

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ В СПЛАВЕ FeCr

Аннотация.

Актуальность и цели. Стали различных типов являются одними из наиболее распространенных конструкционных материалов ядерных реакторов, планируется их широкое применение в разрабатываемых реакторах нового поколения и реакторах термоядерного синтеза. Также в связи с возрастающими требованиями к способности материалов работать при повышенных температурах и дозных нагрузках возникают задачи выбора и разработки новых конструкционных материалов с повышенной радиационной стойкостью. Несмотря на достаточно большой опыт эксплуатации, вопросы достоверного теоретического описания и предсказания поведения материалов под облучением остаются открытыми.

Материалы и методы. Моделирование каскадов атомных смещений в сплаве FeCr с различными концентрациями хрома проводилось методом молекулярной динамики. Для описания межатомного взаимодействия была использована модифицированная версия многочастичного потенциала, предложенного А. Каро и др. и хорошо воспроизводящего кривую энтальпии смещения случайного ферромагнитного сплава FeCr.

Результаты. Молекулярно-динамическое моделирование проведено в пяти сплавах FeCr (Fe – 5ат.% Cr, Fe – 10ат.% Cr, Fe – 14ат.% Cr, Fe – 20ат.% Cr, Fe – 25ат.% Cr) для температуры 300 К. Рассмотрению подлежали каскады атомных смещений для энергий первично-выбитого атома 10 и 20 кэВ. На основе полученных результатов моделирования проведен количественный анализ образующихся радиационных дефектов, оценено содержание хрома в междоузельных конфигурациях на момент затухания каскада. Также получены результаты по кластеризации точечных дефектов в исследуемых сплавах при первичном радиационном воздействии.

Выводы. Количество радиационных дефектов, образующихся на завершающей стадии развития каскадов атомных смещений для выбранных энергий смещения, практически не зависит от содержания хрома в исходной матрице сплава; концентрация атомов хрома в междоузельных конфигурациях превосходит исходную концентрацию хрома в матрице от 1,6 до 2 раз, увеличение доли хрома в сплаве приводит к постепенному уменьшению его концентрации междоузлиях; доля кластеризованных вакансий с учетом погрешностей практически равна доле кластеризованных междоузельных конфигураций для всех рассмотренных случаев.

Ключевые слова: каскады атомных смещений, метод молекулярной динамики, пара Френкеля.

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

MOLECULAR-DYNAMIC SIMULATION OF ATOMIC DISPLACEMENT CASCADES IN FE-CR ALLOY

Abstract.

Background. High-chromium ferritic–martensitic steels and austenitic steels are primary candidates to be structural materials for present nuclear reactors and future fusion power plants. Increasing demands to the material’s ability to be used at high

temperatures and radiation doses raise a problem of development of new radiation-resistant structural materials. Despite considerable experience in exploitation of such materials, the problems of providing reliable theoretical description and prediction of material's behavior under irradiation still remain a great challenge.

Materials and methods. The simulation of atomic displacement cascades was performed using MD method in FeCr alloy with different Cr concentration. To describe the interatomic interaction the authors used a modified version of many-body interatomic potential, proposed by Caro et al. and well reproducing the mixing enthalpy curve in random ferromagnetic FeCr alloy.

Results. The MD simulation was performed at 300 K for five alloys: FeCr (Fe-5at.%Cr, Fe-10at.%Cr, Fe-14at.%Cr, Fe-20at.%Cr, Fe-25at.%Cr). The atomic displacement cascades are considered for the PKA of 10 and 20 keV. The obtained simulation results allowed to perform a quantitative analysis of produced radiation-induced defects and evaluate Cr concentration in interstitial configurations at the final cascade stage. The results of point defect clusterization induced by the primary radiation damage were obtained for alloys under consideration.

Conclusions. The performed simulation revealed: 1) the number of radiation-induced defects formed at the final cascade stage for the selected displacement energies is almost independent of Cr concentration in initial matrix of the alloy; 2) Cr concentration in interstitial configurations is 1.6–2 times higher than the initial Cr concentration in the matrix. Increasing Cr fraction in the alloy results in a gradual decrease of Cr concentration in interstitials; 3) the part of clustered vacancies is almost equal (within errors in calculations) to the fraction of clustered interstitial configurations for all cases under consideration.

Key words: atomic displacement cascades, molecular dynamics, Frenkels pair.

Введение

В настоящее время одними из перспективных конструкционных материалов для проектируемого реактора синтеза ИТЕР являются ферритомартенситные RAFM-стали с быстроспадающей наведенной активностью 7–10 % Cr-WVTa [1–3]. Известно, что нейтронное облучение инициирует атомные смещения, которые ведут к упрочнению таких сталей [4]. В последние годы опубликовано достаточно большое количество работ, посвященных изучению процессов первичного радиационного повреждения сплавов Fe-Cr (см., например работы [5–10]).

Целью настоящей работы является определение ряда параметров первичной радиационной повреждаемости в сплавах FeCr с учетом процессов рекомбинации и кластеризации точечных дефектов в каскадах смещений для широкого диапазона изменения концентраций Cr в сплаве. Моделирование проведено для пяти сплавов с различным содержанием хрома: Fe – 5 ат.% Cr, Fe – 10 ат.% Cr, Fe – 14 ат.% Cr, Fe – 20 ат.% Cr, Fe – 25 ат.% Cr при температуре 300 К.

1. Межатомное взаимодействие

Для атомистического моделирования сплава FeCr был выбран многочастичный потенциал межатомного взаимодействия, предложенный в работе [11]. Этот потенциал хорошо воспроизводит кривую энтальпии смещения случайного ферромагнитного сплава FeCr, в том числе и в области низких концентраций хрома, где энтальпия отрицательна. Согласно этому потенциалу полная потенциальная энергия системы из N атомов определяется как

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N \left[F_{T_i} \left(\sum_{j \neq i} \rho_{T_j}(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} h_{T_i T_j}(x_{ij}) V_{T_i T_j}(r_{ij}) \right], \quad (1)$$

где E_{tot} – полная потенциальная энергия системы; T_i – тип i -го атома: Fe или Cr; ρ_{T_i} – собственная электронная плотность атома T_i как функция расстояния до его центра; F_{T_i} – функция внедрения; r_{ij} – расстояние между атомами i и j ; $V_{T_i T_j}(r_{ij})$ – парный потенциал; $V_{FeCr} = \frac{V_{FeFe} + V_{CrCr}}{2}$, $h_{T_i T_j}(x) = 1$, если $T_i = T_j$, иначе $h_{T_i T_j}(x)$ – полином Редлиха – Кистера четвертой степени,

$$x_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_i^{Fe}}{\rho_i^{tot}} + \frac{\rho_j^{Fe}}{\rho_j^{tot}} \right), \quad (2)$$

где ρ_i^{Fe} – вклад в электронную плотность в узле i (ρ_i^{tot}) только от атомов железа.

Потенциалы для взаимодействий Fe-Fe и Cr-Cr взяты авторами [11] из работ [12] и [8] соответственно. Параметры полинома $h_{T_i T_j}(x)$ были подобраны так, чтобы близко воспроизвести кривую энтальпии смешения случайного ферромагнитного сплава Fe-Cr, рассчитанную методом *ab initio* из работы [13].

В данной работе вышеупомянутый потенциал межатомного взаимодействия использовался в несколько модифицированном виде, предложенном в работе [6]. Во-первых, потенциал для железа взят из более поздней работы [14]. Во-вторых, в силу моделирования каскадов атомных смещений модифицирована репульсивная часть потенциала для взаимодействий Fe-Cr при относительно небольших ($< 1 \text{ \AA}$) межатомных расстояниях. Для чего слагаемое $h_{FeCr}(x)V_{FeCr}(r)$ в формуле (1) заменено следующей функцией:

$$\overline{V_{FeCr}}(x, r) = h(x)V_{FeCr}^{\text{mod}}(r) + V(r), \quad (3)$$

где

$$V_{FeCr}^{\text{mod}}(r) = \begin{cases} V_{FeCr}(r), & r > r_0, \\ cr^3 + dr^2, & 0 < r \leq r_0, \end{cases} \quad (4)$$

$$V(r) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), & 0 < r \leq r_1, \\ \alpha(r - r_2)^3 e^{\beta r}, & r_1 < r \leq r_2, \end{cases} \quad (5)$$

$V(r)$ – экранированный кулоновский парный потенциал для $r < r_1$.

Длина экранирования a определена согласно работе [15], а функция $\Phi(x)$ – в соответствии с подходом Циглера, Берсака и Литтмарка [16]. Коэффициенты c , d , α и β подбираются из условия непрерывности соответ-

ствующих функций и их первых производных; $r_1 = 1 \text{ \AA}$, r_0 и r_2 – подгоночные параметры. Подгонка проведена под энергии связи смешанных FeCr гантелей внедрений с ориентацией $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, рассчитанных Ольссоном и др. [17] методом *ab initio*. Полученные значения r_0 и r_2 составили 2,22815 и 1,9664 \AA соответственно.

2. Моделирование каскадов атомных смещений в сплаве FeCr

Молекулярно-динамическое моделирование первичного радиационного повреждения бинарного неупорядоченного ОЦК-сплава FeCr проведено для пяти различных концентраций хрома: 5, 10, 14, 20 и 25 %.

Изначально все моделируемые микрокристаллиты (общее количество атомов $\approx 10^6$) были отрелаксированы при температуре 300 К и нулевом давлении в течение 30 пс с шагом интегрирования 1 фс.; далее одному из атомов придавался импульс в соответствии с заданной кинетической энергией в направлении $\langle 135 \rangle$. Всего рассмотрено две энергии первично выбитого атома (ПВА): 10 и 20 кэВ. Расчеты проводились с неравномерным шагом по времени, который выбирался так, чтобы он не превосходил 1 фс и чтобы за один шаг по времени атом с максимальной кинетической энергией смещался не более, чем на 0,02 \AA . Время моделирования каскадов атомных смещений составило около 30 пс., что позволило рассмотреть все стадии развития каскада. При моделировании использованы периодические граничные условия.

На стадии остывания каскада для каждого микрокристаллита проводился подсчет образующихся радиационных дефектов. Для этого каждому узлу i идеальной кристаллической решетки ставится в соответствие ячейка Вигнера – Зейца C_i , которая определяется как множество всех точек пространства, расстояние от которых до узла i (с учетом периодических граничных условий) меньше или равно расстоянию до любого другого узла решетки. Обобщения подобных ячеек известны в математике и физике под названиями ячеек Дирихле и полиэдров Вороного. Отсутствие атомов в ячейке C_i трактуется как вакансия в узле i , попадание более одного атома в ячейку C_i трактуется как наличие внедрений вблизи узла i . Число дефектов определяется как общее количество ячеек Вигнера – Зейца, не содержащих ни одного атома материала. Пример развития дефектной структуры приведен на рис. 1.

Моделирование каскадов атомных смещений в сплаве FeCr показало, что на завершающей стадии каскадов общее число «выживающих» точечных дефектов кристаллической решетки для одной и той же энергии ПВА (рис. 2) изменяется незначительно с ростом концентрации атомов хрома в исходной матрице. Для $E_{\text{ПВА}} = 10$ кэВ количество точечных дефектов приблизительно равно 50*, для $E_{\text{ПВА}} = 20$ кэВ – практически в 2 раза больше, т.е. ≈ 90 . Максимальное число радиационных дефектов образуется при энергии $E_{\text{ПВА}} = 20$ кэВ в сплаве Fe – 25 ат.% Cr (≈ 110 дефектов).

Для рассмотренных энергий ПВА содержание атомов хрома в междоузельных конфигурациях (рис. 3) превышает исходное содержание хрома

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

в матрице приблизительно в 2 раза для сплавов с процентным содержанием Cr от 5–14 и $\approx 1,6$ раза для 20, 25 % Cr.

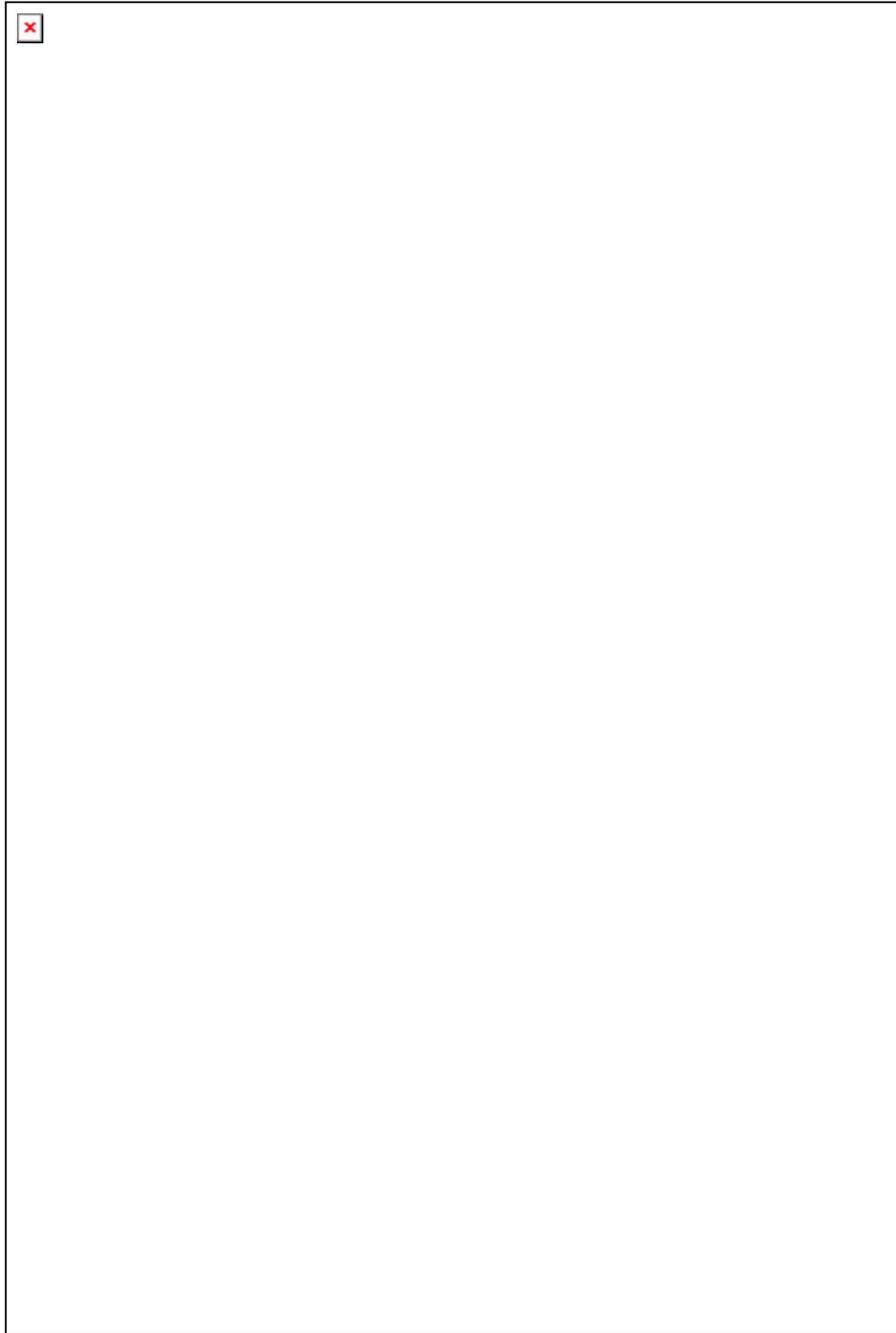


Рис. 1. Пример развития каскадов атомных смещений в бинарном сплаве Fe – 10 ат.% Cr (светлыми окружностями показаны вакансии, темными – собственные междоузельные конфигурации)

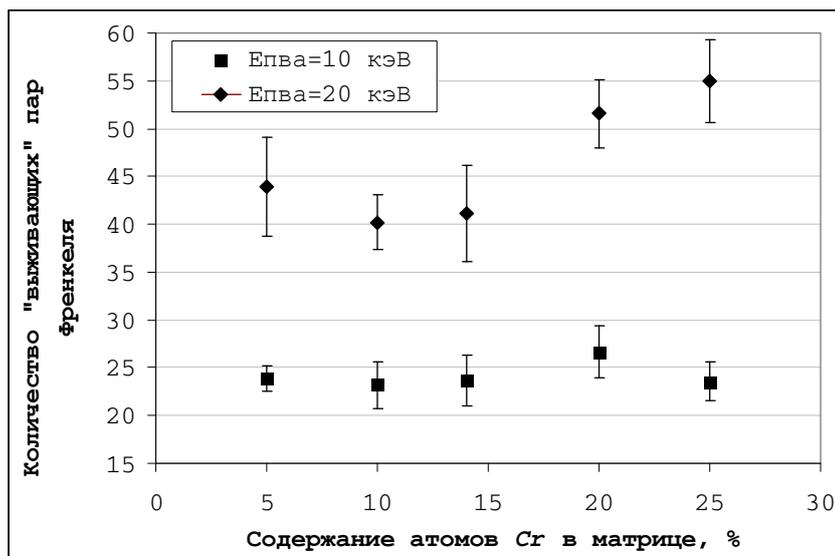


Рис. 2. Количество пар Френкеля на завершающей стадии каскадов атомных смещений в зависимости от концентрации атомов Cr в матрице

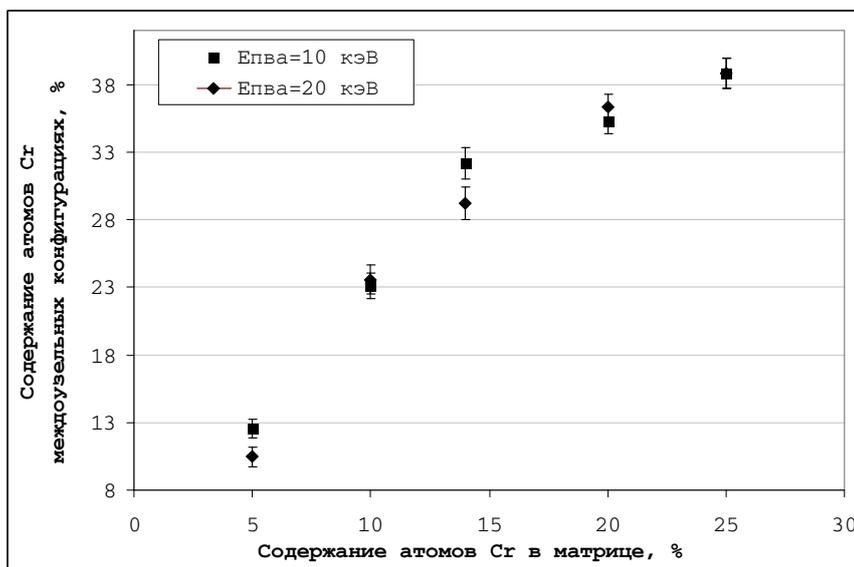


Рис. 3. Содержание атомов Cr в образующихся междоузельных конфигурациях в зависимости от концентрации атомов Cr в матрице

Наблюдаемый эффект объясняется тем, что формирование междоузельных конфигураций смешанного типа энергетически предпочтительнее конфигураций, состоящих из атомов одного сорта. В работе [6] авторами были исследованы каскады атомных смещений в бинарном сплаве Fe – 9 ат.% Cr при температуре 600 К для энергий ПВА 0,1, 0,5, 1, 2, 5, 10, 15 и 20 кэВ; оценка доли атомов Cr в междоузлиях в среднем составила $\approx 22\%$, что количественно согласуется с аналогичным результатом для Fe – 9 ат.% Cr данной работы.

Наряду с оценками числа «выживающих» дефектов также были получены оценки количества, размеров вакансионных и междоузельных кластеров, остающихся в кристаллите после затухания каскада. Дефекты одного типа считали принадлежащими одному кластеру, если соответствующие им узлы решетки находятся на расстоянии не далее вторых ближайших соседей ($2nn$) для вакансий и третьих ($3nn$) ближайших соседей для междоузельных конфигураций.

Для каждого из всех рассмотренных случаев количество междоузельных конфигураций, объединенных в кластеры, оказалось в среднем равным количеству кластеризованных вакансий. Оценки фракций кластеризованных точечных дефектов для рассмотренных концентрации атомов Cr в матрице представлены на рис. 4.

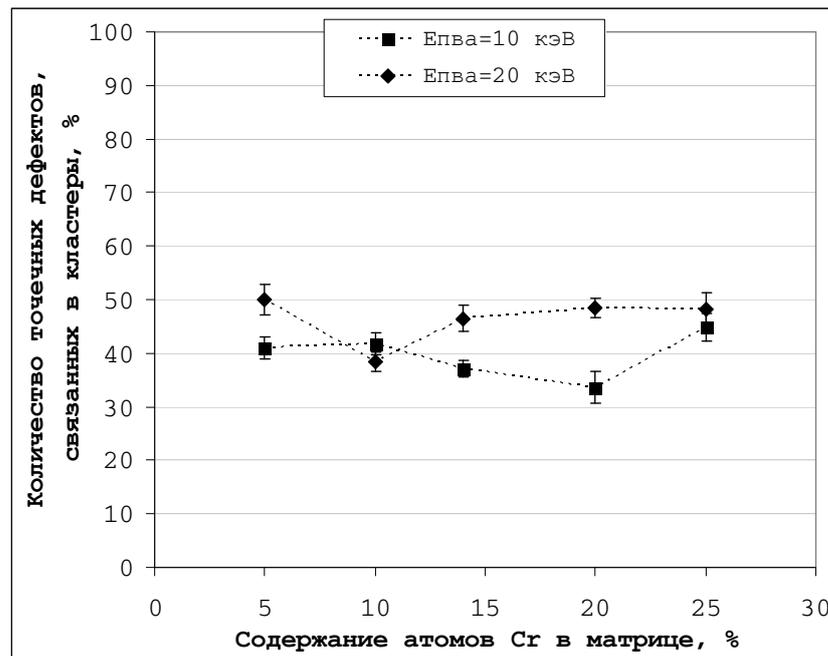


Рис. 4. Доля кластеризованных точечных дефектов в зависимости от концентрации атомов Cr в матрице

От 30 до 50 % «выживающих» точечных дефектов на завершающей стадии каскадов атомных смещений связаны в кластеры. Для энергии первично-выбитого атома 10 кэВ наблюдается *увеличение* доли кластеризованных дефектов до 1,5 раз по сравнению с энергией 20 кэВ. При этом только в сплавах Fe – 10 ат.% Cr и Fe – 25 ат.% Cr для обеих энергий ПВА кластеризуется равная с учетом погрешности доля радиационных дефектов.

С увеличением энергии первично выбитого атома наблюдается увеличение среднего размера кластеров точечных дефектов (рис. 5, 6). Размер кластеров с учетом погрешностей практически не зависит от состава сплава, за исключением Fe – 14 ат.% Cr, для которого при энергии первично выбитого атома 20 кэВ средний размер кластеров междоузельных конфигураций превосходит размер вакансионных кластеров примерно в 1,5 раза.

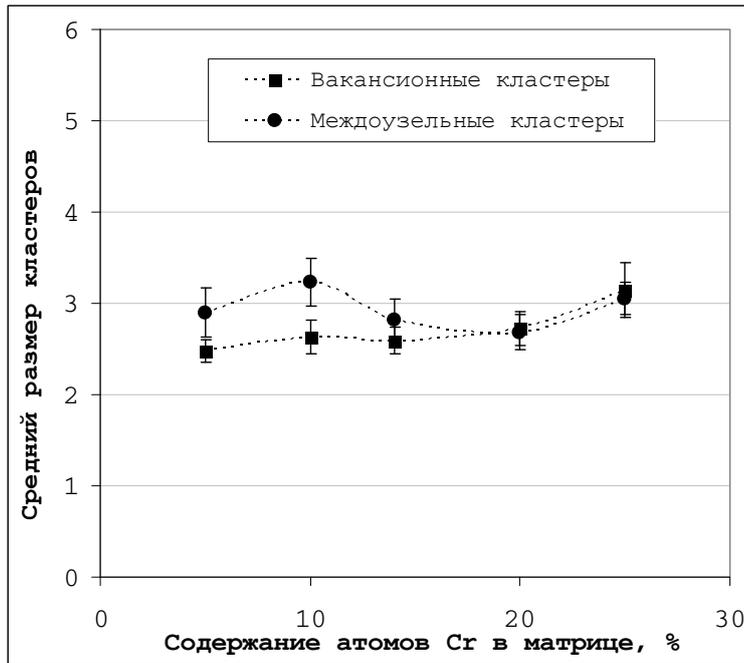


Рис. 5. Средний размер кластеров в зависимости от концентрации атомов Sr в матрице ($E_{\text{ПВА}} = 10 \text{ кэВ}$)

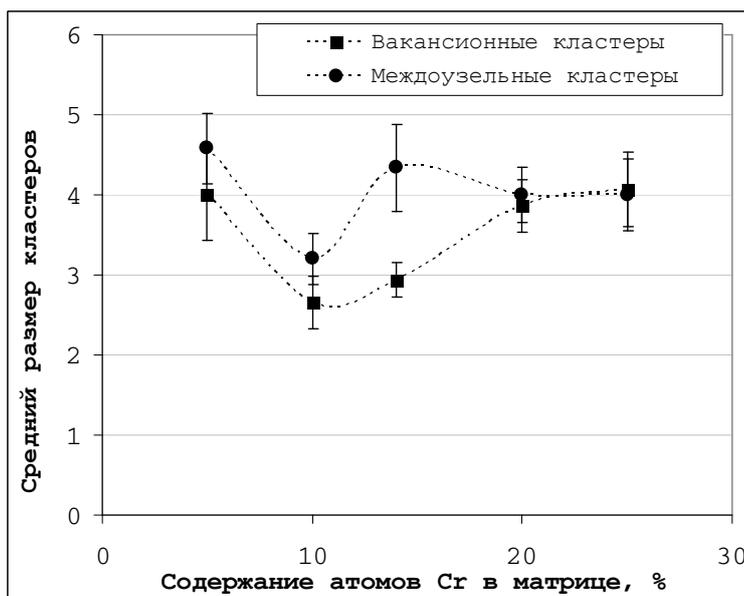


Рис. 6. Средний размер кластеров в зависимости от концентрации атомов Sr в матрице ($E_{\text{ПВА}} = 20 \text{ кэВ}$)

Заключение

В представленной работе путем молекулярно-динамического моделирования рассмотрены процессы первичного радиационного повреждения пя-

ти сплавов FeCr с различным содержанием хрома в матрице. Моделирование проведено при температуре 300 К для двух энергий первично выбитого атома: 10 и 20 кэВ. В расчетах был использован многочастичный потенциал межатомного взаимодействия.

Результаты проведенных расчетов позволили установить, что для энергий первично выбитого атома 10 и 20 кэВ общее число радиационных дефектов, образующихся на завершающей стадии развития каскадов атомных смещений, практически не зависит от содержания хрома в исходной матрице сплава. Для энергии $E_{\text{ПВА}} = 10$ кэВ число «выживающих» точечных дефектов в среднем равно 50, для энергии $E_{\text{ПВА}} = 20$ кэВ составляет в среднем 90 точечных дефектов.

Концентрация атомов хрома в междоузельных конфигурациях во всех рассмотренных микрокристаллитах для обеих энергий ПВА превосходит исходную концентрацию хрома в матрице от 1,6 до 2 раз. При этом увеличение доли хрома в сплаве приводит к постепенному уменьшению его концентрации в собственных междоузельных конфигурациях.

В целом доля кластеризованных точечных дефектов для энергии первично-выбитого атома 10 кэВ оказалась немного выше и составила $\approx 45\%$, по сравнению с каскадами с энергией ПВА 20 кэВ. Более детальный анализ образования кластеров дефектов показал, что во всех рассмотренных сплавах доля кластеризованных вакансий с учетом погрешностей практически равна доле кластеризованных междоузельных конфигураций.

Также в работе оценен средний размер вакансионных и междоузельных кластеров, образующихся после затухания каскадов. Размер кластеров вакансий практически совпадает с размером междоузельных кластеров. Исключением является сплав Fe – 14 ат.% Cr, в котором средний размер вакансионного кластера оказался меньше (примерно в 1,5 раза) для ПВА с энергией 20 кэВ и составляет $2,9 \pm 0,2$. При повышении энергии первично выбитого атома увеличивается размер кластеров дефектов обоих типов около 1,3–1,4 раза.

Список литературы

1. **Gaganidze, E.** Mechanical properties and TEM examination of RAFM steels irradiated up to 70 dpa in BOR-60 / E. Gaganidze, C. Petersen, E. Materna-Morris, C. Dethloff, O. J. Weiß, J. Aktaa, A. Povstyanko, A. Fedoseev, O. Makarov, V. Prokhorov // J. Nucl. Mater. – 2011. – Vol. 417. – P. 93.
2. **Malerba, L.** Multiscale modelling of radiation damage and phase transformations: The challenge of FeCr alloys / L. Malerba, A. Caro, J. Wallenius // J. Nucl. Mater. – 2008. – Vol. 382. – P. 112–125.
3. **Matijasevic, M.** Effect of Cr on the mechanical properties and microstructure of Fe–Cr model alloys after n-irradiation / M. Matijasevic, A. Almazouzi // J. Nucl. Mater. – 2008. – Vol. 377. – P. 147–154.
4. **Mansur, L. K.** Materials needs for fusion, Generation IV fission reactors and spallation neutron sources – similarities and differences / L. K. Mansur, A. F. Rowcliffe, R. K. Nanstad et al. // J. Nucl. Mater. – 2004. – Vol. 329–333. – P. 166–172.
5. **Terentyev, D. A.** Displacement cascades in Fe–Cr. A molecular dynamics study / D. A. Terentyev, L. Malerba, R. Chakarova, K. Nordlund, P. Olsson, M. Rieth, J. Wallenius // J. Nucl. Mater. – 2006. – Vol. 349(1). – P. 119–132.
6. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades near chromium-rich clusters in FeCr alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, E. Gaganidze // J. Nucl. Mater. – 2013. – Vol. 442. – P. S618–S623.

7. **Malerba, L.** Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Fe–Cr alloys / L. Malerba, D. Terentyev, P. Olsson, R. Chakarova, J. Wallenius // *J. Nucl. Mater.* – 2004. – V. 329–333 (Part B). – P. 1156–1160.
8. **Wallenius, J.** Modeling of chromium precipitation in Fe–Cr alloys / J. Wallenius, P. Olsson, C. Lagerstedt, N. Sandberg, R. Chakarova, V. Pontikis // *Physical Review B.* – 2004. – Vol. 69. – P. 94103-1–94103-9.
9. **Shim, J.-H.** Molecular dynamics simulation of primary irradiation defect formation in Fe–10 % Cr alloy / J.-H. Shim, H.-J. Lee, B. D. Wirth // *J. Nucl. Mater.* – 2006. – Vol. 351. – P. 56–64.
10. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades in Fe–10 at. % Cr binary alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze // *J. Nucl. Mater.* – 2009. – Vol. 395. – P. 50–57.
11. **Caro, A.** Classical Many-Body Potential for Concentrated Alloys and the Inversion of Order in Iron-Chromium Alloys / A. Caro, D.A. Crowson, M. Caro // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol. 95(7). – P. 4.
12. **Mendelev, M. I.** Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron / M. I. Mendelev, S. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun, M. Asta // *Phil. Mag.* – 2003. – Vol. 83. – P. 3977–3994.
13. **Olsson, P.** Ab initio formation energies of Fe–Cr alloys / P. Olsson, I. A. Abrikosov, L. Vitos, and J. Wallenius // *J. Nucl. Mater.* – 2003. – Vol. 321. – P. 84–90.
14. **Ackland, G. J.** Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron / G. J. Ackland, M. I. Mendelev, D. J. Srolovitz, S. W. Han, A. V. Barashev // *J. Phys.: Condens. Matter.* – 2004. – Vol. 16. – P. 2629–2642.
15. **Bohr, N.** On the penetration of charged particles through matter / N. Bohr, *Kgl. Dansk. Vid. Selsk. Mat. Fys. Medd.* – 1948. – Vol. 18. – P. 1–141.
16. **Ziegler, J. F.** The stopping and range of ions in solids / J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark. – Vol. 1. – New York : Pergamon Press, 1985. – 321 p.
17. **Olsson, P.** Ab initio study of Cr interactions with point defects in bcc Fe / P. Olsson, C. Domain, J. Wallenius // *Phys. Rev. B.* – 2007. – Vol. 75. – P. 014110-1–014110-12.

References

1. Gaganidze E., Petersen C., Materna-Morris E., Dethloff C., Weiß O. J., Aktaa J., Povstyanko A., Fedoseev A., Makarov O., Prokhorov V. *J. Nucl. Mater.* 2011, vol. 417, p. 93.
2. Malerba L., Caro A., Wallenius J. *J. Nucl. Mater.* 2008, vol. 382, pp. 112–125.
3. Matijasevic M., Almazouzi A. *J. Nucl. Mater.* 2008, vol. 377, pp. 147–154.
4. Mansur L. K., Rowcliffe A. F., Nanstad R. K. et al. *J. Nucl. Mater.* 2004, vol. 329–333, pp. 166–172.
5. Terentyev D. A., Malerba L., Chakarova R., Nordlund K., Olsson P., Rieth M., Wallenius J. *J. Nucl. Mater.* 2006, vol. 349 (1), pp. 119–132.
6. Tikhonchev M., Svetukhin V., Gaganidze E. *J. Nucl. Mater.* 2013, vol. 442, pp. S618–S623.
7. Malerba L., Terentyev D., Olsson P., Chakarova R., Wallenius J. *J. Nucl. Mater.* 2004, vol. 329–333 (Part B), pp. 1156–1160.
8. Wallenius J., Olsson P., Lagerstedt C., Sandberg N., Chakarova R., Pontikis V. *Physical Review B.* 2004, vol. 69, pp. 94103-1–94103-9.
9. Shim J.-H., Lee H.-J., Wirth B. D. *J. Nucl. Mater.* 2006, vol. 351, pp. 56–64.
10. Tikhonchev M., Svetukhin V., Kadochkin A., Gaganidze E. *J. Nucl. Mater.* 2009, vol. 395, pp. 50–57.
11. Caro A., Crowson D. A., Caro M. *Phys. Rev. Lett.* 2005, vol. 95 (7), p. 4.
12. Mendelev M. I., Han S., Srolovitz D. J., Ackland G. J., Sun D. Y., Asta M. *Phil. Mag.* 2003, vol. 83, pp. 3977–3994.

13. Olsson P., Abrikosov I. A., Vitos L. and Wallenius J. *J. Nucl. Mater.* 2003, vol. 321, pp. 84–90.
14. Ackland G. J., Mendeleev M. I., Srolovitz D. J., Han S. W., Barashev A. V. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2004, vol. 16, pp. 2629–2642.
15. Bohr N., Dansk Kgl., Selsk Vid. *Mat. Fys. Medd.* 1948, vol. 18, pp. 1–141.
16. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. *The stopping and range of ions in solids.* Vol. 1. New York: Pergamon Press, 1985, 321 p.
17. Olsson P., Domain C., Wallenius J. *Phys. Rev. B.* 2007, vol. 75, pp. 014110-1–014110-12.

Муралев Артем Борисович

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

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

Muralev Artem Borisovich

Postgraduate student, 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. Капицы, Ульяновский государственный университет (Россия, г. Ульяновск, ул. Льва Толстого, 42)

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

Tikhonchev Mikhail Yur'evich

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

Светухин Вячеслав Викторович

доктор физико-математических наук, профессор, директор научно-исследовательского технологического института имени С. 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, director of Research Technological Institute named after S. Kapitsa, Ulyanovsk State University (42 Lva Tolstogo street, Ulyanovsk, Russia)

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

Муралев, А. Б.

Молекулярно-динамическое моделирование каскадов атомных смещений в сплаве FeCr / А. Б. Муралев, М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2014. – № 1 (29). – С. 156–166.