

РАСЧЕТ ПОРОГОВЫХ ЭНЕРГИЙ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ ВБЛИЗИ ПРОТЯЖЕННОЙ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ФАЗ ГПУ-Zr И ОЦК-Nb МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© 2012 М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин

Ульяновский государственный университет

Поступила в редакцию 20.11.2012

Работа посвящена моделированию на атомарном уровне протяженной границы раздела фаз ГПУ-Zr и ОЦК-Nb и оценке величины средней пороговой энергии смещения вблизи границы фазового раздела методом молекулярной динамики. Подготовлены многотельные потенциалы для системы Zr-Nb, при этом потенциалы для чистых Zr и Nb взяты из литературы. Рассчитаны пороговые энергии атомных смещений для однокомпонентных кристаллов ГПУ-Zr и ОЦК-Nb, а также для атомов Zr и Nb как атомов замещения в матрицах Nb и Zr соответственно. Предложена модель протяженной границы раздела фаз ГПУ-Zr и ОЦК-Nb. Межфазная область рассматриваемой границы охватывает 6 атомных слоев Zr и 2 атомных слоя Nb. При этом часть кристаллита Nb, попадающая в межфазную область, сохраняет структуру близкую к ОЦК, в то время как структура циркониевой части в межфазной области заметно искажается. Получены количественные оценки величины средней пороговой энергии смещения в области фазового раздела.

Ключевые слова: метод молекулярной динамики, пороговая энергия смещения, пара Френкеля.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе рассматривается задача определения пороговых энергий смещения для циркония и ниобия в сплаве Zr-Nb с использованием метода молекулярной динамики. Ранее в работе [1] были проведены расчеты пороговой энергии смещения в бинарной системе Zr-Nb, где сплав рассматривался как твердый раствор замещения. Однако, как известно из экспериментов [2-5], до облучения только часть ниобия растворена в матрице, другая часть образует преципитаты. В случае сплава Э110 (Zr-1%Nb) наблюдаются выделения b-Nb (Zr-90%Nb) имеющие оцк решетку с параметром $a=3.32$ Е, в матрице растворено лишь около половины присутствующих в сплаве атомов Nb. Под облучением происходит рост и существенное изменение состава существующих крупных выделений. Так в облученном сплаве Э110 крупные преципитаты b-Nb имеют средний размер около 500 Е и содержат примерно равное количество атомов ниобия и циркония. Так же под облучением наблюдается зарождение и рост небольших преципитатов, состоящих из циркония и ниобия. Ниобия, растворенного в матрице, после облучения практически

не остается. Поэтому в настоящей работе также проводится моделирование границы раздела фаз гпу-Zr и оцк-Nb и получение количественных оценок величины средней пороговой энергии смещения на границе фазового раздела.

2. МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

При моделировании использовались полуэмпирические многотельные потенциалы межатомного взаимодействия. При использовании многотельных потенциалов энергия каждого атома не имеет вида суммы парных взаимодействий, а представляется как некоторая функция его локального окружения. Для металлов были разработаны несколько схем построения таких потенциалов: метод погруженного атома (МПА) [6], схема Финниса-Синклера [7] и схема Росато-Гвиллопа-Легранда [8]. Несмотря на несколько различные физические интерпретации, все эти методы дают одинаковое аналитическое выражение для полной энергии системы из N частиц:

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N F_i(\rho_i) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \varphi_{ij}(r_{ij}), \quad (1)$$

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

где E_{tot} – энергия кристалла; в формализме МПА ρ_i – электронная плотность в узле i , образуемая другими атомами; $F_i(\rho_i)$ – энергия внедрения атома i в электронную жидкость с плотность ρ_i ;

Тихончев Михаил Юрьевич, кандидат физико-математических наук, начальник лаборатории моделирования поведения неорганических материалов.

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

Светухин Вячеслав Викторович, доктор физико-математических наук, профессор, директор научно-исследовательского технологического института.

E-mail: slava@sv.uven.ru

$\Psi_j(r_{ij})$ – собственная электронная плотность j -ого атома как функция расстояния до его центра; r_{ij} – расстояние между атомами i и j ; $\Phi_{ij}(r_{ij})$ – парный потенциал взаимодействия между атомами i и j .

Если потенциал планируется использовать для моделирования радиационной повреждаемости, то функцию $\Phi(r)$ принято разбивать на три части: равновесную, высокоэнергетическую и промежуточную. Равновесная часть предназначена для описания взаимодействий на межатомных расстояниях близких или превосходящих расстояние между ближайшими соседями в равновесном кристалле. Эта часть ($j_{equilibrium}(r)$) может иметь различные 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 1-1.5 Å) расстояниях. Эта часть потенциала является отталкивающей (т.е. убывающей по r) и обычно описывается 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, e – заряд электрона, ϵ_0 – электрическая постоянная, величина a может определяться несколькими различными способами. Мы использовали приближение, предложенное Бирсаком и Циглером [9]:

$$a = \frac{0.8856 \times a_0}{\sqrt{Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}}}, \quad (4)$$

где $a_0 = 0.529 \text{ Å}$ – 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 призвана связать между собой равновесную и высокоэнергетическую части так, чтобы обеспечить непрерывность функции $\Phi(r)$ и её первой производной. В потенциалах, использованных в настоящей работе, промежуточная часть имеет вид

$$\Phi_{join}(r) = e^{(B_0 + B_1 r + B_2 r^2 + B_3 r^3)}, r_2 J r_1, \quad (6)$$

где $[r_2, r_1]$ – отрезок “сочленения”, параметры B_i $i = \overline{0,3}$ подбираются так, чтобы обеспечить выполнение непрерывности функции $\Phi(r)$ и ее первых производных.

Для циркония в настоящем исследовании мы использовали многотельный потенциал, предложенный Менделевым и Акландом в работе [10]. В этой работе авторы предлагают 2 потенциала, один из которых (обозначен в [10] как потенциал #2) рекомендуют использовать для термодинамичес-

ких расчетов и моделирования фазовых переходов в чистом Zr, а другой (потенциал #3) – для моделирования только гпу-Zr. Потенциал #3 лучше описывает упругие константы гпу-Zr, и поэтому именно он выбран нами для настоящего исследования.

Парная часть используемого нами потенциала для Zr отвечает описанному выше формализму и границы промежуточной области для парной части этого потенциала составляют $r_1 = 1 \text{ Å}$, $r_2 = 2.3 \text{ Е}$. Радиус обрезания составляет 7.6 и 5.6 Å для функций j и u соответственно.

Для ниобия мы использовали потенциал типа Финниса-Синклера из работы Акланда и Фетфорда [11]. Парную часть этого потенциала мы рассматривали только как равновесную, а высокоэнергетическую и парную часть строили согласно формулам (3-6) с r_1 и r_2 равными 1 и 2.3 Å соответственно.

Для моделирования бинарной системы Zr-Nb необходимо подготовить кросс-потенциалы $y_{ZrNb}(r)$ и $j_{ZrNb_equilibrium}(r)$. Функцию $y_{ZrNb}(r)$ определяли по формуле

$$\psi_{ZrNb}(r) = \sqrt{\psi_{Zr}(r) \cdot \psi_{Nb}(r)}. \quad (10)$$

Радиус обрезания для полученной функций $y_{ZrNb}(r)$ составляет $r_c = 3.915354 \text{ Å}$. При этом

$$\lim_{r \rightarrow r_c - 0} \frac{d\psi_{ZrNb}}{dr} \neq 0. \text{ Поэтому при } r \in [r_c - Dr, r_c], \text{ где}$$

$Dr = 0.2 \text{ Å}$, мы полагали

$$\psi_{ZrNb}(r) = 158.1917956(r - r_0)^3 + 58.85426469(r - r_0)^2. \quad (11)$$

Равновесную парную часть кросс-потенциала строили в виде, предложенном в работе [12]:

$$\varphi_{ZrNb_equilibrium}(r) = \begin{cases} A_1 e^{-B_1 r}, & r_2 < r \leq r_{c1} \\ A_2 (r_c - r)^m e^{-B_2 r}, & r_{c1} < r \leq r_c \\ 0, & r > r_c \end{cases} \quad (12)$$

Мы положили $m = 3$, $r_{c1} = 3.2 \text{ Е}$ и $r_c = 5.02 \text{ Å}$. Остальные параметры подбирали так, чтобы удовлетворить условию непрерывности функции $j_{ZrNb_equilibrium}(r)$ и ее первой производной, и двум величинам, характеризующим взаимодействие между атомами в сплаве Zr-Nb. В качестве таких двух величин были взяты энергия замещения атома Zr атомом Nb в матрице циркония и энергия внедрения атома Nb в матрицу чистого Zr (в октаэдральную пустоту гпу-решетки). Для этих величин мы использовали значения 0.61 и 2.76 эВ соответственно, которые были рассчитаны Кристофом Домейн путем ab-initio моделирования и опубликованы в работе [13]. Полученные значения подгоночных параметров потенциала (12) составили:

$$A_1 = 483.1743 \text{ эВ}, B_1 = 2.327 \text{ Å}^{-1}, \\ A_2 = 0.41031 \text{ эВ/Е}^3, B_2 = 0.6787 \text{ Å}^{-1}.$$

Высокоэнергетичная и промежуточная части кросс-потенциала строились согласно (3-6) с r_1 и r_2 равными 1 и 2.3 Е соответственно.

3. РАСЧЕТ ПОРОГОВЫХ ЭНЕРГИЙ СМЕЩЕНИЯ ДЛЯ ОДНОКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ И АТОМОВ ЗАМЕЩЕНИЯ

При расчете средних пороговых энергий смещения использовались гпу кристаллиты для Zr и оцк кристаллиты для Nb, содержащие по 10032 и 9792 атомов соответственно. При расчётах использовались “периодические” граничных условия, начальная температура кристаллита $T=0$ К. Направление импульса первично-выбитого атома (ПВА) выбиралось путем моделирования случайного изотропного вектора. При решении задачи нахождения пороговой энергии поиск устойчивых конфигураций начинается с небольших энергий ПВА, что приводит на начальном этапе расчёта к образованию неустойчивых смещений. Пошагово повышая энергию ПВА, можно определить энергию, при которой в кристаллите образуются устойчивые пары Френкеля. Мы повышали энергию с шагом 1 эВ.

Средняя пороговая энергия смещения может определяться различными способами [14]. Мы использовали наиболее распространенный из них, который заключается в нахождение среднего арифметического пороговых энергий смещения, получаемых для каждого из рассматриваемых направлений. Средняя пороговая энергия оценивалась для четырех вариантов: чистый Zr, чистый Nb, один атом замещения Nb в матрице Zr (ПВА – Nb) и один атом замещения Zr в матрице Nb (ПВА – Zr). Полученные значения представлены в табл. 1. В табл.1 также представлены соответствующие минимальные и максимальные значения пороговых энергий смещения, полученные в ходе моделирования.

К сожалению, в литературе имеется только небольшое количество экспериментальных результатов по определению пороговых энергий смещения для различных металлов. Эти результаты получены путем облучения электронами тонких монокристаллических фольг. К тому же, согласно работам [15-17], в таких экспериментах надежные результаты удается получить только

для минимального значения E_d , которое составляет для Zr 21 и 24 эВ согласно результатам из работ [18] и [19] соответственно. К сожалению, опубликованных экспериментальных результаты по ниобию нам найти не удалось. Стандарт ASTM [20] рекомендует использовать среднее значение пороговой энергии равным 40 эВ как для Zr так и для Nb.

Как видно из полученных нами результатов, оценка средней пороговой энергии для Zr хорошо согласуется с величиной, рекомендованной ASTM. В тоже время средняя пороговая энергия для Nb оказывается на $\gg 10$ эВ выше. Также наблюдаются существенно заниженное значение (на $\gg 10$ эВ) минимальной энергии смещения для Zr. Значение E_d для Nb, как атома замещения в Zr, составляет немногим менее 30 эВ, а для Zr, как атома замещения в Nb, – около 60 эВ. Согласно этим результатам под облучением ниобий, растворенный в цирконии, смещается заметно более легко, чем атомы основной матрицы, а для циркония, растворенного в ниобии, должен наблюдаться прямо противоположный эффект.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОТЯЖЕННОЙ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ФАЗ ГПУ-ZR И ОЦК-NB

В последнее время наблюдается возросший интерес к моделированию внутренней структуры материалов (границ раздела различных типов) на атомарном уровне и особенностям процессов радиационной повреждаемости вблизи таких границ. Наличие таких границ существенно влияет на диффузионные процессы, также ожидается их существенное влияние на образование и развитие каскадов атомных смещений.

В настоящем разделе предлагается модель протяженной границы раздела фаз гпу-Zr и оцк-Nb, и оцениваются величины средней пороговой энергии смещения на границе фазового раздела. Ясные представления о сопряжении оцк и гпу решеток пока отсутствуют. По всей видимости, кристаллиты лежащие по разные стороны границы могут иметь различные пространственные ориентации. В настоящем исследовании мы ограничимся случаем, когда базисные плоскости кристаллитов циркония и ниобия (плоскость (0001) для Zr и плоскость (001) для Nb) парал-

Таблица 1. Рассчитанные значения пороговых энергий смещения

Кристаллит	Средняя пороговая энергия, эВ	E_{\min} , эВ	E_{\max} , эВ
Zr	$39.1 \pm 1.1^*$	12	125
Nb	51.6 ± 1.1	25	113
Nb в Zr	27.1 ± 0.62	10	85
Zr в Nb	60.2 ± 3.3	26	139

* - указаны статистические погрешности равные одному стандартному отклонению

лельны, а направление $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ в Zr сонаправлено направлению $\langle 100 \rangle$ в Nb. Вследствие использования в модели решеток различных типов мы будем использовать декартову систему координат с направлениями осей: O_x – вдоль направлений $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$, O_y – вдоль направлений $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ и $\langle 010 \rangle$ и O_z – вдоль направлений $\langle 0001 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$ для гпу-решетки Zr и оцк-решетки Nb соответственно.

Составной кристаллит имеет форму прямоугольного параллелепипеда. Мы задавали периодические граничные условия на граничных плоскостях модели перпендикулярных осям O_x и O_z, а на границах перпендикулярных оси O_y использовали жесткие условия (т.е. атомы, лежащие на этих граничных плоскостях всегда неподвижны). Такие условия позволяют моделировать протяженную границу раздела между цирконием и ниобием, жесткие условия призваны моделировать здесь бесконечные идеальные кристаллиты Zr и Nb вдоль обоих направлений, перпендикулярных границе раздела сред.

Для возможности использовать периодические условия, необходимо обеспечить периодичность всей системы вдоль осей O_x и O_z. Параметр оцк-решетки Nb составляет 3.3 \AA . Для Zr в составном кристаллите мы использовали параметры решетки $a=3.234 \text{ \AA}$ и $c=5.17 \text{ \AA}$. Мы внесли незначительное искажение в параметр c решетки Zr, а именно используемый нами потенциал обеспечивает значение $c=5.16765 \text{ \AA}$, т.е. разница составляет чуть более 0.002 \AA или менее 0.05% . Таким образом, нам удается добиться периодичности с периодами 161.7 и 155.1 \AA вдоль осей O_x и O_z соответственно. После задания составного кристаллита проводилась его релаксация, при этом определялось начальное расстояние между крайними слоями кристаллитов Zr и Nb, обеспечивающая минимум удельной энергии границы раздела сред после релаксации. Эта энергия оценивалась нами как разность суммы потенциальных энергий идеальных кристаллитов Zr и Nb с тем же числом атомов и потенциальной энергии составного кристаллита деленная на площадь границы раздела. Мы провели серию расчетов, при которых кристаллиту задавалась начальная температура $T=600 \text{ K}$. При этой температуре он выдерживался в течении 3 пс , после чего пошагово, в течении 17 пс охлаждался до абсолютного нуля. Минимальное полученное значение удельной энергии гра-

ницы раздела составило $E_B=0.0556 \text{ эВ/\AA}^2$ при начальном расстоянии между ближайшими слоями атомов Zr и Nb равном 2.058 \AA . В дальнейшем рассматривалась конфигурация бикристаллита, обеспечившая минимальную энергию границы раздела сред. В этой конфигурации несколько атомных слоев вблизи границы межфазного раздела оказываются искаженными. Ширина межфазной области определялась из расчетов изменения средней энергии связи в направлениях перпендикулярных плоскости межфазной границы. Для этого кристаллит разбивался на тонкие слои параллельные плоскости границы раздела, слой считался принадлежащим межфазной области, если средняя энергия связи в нем отличается от соответствующей энергии связи в идеальном кристалле более чем на 0.01 эВ . Согласно проведенных расчетов в межфазную область попадает 6 атомных слоев Zr и только два атомных слоя Nb. В межфазной области наблюдается сближение крайних атомных плоскостей, часть кристаллита Nb, попадающая в межфазную область в основном сохраняет структуру близкую к оцк, в то время как структура циркониевой части в межфазной области заметно искажается. Структуру межфазной области можно рассматривать как “переходную” структуру между гпу-решеткой циркония и оцк-решеткой ниобия.

Нами проведено моделирование низкоэнергетических каскадов атомных смещений с целью оценки величин пороговых энергий смещения в межфазной области. Мы описывали вокруг начальных положений атомов шары радиусом 0.5 \AA . Ситуация, когда в процессе моделирования атом покидает соответствующий ему шар и в образовавшейся устойчивой структуре никакой другой атом в него не попадает, трактовалась устойчивое атомное смещение. В качестве ПВА в межфазной области выбирались по 6 атомов Zr и Nb и полученные для атомов каждого сорта результаты усреднялись. Полученные значения средней пороговой энергии вместе с соответствующими минимальными и максимальными наблюдаемыми значениями пороговых энергий смещения представлены в табл. 2. Согласно полученным результатам, все три энергии (средняя, минимальная и максимальная) в межфазной области значительно понижаются. Так, средняя пороговая энергия оказывается в ≈ 2 раза ниже для атомов обоих типов.

Таблица 2. Рассчитанные значения пороговых энергий смещения в межфазной области

Тип ПВА	Средняя пороговая энергия, эВ	E_{\min} , эВ	E_{\max} , эВ
Zr	$22.0 \pm 1.4^*$	8	68
Nb	25.3 ± 2.6	7	72

* - указаны статистические погрешности равные одному стандартному отклонению

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе проведенного исследования рассчитаны пороговые энергии атомных смещений для однокомпонентных кристаллов гпу-Zr и оцк-Nb, а также для атомов Zr и Nb как атомов замещения в матрицах Nb и Zr соответственно. Оценка средней пороговой энергии для Zr хорошо согласуется с величиной 40 эВ, рекомендованной ASTM для Zr и Nb. В тоже время средняя пороговая энергия для Nb оказывается на ≈ 10 эВ выше. Также наблюдаются существенно заниженные значения (на ≈ 10 эВ) минимальной энергии смещения. Установлено, что значение E_d для Nb, как атома замещения в Zr, составляет немногим менее 30 эВ, а для Zr, как атома замещения в Nb, – около 60 эВ. Следовательно, под облучением ниобий, растворенный в цирконии, смещается заметно более легко, чем атомы основной матрицы, а для циркония, растворенного в ниобии, должен наблюдаться прямо противоположный эффект.

Предложена модель протяженной границы раздела фаз гпу-Zr и оцк-Nb. Рассчитанное значение энергии построенной границы составило $0.0556 \text{ эВ}/\text{Å}^2$. Согласно полученным результатам, межфазная область рассматриваемой границы охватывает 6 атомных слоев Zr и 2 атомных слоя Nb. При этом часть кристаллита Nb, попадающая в межфазную область в основном сохраняет структуру близкую к оцк, в то время как структура циркониевой части в межфазной области заметно искажается.

Получены количественные оценки величины средней пороговой энергии смещения в области фазового раздела. Значения этой энергии оказываются в ≈ 2 раза ниже, чем в идеальном однокомпонентном кристалле как для атомов Zr так и для атомов Nb. Это позволяет предположить, что при прохождении каскада атомных смещений через межфазную область ее внутренняя структура будет заметно меняться, и, скорее всего, энергия каскада при этом будет существенно ослабевать.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тихончев М. Ю., Шиманский Г.А. Уточнение пороговых энергий атомных смещений для циркониевых сплавов методом молекулярной динамики // Физика и химия обработки материалов. 2005. № 2. С.5-9.
2. Микроструктура и формоизменение циркониевых

сплавов / В.Н. Шишов, В.А. Маркелов, А.В. Никулина, В.В. Новиков, М.М. Перегуд, А.Е. Новоселов, Г.П. Кобылянский, З.Е. Островский, А.В. Обухов // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Материаловедение и новые материалы. 2006. Т.67. №2. С.313-328.

3. Influence of Structure–phase State of Nb Containing Zr Alloys on Irradiation Induced Growth / V.N. Shishov, M.M. Peregud, A.V. Nikulina, Yu.V. Pimenov, G.P. Kobylansky, A.E. Novoselov, Z.E. Ostrovsky, A.V. Obukhov // 14 International Symposium on Zirconium in the Nuclear Industry, ASTM STP 1467, 2006, pp. 666–685 14th ASTM International Symposium on Zirconium in the Nuclear Industry, June 13-17, 2004 Stockholm.
4. Состояние оболочек ТВЭЛов ВВЭР после шести лет эксплуатации / А.Е. Новоселов, С.В. Павлов, В.С. Поленок, Д.В. Марков, В.А. Жителев, Г.П. Кобылянский, А.Н. Костюченко, И.Н. Волкова // Физика и химия обработки материалов. 2009. №2. С. 18-25.
5. Аверин С.А., Панченко В.Л. Влияние условий облучения на образование и эволюцию радиационных дефектов в циркониевых сплавах // Вопросы атомной науки и техники. Серия Материаловедение и новые материалы. 2006. Т.66. №1. С.24-30.
6. Daw M.S., Baskes M.I.. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, Phys. Rev. B 29, 1984, pp. 6443 – 6453.
7. Finnis M.F., Sinclair J.E. A simple empirical N-Body potential for transition metals. Philos. Mag., A 50, 1984, pp. 45 – 55.
8. Rosato V., Guillopé M., Legrand B. Thermodynamical and structural-properties of FCC transition-metals using a simple tight-binding model, Philos. Mag. A 59, No 2, 1989, pp. 321 – 336.
9. Biersack J.P. and Ziegler J.F. 1982 Nucl. Instrum. Methods 141, 93
10. Mendeleev M.I. and Ackland G.J. Development of an interatomic potential for the simulation of phase transformations in zirconium. Philosophical Magazine Letters, Vol. 87, No. 5, 2007, pp. 349–359.
11. Ackland G.J. and Thetford R. An improved N-body semi-empirical model for b.c.c. transition metals, Phil. Mag. A 56, 15 (1987).
12. Liang S.H., Li J.H., Liu B.X. Solid-state amorphization of an immiscible Nb–Zr system simulated by molecular dynamics, Computational Materials Science 42 (2008) pp. 550–557
13. Christophe Domain. Ab initio modelling of defect properties with substitutional and interstitials elements in steels and Zr alloys, Journal of Nuclear Materials 351 (2006) pp. 1–19
14. Nordlund K., Wallenius J., Malerba L. Molecular dynamics simulations of threshold displacement energies in Fe. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B, 2006, 246(2) pp. 322–332
15. Vajda P. Anisotropy of electron radiation damage in metal crystals, Rev. Mod. Phys., Vol. 49, No. 3, 1977, pp. 481–521.
16. Hohenstein M., Seeger A., and Sigle W. The anisotropy and temperature dependence of the threshold for radiation damage in gold – comparison with other FCC metals, J. Nucl. Mater., 1989, Vol. 169, pp. 33–46.
17. Maury F., Vajda P., Biget M., Lucasson A., Lucasson P. Anisotropy of the displacement energy in single crystals of molybdenum, Radiat. Effects, v. 25, no3 (1975) pp. 175 – 185.

18. *Biget M., Maury F., Vajda P., Lucasson A., and Lucasson P.* 1971, *Radiat. Effects*, 7, 223
19. *Griffiths M.* 1989, *J. nucl. Mater.*, 165, 315.
20. ASTM E521, (E521-89) Practice for Neutron Radiation Damage Simulation by Charged-Particle Irradiation. Annual Book of ASTM Standards, vol. 12.02, 1995.

CALCULATION OF ATOMIC DISPLACEMENT THRESHOLD ENERGIES NEAR EXTENDED BOUNDARY BETWEEN HCP Zr AND BCC Nb BY MOLECULAR DYNAMICS METHOD

© 2012 M.Yu. Tikhonchev, V.V. Svetukhin

Ulyanovsk State University

This paper is devoted to atomistic level simulation of extended boundary between hcp Zr and bcc Nb and evaluation of average atomic displacement threshold energy in vicinity of interface by molecular dynamics method. N-body interatomic potentials are prepared for Zr-Nb system. At that the potentials for pure Zr and Nb are taken from literature. Threshold displacement energies are calculated for single-component Zr and Nb as well as for Nb and Zr substitution atoms in Zr and Nb matrix respectively. The model of extended boundary between hcp Zr and bcc Nb is suggested. The interface region of considered boundary comprises 6 atomic layers of Zr and 2 atomic layers of Nb. The Nb part of this region has structure closed to bcc. The structure of Zr part is notably distorted. The assessments of average threshold displacement energies are obtained for atoms in interface region. The work is supported by the Russian ministry of science and education in frame of state assignment in 2012-2014, the Program Research and Scientific-Pedagogical Brainpower of Innovated Russia in 2009–2013.

Key words: molecular dynamics method, threshold displacement energy, Frenkel pair.

Mikhail Tikhonchev, Candidate of Physics and Mathematics, Head at the Non-Organic Materials Behaviour Modelling Laboratory. E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru
Viacheslav Svetukhin, Doctor Physics and Mathematics, Professor, Director of Research institute of technology. E-mail: slava@sv.uven.ru