

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРВИЧНОЙ РАДИАЦИОННОЙ ПОВРЕЖДАЕМОСТИ В СПЛАВЕ FeCr

© 2013 А.Б. Муралев

Ульяновский государственный университет

Поступила в редакцию 26.11.2013

В работе представлены результаты молекулярно-динамического моделирования процессов первичной радиационной повреждаемости бинарных неупорядоченных сплавов Fe-5ат.%Cr, Fe-10ат.%Cr и Fe-14ат.%Cr. Моделирование проведено для температуры 300 К с использованием многочастичного потенциала межатомного взаимодействия. Исследованы каскады атомных смещений, инициированные первично-выбитым атомом с энергией 20 кэВ. На основе выполненного моделирования оценено количество точечных дефектов кристаллической решетки, «переживших» рекомбинацию в каскаде, а также представлены результаты по составу кластеров вакансий и собственных междоузельных атомов, образующихся в таких каскадах.

Ключевые слова: каскады атомных смещений, метод молекулярной динамики, пара Френкеля

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Метод молекулярной динамики является одним из наиболее подходящих способов моделирования каскадов атомных смещений. К настоящему времени различными группами исследователей по всему миру проведено большое количество таких исследований применительно к различным материалам. Моделирование каскадов в сплавах также широко выполняется, хотя для многокомпонентных систем сохраняется проблема подготовки надежных потенциалов.

Основной целью работы является определение ряда параметров первичной радиационной повреждаемости сплавов Fe-x%Cr с учетом процессов рекомбинации и кластеризации точечных дефектов в каскадах смещений. Моделирование проведено для нескольких сплавов с различным содержанием хрома: Fe-5ат.%Cr, Fe-10ат.%Cr и Fe-14ат.%Cr при температуре 300 К.

## 2. МЕЖАТОМНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Для атомистического моделирования сплава FeCr широко применяется многочастичный потенциал межатомного взаимодействия, предложенный в работе [1], согласно которому полная потенциальная энергия системы из  $N$  атомов определяется как

$$E_{tot} = \sum_{i=1}^N \left[ F_{Ti} \left( \sum_{j \neq i} \rho_{Tj}(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} h_{TiTj}(x_{ij}) V_{TiTj}(r_{ij}) \right], \quad (1)$$

Муралев Артем Борисович, младший научный сотрудник лаборатории Компьютерного моделирования поведения неорганических материалов Научно-исследовательского технологического института им. С. Капицы.  
E-mail: a.b.muralev@yandex.ru

где  $E_{tot}$  – полная потенциальная энергия системы,  $T_i$  – тип  $i$ -го атома: Fe или Cr,  $\rho_{Ti}$  – собственная электронная плотность атома  $T_i$  как функция расстояния до его центра,  $F_{Ti}$  – функция внедрения,  $r_{ij}$  – расстояние между атомами  $i$  и  $j$ ,  $V_{TiTj}(r_{ij})$  – парный потенциал,

$$V_{FeCr} = \frac{V_{FeFe} + V_{CrCr}}{2}. \quad h_{TiTj}(x) = 1, \text{ если } T_i = T_j,$$

иначе  $h_{TiTj}(x)$  – полином Редлиха-Кистера четвертой степени,

$$x_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\rho_i^{Fe}}{\rho_i^{tot}} + \frac{\rho_j^{Fe}}{\rho_j^{tot}} \right), \quad (2)$$

где  $\rho_i^{Fe}$  – вклад в электронную плотность в узле  $i$  ( $\rho_i^{tot}$ ) только от атомов железа.

Потенциалы для взаимодействий Fe-Fe и Cr-Cr взяты авторами [1] из работ [2] и [3] соответственно. Параметры полинома  $h_{TiTj}(x)$  были подобраны так, чтобы близко воспроизвести кривую энтальпии смешения случайного ферро-магнитного сплава FeCr, рассчитанную методом *ab initio* из работы [4].

В данной работе применен вышеупомянутый потенциал межатомного взаимодействия, но с некоторыми изменениями, предложенными в работе [5]. Во-первых, потенциал для железа, взят из работы [6]. Во-вторых, в силу моделирования каскадов атомных смещений модифицирована репульсивная часть потенциала для взаимодействий Fe-Cr при относительно небольших (<1 Е) межатомных расстояниях. Для чего, слагаемое  $h_{FeCr}(x)V_{FeCr}(r)$  в формуле (1) заменено следующей функцией.

$$\overline{V_{FeCr}}(x, r) = h(x)V_{FeCr}^{mod}(r) + V(r), \quad (3)$$

где 
$$V_{FeCr}^{mod}(r) = \begin{cases} V_{FeCr}(r), & r > r_0 \\ cr^3 + dr^2, & 0 < r \leq r_0 \end{cases} \quad (4)$$

$$V(r) = \begin{cases} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), & 0 < r \leq r_1 \\ \alpha(r - r_2)^3 e^{\beta r}, & r_1 < r \leq r_2 \end{cases}, \quad (5)$$

$V(r)$  – экранированный кулоновский парный потенциал для  $r < r_1$ . Длина экранирования  $a$  определена согласно работе [7], а функция  $\Phi(x)$  – в соответствии подходу Циглера, Берсака и Литтмарка [8]. Коэффициенты  $c$ ,  $d$ ,  $\alpha$  и  $\beta$  подбираются из условия непрерывности соответствующих функций и их первых производных,  $r_1 = 1$  Е,  $r_0$  и  $r_2$  – подгоночные параметры. Подгонка проведена под энергии связи смешанных  $FeCr$  гантелей внедрений с ориентацией  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ , рассчитанных Ольссоном и др. [9] методом *ab initio*. Полученные значения  $r_0$  и  $r_2$  составили 2.22815 и 1.9664 Е соответственно.

### 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ В СПЛАВЕ FeCr

Молекулярно-динамическое моделирование первичного радиационного повреждения бинарного неупорядоченного ОЦК-сплава  $Fe-x\%Cr$  проведено для пяти различных концентраций хрома  $x$ : 5, 10 и 14%.

Для моделирования каскадов атомных смещений задавались ОЦК микрокристаллиты сплава  $FeCr$ , содержащие около  $10^6$  атомов. При этом расположение атомов разных типов в сплаве носило случайный характер, т.е. каждому атому кристаллита с вероятностью  $p=0.91$  приписывался тип  $Fe$  и с вероятностью  $(1-p)$  –  $Cr$ . В расчётах использовались «периодические» граничные условия. Моделирование проведено при начальной температуре кристаллитов  $T = 300$  К для энергии первично-выбитого атома (ПВА) 20 кэВ. Начальная температура обеспечивалась путем задания начальных скоростей атомам кристаллитов с последующим молекулярно-динамическим моделированием NPT-ансамбля с баростатом и термостатом Берендсена для нулевого давления и выбранной температуры в течении 30 пс с шагом по времени 1 фс. Затем, одному из атомов придавался импульс в высокоиндексном направлении  $\langle 135 \rangle$ .

На стадии остывания каскада для каждого микрокристаллита проводился подсчет образующихся радиационных дефектов. Для этого каждому узлу  $i$  идеальной кристаллической решетки ставилась в соответствие ячейка Вигнера-Зейца  $C_i$ , которую можно определить 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. Обобщения подобных ячеек известны в математике и физике под названиями ячеек Дирихле и полиэдров Вороного. Отсутствие атомов в ячейке  $C_i$  трактуется как вакансия в узле  $i$ , попадание более одного атома в ячейку  $C_i$  трактуется как наличие внедрений вблизи узла  $i$ . Число дефектов определяется как общее количество ячеек Вигнера-Зейца, не содержащих ни одного атома материала.

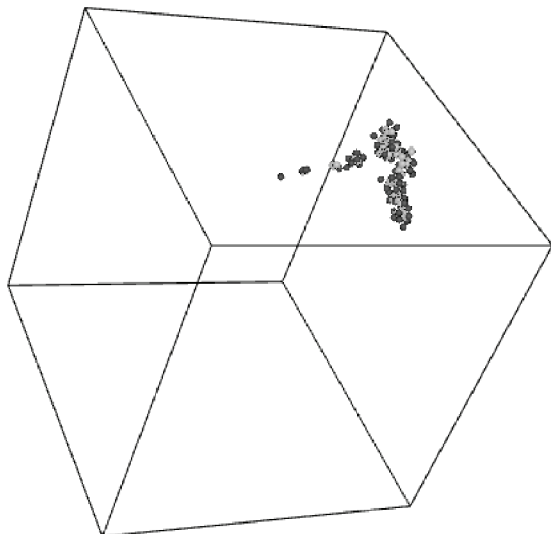
Моделирование каскадов атомных смещений в сплаве  $FeCr$  (рис. 1) показало, что на завершающей стадии каскадов общее число «выживающих» точечных дефектов кристаллической решетки для выбранной энергии ПВА (рис. 2) практически не зависит от исходной концентрации атомов хрома в матрице. Оценка количества радиационных дефектов составила в среднем около 83 дефектов, что количественно согласуется с аналогичным результатом работы [10], в которой были исследованы каскады атомных смещений в бинарном сплаве  $Fe-9at.\%Cr$  при температуре 600 К для энергий ПВА 0.1, 0.5, 1, 2, 5, 10, 15 и 20 кэВ.

Содержание атомов хрома в междоузельных конфигурациях (рис. 3) *превышает* исходное содержание хрома в матрице приблизительно в 2 раза. В работе [10] оценка доли атомов  $Cr$  в междоузлиях в среднем составила  $\approx 22\%$ , что также согласуется с аналогичным результатом для  $Fe-10\%at.Cr$  данной работы. Наблюдаемый эффект можно объяснить более высокой подвижностью атома хрома по сравнению с атомом железа в исследуемых сплавах.

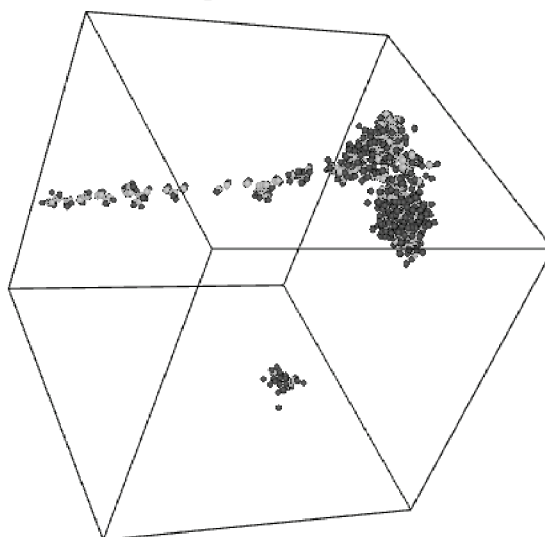
Наряду с оценками числа «выживающих» дефектов, были получены оценки количества, размеров вакансионных и междоузельных кластеров (рис. 4, 5), остающихся в кристаллите после затухания каскада. Дефекты одного типа считали принадлежащими одному кластеру, если соответствующие им узлы решетки находятся на расстоянии не далее вторых ближайших соседей ( $2nn$ ) для вакансий и третьих ( $3nn$ ) ближайших соседей для междоузлий.

До 50% от общего числа «выживающих» радиационных дефектов на завершающей стадии каскадов связаны в кластеры (рис. 4). Для сплавов с долей атомов хрома в исходной матрице 5 и 14% кластеризуется равная с учетом погрешностей доля точечных дефектов, что несколько выше, чем для сплава  $Fe-10at.\%Cr$ . При этом, только в сплаве  $Fe-10at.\%Cr$  обнаружено практически равное количество междоузельных конфигураций и вакансий, связанных в кластеры (рис. 5); для сплавов  $Fe-5at.\%Cr$  и  $Fe-14at.\%Cr$  доля кластеризованных междоузлий выше чем

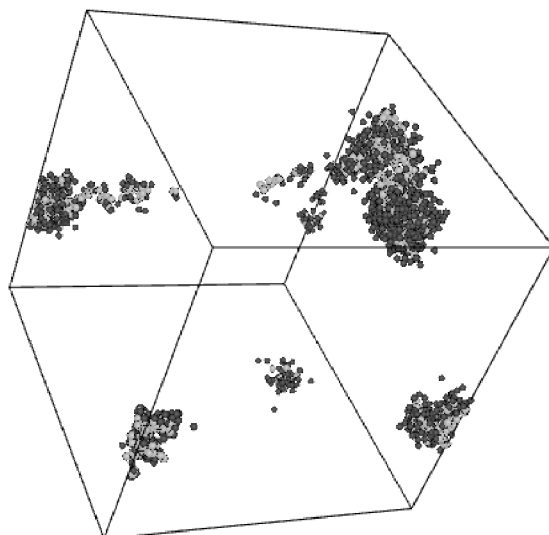
**time = 48.8344 фс**



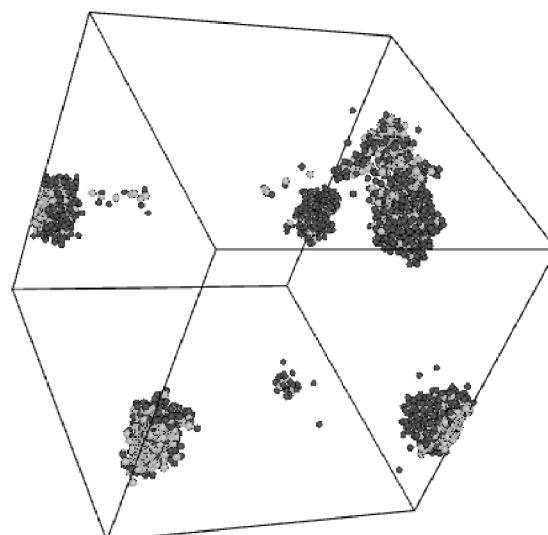
**time = 149.019 фс**



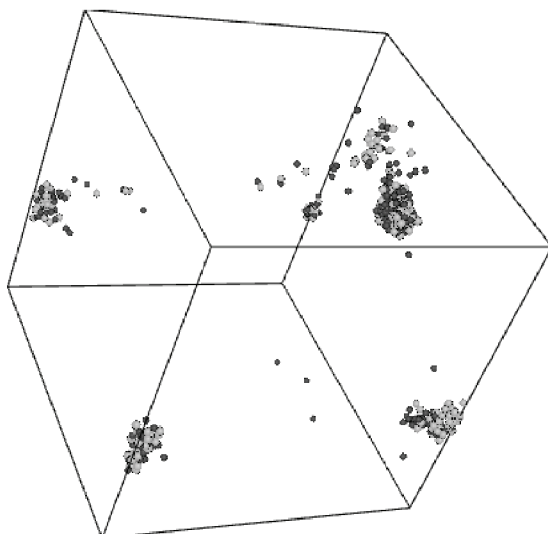
**time = 291.054 фс**



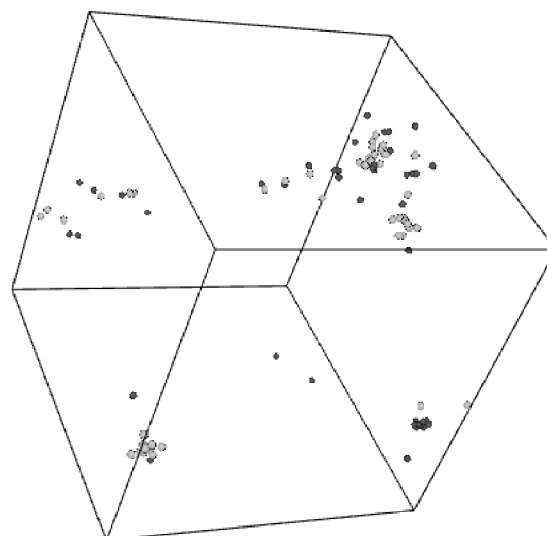
**time = 888.332 фс**



**time = 3388.32 фс**



**time = 29999.9 фс**



**Рис. 1.** Пример развития каскадов атомных смещений в бинарном сплаве Fe-10ат.%Cr (в качестве светлых окружностей выступают вакансии, темных – междоузельные конфигурации)

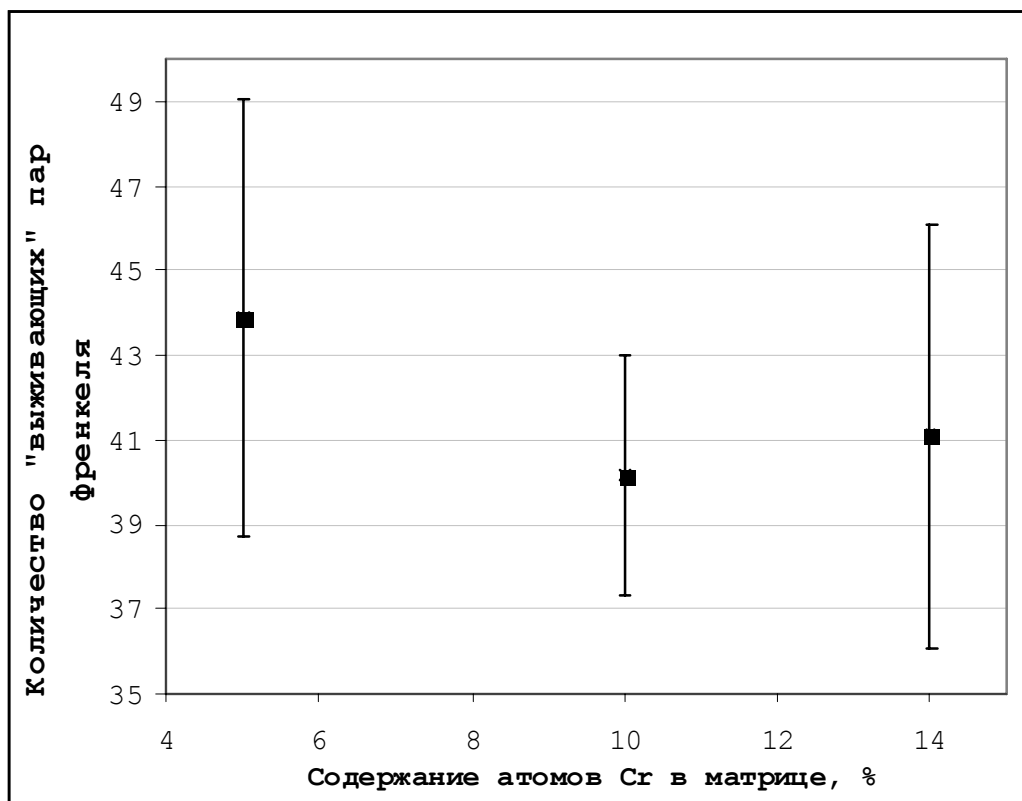


Рис. 2. Количество образующихся пар Френкеля на завершающей стадии каскадов атомных смещений в зависимости от концентрации атомов Cr в исходной матрице

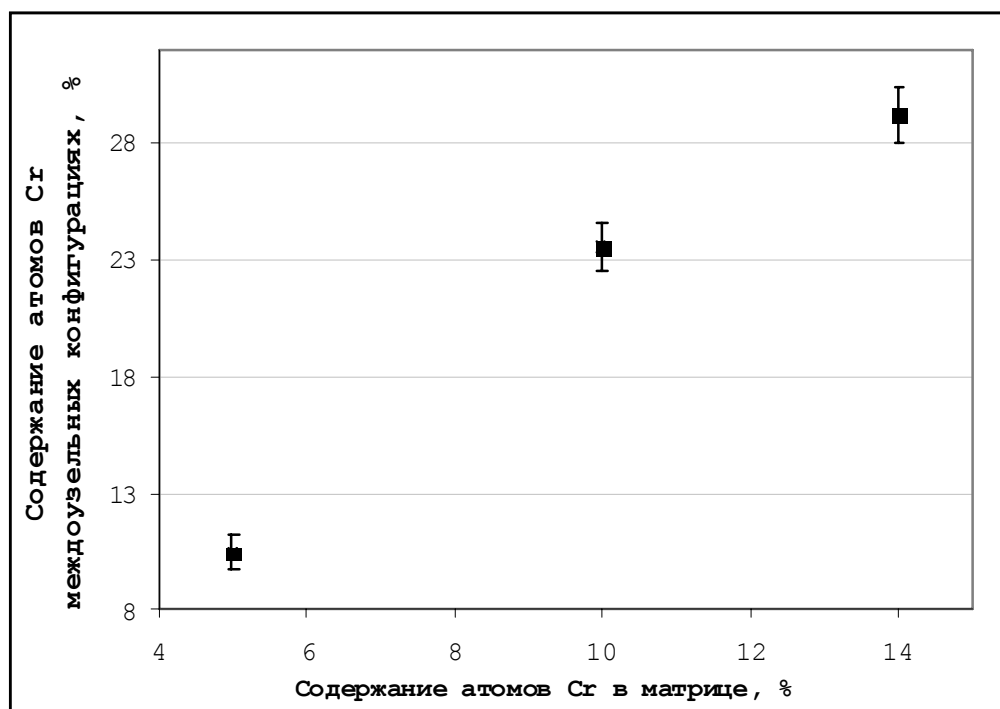


Рис. 3. Содержание атомов Cr в образующихся междуузельных конфигурациях в зависимости от концентрации атомов Cr в исходной матрице

вакансий в  $\approx 1.3$  раза и составляет  $\approx 56$  и  $50\%$  соответственно.

Средний размер кластеров “выживающих” точечных дефектов в исследуемых сплавах для

выбранной энергии первично-выбитого атома, практически одинаков как для скоплений вакансий, так и междуузельных конфигураций, и составляет в среднем 3.6.

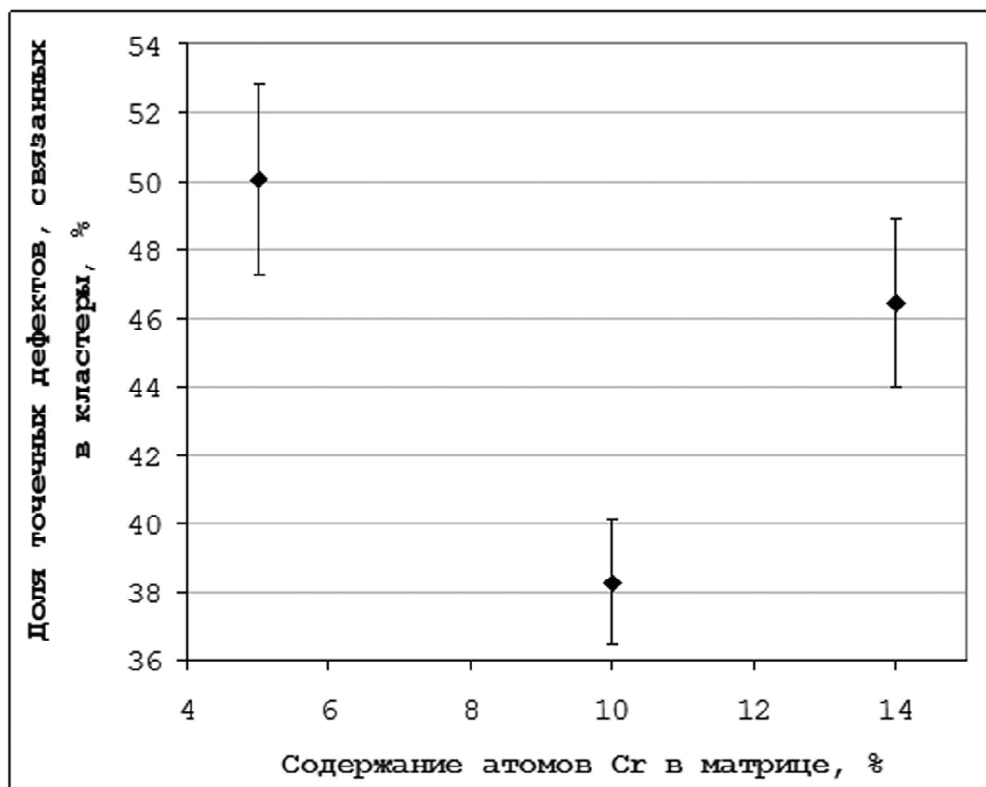


Рис. 4. Доля точечных кластеризованных точечных дефектов в зависимости от концентрации атомов Cr в исходной матрице

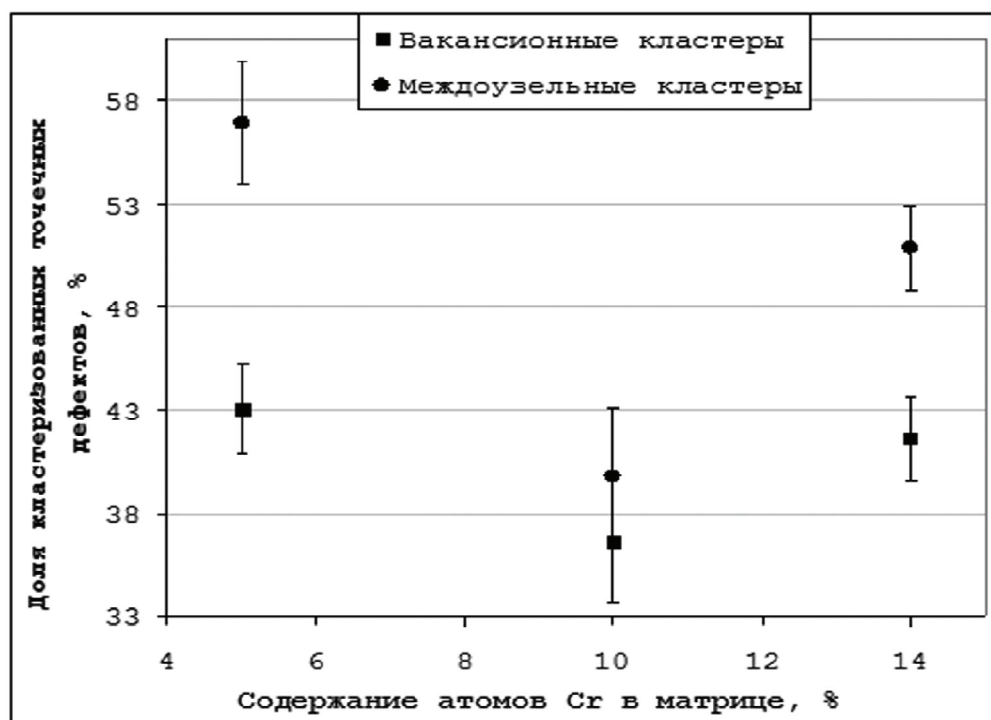


Рис. 5. Доля кластеризованных вакансий и СМА в зависимости от концентрации атомов Cr в матрице

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе путем молекулярно-динамического моделирования рассмотрены процессы первичного радиацион-

ного повреждения сплавов *FeCr* с различным содержанием хрома в матрице: 5, 10 и 14%. Моделирование проведено при температуре 300 К для энергии первично-выбитого атома 20 кэВ. В расчетах был использован много-

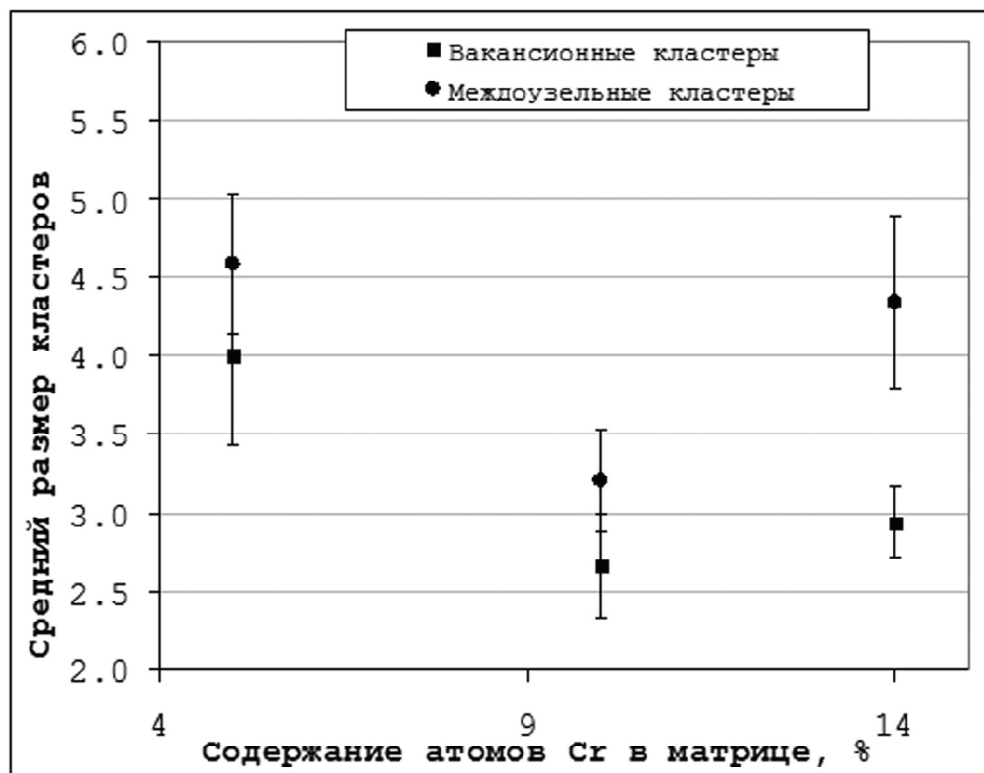


Рис. 6. Средний размер кластеров в зависимости от концентрации атомов Cr в исходной матрице

частичный потенциал межатомного взаимодействия.

Результаты проведенных расчетов позволили установить, что для выбранной энергии первично-выбитого атома, общее число радиационных дефектов, образующихся на завершающей стадии развития каскадов атомных смещений, практически не зависит от содержания хрома в исходной матрице железа. Среднее число «выживающих» точечных дефектов составляет около 83. При этом концентрация атомов хрома в междоузельных конфигурациях во всех рассмотренных кристаллитах практически в 2 раза превосходит исходную концентрацию хрома в сплаве, что количественно согласуется с аналогичным результатом для *Fe-9at.%Cr*, представленным в работе [10].

Доля междоузлий, образующих кластеры, а также средний размер кластеров выше соответствующих значений для вакансионных кластеров, что можно наблюдать в похожих расчетах работ [3, 10]. При этом для одного из сплавов, а именно для *Fe-10at.%Cr*, оценки доли кластеризованных дефектов в целом, а также кластеризованных вакансий и междоузельных конфигураций имеют наименьшие значения, что в свою очередь требует дальнейших проведенных исследований с другим содержанием хрома в исходной матрице, а также при других значениях энергии первично-выбитого атома.

*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 и при частичной поддержке гранта РФФИ – проект 12-08-97076.*

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Classical Many-Body Potential for Concentrated Alloys and the Inversion of Order in Iron-Chromium Alloys / A. Caro, D.A. Crowson, M. Caro // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95(7). Pp. 4.
2. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron / M.I. Mendeleev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sun, M. Asta // Phil. Mag. 2003. V. 83. P. 3977-3994.
3. Displacement cascades in Fe-Cr. A molecular dynamics study / D.A. Terentyev, L. Malerba, R. Chakarova, K. Nordlund, P. Olsson, M. Rieth, J. Wallenius // J. Nucl. Mater. 2006. V. 349(1). P. 119–132.
4. Ab initio formation energies of Fe-Cr alloys / P. Olsson, I.A. Abrikosov, L. Vitos, and J. Wallenius // J. Nucl. Mater. 2003. V. 321. P. 84-90.
5. MD simulation of atomic displacement cascades near chromium-rich clusters in FeCr alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, E. Gaganidze // J. Nucl. Mater. 2013. V. 442. P. S618-S623.
6. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in a-iron / G.J. Ackland, M.I. Mendeleev, D.J. Srolovitz, S.W. Han, A.V. Barashev // J. Phys.: Condens. Matter. 2004. V. 16. Pp. 2629-2642.

7. *Bohr N., Dansk Kgl., Selsk Vid.* // Mat. Fys. Medd. 1948. Vol. 18.
8. The stopping and range of ions in solids / *J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark* // Pergamon Press. 1985. V. 1.
9. *Ab initio* study of Cr interactions with point defects in bcc Fe / *Olsson P., Domain C., Wallenius J.* // Phys. Rev. B. 2007. V. 75. P. 12.
10. MD simulation of atomic displacement cascades in Fe-9at.%Cr binary alloy / *M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze* // J. Nucl. Mater. 2009. V. 395. P. S50-S57.

## STUDY OF THE PRIMARY RADIATION DAMAGE IN THE BINARY FeCr ALLOY

© 2013 A.B. Muralev

Ulyanovsk State University

This paper is devoted to the results of the molecular dynamics simulation of primary radiation damage disordered binary alloys: Fe-5at.%Cr, Fe-10at.%Cr and Fe-14at.%Cr. Simulation is carried out at 300 K using many-body interatomic potential. We examined cascades of atomic displacements cascades for the energies of primary knock-on atom 20 keV. On the results of the simulation was estimated number of “surviving” point defects, survived recombination in the cascade, and the results on the composition of clusters of vacancies and self-interstitial atoms formed in such cascades.

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