

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

DOI 10.21685/2072-3040-2016-3-8

*П. Е. Капустин, В. В. Светухин, М. Ю. Тихончев*

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ В ДЕФОРМИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ГПУ-ЦИРКОНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ДЕФОРМАЦИИ НА ДЕФЕКТНУЮ СТРУКТУРУ<sup>1</sup>

### Аннотация.

*Актуальность и цели.* В настоящей работе рассматривается влияние гидростатической и одноосной деформации модельного кристаллита ГПУ-циркония на его дефектную структуру, сформированную в результате прохождения каскада атомных смещений с энергией первично выбитого атома (ПВА) 10 кэВ. Для одноосного деформирования были выбраны следующие направления:  $[23\bar{4}6\ 23\ 27]$ ,  $[\bar{1}2\bar{1}3]$ ,  $[4\bar{5}10]$  и  $[21\bar{3}0]$ . Степень деформирования модельного кристаллита составляла 0,1, 0,5 и 1 % обоих знаков.

*Материалы и методы.* В работе рассматривается гидростатическая и одноосная деформация кристаллита ГПУ-циркония. Компьютерное моделирование осуществлялось с помощью метода молекулярной динамики с применением многопотенциального потенциала межатомного взаимодействия.

*Результаты.* Получены численные значения энергии формирования точечных дефектов при температуре 0 К. Зависимость числа выживших пар Френкеля от степени деформации модельного кристаллита не была установлена. Анализ кластеризации дефектов показал, что преимущественно формируются одиночные дефекты. Кластеры большого размера (>20 дефектов на кластер) представлены преимущественно вакансиями.

*Выводы.* Выявлена линейная зависимость энергии формирования от степени деформации модельного кристаллита. Наибольшие размеры кластеров дефектов были получены в деформированном состоянии, таким образом, деформирование модельного кристаллита способствует увеличению размеров формируемых кластеров. Установлено, что доля кластеризованных вакансий превышает долю собственных междоузельных атомов (СМА), а средний размер вакансионного кластера превышает средний размер СМА кластера.

**Ключевые слова:** цирконий, деформация, энергия формирования, каскады атомных смещений, кластеризация дефектов.

*Р. Е. Капустин, В. В. Светухин, М. Ю. Тихончев*

## SIMULATION OF ATOMIC DISPLACEMENT CASCADES IN THE DEFORMED HCP ZIRCONIUM MODEL BY THE MOLECULAR DYNAMICS METHOD. EVALUATION OF THE EFFECT OF DEFORMATION ON THE DEFECT STRUCTURE

### Abstract.

*Background.* The paper considers the influence of hydrostatic and uniaxial deformation of the HCP-Zirconium model crystallite on its defect structure formed as

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ в рамках проектной части государственного задания на 2014–2016 гг., а также при поддержке гранта РФФИ: проект № 16-42-732113.

a result of the atomic displacement cascade passage with the energy of primary knock-on atom (PKA) 10 keV. The following axes were chosen for uniaxial deformation:  $[23\bar{4}6\ 23\ 27]$ ,  $[\bar{1}2\ \bar{1}3]$ ,  $[4\bar{5}10]$  and  $[21\bar{3}0]$ . The compression and expansion ratio of the model crystallite amounted to 0.1, 0.5 and 1%.

*Materials and methods.* The study considers the HCP-Zirconium crystallite with hydrostatic and uniaxial deformation. A computer simulation was performed with the help of the molecular dynamics method using the many-body potential of interatomic interaction.

*Results.* Numerical values of the point defects formation energy at the temperature of 0 K were obtained. The dependence of a number of surviving Frenkel pairs on the model crystallite deformation degree was not determined. The defects clustering analysis revealed the dominating single defects formation. Clusters of large size (>20 defects per cluster) were represented mainly by vacancies.

*Conclusions.* The linear dependence of the formation energy on the model crystallite deformation degree was revealed. The defects clustering analysis revealed the dominating single defects formation. Clusters of large size (>20 defects per cluster) were represented mainly by vacancies. The largest defects clusters sizes were obtained in the deformed state, thus, the model crystallite deformation extended the formed clusters growth. The proportion of clustered vacancies was determined to exceed the proportion of self-interstitial atoms (SIA), and the average vacancy cluster size exceeded the average size of the SIA cluster.

**Key words:** zirconium, deformation, formation energy, atomic displacements cascades, defects clustering.

### **Введение**

В процессе эксплуатации ядерных реакторов конструкционные материалы подвергаются сильному радиационному облучению, механическим нагрузкам, которые приводят к деградации физико-механических свойств материала [1, 2]. Широкое применение в качестве конструкционного материала для реакторов на тепловых нейтронах получил цирконий и сплавы на его основе (Э110, Э125, Э635). Модификация применяемых материалов, а также создание новых сплавов с улучшенными эксплуатационными характеристиками невозможно без детального и глубокого изучения процесса взаимодействия излучения с веществом.

Для теоретического изучения процессов первичного радиационного повреждения широко применяется метод молекулярной динамики (МД). В настоящее время имеется обширная база результатов моделирования методом МД для широкого круга материалов. Большая часть из них посвящена аустенитным сталям [3–6], железу и сплавам на его основе [7–15], а также цирконию [16–23]. Повышенный интерес представляет моделирование процессов первичного радиационного повреждения в деформированных материалах. Имеется ряд публикаций, в которых методом МД моделируется деформированное железо, медь, ванадий [24–28]. По моделированию деформированного циркония нами была найдена лишь одна работа [29], в которой авторами рассматривалось влияние одноосной деформации сжатия и растяжения на кластеризацию точечных дефектов, выживших после прохождения каскада атомных смещений. Таким образом, изучение влияния деформации циркония на процессы первичного радиационного повреждения является актуальной задачей.

Настоящая работа посвящена моделированию каскадов атомных смещений в ГПУ-цирконии при гидростатическом и одноосном деформировании вдоль четырех направлений:  $[23\bar{4}6\ 23\ 27]$ ,  $[\bar{1}2\bar{1}3]$ ,  $[4\bar{5}10]$  и  $[21\bar{3}0]$ . Проводится анализ кластеризации дефектов, а также оценивается влияние деформации на изменение энергии формирования точечных дефектов.

### 1. Метод моделирования

Предметом исследования выступает кристаллит ГПУ-циркония, построенный с помощью трансляционной симметрии элементарной ячейки. Для изучения влияния деформации на энергию формирования точечных дефектов был подготовлен модельный кристаллит, размеры которого составляли  $40 \times 40 \times 40$  Å. На гранях модели применялись периодические граничные условия. Создание точечного дефекта в полученном кристаллите осуществлялось путем удаления атома из узла решетки (вакансия) и размещения атома в восьми конфигурациях собственных междоузельных атомов (СМА) (рис. 1). Для дальнейшего проведения компьютерного моделирования использовался потенциал межатомного взаимодействия, разработанный Акландом и Менделевым и представленный в работе [21].

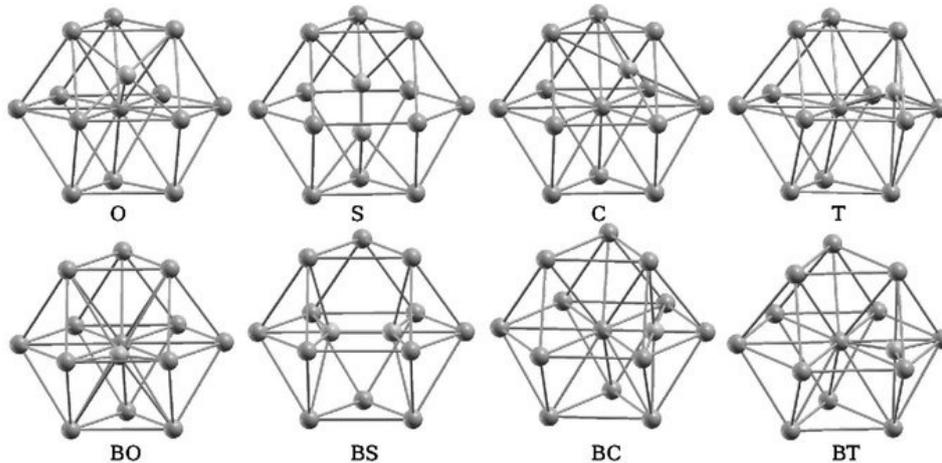


Рис 1. Конфигурации СМА в ГПУ-цирконии

Для моделирования каскадных процессов был подготовлен модельный кристаллит размером  $185 \times 185 \times 185$  Å. Далее проводилась релаксация модели при температуре 100 К с использованием термостата и тензорного варианта баростата Берендсена в течение нескольких пикосекунд. Параметры решетки были предварительно рассчитаны при нулевом давлении и температуре 100 К. Энергия первично выбитого атома (ПВА) составляла 10 кэВ, его направление и начальное положение выбирались произвольно, время моделирования составляло  $\sim 40$  пс, достаточно для того, чтобы считать каскад «затухшим». Для численного интегрирования уравнений движения при моделировании прохождения каскада атомных смещений применялся алгоритм Верле с неравномерным шагом по времени. Критерием выбора шага являлись величина смещения частицы с максимальной скоростью за один шаг ( $0,02$  Å) и ограничение временного шага по времени (не превышало 2 фс). Для проведения

оценки числа выживших пар Френкеля использовался метод полиэдров Вороного, построенных на узлах атомов инициального кристаллита.

В работе рассматривается гидростатическое и одноосное сжатие и растяжение модельного кристаллита на 0,1, 0,5 и 1 %. Для каждой степени деформации проводилось по 16 вычислительных экспериментов.

## 2. Результаты моделирования

На рис. 2–4 представлены диаграммы изменения энергии формирования вакансии, СМА и пары Френкеля от величины изменения объема модельного кристаллита вследствие его гидростатического и одноосного деформирования. Из полученных данных видно, что изменение энергии формирования линейно относительно изменения объема модельного кристаллита. Для вакансий данная зависимость описывается следующим уравнением:

$$E_{fVAC} = 0,058 \cdot \Delta V + 1,689, \quad (1)$$

где  $\Delta V$  – изменение объема модельного кристаллита. Для СМА данная зависимость имеет следующий вид:

$$E_{fSIA} = -0,139 \cdot \Delta V + 2,776. \quad (2)$$

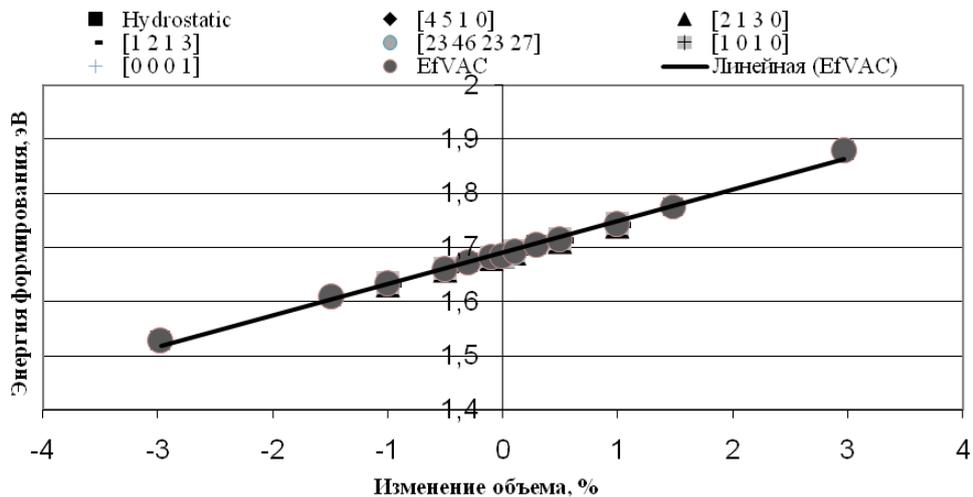


Рис. 2. Изменение энергии формирования вакансии относительно изменения объема модельного кристаллита

Стоит отметить, что для моделирования изменения энергии формирования СМА использовалась конфигурация O – Octahedral (рис. 1), так как она обладает наименьшей энергией формирования (2,77 эВ) в случае недеформированного ГПУ-циркония. Изменение энергии формирования пары Френкеля описывается линейной зависимостью вида

$$E_{fPAIR} = -0,081 \cdot \Delta V + 4,465. \quad (3)$$

Также были получены результаты по изменению энергии формирования точечных дефектов вдоль направлений  $[10\bar{1}0]$  и  $[0001]$ , рассматрива-

емых в работе [29]. Значения энергий формирования хорошо согласуются с полученными выше зависимостями (1)–(3). Таким образом, изменение энергии формирования точечных дефектов, а также пары Френкеля линейно зависит от степени деформации модельного кристаллита, но не зависит от типа деформации (гидростатическая или одноосная).

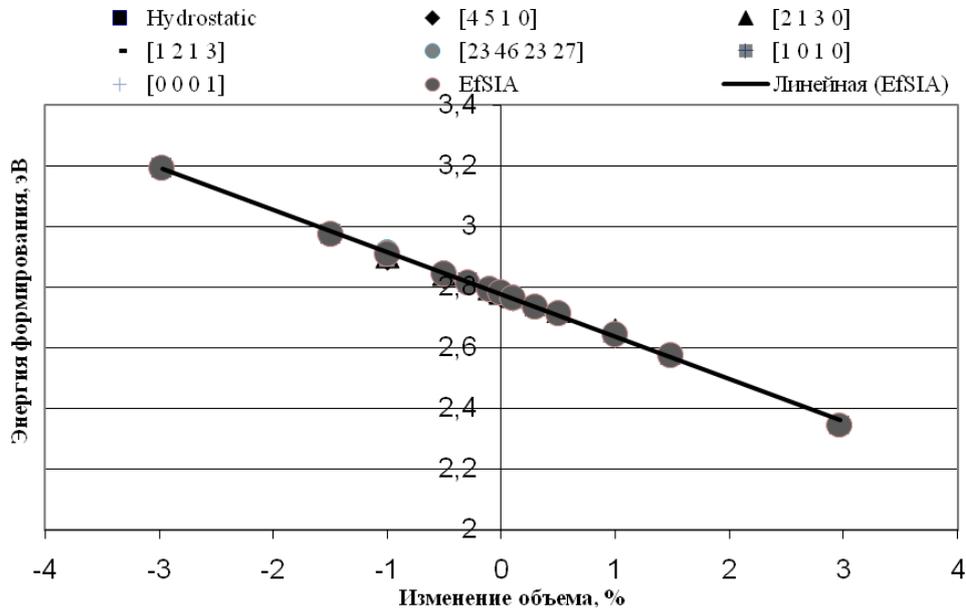


Рис. 3. Изменение энергии формирования СМА относительно изменения объема модельного кристаллита

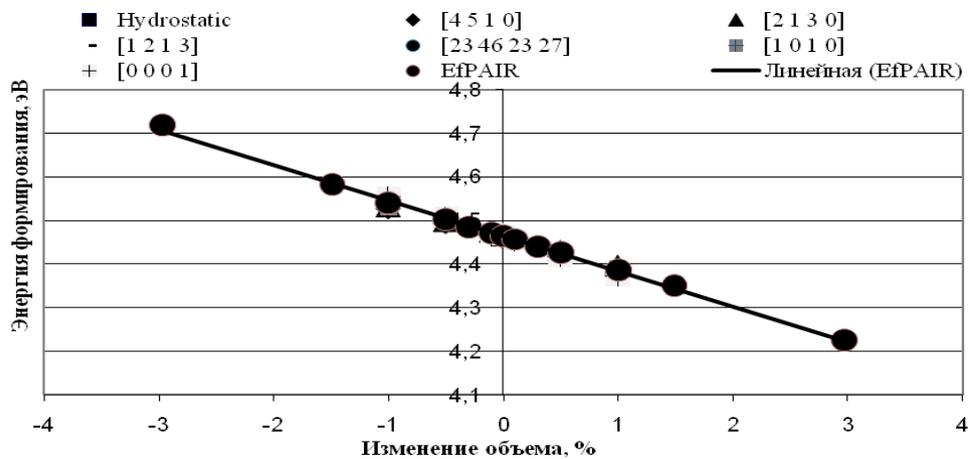


Рис. 4. Изменение энергии формирования пары Френкеля относительно изменения объема модельного кристаллита

На следующем этапе осуществлялось моделирование прохождения каскада атомных смещений с энергией ПВА 10 кэВ в деформированном кристаллите ГПУ-циркония. После затухания каскадного процесса производился анализ кристаллита на предмет выживших пар Френкеля. На рис. 5 представ-

лена диаграмма, демонстрирующая изменение числа выживших пар от степени и типа деформации. Из полученных результатов видно, что деформирование модельного кристаллита не приводит к формированию тенденции роста или снижения числа выживших пар. Стоит отметить, что наибольшее и наименьшее число пар было сформировано при прохождении каскада в деформированном кристаллите: 18 пар при одноосном сжатии на 0,1 % вдоль направления  $[2\ 1\ \bar{3}\ 0]$  и 23 пары при гидростатическом растяжении на 0,1 %.

Полученные результаты по количеству выживших пар Френкеля согласуются с данными из [29].

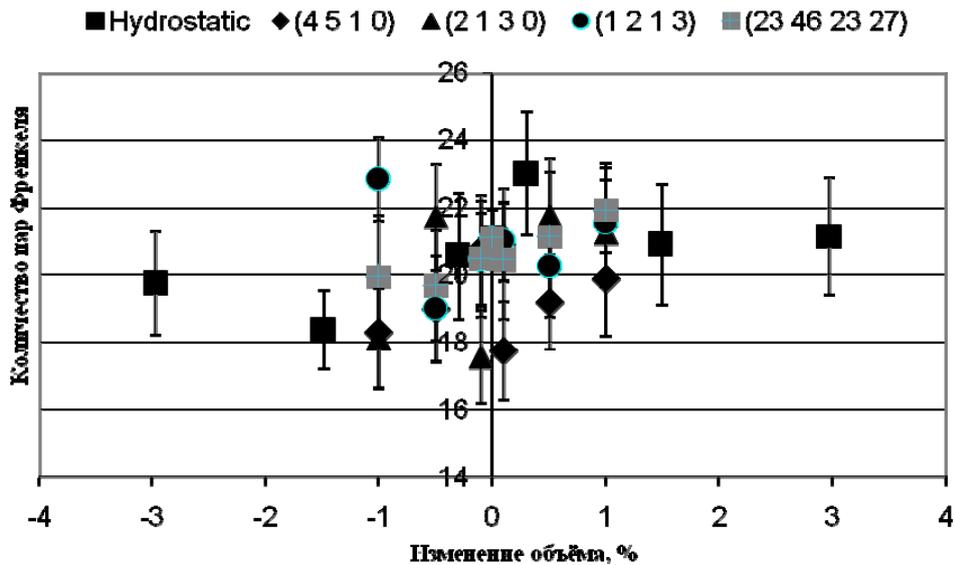
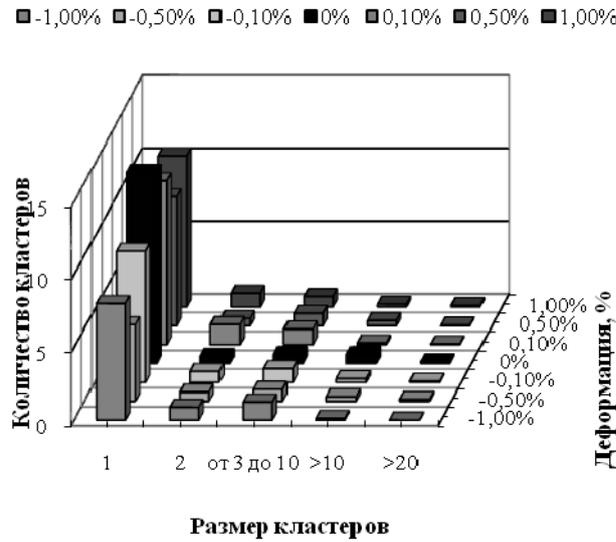


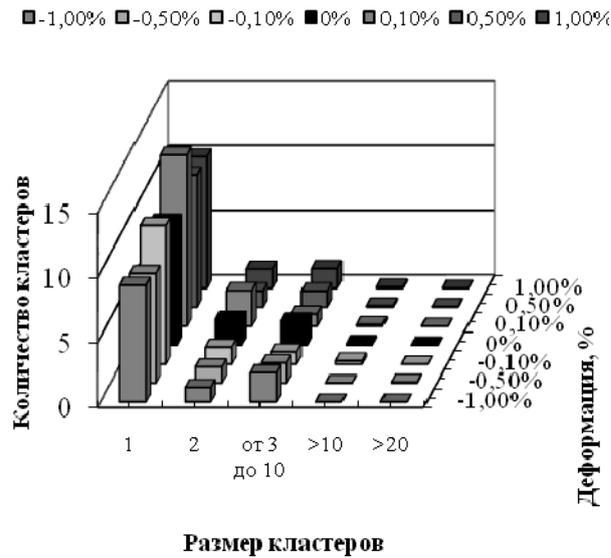
Рис. 5. Количество выживших пар Френкеля

На рис. 6–10 представлены результаты анализа кластеризации вакансий и СМА после прохождения каскада атомных смещений. Принадлежность дефектов к одному кластеру оценивалась по первым соседям. Из полученных данных видно, что в основном в объеме кристаллита происходит формирование одиночных вакансий и СМА. Их число зависит от степени и типа деформации кристаллита. Вакансионных димеров в 1,5–4 раза меньше, чем СМА-димеров. Число вакансионных и СМА кластеров среднего размера (от 3 до 10 дефектов) сопоставимо между собой для большинства из рассмотренных типов деформации, а при одноосном деформировании вдоль  $[2\ 1\ \bar{3}\ 0]$  и  $[\bar{1}\ 2\ \bar{1}\ 3]$  совпадает. Кластеры большого размера (не менее 10 дефектов на кластер) представлены преимущественно вакансиями, количество которых в 2–6 раз превышает число СМА-кластеров такого размера. Наибольший размер вакансионного и СМА-кластера составил 29 и 26 дефектов соответственно, и были получены при гидростатическом растяжении модельного кристаллита на 0,5 %. Во всех рассмотренных случаях деформация способствует формированию кластеров большого размера, что согласуется с результатами из работы [29], в которой авторами было установлено, что деформация вдоль

направлений  $[10\bar{1}0]$  и  $[0001]$  способствует увеличению размеров формируемых кластеров дефектов.



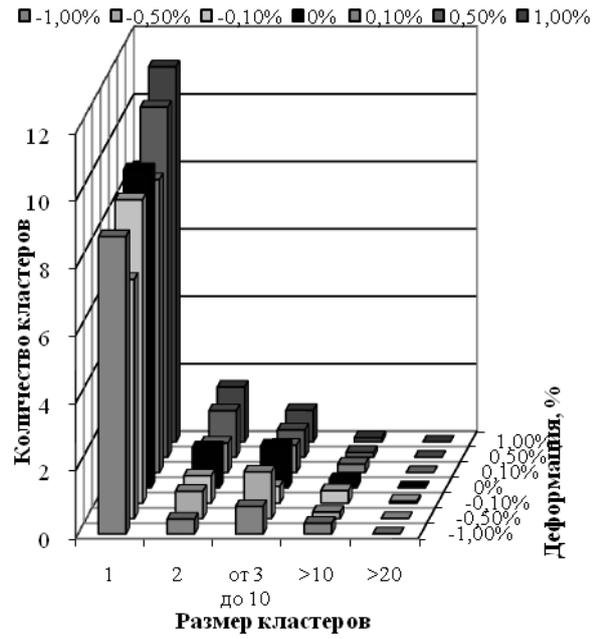
а) Вакансии



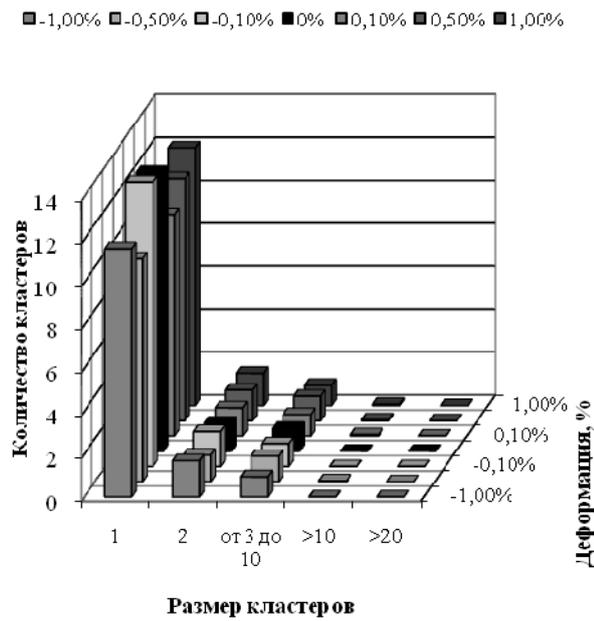
б) СМА

Рис. 6. Распределение кластеров дефектов по размеру при гидростатическом деформировании

Далее была произведена оценка изменения доли кластеризованных вакансий (рис. 11) и СМА (рис. 12) при деформировании модельного кристаллита. Рассматривались кластеры, размер которых составлял не менее трех дефектов.



а) Вакансии



б) СМА

Рис. 7. Распределение кластеров дефектов по размеру при одноосном деформировании вдоль  $[4\bar{5}10]$

Из полученных данных видно, что усредненная по всем рассматриваемым типам деформации доля кластеризованных вакансий (0,55) превышает

ет долю СМА (0,45). Доля кластеризованных вакансий увеличивается при сжатии кристаллита и уменьшается при его растяжении относительно недеформированного состояния, при этом для СМА такой картины не наблюдается.

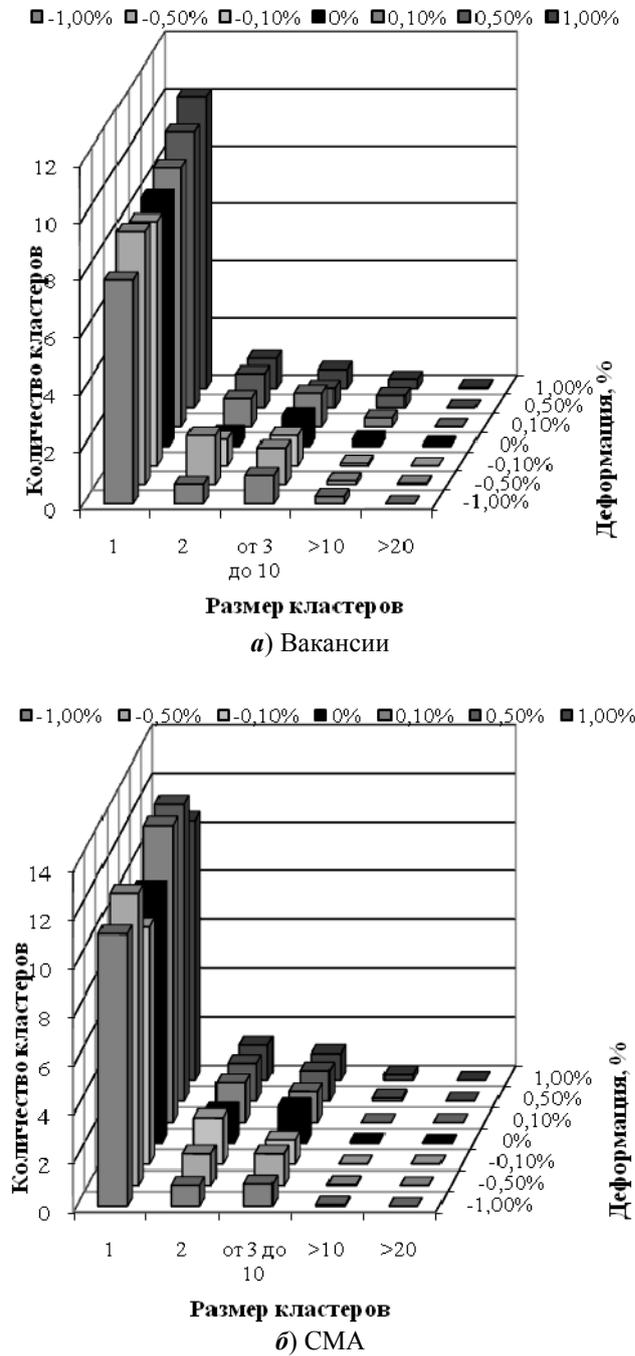


Рис. 8. Распределение кластеров дефектов по размеру при одноосном деформировании вдоль  $[2\bar{1}\bar{3}0]$

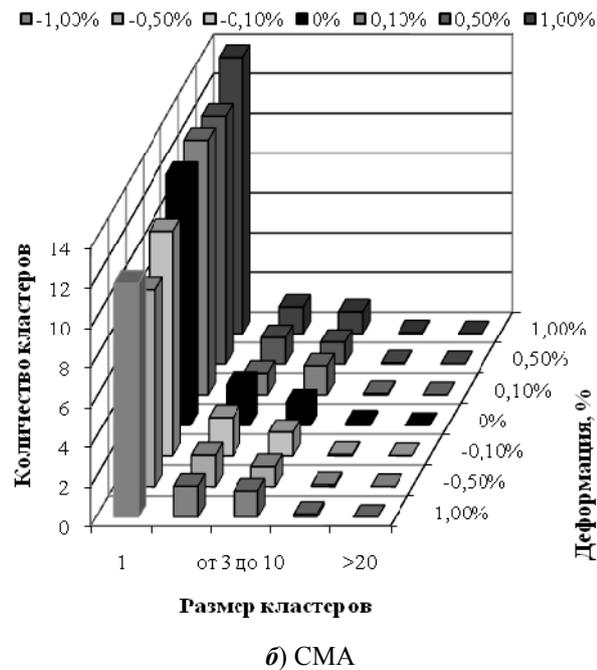
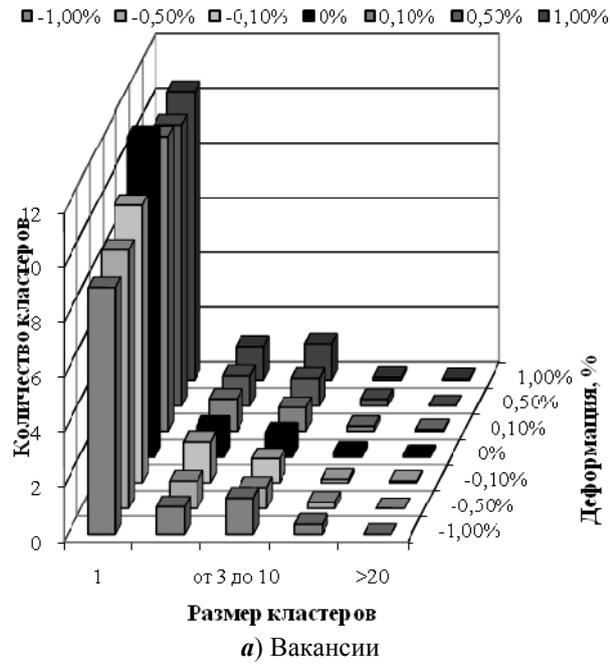
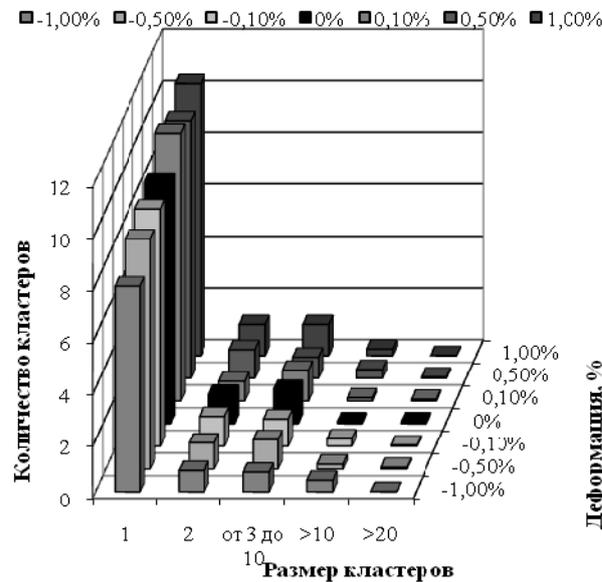


Рис. 9. Распределение кластеров дефектов по размеру при одноосном деформировании вдоль  $[\bar{1}2\bar{1}3]$

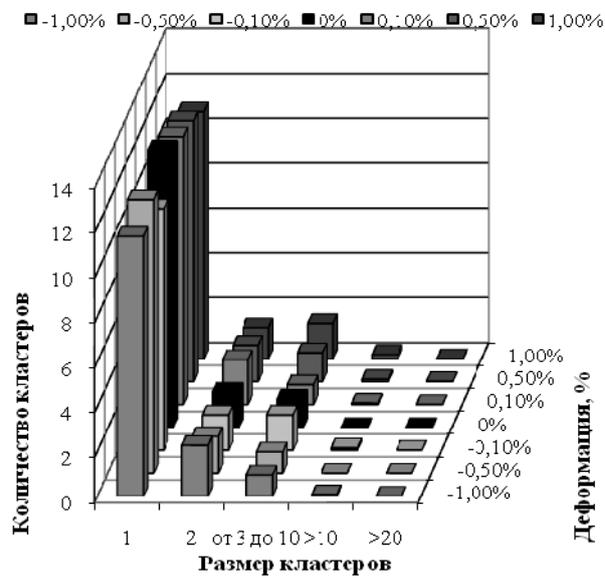
Стоит отметить, что при растяжении кристаллита на 1 % доли кластеризованных вакансий и СМА практически совпадают для всех рассмотренных типов деформации, кроме деформирования вдоль  $[\bar{1}2\bar{1}3]$ . Также была

проведена оценка изменения среднего размера кластеров дефектов при деформировании модельного кристаллита (рис. 13, 14). Средние размеры вакансионного и СМА-кластера составили 8 и 4,8 дефекта соответственно.

Из полученных данных видно, что при растяжении вдоль направлений  $[23\bar{4}6\ 23\bar{2}7]$  и  $[4\bar{5}10]$  наблюдается сближение размеров кластеров дефектов.



а) Вакансии



б) СМА

Рис. 10. Распределение кластеров дефектов по размеру при одноосном деформировании вдоль  $[23\bar{4}6\ 23\bar{2}7]$

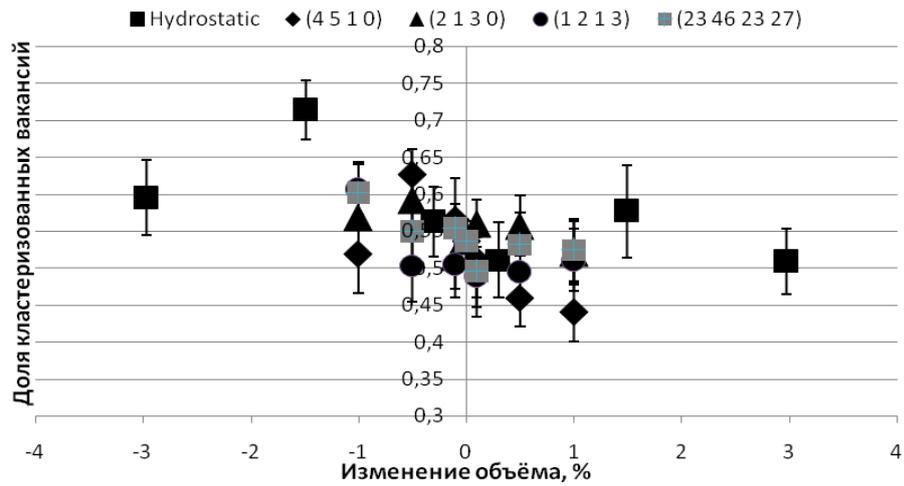


Рис. 11. Изменение доли кластеризованных вакансий при деформировании модельного кристаллита

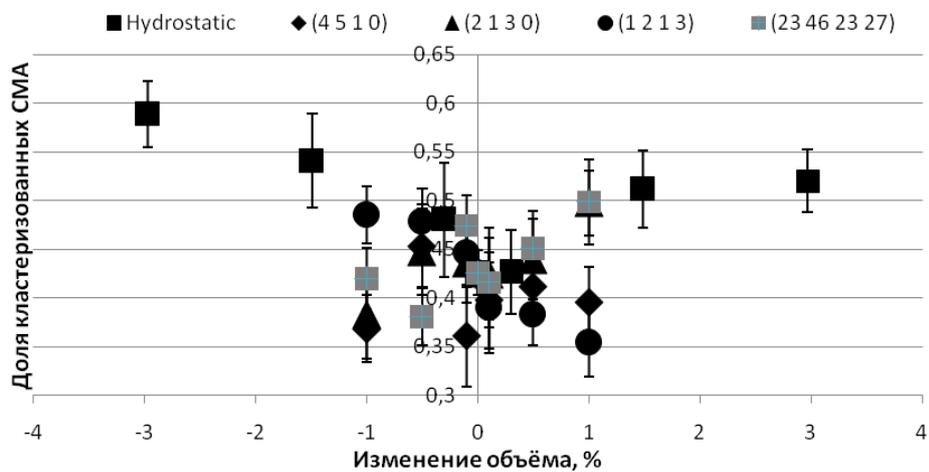


Рис. 12. Изменение доли кластеризованных СМА при деформировании модельного кристаллита

При 1 % растяжении вдоль  $[4\bar{5}10]$  размеры вакансионного и СМА-кластеров практически совпадают. Несмотря на это, общая картина сближения размеров кластеров дефектов при деформировании модельного кристаллита не наблюдается.

### Заключение

Установлено, что энергия формирования точечных дефектов линейно зависит от изменения объема модельного кристаллита в результате его гидростатического или одноосного деформирования. Данная зависимость имеет следующий вид:

$$E_{vac} = 0,058 \cdot \Delta V + 1,689 \text{ для вакансий,}$$

$$E_{fSLA} = -0,139 \cdot \Delta V + 2,776 \text{ для СМА,}$$

$$E_{fPAIR} = -0,081 \cdot \Delta V + 4,465 \text{ для пары Френкеля,}$$

где  $\Delta V$  – приращение объема модельного кристаллита в результате его деформирования.

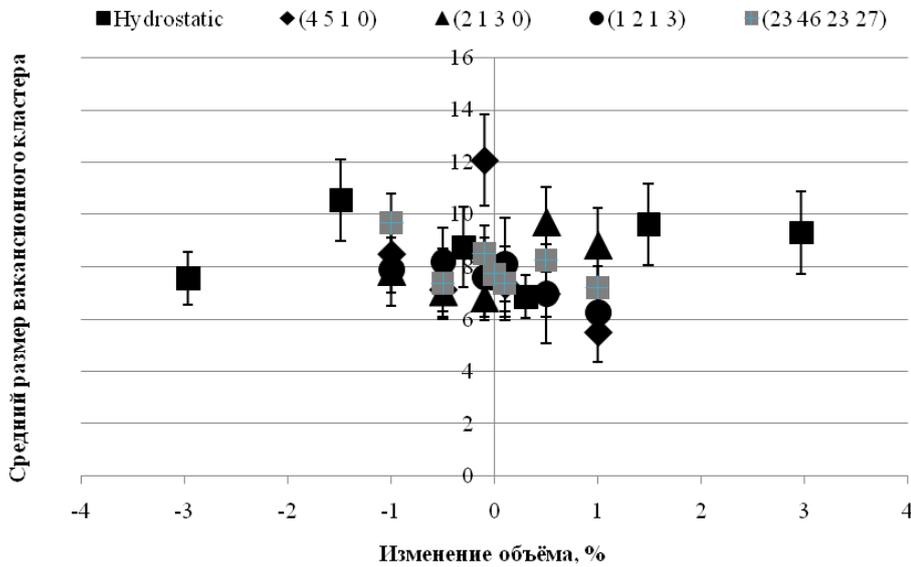


Рис. 13. Изменение среднего размера вакансионных кластеров при деформировании модельного кристаллита

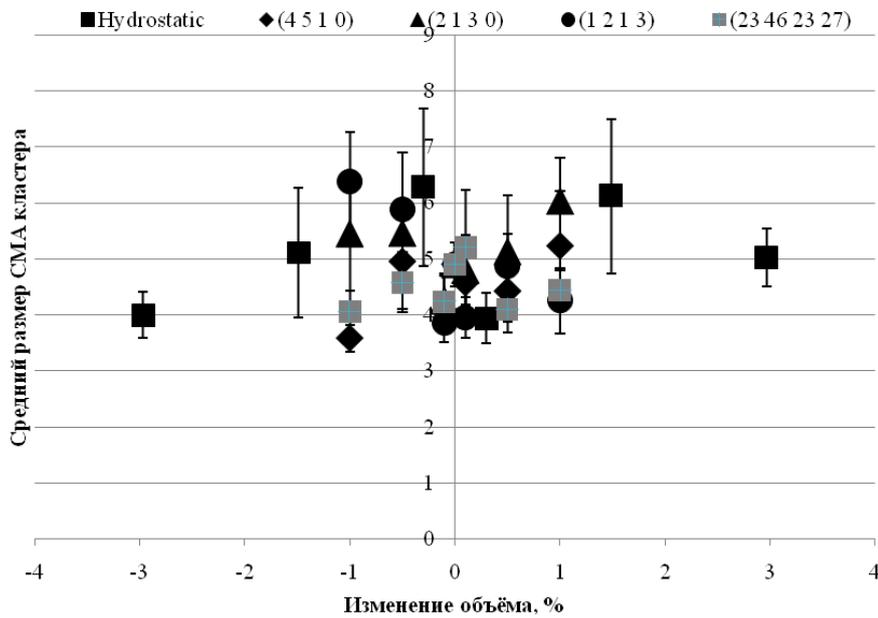


Рис. 14. Изменение среднего размера СМА-кластеров при деформировании модельного кристаллита

Деформирование модельного кристаллита не приводит к формированию тенденции увеличения или снижения количества выживших пар Френкеля после прохождения каскада атомных смещений. Наибольшее и наименьшее число выживших пар было получено при гидростатическом растяжении на 0,1 % и составило 23 и 17 пар соответственно.

Дефектная структура, сформированная в результате прохождения каскада атомных смещений, представлена преимущественно одиночными дефектами. Число СМА-димеров в 1,5–4 раза больше, чем вакансионных. Область кластеров среднего размера представлена в равной степени как вакансионными, так и СМА-кластерами. Кластеры большого размера представлены преимущественно вакансиями, их в 2–6 раз больше, чем СМА-кластеров. Наибольший размер вакансионного и СМА-кластера составил 29 и 26 дефектов соответственно, которые были получены при гидростатическом растяжении кристаллита на 0,5 %. Таким образом, установлено, что деформация модельного кристаллита способствует формированию кластеров большего размера, чем в недеформированном состоянии.

Установлено, что усредненная по всем рассматриваемым типам деформации доля кластеризованных вакансий превышает долю кластеризованных СМА. Доля кластеризованных вакансий уменьшается при растяжении кристаллита и увеличивается при его сжатии. Доля кластеризованных СМА не имеет явной зависимости от деформации кристаллита. При 1 % растяжении кристаллита наблюдается сближение долей кластеризованных дефектов обоих типов для всех рассмотренных типов деформации, кроме одноосного растяжения вдоль направления  $[\bar{1}2\bar{1}3]$ .

Средние размеры вакансионного и СМА кластеров составили 8 и 4,8 дефекта соответственно. При растяжении вдоль направлений  $[23\bar{4}62327]$  и  $[4\bar{5}10]$  наблюдается сближение размеров кластеров дефектов. При этом общей тенденции сближения размеров кластеров дефектов при деформировании модельного кристаллита не установлено.

#### **Список литературы**

1. **Holt, R. A.** In-reactor deformation of cold-worked Zr-2.5Nb pressure tubes / R. A. Holt // *Journal of Nuclear Materials*. – 2008. – Vol. 372, № 2-3. – P. 182–214.
2. **Field, G. J.** Analysis of the Pressure Tube Failure at Pickering NGS “A” Unit 2 Nuclear Systems Department / G. J. Field, J. T. Dunn, B. A. Cheadle // *Canadian Metallurgical Quarterly*. – 1985. – Vol. 24, № 3. – P. 181–188.
3. **Bates, J. F.** Experimental evidence for stress enhanced swelling / J. F. Bates, E. R. Gilbert // *Journal of Nuclear Materials*. – 1976. – Vol. 59, № 2. – P. 95–102.
4. **Bates, J. F.** Effects of stress on swelling in 316 stainless steel / J. F. Bates, E. R. Gilbert // *Journal of Nuclear Materials*. – 1978. – Vol. 71, № 2. – P. 286–291.
5. **Неустроев, В. С.** Влияние растягивающих напряжений на эволюцию вакансионной пористости в стали Fe-18%Cr-10%Ni-Ti, облученной в реакторе БОР-60 / В. С. Неустроев, С. В. Белозеров, Е. И. Макаров, А. В. Обухов // *Физика металлов и металловедение*. – 2014. – Т. 115, № 10. – С. 1070–1074.
6. **Марголин, Б. З.** Влияние напряжений на радиационное набухание аустенитных сталей / Б. З. Марголин, А. И. Мурашова, В. С. Неустроев // *Вопросы материаловедения*. – 2011. – Т. 68, № 4. – С. 124–139.

7. **Zhang, J. M.** Energy Calculation for Symmetrical Tilt Grain Boundaries in Iron / J. M. Zhang, Y. H. Huang, X. J. Wu, K. W. Xu // *Applied Surface Science*. – 2006. – Vol. 252, № 14. – P. 4936–4942.
8. **Pérez, F. J. P.** Modelling Radiation Effects at Grain Boundaries in BCC Iron / F. J. P. Pérez, R. Smith // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 1999. – Vol. 153, № 1-4. – P. 136–141.
9. **Pérez F. J. P.** Preferential Damage at Symmetrical Tilt Grain Boundaries in BCC Iron / F. J. P. Pérez, R. Smith // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2001. – Vol. 180, № 1-4. – P. 322–328.
10. **Martino, S. F. D.** Modelling Radiation Damage Effects on a bcc Iron Lattice Containing Phosphorous Impurity Atoms Near Symmetrical Tilt Boundaries / S. F. Di Martino, R. G. Faulkner, R. Smith // *Journal of Nuclear Materials*. – 2011. – Vol. 417, № 1-3. – P. 1058–1062.
11. Evolution of Atomic Collision Cascades in Vanadium Crystal with Internal Structure / S. G. Psakhie, K. P. Zolnikov, D. S. Kryzhevich, A. V. Zheleznyakov, V. M. Chernov // *Crystallography Reports*. – 2009. – Vol. 54. – P. 1002–1010.
12. **Wachowicz, E.** Cohesive and Magnetic Properties of Grain Boundaries in bcc Fe with Cr Additions / E. Wachowicz, T. Ossowski, A. Kiejna // *Physical Review B*. – 2010. – Vol. 81. – P. 094104.
13. **Terentyev, D.** Segregation of Cr at Tilt Grain Boundaries in Fe–Cr Alloys: A Metropolis Monte Carlo Study / D. Terentyev, X. He, E. Zhurkin, A. Bakaev // *Journal of Nuclear Materials*. – 2011. – Vol. 408, № 2. – P. 161–170.
14. Dependence on Grain Boundary Structure of Radiation Induced Segregation in a 9 wt. % Cr Model Ferritic/Martensitic Steel / K. G. Field, L. M. Barnard, C. M. Parish, J. T. Busby, D. Morgan, T. R. Allen // *Journal of Nuclear Materials*. – 2013. – Vol. 435, № 1-3. – P. 172–180.
15. **Tikhonchev, M.** MD simulation of atomic displacement cascades in random Fe-9at.%Cr binary alloy with twin grain boundaries / M. Tikhonchev, A. Muralev, V. Svetukhin // *Fusion Science and Technology*. – 2014. – Vol. 66, № 1. – P. 91–99.
16. Heavy ion irradiation induced dislocation loops in AREVA's M5® alloy / R. M. Hengstler-Eger, P. M. Baldo, L. Beck, J. Dorner, K. Ertl, P. B. Hoffman, C. Hugenschmidt, M. A. Kirk, W. Petry, P. Pilkart, A. Rempel // *Journal of Nuclear Materials*. – 2012. – Vol. 423, № 1-3. – P. 170–182.
17. **Idrees, Y.** In situ study of defect accumulation in zirconium under heavy ion irradiation / Y. Idrees, Z. Gao, M. A. Kirk, M. R. Daymond // *Journal of Nuclear Materials*. – 2013. – Vol. 433, № 1-3. – P. 95–107.
18. A molecular dynamics study of high-energy displacement cascades in  $\alpha$ -zirconium / S. J. Wooding, L. M. Howe, F. Gao, A. F. Calder, D. J. Bacon // *Journal of Nuclear Materials*. – 1998. – Vol. 254, № 2-3. – P. 191–204.
19. **Gao, F.** Temperature-dependence of defect creation and clustering by displacement cascades in  $\alpha$ -zirconium / F. Gao, D. J. Bacon, L. M. Howe, C. B. So // *Journal of Nuclear Materials*. – 2001. – Vol. 294, № 3. – P. 288–298.
20. **Voskoboinikov, R. E.** Identification and morphology of point defect clusters created in displacement cascades in alpha-zirconium / R. E. Voskoboinikov, Y. N. Osetsky, D. J. Bacon // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. – 2006. – Vol. 243, № 1-2. – P. 530–533.
21. **Mendelev, M. I.** Development of an interatomic potential for the simulation of phase transformation in zirconium / M. I. Mendelev, G. J. Ackland // *Philosophical Magazine Letters*. – 2007. – Vol. 87, № 5. – P. 349–359.

22. Капустин, П. Е. Моделирование ГПУ-циркония методом молекулярной динамики / П. Е. Капустин // Известия Самарского научного центра РАН. – 2013. – № 4. – С. 1131–1136.
23. Капустин, П. Е. Каскады атомных смещений вблизи симметрично наклонных границ зерна в гексагональной плотноупакованной структуре Zr: моделирование методом молекулярной динамики / П. Е. Капустин, М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2015. – № 2 (34). – С. 148–163.
24. Miyashiro, S. MD simulations to evaluate the influence of applied normal stress or deformation on defect production rate and size distribution of clusters in cascade process for pure Cu / S. Miyashiro, S. Fujita, T. Okita // Journal of Nuclear Materials. – 2011. – Vol. 415, № 1. – P. 1–4.
25. Моделирование зарождения пластической деформации в механически-нагруженных кристаллитах при радиационном воздействии / А. В. Корчуганов, К. П. Зольников, Д. С. Крыжевич, В. М. Чернов и С. Г. Псахье // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез. – 2015. – Т. 38, № 1. – С. 42–48.
26. Gao, F. The influence of strain on defect generation by displacement cascades in alpha-iron / F. Gao, D. Bacon, P. Flewitt, T. Lewis // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2001. – Vol. 180, № 1-4. – P. 187–193.
27. Beelera, B. Effects of applied strain on radiation damage generation in body-centered cubic iron / B. Beelera, M. Astab, P. Hosemann, N. Grønbech-Jensen // Journal of Nuclear Materials. – 2015. – Vol. 459. – P. 159–165.
28. Miyashiro, S. MD simulations to evaluate effects of applied tensile strain on irradiation-induced defect production at various PKA energies / S. Miyashiro, S. Fujita, T. Okita, H. Okuda // Fusion Engineering and Design. – 2012. – Vol. 87, № 7–8. – P. 1352–1355.
29. Di, S. Molecular dynamics simulations of irradiation cascades in alpha-zirconium under macroscopic strain / S. Di, Z. Yao, M. Daymond, F. Gao // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. – 2013. – Vol. 303. – P. 95–99.

### *References*

1. Holt R. A. *Journal of Nuclear Materials*. 2008, vol. 372, no. 2-3, pp. 182–214.
2. Field G. J., Dunn J. T., Cheadle B. A. *Canadian Metallurgical Quarterly*. 1985, vol. 24, no. 3, pp. 181–188.
3. Bates J. F., Gilbert E. R. *Journal of Nuclear Materials*. 1976, vol. 59, no. 2, pp. 95–102.
4. Bates J. F., Gilbert E. R. *Journal of Nuclear Materials*. 1978, vol. 71, no. 2, pp. 286–291.
5. Neustroev V. S., Belozero V. S., Makarov E. I., Obukhov A. V. *Fizika metallov i metallovedenie* [Physics of metals and physical metallurgy]. 2014, vol. 115, no. 10, pp. 1070–1074.
6. Margolin B. Z., Murashova A. I., Neustroev V. S. *Voprosy materialovedeniya* [Problems of materials science]. 2011, vol. 68, no. 4, pp. 124–139.
7. Zhang J. M., Huang Y. H., Wu X. J., Xu K. W. *Applied Surface Science*. 2006, vol. 252, no. 14, pp. 4936–4942.
8. Pérez F. J. P., Smith R. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 1999, vol. 153, no. 1-4, pp. 136–141.
9. Pérez F. J. P., Smith R. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2001, vol. 180, no. 1-4, pp. 322–328.
10. Martino S. F. D., Faulkner R. G., Smith R. *Journal of Nuclear Materials*. 2011, vol. 417, no. 1-3, pp. 1058–1062.

11. Psakhie S. G., Zolnikov K. P., Kryzhevich D. S., Zheleznyakov A. V., Chernov V. M. *Crystallography Reports*. 2009, vol. 54, pp. 1002–1010.
12. Wachowicz E., Ossowski T., Kiejna A. *Physical Review B*. 2010, vol. 81, p. 094104.
13. Terentyev D., He X., Zhurkin E., Bakaev A. *Journal of Nuclear Materials*. 2011, vol. 408, no. 2, pp. 161–170.
14. Field K. G., Barnard L. M., Parish C. M., Busby J. T., Morgan D., Allen T. R. *Journal of Nuclear Materials*. 2013, vol. 435, no. 1-3, pp. 172–180.
15. Tikhonchev M., Muralev A., Svetukhin V. *Fusion Science and Technology*. 2014, vol. 66, no. 1, pp. 91–99.
16. Hengstler-Eger R. M., Baldo P. M., Beck L., Dorner J., Ertl K., Hoffman P. B., Hugenschmidt C., Kirk M. A., Petry W., Pilkart P., Rempel A. *Journal of Nuclear Materials*. 2012, vol. 423, no. 1-3, pp. 170–182.
17. Idrees Y., Gao Z., Kirk M. A., Daymond M. R. *Journal of Nuclear Materials*. 2013, vol. 433, no. 1-3, pp. 95–107.
18. Wooding S. J., Howe L. M., Gao F., Calder A. F., Bacon D. J. *Journal of Nuclear Materials*. 1998, vol. 254, no. 2-3, pp. 191–204.
19. Gao F., Bacon D. J., Howe L. M., So C. B. *Journal of Nuclear Materials*. 2001, vol. 294, no. 3, pp. 288–298.
20. Voskoboinikov R. E., Osetsky Y. N., Bacon D. J. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2006, vol. 243, no. 1-2, pp. 530–533.
21. Mendeleev M. I., Ackland G. J. *Philosophical Magazine Letters*. 2007, vol. 87, no. 5, pp. 349–359.
22. Kapustin P. E. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra RAN* [Proceedings of Samara Scientific Center of RAS]. 2013, no. 4, pp. 1131–1136.
23. Kapustin P. E., Tikhonchev M. Yu., Svetukhin V. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2015, no. 2 (34), pp. 148–163.
24. Miyashiro S., Fujita S., Okita T. *Journal of Nuclear Materials*. 2011, vol. 415, no. 1, pp. 1–4.
25. Korchuganov A. V., Zol'nikov K. P., Kryzhevich D. S., Chernov V. M., Psakh'e S. G. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Termoyadernyy sintez* [Problems of nuclear sciences and technology. Thermonuclear synthesis]. 2015, vol. 38, no. 1, pp. 42–48.
26. Gao F., Bacon D., Flewitt P., Lewis T. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2001, vol. 180, no. 1-4, pp. 187–193.
27. Beelera B., Astab M., Hosemann P., Grønbech-Jensen N. *Journal of Nuclear Materials*. 2015, vol. 459, pp. 159–165.
28. Miyashiro S., Fujita S., Okita T., Okuda H. *Fusion Engineering and Design*. 2012, vol. 87, no. 7–8, pp. 1352–1355.
29. Di S., Yao Z., Daymond M., Gao F. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2013, vol. 303, pp. 95–99.

**Капустин Павел Евгеньевич**

аспирант, Научно-исследовательский  
технологический институт  
имени С. П. Капицы, Ульяновский  
государственный университет (Россия,  
г. Ульяновск, ул. Льва Толстого 42)

**Kapustin Pavel Evgen'evich**

Postgraduate student, Research  
Technological Institute named  
after S. P. Kapitsa, Ulyanovsk State  
University (42 Lva Tolstogo street,  
Ulyanovsk, Russia)

E-mail: kapustinpe91@gmail.com

***Светухин Вячеслав Викторович***

доктор физико-математических наук,  
профессор, ведущий научный сотрудник,  
Научно-исследовательский  
технологический институт имени  
С. П. Капицы, Ульяновский  
государственный университет (Россия,  
г. Ульяновск, ул. Льва Толстого 42)

E-mail: slava@sv.uven.ru

***Svetukhin Vyacheslav Viktorovich***

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, leading researcher,  
Research Technological Institute  
named after S. P. Kapitsa, Ulyanovsk  
State University (42 Lva Tolstogo street,  
Ulyanovsk, Russia)

***Тихончев Михаил Юрьевич***

кандидат физико-математических наук,  
начальник лаборатории компьютерного  
моделирования неорганических  
материалов, Научно-исследовательский  
технологический институт имени  
С. П. Капицы, Ульяновский  
государственный университет (Россия,  
г. Ульяновск, ул. Льва Толстого 42)

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

***Tikhonchev Mikhail Yur'evich***

Candidate of physical and mathematical  
sciences, head of laboratory of computer  
modelling of inorganic materials,  
Research Technological Institute  
named after S. P. Kapitsa, Ulyanovsk  
State University (42 Lva Tolstogo street,  
Ulyanovsk, Russia)

---

УДК 544.022.342, 544.022.344.2

**Капустин, П. Е.**

**Моделирование каскадов атомных смещений в деформированной модели ГПУ-циркония методом молекулярной динамики. Оценка влияния деформации на дефектную структуру / П. Е. Капустин, В. В. Светухин, М. Ю. Тихончев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2016. – № 3 (39). – С. 115–132. DOI 10.21685/2072-3040-2016-3-8**