

УДК 621.039.531.001.57

МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ В БИНАРНОМ СПЛАВЕ Fe-1.8at.%Ni МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© 2012 М. Ю. Тихончев

Ульяновский государственный университет

Поступила в редакцию 20.11.2012

В работе представлены результаты компьютерного моделирования процессов первичной радиационной повреждаемости сплава Fe-1.8at.%Ni методом молекулярной динамики. Моделирование проведено для температуры 600 К с использованием многотельных потенциалов межатомного взаимодействия. Рассмотрены каскады атомных смещений для энергий первично выбитого атома от 0.1 до 30 кэВ. Получены оценки количества дефектов, переживающих рекомбинацию в каскаде, а также результаты по количеству и размерам кластеров вакансий и собственных межузельных атомов, образующихся в таких каскадах. Не выявлено заметного влияния никеля в рассматриваемой концентрации на число точечных дефектов, выживающих в каскаде смещений.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, каскад атомных смещений, точечный дефект, пара Френкеля.

1. ВВЕДЕНИЕ

Малолегированные стали с содержанием никеля 1,0-1,9 % типа 15X2НМФАА 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 изменению свойств, в настоящее время изучена недостаточно.

Одним из общепринятых и широко используемых методов моделирования первичного радиационного повреждения конструкционных материалов ядерных и термоядерных установок является метод молекулярной динамики. 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 сохраняется 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-1.8at.%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. Полученные результаты уточняют и дополняют соответствующие результаты, полученные нами ранее [7].

2. ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖАТОМНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Для железа в настоящем исследовании для α -Fe мы использовали многотельный потенциал типа Финниса-Синклера из работы Аккланда, Бэкона и др. [8]. Для описания взаимодействий вида Ni-Ni и Fe-Ni мы использовали потенциал того же типа, предложенный Хепберном, Аккландом 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 $\varphi(r)$ и $\psi(r)$ (в методе погруженного атома смешанные взаимодействия описываются только соответствующей парной частью $\varphi(r)$). 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.

*Тихончев Михаил Юрьевич, кандидат физико-математических наук, начальник лаборатории моделирования поведения неорганических материалов.
E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru*

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ СМЕЩЕНИЙ

Для моделирования каскадов атомных смещений и оценки числа “выживших” дефектов задавались ОЦК кристаллиты “чистого” α -Fe и бинарного сплава Fe-1.8at.%Ni, содержащие до ≈ 800000 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 расчётах 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 шести различных энергий ПВА ($E_{\text{ПВА}}$): 0.1, 0.5, 1, 2, 5, 10, 15, 20 и 30 кэВ. Начальную температуру обеспечивали путем задания начальных скоростей атомам кристаллита с последующим молекулярно динамическим моделированием NPT-ансамбля с баростатом и термостатом Берендсена для нулевого давления и температуры 600 К, соответственно, в течении 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 ≈ 145 К для $E_{\text{ПВА}}=30$ 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 E.

Моделируемое время развития каскада подбиралось так, чтобы обеспечить моделирование всего процесса образования и релаксации точечных дефектов в каскаде вплоть до его затухания.

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 вакансии в узле i , попадание более одного атома в ячейку C_i трактуется как наличие собственного межузельного атома (СМА) вблизи узла i . Число точечных дефектов определяется как общее количество ячеек Вигнера-Зейца, не содержащих ни одного атома материала.

Доля “выживших” дефектов, также известная как “каскадная эффективность”, определялась по формуле:

$$p(E_{\text{ПВА}}) = \frac{N(E_{\text{ПВА}})}{f(E_{\text{ПВА}})}, \quad (1)$$

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 [9] (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 ≈ 40 эВ, рекомендуемое стандартом ASTM [10]. Отметим, что используемые нами потенциалы обеспечивают хорошее согласие с этим значением пороговой энергии [7].

Полученные усредненные по направлениям импульса ПВА значения $N(E_{\text{ПВА}})$ и $p(E_{\text{ПВА}})$ представлены на рис. 1 и 2, соответственно. 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 (1.8at.%) не оказывает влияния на число выживающих дефектов, а, следовательно, и на каскадную эффективность.

Бэкон и др. [11] и Вудинг и др. [12] показали, что для металлов зависимость числа выживших дефектов от энергии ПВА хорошо аппроксимируется степенной функцией

$$N(E) = A \cdot E^B. \quad (2)$$

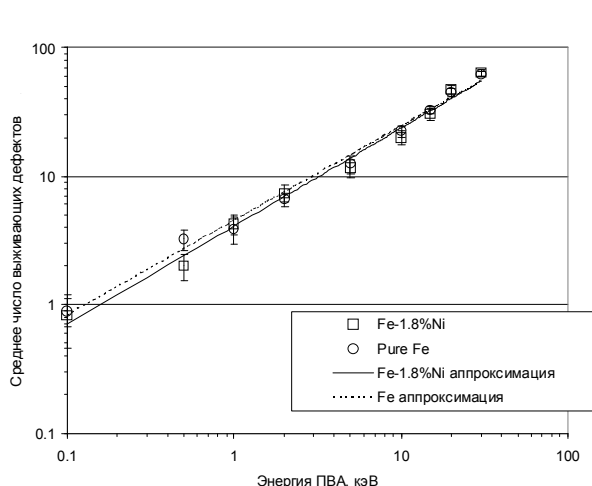


Рис.1. Рассчитанное среднее число “выживающих” дефектов

Полученные нами результаты также хорошо описываются зависимостями такого вида (см. рис. 1), а именно

$$N(E) = 4.48 \cdot E^{0.73} \text{ для } \alpha\text{-Fe}, \quad (3)$$

$$N(E) = 4.08 \cdot E^{0.76} \text{ для сплава Fe-1.8ат.\%Ni}, \quad (4)$$

где E – энергия ПВА в кэВ.

Учитывая (1) из формул (3-4) получаем соответствующие аппроксимации для каскадной эффективности $\rho(E_{\text{ПВА}})$:

$$\rho(E) = 0.448 \cdot E^{-0.27} \text{ для } \alpha\text{-Fe}, \quad (5)$$

$$\rho(E) = 0.408 \cdot E^{-0.24} \text{ для сплава Fe-1.8ат.\%Ni}. \quad (6)$$

Известно, что существенный вклад в микроструктурную эволюцию материала под облучением вносит объединение производимых в нем точечных дефектов в кластеры. При моделировании

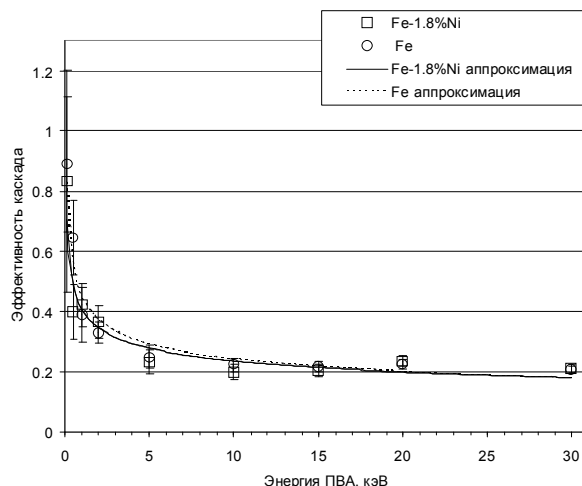


Рис. 2. Каскадная эффективность

каскадов смещений мы, наряду с оценкой числа “выживающих” дефектов, получили оценки размеров и количества кластеров вакансий и СМА 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 ближайших соседей для вакансий и третьих ближайших соседей для СМА.

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 СМА, входящих в кластеры. При более высоких энергиях число вакансий в кластерах становится меньше числа обра-

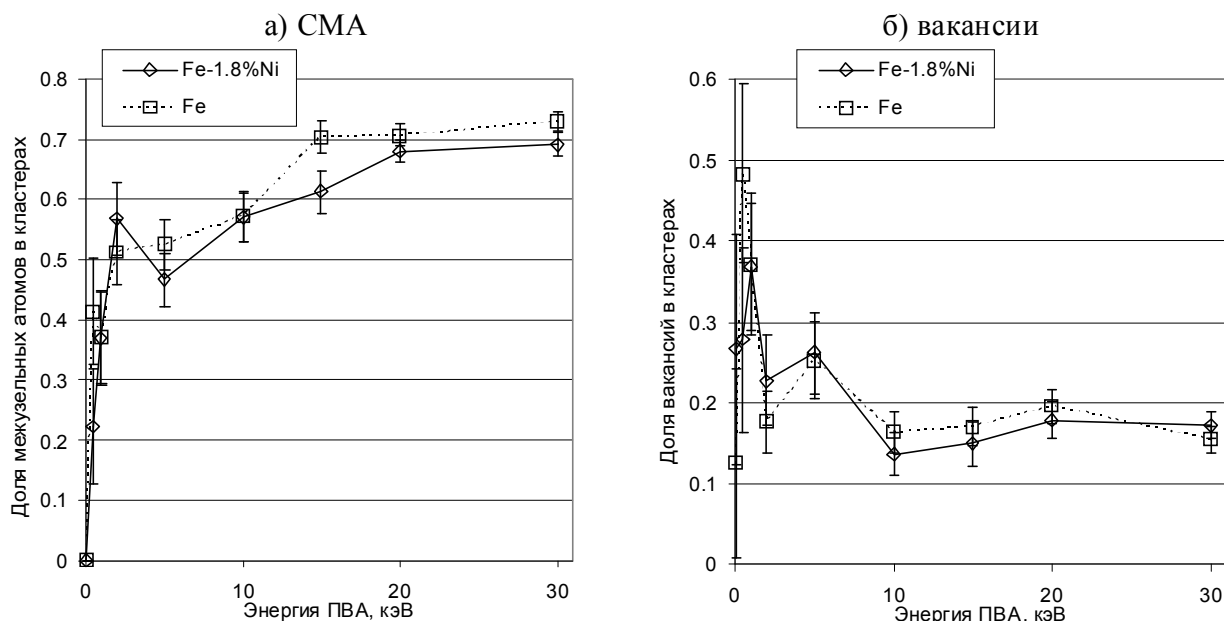


Рис. 3. Доля дефектов, образующих кластеры

зующих кластеры СМА. Отметим, что для всех рассмотренных энергий ПВА доли дефектов обоих типов, попадающих в кластеры, для сплава с никелем и для чистого железа совпадают в пределах погрешности. Исключение составляют только вакансии для энергии ПВА 10 кэВ

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Кратко сформулируем основные результаты работы.

Методом молекулярной динамики проведено моделирование каскадов атомных смещений для сплава Fe-1.8at.%Ni и однокомпонентного α -Fe. Моделирование проведено для начальной температуры системы 600К. Получены оценки числа выживающих дефектов для энергий ПВА до 30 кэВ и результаты по размерам и количеству кластеров вакансий и СМА, 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 30 КэВ). Наименьшие значения каскадной эффективности наблюдаются для энергий ПВА 10–30 кэВ и составляют ≈ 0.22 и $0.20 - 0.24$ для α -Fe и сплава Fe-1.8at.%Ni соответственно.

Согласно полученным оценкам количество вакансий в кластерах лежит выше числа попадающих в кластеры СМА только для энергий ПВА 0.1-0.5 кэВ, и ниже – для более высоких энергий, причем для энергий выше 10 кэВ это отличие достигает 3.5 раз. Не выявлено значимых отличий в долях кластеризованных дефектов для чистого железа и сплава с никелем.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012-2014 гг, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009 – 2013 годы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Fe–Cr alloys / *Malerba L., Terentyev D., Olsson P., Chakarova R., Wallenius J.* // Journal of Nuclear Materials, 329–333 part 2 (2004), pp. 1156 – 1160.
2. Displacement cascades in Fe–Cr. A molecular dynamics study / *Terentyev D.A., Malerba L., Chakarova R., Nordlund K., Olsson P., Rieth, M., Wallenius J.* // Journal of Nuclear Materials, 349(1) (2006) pp. 119 – 132.
3. Modeling of chromium precipitation in Fe–Cr alloys / *Wallenius J., Olsson P., Lagerstedt C., Sandberg N., Chakarova R., Pontikis V.* // PHYSICAL REVIEW B 69 (2004), pp. 94103-1 – 94103-9.
4. 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, 351, Issues 1-3 (2006) pp. 56 – 64.
5. Rescaled potentials for transition metal solutes in α -iron / *D.J. Hepburn, G.J. Ackland and P. Olsson* // Philosophical Magazine, V. 89, N. 34-36, 2009, pp. 3393-3412.
6. MD simulation of atomic displacement cascades in Fe–10 at.%Cr binary alloy / *M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gagaidze* // Journal of Nuclear Materials 395 (2009) pp. 50–57.
7. 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. №3 (15), 2010, с. 143 – 155
8. 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 and T. Harry* // Philosophical Magazine A 75, 713-732 (1997)
9. The proposed method of displacement dose rate calculation / *Norgett N.J., Robinson M.T., Torrens I.M.* // Nucl. Eng. And Design, 1975, 33, pp.50-56.
10. ASTM E521, (E521-89) Practice for Neutron Radiation Damage Simulation by Charged-Particle Irradiation. Annual Book of ASTM Standards, vol. 12.02, 1995
11. Computer simulation of displacement cascade effects in metals / *D.J. Bacon, A.F. Calder, F. Gao* // Rad. Eff. Def. Sol. 141, 1997, pp. 283 – 310.
12. A computer simulation study of displacement cascades in α -titanium / *S.J. Wooding, D.J. Bacon, W.J. Phythian* // Philos. Mag. A 72, 1995 pp. 1261 – 1279.

SIMULATION OF ATOMIC DISPLACEMENT CASCADES IN BINARY FE-1.8at.%Ni ALLOY BY MOLECULAR DYNAMICS METHOD

© 2012 M.Yu. Tikhonchev

Ulyanovsk State University

This paper is devoted to the results of computer simulation of primary irradiation damage processes in Fe-1.8at.%Ni by molecular dynamics method. Simulation is performed for temperature of 600 K. N-body interatomic potentials are used here. Cascade energies in rang of 0.1 – 30 keV are considered. Evaluations of amounts of defects survived in displacement cascades as well as numbers and sizes of vacancy and self-interstitial atoms (SIAs) are obtained. It is revealed that Cr fraction in SIAs is more than twice as higher in comparison with Cr fraction in initial alloy. The influence of nickel in considered concentration on number of point defects survived in displacement atomic cascades is not detected.

Key words: molecular dynamics method, atomic displacement cascade, point defect, Frenkel pair.

Mikhail Tikhonchev, Candidate of Physics and Mathematics, Head of Non-Organic Materials Behaviour Modelling Laboratory. E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru