

# Каскады атомных соударений в сплавах на основе ванадия при радиационном воздействии

Д.С. КРЫЖЕВИЧ

*ИФПМ СО РАН*

e-mail: kryzhev@ispms.tsc.ru

К.П. ЗОЛЬНИКОВ

e-mail: kost@ispms.tsc.ru

А.В. КОРЧУГАНОВ

e-mail: avkor@vtomske.ru

С.Г. ПСАХЬЕ

e-mail: sp@ispms.tsc.ru

Проведено исследование генерации дефектов структуры, вызванных каскадами атомных смещений, в сплавах на основе ванадия. Моделирование проводилось на основе метода молекулярной динамики с использованием многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, рассчитанного в рамках метода погруженного атома. Показаны некоторые основные характеристики развития каскадов атомных смещений в сплаве V-4Ti-4Cr, содержащим межзеренную границу.

## 1. Введение

Изучение радиационной стойкости металлов и сплавов невозможно без детального исследования процесса формирования и накопления структурных повреждений. Отметим, что первичным проявлением радиационного воздействия на материал является генерация каскадов атомных смещений, которые ведут к формированию радиационных структурных дефектов и изменению физико-механических свойств материала. Моделирование каскадов атомных смещений, анализ образующихся дефектов, изучение их эволюции и формирование относительно устойчивых радиационных дефектов, как правило, проводится для материалов с идеальной структурой [1, 2, 3, 4]. Однако, известно, что наличие протяженных границ раздела может оказать существенное воздействие на многие свойства материала [5, 6, 7, 8]. Экспериментальное изучение процессов генерации каскадов атомных смещений чрезвычайно затруднительно, поэтому моделирование является наиболее подходящим способом получения знаний о первичных радиационных процессах, происходящих в материале при облучении.

В данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование влияния межзеренных границ на характер развития каскадов атомных смещений и формирование радиационных дефектов в сплавах V-4Ti-4Cr. Выбор сплавов на основе ванадия в качестве объекта исследования обусловлен тем, что они являются одними из наиболее перспективных в атомной энергетике: они являются малоактивируемыми, характеризуются высоким интервалом рабочих температур и хорошими прочностными характеристиками.

## 2. Формализм расчетов

Молекулярно динамические вычисления проводились на основе программы Lammmps, разработанной в Sandia National Laboratories министерства энергетики США, представленной на <http://lammmps.sandia.gov>. Для описания межатомного взаимодействия в кристаллитах на основе ванадия был использован межатомный потенциал, рассчитанный в рамках модифицированного метода погруженного атома (meam) [9]. Используемый потенциал позволяет с достаточно высокой точностью описывать характеристики важные при моделировании каскадов атомных соударений, таких как параметр решетки, упругие модули, энергии образования и миграции точечных дефектов и т.д.

Для учета влияния интерфейсов в данной работе моделировались кристаллиты, содержащие межзеренную границу специального типа, позволяющую использовать периодические граничные условия [10].

При моделировании каскадов атомных смещений использовались периодические граничные условия. Выбор размера моделируемого кристаллита зависел от величины энергии первично-выбитого атома (ПВА). В настоящих расчетах число атомов в расчетной ячейке менялось от 100 000 (для низких значений энергии ПВА) до 1 450 000 (для больших энергий ПВА). Анализ поврежденности моделируемого кристаллита проводился путем учета количества пар Френкеля, сформированных каскадом. Пара Френкеля определялась как межузельный атом и ближайшая к нему устойчивая вакансия.

## 3. Каскады атомных смещений в сплаве с идеальной структурой

По аналогии с [11] моделируемые кристаллиты, перед генерацией в них каскадов атомных смещений, релаксировались при температуре 10 К. Направление исходной скорости ПВА задавалось вдоль кристаллографического направления [100]. Результаты расчетов показывают, что стадийность изменения числа радиационных дефектов близка к той, что наблюдалась в кристаллитах ванадия [11]. Изменение числа дефектов в образце V-4Ti-4Cr с идеальной структурой в зависимости от времени показано на Рис. 1. Границы стадий развития каскада отмечены вертикальными линиями на кривой данного рисунка.

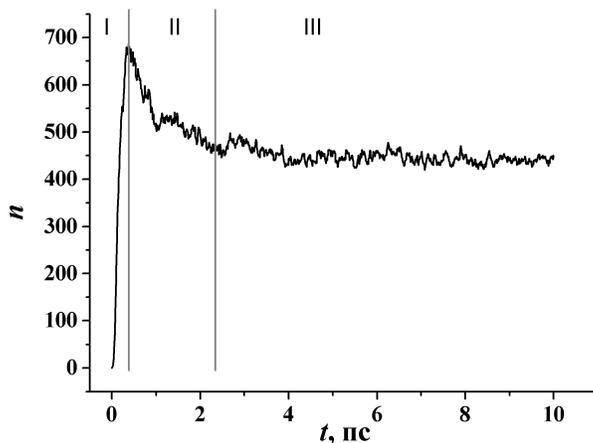


Рис. 1. Изменение числа точечных дефектов ( $n$ ) от времени ( $t$ ) для энергии ПВА 1 кэВ. I – баллистическая стадия развития каскада; II – рекомбинационная; III – основное состояние

Основными характеристиками каскада атомных соударений являются: 1) максимальное значение числа генерируемых дефектов; 2) время достижения “пика” (максимального значения числа генерируемых дефектов); 3) объем поврежденной области; 4) плотность каскада (число дефектов на единицу объема каскадной области для времени “пика”); 5) число дефектов в основном состоянии. Все эти характеристики в кристаллите с идеальной структурой зависят от величины и кристаллографического направления импульса ПВА и температуры кристаллита.

#### 4. Влияние межзеренных границ на развитие каскадов атомных смещений

Симметрично наклонные или двойниковые границы зерен, образующиеся из двух кристаллов с зеркально симметричной структурой, являются наиболее удобными для моделирования среди всех межзеренных границ. В настоящей работе исследовалось развитие каскадов атомных смещений вблизи межзеренной границы  $\Sigma 13 [320](001)$ , структура которой показана на Рис. 2.

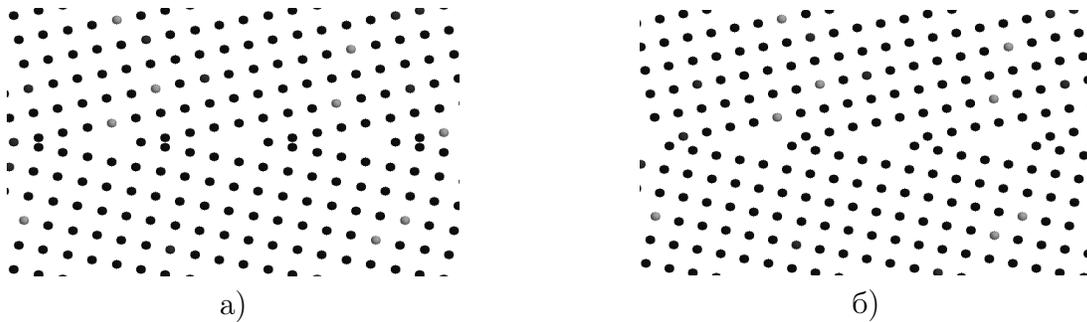


Рис. 2. Проекция симметричной наклонной границы на плоскость (001) для границы зерна типа  $\Sigma 13$ : а) до релаксации; б) после релаксации

После релаксации бикристалла только несколько атомных слоев вблизи границы не лежат в узлах кристаллических решеток. Эти смещенные атомы определяют зернограничную область. Атомы вдали от этой области сохраняют симметрию относительно границы.

Расчеты для кристаллитов, содержащих межзеренную границу, проводились для энергий ПВА от 1 до 15 кэВ, при этом импульс ПВА был направлен по нормали к границе. Расстояние между границей и ПВА составляло 20 Å во всех расчетах. Особенности развития каскадов атомных смещений в материалах с границами раздела во многом схожи с аналогичными процессами в образцах с идеальной структурой. В частности, наибольшее количество дефектов в обоих случаях генерируется в первую пикосекунду (Рис. 3а). За этот интервал времени энергия ПВА практически полностью передается моделируемому образцу (баллистическая стадия). По истечении этого отрезка времени число сгенерированных дефектов идет на убыль (рекомбинационная стадия). Расчеты показали, что момент времени, при котором происходит стабилизация числа радиационных дефектов (основное состояние), зависит от энергии ПВА (Рис. 3а).

Время “пик”, как функция энергии ПВА, приведена на Рис. 3б. Изменение скорости роста времени “пик”, по-видимому, связано с расщеплением основного каскада на субкаскады, которые инициируются вторично выбитыми атомами с энергией меньшей,

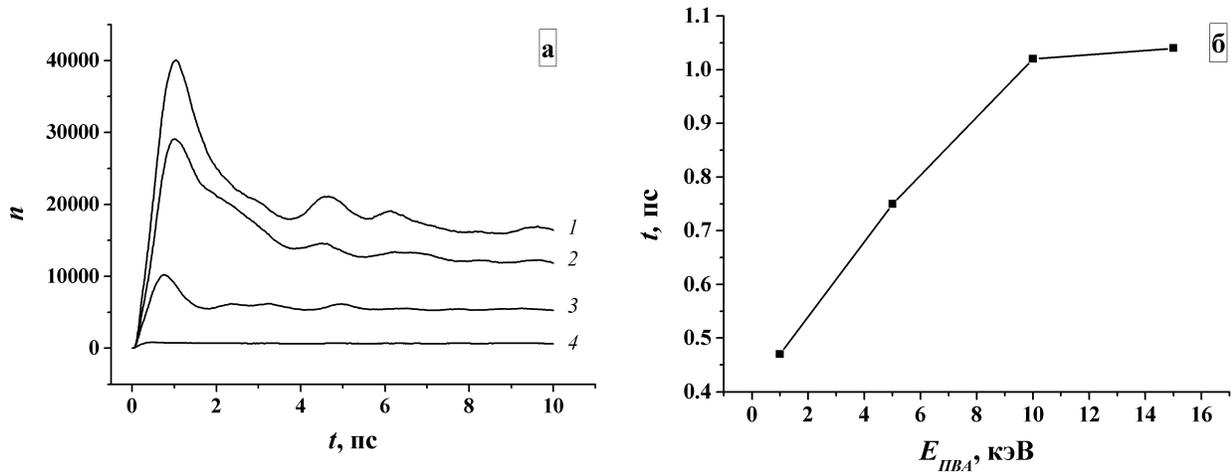


Рис. 3. Изменение числа точечных дефектов ( $n$ ) от времени для различных энергий ПВА (а): 1 – 15 кэВ, 2 – 10 кэВ, 3 – 5 кэВ, 4 – 1 кэВ. Зависимость времени “пик” ( $t$ ) от энергии ПВА (б)

чем энергия ПВА. Эти вторично выбитые атомы формируют каскады с меньшими временами “пик”, чем основной каскад.

Максимальное количество дефектов в области каскада атомных смещений в зависимости от энергии ПВА приведено на Рис. 4а. Эта зависимость имеет практически линейный характер, при этом число дефектов в каскаде возрастает с ростом энергии каскада. Аналогичным образом ведет себя зависимость числа радиационных дефектов в основном состоянии от энергии ПВА (Рис. 4б).

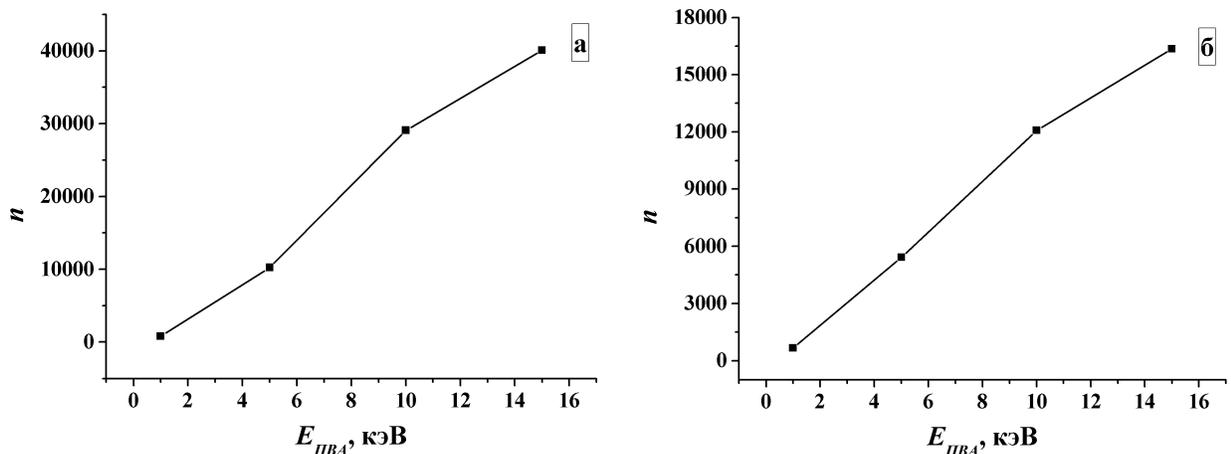


Рис. 4. Зависимость максимального числа точечных дефектов (а) и числа точечных дефектов в основном состоянии (б) от энергии ПВА, где  $n$  – число дефектов

Расчеты показали, что в сплаве V-4Ti-4Cr, как и в чистом ванадии [11], радиационные дефекты в значительной степени аккумулируются в области межзеренной границы. Отметим, что межзеренные границы препятствуют распространению каскадов атомных смещений по другую сторону границы, и их можно рассматривать как своеобразные барьеры радиационной повреждаемости материалов.

Работа выполнена в рамках интеграционного проекта СО РАН №51.

## Список литературы

- [1] ALONSO E., CATURLA M.-J., DIAZ DE LA RUBIA T., PERLADO J.M. Simulation of damage production and accumulation in vanadium // *Journal of Nuclear Materials*. 2000. Vol. 276, P. 221–229.
- [2] SOUIDI A., BECQUART C.S., DOMAIN C., TERYTYEV D., MALERBA L., CALDER A.F., BACON D.J., STOLLER R.E., OSETSKY YU.N., HOU M. Dependence of radiation damage accumulation in iron on underlying models of displacement cascades and subsequent defect migration // *Journal of Nuclear Materials*. 2006. Vol. 355. P. 89–103.
- [3] BACON D.J., GAO F., OSETSKY YU.N. Computer simulation of displacement cascades and the defects they generate in metals // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 1999. Vol. 153. P. 87–98.
- [4] OSETSKY YU.N., BACON D.J. Defect cluster formation in displacement cascades in copper // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 2001. Vol. 180. P. 85–90.
- [5] JAVIER PEREZ PEREZ F., SMITH R. Modelling radiation defects at grain boundaries in bcc iron // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 1999. Vol. 153. P. 136–141.
- [6] SUGIO K., SHIMOMURA Y., DIAZ DE LA RUBIA T. Computer Simulation of Displacement Damage Cascade Formation near Sigma 5 Twist Boundary in Silver // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1998. Vol. 67, N 3. P. 882–889.
- [7] КОЛОВОВ Ю.Р., ГРАВОВЕЦКАЯ Г.П., ИВАНОВ К.В., ГИРЦОВА Н.В. Влияние состояния границ размера зерен на механизмы ползучести субмикроструктурного никеля // *Физика металлов и металловедение*. 2001. Т. 91, № 5. С. 107–112.
- [8] *Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов* / КОЛОВОВ Ю.Р, ВАЛИЕВ Р.З., ГРАВОВЕЦКАЯ Г.П. и др. Новосибирск: Наука, 2001.
- [9] BASKES M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // *Phys. rev. B*. 1992. Vol. 46, N 5. P. 2727–2742.
- [10] SUZUKI A., MISHIN Y. Atomistic Modeling of Point Defects and Diffusion in Copper Grain Boundaries // *Interface science*. 2003. Vol. 11, N 1. P. 131–148.
- [11] ПСАХЬЕ С.Г., ЗОЛЬНИКОВ К.П., КРЫЖЕВИЧ Д.С., ЖЕЛЕЗНЯКОВ А.В., ЧЕРНОВ В.М. Развитие каскадов атомных соударений в кристалле ванадия с внутренней структурой // *Кристаллография*. 2009. Т. 54, № 6. С. 1053–1062.