

УДК 621.039.531.001.57

М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин, Д. В. Козлов, В. Н. Голованов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРВИЧНОЙ РАДИАЦИОННОЙ ПОВРЕЖДАЕМОСТИ СПЛАВА Fe–1.8ат.%Ni МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ¹

Аннотация. Представлены результаты компьютерного моделирования процессов первичной радиационной повреждаемости сплава Fe–1.8ат.%Ni методом молекулярной динамики. Моделирование проведено с использованием многоатомных потенциалов межатомного взаимодействия. Рассмотрены каскады атомных смещений для энергий первично выбитого атома от 0,1 до 20 кэВ. Получены оценки количества дефектов, переживающих рекомбинацию в каскаде, а также результаты по количеству и размерам кластеров вакансий и межузельных атомов, образующихся в таких каскадах. Не выявлено заметного влияния никеля в рассматриваемой концентрации на число точечных дефектов, выживающих в каскаде смещений. В то же время обнаружено, что для энергии 20 кэВ число межузельных атомов, образующих кластеры размером не более трех межузельных атомов на кластер, оказывается в чистом железе примерно в полтора раза выше, чем в сплаве с никелем.

Ключевые слова: радиационная повреждаемость, сплав Fe–Ni, молекулярная динамика, точечный дефект, каскад смещений, кластер точечных дефектов.

Abstract. The results of computer simulation of primary radiation damage processes for Fe–1.8at.%Ni alloy by means of molecular dynamics method are presented in this paper. N-body interatomic potentials were used for the simulation. Atomic displacement cascades for primary knock-out atom energy range from 0,1 to 20 keV were considered. Evaluations of numbers of point defects which survive in cascade as well as results on numbers and sizes of vacancy and interstitial clusters formed in the cascade were obtained. The noticeable influence of nickel in considered concentration on number of surviving defects is not detected. At the same time it is found out that number of interstitial forming clusters, which consist of not more than three interstitials, in pure iron is approximately half as much again than in Fe–Ni alloy.

Keywords: radiation damage, Fe–Ni alloy, molecular dynamics, point defect, displacement cascade, cluster of point defects.

Введение

Метод молекулярной динамики является в настоящее время общепринятым способом моделирования каскадов атомных смещений в конструкционных материалах ядерных и термоядерных установок. Целью такого моделирования является получение качественных и количественных характеристик первичного радиационного повреждения. К настоящему времени различными группами исследователей по всему миру проведено большое количество таких исследований применительно к различным материалам. Особенно много данных получено для чистого α -Fe с использованием различных потенциалов межатомного взаимодействия. Моделирование каскадов в сплавах также широко выполняется, хотя для многокомпонентных систем сохра-

¹ Настоящая работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг., а также при поддержке АВЦП РНПВШ № 2.1.2/5656 и гранта РФФИ – проект № 08-08-97034.

няется проблема подготовки надежных потенциалов. В последние годы опубликовано достаточно большое количество работ, посвященных как подготовке соответствующих потенциалов межатомного взаимодействия, так и проведению такого моделирования (см., например, работы [1–6]).

Данная работа посвящена моделированию каскадов атомных смещений для сплава Fe–1.8ат. %Ni методом молекулярной динамики с целью определения ряда параметров первичной радиационной повреждаемости такого сплава с учетом процессов рекомбинации и кластеризации точечных дефектов в каскадах смещений.

Малолегированные стали с содержанием никеля 1,0–1,9 % типа 15Х2НМФАА используются для изготовления корпусов реакторов типа ВВЭР-1000. Планируется их применение в проектируемых сейчас реакторах ВВЭР-1200 (АЭС 2006/2009) ВВЭР-1500. В результате многочисленных исследований показано, что повышение концентрации никеля значительно понижает радиационную стойкость малолегированных сталей, однако физическая сущность процессов, приводящих к изменению свойств, в настоящее время изучена недостаточно.

1. Потенциалы межатомного взаимодействия

В настоящей работе использовались полуэмпирические многотельные потенциалы межатомного взаимодействия. Для переходных металлов были разработаны несколько схем построения таких потенциалов: метод погруженного атома (МПА) [7], схема Финниса – Синклера [8] и схема Росато – Гвиллопа – Легранда [9]. Несмотря на несколько различные физические интерпретации, все эти методы дают одинаковое аналитическое выражение для полной энергии системы из N частиц:

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i); \quad (1)$$

$$\rho_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \psi(r_{ij}), \quad (2)$$

где E_{tot} – полная энергия системы; в формализме МПА: $F(\rho_i)$ – функция внедрения, определяющая энергию внедрения атома в электронную жидкость плотностью ρ_i ; $\psi(r_{ij})$ – собственная электронная плотность j -го атома как функция расстояния до его центра; $\varphi(r_{ij})$ – парный потенциал взаимодействия между атомами i и j ; r_{ij} – расстояние между атомами i и j .

Для железа в настоящем исследовании для α -Fe мы использовали многотельный потенциал типа Финниса – Синклера из работы Аккланда, Бэкона и др. [10]. Парная часть этого потенциала $\varphi(r)$ состоит из трех частей: равновесной, высокоэнергетической и промежуточной. Равновесная часть парного потенциала предназначена для описания взаимодействий на межатомных расстояниях близких или превосходящих расстояние между ближайшими соседями в равновесном кристалле. Эта часть ($\varphi_{equilibrium}(r)$) может иметь раз-

личные аналитические формы как для атомов разного сорта, так и в зависимости от методов и подходов, используемых при построении потенциала.

Высокоэнергетическая часть описывает взаимодействия между атомами на небольших (как правило, до 0,5–1,5 Å) расстояниях. Эта часть потенциала является репульсивной (т.е. убывающей по r) и описывается в [10] выражением

$$\Phi_{short-dist}(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (3)$$

где Z_i – атомный номер, $i = 1, 2$; e – заряд электрона; ϵ_0 – электрическая постоянная; a определяется здесь согласно приближению Биерсака – Зиглера [11]:

$$a = \frac{0,8856a_0}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}}, \quad (4)$$

$a_0 = 0,529$ Å – радиус Бора, $\Phi(x)$ – функция экранирования:

$$\Phi(x) = 0,1818e^{-3,2x} + 0,5099e^{-0,9423x} + 0,2802e^{-0,4029x} + 0,02817e^{-0,2016x}. \quad (5)$$

Промежуточная часть связывает между собой равновесную и высокоэнергетическую части. В потенциалах, использованных в настоящей работе, промежуточная часть имеет вид

$$\Phi_{join}(r) = e^{(B_0 + B_1 r + B_2 r^2 + B_3 r^3)}, \quad (6)$$

где параметры B_i , $i = 1, 2, 3$, подбираются так, чтобы обеспечить непрерывность функции $\Phi(r)$ и ее первой производной.

При моделировании радиационной повреждаемости (в том числе и в случае только парного взаимодействия) такое разбиение считается сейчас общепринятым (см., например, [12]), хотя разные авторы часто используют другие аналитические выражения для описания частей парного потенциала.

Для описания взаимодействий вида Ni–Ni и Fe–Ni мы использовали потенциал того же типа, предложенный Хепберном, Акландом и Олссоном в их недавней работе [5]. Причем разбиение парных частей соответствующих потенциалов проведено по формулам (3)–(6), т.е. так же, как это сделано для взаимодействий Fe–Fe. Отметим два момента. Во-первых, поскольку используемые потенциалы относятся к типу потенциалов Финниса – Синклера, смешанные взаимодействия Fe–Ni описываются заданием соответствующих функций $\Phi(r)$ и $\Psi(r)$ (в методе погруженного атома смешанные взаимодействия описываются только соответствующей парной частью $\Phi(r)$). Во-вторых, используемые Ni–Ni и Fe–Ni потенциалы предназначены только для описания никеля как примеси замещения в матрице α -Fe с небольшой (до нескольких процентов) концентрацией никеля.

При исследовании процессов первичной радиационной повреждаемости и получении количественных оценок дозы повреждения (см., например, [13]) важную роль играет средняя пороговая энергия смещения. Средняя пороговая энергия смещения для чистого α -Fe с используемым нами потенциалом была рассчитана ранее Нордландом и др. [14] и составила $44,8 \pm 0,4$ эВ. Это значение незначительно (на ≈ 5 эВ) превосходит величину 40 эВ, реко-

мендующую для железа и сталей стандартом ASTM [15]. Нами с использованием выбранных потенциалов рассчитана также величина средней пороговой энергии смещения для Ni как атома замещения в матрице α -Fe. Полученная оценка составила $44,9 \pm 1,35$ эВ, т.е. практически совпадает с пороговой энергией для чистого железа.

2. Моделирование каскадов смещений

Для моделирования каскадов атомных смещений и оценки числа «выживших» дефектов задавались объемно-центрированные кубические (ОЦК) кристаллиты «чистого» α -Fe и бинарного сплава Fe–1.8ат. %Ni, содержащие до ≈ 600000 атомов. При этом атомы Ni в бинарном сплаве задавались как атомы замещения, и расположение атомов разных типов носило случайный характер, т.е. каждому атому кристаллита с вероятностью $p = 0,982$ приписывался тип Fe и с вероятностью $(1 - p)$ – Ni. При расчетах использовались «периодические» граничные условия. Поэтому, чтобы избежать цикличности возмущений вдоль плотноупакованного направления $\langle 111 \rangle$, кристаллиты задавали в форме прямоугольного параллелепипеда, но не куба. Моделирование проводилось при начальной температуре кристаллита $T = 600$ К для восьми различных значений $E_{\text{ПВА}}$ энергии первичного выбитого атома ПВА: 0,1; 0,5; 1; 2; 5; 10; 15 и 20 кэВ. Начальную температуру обеспечивали путем задания начальных скоростей атомам кристаллита с последующим молекулярно динамическим моделированием NPT-ансамбля с нулевым давлением и температурой 600 К в течение 1 пс с шагом по времени 1 фс. Затем фиксированному атому (ПВА) релаксированного кристаллита (это мог быть как атом Fe так и Ni) придавали импульс в некотором направлении. Для каждой энергии ПВА моделировали каскад для восемнадцати различных направлений, которые выбирались путем моделирования случайного изотропного вектора.

В ходе моделирования каскадов никакие алгоритмы сброса кинетической энергии для имитации «остывания» кристаллита не использовались. Рост температуры кристаллита составил от ≈ 16 К для $E_{\text{ПВА}} = 0,1$ кэВ до ≈ 125 К для $E_{\text{ПВА}} = 20$ кэВ. Расчеты проводились с неравномерным шагом по времени, который выбирался так, чтобы он не превосходил 10^{-3} пс и чтобы за один шаг по времени атом с максимальной кинетической энергией смещался не более чем на $0,02 \text{ \AA}$.

Моделируемое время развития каскада подбиралось так, чтобы обеспечить моделирование всего процесса образования и релаксации точечных дефектов в каскаде вплоть до его затухания. Информация по размерам модельного кристаллита и моделируемого времени для рассматриваемых энергий ПВА собрана в табл. 1.

При моделировании каскада смещений периодически проводился анализ кристаллита, подсчитывалось число точечных дефектов, переживших рекомбинацию в каскаде, и определялось среднее число таких дефектов для каждой энергии ПВА. Подсчет дефектов в кристаллите осуществлялся следующим образом. 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. Отсутствие атомов в ячейке C_i трактуется как вакансия в узле i , попадание более одного атома в ячейку C_i трактуется как наличие

межузельного атома вблизи узла i . Число точечных дефектов определяется как общее количество ячеек Вигнера – Зейца, не содержащих ни одного атома материала.

Таблица 1

Размеры кристаллита и моделируемое время

Энергия ПВА, кэВ	Размер кристаллита $l_x \times l_y \times l_z$, Å	Число атомов кристаллита (без учета межузельных атомов С)	Моделируемое время, пс
0,1	69,0072×63,2566×66,1319	24288	10
0,5	109,2614×103,5108×106,3861	101232	12
1	123,6379×117,8873×120,7626	148092	14
2	135,1391×129,3885×132,2638	194580	16
5	155,2662×149,5156×152,3909	297648	20
10	172,518×163,8921×169,6427	403560	24
15	184,0192×178,2686×181,1439	499968	28
20	195,5204×186,8945×192,6451	592280	30

Доля «выживших» дефектов, также известная как «каскадная эффективность», определялась по формуле

$$p(E_{\text{ПВА}}) = \frac{N(E_{\text{ПВА}})}{f(E_{\text{ПВА}})}, \quad (7)$$

где $E_{\text{ПВА}}$ – энергия первично-выбитого атома; $N(E_{\text{ПВА}})$ – рассчитанное среднее число дефектов, «выживающих» в каскаде; $f(E_{\text{ПВА}}) = 0,8 \cdot E_{\text{ПВА}} / (2 \bar{E}_d)$ – количество атомных смещений по NRT-стандарту [13] (без учета неупругих потерь энергии, которые в рассматриваемом интервале энергий ПВА являются незначительными); $\bar{E}_d$ – средняя пороговая энергия смещения. Для средней пороговой энергии смещения мы здесь использовали значение $\bar{E}_d = 40$ эВ, рекомендуемое стандартом ASTM [15].

Полученные усредненные по направлениям импульса ПВА значения $N(E_{\text{ПВА}})$ и $p(E_{\text{ПВА}})$ представлены в табл. 2 и на рис. 1, 2. Из полученных результатов видно, что везде на рассматриваемом интервале энергий наблюдается рост числа дефектов с увеличением $E_{\text{ПВА}}$, в то время как каскадная эффективность в основном убывает с ростом $E_{\text{ПВА}}$. Исключения составляют два «выброса» для сплава Fe–Ni при энергиях 0,5 и 20 кэВ. При этом полученные оценки $N(E_{\text{ПВА}})$ и $p(E_{\text{ПВА}})$ для 0,5 кэВ, по всей видимости, занижены, а для 20 кэВ – немного завышены. Оба «выброса», по всей видимости, носят статистический характер. Отличия в соответствующих оценках для чистого железа и сплава с никелем практически всюду лежат в пределах погрешностей расчета. Из этого можно сделать вывод о том, что присутствие никеля в рассматриваемой концентрации (1.8 ат.%) не оказывает влияния на число выживающих дефектов, а следовательно, и на каскадную эффективность.

Д. Бэкон и др. [16] и С. Вудинг и др. [17] показали, что для металлов зависимость числа выживших дефектов от энергии ПВА хорошо аппроксимируется степенной функцией

$$N(E) = A \cdot E^B. \quad (8)$$

Таблица 2

Количество «выживших» дефектов и каскадная эффективность

$E_{\text{ПВА}},$ кэВ	$\alpha\text{-Fe}$		$\text{Fe-1.8at.\%Ni}$	
	$N(E_{\text{ПВА}})$	$p(E_{\text{ПВА}})$	$N(E_{\text{ПВА}})$	$p(E_{\text{ПВА}})$
0,1	$0,89 \pm 0,22^*$	$0,89 \pm 0,22$	$0,83 \pm 0,37$	$0,83 \pm 0,37$
0,5	$3,22 \pm 0,62$	$0,64 \pm 0,12$	$2,00 \pm 0,46$	$0,40 \pm 0,09$
1	$3,89 \pm 0,90$	$0,39 \pm 0,09$	$4,22 \pm 0,72$	$0,42 \pm 0,07$
2	$6,61 \pm 0,73$	$0,33 \pm 0,04$	$7,33 \pm 1,1$	$0,36 \pm 0,05$
5	$12,5 \pm 2,0$	$0,25 \pm 0,04$	$11,7 \pm 1,9$	$0,23 \pm 0,04$
10	$22,4 \pm 2,2$	$0,22 \pm 0,02$	$19,9 \pm 2,5$	$0,20 \pm 0,03$
15	$32,8 \pm 2,4$	$0,22 \pm 0,02$	$30,6 \pm 3,1$	$0,20 \pm 0,02$
20	$44,9 \pm 3,5$	$0,22 \pm 0,02$	$47,3 \pm 3,6$	$0,24 \pm 0,02$

* Приведенные здесь погрешности соответствуют доверительной вероятности $p = 0,95$ (два σ).

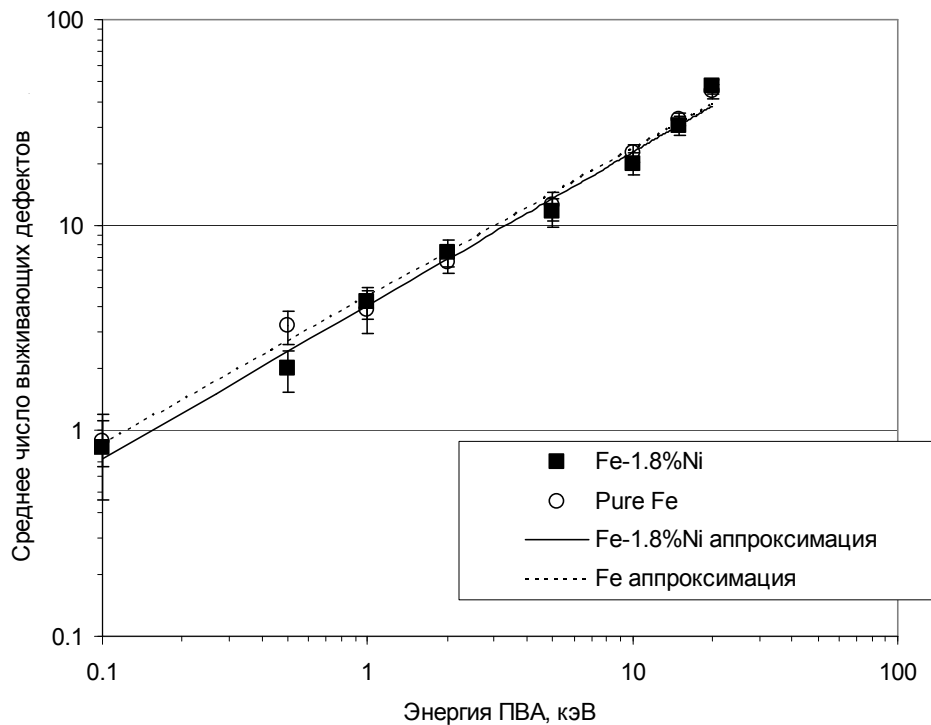


Рис. 1. Рассчитанное среднее число «выживающих» дефектов

Полученные нами результаты также хорошо описываются зависимостями такого вида (см. рис. 1):

$$N(E) = 4,47 \cdot E^{0,72} \text{ для } \alpha\text{-Fe}; \quad (9)$$

$$N(E) = 4,06 \cdot E^{0,75} \text{ для сплава Fe-1.8at.\%Ni}, \quad (10)$$

где E – энергия ПВА в кэВ.

Учитывая (7), из формул (9)–(10) получаем соответствующие аппроксимации для каскадной эффективности $p(E_{\text{ПВА}})$:

$$p(E) = 0,447 \cdot E^{-0,28} \text{ для } \alpha\text{-Fe}; \quad (11)$$

$$p(E) = 0,406 \cdot E^{-0,25} \text{ для сплава Fe-1.8ат.\%Ni}. \quad (12)$$

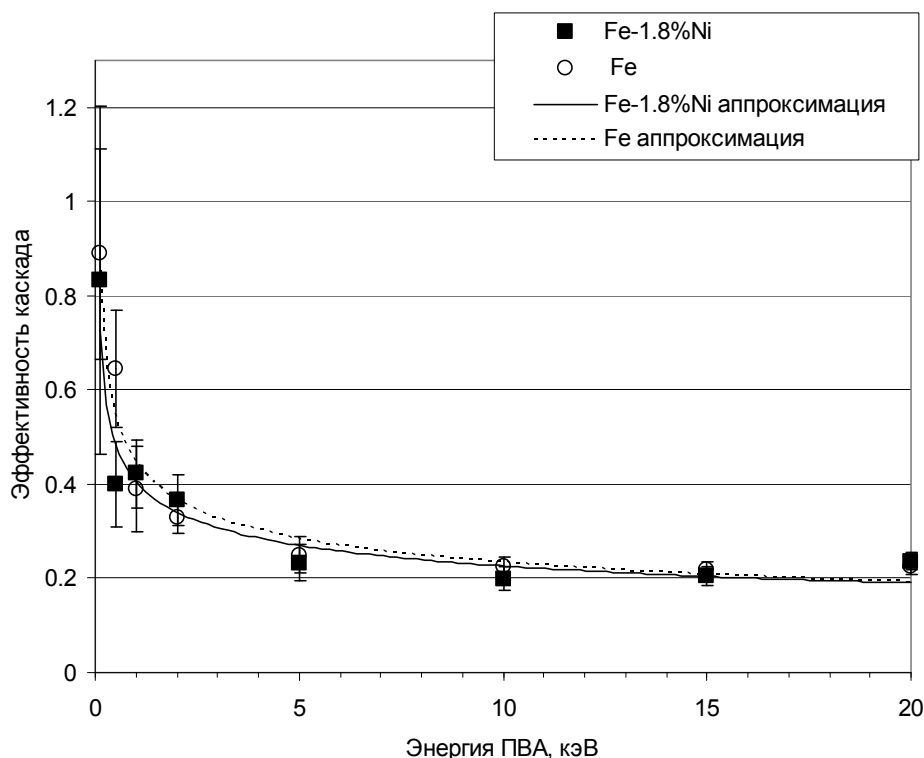


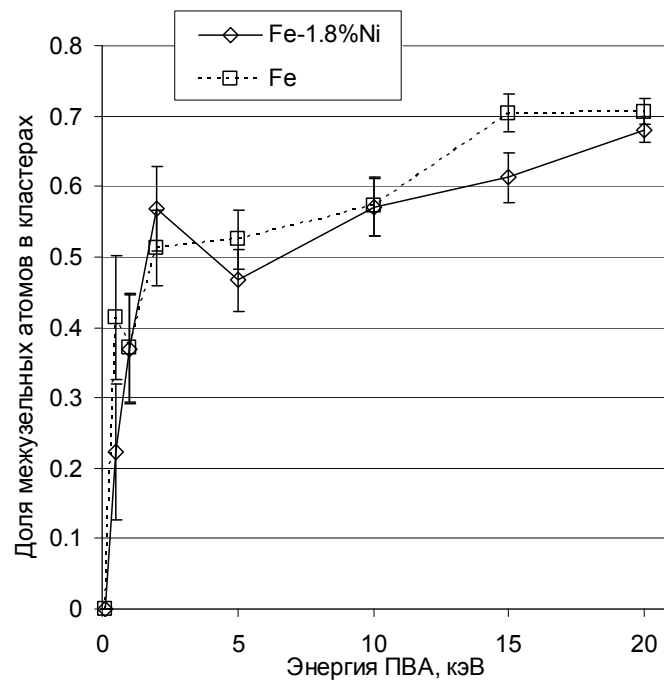
Рис. 2. Каскадная эффективность

Известно, что существенный вклад в микроструктурную эволюцию материала под облучением вносит объединение производимых в нем точечных дефектов в кластеры. При моделировании каскадов смещений мы, наряду с оценкой числа «выживающих» дефектов, получили оценки размеров и количества кластеров вакансий и межузельных атомов Fe и Ni, остающихся в кристаллите после затухания каскада. Дефекты одного типа считали принадлежащими одному кластеру, если соответствующие им узлы решетки находятся на расстоянии, не далее вторых соседей для вакансий и третьих соседей для межузельных атомов.

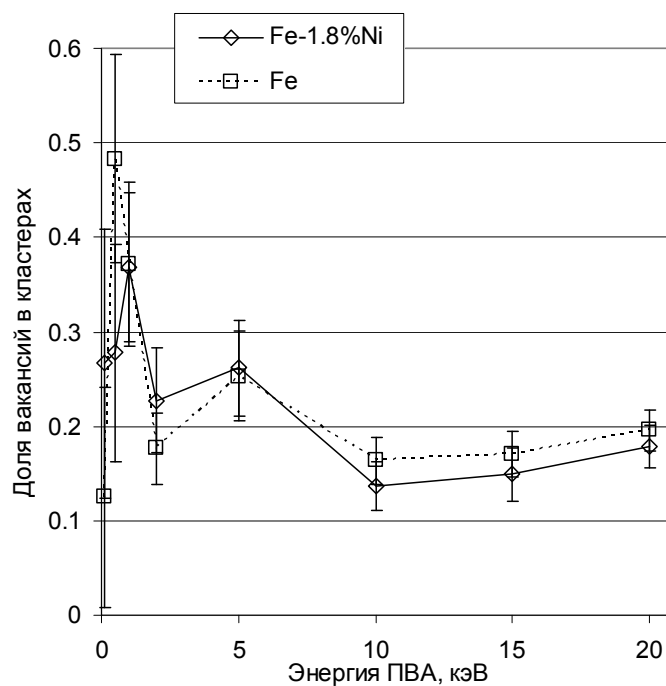
На рис. 3 представлены расчетные оценки доли точечных дефектов, образовавших кластеры на момент завершения моделирования каскада. Хорошо видно, что для обеих рассматриваемых систем количество вакансий, участвующих в процессе кластеризации, при энергиях ПВА до 0,5 кэВ превышает число межузельных атомов, входящих в кластеры. При более высоких энергиях число вакансий в кластерах становится меньше числа образующих кластеры межузельных атомов. Отметим, что для энергий ПВА 10–20 кэВ доля дефектов обоих типов, попадающих в кластеры, для сплава с никелем немного ниже, чем для чистого железа.

На рис. 4, 5 в виде гистограмм даны распределения наблюдаемых кластеров точечных дефектов по размерам на момент завершения моделирова-

ния каскада. Результаты получены усреднением по всем моделируемым каскадам для данной энергии ПВА. Как видно из гистограмм, в каскадах от ПВА энергий 15 и 20 кэВ увеличивается число межузельных атомов, объединяющихся в кластеры довольно больших размеров.

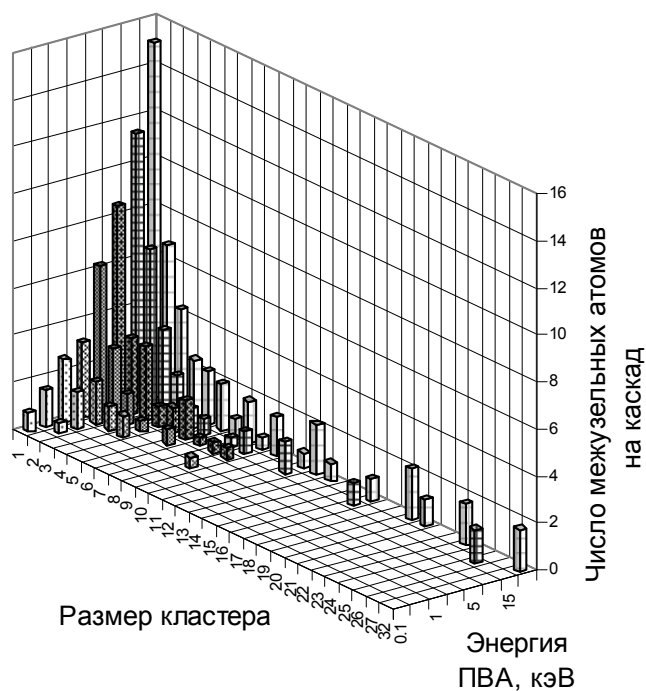


а)

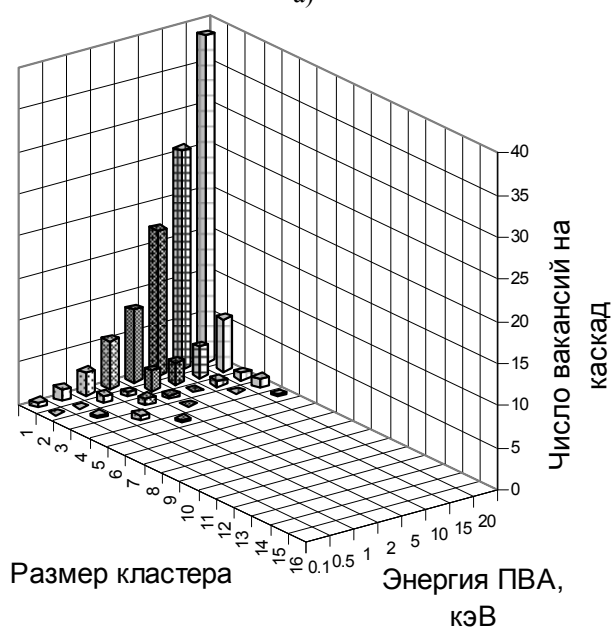


б)

Рис. 3. Доля дефектов, образующих кластеры: а – межузельные атомы; б – вакансии



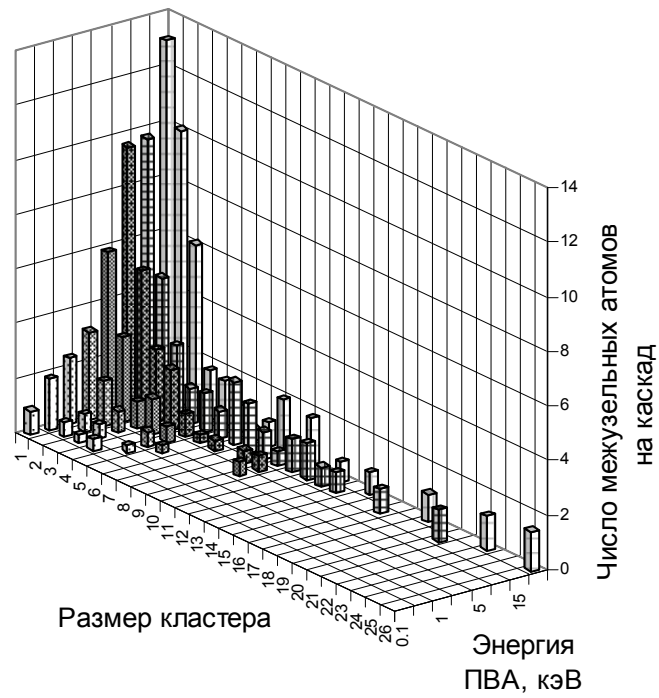
а)



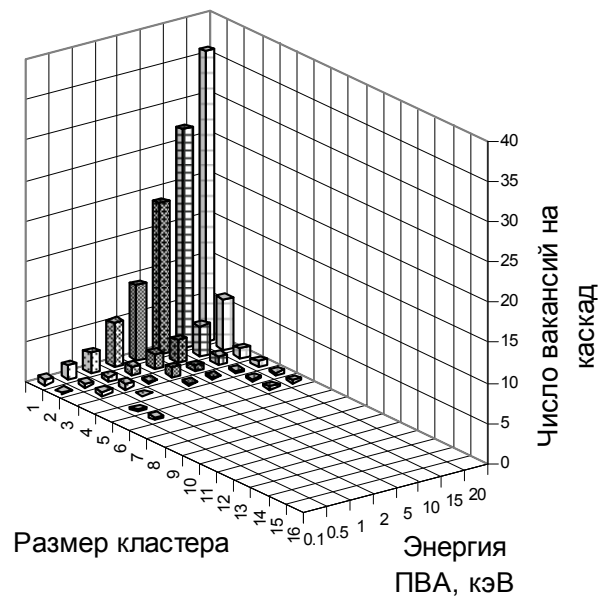
б)

Рис. 4. Число одиночных точечных дефектов и дефектов в кластерах, образующихся в каскадах смещений от ПВА различных энергий: а – межузельные атомы Fe–1.8ат. %Ni; б – вакансии Fe–1.8ат. %Ni

Так, при этих энергиях для сплава Fe–1.8ат. %Ni и однокомпонентного Fe наблюдаются кластеры, содержащие до 32 и 26 межузельных атомов соответственно. Вакансии в обоих рассматриваемых материалах не образуют кластеров больших размеров.



а)



б)

Рис. 4. Число одиночных точечных дефектов и дефектов в кластерах, образующихся в каскадах смещений от ПВА различных энергий:
а – межузельные атомы α -Fe; б – вакансии α -Fe

Максимальные наблюдаемые размеры кластеров вакансий составили пять и шесть вакансий на кластер для сплава Fe-1.8ат. %Ni и α -Fe соответственно. Из представленных результатов следует выделить следующий момент.

Для энергии ПВА 20 кэВ в чистом железе число межузельных атомов, образующих кластеры небольших размеров (2–3 межузельных атома на кластер), примерно в полтора раза выше соответствующего числа межузельных атомов для сплава с никелем. Кластеры таких размеров весьма подвижны, и следует ожидать их существенный вклад в посткаскадную эволюцию структуры облучаемого материала. Влияния никеля на распределение по размерам кластеров вакансий не выявлено.

Заключение

В заключение кратко сформулируем основные результаты работы.

Методом молекулярной динамики проведено моделирование каскадов атомных смещений для сплава Fe–1.8ат. %Ni и однокомпонентного α -Fe. Моделирование проведено для начальной температуры системы 600 К. Получены оценки числа выживающих дефектов для энергий ПВА до 20 кэВ и результаты по размерам и количеству кластеров вакансий и межузельных атомов, образующихся в каскаде смещений.

Полученные зависимости среднего числа выживающих дефектов и каскадной эффективности от энергии ПВА хорошо аппроксимируются степенной функцией. Не выявлено заметного влияния никеля в рассматриваемой концентрации на число точечных дефектов, выживающих в каскаде.

Исследована зависимость каскадной эффективности от энергии ПВА (в диапазоне от 0,1 до 20 КэВ). Наименьшие значения каскадной эффективности наблюдаются для энергий ПВА 10–20 кэВ и составляют $\approx 0,22$ и 0,20–0,24 для α -Fe и сплава Fe–1.8ат. %Ni соответственно.

Согласно полученным оценкам количество вакансий в кластерах лежит выше числа попадающих в кластеры межузельных атомов только для энергий ПВА ниже 0,5 кэВ и ниже – для более высоких энергий, причем для энергий выше 10 кэВ это отличие достигает 3,5 раз. Для энергий ПВА 10–20 кэВ доля дефектов обоих типов, попадающих в кластеры, для сплава с никелем немного ниже, чем для чистого железа.

Получены распределения по размерам кластеров точечных дефектов, образующихся в каскаде. Для энергий ПВА 15 и 20 кэВ наблюдается существенное увеличение числа межузельных атомов, объединяющихся в кластеры больших размеров. Вакансии в обоих рассматриваемых материалах не образуют кластеров больших размеров. Обнаружено, что для энергии ПВА 20 кэВ в чистом железе число межузельных атомов, образующих кластеры размером не более трех атомов на кластер, примерно в полтора раза выше соответствующего числа межузельных атомов для сплава с никелем. Это может свидетельствовать об образовании под облучением меньшего числа свободно мигрирующих дефектов в сплаве Fe–1.8ат. %Ni, чем в однокомпонентном α -Fe.

Полученные результаты предполагается использовать в дальнейшем для развития моделей радиационного повреждения материалов корпусов ядерных реакторов с водой под давлением на основе многомасштабного подхода.

Список литературы

1. **Malerba, L.** Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Fe–Cr alloys / L. Malerba, D. Terentyev, P. Olsson, R. Chakarova, J. Wallenius // Journal of Nuclear Materials. – 2004. – V. 329–333. – Part. 2. – P. 1156–1160.

2. **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. // *Journal of Nuclear Materials*. – 2006. – V. 349 (1). – P. 119–132.
3. **Wallenius, J.** Modeling of chromium precipitation in Fe-Cr alloys / J. Wallenius, P. Olsson, C. Lagerstedt, N. Sandberg, R. Chakarova, and V. Pontikis // *PHYSICAL REVIEW B*. – 2004. – V. 69. – P. 94103-1–94103-9.
4. **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 // *Journal of Nuclear Materials*. – 2006. – V. 351 (1–3). – P. 56–64.
5. **Hepburn, D. J.** Rescaled potentials for transition metal solutes in α -iron / D. J. Hepburn, G. J. Ackland and P. Olsson // *Philosophical Magazine*. – 2009. – V. 89. – № 34–36. – P. 3393–3412.
6. **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.
7. **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. – V. 29. – P. 6443–6453.
8. **Finnis, M. F.** A simple empirical N-Body potential for transition metals / M. F. Finnis, J. E. Sinclair // *Philos. Mag.*, A. – 1984. – V. 50. – P. 45–55.
9. **Rosato, V.** Thermodynamical and structural-properties of FCC transition-metals using a simple tight-binding model / V. Rosato, M. Guelloppé, B. Legrand // *Philos. Mag. A*. – 1989. – V. 59. – № 2. – P. 321–336.
10. **Ackland, G. J.** Computer simulation of Point Defect Properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential / G. J. Ackland, D. J. Bacon, A. F. Calder, T. Harry // *Philosophical Magazine A*. – 1997. – V. 75. – P. 713–732.
11. **Biersack, J. P.** Refined universal potentials in atomic collisions / J. P. Biersack, J. F. Ziegler // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*. – 1982. – V. 194. – P. 93–100.
12. **Nordlund K.** Molecular dynamics: introduction / K. Nordlund // *International School on Modelling of Irradiation Damage (Auberge de la Ferme, Rochehaut, Belgium, 1–5 October 2007) : collected lectures on CD*. – Rochehaut : SCK-SEN, 2007.
13. **Norgett, N. J.** The proposed method of displacement dose rate calculation / N. J. Norgett, M. T. Robinson, I. M. Torrens // *Nucl. Eng. And Design*. – 1975. – V. 33. – P. 50–56.
14. **Nordlund, K.** Molecular dynamics simulations of threshold displacement energies in Fe / K. Nordlund, J. Wallenius, L. Malerba // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B*. – 2006. – V. 246 (2). – P. 322–332.
15. ASTM E521, (E521-89) Practice for Neutron Radiation Damage Simulation by Charged-Particle Irradiation. Annual Book of ASTM Standards. – 1995. – V. 12.02.
16. **Bacon, D. J.** Computer simulation of displacement cascade effects in metals / D. J. Bacon, A. F. Calder, F. Gao // *Rad. Eff. Def. – Sol.* 141. – 1997. – P. 283–310.
17. **Wooding, S. J.** A computer simulation study of displacement cascades in α -titanium / S. J. Wooding, D. J. Bacon, W. J. Phythian // *Philos. Mag. A* 72. – 1995. – P. 1261–1279.

Тихончев Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук,
начальник лаборатории, Ульяновский
государственный университет

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

Tikhonchev Mikhail Yuryevich

Candidate of physical and mathematical
sciences, head of laboratory,
Ulyanovsk State University

Светухин Вячеслав Викторович

доктор физико-математических наук,
профессор, директор научно-
исследовательского технологического
института Ульяновского
государственного университета

E-mail: slava@sv.uven.ru

Svetukhin Vyacheslav Viktorovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, director
of the research technological institute
under Ulyanovsk State University

Голованов Виктор Николаевич

доктор физико-математических наук,
профессор, проректор по науке
и информационным технологиям,
Ульяновский государственный
университет

E-mail: golovanovvn@ulsu.ru

Golovanov Viktor Nikolaevich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, vice rector for scientific
affairs and information technologies,
Ulyanovsk State University

Козлов Дмитрий Владимирович

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник,
Ульяновский государственный
университет

E-mail: kozlovdv@ulsu.ru

Kozlov Dmitry Vladimirovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, senior staff scientist,
Ulyanovsk State University

УДК 621.039.531.001.57

Тихончев, М. Ю.

Моделирование процессов первичной радиационной повреждаемости сплава Fe–1.8ат.%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.