

УДК 621.039.531:004.942

## Моделирование каскада радиационных смещений в Zr методом молекулярной динамики

Н.С. Палей

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Н.В. Чистякова

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: nsp29@tpu.ru

## Modeling of a cascade of radiation displacement in Zr using the molecular dynamics method

N.S. Paley

Scientific Supervisor: Ph.D. N.V. Chistyakova

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: nsp29@tpu.ru

**Abstract.** Due to the molecular dynamics method, there were got dependence Frenkel's pairs on time for a cascade of radiation displacement in Zr, induced by primary knocked-on atom (PKA) with energy 1 keV for different crystallographic arrangement. It was found that PKA arrangement does not act Frenkel's pair-time distribution.

**Key word:** Molecular dynamics, primary knocked-on atom, Frenkel's pair.

### Введение

Функционально градиентные материалы – класс материалов, у которых наблюдается плавное изменение механических свойств или химического состава по глубине от поверхности. Кроме того, такие материалы проявляют высокую радиационную стойкость, поэтому они являются перспективными материалами для ядерной энергетики. С помощью моделирования методом молекулярной динамики можно изучить механизмы образования и эволюции дефектов в материалах на атомном уровне. Цель работы – исследовать количество, тип и распределение дефектов в процессе развития радиационного каскада в цирконии.

### Экспериментальная часть

Для расчётов применялся метод молекулярной динамики, который реализован в программном пакете LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Для описания взаимодействия атомов применялся межатомный потенциал, предложенный Менделевым и Акландом [1]. В расчётной суперячейке циркония с размером  $230 \times 232 \times 224 \text{ \AA}$  [2], с периодом решётки  $3,232 \text{ \AA}$ , с гексагональной плотноупакованной решёткой создавалось 520128 атомов. Граничные условия были заданы периодическими условиями во всех направлениях. Первично-выбитый атом (ПВА) выбирался для каждого направления, так чтобы радиационный каскад не выходил за пределы расчётной области. Перед запуском ПВА проводилась выдержка при постоянном количестве атомов, объёме и температуре (NVT ансамбль) для того, чтобы в системе установилась постоянная температура 300 К. Далее ПВА запускался с энергией 1 кэВ в нескольких кристаллографических направлениях:  $\langle 0001 \rangle$ ,  $\langle 1\bar{1}00 \rangle$  и  $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ . При этом был задан тот же ансамбль с шагом 0,0001 пс в течение 1 пс. После этого задавался ансамбль с постоянным количеством атомов, объёмом и энергией (NVE) в течение 15 пс с шагом 0,001 пс [3]. После окончания моделирования проводился анализ моделирования в программном пакете OVITO (Open Visualization Tool). В OVITO при помощи, встроенного в программный пакет, анализа Вингера-Зейца проводился замер количества пар Френкеля в единицу времени для всех кристаллографических направлений.

**Результаты**

В результате моделирования были получены зависимости пар Френкеля от времени для ПВА с разными кристаллографическими направлениям (рис. 1).

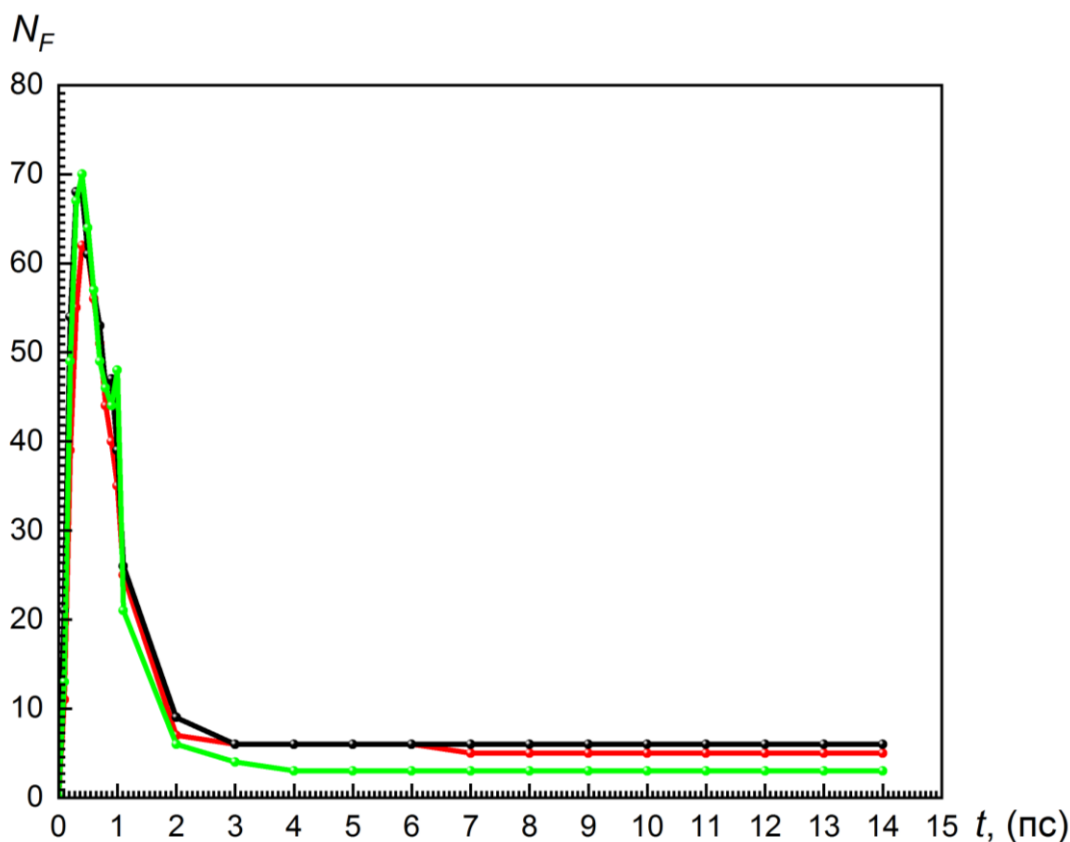


Рис. 1. Зависимость пар Френкеля от времени каскада радиационных смещений, инициируемый ПВА с энергией 1 кэВ. Чёрная линия – направление  $\langle 0001 \rangle$ , красная линия – направление  $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ , зелёная линия – направление  $\langle 11\bar{2}3 \rangle$

Из рис. 1 видно, что зависимости пар Френкеля от времени для различных направлений выглядят приблизительно одинаковыми, то есть можно сказать, что направление ПВА с энергией 1 кэВ практически не влияет на распределение дефектов по времени.

Для дальнейшего сравнения были выписаны следующие значения: максимальное число пар Френкеля, время пика, число выживших пар Френкеля (табл. 1).

Таблица 1

Результаты моделирования

| Направление ПВА              | Максимальное количество пар Френкеля $N_F^{MAX}$ | Время пика $t_p$ , пс | Количество выживших пар Френкеля $N_F^S$ |
|------------------------------|--------------------------------------------------|-----------------------|------------------------------------------|
| $\langle 0001 \rangle$       | 62                                               | 0,4                   | 5                                        |
| $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ | 68                                               | 0,3                   | 6                                        |
| $\langle 11\bar{2}3 \rangle$ | 70                                               | 0,4                   | 3                                        |

Из табл. 1 можно сказать, что пик каскада достигается в примерно одинаковое время, число максимальное число пар Френкеля незначительно отличаются в зависимости от кристаллографического направления, а также на направление не сильно влияет на число выживших пар Френкеля.

Также была проанализирована эволюция каскада радиационных смещений в цирконии, инициируемый ПВА с энергией 1 кэВ (рис. 1).

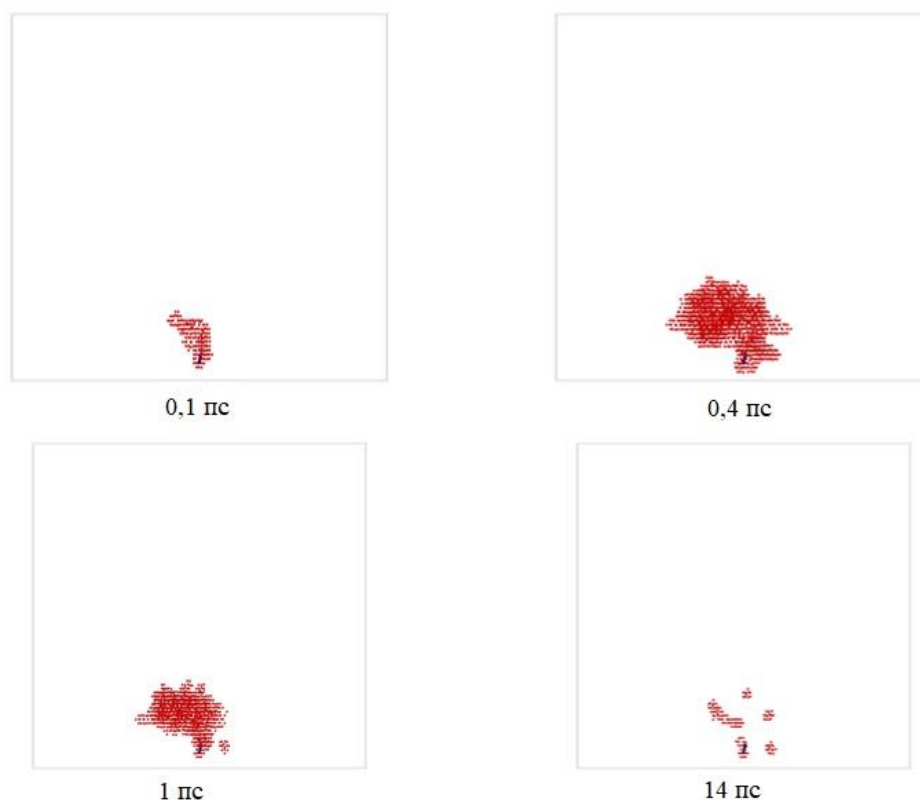


Рис. 1. Эволюция каскада в направлении  $\langle 0001 \rangle$

Из рис. 1 можно заметить, что выжившие дефекты располагаются в небольшой области суперячейки, образуя область, насыщенную точечными дефектами.

### Заключение

В ходе работы был исследован каскад радиационных смещений в цирконии, вызванных первично-выбитым атом с энергией 1 кэВ. В результате было установлено, что при энергии ПВА равной 1 кэВ направление ПВА не влияет на распределение дефектов в течении времени.

### Список литературы

1. Ackland G.J., Wooding S.J., Bacon D.J. Defect, surface and displacement threshold properties of a zirconium simulated with manybody potential // Phil. Mag. A. – 1995. – Vol. 71, № 3. P. 553–565.
2. Wei Zhou, Jiting Tian, Qijie Feng et al. Molecular dynamics simulations of high-energy displacement cascades in hcpZr // Journal of Nuclear Materials. – 2018. – Vol. 508. – P. 540–545.
3. Mohammad B.S., Minkyu P., Mosab J.B. A Molecular Dynamics Study of Tungsten's Interstitial Dislocation Loops Formation Induced by Irradiation under Local Strain // Solids. – 2022. – Vol. 3. – P. 219–230.