

УДК 544.022.342, 544.022.344.2
DOI 10.21685/2072-3040-2016-3-9

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

ПЕРВИЧНОЕ РАДИАЦИОННОЕ ПОВРЕЖДЕНИЕ БИНАРНОГО СПЛАВА Zr-Nb: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ¹

Аннотация.

Актуальность и цели. В работе рассматривается распределение атомов ниобия по междоузельным конфигурациям после прохождения каскада атомных смещений с энергией первично выбитого атома (ПВА) 10 кэВ в бинарном сплаве Zr – 1 % Nb и Zr – 2 % Nb при температурах модельного кристаллита 0, 300 и 600 К. Рассмотрены 8 конфигураций междоузельного атома в ГПУ-цирконии, в которые был внедрен атом ниобия.

Материалы и методы. В работе рассматриваются два бинарных сплава Zr – 1 % Nb и Zr – 2 % Nb с ГПУ-решеткой. Компьютерное моделирование осуществлялось с помощью метода молекулярной динамики с применением многотельного потенциала межатомного взаимодействия.

Результаты. Получены численные значения энергии формирования внедренного атома ниобия при 0 К, а также энергии связи. Произведен анализ распределения атомов ниобия по одиночным междоузлиям, димерам и междоузельным кластерам, размер которых составлял не менее 3 дефектов.

Выводы. Установлено наличие конфигураций СМА с высокой положительной энергией связи. Изменение температуры модельного кристаллита, атомарной доли ниобия, выбор потенциала межатомного взаимодействия оказывают влияние на распределение ниобия по междоузельным конфигурациям.

Ключевые слова: цирконий, цирконий-ниобий, метод молекулярной динамики, междоузлия, каскады атомных смещений.

P. E. Kapustin, V. V. Svetukhin, M. Yu. Tikhonchev

PRIMARY RADIATION DAMAGE OF THE Zr-Nb BINARY ALLOY: MOLECULAR DYNAMICS MODELING

Abstract.

Background. In this paper the distribution of niobium atoms in interstitial configurations after the passage of the atomic displacement cascade with the energy of primary knock-on atom (PKA) 10 keV in the binary alloy of Zr – 1 % Nb and Zr – 2 % Nb at the model crystallite temperature of 0, 300 and 600 K was examined. Eight configurations of the interstitial atom in HCP-Zirconium with the embedded niobium atom were considered.

Materials and methods. In this work two binary alloys Zr – 1 %Nb and Zr – 2 %Nb with the HCP lattice were considered. With the help of the molecular dynamics method a computer simulation was carried out using the many-body potential of interatomic interaction.

Results. The numerical values of the formation energy of the embedded niobium atom and the binding energy at 0 K were obtained. The analysis of the niobium at-

¹ Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ в рамках проектной части государственного задания на 2014–2016 гг., а также при поддержке гранта РФФИ: проект № 16-01-00542.

oms distribution in single interstitials, dimers and interstitial clusters, the size of which was not less than 3 defects, was performed.

Conclusions. SIA configurations with a high positive binding energy were determined. Changes of the model crystallite temperature, atomic niobium proportion, interatomic potential influence the niobium distribution in the interstitial configurations.

Key words: zirconium, zirconium-niobium, molecular dynamics method, interstitials, atomic displacement cascades.

Введение

Различные металлы и сплавы на их основе нашли широкое применение в качестве конструкционных материалов ядерных энергетических установок. Комбинация различных компонентов сплава, а также их концентрации позволяет получать материалы, способные эффективнее противостоять разрушительному воздействию радиационного облучения. Для реакторов на тепловых нейтронах широкое применение нашли сплавы циркония и ниобия, такие как Э110, Э125, содержащие 1 и 2,5 % ниобия соответственно. Эксперименты показали, что часть ниобия до облучения растворена в матрице циркония, а другая часть образует преципитаты. Под облучением происходит рост и существенно меняется состав таких образований [1–5]. Детально изучить поведение атомов ниобия в циркониевых сплавах под облучением позволяет метод компьютерного моделирования. Широкое применение в области компьютерного моделирования процессов первичного радиационного повреждения получил метод молекулярной динамики (МД). Имеется большое количество работ по моделированию различных материалов: железо, медь, ванадий, цирконий [6–14]. Имеется ряд работ, посвященных моделированию бинарных сплавов циркония и ниобия [1, 15–17]. Однако работ, посвященных распределению ниобия по междоузельным конфигурациям и влиянию на распределение температуры и доли ниобия в бинарном сплаве Zr-Nb, нами не было найдено. Настоящая работа посвящена анализу распределения ниобия в междоузлиях, сформированных в результате прохождения каскада атомных смещений с энергией первично выбитого атома (ПВА) 10 кэВ, а также выявлению влияния температуры модельного кристаллита и атомарной доли ниобия в бинарном сплаве на конечное распределение ниобия в междоузлиях.

1. Метод моделирования

При моделировании методом молекулярной динамики был применен потенциал межатомного взаимодействия для ГПУ-циркония, предложенного в [18]. Потенциал, описывающий межатомное взаимодействие ниобия, а также кросс-потенциал, необходимый для моделирования бинарной системы цирконий-ниобий, были взяты из работы Тихончева и Светухина [1] (далее обозначается как потенциал #1). Также были использованы потенциалы для циркония и ниобия из работы [19] с целью сопоставления результатов моделирования (потенциал #2).

Для построения модельного кристаллита и дальнейшего моделирования использовался программный пакет MDRDS [20, 21]. Кристаллит ГПУ-циркония с внедренным в него атомом ниобия строился в два этапа. На первом этапе производилось построение кристаллита циркония с помощью

трансляционной симметрии элементарной ячейки. Размеры модели составляли $40 \times 40 \times 40$ Å. На гранях модели применялись периодические граничные условия. На втором этапе осуществлялось размещение атома ниобия в восьми конфигурациях, соответствующих расположению собственного междоузельного атома (СМА) в цирконии [22]. После построения модельного кристаллита проводилась его релаксация при температуре 0 К в течение нескольких пикосекунд.

Построение бинарного модельного кристаллита, содержащего 1 и 2 % ниобия, осуществлялось следующим образом. В транслируемой элементарной ячейке производилась замена атомов циркония на ниобий так, чтобы в конечной модели ниобий был равномерно распределен в требуемом процентном отношении. Линейные размеры модельного кристаллита составили $160 \times 160 \times 160$ Å. Перед моделированием каскадов атомных смещений производилась релаксация модельного кристаллита в течение нескольких пикосекунд при температурах 0, 300 и 600 К. После релаксации инициировался каскад атомных смещений со следующими параметрами: энергия ПВА составляла 10 кэВ, направление и место положения ПВА выбирались случайно, время моделирования ~ 45 пс. Численное интегрирование уравнений движения в процессе моделирования каскада атомных смещений производилось по алгоритму Верле с неравномерным временным шагом.

Критерий выбора величины временного шага определяется следующими правилами:

- 1) величина смещения частицы, движущейся с максимальной скоростью, не должна превышать $0,02$ Å за один шаг;
- 2) время шага не должно превышать 2 фс. Анализ дефектной структуры проводили методом ячеек Вигнера – Зейца.

Пустая ячейка трактуется как вакансия, ячейка. Наличие в ячейке более одного атома свидетельствует о наличии СМА. Два однотипных точечных дефекта считаем принадлежащими одной конфигурации дефектов, если узлы соответствующих им ячеек Вигнера – Зейца находятся на расстоянии ближайших соседей. При этом отдельно выделяем конфигурации, состоящие из двух дефектов, – димеры, и кластеры – конфигурации, состоящие из трех и более дефектов. Для каждого бинарного сплава проводилось по 20 вычислительных экспериментов.

2. Результаты моделирования

На рис. 1 представлены восемь рассмотренных конфигураций СМА в ГПУ-цирконии. Энергия формирования СМА циркония или ниобия в матрице рассчитывалась соответственно по формулам:

$$E_{fZr} = E_t - E_c^{Zr} \cdot N_{Zr}, \quad (1)$$

$$E_{fNb} = E_t - (E_c^{Zr} \cdot N_{Zr} + E_c^{Nb}), \quad (2)$$

где E_t – потенциальная энергия модельного кристаллита с СМА после релаксации; E_c^{Zr} и E_c^{Nb} – энергии сублимации циркония и ниобия на один атом соответственно; N_{Zr} – количество атомов циркония в системе.

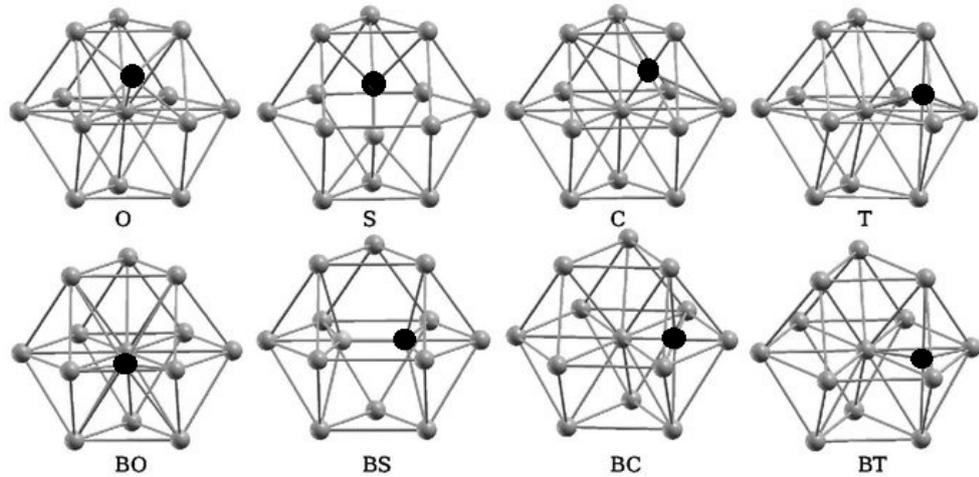


Рис. 1. Атом ниобия, внедренный в ГПУ-цирконий. Черные – собственный междоузельный атом (Zr или Nb), серые – атомы циркония

В табл. 1 приведены результаты расчета энергии формирования СМА в ГПУ-цирконий с использованием двух потенциалов. Из результатов моделирования видно, что для всех конфигураций междоузельного атома ниобия в матрице циркония энергия связи E_{BIND} положительна. Исключение составляет конфигурация BT при моделировании с помощью потенциала #1. Расчет энергии связи осуществлялся по формуле

$$E_{BIND} = E_{fZr} + E_{subs} - E_{fNb}, \quad (3)$$

где E_{subs} – энергия замещения атома циркония атомом ниобия, составляющая 0,61 эВ (потенциал #1) или 0,49 эВ (потенциал #2).

Таблица 1
Энергия формирования внедренного атома ниобия в ГПУ решетке циркония

Тип потенциала	#1			#2		
	Конфигурация	E_{fZr} , эВ	E_{fNb} , эВ	E_{BIND} , эВ	E_{fZr} , эВ	E_{fNb} , эВ
O	2,77	2,76	0,63	2,91	3,07	0,34
BO	2,89	1,91	1,59	2,90	2,89	0,49
T	2,89	3,37	0,14	2,91	3,01	0,39
BT	2,89	3,57	-0,07	2,90	3,01	0,37
S	3,65	3,44	0,82	2,91	3,01	0,39
BS	2,87	1,95	1,53	2,86	2,89	0,45
C	2,79	2,35	1,06	2,85	3,07	0,27
BC	2,87	1,91	1,56	2,85	2,89	0,45

Для обоих потенциалов конфигурациями с наибольшей энергией связи являются BO, BS и BC. Принимая во внимание энергетическую выгодность ряда конфигураций междоузельного атома ниобия, можно сделать предположение, что доля атомов ниобия в междоузельных конфигурациях после прохождения каскада атомных смещений будет больше атомарной доли атомов ниобия в кристаллите.

Для проверки данного предположения было проведено моделирование каскадов атомных смещений с энергией ПВА 10 кэВ в бинарных сплавах Zr – 1 % Nb и Zr – 2 % Nb при трех температурах модельного кристаллита: 0, 300 и 600 К. В табл. 2 представлены данные о распределении атомов ниобия по междоузлиям после затухания каскада в бинарном сплаве Zr – 1 % Nb. Концентрация атомов ниобия, участвующих в формировании междоузлий, не зависит от температуры и составляет в среднем 43 % при использовании потенциала #1. Концентрация атомов ниобия в одиночных междоузлиях практически не изменяется с ростом температуры кристаллита и составляет в среднем 47,6 %. Увеличение температуры кристаллита приводит к снижению концентрации ниобия в димерах и междоузельных кластерах на 5,6 и 4,9 % соответственно. При моделировании с использованием потенциала #2 были получены следующие результаты. Рост температуры приводит к небольшому увеличению (на 5,3 %) концентрации атомов ниобия в междоузлиях. Концентрация атомов ниобия в одиночных междоузлиях практически не изменяется с ростом температуры, составляя в среднем 52,7 %, что на 5,1 % больше, чем при использовании потенциала #1. Увеличение температуры кристаллита приводит к незначительному снижению концентрации ниобия в димерах и междоузельных кластерах на 3,2 и 1,5 % соответственно. Концентрации ниобия в димерах и междоузельных кластерах при использовании потенциала #2 меньше, чем при работе с потенциалом #1.

Таблица 2

Распределение атомов ниобия в междоузлиях в бинарном сплаве Zr – 1 % Nb

Тип потенциала	Температура, К	Концентрация атомов Nb (%) в СМА			
		Все СМА	Одиночные	Димеры	Кластеры
#1	0	43,2 ± 1	47 ± 0,5	33,1 ± 2,1	20 ± 3,7
	300	44,2 ± 1,3	48,4 ± 0,6	35,6 ± 1,6	16 ± 3,2
	600	41,5 ± 2	47,3 ± 0,5	27,5 ± 5,3	15,1 ± 3,8
#2	0	35,4 ± 1,6	53,3 ± 0,9	24 ± 2,4	11,4 ± 1,4
	300	36,6 ± 2,9	52,5 ± 2,4	21,9 ± 2,9	8,2 ± 3
	600	40,7 ± 3,3	52,4 ± 2	20,8 ± 4,1	9,9 ± 1,8

В табл. 3 представлены данные о распределении атомов ниобия по междоузлиям после затухания каскада в бинарном сплаве Zr – 2 % Nb. Рассмотрим результаты, полученные при моделировании с помощью потенциала #1. Концентрация ниобия в междоузлиях не зависит от температуры, составляя в среднем 44,7 %. Небольшое снижение концентрации ниобия происходит в одиночных междоузлиях и в димерах на 2,1 и 2,8 % соответственно. Концентрация ниобия в кластерах существенно увеличивается (на 10,2 %) с ростом температуры. При моделировании с помощью потенциала #2 были получены следующие результаты. Изменение температуры оказывает существенное влияние на концентрацию атомов ниобия в междоузлиях, наблюдается рост на 9,2 %. Стоит отметить, что скачок концентрации наблюдается при переходе к температуре модельного кристаллита в 600 К, при 0 и 300 К разница в значениях концентрации составляет 0,5 %. В одиночных междоузлиях происходит увеличение концентрации ниобия на 4,5 %. При температуре 300 К концентрация ниобия в димерах увеличивается на 10 %, уменьшаясь

впоследствии на 1,9 % при переходе к температуре 600 К. В кластерах сначала наблюдается снижение концентрации на 4 %, потом рост на 14,7 %. Таким образом, в димерах и междоузельных кластерах наблюдается существенное влияние температуры кристаллита на изменение концентрации ниобия.

Таблица 3
Распределение атомов ниобия в междоузлиях в бинарном сплаве Zr – 2 % Nb

Тип потенциала	Температура, К	Концентрация атомов Nb (%)			
		Междоузлия	Одиночные междоузлия	Димеры	Кластеры (≥ 3)
#1	0	44,8 ± 0,8	47,5 ± 0,6	41,4 ± 2,1	22,2 ± 3,3
	300	44,8 ± 1,8	48,8 ± 0,7	39,1 ± 3,3	16,9 ± 4,2
	600	44,6 ± 1,1	45,4 ± 0,8	38,6 ± 3	32,4 ± 3,7
#2	0	49,2 ± 2,2	58,9 ± 0,9	33,1 ± 3,6	18,5 ± 4,8
	300	48,7 ± 2,4	62,1 ± 1,6	43,1 ± 4,4	14,5 ± 2,6
	600	58,4 ± 1,8	63,4 ± 1,4	41,2 ± 4,6	29,2 ± 4,2

На рис. 2 показано изменение количества выживших пар Френкеля с ростом температуры модельного кристаллита при использовании двух потенциалов межатомного взаимодействия в бинарных сплавах Zr – 1 % Nb и Zr – 2 % Nb. Из полученных данных видно, что для всех рассмотренных случаев формируется тенденция уменьшения числа выживших дефектов. Это связано с повышением подвижности точечных дефектов с ростом температуры и, как следствие, усилением их рекомбинации.

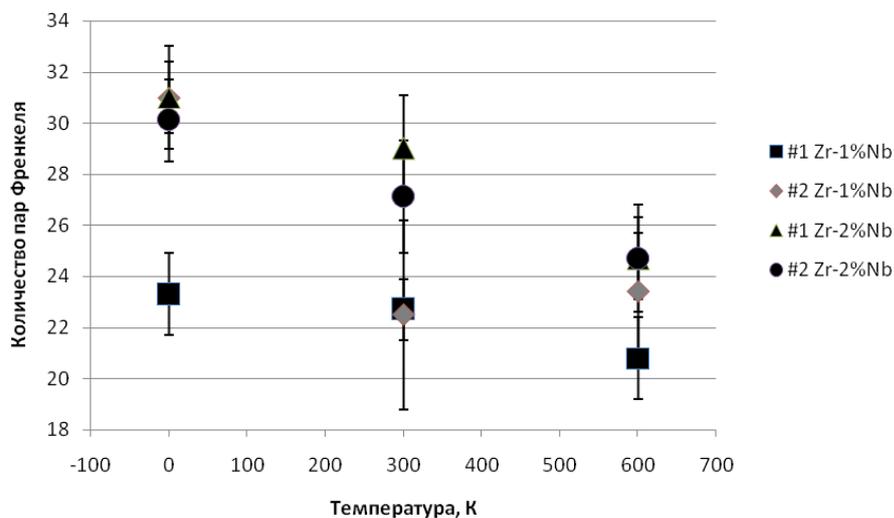


Рис. 2. Изменение числа выживших пар Френкеля

На рис. 3 представлены гистограммы распределения СМА по одиночным междоузлиям, димерам и междоузельным кластерам, состоящим не менее чем из трех дефектов. Из полученных данных видно, что преимущественно формируются одиночные СМА. Количество междоузлий в димерах и кластерах в большинстве из рассмотренных случаев сопоставимо друг с другом

и в несколько раз меньше, чем число одиночных дефектов. Температура, атомарная доля атомов ниобия в бинарном сплаве, а также выбор потенциала межатомного взаимодействия не оказывают существенного влияния на распределения междоузельных атомов по рассматриваемым типам конфигураций. Исключение составляет бинарный сплав $Zr - 1\% Nb$, промоделированный с использованием потенциала #2. В нем наблюдается увеличение числа междоузлий в кластерах (до значений в 1,6–1,9 раз меньших, чем в одиночных междоузлиях).

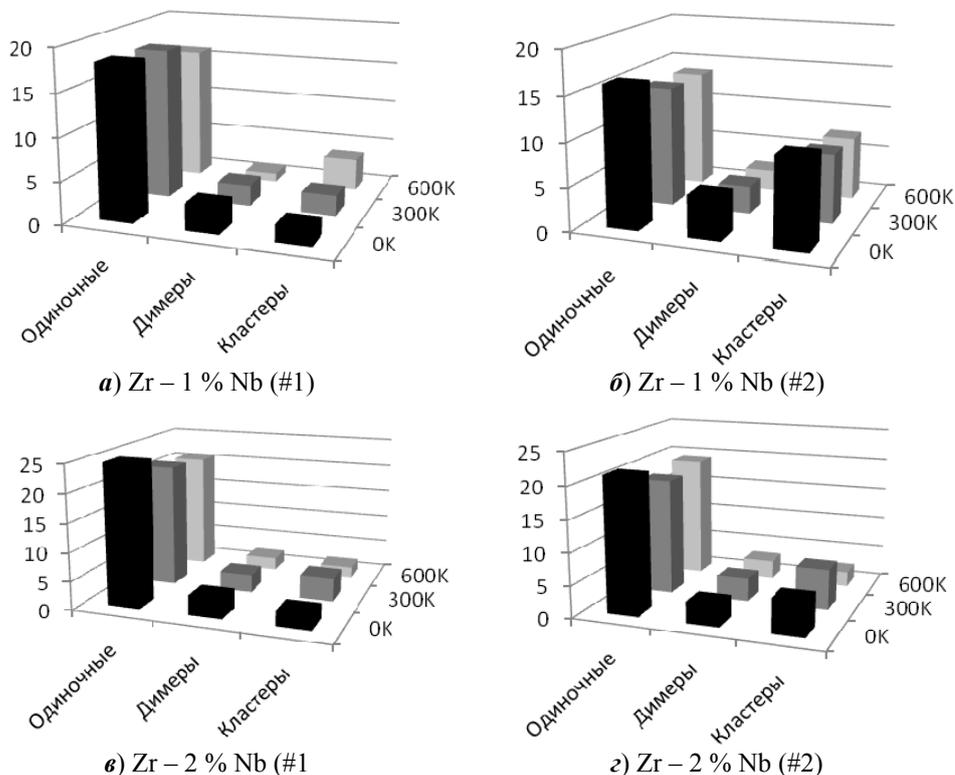


Рис. 3. Распределение междоузельных атомов по конфигурациям

Таким образом, сформированное ранее предположение об увеличении по сравнению с атомарной долей атомов ниобия в междоузлиях подтвердилось. Действительно, ниобий, внедренный в матрицу циркония, формирует ряд конфигураций с положительной энергией связи при работе с обоими потенциалами межатомного взаимодействия. Наличие таких конфигураций способствует активному участию атомов ниобия в формировании междоузельных конфигураций (одиночные междоузлия, димеры и междоузельные кластеры).

Установлено, что изменение атомарной доли атомов ниобия в бинарном сплаве, температуры модельного кристаллита, а также выбор потенциала межатомного взаимодействия способны привести к существенному изменению концентрации ниобия в междоузельных конфигурациях. При моделировании с помощью потенциала #2 бинарного сплава $Zr - 2\% Nb$ отмечается резкое увеличение концентрации при переходе к температуре 600 К.

Заключение

Рассчитаны энергии связи внедренного атома ниобия в матрицу циркония. Установлено, что энергия связи принимает положительные значения для всех конфигураций СМА, кроме конфигурации ВТ (потенциал #1). Конфигурациями СМА с наибольшей энергией связи являются ВО, ВS и ВС вне зависимости от выбора потенциала. Наличие положительной энергии связи внедренного атома ниобия способствует активному участию ниобия в формировании междоузлий.

Температура модельного кристаллита и атомарная доля ниобия в бинарном сплаве практически не влияет на концентрацию ниобия в междоузлиях при использовании потенциала #1 и составляет 43–45 %. При использовании потенциала #2 общая концентрация атомов ниобия в бинарном сплаве Zr – 1 % Nb увеличивается на 5,3 %, в бинарном сплаве Zr – 2 % Nb происходит резкое увеличение концентрации на 9,2 % при переходе к температуре 600 К.

Влияние температуры модельного кристаллита, атомарной доли атомов ниобия в бинарном сплаве, используемого потенциала межатомного взаимодействия на концентрацию атомов ниобия в одиночных междоузлиях практически отсутствует. Исключение составляет бинарный сплав Zr – 2 % Nb, промоделированный с использованием потенциала #2, в котором наблюдается увеличение концентрации атомов ниобия на 4,5 %.

С ростом температуры модельного кристаллита вне зависимости от атомарной доли атомов ниобия и потенциала межатомного взаимодействия наблюдается снижение концентрации атомов ниобия в междоузельных димерах. Исключение составил бинарный сплав Zr – 2 % Nb, промоделированный с использованием потенциала #2, в котором наблюдается существенный рост концентрации на 10 % (при температуре 300 К) с последующим небольшим снижением на 1,9 % (при температуре 600 К).

Изменение температуры модельного кристаллита бинарного сплава Zr – 1 % Nb приводит к незначительному уменьшению концентрации ниобия в междоузельных кластерах вне зависимости от выбора потенциала межатомного взаимодействия. При моделировании бинарного сплава Zr – 2 % Nb изменение температуры приводит к существенному росту концентрации ниобия не менее чем на 10 % для каждого потенциала межатомного взаимодействия.

Температура модельного кристаллита, атомарная доля атомов ниобия в бинарных сплавах, а также выбор потенциала межатомного взаимодействия не оказывают существенного влияния на распределение междоузельных атомов по одиночным дефектам, димерам и междоузельным кластерам, состоящих не менее чем из трех дефектов. Исключением является бинарный сплав Zr – 1 % Nb, промоделированный с использованием потенциала #2.

Список литературы

1. **Тихончев, М. Ю.** Расчетное определение пороговых энергий смещения и исследования особенностей развития каскадов атомных смещений вблизи протяженной границы раздела фаз циркония и ниобия: молекулярно-динамическое моделирование / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // Вопросы материаловедения. – 2011. – Т. 68, № 4. – С. 140–152.

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. Сер. 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 (June 13–17, 2004, Stockholm). – Stockholm, 2006. – P. 666–685.
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. 24–32.
5. **Аверин, С. А.** Влияние условий облучения на образование и эволюцию радиационных дефектов в циркониевых сплавах / С. А. Аверин, В. Л. Панченко // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Материаловедение и новые материалы. – 2006. – Т. 66, № 1. – С. 24–30.
6. **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 материаловедение. – 2014. – Т. 115, № 10. – С. 1070–1074.
7. 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.
8. **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.
9. **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.
10. 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.
11. **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.
12. 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.
13. **Капустин, П. Е.** Моделирование ГПУ-циркония методом молекулярной динамики / П. Е. Капустин // Известия Самарского научного центра РАН. – 2013. – № 4. – С. 1131–1136.
14. **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.

15. **Long, F.** Effect of neutron irradiation on deformation mechanisms operating during tensile testing of Zr-2.5Nb / F. Long, L. Balogh, D. W. Brown, P. Mosbrucker, T. Skippon, C. D. Judge, M. R. Daymond // *Acta Materialia*. – 2016. – Vol. 102. – P. 352–363.
16. **Cochrane, C.** Effect of interstitial oxygen and iron on deformation of Zr-2.5 wt% Nb / C. Cochrane, M. R. Daymond // *Materials Science and Engineering: A*. – 2015. – Vol. 636. – P. 10–23.
17. The effect of crystallographic mismatch on the obstacle strength of second phase precipitate in dispersion strengthening: bcc Nb particles and nanometric Nb clusters embedded in hcp Zr / Y. Matsukawa, H. L. Yang, K. Saito, Y. Murakami, T. Maruyama, T. Iwai, K. Murakami, Y. Shinohara, T. Kido, T. Toyama, Z. Zhao, Y. F. Li, S. Kano, Y. Satoh, Y. Nagai, H. Abe // *Acta Materialia*. – 2016. – Vol. 102. – P. 323–332.
18. **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.
19. An n-body potential for a Zr–Nb system based on the embedded-atom method / D. Y. Lin, S. S. Wang, D. L. Peng, M. Li, X.D. Hui // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2013. – Vol. 25, № 20. – P. 209501.
20. **Муралев, А. Б.** Моделирование двойниковых межзеренных границ в ОЦК металлах и сплавах / А. Б. Муралев // *Известия Самарского научного центра Российской академии наук*. – 2012. – Т. 14, № 4. – С. 1045–1049.
21. **Муралев, А. Б.** Моделирование каскадов атомных смещений в альфа-железе, содержащем симметрично-наклонную межзеренную границу / А. Б. Муралев, М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин // *Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки*. – 2013. – № 1 (25). – С. 144–158.
22. **Peng, Q.** Stability of self-interstitials atoms in hcp-Zr / Q. Peng, W. Ji, H. Huang, S. De // *Journal of Nuclear Materials*. – 2012. – Vol. 429, № 1-3. – P. 233–236.

References

1. Tikhonchev M. Yu., Svetukhin V. V. *Voprosy materialovedeniya* [Problems of materials science]. 2011, vol. 68, no. 4, pp. 140–152.
2. Shishov V. N., Markelov V. A., Nikulina A. V., Novikov V. V., Peregud M. M., Novoselov A. E., Kobylanskiy G. P., Ostrovskiy Z. E., Obukhov A. V. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Materialovedenie i novye materialy* [Problems of nuclear science and technology. Series: Materials science and new materials]. 2006, vol. 67, no. 2, pp. 313–328.
3. Shishov V. N., Peregud M. M., Nikulina A. V., Pimenov Yu. V., Kobylanskiy G. P., Novoselov A. E., Ostrovskiy Z. E., Obukhov A. V. *14 International Symposium on Zirconium in the Nuclear Industry, ASTM STP 1467 (June 13–17, 2004, Stockholm)*. Stockholm, 2006, pp. 666–685.
4. Novoselov A. E., Pavlov S. V., Polenok V. S., Markov D. V., Zhitelev V. A., Kobylanskiy G. P., Kostyuchenko A. N., Volkova I. N. *Fizika i khimiya obrabotki materialov* [Physics and chemistry of materials processing]. 2009, no. 2, pp. 24–32.
5. Averin S. A., Panchenko V. L. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Materialovedenie i novye materialy* [Problems of nuclear science and technology. Series: Materials science and new materials]. 2006, vol. 66, no. 1, pp. 24–30.
6. Neustroev V. S., Belozerov S. V., Makarov E. I., Obukhov A. V. *Fizika metallov i metallovedenie* [Physics of metals and physical metallurgy]. 2014, vol. 115, no. 10, pp. 1070–1074.
7. 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.
8. Tikhonchev M., Muralev A., Svetukhin V. *Fusion Science and Technology*. 2014, vol. 66, no. 1, pp. 91–99.

9. Miyashiro S., Fujita S., Okita T. *Journal of Nuclear Materials*. 2011, vol. 415, no. 1, pp. 1–4.
10. 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 science and technology. Series: Thermonuclear synthesis]. 2015, vol. 38, no. 1, pp. 42–48.
11. Beelera B., Astab M., Hosemann P., Grønbech-Jensen N. *Journal of Nuclear Materials*. 2015, vol. 459, pp. 159–165.
12. 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.
13. Kapustin P. E. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra RAN* [Proceedings of Samara Scientific Center of RAS]. 2013, no. 4, pp. 1131–1136.
14. 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.
15. Long F., Balogh L., Brown D. W., Mosbrucker P., Skippon T., Judge C. D., Daymond M. R. *Acta Materialia*. 2016, vol. 102, pp. 352–363.
16. Cochrane C., Daymond M. R. *Materials Science and Engineering: A*. 2015, vol. 636, pp. 10–23.
17. Matsukawa Y., Yang H. L., Saito K., Murakami Y., Maruyama T., Iwai T., Murakami K., Shinohara Y., Kido T., Toyama T., Zhao Z., Li Y. F., Kano S., Satoh Y., Nagai Y., Abe H. *Acta Materialia*. 2016, vol. 102, pp. 323–332.
18. Mendeleev M. I., Ackland G. J. *Philosophical Magazine Letters*. 2007, vol. 87, no. 5, pp. 349–359.
19. Lin D. Y., Wang S. S., Peng D. L., Li M., Hui X. D. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2013, vol. 25, no. 20, p. 209501.
20. Muralev A. B. *Izvestiya Samarskogo nauchnogo tsentra Rossiyskoy akademii nauk* [Proceedings of Samara Scientific Center of RAS]. 2012, vol. 14, no. 4, pp. 1045–1049.
21. Muralev A. B., Tikhonchev M. Yu., Svetukhin V. V. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* [University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences]. 2013, no. 1 (25), pp. 144–158.
22. Peng Q., Ji W., Huang H., De S. *Journal of Nuclear Materials*. 2012, vol. 429, no. 1-3, pp. 233–236.

Капустин Павел Евгеньевич

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

E-mail: kapustinpe91@gmail.com

Kapustin Pavel Evgen'evich

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

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.

Первичное радиационное повреждение бинарного сплава Zr-Nb: моделирование методом молекулярной динамики / П. Е. Капустин, В. В. Светухин, М. Ю. Тихончев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2016. – № 3 (39). – С. 133–144. DOI 10.21685/2072-3040-2016-3-9