

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ В СПЛАВЕ УРАН–МОЛИБДЕН ПРИ ПРОЛЕТЕ ОСКОЛКА ДЕЛЕНИЯ

Л. Н. Колотова^{a,b}, С. В. Стариков^c, В. Д. Озрин^a*

*^a Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук
115191, Москва, Россия*

*^b Московский физико-технический институт (государственный университет)
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

*^c Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 22 октября 2018 г.,
после переработки 11 февраля 2019 г.
Принята к публикации 15 февраля 2019 г.

Представлены результаты моделирования процесса образования дефектов в сплаве урана с молибденом при пролете ионов ксенона и циркония с характерными для осколков деления энергиями. Исследуется процесс генерации дефектов в рамках атомистической двухтемпературной модели и метода Монте-Карло. Это позволяет оценить полное число первичных радиационных дефектов, которые образуются на стадии «термической вспышки» и в столкновительных каскадах для различных температур. Результаты расчетов пороговых энерговыделений ионов, приводящих к образованию дефектов на стадии «термической вспышки», находятся в хорошем согласии с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными.

DOI: 10.1134/S0044451019070071

1. ВВЕДЕНИЕ

На всех этапах жизненного цикла в ядерном топливе протекают сложные термомеханические и физико-химические процессы — при производстве, облучении в ядерном реакторе, последующей переработке и хранении. Физика, химия и материаловедение ядерного топлива существенно усложнена радиационными эффектами, и по этой причине большинство коммерческих топливных кодов, описывающих поведение ядерного топлива в реакторе, являются полуэмпирическими. В связи с этим весьма актуальной задачей является разработка так называемых механистических моделей, базирующихся на современных представлениях о физике и химии процессов в ядерном топливе [1–5]. Такие модели обычно формулируются для описания явлений в мезомасштабе, таких как теплопередача, диффузия ком-

понентов топлива, зарождение в топливе новых фаз, их стабильность и т. д. При этом модели содержат, как правило, неизвестные микроскопические параметры, величины которых подгоняются под имеющиеся экспериментальные данные.

В свою очередь, оценка модельных параметров может быть проведена с помощью численного моделирования процессов, протекающих на атомистическом уровне [6–9], с использованием современных численных методов квантовой механики, Монте-Карло и молекулярной динамики. Это приводит к концепции мультимасштабности в разработке топливных кодов, когда данные на атомистическом уровне передаются через мезомасштабные модели для описания явлений в макромасштабе. Такой подход является особенно ценным при недостатке и тем более при отсутствии экспериментальной информации, касающейся физико-химических особенностей отдельных процессов в топливе.

В настоящее время в ряде стран, включая Россию, проводятся интенсивные работы по переводу атомной энергетики на новую технологическую

* E-mail: lada.kolotova@gmail.com

платформу, в которой предусмотрена реализация замкнутого топливного цикла. Эта платформа предполагает использование реакторов на быстрых нейтронах, и важнейшей задачей является выбор оптимального топлива для этих реакторов. Наряду с традиционным смешанным оксидным топливом рассматривают альтернативные варианты, такие как карбидное, нитридное и металлическое топливо. В качестве металлического топлива часто используется сплав U–Mo из-за высоких показателей плотности, теплопроводности, повышенной коррозионной стойкости [10–14]. Но, в отличие от оксидного топлива, которое интенсивно исследовалось на протяжении многих десятков лет, экспериментальная информация, касающаяся новых видов топлива, весьма скудна. В этих условиях особое значение придается расчетным оценкам поведения топлива при облучении.

Многие процессы, протекающие в разных видах топлива, имеют сходную физико-химическую природу и, следовательно, описываются в рамках единой модели. Так, во всех видах топлива описание эволюции дефектной структуры предполагает знание энергий активации, коэффициентов диффузии точечных дефектов, скорости их генерации при облучении и т. д. Однако микроскопические параметры, с которыми оперируют модели, могут существенно различаться для разных видов топлива. В данной работе оценивается один из важнейших параметров дефектной модели кода BERKUT [15] — число первичных радиационных дефектов, которые образуются на стадии «термической вспышки» и в столкновительных каскадах при прохождении фрагментов деления в U–Mo для различных температур эксплуатации топлива.

2. МОДЕЛЬ «ТЕРМИЧЕСКОЙ ВСПЫШКИ»

При делении урана в ядерном топливе формируются осколки деления (ионы) с большой начальной энергией. Быстрые тяжелые ионы (БТИ) при пролете через вещество теряют свою энергию в двух независимых процессах: передача энергии в электронную подсистему и упругие столкновения с атомами, которые могут приводить к развитию столкновительных каскадов. Оба процесса могут приводить к образованию дефектов. В случае быстрых тяжелых ионов ($E > 100$ кэВ/н) интенсивность передачи энергии $S = dE/dz$ (энерговклад) в электронную подсистему на несколько порядков выше, чем энергия, теряемая за счет упругих столкновений [16–18].

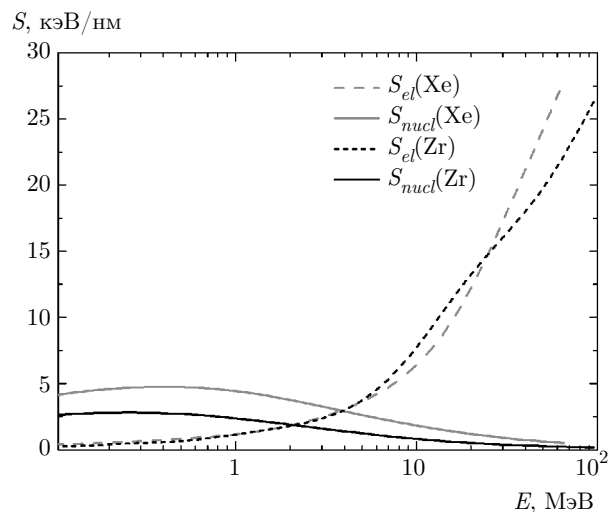


Рис. 1. Зависимости энерговклада БТИ от энергии ионов Xe и Zr в сплаве U–Mo. Штриховые линии — передача энергии в электронную подсистему, сплошные линии — энергия, теряемая за счет столкновительных каскадов. Расчеты выполнены с помощью кода SRIM [19]

На рис. 1 представлены зависимости энерговкладов БТИ от энергии осколков деления, полученные с помощью кода SRIM [19].

Выделение большого количества энергии в электронную подсистему и релаксационные процессы приводят к образованию структурных дефектов и вызывают специфические эффекты, такие как формирование скрытых треков, локальное плавление, аморфизация, формирование различных твердых фаз [16, 18, 20–28]. Природа треков зависит от типа твердого тела. В случае большинства изоляторов и некоторых проводящих сплавов треки состоят из аморфного материала. В чистых металлах и многих керамиках трекообразование обычно ассоциируется с образованием точечных дефектов и их последующей кластеризацией в результате термически активируемой миграции [16, 22, 29, 30]. Таким образом, происходит нагрев ионной подсистемы, вещество плавится и при последующей кристаллизации образуются дефекты.

Структура сплава U–Mo и его ионная подсистема описываются в рамках молекулярно-динамического (МД) моделирования с модифицированной версией потенциала ADP [31]. Все расчеты проводились с использованием МД-пакета LAMMPS [32] с ttm/mod-модификацией [33].

Расчеты проводились в ячейке размерами $160\alpha_0 \times 160\alpha_0 \times 6\alpha_0$ вдоль осей x, y, z соответственно, где $\alpha_0 = 3.45$ Å — параметр кристаллической

решетки сплава U–Mo. Для устранения поверхностных эффектов использовались периодические граничные условия. Размер элементарной ячейки для электронной подсистемы был равен $2\alpha_0 \times 2\alpha_0 \times 6\alpha_0$. Шаг интегрирования составлял 0.5 фс. Использовалось случайное распределение атомов урана и молибдена в кристаллической решетке для создания концентрации молибдена в 5 at. %.

На стадии термической вспышки энергия иона передается непосредственно в электронную подсистему. На короткое время это создает двухтемпературное состояние вещества, где температура электронов T_e на несколько порядков выше температуры ионов T_i . В модели взаимодействуют электронная и ионная подсистемы с различающимися начальными температурами [33–36]. Совместно решается система уравнений Ньютона для ионов и уравнение теплопроводности для электронной подсистемы. Силу, действующую на атом j , можно записать как

$$\mathbf{F}_j = -\nabla_j U(r_1, \dots, r_n) + F_j^{lang}(T_e - T_i) - \frac{\nabla P_e}{n_i}, \quad (1)$$

где $U(r_1, \dots, r_n)$ — потенциальная энергия системы ионов, задаваемая с помощью потенциала ADP [31], F^{lang} — ланжевенский термостат в ионной подсистеме, $\nabla P_e/n_i$ — дополнительный член в уравнении движения, отвечающий за влияние электронного давления на динамику ионов [37], $P_e = 0.5\rho_e C_e T_e$ [33, 36].

Изменение температуры электронной подсистемы описывается следующим образом:

$$C_e(T_e)\rho_e \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla(\kappa_e \nabla T_e) - g_p(T_e - T_i), \quad (2)$$

где C_e — удельная электронная теплоемкость, плотность $\rho_e = 0.625e/\text{\AA}^3$, $\kappa_e = D_e \rho_e C_e$ — коэффициент теплопроводности, D_e — коэффициент термодиффузии электронов, константа электрон-ионного взаимодействия $g_p = 6.5 \cdot 10^{17} \text{ В} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{К}^{-1}$ [38].

Важно отметить, что уравнения (1) и (2) решаются совместно для всей моделируемой системы. Электронная подсистема влияет на ионную подсистему через электрон-ионную релаксацию (ланжевенский термостат в ионной подсистеме) и дополнительный член в уравнении движения, отвечающий за влияние электронного давления на динамику ионов. Стоит отметить, что более корректный подход заключается в учете изменения межатомного потенциала в ходе возбуждения электронной подсистемы. Однако моделирование треков происходит в объеме вещества, в отсутствие свободной поверхности. В этом случае за время электрон-ионной релаксации (около пикосекунды) атомы не успевают

сильно изменить положение вследствие изменения межатомных сил. Силы между ионами можно считать не зависящими от электронной температуры и в первом приближении учитывать электронное давление только как дополнительный член в уравнении движения ионов. По результатам проведенного моделирования можно сделать даже более сильное заключение: учет электронного давления хоть и важен с методической точки зрения, но практически не влияет на конечный результат моделирования образования дефектов в сплаве уран–молибден (в отличие от моделирования треков в диоксиде урана вблизи поверхности [33]).

Удельная электронная теплоемкость взята в форме

$$C_e = \gamma T_e, \quad (3)$$

где $\gamma = 4.0 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}/(K^2 e)$ [38]. Значения g_p и γ были теоретически получены из первопринципных расчетов плотности электронных состояний и функции Элиашберга [38] для чистого урана. Релаксация сильных электронных возбуждений, создаваемых тяжелыми ионами, является главным фактором, который определяет природу трековой области. Таким образом, важной задачей для моделирования образования трека является оценка коэффициента термодиффузии D_e для двухтемпературной модели. Он был получен из экспериментальных данных о теплопроводности κ_e [39–43]. Коэффициент термодиффузии электронов D_e можно найти из аппроксимации экспериментальных данных линейной зависимостью от температуры $\kappa_e = D_e \rho_e \gamma T_e$. В настоящей работе было принято значение $D_e = 10 \text{ \AA}^2/\text{фс}$, которое наиболее корректно описывает экспериментальные данные.

При пролете БТИ можно выделить следующие временные стадии [44, 45]: перераспределение заряда и его нейтрализация, релаксация электронов, релаксация решетки, ее нагрев и последующее охлаждение. В металлах первые две стадии обычно протекают очень быстро и занимают около 0.1–1 фс. Это время можно оценить, решая статические уравнения Максвелла для напряженности электрического поля $\mathbf{E}$, плотности тока $\mathbf{j}$ и проводимости σ [46–48]. Далее идет стадия релаксации электронов к равновесному распределению. В общем случае, если концентрация возбужденных электронов достаточно велика, обмен энергией между ними будет происходить сначала достаточно эффективно. Время этой стадии можно оценить как 10–100 фс в моделях, описывающих кинетику электронов с учетом их соударений [47–49]. Это делает возможным исполь-

зовать уравнение теплопроводности для электронов после их термализации. Таким образом, двухтемпературная атомистическая модель, используемая в данной работе, описывает процесс формирования трека при пролете БТИ после установления равновесного распределения электронов по энергиям и до стадии охлаждения кристаллической решетки с формированием в ней точечных дефектов.

3. ФОРМИРОВАНИЕ ТРЕКОВ В γ -ФАЗЕ СПЛАВА U–Mo

При моделировании треков БТИ проходит через вещество вдоль одного из направлений решетки сплава U–Mo. Влияние энергии иона обычно описывается в терминах энерговклада $S = dE/dz$, который отражает скорость потери кинетической энергии иона на единицу длины вдоль его траектории. В данной работе значения электронного энерговклада варьировались от 5 кэВ/нм до 30 кэВ/нм, которые близки к энерговкладам от осколков деления [50]. Энерговклад от БТИ моделировался заданием начального профиля электронной температуры. Начальное распределение электронной температуры было взято в виде

$$T_e = T_{init} + T_{max} \exp(-r/R). \quad (4)$$

Максимальное значение электронной температуры T_{max} находится в центре расчетной ячейки, $R = 10a_0$ (радиус трека), r — расстояние от оси трека. Значения электронной температуры T_{max} и радиус трека R подбирались таким образом, чтобы соответствовать значениям электронного энерговклада. Например, $T_{max} = 35000$ К соответствует энерговкладу $S = 29$ кэВ/нм. T_{init} — начальная температура сплава U–Mo, эта температура в расчетах менялась в пределах 300 К–900 К.

Два типа релаксационных процессов имеют место для электронной подсистемы: передача энергии от электронов к ионам и электронная теплопроводность. Электрон-ионная релаксация приводит к нагреву ионной подсистемы вблизи центра трека. В данной работе образование точечных дефектов и плавление при облучении БТИ происходит при нагреве ионной подсистемы, вызванном электрон-ионной релаксацией. Время двухтемпературной стадии равно примерно 4 пс.

В предыдущей работе [51] было показано, что существуют различные механизмы образования дефектов при облучении сплава уран–молибден: плавление и последующая кристаллизация системы, фазовый

переход между двумя кристаллическими фазами ($\alpha \rightarrow \gamma$). Более того, результаты моделирования показывают, что генерация точечных дефектов может происходить без какого-либо фазового перехода. Возможная причина этого явления — небольшая энергия образования пары Френкеля в γ -фазе сплава уран–молибден. Также на образование дефектов в области трека может влиять распространение волн сжатия, поскольку они создают сильные локальные возмущения. Были рассчитаны пороговые энерговклады БТИ, облучение которыми приводит к формированию дефектов в сплаве урана с 5 ат. % молибдена в различных условиях. Пороговые энерговклады уменьшаются от 27 кэВ/нм до 6 кэВ/нм при увеличении начальной температуры сплава от 300 К до 900 К.

4. ЗАВИСИМОСТЬ ПОРОГОВОГО ЭНЕРГОВКЛАДА ОТ СВОЙСТВ ОБЛУЧАЕМОГО МАТЕРИАЛА

В рамках модели термической вспышки пороговый энерговклад, приводящий к плавлению вещества, может быть оценен различными способами. В модели, предложенной в работе [52], зависимость температуры ионов от времени после передачи энергии в ионную подсистему аппроксимируется распределением Гаусса. Тогда пороговый энерговклад S_{th} для плавления и последующей кристаллизации с образованием дефектов можно оценить как энерговклад, при котором температура ионов в центре трека достигает температуры плавления T_m :

$$S_{th} = \frac{c\rho\pi a^2(T_m - T_{init})}{g}, \quad (5)$$

где a — радиус трека, g — доля энергии, передающейся от электронов к ионам. Для оценки теплоемкости c облучаемого вещества можно рассчитать как теплоемкость решетки по закону Дюлонга–Пти: $c = (3R/M)N$, где R — универсальная газовая постоянная, M — молярная масса вещества, N — число атомов в химической формуле вещества.

В работе [22] приводятся пороговые энерговклады БТИ для большого числа веществ из различных работ. Эти данные были нанесены на график зависимости порогового энерговклада S_{th} от $c\rho(T_m - T_{init})$ вместе с полученными из расчетов данными для сплава U–Mo (рис. 2).

При аппроксимации данных линейной зависимостью коэффициент наклона равен $\pi a^2/g$. Это позволяет оценить долю энергии на единицу площади, которая идет на нагрев ионной подсистемы. Все

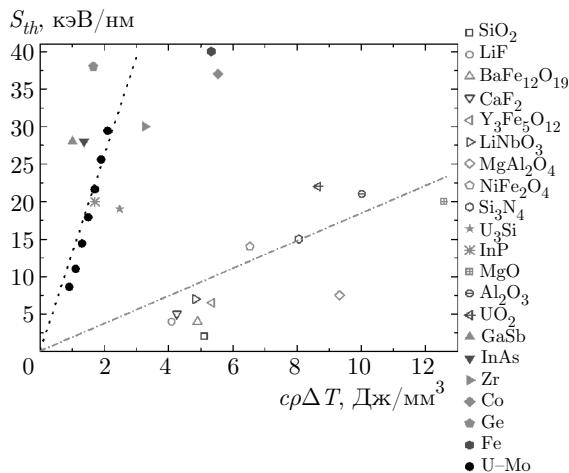


Рис. 2. Пороговые энергосклады БТИ для различных веществ, полученные в экспериментах [22], в зависимости от $cr(T_m - T_{init})$. Результаты настоящей работы показаны черными кружками

данные можно разбить на две группы — металлы с большими пороговыми энергоскладами (около 30 кэВ/нм) при комнатной температуре (к этой группе также можно отнести U_3Si , близкий по свойствам к металлическому топливу, и полупроводник InP , обладающий большой теплопроводностью) и диэлектрики, полупроводники с энергоскладами меньше 30 кэВ/нм при комнатной температуре. Для первой группы веществ доля энергии на $1 \text{ \AA}^2$, которая идет на нагрев ионной подсистемы, $g/\pi a^2$ составляет 34 %, а для второй группы $g/\pi a^2 \approx 5 \%$ на $1 \text{ \AA}^2$. Различие на порядок в значениях $g/\pi a^2$ для неметаллов и металлов объясняется высокой теплопроводностью последних — большая часть энергии в электронной подсистеме успевает рассеяться по объему вещества до передачи в ионную подсистему. При этом значения пороговых энергоскладов, полученные для сплава $U-Mo$ в настоящей работе, хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными для других металлов.

5. ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЧИСЛА ПАР ФРЕНКЕЛЯ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ НА СТАДИИ «ТЕРМИЧЕСКОЙ ВСПЫШКИ»

Результаты моделирования позволяют оценить полное число первичных радиационных дефектов в ядерном топливе в условиях эксплуатации. В данной части работы мы выполнили оценку числа первичных радиационных дефектов, образующихся на ста-

дии «термической вспышки». Число созданных радиационных дефектов линейно увеличивается с увеличением энергосклада, если он больше порогового значения S_{th} . Число пар Френкеля (N_{Fp}) на единицу длины пути Δz пролета БТИ может быть описано как $N_{Fp}/\Delta z = N_0(S - S_{th})$, где $N_0 \approx 2 \text{ кэВ}^{-1}$. При распаде одного актинида основная часть энергии превращается в кинетическую энергию двух осколков деления, которые движутся в разные стороны. Существует два основных типа осколков деления: тяжелые осколки с массовым номером около 130 а.е.м. (в частности, Xe) и энергией около 65 МэВ; легкие фрагменты с массой около 95 а.е.м. (например, Zr) и энергией около 95 МэВ. Для расчета значений S для осколков деления (Xe и Zr) и изменения S вдоль их путей использовался код SRIM [19] (рис. 1).

Таким образом, число первичных радиационных дефектов N вдоль линии трека можно оценить как

$$N_{Fp}(T) = \int_0^{L_{th}} N_0 S dz - \int_0^{L_{th}} N_0 S_{th} dz = N_0(E_0 - E_{th}) - N_0 S_{th} L_{th}, \quad (6)$$

где E_0 — начальная энергия иона. Конечные значения энергии E_{th} и длины пути L_{th} вычисляются при достижении энергоскладом порогового значения $S = S_{th}$ и, соответственно, зависят от температуры.

В итоге полное число первичных радиационных дефектов, образующихся на стадии «термической вспышки» (TS), равно сумме числа дефектов, образующихся при пролете Xe и Zr :

$$N_{Fp}^{TS}(T) = N_{Fp}^{Xe}(T) + N_{Fp}^{Zr}(T).$$

Зависимость полного числа первичных радиационных дефектов, образующихся в результате распада одного актинида, от температуры T показана на рис. 3. При увеличении температуры от 300 К до 900 К число пар Френкеля возрастает практически на два порядка. Следует отметить, что это число первичных радиационных дефектов образовалось только на стадии «термической вспышки».

6. РАСЧЕТ ЧИСЛА ПАР ФРЕНКЕЛЯ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ КАСКАДАХ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Как уже было сказано выше, радиационные дефекты могут формироваться не только в результате

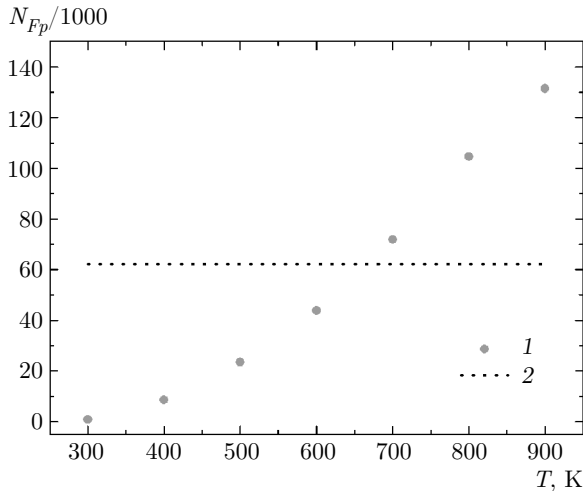


Рис. 3. Зависимости числа пар Френкеля, образующихся в результате распада одного актинида, от температуры T на стадии «термической вспышки» (1) и в столкновительных каскадах (2)

передачи энергии от БТИ в электронную подсистему, но и за счет упругих соударений между налетающим ионами и атомами матрицы [16, 22, 53]. При энергии БТИ меньше 10 МэВ, потери энергии иона на нагрев электронной подсистемы становятся меньше величины порогового энерговклада S_{th} и не могут приводить к образованию дефектов. В этом случае основное число дефектов формируется в результате столкновительных каскадов. Для расчета числа таких дефектов был использован кинетический метод Монте-Карло, реализованный в программном коде TRIM [19].

Метод основан на приближении парных соударений между тяжелым ионом и атомами матрицы. После каждого столкновения случайным образом разыгрывается прицельный параметр следующего столкновения. Между столкновениями ион тратит свою энергию только на нагрев электронной подсистемы. Результат столкновения иона с атомом матрицы зависит от переданной атому энергии. Если она оказывается больше некоторого порогового значения E_D , то образуется пара Френкеля. Значение $E_D = 35$ эВ для γ -урана было получено из молекулярно-динамических расчетов в работе [54]. Выбитый атом (РКА — primary knock-on atom) можно рассматривать в качестве самостоятельного быстрого иона, генерирующего вторично выбитые атомы, — формируется столкновительный каскад. В противоположном случае атом остается на месте, а переданная энергия переходит в тепло. Из результатов моделирования видно, что около 80 %

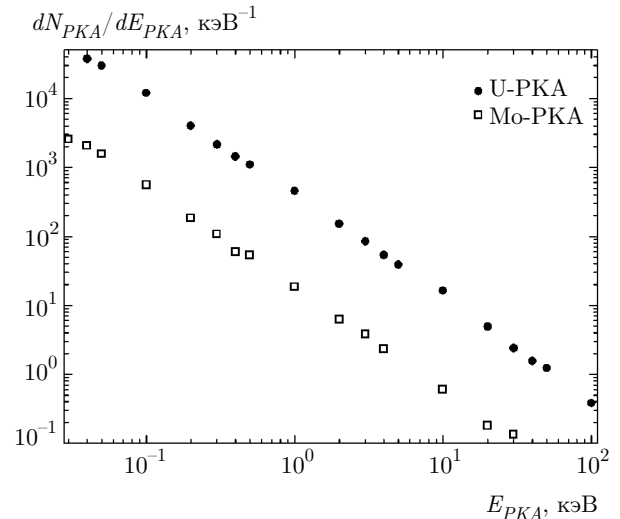


Рис. 4. Энергетическое распределение числа выбитых атомов (РКА), образующихся в сплаве урана с 5 at. % Мо, при пролете иона Хе с энергией 65 МэВ

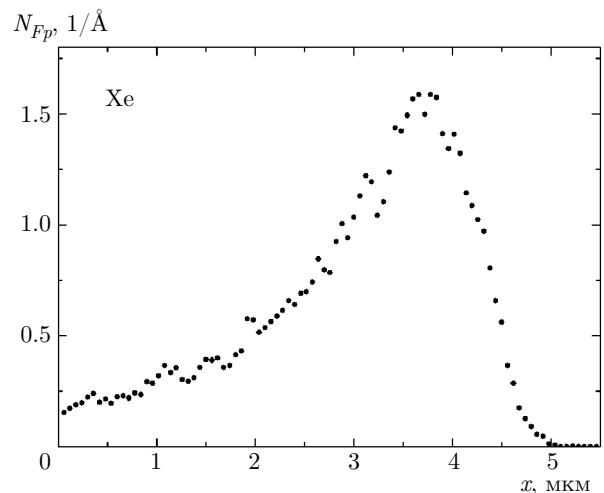


Рис. 5. Распределение количества пар Френкеля по длине пробега иона Хе с энергией 65 МэВ

выбитых атомов (РКА) обладают энергией, меньшей 1 кэВ (рис. 4).

Тем не менее, для расчета полного числа радиационных дефектов, образующихся в результате столкновительных каскадов, N_{Fp}^{CC} необходимо учитывать, что в модели Монте-Карло отсутствует тепловое движение атомов, которое приводит к частичной рекомбинации дефектов [55–57]. Поэтому полное число дефектов можно оценить как $N_{Fp}^{CC} = 0.3N_{Fp}^{TRIM}$ [55].

На рис. 5, 6 представлены распределения количества пар Френкеля по длине пробега осколков деле-

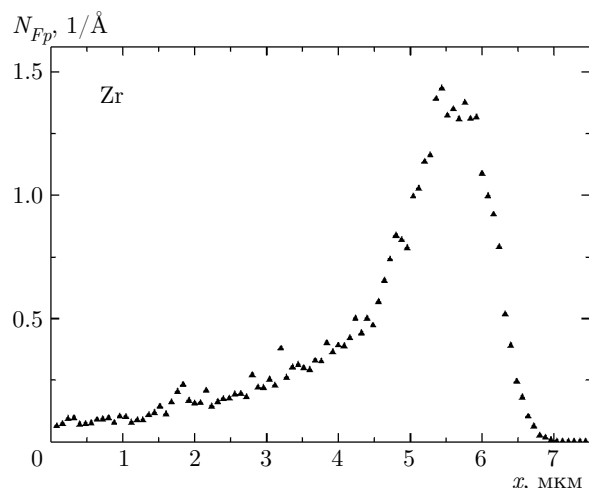


Рис. 6. Распределение количества пар Френкеля по длине пробега иона Zr с энергией 95 МэВ

ния Xe и Zr с учетом рекомбинации дефектов. В результате получается, что число первичных радиационных дефектов, генерируемых в столкновительных каскадах, $N_{Fp}^{CC} \approx 60000$ пар Френкеля. При этом в отличие от числа дефектов, образующихся на стадии «термической вспышки», оно практически не зависит от температуры (рис. 3).

7. ВЫВОДЫ

В данной работе выполнено исследование процесса генерации первичных радиационных дефектов в сплаве урана с молибденом. В результате распада одного атома U^{235} образуется около $6 \cdot 10^4$ пар Френкеля в столкновительных каскадах. Число дефектов, формирующихся на стадии «термической вспышки», сильно зависит от температуры и меняется от 10^3 до 10^5 при увеличении температуры сплава от 300 К до 900 К. Полученные в данной работе результаты могут являться входными данными для многомасштабных моделей, описывающих эволюцию топлива в условиях эксплуатации. Примером такой модели является механистический топливный код MFPR, разрабатываемый с 1996 г. ИБРАЭ РАН [4]. Код описывает эволюцию микроструктуры топлива, включая пространственное распределение точечных (вакансии и межузлия) и протяженных (дислокации, газонаполненные пузыри) дефектов, набухание топлива, генерацию и перенос в топливе продуктов деления, их выход в открытую пористость, формирование газовой и конденсированных фаз продуктов деления и компонентов топлива. Код включен в качестве самостоятельного модуля

в коды SFPR [3, 5] и BERKUT [15], описывающие поведение отдельного ТВЭЛа в ядерных реакторах соответственно на тепловых и быстрых нейтронах.

Благодарности. Расчеты проводились с использованием вычислительного кластера МВС-10П (Межведомственный суперкомпьютерный центр Российской академии наук).

ЛИТЕРАТУРА

1. Ch. Newman, G. Hansen, and D. Gaston, J. Nucl. Mat. **392**(1), 6 (2009).
2. R. L. Williamson, J. D. Hales, and S. R. Novascone, J. Nucl. Mat. **423**(1), 149 (2012).
3. M. S. Veshchunov, A. V. Boldyrev, A. V. Kuznetsov, V. D. Ozrin, M. S. Seryi, V. E. Shestak, V. I. Tarasov, G. E. Norman, A. Yu. Kuksin, V. V. Pisarev, D. E. Smirnova, S. V. Starikov, V. V. Stegailov, and A. V. Yanilkin, Nucl. Eng. Design **295**, 116 (2015).
4. M. S. Veshchunov, R. Dubourg, V. D. Ozrin, V. E. Shestak, and V. I. Tarasov, J. Nucl. Mat. **362**, 327 (2007).
5. M. S. Veshchunov, A. V. Boldyrev, V. D. Ozrin, V. E. Shestak, and V. I. Tarasov, Nucl. Eng. Design **241**, 2822 (2011).
6. R. E. Stoller and L. R. Greenwood, in *Proc. of MRS1998 Fall Meeting, Symp. J: Multiscale Modeling of Materials*, ORNL/CP-10122, Boston (1998).
7. D. J. Bacon and Yu. N. Osetsky, Mat. Sci. Eng. A **365**, 46 (2004).
8. M. Stan, J. C. Ramirez, P. Cristea, S. Y. Hu, C. Deo, B. P. Uberuaga, S. Srivilliputhur, S. P. Rudin, and J. M. Wills, J. Alloys Comp. **444–445**, 415 (2007).
9. R. Darkins and D. M. Duffy, Comput. Mater. Sci. **147**, 145 (2018).
10. V. V. Kalashnikov, V. V. Titova, and G. Ia. Sergeev, Atom. Energy **5**, 1315 (1959).
11. A. Landa, P. Söderlind, and P. E. A. Turchi, J. Nucl. Mat. **414**(2), 132 (2011).
12. Y. S. Kim and G. L. Hofman, J. Nucl. Mat. **419**(1), 291 (2011).
13. A. V. Vatulin, A. V. Morozov, and V. B. Suprun, Atom. Energy **100**, 37 (2006).
14. J. Rest, Y. S. Kim, and G. L. Hofman, *U–Mo Fuels Handbook*, Argonne Nat. Lab., ANL-09/31 (2009).

15. A. V. Boldyrev, S. Yu. Chernov, A. P. Dolgodvorov, I. O. Dolinsky, V. D. Ozrin, and V. I. Tarasov, in *Proc. Int. Conf. FR-17*, Ekaterinburg (2017), p. 363.
16. Z. G. Wang, Ch. Dufour, and E. Paumier, *J. Phys.: Condens. Matter* **6**, 6733 (1994).
17. M. Toulemonde, Ch. Dufour, and E. Paumier, *Phys. Rev. B* **46**, 14362 (1992).
18. M. Toulemonde, Ch. Dufour, and A. Meftah, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **166**, 903 (2000).
19. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Matter*, Vol. 1, Pergamon Press, New York (1985).
20. D. A. Young, *Nature* **182**, 917 (1958).
21. E. C. H. Silk and R. S. Barnes, *Phil. Mag.* **4**(44), 970 (1959).
22. N. Itoh, D. M. Duffy, and S. Khakshouri, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 474205 (2009).
23. Th. Th. Hlatshwayo, J. H. O'Connell, and V. A. Skuratov, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48**, 465306 (2015).
24. M. Karlušić, R. Kozubek, and H. Lebius, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **48**, 325304 (2015).
25. T. Steinbach, Th. Bierschenk, and S. Milz, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **47**, 065301 (2014).
26. M. Lang, J. Lian, and J. Zhang, *Phys. Rev. B* **79**, 224105 (2009).
27. P. Kluth, C. S. Schnorr, and O. H. Pakarinen, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 175503 (2008).
28. J. H. O'Connell, R. A. Rymzhanov, and V. A. Skuratov, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **374**, 97 (2016).
29. B. Canut, A. Benyagoub, G. Marest, A. Meftah, N. Moncoffre, S. M. M. Ramos, F. Studer, P. Thevenard, and M. Toulemonde, *Phys. Rev. B* **51**, 12194 (1995).
30. V. A. Skuratov, J. O'Connell, N. S. Kirilkin, and J. Neethling, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **326**, 223 (2014).
31. S. V. Starikov, L. N. Kolotova, A. Yu. Kuksin, D. E. Smirnova, and V. I. Tseplyaev, *J. Nucl. Mat.* **499**, 451 (2018).
32. S. J. Plimpton, *J. Comp. Phys.* **117**, 1 (1995).
33. V. V. Pisarev and S. V. Starikov, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 475401 (2014).
34. G. E. Norman, S. V. Starikov, and V. V. Stegailov, *Contrib. Plasma Phys.* **53**, 129 (2013).
35. A. M. Rutherford and D. M. Duffy, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 496201 (2007).
36. D. M. Duffy and A. M. Rutherford, *J. Phys.: Condens. Matter* **19**, 016207 (2006).
37. S. V. Starikov and V. V. Pisarev, *J. Appl. Phys.* **117**, 135901 (2015).
38. Z. Li, C. Wang, and J. Zhao, *Phys. Plasmas* **24**, 022703 (2017).
39. J. L. Klein, *Uranium and its Alloys AR Kaufmann*, Wiley, New York–London (1962), p. 31.
40. R. K. McGeary, USAEC Rep. WAPD-127-I (1955).
41. Y. S. Touloukian, R. W. Powell, and C. Y. Ho, *Thermal Conductivity*, IFI (1970).
42. C. Roy, A. Radenac, and F. Cado, Tech. Rep.: CEA, Montrouge, France (1973).
43. H. A. Saller, R. F. Dickerson, and A. A. Bauer, Tech. Rep.: Battelle Memorial Inst., Columbus, Ohio (1956).
44. F. F. Komarov, *Physics-Uspekhi* **46**, 1253 (2003).
45. F. F. Komarov, *Physics-Uspekhi* **60**, 435 (2017).
46. Z. Insepov, M. Terasawa, and K. Takayama, *Phys. Rev. A* **77**, 062901 (2008).
47. B. Rethfeld, A. Kaiser, M. Vicanek, and G. Simon, *Phys. Rev. B* **65**, 214303 (2002).
48. Ю. В. Петров, Н. А. Иногамов, К. П. Мигдал, *Письма в ЖЭТФ* **97**, 24 (2013).
49. R. R. Ramazashvili, A. A. Rukhadze, and V. P. Silin, *Sov. Phys. JETP* **16**, 939 (1963).
50. H.-Y. Chiang, S.-H. Park, and M. Mayer, *J. Alloys Comp.* **626**, 381 (2015).
51. L. N. Kolotova and S. V. Starikov, *J. Nucl. Mat.* **495**, 111 (2017).
52. G. P. R. B. Szenes, *Phys. Rev. B* **51**, 8026 (1995).
53. S. J. Zinkle, V. A. Skuratov, and D. T. Hoelzer, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **191**, 758 (2002).
54. B. Beeler, Y. Zhang, M. Okuniewski, and C. Deo, *J. Nucl. Mat.* **508**, 181 (2018).
55. S. V. Starikov, *High Temp.* **53**, 55 (2015).
56. R. E. Stoller, M. B. Toloczko, G. S. Was, A. G. Certain, S. Dwaraknath, and F. A. Garner, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res.* **310**, 75 (2013).
57. T. Troev, N. Nankov, and T. Yoshiie, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res.* **269**, 566 (2011).