

МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ В АЛЬФА-ЖЕЛЕЗЕ, СОДЕРЖАЩЕМ СИММЕТРИЧНО- НАКЛОННУЮ МЕЖЗЕРЕННУЮ ГРАНИЦУ¹

Аннотация. Работа посвящена исследованию первичного радиационного повреждения бикристаллитов альфа-железа с двойниковой границей зерна путем молекулярно-динамического моделирования. Моделирование проведено на основе многотельного межатомного взаимодействия. Рассмотрены атомарные модели шести типов протяженных двойниковых межзеренных границ в ОЦК-железе, рассчитаны их удельные энергии и определены размеры межзеренных областей. Проведено моделирование развития каскадов атомных смещений в бикристаллах альфа-железа с симметричной межзеренной границей $\Sigma 5$ (310)[001]. На основе полученных результатов проведен сравнительный анализ числа образующихся радиационных дефектов в идеальной кристаллической решетке и бикристаллитах, содержащих межзеренную границу.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, межзеренная граница, первичное радиационное повреждение, каскады атомных смещений

A. B. Muralev, M. Y. Tikhonchev, V. V. Svetukhin

MODELING THE CASCADES OF ATOMIC DISPLACEMENTS IN ALPHA IRON CONTAINING SIMMETRICALLY TILT GRAIN BOUNDARY

Abstract. The work is devoted to examination of primary radiation damage of alpha-iron bicrystals with twin grain boundary by means of molecular dynamics simulation. Simulation is based on the multibody interatomic interaction. The authors have considered atomic models of six types of extended twin grain boundaries in bcc iron. Their specific energies have been calculated and grain region sizes have been determined. The researchers have simulated evolution of atomic cascade displacements in bicrystals of alpha-iron with a symmetric grain boundary $\Sigma 5$ (310)[001]. According to the obtained results, the authors have conducted a comparative analysis of a number of radiation-induced defects formed in a perfect crystal lattice and bicrystals containing grain boundaries.

Key words: molecular dynamics, grain boundary, radiation damage, atomic displacement cascade.

Введение

Метод молекулярной динамики является общепринятым способом моделирования каскадов атомных смещений в конструкционных материалах ядерной техники. Различными группами исследователей по всему миру проведено большое количество таких исследований применительно к различным

¹ Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012–2014 гг., федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» и «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2012 годы», а также при частичной поддержке гранта РФФИ: проект № «12-08-97076-р_поволжье_а».

материалам. Особенно много данных получено для «чистого» α -Fe с использованием разнообразных потенциалов межатомного взаимодействия. Также широко выполняется моделирование в сплавах (см., например, работы [1–5]), хотя для многокомпонентных систем сохраняется проблема подготовки надежных функций взаимодействия частиц. Как правило, в молекулярно-динамическом моделировании рассматриваются изначально идеальные кристаллические структуры. В реальности же твердым телам присуща сложная внутренняя структура, образованная в том числе и протяженными межзеренными границами.

Ранее моделирование развития каскадов атомных смещений в кристаллитах с внутренней структурой проводилось в работах [6–9]. В работах [6, 7] выполнено моделирование каскадов атомных смещений энергии 1 keV в бикристаллитах α -Fe с двойниковой межзеренной границей $\Sigma 17$ (530)[001]. При моделировании использовался многотельный потенциал межатомного взаимодействия типа Финниса – Синклера (Finnis – Sinclair). Авторы уделили особое внимание вопросам влияния первоначального строения кристаллитов, содержащих межзеренную границу, на релаксационные процессы и эволюцию атомных смещений в целом.

В работах [8, 9] рассмотрены бикристаллиты ванадия и ванадиевого сплава. Межатомное взаимодействие было описано в рамках приближения Финниса – Синклера и модифицированного метода погруженного атома (MEAM). Исследование первичного радиационного повреждения проводилось вблизи симметрично-наклонных межзеренных границ $\Sigma 13$ (320)[001] и $\Sigma 17$ (410)[001]. Моделировались каскады атомных смещений с энергиями до 10 keV.

Обобщая результаты этих четырех работ, можно сформулировать следующие выводы об особенностях развития каскадов атомных смещений в кристаллитах с межзеренными границами. Межзеренные границы выступают в качестве барьера, препятствующего распространению смещений по другую сторону границы. При развитии каскада в непосредственной близости от границы приграничная область аккумулирует значительную долю произведенных радиационных дефектов.

Настоящая работа посвящена исследованию особенностей первичного радиационного повреждения бикристаллитов альфа-железа с двойниковой межзеренной границей. Исследование проводилось путем молекулярно-динамического моделирования развития каскадов атомных смещений энергии 10 keV. В расчетах применялся многотельный потенциал межатомного взаимодействия, разработанный Акландом, Менделеевым и др. [10]. Этот потенциал является модификацией потенциала из работы [11]. Для моделирования был применен комплекс специализированных компьютерных программ MDRDS (Molecular Dynamics for Radiation Damage Simulation), разработанных в Научно-исследовательском технологическом институте УлГУ (<http://niti.ulsu.ru>).

1. Первичное радиационное повреждение монокристаллита α -Fe

Развитие каскадов атомных смещений начинается с момента генерации первично-выбитого атома (ПВА) с заданными кинетической энергией и направлением импульса и продолжается до тех пор, пока вся энергия, пере-

данная от ПВА атомам вещества, не распределится по его объему. При этом в качестве количественной меры последствий радиационного воздействия часто используют количество оставшихся («выживших») после затухания каскада точечных дефектов кристаллической решетки: вакансий и собственных междоузельных атомов (СМА).

Для идентификации и подсчета точечных дефектов применялся метод, использующий анализ ячеек Вигнера – Зейтца. Каждому узлу первоначальной кристаллической решетки ставится в соответствие ячейка Вигнера – Зейтца, которая определяется как множество всех точек пространства, расстояние от которых до рассматриваемого узла кристаллита меньше или равно расстоянию до любого другого узла решетки. Отсутствие атомов в ячейке трактуется как вакансия, а попадание более одного атома в ячейку – как наличие СМА вблизи этого узла.

Моделирование процесса повреждения идеальной кристаллической решетки α -Fe проводилось для кристаллита, состоящего из ~ 400 тысяч атомов, с использованием периодических граничных условий. Энергия первоначально-выбитого атома соответствовала 10 keV. Направление вылета ПВА выбрано вдоль кристаллографического направления [135]. Перед началом моделирования каскадов кристаллит релаксировали при температуре 300 К и нулевом давлении в течение 30 ps. Моделируемое время развития каскадов составило 20 ps, что обеспечило рассмотрение всего процесса образования и релаксации дефектов в каскаде вплоть до его затухания.

Среднее рассчитанное число Френкелевских пар, «выживающих» в каскадах смещений, составило 25 ± 1^1 . Эта оценка хорошо согласуется с результатами других исследователей, полученных для ОЦК-Fe с использованием различных потенциалов межатомного взаимодействия, а также других металлов и сплавов (см. работы [1, 12–19] дальнейшие ссылки в них). Наблюдаемое согласие свидетельствует об адекватности используемой расчетной модели и корректности используемого вычислительного алгоритма.

2. Моделирование протяженной межзеренной границы

Кристаллические структуры, содержащие *двойниковые (специальные, симметрично-наклонные)* границы зерен (ГЗ, GB), представляют собой монокристаллические области, структуры которых связаны друг с другом операцией точечной симметрии. Специальная межзеренная граница представляет собой границу между двойниками, являясь плоскостью зеркальной симметрии. Такие дефекты нарушают трансляционную инвариантность в направлении, перпендикулярном плоскости распространения межзеренной границы, однако в направлениях, параллельных границе трансляционная, симметрия сохраняется (рис. 1).

Для шести типов двойниковых межзеренных границ (табл. 1) проведена релаксация бикристаллитов альфа-железа при температуре 0 К. Релаксация проводилась с применением смешанных граничных условий (ГУ): атомы на границах, параллельных плоскости распространения ГЗ, закреплялись в своих первоначальных положениях; для границ, перпендикулярных ГЗ, использовались периодические ГУ.

¹ Здесь и далее приводятся статистические погрешности, соответствующие доверительной вероятности $p = 0,67$ (1σ) для выборочного среднего.

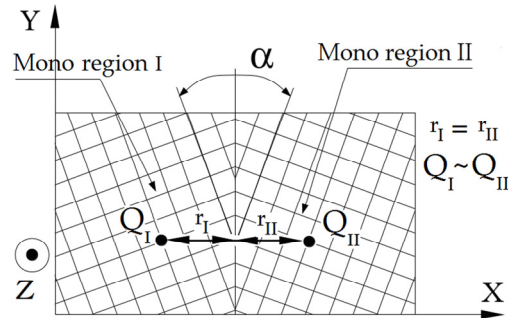


Рис. 1. Двойниковая межзеренная граница

Таблица 1

Исследуемые симметрично-наклонные межзеренные границы

Тип межзеренной границы	Ось вращения	Угол наклона одного зерна относительно другого α , °
$\Sigma 13$ (320)[001]	[001]	22,62
$\Sigma 17$ (530)[001]		28,07
$\Sigma 5$ (210)[001]		36,87
$\Sigma 5$ (310)[001]		53,13
$\Sigma 17$ (410)[001]		61,93
$\Sigma 13$ (510)[001]		67,38

В процессе релаксации бикристаллита в приграничной области ГЗ происходит разупорядочивание нескольких атомных слоев, образуется так называемая межзеренная или зернограничная область. При этом в объеме двойников сохраняется кристаллическая структура ОЦК-железа. Размер межзеренной области определялся методом, основанным на анализе потенциальной энергии кристаллита в прилегающих к ГЗ областях (см., например, работу [4]). В этом методе исследуемый бикристаллит разбивается, начиная от ГЗ, на слои шириной X_S , параллельные плоскости распространения ГЗ. Далее в каждом таком слое вычисляется значение потенциальной энергии E_p , приходящееся на один атом, и оценивается разница величин $\Delta E = E_p - E_c$, где E_c – энергия связи на атом в идеальной кристаллической решетке ОЦК-Fe. Слои, для которых ΔE превышает по модулю заданное пороговое значение ΔE_{pmax} , составляют межзеренную область. В данной работе использовано значение $E_c = 4,013$ eV, которое обеспечивается используемым потенциалом межатомного взаимодействия, $\Delta E_{pmax} = 0.01$ eV и $X_S = 0,2$ Å.

Удельная энергия межзеренной границы рассчитывалась по выражению

$$E_{GB} = \frac{E'_p - N \cdot E_c}{S},$$

где E'_p – полная потенциальная энергия отрелаксированного бикристалла с ГЗ; N – число частиц, находящееся в расчетной области; S – площадь межзеренной границы в модельном бикристалле.

Полученные значения удельной энергии рассмотренных двойниковых межзеренных границ, а также размеры соответствующих их зернограничных областей представлены в табл. 2. Представленные оценки получены для ну-

левой температуры бикристаллита. Наряду с результатами настоящей работы в табл. 2 представлены соответствующие оценки, полученные другими исследователями.

Таблица 2
Рассчитанные параметры межзеренных границ в α -Fe.

Тип двойниковой границы	Удельная энергия межзеренной границы, $\text{eV}/\text{\AA}^2$		Ширина межзеренной области, $\text{\AA}$
	Результаты настоящей работы	Результаты других исследователей	
$\Sigma 13 (320)[001]$	0,080	–	19,6
$\Sigma 17 (530)[001]$	0,072	0,080[6]	19,2
$\Sigma 5 (210)[001]$	0,07	0,087[20]	16,4
$\Sigma 5 (310)[001]$	0,063	0,062[20], 0,079[21], 0,062[21], 0,063[21], 0,081[21], 0,093[21], 0,069[21],	9,2
$\Sigma 17 (410)[001]$	0,069	0,069[20]	12
$\Sigma 13 (510)[001]$	0,063	0,115[20]	10

Наименьшим значением удельной энергии обладают межзеренные границы $\Sigma 5 (310)[001]$ и $\Sigma 13 (510)[001]$, наибольшим – $\Sigma 13 (320)[001]$. При этом все полученные значения попадают в относительно узкий интервал 0,06–0,08 $\text{eV}/\text{\AA}^2$. В работе [20] указано значение удельной энергии 0,093 $\text{eV}/\text{\AA}^2$ для симметрично-наклонной межзеренной границы $\Sigma 5 (310)[001]$, которое получено в расчетах из первых принципов Ab Initio. В целом полученные в данной работе оценки удельной энергии ГЗ хорошо согласуются с опубликованными результатами других исследователей. Исключение составляет только граница $\Sigma 13 (510)[001]$, для энергии которой получена оценка почти вдвое ниже оценки, полученной ранее Д. Терентьевым [21]. Существующее различие в рассчитанных характеристиках специальных ГЗ можно объяснить применением различных потенциалов межатомного взаимодействия.

3. Моделирование прохождения каскада атомных смещений через межзеренную границу

Моделирование процесса первичного радиационного повреждения ОЦК-бикристаллитов железа с симметрично-наклонной границей проведено только для ГЗ $\Sigma 5 (310)[001]$ и энергии первично-выбитого атома, равной 10 keV. Форма исследуемых бикристаллитов представляла собой параллелепипед объемом $V = 235,16 \times 171,84 \times 168,75 \text{ \AA}^3$; общее число частиц в расчетном блоке составило 549290 атомов. Предварительная релаксация проводилась при температуре 300 К. Рассмотрено два направления вылета ПВА (рис. 2), первое из которых соответствует кристаллографическому направлению $[310]$ (направление перпендикулярно плоскости распространения ГЗ), второе – направлению $[\bar{1}30]$ (направление параллельно плоскости распространения ГЗ). Для каждого направления ПВА рассмотрено четыре начальных расстояния от ПВА до границы $L_{\text{ПВА}}$: 10, 30, 53, 71 $\text{\AA}$ для направления $[310]$ и 10, 30, 53, 63 $\text{\AA}$ – для $[\bar{1}30]$. Моделируемое время развития каскадов составило около 30 ps.

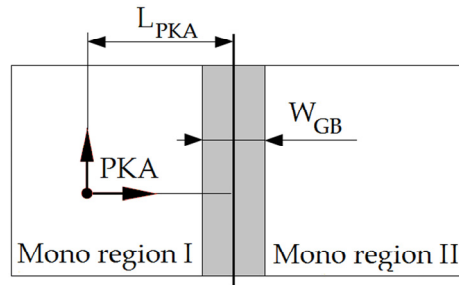


Рис. 2. Моделирование каскадов атомных смещений в образце с межзеренной границей (области двойников, в которых после процесса релаксации сохранялась кристаллическая решетка α -железа, называли монообластью I и монообластью II)

Части бикристаллита, расположенные по разные стороны от межзеренной области, являются монокристаллитами ОЦК-Fe. Область, где инициируется ПВА, будем в дальнейшем называть монообластью I, а противоположную ей область – монообластью II. Подсчет числа точечных дефектов осуществлялся путем описанного выше метода анализа ячеек Вигнера – Зейтца. При этом рассматривались только узлы кристаллической решетки, расположенные в монообластях I и II, структурные изменения межзеренной области не учитывались. Отметим, что, в отличие от случая каскадов в идеальном кристаллите, здесь оценки числа вакансий и числа СМА дают, вообще говоря, несовпадающие значения.

Полученные оценки среднего числа точечных дефектов, «выживающих» в каскаде смещений, для направлений вылета ПВА $[310]$ и $[\bar{1}30]$ представлены на рис. 3 и 4 соответственно.

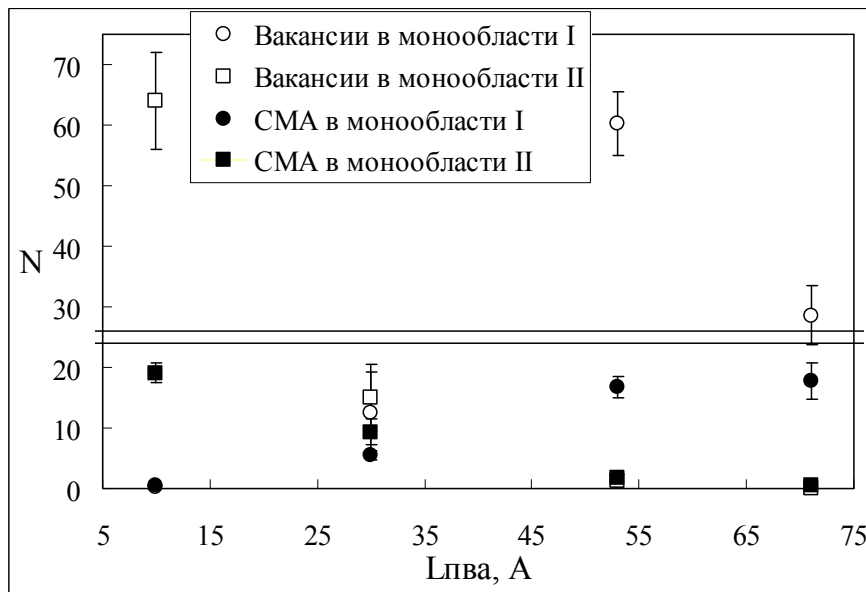


Рис. 3. Среднее число «выживающих» вакансий и СМА (N) в монообластях бикристаллита α -железа в зависимости от положения генерации ПВА относительно ГЗ ($L_{\text{ПВА}}$) (направление вылета ПВА соответствует направлению $[310]$)

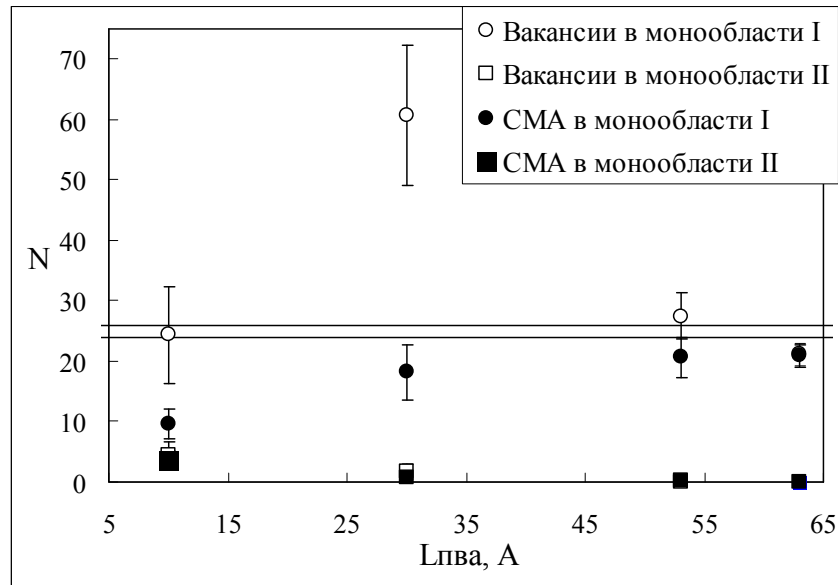


Рис. 4. Среднее число «выживающих» вакансий и СМА (N) в монообластях бикристаллита α -железа в зависимости от положения генерации ПВА относительно ГЗ ($L_{\text{ПВА}}$) (направление вылета ПВА соответствует направлению $[\bar{1}30]$)

Сплошными горизонтальными линиями на рис. 3, 4 обозначен доверительный интервал для среднего числа пар Френкеля, образующихся в каскадах той же энергии (10 keV), инициированных в идеальном кристаллите ОЦК-Fe без ГЗ. Такой кристаллит ниже будем называть монокристаллитом.

Представленные результаты позволяют отметить ряд особенностей для каскадов атомных смещений в кристаллитах с межзеренными границами. Прежде всего отметим пониженное по сравнению со случаем монокристаллита среднее число СМА. Это отличие достигает 1,5–2-х раз для каскадов, инициированных на относительно небольших расстояниях от ГЗ (10 и 30 Å для направления ПВА $[310]$ и 10 Å – для $[\bar{1}30]$).

Второй особенностью является повышенное в 2–2,5 раза число вакансий, образующихся в каскадах, инициированных ПВА на расстояниях 10 и 53 Å вдоль направления $[310]$ и на расстоянии 30 Å вдоль направления $[\bar{1}30]$. Далее для случая ПВА, инициированного вдоль $[310]$ на расстоянии 30 Å от ГЗ, среднее число «выживающих» СМА оказывается вдвое ниже, чем в случае монокристаллита. Оценка среднего числа вакансий в пределах погрешности совпадает с соответствующей оценкой для монокристаллита. Для случаев относительно больших расстояний (расстояние 53 Å и направление $[\bar{1}30]$, а также 73 Å и оба рассмотренных направления) не наблюдается заметных различий в оценках числа СМА и вакансий, которые хорошо согласуются с числом пар Френкеля, «выживающих» в монокристалле, т.е. влияние ГЗ в этом случае можно считать незначительным.

Чтобы дать объяснение полученным результатам, необходимо подробнее рассмотреть положение охваченной каскадом области относительно межзеренной границы. В зависимости от положения генерации ПВА относительно ГЗ значительная часть каскадной области может охватывать:

- только одну из монообластей (рис. 5);
- одну монообласть и зернограничную область (рис. 6);
- обе монообласти и зернограничную область (рис. 7).

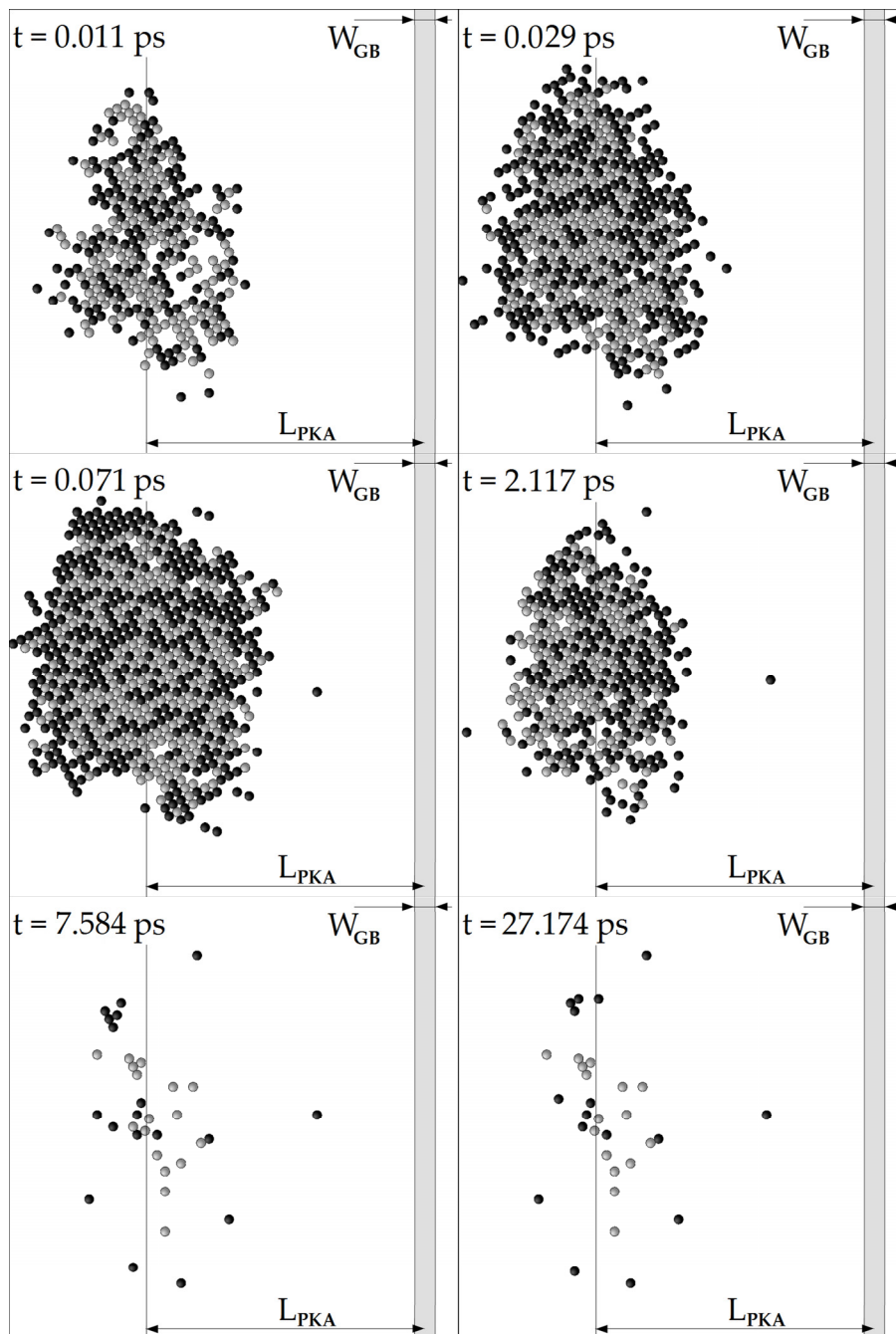


Рис. 5. Пример развития каскадов атомных смещений в бикристаллите α -железа с двойниковой межзеренной границей $\Sigma 5 (310) [001]$. Направление вылета ПВА параллельно плоскости распространения ГЗ; точка генерации ПВА расположена на расстоянии $63 \text{ \AA}$ от ГЗ. Точки черного цвета соответствуют СМА, точки серого цвета – вакансии

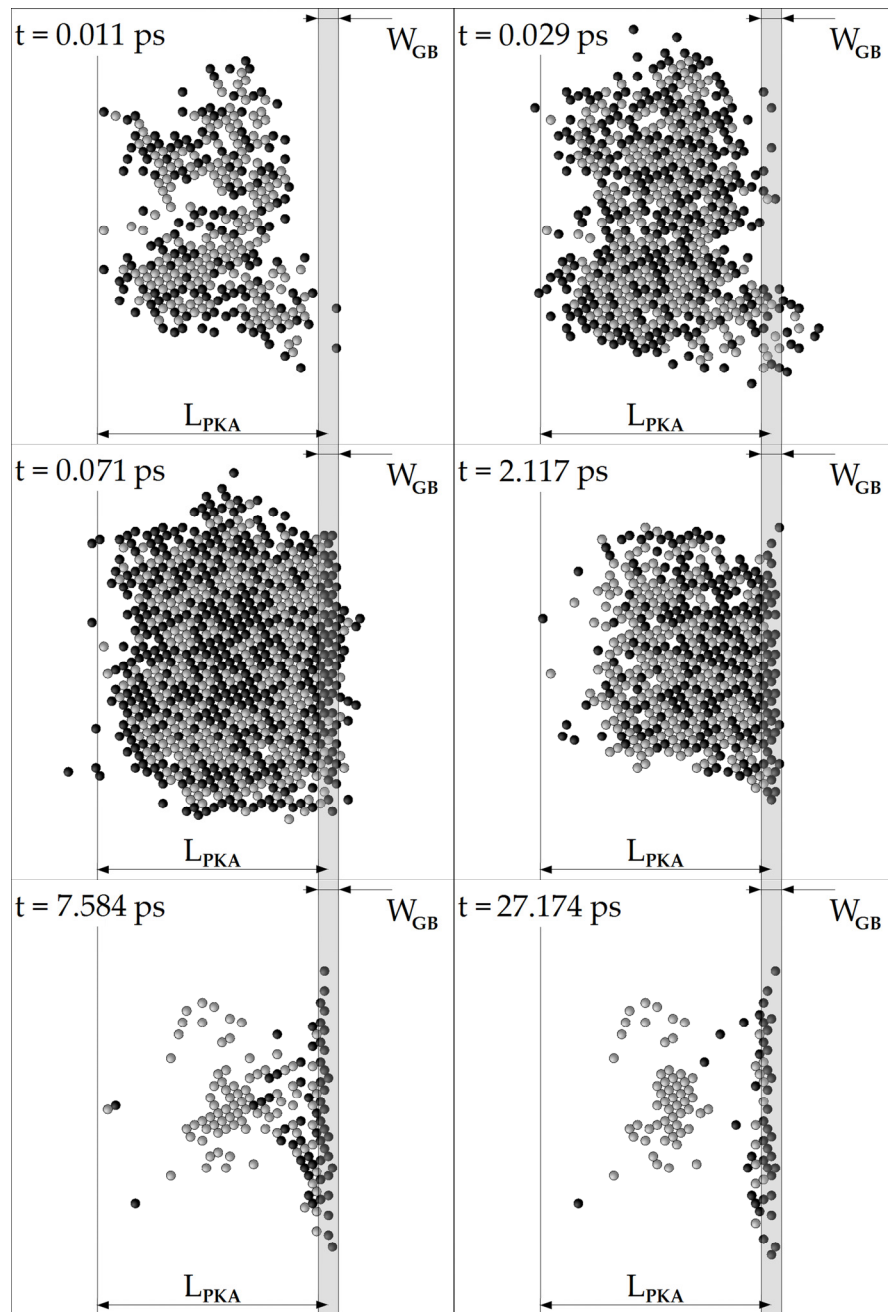


Рис. 6. Пример развития каскадов атомных смещений в бикристаллите α -железа с двойниковой межзеренной границей $\Sigma 5$ (310) [001]. Направление вылета ПВА перпендикулярно плоскости распространения ГЗ; точка генерации ПВА расположена на расстоянии 50 Å от ГЗ. Точки черного цвета соответствуют СМА, точки серого цвета – вакансии

В первом случае каскад практически не выходит из монообласти I (рис. 5). Это наблюдается для каскадов, инициированных ПВА на расстояниях более 70 Å для направления [310] и более 50 Å для направления $[\bar{1}30]$. В этом слу-

чае граница раздела между двойниками практически не влияет на процесс развития каскадов атомных смещений, и полученные результаты хорошо согласуются с результатами, полученными для монокристалла.

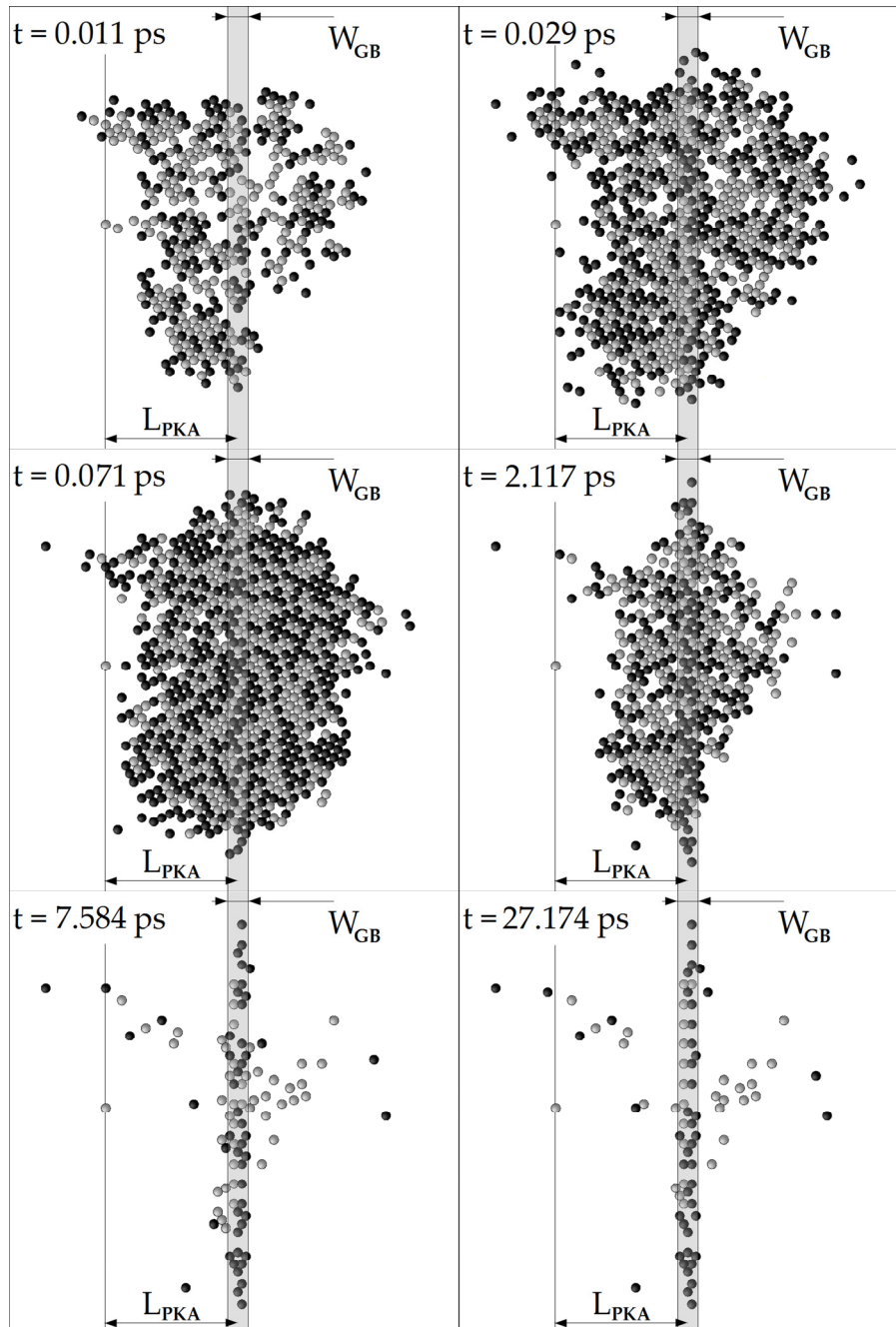


Рис. 7. Пример развития каскадов атомных смещений в бикристаллите α -железа с двойниковой межзеренной границей $\Sigma 5$ (310) [001]. Направление вылета ПВА перпендикулярно плоскости распространения ГЗ; точка генерации ПВА расположена на расстоянии 30 Å от ГЗ. Точки черного цвета соответствуют СМА, точки серого цвета – вакансии

На рис. 6 приведен пример, когда атомные смещения на баллистической стадии в значительной степени охватывают одну из монообластей (причем это может быть как монообласть I так и монообласть II) и зернограничную область. В этом случае на стадии релаксации каскада значительная часть СМА, которые обладают достаточно высокой подвижностью, переходит в межзеренную область. Это, в свою очередь, влечет уменьшение числа рекомбинаций в монообласти и тем самым повышает число вакансий. Этим объясняется повышенное число вакансий, «выживающих» в каскадах от ПВА на расстояниях 10, 50 Å для направления вылета [310] и 30 Å – для $\bar{1}30$.

В том случае когда, каскады атомных смещений распространяются через двойниковую границу из одного двойника в другой, осуществляется переход СМА в зернограничную область из обеих монообластей (рис. 7). Также в межзеренную область попадает заметная часть не только СМА, но и вакансий. Такой случай наблюдается для ПВА, инициированного вдоль [310] на расстоянии 30 Å от ГЗ, когда среднее суммарное число вакансий в монообластях близко к числу вакансий, «выживающих» в монокристалле. В то же время здесь наблюдается заметное снижение числа СМА. Это объясняется переходом большей части СМА в зернограничную область.

Заключение

В работе рассмотрены атомарные модели двойниковых межзеренных границ в α -Fe. Рассмотрено шесть типов таких границ, для которых рассчитаны удельные энергии и определены размеры межзеренных областей. Ширина межзеренной области составляет 9–20 Å. Для всех рассмотренных границ полученные оценки удельной энергии лежат в интервале 0,06–0,08 eV/Å². Эти результаты удовлетворительно согласуются с соответствующими результатами других исследователей. Наблюдаемые в отдельных случаях расхождения объясняются использованием различных потенциалов межатомного взаимодействия.

Методом молекулярной динамики проведено моделирование каскадов атомных смещений энергии 10 keV в бикристалле α -Fe, содержащем ГЗ $\Sigma 5$ (310)[001], при температуре 300 К. Получены оценки среднего числа «выживающих» в каскаде точечных дефектов для различных направлений импульса ПВА и его положений относительно ГЗ. Эти оценки сопоставлялись с соответствующими результатами, полученными для монокристалла α -Fe при той же температуре с использованием того же потенциала межатомного взаимодействия. Установлены следующие особенности влияния ГЗ на параметры первичного радиационного повреждения. Для каскадов, инициированных на относительно небольших расстояниях от двойниковой границы, среднее число образующихся СМА оказывается в 1,5–2 раза ниже, чем в случае монокристалла. В случаях, когда область, охватываемая каскадом на его баллистической стадии, оказывается «примыкающей» к ГЗ, наблюдается увеличение числа «выживающих» вакансий в 2–2,5 раза. Оба этих случая объясняются интенсивным переходом образовавшихся в каскаде СМА в межзеренную область. Переход в зернограничную область вакансии в процессе развития каскада оказывается менее значимым в силу их существенно более низкой (по сравнению с СМА) подвижностью.

Полученные результаты целесообразно использовать в дальнейшем для учета внутренней структуры материалов при разработке новых моделей радиационного повреждения.

Список литературы

1. **Vortler, K.** The effect of Cr concentration on radiation damage in Fe–Cr alloys / K. Vortler, C. Bjorkas, D. Terentyev et al. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2008. – V. 382. – P. 24–30.
2. **Malerba, L.** Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Fe–Cr alloys / L. Malerba, D. Terentyev, P. Olsson et al. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2004. – V. 329–333. – P. 1156–1160.
3. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades in Fe–10 at.%Cr binary alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze // *Journal of Nuclear Materials*. – 2009. – V. 395. – P. 50–57.
4. **Terentyev, D.** Displacement cascades in Fe–Cr: A molecular dynamics study / D. A. Terentyev, L. Malerba, R. Chakarova et al. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2006. – V. 349. – P. 119–132.
5. **Svetukhin, V.** Kinetics and thermodynamics of Cr nanocluster formation in Fe–Cr system / V. Svetukhin, P. L'vov, E. Gaganidze, M. Tikhonchev, C. Dethloff // *Journal of Nuclear Materials*. – 2011. – V. 415. – P. 205–209.
6. **Javier Perez-Perez, F.** Modelling radiation effects at grain boundaries in bcc iron / F. Javier Perez-Perez, R. Smith // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 1999. – V. 153. – P. 136–141.
7. **Javier Perez-Perez, F.** Preferential damage at symmetrical tilt grain boundaries in bcc iron / F. Javier Perez-Perez, R. Smith // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 2001. – V. 180. – P. 322–328.
8. **Псахье, С.** Развитие каскадов атомных соударений в кристалле ванадия с внутренней структурой / С. Г. Псахье, В. М. Чернов, К. П. Зольников, Д. С. Крыжевнич, А. В. Железняков // *Кристаллография*. – 2009. – V. 54. – P. 1053–1062.
9. **Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика** : тр. Междунар. конф. посвящ. 90-летию со дня рождения академика Н. Н. Яненко (Новосибирск, Россия, 30 мая – 4 июня 2011 г.). – Новосибирск, 2011.
10. **Ackland, G.** Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron / G. J. Ackland, M. I. Mendelev, D. J. Srolovitz, S. Han, A. V. Barashev // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2004. – V. 16. – P. 2629.
11. **Mendelev, M.** Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron / M. I. Mendelev, S. Han, D. J. Srolovitz et al. // *Philosophical Magazine*. – 2003. – V. 83. – P. 3977–3994.
12. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades in Fe–10 at.%Cr binary alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze // *Journal of Nuclear Materials*. – 2009. – V. 395. – P. 50–57.
13. **Dethloff, C.** Modeling of helium bubble formation and growth in RAFM steels under neutron irradiation / C. Dethloff, E. Gaganidze, V. Svetukhin et al. // *Extended Abstracts Book of First International Conference on Materials for Energy*. – 2010. – P. 196–198.
14. **Тихончев, М. Ю.** Моделирование процессов первичной радиационной повреждаемости сплава Fe–1.8at.%Ni методом молекулярной динамики / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин, Д. В. Козлов, В. Н. Голованов // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. – 2010. – № 3(15). – С. 143–155.

15. **Svetukhin, V.** Kinetics and thermodynamics of Cr nanocluster formation in Fe-Cr system / V. Svetukhin, P. L'vov, E. Gaganidze, M. Tikhonchev, C. Dethloff // *Journal of Nuclear Materials*. – 2011. – V. 415. – P. 205–209.
16. **Тихончев, М. Ю.** Молекулярно-динамическое моделирование каскадов атомных смещений для сплава Fe-9ат.%Cr с углеродом в растворе / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин, А. С. Кадочкин, Э. Гаганидзе // *Металлы*. – 2011. – № 3. – С. 22–30.
17. **Тихончев, М. Ю.** Моделирование процессов первичной радиационной повреждаемости α -железа методом молекулярной динамики / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин, Т. С. Ильина, // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. – 2007. – № 2. – С. 70–79.
18. **Тихончев, М. Ю.** Молекулярно-динамическое моделирование каскадов атомных смещений в α -цирконии / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин. // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион*. – 2006. – № 5. – С. 70–82.
19. **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.
20. **Gao, N.** Multiscale modelling of bi-crystal grain boundaries in bcc iron / N. Gao, C. Fu, M. Samaras, R. Shäublin, M. Victoria, W. Höffelner // *Journal of Nuclear Materials*. – 2009. – V. 385. – P. 262.
21. **Terentyev, D.** Properties of grain boundaries in BCC iron and iron-based alloys: An atomistic study / D. Terentyev, Xinfu He // *Open report of the Belgian nuclear research centre SCK•CEN-BLG*. – 2010. – V. 1072. – P. 70.

References

1. **Vortler, K.** The effect of Cr concentration on radiation damage in Fe-Cr alloys / K. Vortler, C. Bjorkas, D. Terentyev et al. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2008. – V. 382. – P. 24–30.
2. **Malerba, L.** Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Fe-Cr alloys / L. Malerba, D. Terentyev, P. Olsson et al. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2004. – V. 329–333. – P. 1156–1160.
3. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades in Fe-10 at.%Cr binary alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze // *Journal of Nuclear Materials*. – 2009. – V. 395. – P. 50–57.
4. **Terentyev, D.** Displacement cascades in Fe-Cr: A molecular dynamics study / D. A. Terentyev, L. Malerba, R. Chakarova et al. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2006. – V. 349. – P. 119–132.
5. **Svetukhin, V.** Kinetics and thermodynamics of Cr nanocluster formation in Fe-Cr system / V. Svetukhin, P. L'vov, E. Gaganidze, M. Tikhonchev, C. Dethloff // *Journal of Nuclear Materials*. – 2011. – V. 415. – P. 205–209.
6. **Javier Perez-Perez, F.** Modelling radiation effects at grain boundaries in bcc iron / F. Javier Perez-Perez, R. Smith // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 1999. – V. 153. – P. 136–141.
7. **Javier Perez-Perez, F.** Preferential damage at symmetrical tilt grain boundaries in bcc iron / F. Javier Perez-Perez, R. Smith // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. – 2001. – V. 180. – P. 322–328.
8. **Psakh'ye, C.** Razvitiye kaskadov atomnykh soudareniy v kristalle vanadiya s vnutrenney strukturoy / C. G. Psakh'ye, V. M. Chernov, K. P. Zol'nikov, D. S. Kryzhevich, A. V. Zheleznyakov // *Kristallografiya*. – 2009. – V. 54. – P. 1053–1062.
9. *Sovremennyye problemy prikladnoy matematiki i mekhaniki: teoriya, eksperiment i praktika* : tr. Mezhdunar. konf. posvyashch. 90-letiyu so dnya rozhdeniya akade-mika

- N. N. Yanenko (Novosibirsk, Rossiya, 30 maya – 4 iyunya 2011 g.). – Novosibirsk, 2011.
10. **Ackland, G.** Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron / G. J. Ackland, M. I. Mendelev, D. J. Srolovitz, S. Han, A. V. Barashev // J. Phys.: Condens. Matter. – 2004. – V. 16. – P. 2629.
 11. **Mendelev, M.** Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron / M. I. Mendelev, S. Han, D. J. Srolovitz et al. // Philosophical Magazine. – 2003. – V. 83. – P. 3977–3994.
 12. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades in Fe–10 at.%Cr binary alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze // Journal of Nuclear Materials. – 2009. – V. 395. – P. 50–57.
 13. **Dethloff, C.** Modeling of helium bubble formation and growth in RAFM steels under neutron irradiation / C. Dethloff, E. Gaganidze, V. Svetukhin et al. // Extended Abstracts Book of First International Conference on Materials for Energy. – 2010. – P. 196–198.
 14. **Tikhonchev, M. YU.** Modelirovaniye protsessov pervichnoy radiatsionnoy povrezhdayemosti splava Fe–1.8at.%Ni metodom molekulyarnoy dinamiki / M. YU. Tikhonchev, V. V. Svetukhin, D. V. Kozlov, V. N. Golovanov // Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskiye nauki. – 2010. – № 3(15). – S. 143–155.
 15. **Svetukhin, V.** Kinetics and thermodynamics of Cr nanocluster formation in Fe–Cr system / V. Svetukhin, P. L'vov, E. Gaganidze, M. Tikhonchev, C. Dethloff // Journal of Nuclear Materials. – 2011. – V. 415. – P. 205–209.
 16. **Tikhonchev, M. YU.** Molekulyarno-dinamicheskoye modelirovaniye kaskadov atomnykh smeshcheniy dlya splava Fe–9at.%Cr s uglerodom v rastvore / M. YU. Tikhonchev, V. V. Svetukhin, A. S. Kadochkin, E. Gaganidze // Metally. – 2011. – № 3. – C. 22–30.
 17. **Tikhonchev, M. YU.** Modelirovaniye protsessov pervichnoy radiatsionnoy povrezhdayemosti α -zheleza metodom molekulyarnoy dinamiki / M. YU. Tikhonchev, V. V. Svetukhin, T. S. Il'ina, // Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskiye nauki. – 2007. – № 2. – S. 70–79.
 18. **Tikhonchev, M. YU.** Molekulyarno-dinamicheskoye modelirovanie kaskadov atomnykh smeshcheniy v α -tsirkonii / M. YU. Tikhonchev, B. V. Svetukhin. // Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. – 2006. – № 5. – C. 70–82.
 19. **Tikhonchev, M. YU.** Raschetnoye opredeleniye porogovykh energiy smeshcheniya i is-sledovaniye osobennostey razvitiya kaskadov atomnykh smeshcheniy vblizi protya-zhennoy granitsy razdela faz tsirkoniya i niobiya: molekulyarno-dinamicheskoye modelirovaniye / M. YU. Tikhonchev, V. V. Svetukhin // Voprosy materialovedeniya. – 2011. – № 4 (68). – C. 140–152.
 20. **Gao, N.** Multiscale modelling of bi-crystal grain boundaries in bcc iron / N. Gao, C. Fu, M. Samaras, R. Shäublin, M. Victoria, W. Hoffelner // Journal of Nuclear Materials. – 2009. – V. 385. – P. 262.
 21. **Terentyev, D.** Properties of grain boundaries in BCC iron and iron-based alloys: An atomistic study / D. Terentyev, Xinfu He // Open report of the Belgian nuclear research centre SCK•CEN-BLG. – 2010. – V. 1072. – P. 70.

Муралев Артем Борисович

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

E-mail: a.b.muralev@yandex.ru

Muralev Artem Borisovich

Postgraduate student, Ulyanovsk State
University (Ulyanovsk, 42 Lva
Tolstogo str.)

Тихончев Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук,
начальник лаборатории Компьютерного
моделирования неорганических
материалов научно-исследовательского
технологического института,
Ульяновский государственный
университет (г. Ульяновск,
ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

Tikhonchev Mikhail Yryevich

Candidate of physical and mathematical
sciences, head of computer modeling
laboratory of inorganic materials, Research
Institute of Technology, Ulyanovsk
State University (Ulyanovsk, 42 Lva
Tolstogo str.)

Светухин Вячеслав Викторович

доктор физико-математических
наук, профессор, директор научно-
исследовательского технологического
института, Ульяновский
государственный университет
(г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: slava@sv.uven.ru

Svetukhin Vyacheslav Viktorovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of Research
Institute of Technology, Ulyanovsk State
University (Ulyanovsk, 42 Lva
Tolstogo str.)

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

Муралев, А. Б.

Моделирование каскадов атомных смещений в альфа-железе, содержащем симметрично-наклонную межзеренную границу / А. Б. Муралев, М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2013. – № 1 (25). – С. 144–158.