

лый ряд учреждений Национальной академии наук и промышленных предприятий Беларуси: Институт механики металлополимерных систем, Объединенный институт машиностроения; «КБТМ СО», Физико-технический институт, Институт порошковой металлургии НАН Беларуси. Работа белорусской стороны выполняется в тесном сотрудничестве с организациями России: постановщиком космиче-

ского эксперимента — Центральным научно-исследовательским институтом машиностроения; разработчиком аппаратуры — Институтом проблем механики РАН; Научно-производственным объединением им. С.А. Лавочкина; Ракетно-космической корпорацией «Энергия» им. С.П. Королева; Научно-исследовательским институтом космических проблем им. А.А. Максимова.

#### Литература

1. Имитатор трения / Н.Е. Богорад [и др.] // Современные методы и средства измерения внешнего трения: сб. науч. трудов. — М.: НИИ ФТРИ, 1977. — С. 8–10.
2. Ярош, В.М. Исследование материалов на трение и износ в открытом космическом пространстве и на орбите вокруг Луны / В.М. Ярош, А.А. Моишев, М.А. Броневец // Трение и износ. — 2003. — Т. 24. — № 6. — С. 626–635.
3. Мышкин, Н.К. Разработка оборудования для выполнения космического эксперимента «Материал – Трение» / Н.К. Мышкин, А.Я. Григорьев, М.А. Броневец // Труды Второго белорусского космического конгресса; Минск, 25–27 окт. 2005 г. — С. 50–54.
4. Разработка материалов и покрытий для космической техники, экспериментального оборудования, методик и программного обеспечения для проведения триботехнических испытаний / Н.К. Мышкин [и др.] // Трение и износ. — 2004; спец. выпуск. — С. 4–27.
5. Наземные и бортовые испытания материалов на трение в космосе / Н.К. Мышкин [и др.] // Информатика, 2007. — № 3. — С. 41–50.

УДК: 544.022.342 + 544.022.344.2 + 544.032.6

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В МЕТАЛЛАХ

*С.Г. Псахье, К.П. Зольников, Д.С. Крыжевич, А.В. Корчуганов*

*Учреждение Российской академии наук Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН  
г. Томск, Россия*

### Введение

Эволюция структурных повреждений в материалах в условиях радиационного облучения представляет значительный интерес с точки зрения долговременных предсказаний изменений их механических свойств. Одним из основных проявлений радиационного воздействия на материал является генерация каскадов атомных смещений, что ведет к формированию структурных дефектов и изменению физико-механических свойств

материала. Отметим, что моделирование каскадов атомных смещений, анализ образующихся дефектов, изучение их эволюции и формирование относительно устойчивых радиационных дефектов, как правило, проводится для материалов с идеальной структурой [1–4]. Однако хорошо известно, что наличие протяженных границ раздела может оказать существенное воздействие на многие свойства материала [5, 6]. В частности, присутствие протяженных границ раздела, например

межзеренных, может оказать влияние не только на особенности зарождения радиационных дефектов, но и на характер их накопления и последующие процессы деградации механических свойств материала [7, 8].

В связи с вышесказанным в данной работе проведено молекулярно-динамическое моделирование влияния межзеренных границ на характер развития каскадов атомных смещений и формирование радиационных дефектов в кристаллитах ванадия. Для исследований были выбраны наклонные симметричные границы, отличающиеся между собой энергией. Выбор кристаллитов ванадия в качестве объекта исследования обусловлен тем, что сплавы на основе ванадия сегодня являются одними из наиболее перспективных в атомной энергетике. В рамках поставленной задачи изучалось влияние удаленности первично выбитого атома (ПВА) от границы зерна (ГЗ) на характер развития каскадов.

#### 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 ванадия был использован межатомный потенциал, рассчитанный в рамках приближения Финниса-Синклера (Finnis-Sinclair), предоставленный Менделевым М.И. и также представленный на <http://lammmps.sandia.gov>. Используемый потенциал был протестирован и показал достаточно высокую точность описания характеристик важных при моделировании каскадов атомных соударений, таких как параметр решетки, упругие модули, энергии образования и миграции точечных дефектов и т. д.

Моделируемые кристаллиты содержали наклонные симметричные границы двух типов:  $\Sigma 13$  (320)[001] и  $\Sigma 17$  (410)[001]. Выбор данных типов границ обусловлен тем, что наклонные симметричные границы в виду периодичности их структуры позволяют использовать периодические граничные условия. Отметим, что данные межзеренные границы строились по алгоритму, приведенному в работе [9].

Для моделирования каскадов атомных смещений в данной работе использовались периодические граничные условия. Выбор размера моделируемого кристаллита зависел от величины энергии ПВА. В настоящих расчетах число атомов в расчетной ячейке менялось от 65 000 (для значе-

ний энергии ПВА меньших 500 эВ) до 450 000 (для энергий ПВА больших 500 эВ).

В процессе моделирования, используя специальные средства визуализации, анализировалась эволюция зон повреждения с целью выявления возможного перекрытия различных частей каскада. Анализ был основан на общих соображениях о перекрытии частей каскада, поскольку до настоящего времени не существует однозначного критерия для определения каскадного перекрытия. Анализ поврежденности моделируемого кристаллита проводился с учетом количества пар Френкеля и заселенности кластеров, сформированных каскадом [2]. При моделировании каскадов атомных смещений точечные дефекты могут возникать в непосредственной близости друг от друга. Если расстояние между ближайшими точечными дефектами меньше некоторого порогового расстояния, то они считаются принадлежащими одному кластеру. В данной работе пороговое расстояние полагалось равным радиусу второй координационной сферы в идеальной решетке ванадия [2].

#### Каскады атомных смещений в идеальной решетке ванадия

Моделируемые кристаллиты ванадия перед генерацией в них каскадов атомных смещений, релаксировались при температуре 10 К. Сразу после инициирования ПВА в образце начинает развиваться «цепная» последовательность атомных смещений. Число смещенных атомов и размеры радиационно-поврежденной зоны растут одновременно до тех пор, пока энергия, переданная ПВА, не распределится по объему образца таким образом, что не останется атомов с энергией, превышающей энергию порогового смещения. Этот этап называется баллистическим и его окончание характеризуется достижением максимума числа дефектов, сформированных атомными смещениями. После этого начинается рекомбинационный этап (фаза релаксации), в течение которого число дефектов уменьшается до некоторой относительно стабильной величины, после которого только диффузионные процессы будут менять число и характер распределения дефектов в образце. Этот этап называется основным состоянием радиационного повреждения. Следует отметить, что кинетическая температура на стадии рекомбинации в области каскада достигает высоких значений, а ее максимальное значение называется температурным пиком.

Изменение числа дефектов в области каскада атомных смещений в кристаллите ванадия с

идеальной структурой в зависимости от времени представлены на рис. 1. Направление исходной скорости ПВА совпадало с кристаллографическим направлением [100].

Основными характеристиками баллистического этапа развития каскада являются: 1) максимальное значение числа генерируемых дефектов; 2) время достижения «пика» (максимального значения числа генерируемых дефектов); 3) объем области, в которой развился каскад; 4) плотность каскада (число дефектов на единицу объема каскадной области для времени «пика»). Все эти характеристики зависят от величины энергии ПВА.

Время «пик», как функция энергии каскада, приведена на рис. 2. Из рисунка видно, что зависимость данной величины замедляет свой рост с увеличением энергии ПВА. По-видимому такое поведение связано с расщеплением основного каскада на субкаскады, которые инициируются вторично выбитыми атомами с энергией меньшей, чем энергия ПВА. Эти вторично выбитые атомы формируют каскады с меньшими временами «пик», чем основной каскад, и, в целом, понижают «пиковое» время.

Максимальное количество дефектов в области каскада атомных смещений в зависимости от энергии ПВА приведено на рис. 3, а. Эта зависимость имеет практически линейный характер, при этом число дефектов в каскаде возрастает с возрастанием энергии каскада. В тоже время зависимость числа генерируемых дефектов в отрексированном кристаллите от энергии ПВА носит нелинейный характер (рис. 3, б). Уменьшение скорости роста кривой с увеличением энергии ПВА (рис. 3, б) может быть связана с расщеплением основного каскада на субкаскады.

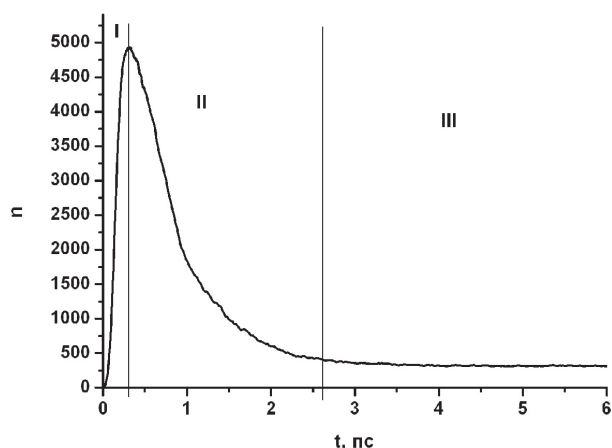


Рис. 1. Изменение числа точечных дефектов ( $n$ ) от времени для энергии ПВА 10 кэВ. Баллистическая стадия развития каскада обозначена цифрой — I; рекомбинационная — II; основное состояние — III

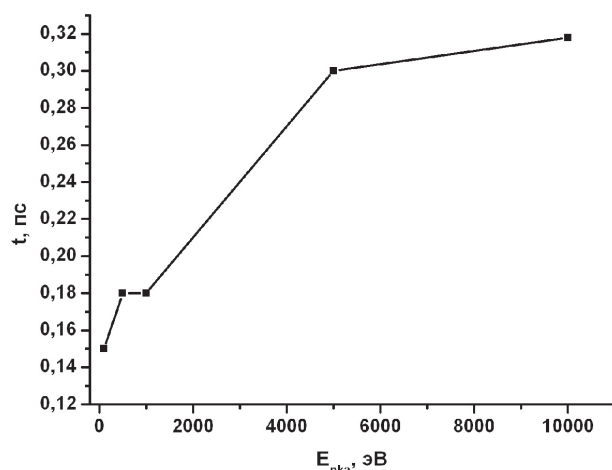


Рис. 2. Зависимость времени «пик» ( $t$ ) от энергии ПВА ( $E_{pka}$ )

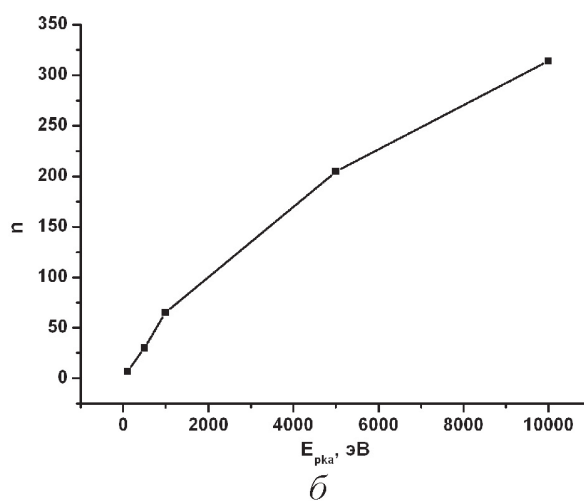
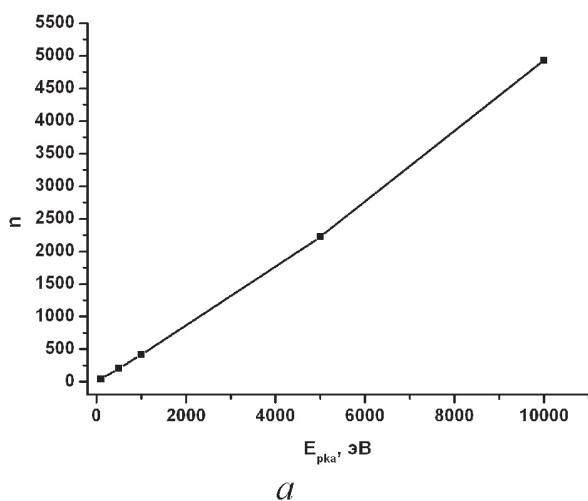


Рис. 3. Зависимость числа точечных дефектов ( $n$ ) от энергии ПВА на: а — пике; б — на основном этапе

### Влияние межзеренных границ на формирование атомных смещений в каскаде

Симметрично наклонные или двойниковые ГЗ, образующиеся из двух кристаллов с зеркально симметричной структурой, являются наиболее простыми среди всех межзеренных границ. В работе были протестированы несколько типов межзеренных границ. Наибольшей энергией характеризуются межзеренная граница (410) [001]  $\Sigma 17$ , а наименьшим значением  $E_{GB}$  межзеренная граница (320) [001]  $\Sigma 13$ . Поэтому именно эти две границы были выбраны для изучения влияния протяженных границ раздела на характер развития каскадов атомных смещений и последующее образование радиационно-поврежденных областей. Как правило, ширина межзеренной границы составляет несколько атомных слоев. Вследствие разупорядоченности этих слоев после релаксации многие физические свойства (тепловое расширение, электросопротивление, упругие модули и т. д.) вблизи межзеренной границы могут существенно отличаться от соответствующих объемных свойств и обладать высокой степенью анизотропии. Ширина межзеренной области может быть определена из расчетов изменения энергии атомной связи  $E_p$  в направлении перпендикулярном к плоскости границы зерна.

Развитие каскада атомных смещений начинается с момента времени, когда произошла генерация ПВА. Для того, чтобы выяснить влияние межзеренных границ на развитие каскадов, исследовалась удаленность ПВА от границы раздела. Энергия ПВА во всех случаях составляла 1 кэВ, а направление скорости ПВА выбиралось перпен-

дикулярным к плоскости границы. Расстояния от ПВА до плоскости межзеренной границы варьировались от 10 до 45 Å.

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 половину пикосекунды (рис. 4). В этот интервал времени избыточная энергия ПВА передается моделируемому образцу, при этом его энергия испытывает наибольшие флуктуации. По истечении этого отрезка времени флуктуации энергии и число сгенерированных дефектов идут на убыль. Примерно через 3–4 пс число радиационных дефектов в материале стабилизируется.

Из рис. 4 видно, что характер изменения числа дефектов (число дефектов на пике, скорость спада кривых, число устойчивых дефектов на конечном этапе моделирования и соответствующие характерные времена) в образцах с различным типом межзеренных границ примерно одинаковы.

Рис. 5 показывает различные стадии развития моделируемых каскадов в кристаллитах ванадия с ГЗ  $\Sigma 13$  для ПВА, удаленных от плоскости ГЗ на 18.1 Å. Начальная скорость ПВА совпадает с кристаллографическим направлением [320]. Расчеты показали, что большая часть атомных смещений, приводящих к формированию точечных дефектов, локализуется в области границы зерна. Отметим, что значительно меньшая часть точечных дефектов, включая стадию релаксации, проходит через межзеренную границу. Такое поведение каскада атомных смещений обусловлено

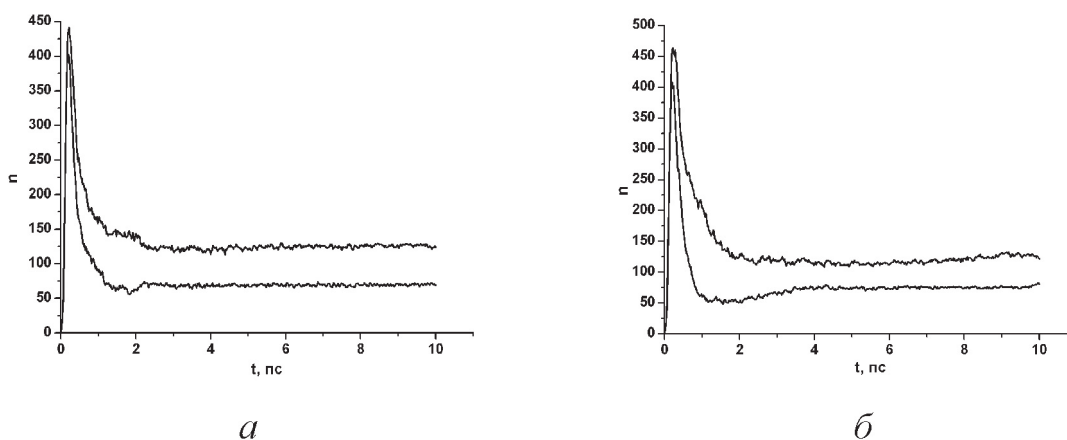


Рис. 4. Зависимость числа точечных дефектов ( $n$ ) от времени. Образец с ГЗ  $\Sigma 13$ (а); верхняя кривая соответствует ПВА, удаленному на расстояние 10.4 Å от ГЗ, нижняя кривая — на 31.6 Å. Образец с ГЗ  $\Sigma 17$  (б); верхняя кривая соответствует ПВА, удаленному от ГЗ на расстояние 18.4 Å, нижняя кривая — на 38.7 Å

тем фактом, что в области границы зерна дефекты формируются как за счет атомных перестроек зернограничных атомов, так и за счет внедрения извне в эту область межузельных атомов. Для расстояния примерно 18 Å от ПВА до межузельной границы почти 90 % сгенерированных дефектов лежит в области границы, тогда как при удаленности ПВА примерно на 38 Å число дефектов уменьшается до 55 % для обоих типов ГЗ.

Начиная с расстояний примерно 38 Å для удаленности ПВА от межузельной границы, каскады атомных смещений практически не пересекают область межузельной границы. Аналогичная картина наблюдается и для образца с межузельной границей  $\Sigma 17$ .

Результаты расчетов показывают, что существует зависимость между числом устойчивых дефектов, сформированных на завершающем этапе релаксации, и удаленностью ПВА от межузельной границы. Чем дальше ПВА удален от границы, тем меньше дефектов формируется в образце. По мере удаленности от границы их число стремится к величине характерной для материала с идеальной структурой.

Важной характеристикой радиационно-поврежденной зоны является количество сформированных в ней кластеров точечных дефектов. Кластером считается группа точечных дефектов, расстояние между ближайшими из которых не превосходит величину радиуса второй координационной сферы в идеальной решетке ванадия. Результаты расчетов показывают, что на этапе основного состояния в кристаллите формируется относительно малое число кластеров. Отметим, что значительную долю в общем количестве кластеров занимают кластеры из трех дефектов. Анализ этих кластеров показывает, что они представляют собой гантели, ориентированные вдоль кристаллографического направления  $[111]$ . Это характерно как для образцов с идеальной структурой, так и для образцов, содержащих межузельную границу. Следует отметить, что для образцов с границей зерен на основной стадии развития каскада характерно формирование в зернограничной области одного или двух кластеров достаточно больших размеров. При этом чем ближе располагался ПВА к межузельной границе, тем большего размера кластер в ней формировался.

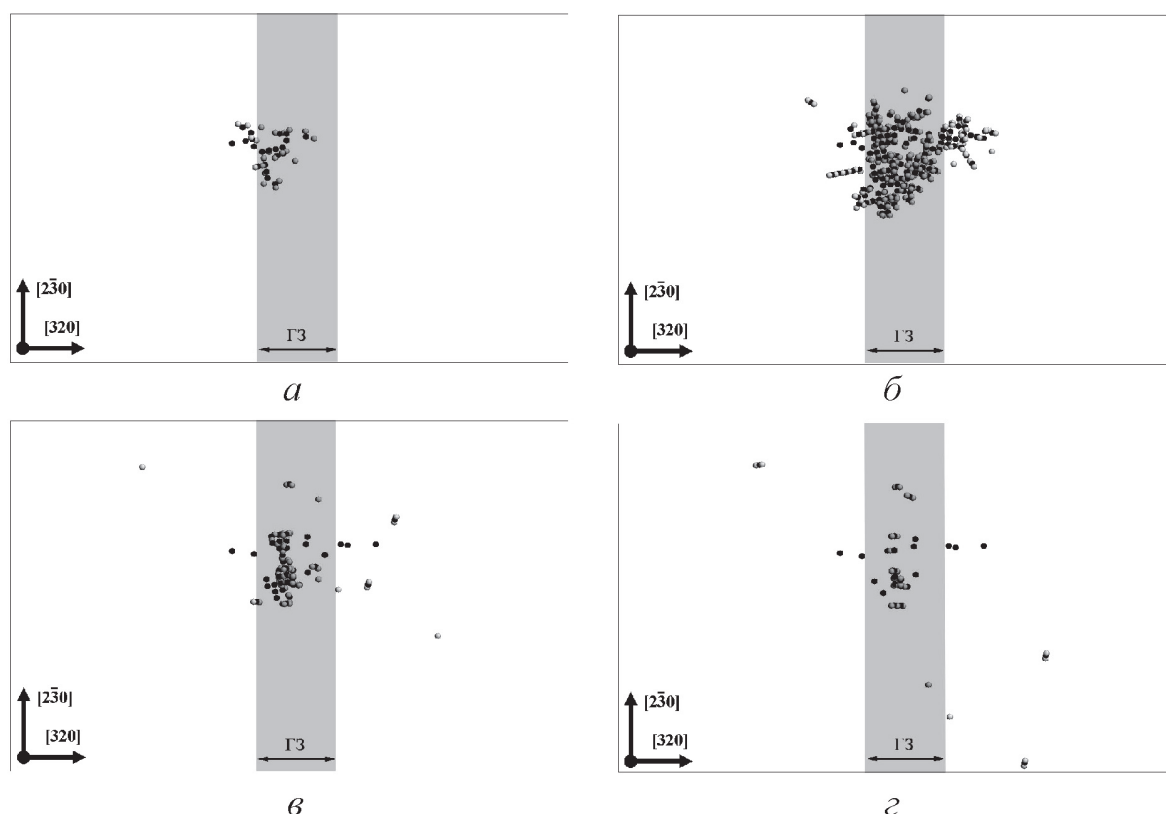


Рис. 5. Проекция дефектной структуры на плоскость  $(001)$  в различные моменты времени: а — 0,06 пс; б — 0,2 пс; в — 1 пс; г — 10 пс. Светлые кружки — вакансии, темные — межузельные атомы



### Заключение

На основании проведенных исследований можно заключить, что наличие протяженных границ раздела в материалах оказывает существенное влияние на характер развития каскадов атомных смещений, возникающих при радиационном облучении. В частности, такие границы аккумулируют в своей области значительную долю радиационных дефектов, среди которых могут формироваться кластеры достаточно большого размера, и в значительной степени препятствуют распространению каскадов атомных смещений по другую сторону границы. По-видимому, для

каждой энергии ПВА существует некоторая пороговая величина его удаленности от границы раздела. Начиная с этого порогового расстояния и более него, граница раздела данного типа становится непроницаемым барьером на пути каскада атомных смещений, который генерируется ПВА с меньшей энергией.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований СО РАН, 2010–2012 гг., III.20.2. «Научные основы создания материалов и покрытий с неравновесными структурно-фазовыми состояниями на основе многоуровневого подхода» и при частичной финансовой поддержке проекта СО РАН № 51.

### Литература

1. Simulation of damage production and accumulation in vanadium / E. Alonso [et. al.] // Journal of Nuclear Materials. — 2000. — V. 276. — P. 221–229.
2. Dependence of radiation damage accumulation in iron on underlying models of displacement cascades and subsequent defect migration / A. Souidi [et. al.] // Journal of Nuclear Materials. — 2006. — V. 355. — P. 89–103.
3. Computer simulation of displacement cascades and the defects they generate in metals / D.J. Bacon [et. al.] // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. — 1999. — V. 153. — P. 87–98.
4. Osetsky, Yu.N. Defect cluster formation in displacement cascades in copper / Yu.N. Osetsky, D.J. Bacon // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. — 2001. — V.180. — P. 85–90.
5. Javier Perez Perez, F. Modelling radiation defects at grain boundaries in bcc iron / F.Javier Perez Perez, Roger Smith // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B. — 1999. — V. 153. — P. 136–141.
6. Computer Simulation of Displacement Damage Cascade Formation near Sigma 5 Twist Boundary in Silver / K. Sugio [et. al.] // Journal of the Physical Society of Japan. — 1998. — V. 67 — No 3. — P. 882–889.
7. Влияние состояния границ размера зерен на механизмы ползучести субмикроструктурного никеля / Ю.П. Колобов [и др.] // Физика металлов и металловедение. — 2001. — Т. 91. — № 5. — С. 107–112.
8. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов / Ю.П. Колобов [и др.]. — Новосибирск: Наука, 2001. — 231 с.
9. Suzuki, A. Atomistic Modeling of Point Defects and Diffusion in Copper Grain Boundaries / A. Suzuki, Y. Mishin // Interface science. — 2003. — V. 11. — No 1. — P. 131–148.