

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 539.12.043

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРОГОВОЙ ЭНЕРГИИ СМЕЩЕНИЯ В ФЕРРИТО-МАРТЕНСИТНЫХ СТАЛЯХ НА ОСНОВЕ Fe–Cr

© 2024 г. Р. Е. Воскобойников^{a, b, *}

^aНациональный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Каширское ш., 31, Москва, 115409 Россия

^bНациональный исследовательский центр “Курчатовский институт”, пл. Курчатова, 1, Москва, 123182 Россия

*e-mail: roman.voskoboynikov@gmail.com

Поступила в редакцию 29.04.2024 г.

После доработки 04.06.2024 г.

Принята к публикации 07.06.2024 г.

Методом молекулярной динамики (МД) смоделировали дефектообразование в неупорядоченном бинарном сплаве Fe–10 ат.%Cr. Сгенерированная выборка, включающая в себя 14 784 событий образования радиационных дефектов, инициированных первично-выбитыми атомами (ПВА) Fe и Cr с энергиями $100 \text{ эВ} \leq E_{PKA} \leq 5 \text{ кэВ}$ вдоль двадцати двух неэквивалентных кристаллографических направлений, использована для расчета средних пороговых энергий смещения. Показано, что в исследуемом материале средние пороговые энергии смещения атомов Fe и Cr совпадают и равны $\langle E_d \rangle = 24.5 \pm 0.6 \text{ эВ}$. Используя полученные данные МД-моделирования, построили зависимость E_d от E_{PKA} , которая распадается на два линейных фрагмента, определяемых механизмом дефектообразования. Определили значение $E_{cc} \approx 0.84 \text{ кэВ}$, при котором образование изолированных точечных дефектов при низких энергиях ПВА $E_{PKA} \leq E_{cc}$ сменяется дефектообразованием в каскадах столкновений, инициируемых ПВА с энергиями $E_{PKA} \geq E_{cc}$. На основании результатов МД-моделирования модифицировали каскадную функцию в модели Кинчина–Пиза, чтобы учесть зависимость пороговых энергий смещения E_d от энергии E_{PKA} .

Ключевые слова: молекулярная динамика, первичное дефектообразование, феррито-мартенситные стали, пороговая энергия смещения, модель Кинчина–Пиза, NRT-стандарт

DOI: 10.31857/S0015323024100063, **EDN:** JFGLMG

ВВЕДЕНИЕ

Низкая склонность феррито-мартенситных (ФМ) сталей к вакансионному распуханию является ключевым фактором, определяющим выбор этих материалов для изготовления элементов конструкций активных зон реакторов на быстрых нейтронах и компонентов первой стенки и бланкета реакторов синтеза [1]. В настоящее время основные усилия разработчиков направлены на создание нового поколения низкоактивируемых ФМ-сталей, обладающих высокой радиационной стойкостью и сохраняющих свои эксплуатационные свойства в операционных условиях активных зон ядерных энергетических установок четвертого поколения вплоть до 250 сна [2].

ФМ-стали с содержанием хрома 9–12 мас.% начали разрабатывать в 30-х годах прошлого столетия для использования в нефтехимической промышленности, теплоэлектростанциях на ис-

копаемом топливе и, позднее, газотурбинных двигателях [3, 4]. Изначально ФМ-стали не рассматривали в качестве конструкционных материалов для изготовления компонентов активных зон, чехлов тепловыделяющих сборок и оболочек твэлов ядерных энергетических установок, где для этих целей широко применяли традиционные аустенитные нержавеющие стали. Однако во второй половине XX века обнаружили склонность аустенитных сталей к радиационному распуханию [5] со скоростью $\sim 1\%/сна$ [6] без каких-либо признаков насыщения с ростом накопленной дозы облучения. Стало понятно [7–9], что именно низкая скорость вакансионного распухания является базовым свойством, которым должны обладать конструкционные материалы активных зон реакторов четвертого поколения, которые к концу расчетного срока службы могут накопить дозу облучения до 200 сна. Начиная с 70-х годов прошлого столетия, над созданием низкоактивируемых ФМ-сталей

для ядерной энергетики работают все основные игроки мирового рынка ядерных технологий, а разработанные стали HT9 [10–15] и T91 [15–21] (США), EM10 [22, 23] и EM12 [23–25] (Франция), PNC-FMS [26–28] (Япония), FV448/DIN 1.4914 [29–31] (Германия, Великобритания), ЭП-450 [32–38], ЭК-181 [39–41], ЧС-139 [37, 42, 43] (СССР/Россия) были успешно протестированы в операционных условиях исследовательских реакторов, реакторов-прототипов и/или реакторов на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем.

Для оптимизации микроструктуры и химического состава, безопасного использования ФМ-сталей в условиях эксплуатации ядерных энергетических установок необходимо количественно описать деградацию их свойств при одновременном воздействии механических нагрузок, повышенных температур, химически активных сред и реакторного облучения. Программы экспериментальных исследований и опытно-промышленной эксплуатации в существующих энергетических реакторах, направленные на решение этой задачи, требуют больших временных и материальных затрат, для снижения которых экспериментальное изучение радиационных эффектов в ФМ-сталях целесообразно дополнить математическим и компьютерным моделированием. Моделирование оказывается особенно востребовано там, где в силу временных и линейных масштабов протекающих процессов проведение экспериментов затруднено или невозможно из-за отсутствия подходящих экспериментальных методик и инструментов.

Основным источником радиационных повреждений в материалах, подвергаемых облучению быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии, являются каскады смещений, которые образуются в результате рассеяния первично-выбитых атомов (ПВА) с энергиями $E_{PKA} \gtrsim 1$ кэВ на атомах облучаемого материала. Характерные линейные размеры и время жизни каскадов смещений составляют ~ 5 – 30 нм и ~ 2 – 20 пс соответственно, что на данном этапе развития науки и техники не позволяет наблюдать за первичным дефектообразованием в облучаемых материалах в масштабе реального времени, и компьютерное моделирование методом молекулярной динамики (МД) является единственным адекватным методом исследования этого быстропротекающего процесса.

Успешные исследования первичного дефектообразования методом МД проводятся на протяжении нескольких десятилетий [44–48]. За это время изучены фундаментальные закономерности

образования радиационных дефектов в чистых металлах и сплавах, полупроводниках, керамических материалах, полимерах и т.п. МД позволяет проанализировать влияние температуры и действующих напряжений на образование и кластеризацию радиационных дефектов, разупорядочение и аморфизацию под облучением, взаимодействие дефектов со свободной поверхностью облучаемой мишени, границами раздела фаз и вакансионными порами, дислокациями, границами зерен, атомами примесей и т.д. [48].

Следует, однако, отметить, что для многих инженерных приложений детализация и результаты МД-моделирования радиационных эффектов оказываются избыточными, линейные размеры моделируемого кристалла и максимальная накопленная доза, напротив, недостаточными и нерепрезентативными, необходимые для проведения расчетов высокопроизводительные вычислительные ресурсы и научная экспертиза – недоступными, а трудозатраты – чрезмерными. В случаях, когда для планирования пучковых экспериментов или решения иных материаловедческих задач требуется только определить тормозные способности, распределение имплантированных примесей по глубине образца, накопленную дозу, коэффициенты распыления, ионное перемешивание и т.п., оказывается достаточно приближения парных столкновений и функционала программного обеспечения типа SRIM/TRIM [49–54].

Для проведения корректных расчетов SRIM необходимо правильно задать параметры материала мишени, в число которых входят не только химический состав и массовая плотность, но и средние пороговые энергии смещения E_d . Значения E_d , которые используются в SRIM по умолчанию, определены для однокомпонентных материалов и, вообще говоря, могут не отражать реальных пороговых энергий смещения в различных аллотропных модификациях одного и того же однокомпонентного материала (графита и алмаза, например). Отличия пороговых энергий смещения, заданных в SRIM по умолчанию, от реальных пороговых энергий смещения в многокомпонентных материалах могут оказаться еще более заметными.

В проведенном исследовании средние пороговые энергии смещения в модельном бинарном сплаве Fe–10 ат.%Cr получены с использованием простой, но строгой процедуры, позволяющей однозначно определить пороговые энергии смещения в многокомпонентных мишенях. Физическая постановка задачи сформулирована в следующем разделе. Далее приводится описание

использованных методов и подходов и требующих решения вспомогательных задач, за которым следует анализ и обсуждение полученных результатов. И в заключительном разделе сформулированы выводы.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При упругом рассеянии быстрых частиц на атомах кристаллической мишени последним передается часть кинетической энергии налетающей частицы. В результате рассеяния атомы мишени смещаются из своих равновесных положений в узлах кристаллической структуры. Таким образом, большая часть энергии налетающей частицы конвертируется в тепло и ведет к нагреву материала мишени. Более того, если энергия, переданная смещенным атомам, превышает некоторое пороговое значение, в результате рассеяния образуется одна или несколько устойчивых пар точечных дефектов вакансионного и междоузельного типа (пары Френкеля). В силу анизотропии кристаллической структуры пороговые энергии, необходимые для образования пары Френкеля при смещении атомов мишени вдоль различных кристаллографических направлений, существенно отличаются. С другой стороны, за исключением специальных случаев облучения тонких монокристаллов узкоколлимированными пучками, кристаллическая структура поликристаллического материала ориентирована случайным образом по отношению к направлению движения быстрых частиц, и число образующихся радиационных дефектов усредняется по всем кристаллографическим направлениям.

Для простой оценки числа пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$, образовавшихся в облучаемом материале, широко используется NRT-стандарт [55]:

$$N_{\text{ФР}} = \frac{0.8E_{\text{PKA}}}{2E_d}, \quad (1)$$

где $E_{\text{PKA}} \geq 2E_d$ — кинетическая энергия, переданная от налетающей частицы ПВА мишени в результате упругого рассеяния, E_d — соответствующая пороговая энергия смещения. Таким образом, если переписать (1) в виде:

$$E_d(hkl) = \frac{0.8E_{\text{PKA}}(hkl)}{2N_{\text{ФР}}}, \quad (2)$$

можно рассмотреть обратную задачу и в NRT-приближении определить фактическую пороговую энергию смещения в рассматриваемом материале $E_d(hkl)$ вдоль направления $\langle hkl \rangle$. Для этого методом МД необходимо смоделировать процесс образования $N_{\text{ФР}}$ пар Френкеля первично-выбитым атомом с энергией E_{PKA} и начальным импульсом в направлении $\langle hkl \rangle$. В силу стохастической природы образования радиационных дефектов

необходимо смоделировать процесс первичного дефектообразования с одним и тем же набором параметров несколько раз, иницируя ПВА в разных местах моделируемого кристалла в разные моменты времени и имитируя случайное пространственное и временное распределение ПВА.

Чтобы определить среднюю пороговую энергию смещения, которую в дальнейшем можно будет использовать в программном обеспечении SRIM [54], пороговые энергии смещений вдоль конкретных кристаллографических направлений необходимо усреднить:

$$\langle E_d \rangle = \frac{1}{\sum_i^M N_i} \sum_i^M \sum_j^{N_i} \frac{1}{E_d^j(hkl)}. \quad (3)$$

Здесь суммирование ведется по всем M смоделированным кристаллографическим направлениям $\langle hkl \rangle$ и N_i значениям $E_d^j(hkl)$, полученным в серии $j = 1 \dots N_i$ с одинаковым набором параметров МД-моделирования.

Следует, однако, помнить, что “видимые” пороговые энергии смещения, рассчитанные с использованием соотношений (2) и (3), получены в предположении, что вся энергия ПВА расходуется на образование дефектов. Однако, как было замечено ранее, в результате упругого рассеяния ПВА на атомах мишени атомы отдачи приобретают энергию как больше, так и меньше энергии, необходимой для образования устойчивой пары Френкеля. Перепишем $\langle E_d \rangle$ из (3) в виде:

$$\langle E_d(E_{\text{PKA}}) \rangle = \langle E_d^t \rangle + \langle E_d^{\text{ph}}(E_{\text{PKA}}) \rangle, \quad (4)$$

где $\langle E_d^t \rangle$ — “чистая” пороговая энергия, необходимая для образования пары Френкеля, $\langle E_d^{\text{ph}}(E_{\text{PKA}}) \rangle$ — сопутствующие потери энергии на подпороговые смещения атомов в пересчете на одну образовавшуюся пару Френкеля. E_d^t определяется свойствами материала и не зависит от энергии ПВА. Напротив, $\langle E_d^{\text{ph}}(E_{\text{PKA}}) \rangle$ определяется суммарным числом смещенных атомов, и чем выше энергия ПВА, тем это число больше, и напротив, чем меньше E_{PKA} , тем меньше энергии расходуется на возбуждение подпороговых смещений при неизменном значении $\langle E_d^t \rangle$. Таким образом, если построить зависимость $\langle E_d(E_{\text{PKA}}) \rangle$, то в предельном случае $E_{\text{PKA}} \rightarrow 0$ получим искомую среднюю пороговую энергию смещения в облучаемом материале, “очищенную” от потерь энергии на подпороговые смещения атомов мишени:

$$\lim_{E_{\text{PKA}} \rightarrow 0} \langle E_d(E_{\text{PKA}}) \rangle = \langle E_d^t \rangle. \quad (5)$$

В свете вышеизложенных соображений, с технической точки зрения задача о нахождении “истинной” средней пороговой энергии смещения в материале сводится к МД-моделированию первичных повреждений в материале и расчету $\langle E_d \rangle$ по формуле (3) для различных значений энергии ПВА с последующей экстраполяцией полученной функциональной зависимости $\langle E_d(E_{PKA}) \rangle$ в область значений $E_{PKA} \rightarrow 0$.

Поскольку $\langle E_d^t \rangle$ определяется свойствами материала, а не свойствами ПВА, логично предположить, что в многокомпонентных неупорядоченных твердых растворах истинная средняя пороговая энергия смещения не зависит от типа ПВА. Чтобы убедиться в этом, пороговые энергии смещения в рассматриваемом бинарном сплаве Fe–10 ат.%Cr определим как для ПВА Fe, так и для ПВА Cr.

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ

В работе рассмотрен модельный сплав Fe–10 ат.%Cr с кристаллической структурой ОЦК, химический состав которого совпадает с содержанием двух основных компонент в низкоактивируемых ФМ-сталях 16X12МВСФБР-Ш (ЭП823-Ш) [56], 12X12М1БФР-Ш (ЭП450-Ш) [32], 16X12В2ФТаР (ЭК-181, RUSFER-EK-181) [40], EUROFER-97 [57, 58], T91 [16, 17], F82H [59–62], CLAM [63] и т.п. Для вычисления межатомных сил взаимодействия в неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат.%Cr применили полуэмпирические потенциалы [64]. Для корректного описания термодинамических свойств бинарных систем на основе Fe–Cr при построении потенциалов [64] использован формализм двух оболочек [65, 66], являющийся расширением метода внедренного атома [67].

Оригинальные потенциалы [64] не подходят для моделирования радиационных эффектов в облучаемых материалах. Если парная часть Fe–Fe потенциала [64] взята из [68] и адекватно описывает взаимодействие атомов на коротких расстояниях, то про парные части потенциалов Cr–Cr и Fe–Cr этого сказать нельзя. Для корректного моделирования процесса радиационного дефектообразования в каскадах смещений в бинарных сплавах Fe–Cr потенциалы, описывающие взаимодействие атомов Cr между собой и с атомами Fe, необходимо модифицировать на коротких расстояниях.

Вспомогательная задача: подгонка парных потенциалов Cr–Cr и Cr–Fe на коротких расстояниях. Следуя процедуре [69], на коротких расстояниях парную часть Cr–Cr потенциала [64]

модифицировали подстановкой универсального потенциала Зиглера–Бирсака–Литтмарка (ЗБЛ) [49, 50]. В качестве подгоночных параметров применили экспериментально измеренные пороговые энергии смещения в чистом хроме [70], а там, где они отсутствуют, в качестве ориентира использовали опубликованные данные других исследований [65, 71]. Для плавного перехода от потенциала ЗБЛ в точке r_{in} к исходной парной функции взаимодействия Cr–Cr [64] в точке r_{out} применили интерполяцию кубическим сплайном, см. рис. 1. Для сравнения пороговые энергии смещения модифицированного потенциала Cr–Cr и экспериментальные данные [70] приведены в табл. 1. Значения r_{in} , r_{out} и коэффициенты кубического сплайна представлены в табл. 2.

Модифицированную парную функцию взаимодействия Cr–Cr использовали для подгонки кросс-потенциала Fe–Cr на коротких расстояниях. Процедура подгонки кросс-потенциала Fe–Cr не отличается от подгонки парного потенциала взаимодействия Cr–Cr за одним исключением. Пороговые энергии смещения в бинарных системах Fe–Cr никогда экспериментально не измеряли, а значит, на первый взгляд, отсутствуют необходимые данные, которые можно было бы использовать в качестве подгоночных параметров. Однако в исследовании [73] показано, что статистически значимая разница между пороговыми энергиями смещения в сплаве Fe–10 ат.%Cr и чистом α -Fe отсутствует, и, следовательно, экспериментально измеренные пороговые энергии смещения в чистом α -Fe могут быть использованы для подгонки кросс-потенциала Fe–Cr. Пороговые энергии смещения в чистом α -Fe и пороговые энергии смещения модифицированного кросс-потенциала Fe–Cr

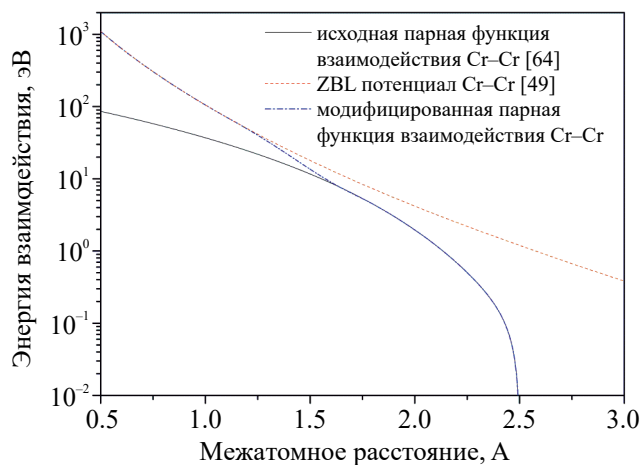


Рис. 1. Подгонка парной функции взаимодействия Cr–Cr исходного потенциала [64] на коротких расстояниях.

Таблица 1. Пороговые энергии смещения в чистых Fe, Cr и неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr

Потенциал	$\langle 100 \rangle$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 111 \rangle$
Cr–Cr	20–21 эВ	56±1 эВ	27–28 эВ
Cr–Cr [65]	21±1 эВ	55±1 эВ	31±1 эВ
Cr–Cr [71]	15±1 эВ	33±1 эВ	27±1 эВ
Cr эксперимент [70]			27±1 эВ
Fe–10 ат.%Cr ПВА Fe	17–18 эВ	47±1 эВ	21–23 эВ
Fe–10 ат.%Cr ПВА Cr	21±1 эВ	37–38 эВ	32–33 эВ
Fe–Cr [71] ПВА Fe	21±1 эВ	53±1 эВ	29±1 эВ
Fe–Cr [71] ПВА Cr	17±1 эВ	39±1 эВ	29±1 эВ
Fe–Cr [65] ПВА Fe	15±1 эВ	33±1 эВ	39±1 эВ
Fe–Cr [65] ПВА Cr	17±1 эВ	37±1 эВ	33±1 эВ
Fe–Fe [71]	19±1 эВ	47±1 эВ	29±1 эВ
Fe–Fe [68]	15±1 эВ	33±1 эВ	35±1 эВ
Fe эксперимент [72]	17±1 эВ	>30 эВ	20±1 эВ

Таблица 2. Параметры модифицированных потенциалов (6), описывающих парные взаимодействия атомов Cr–Cr и Fe–Cr в неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr

Параметр потенциала (6)	Cr–Cr	Fe–Cr
$A, \text{эВ}/\text{\AA}^3$	–168.898865137271	–213.852389566832
$B, \text{эВ}/\text{\AA}^2$	906.285552329379	1137.86930204304
$C, \text{эВ}/\text{\AA}$	–1637.87907456703	–2027.50347658983
$D, \text{эВ}$	1001.30376921357	1213.16378742874
$r_{\text{in}}, \text{\AA}$	1.13947123074036	1.06970915153387
$r_{\text{out}}, \text{\AA}$	1.79104910491049	1.76454645464546

вдоль различных кристаллографических направлений приведены в табл. 1, которая была также дополнена результатами других исследований по этой теме для проведения сравнительного анализа. Исходный парный кросс-потенциал Fe–Cr, модифицированный кросс-потенциал Fe–Cr и ZBL потенциал Fe–Cr показаны на рис. 2.

Модифицированные потенциалы $\varphi_{\alpha\beta}(r)$, $\alpha, \beta = \text{Fe, Cr}$, описывающие парные взаимодействия атомов Cr–Cr и Fe–Cr, представим в следующем виде:

$$\varphi_{\alpha\beta}(r) = \begin{cases} \text{ZBL}, & r \leq r_{\text{in}} \\ Ar^3 + Br^2 + Cr + D, & r_{\text{in}} \leq r \leq r_{\text{out}}, \quad (6) \\ \text{исх. потенциал}, & r \geq r_{\text{out}} \end{cases}$$

где радиусы обрезания $r_{\text{in}}, r_{\text{out}}$ и коэффициенты A, B, C и D кубического сплайна собраны в табл. 2. По сравнению с [65, 71] построенные потенциалы (6) более точно воспроизводят экспериментально измеренные пороговые энергии смещения [70, 72].

МД-моделирование каскадов смещений в неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат.%Cr

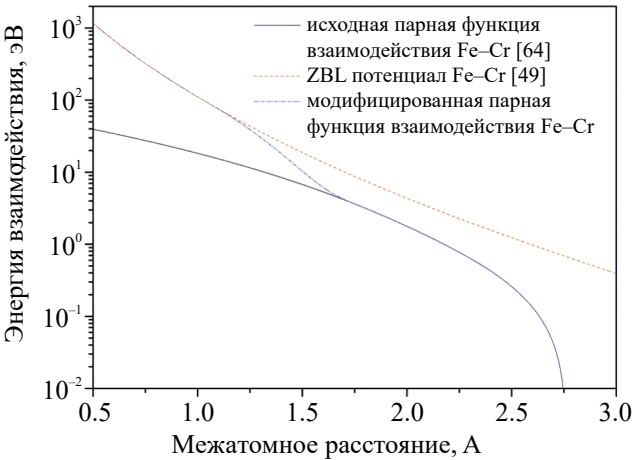


Рис. 2. Подгонка парной функции взаимодействия Fe–Cr исходного потенциала [64] на коротких расстояниях.

выполнили при температуре кристалла $T = 20 \text{ К}$. Используя теорему о вириале [74], определили равновесный параметр решетки $a_0 = 2.87151 \text{ \AA}$, соответствующий нулевым внутренним напряжениям при температуре моделирования. Моде-

лирование провели в ансамбле *NVE*. Моделируемый кристалл имеет форму параллелепипеда или куба с гранями $\{100\}$. Периодические граничные условия использовали на всех гранях кристалла. При малых энергиях ПВА некубическая форма моделируемого кристалла небольшого размера исключает взаимодействие цепочек последовательных замещающих столкновений вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ со своими изображениями.

Для расчета средних пороговых энергий смещения в неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат. %Cr смоделировали каскады смещений, инициированные ПВА с энергиями $E_{PKA} = 100, 200, 300, 400, 500, 750, 1000, 1500, 2000, 3000, 4000$ и 5000 эВ. ПВА вводили вдоль одного из двадцати двух неэквивалентных кристаллографических направлений, приведенных в табл. 3. Для того чтобы имитировать изотропное пространственное и случайное временное распределение ПВА, последние вводили в различных местах моделируемого кристалла в разные моменты времени. Для каждой пары параметров (E_{PKA} , $\langle hkl \rangle$), где $\langle hkl \rangle$ – это одно из 22 направлений, сгенерировали репрезентативную статистическую выборку из 28 каскадов смещений. В качестве ПВА выбирали как атомы Fe, так и атомы Cr. Таким образом, статистическая выборка, использованная для расчета средних пороговых энергий смещения в неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат. %Cr, содержит результаты МД-моделирования $2 \times 22 \times 12 \times 28 = 14\,784$ событий первичного дефектообразования.

Число атомов N_{box} в моделируемом кристалле выбирали так, чтобы при низких энергиях ПВА $100 \text{ эВ} \leq E_{PKA} \leq 750 \text{ эВ}$ смещенные атомы из каскадной области повреждений не выходили за пределы моделируемого кристалла и не взаимодействовали со своими изображениями, а при энергиях ПВА $1 \text{ кэВ} \leq E_{PKA} \leq 5 \text{ кэВ}$ на один атом мишени приходилось $\approx 10^{-2}$ эВ энергии ПВА, см. табл. 4. Перед введением ПВА кристалл Fe–10 ат. %Cr приводили в состояние термодинамического равновесия в течение 1×10^4 МД-итераций (≈ 9 пс). МД-моделирование выполняли без контроля температуры. Пример изменения температуры Максвелла на разных стадиях ре-

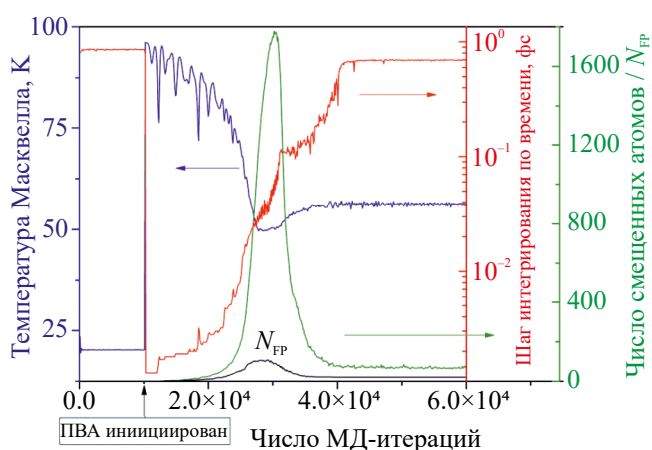


Рис. 3. Изменение температуры Максвелла, шага интегрирования по времени, числа смещенных атомов (зеленая кривая) и пар Френкеля N_{FP} (черная кривая) в процессе релаксации 2 кэВ каскада смещений в неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат. %Cr.

лаксации каскада смещений, инициированного ПВА с энергией $E_{PKA} = 2$ кэВ, показан на рис. 3. Энергию, вносимую ПВА, не извлекали из системы. Связанный с этим нагрев моделируемого кристалла после релаксации каскада смещений не превышал 36 К, см. рис. 3.

Для МД-моделирования первичного дефектообразования в каскадах смещений в неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат. %Cr использовали программное обеспечение (ПО) собственной разработки, оптимизированное для исследования атомарных систем, далеких от состояния равновесия. Прикладное ПО уже использовали ранее для исследования дефектообразования в каскадах смещений в меди [75], α -цирконии [75], алюминии [76], никеле [77], α -титане [78], интерметаллидах и неупорядоченных твердых растворах на основе Ti–Al и Ni–Al [79–81].

Для интегрирования уравнений движения применили алгоритм скоростей Верле [82]. Уравнения движения интегрировали с переменным шагом по времени, см. рис. 3. Для ускорения расчета сил межатомного взаимодействия используемые межатомные потенциалы пред-

Таблица 3. Неэквивалентные кристаллографические направления, вдоль которых инициировали ПВА

$\langle 100 \rangle$					
$\langle 101 \rangle$	$\langle 111 \rangle$				
$\langle 102 \rangle$	$\langle 112 \rangle$	$\langle 122 \rangle$			
$\langle 103 \rangle$	$\langle 113 \rangle$	$\langle 123 \rangle$	$\langle 133 \rangle$		
$\langle 104 \rangle$	$\langle 114 \rangle$	$\langle 124 \rangle$	$\langle 134 \rangle$	$\langle 203 \rangle$	$\langle 342 \rangle$
$\langle 106 \rangle$	$\langle 116 \rangle$	$\langle 126 \rangle$	$\langle 135 \rangle$	$\langle 223 \rangle$	$\langle 344 \rangle$

Таблица 4. Размеры моделируемых кристаллов

Энергия ПВА E_{PKA} , эВ	Размеры моделируемого кристалла, a_0	Число атомов N_{box} в моделируемом кристалле
100	$20 \times 26 \times 29$	30 160
200	$25 \times 32 \times 38$	60 800
300	$28 \times 34 \times 40$	76 160
400	$37 \times 37 \times 37$	101 306
500	$37 \times 37 \times 37$	101 306
750	$37 \times 37 \times 37$	101 306
1000	$37 \times 37 \times 37$	101 306
1500	$42 \times 42 \times 43$	151 704
2000	$46 \times 47 \times 47$	203 228
3000	$54 \times 53 \times 53$	303 372
4000	$60 \times 58 \times 58$	403 680
5000	$63 \times 63 \times 63$	500 094

Таблица 5. Эффективные пороговые энергии смещения E_d , эВ, атомов Fe и Cr в ОЦК-неупорядоченном бинарном твердом растворе Fe–10 ат.%Cr, усредненные по двадцати двум смоделированным кристаллографическим направлениям, в зависимости от энергии ПВА

E_{PKA} , эВ	Fe	Cr
100	29.9 ± 0.6	29.4 ± 0.6
200	34.5 ± 0.6	33.8 ± 0.5
300	39.6 ± 0.6	39.1 ± 0.6
400	42.4 ± 0.6	43.2 ± 0.6
500	46.4 ± 0.7	46.1 ± 0.6
750	52.8 ± 0.7	53.8 ± 0.6
1000	59.9 ± 0.7	59.2 ± 0.7
1500	68.2 ± 0.7	67.5 ± 0.7
2000	76.2 ± 0.8	77.0 ± 0.8
3000	89 ± 1	90 ± 1
4000	98 ± 1	98 ± 1
5000	108 ± 1	107 ± 1

ставили в виде полиномиального разложения по степеням r^2 , где r – расстояние между взаимодействующими атомами. Дефектную структуру материала определяли на каждом сотом шаге интегрирования уравнений движения тремя различными способами: методом эквивалентных сфер Линдемманна [83], ячеек Вигнера–Зейтца [84] и кластерным анализом [85]. В методе эквивалентных сфер Линдемманна использовали пороговые смещения $0.3a_0$; для идентификации кластеров точечных дефектов при проведении кластерного анализа использован радиус второй координационной сферы.

АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ
МД МОДЕЛИРОВАНИЯ

Пороговые энергии смещения Fe и Cr в неупорядоченном бинарном твердом растворе Fe–10 ат.%Cr, усредненные по всем смоделированным неэквивалентным кристаллографическим направлениям, представленным в табл. 3, приведены в табл. 5. Как и предполагали ранее, МД-моделирование первичных повреждений не выявило отличий средних пороговых энергий смещения Fe и Cr при одинаковых энергиях ПВА в неупорядоченном твердом растворе

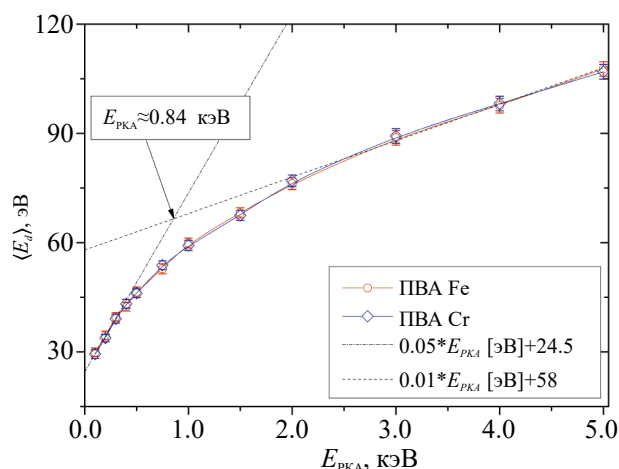


Рис. 4. Зависимость средней пороговой энергии смещения $\langle E_d \rangle$ от E_{PKA} в неупорядоченном бинарном модельном сплаве Fe–10 ат. %Cr. 95% доверительный интервал показан планками.

Fe–10 ат. %Cr во всем рассмотренном интервале энергий $100 \text{ эВ} \leq E_{PKA} \leq 5 \text{ кэВ}$.

Пороговая энергия смещения $\langle E_d \rangle$ атомов Fe и Cr в неупорядоченном бинарном твердом растворе Fe–10 ат. %Cr, усредненная по телесному углу как функция E_{PKA} , показана на рис. 4.

Зависимость $\langle E_d \rangle$ от E_{PKA} распадается на два линейных фрагмента, недвусмысленно указывая

на два доминирующих механизма дефектообразования. При больших энергиях E_{PKA} ПВА инициирует каскад смещений, см. пример на рис. 5. Эффективность дефектообразования в каскаде смещений относительно невелика благодаря рекомбинации радиационных дефектов в каскадной области повреждений. При низких энергиях E_{PKA} ПВА не создает каскадной области повреждений, см. пример на рис. 6. Результатом упругого рассеяния ПВА на атомах мишени является формирование цепочек последовательных замещающих столкновений (см. рис. 6а), и образование изолированных точечных дефектов. Пространственное разделение точечных дефектов затрудняет их рекомбинацию, и эффективность дефектообразования, количественной мерой которой является относительно низкая средняя энергия пороговых смещений, оказывается повышенной. Несмотря на различие механизмов дефектообразования при низких и относительно высоких энергиях ПВА, распределение радиационных дефектов, оставшихся после релаксации атомных смещений, имеет выраженный центральносимметричный характер с обогащенным вакансиями ядром и междоузлиями, расположенными на периферии.

Плавный переход от одного механизма дефектообразования к другому происходит в интервале энергий $400 \text{ эВ} \leq E_{PKA} \leq 2 \text{ кэВ}$, см. рис. 4.

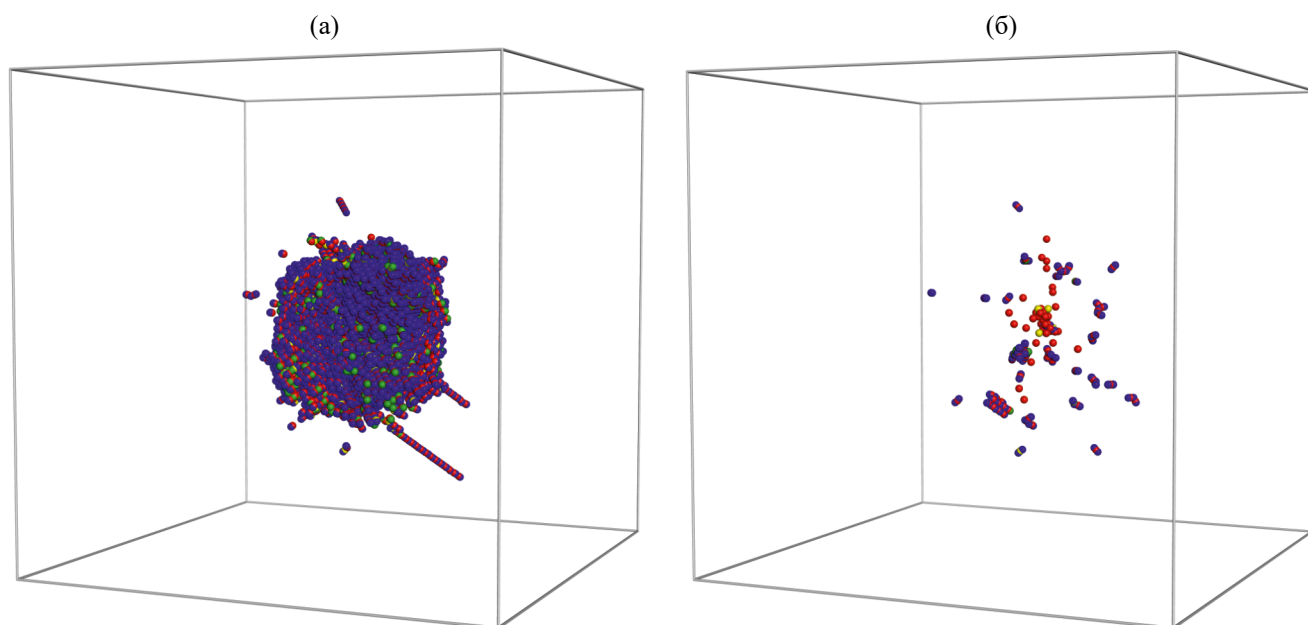


Рис. 5. (а) Каскадная область повреждений, создаваемая 5 кэВ ПВА Fe, инициированным вдоль кристаллографического направления $\langle 134 \rangle$, в неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат. %Cr. (б) Точечные дефекты и их кластеры, оставшиеся после релаксации каскада смещений, показанного на рис. 5а, размеры и ориентация сохранены. Синим и зеленым цветом показаны смещенные атомы Fe и Cr соответственно. Красным и желтым цветом обозначены вакантные узлы, которые изначально занимали атомы Fe и Cr соответственно. Для просмотра цветного изображения читателю следует обратиться к электронной версии статьи.

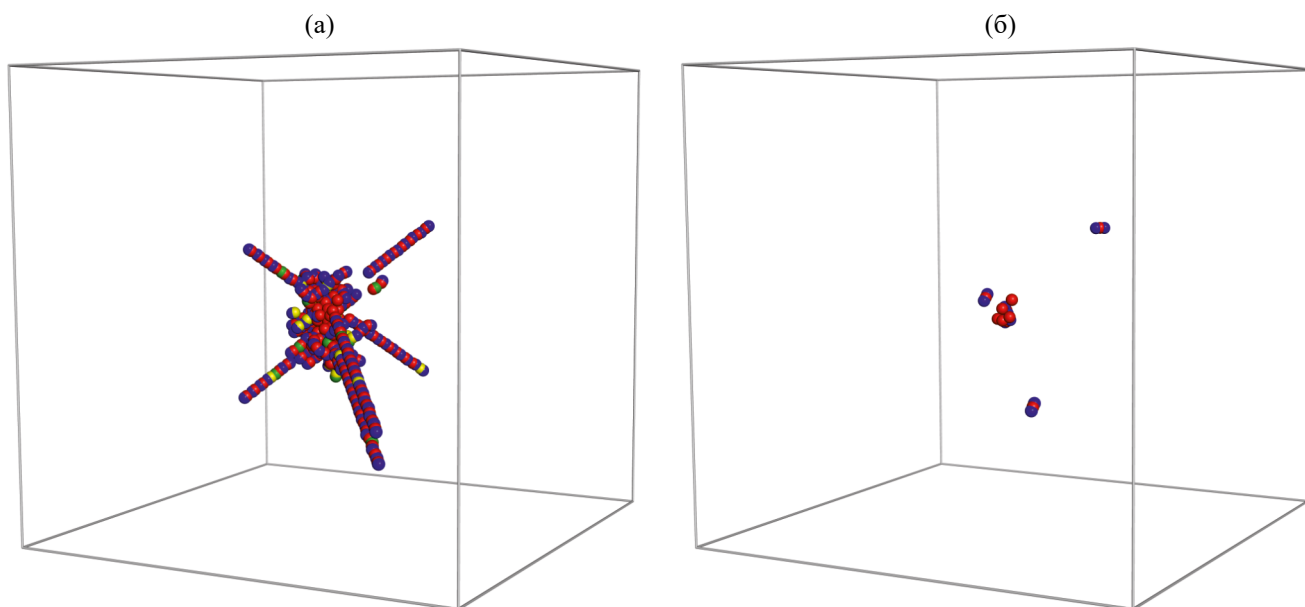


Рис. 6. (а) Цепочки последовательных замещающих столкновений, создаваемые 400 эВ ПВА Fe, инициированным вдоль кристаллографического направления $\langle 111 \rangle$ в неупорядоченном бинарном сплаве Fe–10 ат.%Cr. (б) Изолированные точечные дефекты, оставшиеся после релаксации атомных смещений, показанных на рис. 6а. Цветовая кодировка совпадает с рис. 5.

Зависимость $\langle E_d(E_{PKA}) \rangle$ не имеет особенных точек, и однозначно определить пороговую энергию ПВА, при которой образование изолированных точечных дефектов сменяется дефектообразованием в каскадах, не получится. Но при необходимости в качестве такой пороговой энергии можно принять точку пересечения асимптот кривой $\langle E_d(E_{PKA}) \rangle$ на рис. 4. В рассматриваемом бинарном твердом растворе эта пороговая энергия оказалась равна $E_{cc} \approx 0.84$ кэВ.

Отдельного комментария заслуживает собственно $\langle E_d \rangle$ как функция E_{PKA} . NRT-стандарт [55], используемый для оценки уровня накопленной дозы облучения, не имеет никакой функциональной зависимости пороговой энергии смещения E_d . Результаты МД, демонстрирующие зависимость E_d от E_{PKA} , указывают на потерю энергии ПВА за счет подпороговых взаимодействий, вклад которых в диссипацию энергии ПВА очевидно возрастает с ростом E_{PKA} , см. табл. 5. Таким образом, без учета подпороговых взаимодействий каскадная функция и рассчитанная величина накопленной дозы облучения будут сильно переоценены по сравнению с фактическим уровнем радиационных повреждений облучаемого материала.

Чтобы “очистить” E_d от вклада слабых подпороговых взаимодействий ПВА с окружающими атомами, не приводящих к образованию радиационных дефектов, необходимо экстраполировать построенную линейную зависимость $\langle E_d \rangle$ от E_{PKA} в область $E_{PKA} \rightarrow 0$, см. рис. 4. Полученное

значение $\langle E_d \rangle = 24.5 \pm 0.6$ эВ и будет искомой пороговой энергией смещения Fe и Cr в неупорядоченном бинарном твердом растворе Fe–10 ат.%Cr. Как и предполагали, средняя пороговая энергия смещения не зависит от типа ПВА и одинакова для атомов Fe и Cr.

Следует, однако, отметить, что использование пороговой энергии смещения $\langle E_d \rangle = 24.5 \pm 0.6$ эВ при расчете каскадной функции (1) в представлении Кинчина–Пиза неизбежно приведет к переоценке числа пар Френкеля, образованных в неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат.%Cr, облучаемом быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии. Отклонение от реальной величины N_{FP} в сторону больших значений будет тем значительнее, чем выше энергия ПВА.

Результаты МД-моделирования первичных повреждений в модельном сплаве Fe–10 ат.%Cr указывают на то, что реальный вклад подпороговых смещений атомов, не приводящих к образованию радиационных дефектов, в диссипацию энергии ПВА, оказывается выше, чем это предсказывается NRT стандартом/ моделью Кинчина–Пиза. Чтобы корректно учесть потери энергии ПВА на подпороговые смещения атомов из равновесных положений в узлах кристаллической структуры мишени, в выражение (1) для расчета каскадной функции предлагается подставить “эмпирическую” линейную зависимость средней пороговой энергии смещения $\langle E_d \rangle$ от E_{PKA} , построенную на основе анализа

Таблица 6. Значения параметров χ и E_χ модифицированной каскадной функции (7)

E_{PKA}	χ	E_χ , эВ
$2E_\chi \leq E_{PKA} \leq E_{CC}$	0.05	24.5
$E_{PKA} \leq E_{CC}$	0.01	58

результатов МД-моделирования первичных повреждений, см. рис. 4:

$$N_{FP} = \frac{0.8E_{PKA}}{2(\chi E_{PKA} + E_\chi)}. \quad (7)$$

Здесь параметры χ и E_χ определяются величиной энергии ПВА E_{PKA} и, в зависимости от режима первичного дефектообразования, принимают значения, приведенные в табл. 6. Верхняя строчка значений параметров χ и E_χ в табл. 6 отвечает режиму образования изолированных точечных дефектов при низких энергиях ПВА $E_{PKA} \leq E_{CC}$. Увеличение энергии ПВА E_{PKA} выше $E_{CC} \approx 0.84$ кэВ ведет к переходу от образования изолированных точечных дефектов к дефектообразованию в каскадах смещений и соответствующей смене значений параметров χ и E_χ при вычислении каскадной функции (7).

ВЫВОДЫ

Методом МД смоделирован процесс первичного радиационного дефектообразования в бинарном модельном сплаве Fe–10 ат. %Cr, химический состав которого совпадает с примерным содержанием основных компонент перспективных низкоактивируемых ФМ сталей 16X12М-ВСФБР-Ш (ЭП823-Ш), 12X12М1БФР-Ш (ЭП450-Ш), 16X12В2ФТаР (ЭК-181, RUSFER-EK-181), EUROFER-97, T91, F82H, CLAM для использования в активных зонах энергетических реакторов на быстрых нейтронах и реакторах синтеза. Сгенерированная репрезентативная статистическая выборка включает в себя 14784 события первичного дефектообразования, инициированных Fe и Cr ПВА с энергиями $100 \text{ эВ} \leq E_{PKA} \leq 5 \text{ кэВ}$.

Усреднение числа пар Френкеля, образованных в результате упругого рассеяния ПВА на атомах исследуемой мишени, позволило идентифицировать два механизма дефектообразования при облучении неупорядоченных бинарных твердых растворов Fe–Cr быстрыми частицами. Показано, что ПВА с энергиями $E_{PKA} \lesssim 0.84$ кэВ не образуют каскадов смещений, а радиационные дефекты, возникающие в результате рассеяния таких низкоэнергетичных ПВА, расположены далеко друг от друга. ПВА с энергиями $E_{PKA} \gtrsim 0.84$ кэВ, напротив, образуют каскады

смещений, в результате релаксации которых в ряде случаев наблюдается образование кластеров точечных дефектов.

Плавный переход от образования изолированных точечных дефектов к дефектообразованию в каскадах смещений происходит в интервале энергий ПВА $400 \text{ эВ} \leq E_{PKA} \leq 2 \text{ кэВ}$. Оценочное значение минимальной энергии ПВА $E_{CC} \approx 0.84$ кэВ, необходимой для образования каскада смещений в бинарном неупорядоченном твердом растворе Fe–10 ат. %Cr, определили по пересечению асимптот зависимости $\langle E_d(E_{PKA}) \rangle$ при больших и малых значениях E_{PKA} .

Предложен простой способ вычисления пороговой энергии смещения в материалах, с помощью которого определены средние пороговые энергии смещения атомов Fe и Cr в бинарном модельном сплаве Fe–10 ат. %Cr. Как и было предсказано, эти энергии не зависят от типа ПВА и равны 24.5 ± 0.6 эВ.

На основании результатов МД-моделирования каскадная функция в модели Кинчина–Пиза модифицирована таким образом, чтобы корректно учесть потери энергии ПВА на подпороговые смещения атомов в исследуемом материале во всем интервале рассматриваемых значений E_{PKA} .

Исследования выполнены с использованием ресурсов и оборудования высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ и центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”, <http://ckp.nrcki.ru/>.

Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Little E.A., Stow D.A. Void-swelling in irons and ferritic steels: II. An experimental survey of materials irradiated in a fast reactor // J. Nuclear Mater. 1979. V. 87:1. P. 25–39.
2. Hashimoto N., Kasada R., Raj B., Vijayalakshmi M. 3.05 – Radiation Effects in Ferritic Steels and Advanced Ferritic-Martensitic Steels / Konings R.J.M., Stoller R.E. Eds. Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition). Elsevier. 2020. P. 226–254.
3. Masuyama F. New Developments in Steels for Power Generation Boilers / in Ramaswamy Viswanathan, Jack Nutting Eds. Advanced Heat Resistant Steels for Power Generation. IOM Communications Ltd. The Institute of Materials. 1999. Book 708. P. 33–48.
4. Orr J., Sanderson S.J. Examination of the Potential for 9%Cr1%Mo Steel as Thick Section Tubeplates in Fast Reactors // Proceedings of Topical Conference on

- Ferritic Alloys for Use in Nuclear Energy Technologies // Metallurgical Soc of AIME. 1984. P. 261–267.
5. *Cawthorne C., Fulton E.* Voids in Irradiated Stainless Steel // *Nature*. 1967. V. 216. P. 575–576.
 6. *Garner F.A., Gelles D.S.* Neutron-induced swelling of commercial alloys at very high exposures / in: Packan N.H., Stoller R.E., Kumar A.S. Eds. Effects of Radiation on Materials: 14th International Symposium. ASTM STP1046. V. 2. 1990. American Society for Testing and Materials. Philadelphia. P. 673–683.
 7. *Bishop J.F.W.* Metallurgy in Relation to Reactor Design and Development / Dimensional Stability and Mechanical Behaviour of Irradiated Metals and Alloys. British Nuclear Energy Society. London. 1984. V. 2. P. 115–124.
 8. *Bennett J.W., Horton K.E.* Materials requirements for liquid metal fast breeder reactors // *Metall Trans. A*. 1978. V. 9. P. 143–149.
 9. *Harries D., Standring J., Barnes W., Lloyd G.* The U.K. Fast Reactor Materials Programme / in: Brager H., Perrin J. Eds., Effects of Radiation on Materials: Eleventh Conference. ASTM STP 782. American Society for Testing and Materials. Philadelphia PA. 1982. P. 1197–1217.
 10. *Chen Y.* Irradiation Effects of HT-9 Martensitic Steel // *Nucl. Eng. Techn.* 2013. V. 45:3. P. 311–322.
 11. *Zheng C., Reese E.R., Field K.G., Marquis E., Maloy S.A., Kaoumi D.* Microstructure response of ferritic/martensitic steel HT9 after neutron irradiation: effect of dose // *J. Nucl. Mater.* 2019. V. 523. P. 421–433.
 12. *Zheng C., Reese E.R., Field K.G., Marquis E., Maloy S.A., Kaoumi D.* Microstructure response of ferritic/martensitic steel HT9 after neutron irradiation: effect of temperature // *J. Nucl. Mater.* 2020. V. 528. P. 151845.
 13. *Toloczko M.B., Garner F.A.* Variability of Irradiation Creep and Swelling of HT9 Irradiated to High Neutron Fluence at 400–600 °C / in Nanstad R.K., Hamilton M.L., Garner F.A., Kumar A.S. Eds, Effects of Radiation on Materials: 18th International Symposium. ASTM STP 1325. American Society for Testing and Materials. Philadelphia PA. 1999. P. 765–779.
 14. *Field K.G., Eftink B.P., Parish C.M., Saleh T.A., Maloy S.A.* Synergies Between α' and Cavity Formation in HT-9 Following High Dose Neutron Irradiation // ORNL/TM-2017/274 Rev. 0. 2017. 18 p.
 15. *Maloy S.A., Saleh T.A., Anderoglu O., Romero T.J., Odette G.R., Yamamoto T., Li S., Cole J.I., Fielding R.* Characterization and comparative analysis of the tensile properties of five tempered martensitic steels and an oxide dispersion strengthened ferritic alloy irradiated at ≈ 295 °C to ≈ 6.5 dpa // *J. Nucl. Mater.* 2016. V. 468. P. 232–239.
 16. *Jiao Z., Taller S., Field K., Yeli G., Moody M.P., Was G.S.* Microstructure evolution of T91 irradiated in the BOR60 fast reactor // *J. Nucl. Mater.* 2018. V. 504. P. 122–134.
 17. *Tan L., Kim B.K., Yang Y., Field K.G., Gray S., Li M.* Microstructural evolution of neutron-irradiated T91 and NF616 to ~ 4.3 dpa at 469 °C // *J. Nucl. Mater.* 2017. V. 493. P. 12–20.
 18. *Taller S., Jiao Zh., Field K., Was G.S.* Emulation of fast reactor irradiated T91 using dual ion beam irradiation // *J. Nucl. Mater.* 2019. V. 527. P. 151831.
 19. *Adisa S.B., Blair R., Swenson M.J.* Comparison of microstructure evolution in Fe²⁺ or neutron-irradiated T91 at 500 °C // *Materialia*. 2020. V. 12. P. 100770.
 20. *Konstantinović M.J., Stergar E., Lambrecht M., Gavrilov S.* Comparison of the mechanical properties of T91 steel from the MEGAPIE, and TWIN-ASTIR irradiation programs // *J. Nucl. Mater.* 2016. V. 468. P. 228–231.
 21. *Dai Y., Krsjak V., Kuksenko V., Schäublin R.* Microstructural changes of ferritic/martensitic steels after irradiation in spallation target environments // *J. Nucl. Mater.* 2018. V. 511. P. 508–522.
 22. *Tissot O., Gavoille P., Verhaeghe B., Henry J.* Mechanical and microstructural analysis of an EM10 wrapper tube after neutron irradiation in Phénix // *J. Nucl. Mater.* 2021. V. 543. P. 152575.
 23. *Dubuisson P., Gilbon D., Séran J.L.* Microstructural evolution of ferritic-martensitic steels irradiated in the fast breeder reactor Phénix // *J. Nucl. Mater.* 1993. V. 205. P. 178–189.
 24. *Séran J.L., Levy V., Dubuisson P., Gilbon D., Maillard A., Fissolo A., Tournon H., Cauvin R., Chalony A., Le Boulbin E.* Behavior under neutron irradiation of the 15–15Ti and EM10 steels used as standard materials of the phenix fuel subassembly / 15 International Symposium on the Effects of Radiation on Materials. 1990. (CEA-CONF-10217). France.
 25. *Klueh R.L.* Chromium-molybdenum steels for fusion reactor first walls – a review // *Nucl. Eng. Design*. 1982. V. 72:3. P. 329–344.
 26. *Yano Y., Yoshitake T., Yamashita S., Akasaka N., Onose S., Watanabe S., Takahashi H.* Effects of Fast Reactor Irradiation Conditions on Tensile and Transient Burst Properties of Ferritic/Martensitic Steel Claddings // *J. Nucl. Sci. Techn.* 2007. V. 44:12. P. 1535–1542.
 27. *Yano Y., Yoshitake T., Yamashita S., Akasaka N., Onose S., Takahashi H.* Tensile and transient burst properties of advanced ferritic/martensitic steel claddings after neutron irradiation // *J. Nucl. Mater.* 2007. V. 367–370. Part A. P. 127–131.
 28. *Yano Y., Yamashita S., Ohtsuka S., Kaito T., Akasaka N., Shibayama T., Watanabe S., Takahashi H.* Mechanical properties and microstructural stability of 11Cr-ferritic/martensitic steel cladding under irradiation // *J. Nucl. Mater.* 2010. V. 398:1–3. P. 59–63.
 29. *Bagley K., Little E.A., Levy V., Alamo A.* European development of ferritic-martensitic steels for fast reactor wrapper applications // CEA-CONF-9369. France. 1987. 25 p.
 30. *Ehrlich K., Harries D.R., Möslang A.* Characterization and Assessment of Ferritic/ Martensitic Steels // FZKA 5626. Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe. 1997. 101 p.

31. Klueh R.L., Nelson A.T. Ferritic/martensitic steels for next-generation reactors // J. Nucl. Mater. 2007. V. 371:1–3. P. 37–52.
32. Dvoriashin A.M., Porollo S.I., Konobeev Yu.V., Garner F.A. Influence of high dose neutron irradiation on microstructure of EP-450 ferritic-martensitic steel irradiated in three Russian fast reactors // J. Nucl. Mater. 2004. V. 329–333. Part A. P. 319–323.
33. Porollo S.I., Dvoryashin A.M., Ivanov A.A., Konobeev Yu. V., Shulepin S.V. Study of Phase-Structural Transformations Resulting in Low-Temperature Radiation Embrittlement in Ferritic-Martensitic Steel // At Energy. 2019. V. 126. P. 39–45.
34. Kupriyanova Y.E., Bryk V.V., Kalchenko A.S., Voyevodin V.N. Single and dual ion irradiation effects on swelling behavior of EP-450 ferritic-martensitic steel // East European J. Phys. 2015. V. 2(1). P. 46–52.
35. Vilensky O. Yu., Ryabtsov A.V. Mathematical models of radiation-induced swelling and creep of casing steel EP-450 of fast sodium reactors active zone assembly // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Nuclear and Reactor Constants. 2017. V. 3:17. P. 199–209.
36. Грачев А.Ф., Забудько Л.М., Леонтьева-Смирнова М.В., Науменко И.А., Крюков Ф.Н., Чертопятов Е.В., Мариненко Е.Е., Поролло С.И. Кратковременные механические свойства ферритно-мартенситной стали ЭП823-III после высокодозового нейтронного облучения // Атомная энергия. 2021. Т. 130. № 6. С. 306–309.
37. Рогожкин С.В., Искандаров Н.А., Никитин А.А., Хомич А.А., Хорошилов В.В., Богачев А.А., Лукьянчук А.А., Разницын О.А., Шутлов А.С., Кулевой Т.В., Федин П.А., Васильев А.Л., Пресняков М.Ю., Леонтьева-Смирнова М.В., Можанов Е.М., Никитина А.А. Исследование микроскопических причин радиационного упрочнения сталей ЭК-181 и ЧС-139 с помощью имитационного облучения ионами // Перспективные материалы. 2019. № 12. С. 39–51.
38. Митрофанова Н.М., Целищев А.В., Агеев В.С., Буданов Ю.П., Иолтуховский А.Г., Леонтьева-Смирнова М.В., Решетников Ф.Г., Бибилашвили Ю.К., Шкабура И.А., Иванов Ю.А. Конструкционные материалы для оболочек твэлов и чехлов ТВС реактора БН-600 // Изв. вузов. Ядерная энергетика. 2011. № 1. С. 211–264.
39. Арбузов В.Л., Гощицкий Б.Н., Данилов С.Е., Козлов А.В., Сагарадзе В.В., Чернов В.М. Влияние нейтронного и электронного облучений на структурно-фазовые превращения в стали Fe–12Cr–2W–V–Ta–B с различными исходными термообработками // ФММ. 2019. Т. 120. № 4. С. 395–399.
40. Блохин Д.А., Леонтьева-Смирнова М.В., Чернов В.М., Блохин А.И., Демин Н.А., Сипачев И.В. Ядерные физические свойства ферритно-мартенситной стали ЭК-181 в условиях длительного нейтронного облучения в быстром БН-600 и термоядерном ДЕМО-РФ реакторах // Перспективные материалы. 2010. № 4. С. 26–33.
41. Blokhin D.A., Leontyeva-Smirnova M.V., Chernov V.M., Blokhin A.I., Demin N.A., Sipachev I.V. Nuclear Physical Properties of Ferritic-Martensitic Steel EK-181 under Conditions of Long-Term Neutron Irradiation in Fast Breeder BN-600 and Fusion DEMO-RF Reactors // Inorganic Mater.: Appl. Research. 2011. V. 2. № 2. P. 129–135.
42. Aydogan E., Chen T., Gigax J.G., Chen D., Wang X., Dzhumayev P.S., Emelyanova O.V., Ganchenkova M.G., Kalin B.A., Leontyeva-Smirnova M., Valiev R.Z., Enikeev N.A., Abramova M.M., Wu Y., Lo W.Y., Yang Y., Short M., Maloy S.A., Garner F.A., Shao L. Effect of self-ion irradiation on the microstructural changes of alloy EK-181 in annealed and severely deformed conditions // J. Nucl. Mater. 2017. V. 487. P. 96–104.
43. Рогожкин С.В., Искандаров Н.А., Лукьянчук А.А., Шутлов А.С., Разницын О.А., Никитин А.А., Залужный А.Г., Кулевой Т.В., Куйбида Р.П., Андрианов С.Л., Леонтьева-Смирнова М.В., Можанов Е.М., Никитина А.А. Исследование наноструктуры ферритно-мартенситной стали ЧС-139 в исходном состоянии и после облучения ионами Fe // Перспективные материалы. 2017. № 11. С. 5–17.
44. Богданов С.Г., Гощицкий Б.Н., Пархоменко В.Д., Леонтьева-Смирнова М.В., Чернов В.М. Кристаллические и магнитные структуры. Исследование наноструктуры ферритно-мартенситных 12%-хромистых сталей методом малоуглового рассеяния нейтронов // ФТТ. 2014. Т. 56:1. С. 9–20.
45. Cai W., Li J., Uberuaga B.P., Yip S. 1.18 – Molecular Dynamics / Konings R.J.M., Stoller R.E. Eds. Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition). Elsevier, Amsterdam. 2020. V. 1. P. 573–594.
46. Nordlund K. Historical review of computer simulation of radiation effects in materials // J. Nucl. Mater. 2019. V. 520. P. 273–295.
47. Stoller R.E., Zarkadoula E. 1.20 – Primary Radiation Damage Formation in Solids / Konings R.J.M., Stoller R.E. Eds. Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition). Elsevier, Amsterdam. 2020. V. 1. P. 620–662.
48. Nordlund K., Sand A.E., Granberg F., Zinkle S.J., Stoller R., Averbach R.S., Suzudo T., Malerba L., Banhart F., Weber W.J., Willaime F., Dudarev S., Simeone D. Primary Radiation Damage in Materials: Review of Current Understanding and Proposed New Standard Displacement Damage Model to Incorporate In-cascade Mixing and Defect Production Efficiency Effects / OECD Nuclear Energy Agency, Paris. 2015. 87 p.
49. Nordlund K., Zinkle S.J., Sand A.E., Granberg F., Averbach R.S., Stoller R.E., Suzudo T., Malerba L., Banhart F., Weber W.J., Willaime F., Dudarev S.L., Simeone D. Primary radiation damage: A review of current understanding and models // J. Nucl. Mater. 2018. V. 512. P. 450–479.
50. Ziegler J.F., Biersack J.P. The Stopping and Range of Ions in Matter / in: Bromley D.A. Eds. Treatise on Heavy-Ion Science. 1985. Springer, Boston, MA. P. 93–129.

50. Ziegler J.F., Biersack J., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Matter 1st ed. Pergamon Press. 1985. 321 p.
51. Ziegler J.F. SRIM-2003 // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2004. V. 219–220. P. 1027–1036.
52. Ziegler J.F., Biersack J.P., Ziegler M.D. SRIM—The Stopping Range of Ions in Matter. SRIM Co. 2008. 405 p.
53. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. SRIM – The stopping and range of ions in matter // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2010. V. 268. Issues 11–12. P. 1818–1823.
54. <http://www.srim.org/SRIM/SRIM-2013-Std.e>.
55. Norgett M.J., Robinson M.T., Torrens I.M. A proposed method for calculating displacement dose rates // Nucl. Eng. Design. 1975. V. 33:1. P. 50–54.
56. Kozlov K., Shabashov V., Kozlov A., Sagaradze V., Semyonkin V., Panchenko V., Zamatovskii A., Kataeva N., Nikitina A. Mössbauer spectroscopy investigation of the effect of a high-dose neutron irradiation on the atomic redistribution in the industrial steel EP823 // J. Nucl. Mater. 2022. V. 558. P. 153384.
57. Bhattacharya A., Chen X., Graening T., Geringer J.W., Reed J., Henry J., Pilloni L., Terentyev D., Puype A., Byun T.S., Katoh Y., Rieth M., Zinkle S.J. Irradiation hardening and ductility loss of Eurofer97 steel variants after neutron irradiation to ITER-TBM relevant conditions // Fusion Eng. Design. 2021. V. 173. P. 112935.
58. Klimenkov M., Jäntschi U., Rieth M., Möslang A. Correlation of microstructural and mechanical properties of neutron irradiated EUROFER97 steel // J. Nucl. Mater. 2020. V. 538. P. 152231.
59. Shiba K., Hishinuma A., Tohyama A., Masamura K. Properties of Low Activation Ferritic Steel F82H IEA Heat. Interim Report of IEA Round-robin Tests (1) / JAERI-Tech 97–038. 1997. Japan Atomic Energy Research Institute. 118 p.
60. Wakai E., Ando M., Matsukawa S., Taguchi T., Yamamoto T., Tomita H., Takada F. Effect of Initial Heat Treatment on DBTT of F82H Steel Irradiated by Neutrons // Fusion Science and Technology. 2005. V. 47:4. P. 856–860.
61. Huang S.S., Kitao S., Kobayashi Y., Yoshiie T., Xu Q., Sato K., Seto M. Study of neutron irradiation on F82H alloys by Mössbauer spectroscopy // J. Nucl. Mater. 2015. V. 456. P. 266–271.
62. Coppola R., Lindau R., May R.P., Möslang A., Valli M. Microstructural investigation of low-dose neutron irradiation effects in martensitic steels for nuclear application by means of small-angle neutron scattering // J. Appl. Crystal. 2007. V. 40. P. s142–s146.
63. Huang Q. FDS Team, Development status of CLAM steel for fusion application // J. Nucl. Mater. 2014. V. 455. Issues 1–3. P. 649–654.
64. Eich S.M., Beinke D., Schmitz G. Embedded-atom potential for an accurate thermodynamic description of the iron-chromium system // Comp. Mater. Sci. 2015. V. 104. P. 185–192.
65. Olsson P., Wallenius J., Domain C., Nordlund K., Malerba L. Two-band modeling of α -prime phase formation in Fe-Cr // Phys. Rev. B. 2005. V. 72. P. 214119.
66. Olsson P., Wallenius J., Domain C., Nordlund K., Malerba L. Erratum: Two-band modeling of α -prime phase formation in Fe-Cr [Phys. Rev. B72 (2005) 214119] // Phys. Rev. B. 2006. V. 74. P. 229906.
67. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 6443–6453.
68. Ackland G.J., Mendelev M.I., Srolovitz D.J., Han S., Barashev A.V. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron // J. Phys.: Condensed Matter. 2004. V. 16. P. S2629–S2642.
69. Gärtner K., Stock D., Weber B., Betz G., Hautala M., Hobler G., Hou M., Sarite S., Eckstein W., Jiménez-Rodríguez J.J., Pérez-Martín A. M. C., Andribet E.P., Konoplev V., Gras-Marti A., Posselt M., Shapiro M.H., Tombrello T.A., Urbassek H.M., Hensel H., Yamamura Y., and Takeuchi W. Round robin computer simulation of ion transmission through crystalline layers // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 1995. V. 102. Issues 1–4. P. 183–197.
70. Biget M., Maury F., Vajda P., Lucasson A., Lucasson P. Atomic displacements in low temperature irradiated chromium crystals // J. Phys. 1979. V. 40. P. 293–298.
71. Chakarova R., Pontikis V., Wallenius J. Development of FeCr many body potential and cohesion model / Delivery Report WP6, SPIRE project, EC contract no. FIKW-CT-2000–00058. 2002. 25 p.
72. Maury F., Biget M., Vajda P., Lucasson A., Lucasson P. Anisotropy of defect creation in electron-irradiated iron crystals // Phys. Rev. B. 1976. V. 14. P. 5303–5313.
73. Juslin N., Nordlund K., Wallenius J., Malerba L. Simulation of threshold displacement energies in FeCr // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2007. V. 255. Issue 1. P. 75–77.
74. Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976. 376 с.
75. Voskoboynikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J. Statistics of primary damage creation in high-energy displacement cascades in copper and zirconium // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2006. V. 242. P. 68–70.
76. Воскобойников Р.Е. Радиационные дефекты в алюминии. Моделирование первичных повреждений в объеме материала // ФММ. 2019. Т. 120. № 1. С. 3–10.
77. Воскобойников Р.Е. Моделирование первичных радиационных повреждений в никеле // ФММ. 2020. Т. 121. № 1. С. 18–24.
78. Воскобойников Р.Е. МД моделирование каскадов столкновений в α -Ti. Часть 1. Число дефектов, вре-

- мя релаксации и морфология каскадной области смещений // ФММ. 2023. Т. 124. № 8. С. 671–678.
79. Voskoboinikov R. A contribution of $L1_0$ ordered crystal structure to the high radiation tolerance of γ -TiAl intermetallics // Instr. Meth. Phys. Res. B. 2019. V. 460. P. 92–97.
 80. Voskoboinikov R. An insight into radiation resistance of $D0_{19}$ Ti_3Al intermetallics // J. Nucl. Mater. 2019. V. 519. P. 239–246.
 81. Voskoboinikov R. MD simulations of primary damage formation in $L1_2$ Ni_3Al intermetallics // J. Nucl. Mater. 2019. V. 522. P. 123–135.
 82. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. Clarendon, Oxford. 1987. 408 p.
 83. Lindemann P. Über die Berechnung molekularer Eigenfrequenzen // Phys. Zeitschrift. 1910. V. 11. P. 609–612.
 84. Nordlund K., Averbach R.S. Point defect movement and annealing in collision cascades // Phys. Review B. 1997. V. 56. P. 2421–2431.
 85. Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J. Computer simulation of primary damage creation in displacement cascades in copper. I. Defect creation and cluster statistics // J. Nucl. Mater. 2008. V. 377. P. 385–395.

EVALUATION OF THE THRESHOLD DISPLACEMENT ENERGY IN Fe–Cr FERRITIC-MARTENSITIC STEELS

R. E. Voskoboinikov^{1,2,*}

¹National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, 115409 Russia

²National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182 Russia

*e-mail: roman.voskoboynikov@gmail.com

Molecular dynamics (MD) simulations are applied to study primary damage formation in a Fe–10 at.% Cr binary model alloy. 14784 events of radiation defect formation are initiated by either Fe or Cr primary knocked-out atoms (PKAs) with PKA energies $100 \text{ eV} \leq E_{PKA} \leq 5 \text{ keV}$ introduced along twenty-two non-equivalent crystallographic directions. The generated sample is used to calculate the average threshold displacement energies. It is shown that in the considered material the average threshold displacement energy of Fe and Cr atoms is the same and equals $\langle E_d \rangle = 24.5 \pm 0.6 \text{ eV}$. It is also established that the dependence of E_d on E_{PKA} splits into two linear fragments determined by the governing defect formation mechanism. The formation of isolated point defects at low PKA energies $E_{PKA} \leq E_{cc}$, where $E_{cc} \approx 0.84 \text{ keV}$, is replaced by defect formation in collision cascades initiated by PKAs with energy $E_{PKA} \geq E_{cc}$. Using MD simulation results, we modified the cascade function in the Kinchin–Pease model to take into account the dependence of the threshold displacement energy on the PKA energy.

Keywords: molecular dynamics, primary damage formation, ferritic-martensitic steels, threshold displacement energy, Kinchin–Pease model, NRT standard