

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

П. Е. Капустин, В. В. Светухин, М. Ю. Тихончев

КАСКАДЫ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ ВБЛИЗИ СИММЕТРИЧНЫХ НАКЛОННЫХ ГРАНИЦ ЗЕРНА В ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ ПЛОТНОУПАКОВАННОЙ СТРУКТУРЕ Zr: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Работа посвящена атомистическому моделированию симметричных наклонных границ зерна (ГЗ) в гексагональной плотноупакованной структуре Zr и исследованию процессов радиационной повреждаемости возле таких границ. Рассмотрены четыре симметричных наклонных ГЗ: $\Sigma 14(2\ 1\ \bar{3}\ 0)$, $\Sigma 14(4\ \bar{5}\ 1\ 0)$ с осью вращения $[0\ 0\ 0\ 1]$ и $\Sigma 32(23\ \bar{46}\ 23\ 27)$, $\Sigma 32(\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3)$ с осью вращения $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$. Рассчитаны значения удельной энергии соответствующих свободных и межзеренных границ, а также получены оценки ширины зернограницных областей при температурах 0 и 300 К.

Материалы и методы. Методом молекулярной динамики проведено моделирование каскадов атомных смещений от первично выбитого атома с энергией 10 кэВ в составных кристаллах с ГЗ при 300 К. Обнаружена склонность произведенных в каскаде точечных дефектов накапливаться вблизи плоскости ГЗ, которая является препятствием на пути распространения каскада. Установлено, что вне межзеренной области число выживших в каскаде вакансий превышает число собственных междоузельных атомов (СМА) для всех типов ГЗ. Для большинства рассмотренных границ наблюдается меньшее по сравнению с инициально идеальным кристаллом без ГЗ число СМА, остающихся вне межзеренной области.

Результаты. Получены результаты по кластеризации произведенных в каскаде точечных дефектов. Для ГЗ с осью вращения $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$ доля кластеризованных вакансий в 1,5–2 раза выше доли кластеризованных СМА. В то же время для границ с осью вращения $[0\ 0\ 0\ 1]$ доля формирующих кластеры СМА незначительно превосходит фракцию кластеризованных вакансий. Кластеры обоих типов представлены в основном малыми образованиями (от 2 до 4 дефектов на кластер). В то же время вакансии часто формируют кластеры довольно большого (>20 вакансий на кластер) размера, в то время как кластеры СМА имеют небольшие размеры.

Ключевые слова: цирконий, метод молекулярной динамики, точечные дефекты, каскад атомных смещений, граница зерна, кластеризация дефектов.

¹ Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания на 2014–2016 гг., а также при частичной поддержке гранта РФФИ: проект № 13-01-00945.

P. E. Kapustin, V. V. Svetukhin, M. Yu. Tikhonchev

ATOMIC DISPLACEMENT CASCADES NEAR SYMMETRICAL TILT GRAIN BOUNDARIES IN HCP Zr: MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Abstract.

Background. The work is devoted to the atomistic modeling of symmetric tilt grain boundaries (GBs) in HCP Zr and to the study of the radiation damage processes near such boundaries. Four symmetrical tilt GBs: $\Sigma 14(2\ 1\ \bar{3}\ 0)$, $\Sigma 14(4\ \bar{5}\ 1\ 0)$ with the axis of rotation $[0\ 0\ 0\ 1]$ and $\Sigma 32(23\ \bar{46}\ 23\ 27)$, $\Sigma 32(\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3)$ with the axis of rotation $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$ are considered. The value of the free and grain boundary specific energy is calculated, the intergrain regions width at the temperature of 0 and 300 K is estimated.

Materials and methods. The molecular dynamics simulation of atomic displacement cascades from PKA with the energy of 10 keV in the composite crystals with GB at 300 K was conducted. A tendency of the point defects produced in the cascade to accumulate near the GB plane, which is an obstacle to the spread of the cascade, has been discovered. It has been found that the number of surviving vacancies in the cascade out of the intergrain region exceeds the number of self-interstitial atoms for all types of GBs. For the most of the considered boundaries the number of SIAs remaining outside the intergrain region is considered to be fewer than in an ideal crystal without a GB.

Results. The results of the point defects clustering produced in the cascade were obtained. For the GB with the axis of rotation $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$ the proportion of the clustered vacancies is 1.5–2 times higher than the proportion of the clustered SIAs. At the same time for the boundaries with the axis of rotation $[0\ 0\ 0\ 1]$ the proportion of SIAs, which create clusters, is slightly bigger than the fraction of the clustered vacancies. The clusters of both types are represented mainly by small formations (from 2 to 4 defects per cluster). At the same time vacancies often form clusters of a large size (more than 20 vacancies per cluster), while SIA clusters are small.

Key words: zirconium, molecular dynamics method, point defects, atomic displacement cascade, grain boundary, defects clustering.

Введение

Цирконий обладает удачным сочетанием механических свойств и ядерно-физических характеристик. Сплавы циркония широко используются в современных ядерных энергетических реакторах на тепловых нейтронах в качестве оболочек тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ) и элементов конструкции тепловыделяющих сборок (ТВС). Поэтому цирконий и его сплавы рассматриваются как перспективные конструкционные материалы действующих и проектируемых ядерных реакторов.

Хорошо известно, что нейтронное облучение инициирует каскады атомных смещений, которые, в свою очередь, ведут к микроструктурным изменениям и последующей деградации механических свойств циркония и его сплавов. Также хорошо известно, что внутренняя структура твердого тела, сформированная границами различных типов, в значительной степени опре-

деляет его свойства и существенно влияет на последствия радиационного воздействия. Границы зерна (ГЗ) традиционно рассматриваются как стоки точечных дефектов, произведенных в каскадах атомных смещений. Однако механизмы взаимодействия таких каскадов с ГЗ не изучены в полной мере. Поэтому в последние годы наблюдается возросший интерес к изучению структуры и свойств различных ГЗ путем их компьютерного моделирования на атомистическом уровне.

Наибольшее число статей по этому направлению посвящено ГЗ в ОЦК железе и бинарных сплавах на его основе (см., например [1–9]). Это связано как с хорошей проработанностью атомистических моделей и наличием достаточно надежных потенциалов межатомного взаимодействия железа и основных примесей (медь, хром, никель, фосфор и т.п.), так и с практической значимостью различных сталей для нужд ядерной энергетики. Другим материалам посвящено существенно меньшее число публикаций. Например, в работе [10] рассматривались каскады атомных смещений возле симметричных наклонных границ в ванадии. Основными методами исследования «статичных» свойств ГЗ являются метод молекулярной статики и расчеты из первых принципов (*ab initio*). Радиационная повреждаемость изучается путем моделирования методом молекулярной динамики. Различными исследователями были сделаны сходные выводы об особенностях взаимодействия каскадов атомных смещений с ГЗ. А именно было установлено, что ГЗ служат барьером для распространения каскада и аккумулируют значительную долю произведенных в каскаде радиационных дефектов.

Имеется ряд публикаций, посвященных каскадным процессам в бездефектном гексагональной плотноупакованной структуре (ГПУ) Zr [11–15] или содержащем границу фазового раздела в сплаве ZrNb [16, 17]. Работ, посвященных атомистическому моделированию каскадов смещения возле ГЗ в Zr, нами не найдено. Настоящая работа посвящена атомистическому моделированию симметричных наклонных ГЗ в ГПУ Zr, исследованию их энергетических свойств, изучению особенностей прохождения через такие границы каскадов атомных смещений.

1. Методическая часть

В настоящей работе используется многотельный потенциал межатомного взаимодействия, предложенный Менделевым и Акландом в 2007 г. в работе [18] (обозначен в [18] как потенциал #3). Этот потенциал базируется на формализме метода погруженного атома [19] и является развитием широко использовавшегося ранее потенциала Акланда, Вудинга и Бэкона 1995 г. [20]. Сравнение этих потенциалов можно найти в работах [21, 22]. Несмотря на небольшие расхождения с последними оценками *ab initio* энергий формирования собственных междоузельных конфигураций, потенциал 2007 г. рассматривается как лучший из имеющихся к настоящему времени потенциалов для моделирования радиационной повреждаемости циркония.

Построение модельного кристаллита с ГЗ осуществлялось с помощью трансляционной симметрии элементарной ячейки ГПУ-циркония. Сначала производился поворот области идеального ГПУ-циркония на определенный угол относительно выбранной оси вращения. Новая элементарная ячейка имела форму прямоугольного параллелепипеда, одна из граней которого па-

параллельна плоскости строящейся ГЗ. Трансляцией ячейки по трем направлениям строили монокристалл, одна из граней которого определялась как плоскость границы. Построение би-кристалла завершали зеркальным отображением монокристалла относительно плоскости ГЗ. При дальнейших расчетах использовались периодические граничные условия на гранях модельного кристаллита, перпендикулярных плоскости ГЗ, и условия свободной границы с вакуумом на гранях, параллельных плоскости ГЗ. Такой подход позволяет естественным образом снять при релаксации напряжения вдоль нормали к плоскости ГЗ. Однако он требует рассмотрения кристаллитов достаточно больших размеров, чтобы исключить значимое взаимное влияние границ друг на друга. В рассматриваемых далее кристаллитах расстояние между свободной и межзеренной границами составляло от 150 до 200 Å.

В настоящем исследовании мы рассмотрели четыре симметрично наклонных ГЗ: $\Sigma 14(2\ 1\ \bar{3}\ 0)$, $\Sigma 14(4\ \bar{5}\ 1\ 0)$ с осью вращения $[0001]$ и $\Sigma 32(23\ \bar{46}\ 23\ 27)$, $\Sigma 32(\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3)$ с осью вращения $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$. В дальнейшем для краткости будем обозначать их как $(2\ 1\ \bar{3}\ 0)$, $(4\ \bar{5}\ 1\ 0)$, $(23\ \bar{46}\ 23\ 27)$ и $(\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3)$ соответственно.

Имеются некоторые особенности в процедуре построения ГЗ, которые целесообразно пояснить. Для «классических» ГПУ решеток имеет место соотношение $c/a = \sqrt{8/3} \approx 1,633$, где a и c – параметры решетки. Для ГПУ решетки Zr отношение c/a составляет 1,603 [23]. Используемый нами потенциал межчастичного взаимодействия обеспечивает $c/a \approx 1,598$. Эта особенность циркония никак не сказывается на симметричных наклонных границах с осью вращения $[0001]$, перпендикулярной базисной плоскости. В прочих случаях возникает проблема построения модельного кристаллита. Для проведения эффективных (с точки зрения вычислительной сложности) расчетов модельные кристаллиты в атомистическом моделировании стараются задавать в виде прямоугольных параллелепипедов, позволяющих легко обеспечить трансляционную симметрию системы. В случае ГЗ с осью вращения неколлинеарной направлению $[0001]$ обеспечение трансляционной симметрии становится в общем случае проблематичным. Поясним это на нашем примере. Пусть в качестве оси вращения выбрано направление $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$, а нормаль к плоскости границы – вдоль $[\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3]$. Нетрудно убедиться, что эти направления перпендикулярны. В случае «классического» $c/a = \sqrt{8/3}$ направлением, перпендикулярным к каждому из $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$ и $[\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3]$ и, следовательно, определяющим третью ось для ребер модельного кристаллита в виде прямоугольного параллелепипеда, является направление $[8\ \bar{16}\ 8\ 9]$. Однако при искажении c/a параллелепипед перестает быть прямоугольным. В этом случае при проведении расчетов (вычислении потенциальной энергии и сил, действующих на атомы) потребуется дополнительно заложить в расчетный алгоритм поправку на «наклон» координатных осей. Это заметно усложняет и без того ресурсоемкую процедуру расчетов и ведет к существенному замедлению расчетов. Искусственное искажение решетки циркония путем использования «классического» c/a вместо реального, не выглядит здесь удачным, поскольку различие в отношении c/a слишком велико

и приведет к внесению в кристаллит значительных напряжений. Решением проблемы может стать поиск другого – «третьего» направления, обеспечивающего требуемые периодичность и перпендикулярность при менее значительном искажении c/a . В нашем случае таким направлением оказывается $[23\ \bar{46}\ 23\ 27]$ с $c/a = \sqrt{23/9} \approx 1,599$. Искажение, вносимое в отношении c/a , составляет здесь несколько сотых долей процента и может рассматриваться как незначительное.

При зеркальном отображении монокристалла возможны ситуации, когда пары симметрично расположенных атомов находятся близко друг к другу. В этом случае при начале дальнейшего моделирования вследствие взаимного отталкивания такие атомы приобретут значительную энергию отдачи, достаточную для инициирования атомных смещений и, как следствие, для создания точечных дефектов. Поэтому такие пары атомов замещались одним атомом, который помещался на плоскость границы, как это показано на рис. 1. Минимальным допустимым расстоянием между атомами модельного кристаллита было $2\ \text{Å}$. Исключение составила граница $(2\ 1\ \bar{3}\ 0)$, где это расстояние было увеличено до $2,12\ \text{Å}$.

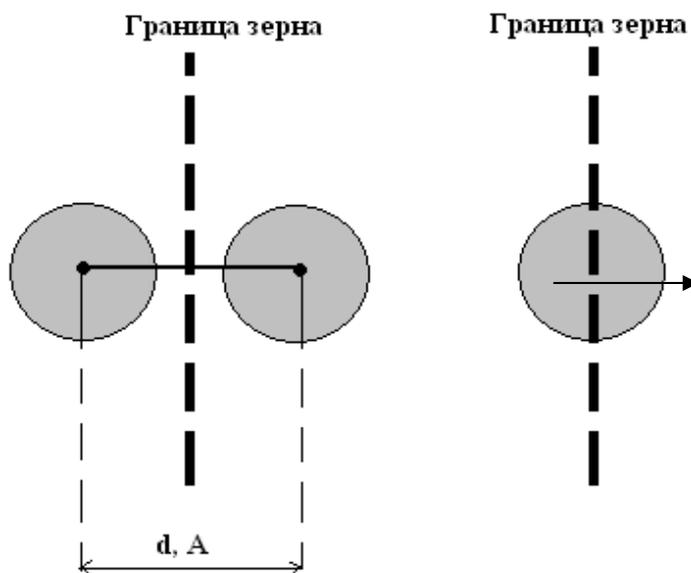


Рис. 1. Схема замены двух близкорасположенных атомов одним на границе зерна, $d < 2\ \text{Å}$

Для анализа каждой ГЗ сначала строили ГПУ кристаллит, повернутый на требуемый угол относительно рассматриваемой оси вращения так, чтобы в кристаллите имелись две параллельные грани, плоскости которых параллельны плоскости рассматриваемой ГЗ. Затем методом молекулярной статики при нулевой температуре или же методом молекулярной динамики при ненулевой температуре проводится релаксация этого кристаллита со следующими граничными условиями. На гранях параллельных плоскости рассматриваемой ГЗ воспроизводится свободная граница с вакуумом, на остальных гранях –

периодические условия. Такое построение позволяет рассчитать удельную энергию свободной границы с требуемой кристаллографической ориентацией. Она вычислялась по формуле

$$E_{FB} = \frac{\Delta E}{2 \cdot S}, \quad (1)$$

где ΔE – разница между потенциальными энергиями релаксированного кристаллита со свободной границей и идеального бездефектного кристалла, содержащими одинаковое число атомов; S – площадь грани кристаллита на свободной границе. Множитель 2 необходим в связи с наличием в системе двух параллельных границ одинаковой площади. Отметим, что для корректности таких расчетов нужно рассматривать кристаллы достаточно большого размера, чтобы исключить значимое взаимное влияние свободных границ.

После проведения релаксации составного бикристаллита расчет удельной энергии межзеренной границы осуществляется по формуле

$$E_{GB} = \frac{\Delta E}{S} - 2 \cdot E_{FB}, \quad (2)$$

где ΔE – разница между потенциальными энергиями релаксированного составного кристаллита и идеального бездефектного кристалла, содержащего то же число атомов; S – площадь ГЗ.

В ходе релаксации бикристаллита атомы в нескольких атомных слоях, прилегающих с обеих сторон к ГЗ, заметно смещаются из узлов исходных кристаллических решеток. Эти атомные слои образуют зернограничную область. Размер зернограничной области определяется здесь следующим методом. Исследуемый бикристаллит разбивается начиная от ГЗ на тонкие слои, параллельные плоскости ГЗ. В каждом таком слое вычисляется значение потенциальной энергии E_p , приходящееся на один атом. Слои, не содержащие атомов, игнорируются. Граница зернограничной области определяется как плоскость посередине между двумя последовательными слоями такими, что абсолютное отклонение E_p от энергии сублимации идеального Zr в слое, ближайшем к ГЗ, превышает заданное значение ΔE , а значения E_p в трех последующих слоях не превышает ΔE . В данной работе мы рассматривали слои шириной 0,2 Å и $\Delta E = 0,01$ эВ.

При моделировании каскадов атомных смещений исходный бикристалл релаксировали в течение 10 пс при температуре 300 К, используя термостат Берендсена. При этом использовали параметры решетки, предварительно рассчитанные для идеального кристалла Zr при нулевом давлении и температуре 300 К с использованием термостата и тензорного варианта баростата Берендсена. Первично выбитый атом (ПВА) выбирали на расстоянии 20–25 Å от ГЗ, его энергия составляла 10 кэВ, направление вылета всегда задавалось к ГЗ перпендикулярно ее плоскости. При моделировании каскадов численное интегрирование уравнений движения осуществляли по алгоритму Верле с неравномерным временным шагом. Шаг выбирается так, чтобы частица с максимальной скоростью смещалась за один шаг на расстояние, не выше заданного (в нашем случае 0,2 нм), и значение временного шага не превышало заданного максимального значения (мы использовали ограничение

в 2 фс). Моделирование каскада продолжается до достижения заданного значения моделируемого времени, на котором каскад можно считать «затухшим» (для энергии ПВА 10 кэВ в нашем случае это составляет 16–20 пс). При моделировании каскадов атомных смещений периодически проводится оценка числа пар Френкеля в системе. Эта оценка проводится методом анализа полиэдров Вороного, построенных на узлах атомов инициального би-кристаллита. Полиэдры Вороного являются здесь обобщением ячеек Вигнера – Зейца для случая неидеальной кристаллической структуры. Отсутствие атомов в полиэдре определяется как вакансии в соответствующем узле решетки, попадание более одного атома в полиэдр трактуется как наличие собственного междоузельного атома (СМА) вблизи соответствующего узла. Если узлы, соответствующие точечным дефектам одного типа, находятся на расстоянии вторых и третьих ближайших соседей для вакансий и СМА соответственно, то такие дефекты считали принадлежащими одному кластеру. Для каждого типа ГЗ моделировали по 8 каскадов смещений, все полученные количественные характеристики последствий каскадного процесса усредняли. Дефекты внутри и вне зернограничной области рассматривались отдельно. Это связано с тем, что зернограничная область является участком, структуру которого в связи с близостью ГЗ, нельзя рассматривать как инициально бездефектную. В случае сильных пертурбаций, таких как каскады атомных смещений, в зернограничной области могут образовываться сложные конфигурации, которые не всегда можно трактовать как скопления точечных дефектов. Точечный дефект считали принадлежащим зернограничной области, если в нее попадает либо сам дефект, либо любая часть кластера дефектов, которому он принадлежит.

2. Результаты моделирования

Рассчитанные значения удельной энергии свободной и межзеренной границы, а также ширины зернограничной области для рассматриваемых ГЗ при температурах 0 и 300 К представлены в табл. 1 (E_{FB} и E_{GB} – удельные энергии свободной и межзеренной границ соответственно, эВ/Å², w_{GB} – ширина межзеренной области, Å).

Таблица 1
Рассчитанные характеристики свободной и межзеренной границ

Тип границы	$(23 \bar{4}6 \ 23 \ 27)$	$(\bar{1} \ 2 \ \bar{1} \ 3)$	$(4 \ \bar{5} \ 1 \ 0)$	$(2 \ 1 \ \bar{3} \ 0)$
E_{FB} $T = 0$ К	0,1043	0,1095	0,1060	0,1049
E_{FB} $T = 300$ К	0,1043	0,1097	0,1055	0,1041
E_{GB} $T = 0$ К	0,0131	0,0565	0,0418	0,0406
E_{GB} $T = 300$ К	0,0128	0,0494	0,0422	0,0419
w_{GB} $T = 0$ К	12,4	14,4	13,6	17,0
w_{GB} $T = 300$ К	10,8	15,6	14,4	13,2

Как следует из представленных результатов, удельная энергия свободной границы слабо зависит от температуры и типа границы. Для удельной энергии ГЗ наблюдается существенная зависимость от типа границы. Наибольшую удельную энергию имеет граница $(\bar{1} \ 2 \ \bar{1} \ 3)$, наименьшую –

($23 \bar{46} 23 27$), причем отличие достигает 4 раз. Границы с осью вращения $[0 0 0 1]$ имеют близкие оценки удельной энергии, которые незначительно повышаются с ростом температуры. Для границ с осью вращения $[1 0 \bar{1} 0]$, наоборот, наблюдается снижение энергии с ростом температуры до 300 К. Для границы ($23 \bar{46} 23 27$) это снижение незначительно, в то время как для ГЗ ($\bar{1} 2 \bar{1} 3$) оно составляет $\sim 14\%$ и может рассматриваться как умеренное. Усредненная по всем границам ширина межзеренной области составляет 14,4 и 13,5 Å для температуры 0 и 300 К соответственно. Отклонение от среднего для границ разного типа достигает 18 % для нулевой температуры и 20 % для 300 К. При этом для границ ($23 \bar{46} 23 27$) и ($2 1 \bar{3} 0$) наблюдается снижение ширины межзеренной области с ростом температуры, для остальных границ эта ширина возрастает.

При моделировании каскадов смещений периодически проводился анализ дефектной структуры составного кристалла. После затухания каскада подсчитывали число вакансий и СМА вне и в зернограничной области. При моделировании каскадов атомных смещений для ГЗ ($2 1 \bar{3} 0$) часть точечных дефектов ($\sim 8\%$) располагалась вблизи двух свободных границ. При последующем анализе результатов эти дефекты не учитывались. На рис. 2 приведен пример эволюции дефектной структуры в процессе развития каскада возле границы $\Sigma 32(23 \bar{46} 23 27)$. Визуальный анализ результатов моделирования показал, что ГЗ аккумулирует значительное число произведенных дефектов и может рассматриваться как препятствие на пути распространения каскада.

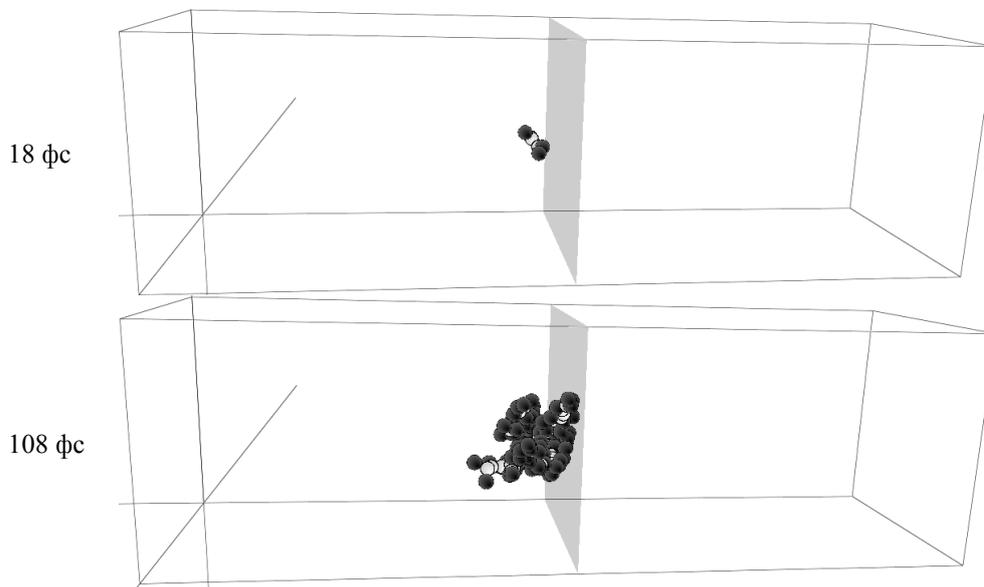


Рис. 2. Эволюция дефектной структуры в каскаде атомных смещений вблизи границы $\Sigma 32(23 \bar{46} 23 27)$. Белые точки – вакансии, черные – СМА, плоскость ГЗ заштрихована серым (см. также с. 156)

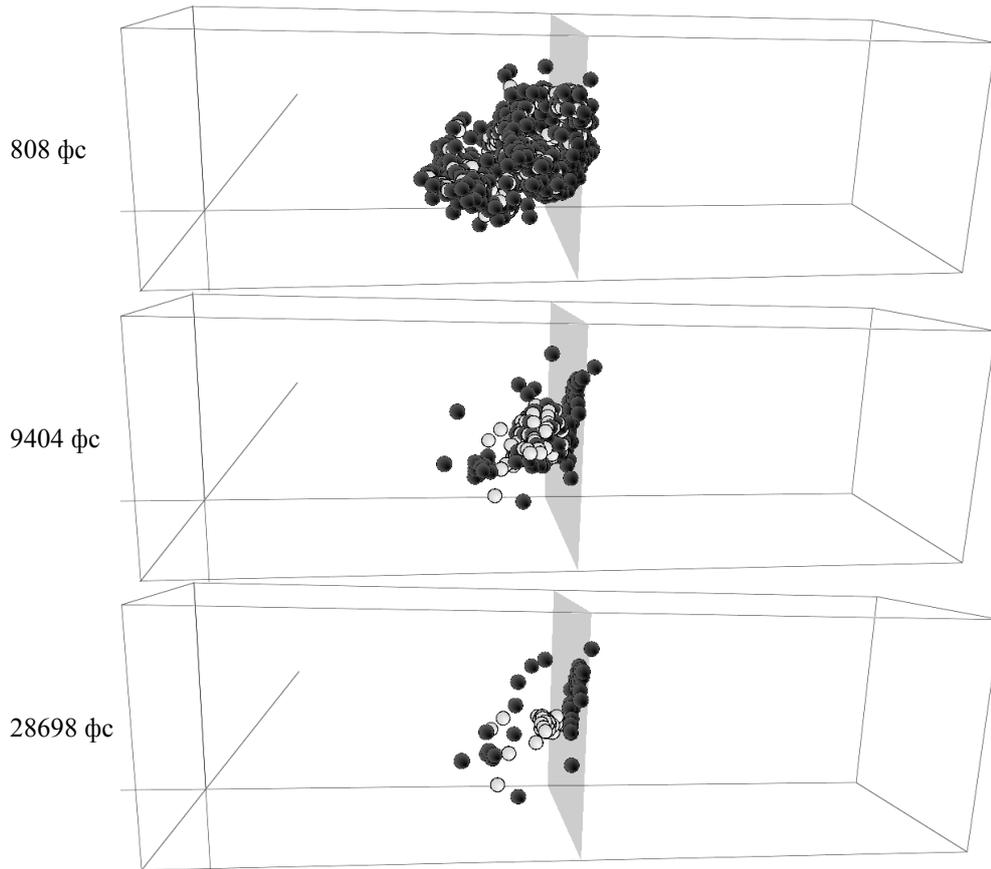


Рис. 2. Окончание

В табл. 2 приведены результаты среднего количества точечных дефектов, выживших в каскаде смещений, для каждой из рассматриваемых ГЗ. В таблице представлены оценки полного числа пар Френкеля во всем би-кристаллите, оценки числа вакансий и СМА, оставшихся вне межзеренной области, и взятая из [24] оценка среднего числа пар Френкеля, выживающих в каскаде с энергией 10 кэВ в изначально идеальном кристалле при 300 К. Отметим, что вне межзеренной области число вакансий выше числа СМА для всех типов ГЗ. Отличие составляет от $\sim 20\%$ для границы $(4 \bar{5} 1 0)$ и достигает двух с половиной раз для границы $(23 \bar{46} 23 27)$. Это связано с высокой подвижностью СМА, которая позволяет им более быстро покидать матрицу и аккумулироваться в зернограничной области. Число СМА вне межзеренной области ГЗ $(\bar{1} 2 \bar{1} 3)$ превосходит число пар Френкеля, остающихся после каскада в кристаллите без ГЗ. Для остальных границ наблюдается меньшее, по сравнению с изначально идеальным кристаллом, число СМА, выживающих вне межзеренной области. Для границ с осью вращения $[1 0 \bar{1} 0]$ наблюдается заметно более высокое, по сравнению с изначально идеальным кристаллом, число вакансий, выживающих вне межзеренной области.

Таблица 2

Среднее количество выживших в каскаде точечных дефектов

Тип границы	$(23\bar{4}6\ 23\ 27)$	$(\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3)$	$(4\bar{5}\ 10)$	$(21\bar{3}\ 0)$	
Всего пар Френкеля	$38,8 \pm 2,8$	$230,3 \pm 31,3$	$92,1 \pm 11,0$	$47,3 \pm 3,1$	
Вне межзеренной области	Вакансии	$34,3 \pm 3,4$	$47,3 \pm 8,4$	$18,6 \pm 6,6$	$16,1 \pm 3,6$
	СМА	$13,8 \pm 2,2$	$22,6 \pm 3,4$	$15,5 \pm 3,3$	$9,3 \pm 2,3$
Пар Френкеля в кристаллите без ГЗ	$17,3 \pm 1,4$				

При моделировании каскадов возле границы $(\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3)$ наблюдалось образование и «расползание» большого числа точечных дефектов по всей площади межзеренной границы (рис. 3). По всей видимости, это является следствием перестроения кристаллической структуры вблизи плоскости ГЗ, инициированным каскадом смещений. Для остальных границ подобный феномен не наблюдался.

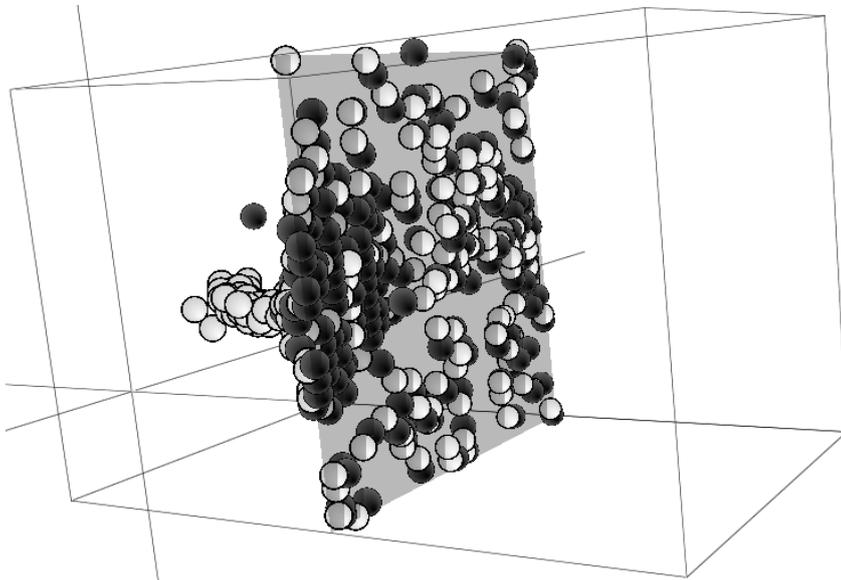


Рис. 3. «Точечные дефекты» возле ГЗ $(\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3)$ после прохождения каскада. Белые точки – вакансии, черные – СМА, плоскость ГЗ заштрихована серым

В табл. 3 и 4 представлены результаты анализа посткаскадных областей на предмет формирования кластеров точечных дефектов. В табл. 3 представлены данные о средней доле кластеризованных дефектов вне межзеренных областей после прохождения каскада смещений. Нетрудно видеть, что для ГЗ $(23\bar{4}6\ 23\ 27)$ и $(\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3)$ (т.е. границ с осью вращения $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$) доля кластеризованных вакансий в 1,5–2 раза выше доли кластеризованных СМА. Для границ с осью вращения $[0\ 0\ 0\ 1]$ доля формирующих кластеры СМА значительно превосходит фракцию кластеризованных вакансий. В табл. 4 представлены оценки количества дефектных кластеров вне межзеренной области.

Таблица 3

Средняя доля кластеризованных дефектов вне межзеренной области, %

Тип границы	(23 $\bar{46}$ 23 27)	($\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ 3)	(4 $\bar{5}$ 1 0)	(2 1 $\bar{3}$ 0)
Вакансии	74,5 ± 7,0	57,4 ± 4,4	43,0 ± 10,4	34,1 ± 10,7
СМА	35,5 ± 5,0	35,9 ± 2,5	52,4 ± 8,4	39,2 ± 4,6

Таблица 4

Среднее количество дефектных кластеров вне межзеренной области

Тип границы	(23 $\bar{46}$ 23 27)	($\bar{1}$ 2 $\bar{1}$ 3)	(4 $\bar{5}$ 1 0)	(2 1 $\bar{3}$ 0)
Вакансии	2,9 ± 0,5	6,5 ± 2,2	1,9 ± 0,8	0,9 ± 0,3
СМА	1,8 ± 0,5	2,6 ± 0,4	2,6 ± 0,5	1,4 ± 0,4

На рис. 4 представлены диаграммы распределения дефектных кластеров по размерам. Как видно из диаграмм, кластеры обоих типов представлены в основном малыми образованиями (от 2 до 4 дефектов).

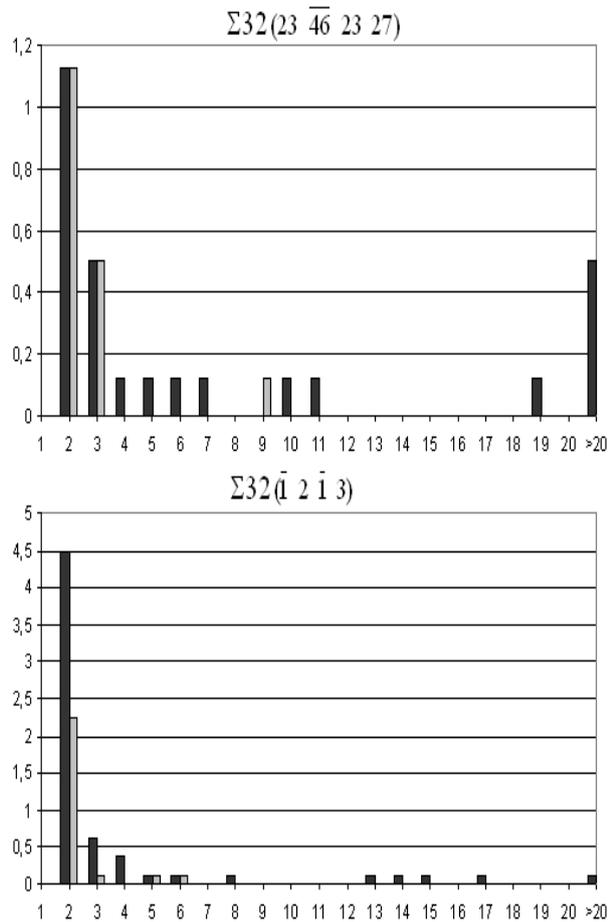


Рис. 4. Распределение кластеров точечных дефектов по размерам. По оси абсцисс – число точечных дефектов, составляющих кластер. По оси ординат – среднее на каскад число кластеров. Черным показаны вакансии, серым – СМА

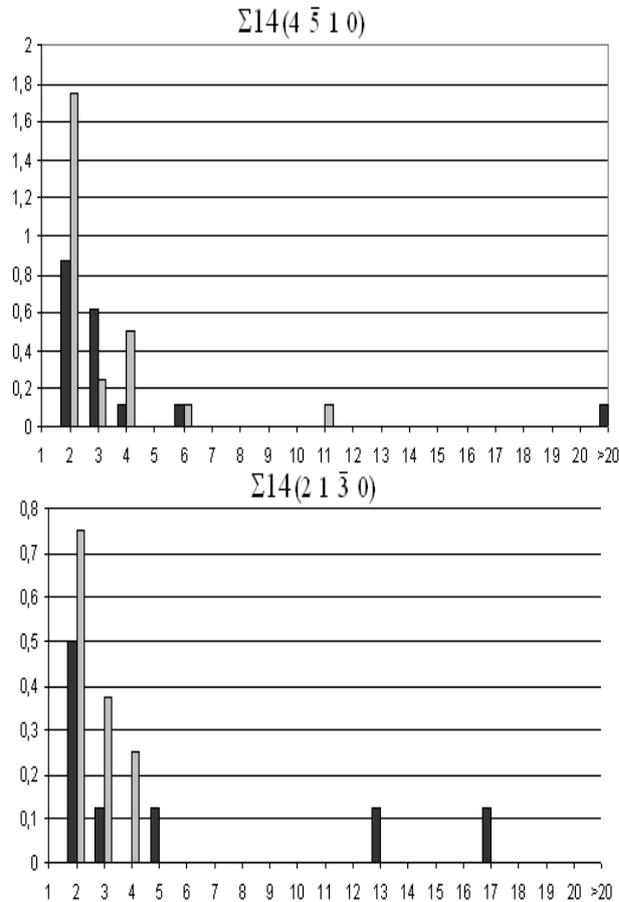


Рис. 4. Окончание

При этом СМА, в отличие от вакансий, не формируют кластеров больших размеров. Наибольший из наблюдаемых междоузельных кластеров состоял из 11 СМА и наблюдался для ГЗ $(4 \bar{5} 1 0)$. Для вакансий характерно формирование кластеров довольно больших размеров. Для границы $(2 1 \bar{3} 0)$ наибольший вакансионный кластер состоит из 17 вакансий. Для остальных ГЗ наблюдаются кластеры, сформированные более чем 20 вакансиями.

Заключение

В заключение кратко перечислим основные полученные результаты.

В работе проведено атомистическое моделирование симметричных наклонных ГЗ в ГПУ Zr. Рассмотрены четыре симметрично наклонных ГЗ: $(2 1 \bar{3} 0)$, $(4 \bar{5} 1 0)$, $(23 \bar{46} 23 27)$ и $(\bar{1} 2 \bar{1} 3)$. Рассчитаны значения удельной энергии соответствующих свободных и межзеренных границ, а также получены оценки ширины зернограничных областей при температурах 0 и 300 К. Наибольшее значение удельной энергии наблюдается у ГЗ $(\bar{1} 2 \bar{1} 3)$, наименьшее – у ГЗ $(23 \bar{46} 23 27)$. ГЗ с осью вращения $[0 0 0 1]$ имеют близ-

кие оценки удельной энергии, которые незначительно повышаются с ростом температуры. Для границ с осью вращения $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$ энергия с ростом температуры снижается. Средняя по рассматриваемым ГЗ ширина межзеренной области составляет около 14,4 Å при 0 К и 13,5 Å при 300 К. При этом отклонение от среднего достигает 20 %. Для границы $(23\ \bar{4}6\ 23\ 27)$ и $(2\ 1\ \bar{3}\ 0)$ наблюдается снижение ширины межзеренной области с ростом температуры, для остальных границ эта ширина с ростом температуры возрастает.

Методом молекулярной динамики проведено моделирование каскадов атомных смещений от ПВА с энергией 10 кэВ в составных кристаллитах, содержащих протяженную ГЗ, при 300 К. Визуальный анализ результатов показал, что произведенные точечные дефекты склонны аккумулироваться вблизи плоскости ГЗ, сама ГЗ является препятствием на пути распространения каскада. Эти качественные результаты согласуются с выводами других исследователей, полученными ранее для протяженных ГЗ в материалах с другими типами кристаллической решетки. Установлено, что вне межзеренной области число выживших в каскаде вакансий превышает число СМА для всех типов ГЗ. Это объясняется высокой подвижностью СМА, значительная часть которых быстро покидает матрицу и аккумулируется в зернограничной области. Для большинства рассмотренных границ наблюдается меньшее, по сравнению с инициально идеальным кристаллом без ГЗ, число СМА, остающихся вне межзеренной области. Для границ с осью вращения $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$ наблюдается заметно более высокое, по сравнению с инициально идеальным кристаллом, число вакансий, выживающих за пределами межзеренной области.

Получены результаты по кластеризации произведенных в каскаде точечных дефектов. Для ГЗ с осью вращения $[1\ 0\ \bar{1}\ 0]$ доля кластеризованных вакансий в 1,5–2 раза выше доли кластеризованных СМА. В то же время для границ с осью вращения $[0\ 0\ 0\ 1]$ доля формирующих кластеры СМА незначительно превосходит фракцию кластеризованных вакансий. Кластеры обоих типов представлены в основном малыми образованиями (от 2 до 4 дефектов на кластер). При этом СМА, в отличие от вакансий, не формируют кластеров больших размеров. Так, наибольший из наблюдаемых междоузельных кластеров состоит из 11 СМА. В то же время для большинства ГЗ наблюдаются кластеры, содержащие более 20 вакансий.

Полученные результаты целесообразно использовать при разработке моделей поведения изделий из циркония и его сплавов под облучением в рамках концепции многомасштабного подхода.

Список литературы

1. Energy Calculation for Symmetrical Tilt Grain Boundaries in Iron / J.-M. Zhang et al. // *Appl. Surf. Sci.* – 2006. – Vol. 252. – P. 4936.
2. Modelling Radiation Effects at Grain Boundaries in BCC Iron / F. J. P. Pérez et al. // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B.* – 1999. – Vol. 153. – P. 136.
3. Preferential Damage at Symmetrical Tilt Grain Boundaries in BCC Iron / F. J. P. Pérez et al. // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B.* – 2001. – Vol. 180. – P. 322.
4. Modelling Radiation Damage Effects on a bcc Iron Lattice Containing Phosphorous Impurity Atoms Near Symmetrical Tilt Boundaries / S. F. Di Martino et al. // *J. Nucl. Mater.* – 2011. – Vol. 417. – P. 1058.

5. Evolution of Atomic Collision Cascades in Vanadium Crystal with Internal Structure / S. G. Psakhiea et al. // *Crystallogr. Rep.* – 2009. – Vol. 54, № 6. – P. 1002.
6. Cohesive and Magnetic Properties of Grain Boundaries in bcc Fe with Cr Additions / E. Wachowicz et al. // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Vol. 81. – P. 094104.
7. Segregation of Cr at Tilt Grain Boundaries in Fe–Cr Alloys: A Metropolis Monte Carlo Study / D. Terentyev et al. // *J. Nucl. Mater.* – 2011. – Vol. 408. – P. 161.
8. Dependence on Grain Boundary Structure of Radiation Induced Segregation in a 9 wt.% Cr Model Ferritic/Martensitic Steel / K. G. Field et al. // *J. Nucl. Mater.* – 2013. – Vol. 435. – P. 172.
9. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades in random Fe-9at.%Cr binary alloy with twin grain boundaries / M. Tikhonchev, A. Muralev, and V. Svetukhin // *Fusion Science and Technology.* – 2014. – Vol. 66, № 1. – P. 91–99.
10. Развитие каскадов атомных соударений в кристалле ванадия с внутренней структурой / С. Г. Псахье, К. П. Зольников, Д. С. Крыжевич, А. В. Железняков, В. М. Чернов // *Кристаллография.* – 2009. – Т. 54, № 6. – С. 1053–1062.
11. **Gao, F.** Temperature-dependence of defect creation and clustering by displacement cascades in α -zirconium / F. Gao, D. J. Bacon, L. M. Howe, C. B. So. // *Journal of Nuclear Materials.* – 2001. – Vol. 249. – P. 288–298.
12. **Khater, H. A.** Dislocation core structure and dynamics in two atomic models of α -zirconium / H. A. Khater, D. J. Bacon // *Acta Materialia.* – 2010. – Vol. 58. – P. 2978–2987.
13. **Svetukhin, V.** Effective Atomic Displacements in α -Zirconium under Neutron Irradiation / V. Svetukhin, M. Tikhonchev // *Advanced Materials Research.* – 2014. – Vol. 1042. – P. 52–57.
14. A molecular dynamics study of high-energy displacement cascades in α -zirconium / S. J. Wooding et al. // *Journal of Nuclear Materials.* – 1998. – № 254. – P. 191–204.
15. Molecular dynamics simulations of irradiation cascades in alpha-zirconium under macroscopic strain / Sali Di, Zhongwen Yao, Mark R. Daymond, Fei Gao // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* – 2013. – Vol. 303. – P. 95–99.
16. **Тихончев, М. Ю.** Расчет пороговых энергий атомных смещений вблизи протяженной границы раздела фаз ГПУ-Zr и ОЦК-Nb методом молекулярной динамики / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // *Известия Самарского научного центра РАН. Физика и электроника.* – 2012. – Т. 14, № 4. – С. 1143–1148.
17. **Тихончев, М. Ю.** Расчетное определение пороговых энергий смещения и исследование особенностей развития каскадов атомных смещений вблизи протяженной границы раздела фаз циркония и ниобия: молекулярно-динамическое моделирование / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // *Вопросы материаловедения.* – 2011. – № 4 (68). – С. 140–152.
18. **Mendelev, M. I.** Development of an interatomic potential for the simulation of phase transformation in zirconium / M. I. Mendelev and G. J. Ackland // *Phil. Mag. Lett.* – 2007. – Vol. 87, № 5. – P. 349–359.
19. **Daw, M. S.** Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M. S. Daw, M. I. Baskes // *Phys. Rev. B.* – 1984. – Vol. 29. – P. 6443–6453.
20. **Ackland, G. J.** Defect, surface and displacement-threshold properties of α -zirconium simulated with many-body potential / G. J. Ackland, S. J. Wooding, D. J. Bacon // *Phil. Mag. A.* – 1995. – Vol. 71, № 3. – P. 553–565.
21. **Khater, H. A.** Dislocation core structure and dynamics in two atomic models of α -zirconium / H. A. Khater, D. J. Bacon // *Acta Materialia.* – 2010. – Vol. 58. – P. 2978–2987.
22. **Diego, N. D.** On the structure and mobility of point defect clusters in alpha-zirconium: a comparison for two interatomic potential models / N. D. Diego, A. Serra,

- D. J. Bacon, Y. N. Osetsky // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2011. – Vol. 19. – P. 035003.
23. **Pearson, W. B.** *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals* / W. B. Pearson. – Oxford : Pergamon Press, 1967.
24. **Капустин, П. Е.** Моделирование ГПУ-циркония методом молекулярной динамики / П. Е.Капустин // *Известия самарского научного центра РАН.* – 2013. – № 4. – С. 1131–1136.

References

1. Zhang J.-M. et al. *Appl. Surf. Sci.* 2006, vol. 252, p. 4936.
2. Pérez F. J. P. et al. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B.* 1999, vol. 153, p. 136.
3. Pérez F. J. P. et al. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B.* 2001, vol. 180, p. 322.
4. Di Martino S. F. et al. *J. Nucl. Mater.* 2011, vol. 417, p. 1058.
5. Psakhiea S. G. et al. *Crystallogr. Rep.* 2009, vol. 54, no. 6, p. 1002.
6. Wachowicz E. et al. *Phys. Rev. B.* 2010, vol. 81, p. 094104.
7. Terentyev D. et al. *J. Nucl. Mater.* 2011, vol. 408, p. 161.
8. Field K. G. et al. *J. Nucl. Mater.* 2013, vol. 435, p. 172.
9. Tikhonchev M., Muralev A. and Svetukhin V. *Fusion Science and Technology.* 2014, vol. 66, no. 1, pp. 91–99.
10. Psakh'e S. G., Zol'nikov K. P., Kryzhevich D. S., Zheleznyakov A. V., Chernov V. M. *Kristallografiya* [Crystallography]. 2009, vol. 54, no. 6, pp. 1053–1062.
11. Gao F., Bacon D. J., Howe L. M., So. C. B. *Journal of Nuclear Materials.* 2001, vol. 249, pp. 288–298.
12. Khater H. A., Bacon D. J. *Acta Materialia.* 2010, vol. 58, pp. 2978–2987.
13. Svetukhin V., Tikhonchev M. *Advanced Materials Research.* 2014, vol. 1042, pp. 52–57.
14. Wooding S. J. et al. *Journal of Nuclear Materials.* 1998, no. 254, pp. 191–204.
15. Sali Di, Zhongwen Yao, Mark R. Daymond, Fei Gao *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.* 2013, vol. 303, pp. 95–99.
16. Tikhonchev M. Yu., Svetukhin V. V. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra RAN. Fizika i elektronika* [Proceedings of Samara scientific center of the Russian Academy of Sciences. Physics and electronics]. 2012, vol. 14, no. 4, pp. 1143–1148.
17. Tikhonchev M. Yu., Svetukhin V. V. *Voprosy materialovedeniya* [Problems of materials science]. 2011, no. 4 (68), pp. 140–152.
18. Mendeleev M. I. and Ackland G. J. *Phil. Mag. Let.* 2007, vol. 87, no. 5, pp. 349–359.
19. Daw M. S., Baskes M. I. *Phys. Rev. B.* 1984, vol. 29, pp. 6443–6453.
20. Ackland G. J., Wooding S. J., Bacon D. J. *Phil. Mag. A.* 1995, vol. 71, no. 3, pp. 553–565.
21. Khater H. A., Bacon D. J. *Acta Materialia.* 2010, vol. 58, pp. 2978–2987.
22. Diego N. D., Serra A., Bacon D. J., Osetsky Y. N. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2011, vol. 19, p. 035003.
23. Pearson W. B. *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals.* Oxford: Pergamon Press, 1967.
24. Kapustin P. E. *Izvestiya samarskogo nauchnogo tsentra RAN* [Proceedings of Samara scientific center of the Russian Academy of Sciences]. 2013, no. 4, pp. 1131–1136.

Капустин Павел Евгеньевич

аспирант, Ульяновский государственный университет (Россия, г. Ульяновск, ул. Льва Толстого 42)

E-mail: kapustinpe91@gmail.com

Kapustin Pavel Evgenievich

Postgraduate student, Ulyanovsk State University (42 Lva Tolstogo street, Ulyanovsk, Russia)

Светухин Вячеслав Викторович

доктор физико-математических наук,
профессор, ведущий научный сотрудник,
Научно-исследовательский
технологический институт имени
С. П. Капицы, Ульяновский
государственный университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Льва Толстого 42)

E-mail: slava@sv.uven.ru

Svetukhin Vyacheslav Viktorovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, leading researcher,
Research Technological Institute
named after S. P. Kapitsa, Ulyanovsk
State University (42 Lva Tolstogo street,
Ulyanovsk, Russia)

Тихончев Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук,
начальник лаборатории компьютерного
моделирования неорганических
материалов, Научно-исследовательский
технологический институт имени
С. П. Капицы, Ульяновский
государственный университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Льва Толстого 42)

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

Tikhonchev Mikhail Yurievich

Candidate of physical and mathematical
sciences, head of laboratory of computer
modelling of inorganic materials,
Research Technological Institute
named after S. P. Kapitsa, Ulyanovsk
State University (42 Lva Tolstogo street,
Ulyanovsk, Russia)

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

Капустин, П. Е.

Каскады атомных смещений вблизи симметричных наклонных границ зерна в гексагональной плотноупакованной структуре Zr: моделирование методом молекулярной динамики / П. Е. Капустин, В. В. Светухин, М. Ю. Тихончев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 2 (34). – С. 148–163.