradiated CANDU spacer material Inconel X-750 // *J. Nucl. Mater.* 2014. V. 451. № 1–3. P. 88–96.
30. *Ingle K.W., Perrin R.C., Schober H.R.* Interstitial cluster in FCC metals // *J. Phys. F: Met. Phys.* 1981. V. 11. № 6. P. 1161–1173.
31. *Borodin V.A., Voskoboinikov R.E.* To be published.