

МД-МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ СТОЛКНОВЕНИЙ В α -Ti. СТАТИСТИКА И ЗАКОНОМЕРНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

© 2023 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 27.03.2023 г.

После доработки 11.06.2023 г.

Принята к публикации 01.07.2023 г.

Проанализированы результаты моделирования первичного дефектообразования в каскадах столкновений в α -титане в широком диапазоне энергий первично выбитых атомов (ПВА) $5 \leq E_{PKA} \leq 25$ кэВ и температур облучения $100 \leq T \leq 900$ К. Определены доли вакансий ϵ_v и междоузельных атомов ϵ_i в кластерах точечных дефектов, образованных в индивидуальных каскадах, и их средние значения $\langle \epsilon_v \rangle$ и $\langle \epsilon_i \rangle$, средние размеры вакансионных $\langle N_{vac} \rangle$ и междоузельных $\langle N_{SIA} \rangle$ кластеров и среднее число вакансионных $\langle Y_{vac} \rangle$ и междоузельных $\langle Y_{SIA} \rangle$ кластеров на каскад. Предложены физические механизмы, определяющие зависимость $\langle \epsilon_v \rangle$, $\langle \epsilon_i \rangle$, $\langle N_{vac} \rangle$, $\langle N_{SIA} \rangle$, $\langle Y_{vac} \rangle$ и $\langle Y_{SIA} \rangle$ от параметров (E_{PKA}, T) .

Ключевые слова: α -титан, облучение, каскады столкновений, первичные повреждения, пары Френкеля, кластеры точечных дефектов, одномерная диффузия, молекулярная динамика

DOI: 10.31857/S001532302360048X, EDN: SXIYMG

ВВЕДЕНИЕ

При облучении материалов энергия, переданная от налетающих частиц первично выбитым атомам (ПВА) мишени в результате упругого рассеяния, практически полностью конвертируется в тепло. Если принять энергию образования пары “вакансия + междоузельный атом” в α -Ti, равной ≈ 4 эВ [1], то, например, на создание радиационных дефектов в 25 кэВ каскаде столкновений при температуре облучения $T = 100$ К в среднем требуется менее 2% энергии ПВА [2]. Несмотря на пренебрежимо малый вклад радиационного дефектообразования в диссипацию энергии ПВА, именно формирование и накопление точечных дефектов и их кластеров определяет эволюцию структурно-фазового состояния облучаемых материалов и изменение их эксплуатационных свойств.

Результаты моделирования каскадов смещений в α -титане методом молекулярной динамики (МД) представлены в первой части статьи [2]. Моделирование проведено с применением программного обеспечения собственной разработки, которое ранее использовалось для моделирования первичных повреждений в меди [3], никеле [4], α -цирконии [5], алюминии [6] и интерметаллидах γ -TiAl [7], α_2 -Ti₃Al [8] и γ -Ni₃Al [9].

МД-моделирование выполнено при температурах облучения α -Ti $T = 100, 300, 600$ и 900 К и энергиях ПВА $E_{PKA} = 5, 10, 15, 20$ и 25 кэВ. Для каждой пары параметров (E_{PKA}, T) сгенерирована репрезентативная выборка из 24 каскадов, в которых ПВА вводились в разные моменты времени, в разных местах моделируемого кристалла вдоль кристаллографических направлений типа $\langle 12\bar{3}2 \rangle$, имитируя случайное временное и изотропное пространственное распределение. Идентификацию и визуализацию дефектов кристаллической структуры выполнили методами ячеек Вигнера–Зейтца [10], эквивалентных сфер Линдемманна [11] и кластерным анализом [3]. 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.

Типичное распределение точечных дефектов и их кластеров, оставшихся после релаксации 25 кэВ каскада столкновений при $T = 600$ К показано на рис. 1. При повышенных температурах для каскадной области смещений в α -Ti характерно центрально-симметричное пространственное распределение дефектов с пересыщенным вакансия-

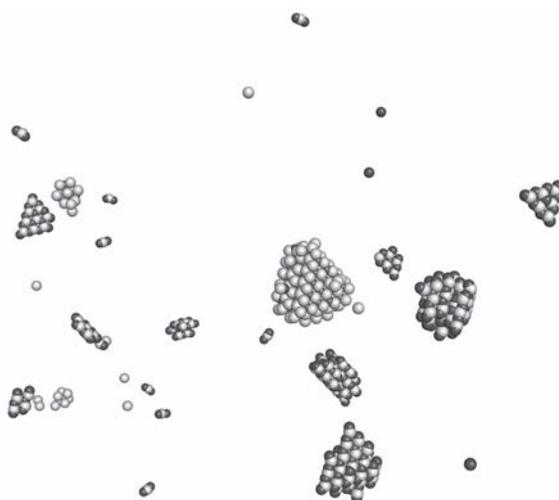


Рис. 1. Точечные дефекты и их кластеры, образованные в 25 кэВ каскаде столкновений в α -Ti при $T = 600$ К. Здесь и далее на рис. 6 и 7 вакансии и смещенные атомы показаны соответственно белым и темно-серым цветом.

ми и вакансионными кластерами ядром и междуузельными атомами и их кластерами, расположенными на периферии.

Кластеры дефектов выступают в роли стопоров для движения дислокаций [12] и вносят основной вклад в радиационное упрочнение, охрупчивание, формирование полос скольжения и локализацию пластической деформации материалов, подвергаемых облучению быстрыми частицами [13]. С другой стороны, точечные дефекты, объединенные в кластеры, теряют мобильность и исключаются из процессов диффузионного перераспределения легирующих компонентов в облучаемых материалах.

Доля свободно мигрирующих дефектов в моделях скоростей реакций, описывающих радиационно-индуцированные сегрегации и структурно-фазовые превращения под облучением, задается факторами предпочтения при зарождении [13]. Кроме того, кластеры дефектов выступают в роли стоков для точечных дефектов и ловушек для примесных атомов, а значит можно ожидать, что генерация кластеров точечных дефектов в каскадах столкновений будет оказывать заметное влияние на эволюцию многокомпонентного твердого раствора вакансий, междуузельных атомов и атомов примесей. Таким образом, для корректного анализа радиационных эффектов в α -Ti, облучаемом быстрыми частицами, наравне с подсчетом числа пар Френкеля N_{FP} , выполненном в первой части статьи [2], оказывается принципиально важным определение доли точечных дефектов в кластерах, размера кластеров и числа кластеров на каскад в зависимости от энергии ПВА и температуры облучения.

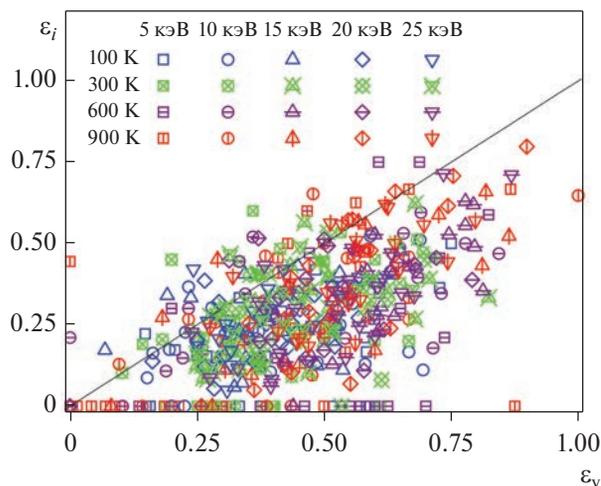


Рис. 2. Соотношение доли вакансий ϵ_v в вакансионных кластерах и доли междуузельных атомов ϵ_i в кластерах междуузельных атомов, образованных в каскадах столкновений в α -титане. Каждый символ отражает значения ϵ_i и ϵ_v в индивидуальных каскадах столкновений.

1. ДОЛЯ ВАКАНСИЙ И МЕЖДОУЗЛИЙ В КЛАСТЕРАХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

На рис. 2 показано соотношение доли вакансий $\epsilon_v = \sum N_{vac} / N_{FP}$ в вакансионных кластерах размером $N_{vac} \geq 3$ и доли междуузлий $\epsilon_i = \sum N_{SIA} / N_{FP}$ в кластерах междуузельных атомов размером $N_{SIA} \geq 4$, оставшихся после релаксации каскадов столкновений в α -титане. В большинстве каскадов выполняется соотношение $\epsilon_v \geq \epsilon_i$, т.е., в отличие от других плотноупакованных чистых металлов, см., например, [3–6], в каскадах столкновений в α -Ti доля вакансий в вакансионных кластерах превышает долю междуузлий в кластерах междуузельных атомов.

В феноменологических моделях, описывающих эволюцию микроструктуры облучаемых материалов, предполагается, что вакансионные кластеры являются нейтральными стоками для точечных дефектов при низких температурах и источниками вакансий при высоких температурах, в то время как кластеры междуузельных атомов являются стоками для точечных дефектов во всем интервале температур [13]. Это предположение выполняется в металлах с ГЦК-структурой, что косвенно подтверждается результатами моделирования каскадов столкновений в этих материалах. Так как вакансионные кластеры нестабильны при высоких температурах, вероятность их образования в каскадах столкновений при таких условиях облучения будет ниже. Это означает, что с ростом температуры облучения можно ожидать $\epsilon_v \rightarrow 0$, что действительно наблюдается, в частности, в меди [3] и никеле [4]. Однако, на-

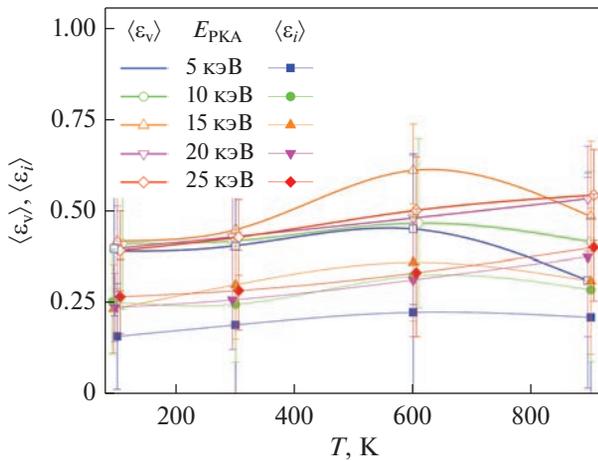


Рис. 3. Средние значения доли вакансий ϵ_v в вакансионных кластерах и доли междоузлий ϵ_i в кластерах междоузельных атомов, образованных в каскадах столкновений в α -титане, в зависимости от (E_{PKA}, T) . Планками показаны среднеквадратичные отклонения средних значений $\langle \epsilon_v \rangle$ и $\langle \epsilon_i \rangle$.

пример, в облучаемом α -Zr, ϵ_v не зависит от T [5]. Температурная зависимость ϵ_v и ϵ_i в α -Ti неочевидна.

На рис. 3 приведены средние значения доли вакансий $\langle \epsilon_v \rangle$ в вакансионных кластерах и доли междоузлий $\langle \epsilon_i \rangle$ в кластерах междоузельных атомов, образованных в каскадах столкновений в α -Ti, в зависимости от параметров (E_{PKA}, T) . Соотношение $\langle \epsilon_v \rangle > \langle \epsilon_i \rangle$ выполняется при любых (E_{PKA}, T) .

Доля вакансий и междоузельных атомов в кластерах точечных дефектов зависит как от суммарного числа дефектов N_{FP} , так и от среднего числа кластеров, приходящихся на один каскад, и среднего размера вакансионных и междоузельных кластеров, образовавшихся в каскадах столкновений.

2. СРЕДНИЙ РАЗМЕР ВАКАНСИОННЫХ И МЕЖДОУЗЕЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ В КАСКАДАХ СТОЛКНОВЕНИЙ В α -Ti

На рис. 4 приведена зависимость среднего размера вакансионных кластеров $\langle N_{vac} \rangle$, образованных в каскадах в α -Ti, от энергии ПВА и температуры облучения. Зависимость $\langle N_{vac}(E_{PKA}, T) \rangle$ во всем диапазоне значений (E_{PKA}, T) повторяет зависимость $\langle \epsilon_v(E_{PKA}, T) \rangle$, см. рис. 3.

Зарождение кластеров точечных дефектов определяется пересыщением и диффузией мономеров [14]. При низких температурах подвижность вакансий невелика, средний размер вакансионных кластеров мал вне зависимости от числа

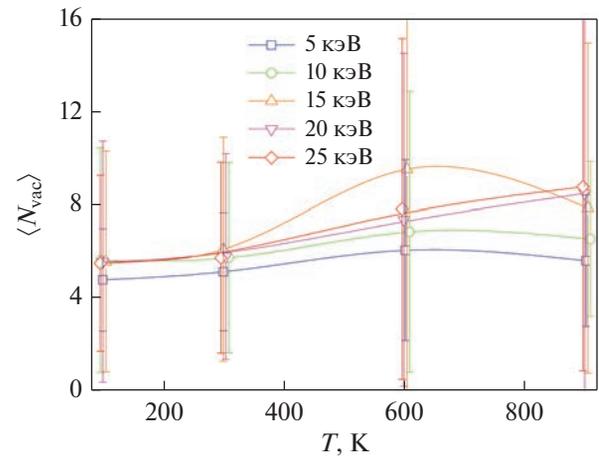


Рис. 4. Средний размер вакансионных кластеров $\langle N_{vac} \rangle$, образованных в каскадах столкновений в α -титане, в зависимости от (E_{PKA}, T) . Планками показаны среднеквадратичные отклонения $\langle N_{vac} \rangle$.

создаваемых дефектов N_{FP} и не зависит от E_{PKA} , т.к. $N_{FP} \propto E_{PKA}$.

С ростом температуры увеличивается мобильность вакансий и время релаксации каскадной области смещений, см. [2]. При энергиях $E_{PKA} \geq 20$ кэВ это ведет к монотонному увеличению среднего размера вакансионных кластеров $\langle N_{vac} \rangle$ во всем интервале рассматриваемых температур. Низкоэнергетичные каскады, инициированные ПВА с энергиями $E_{PKA} \leq 15$ кэВ, имеют меньшие размеры каскадной области смещений, и те же самые факторы наравне с кластеризацией облегчают рекомбинацию дефектов. Соответственно уменьшение числа вакансий ведет к уменьшению $\langle N_{vac} \rangle$. На рекомбинацию дефектов в низкоэнергетичных каскадах в α -титане при высоких температурах также указывает синхронное снижение среднего размера междоузельных кластеров $\langle N_{SIA} \rangle$, которое наблюдается при тех же значениях (E_{PKA}, T) , см. рис. 5.

Идеальные условия для формирования вакансионных кластеров реализуются в каскадах столкновений, инициированных ПВА с энергиями $E_{PKA} \cong 15$ кэВ, в α -титане при температуре облучения $T \cong 600$ К. При таких значениях параметров (E_{PKA}, T) мобильность вакансий и времени релаксации каскадной области смещений оказывается достаточно для формирования вакансионных кластеров, но недостаточно для преодоления пространственного разделения вакансий, расположенных в центре каскада, и междоузельных атомов на периферии и их рекомбинации.

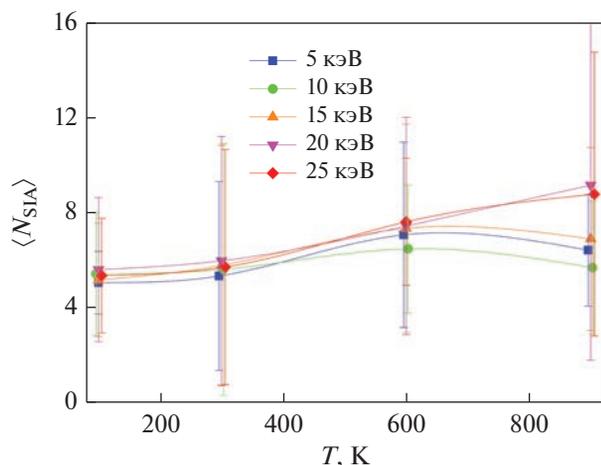


Рис. 5. Средний размер междоузельных кластеров N_{SIA} , образованных в каскадах столкновений в α -Ti, в зависимости от (E_{PKA}, T) . Планками показаны средние квадратичные отклонения N_{SIA} .

Как $\langle N_{vac} \rangle$ на рис. 4 повторяет $\langle \varepsilon_v \rangle$, так и зависимость $\langle N_{SIA} \rangle$ от (E_{PKA}, T) на рис. 5 повторяет $\langle \varepsilon_i \rangle$. Исключение составляет величина $\langle \varepsilon_i \rangle$ в 5 кэВ каскадах, см. рис. 3. Отличия связаны с методом расчета. Если $\langle \varepsilon_i \rangle$ получается усреднением по всем каскадам с одинаковыми значениями (E_{PKA}, T) , включая каскады с $\varepsilon_i = 0$, которых особенно много при $E_{PKA} = 5$ кэВ, см. рис. 2, то при расчете $\langle N_{SIA} \rangle$ учитываются только кластеры размером $N_{SIA} \geq 4$.

Мобильность междоузлий и их кластеров велика даже при низких температурах [15]. Температурная зависимость $\langle N_{SIA} \rangle$ в α -Ti определяется не активацией диффузионной подвижности дефектов, а анизотропией их диффузии и взаимодействием друг с другом. При температурах 100 и 300 К перемещение междоузельных атомов и их кластеров ограничено одним из трех плотноупакованных кристаллографических направлений $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, см. [16]. При повышении температуры под действием термических флуктуаций междоузельные кластеры в базисной плоскости могут менять направление движения с одного направления $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ на другое направление $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ [17], и их диффузия из одномерной превращается в двумерную. Двумерная диффузия повышает вероятность объединения междоузельных дефектов в один кластер, увеличивая $\langle N_{SIA} \rangle$ и снижая среднее число междоузельных кластеров на каскад $\langle Y_{SIA} \rangle$, см. следующий раздел.

Особняком стоит формирование кластеров дефектов в каскадах столкновений в α -титане при температуре $T = 900$ К. Повышение температуры

в высокоэнергетических каскадах, инициированных ПВА с энергиями $E_{PKA} \geq 20$ кэВ, ведет к частичному плавлению каскадной области смещений. В процессе неравномерного затвердевания единая расплавленная область распадается на два и более локализованных расплавленных фрагмента, см. рис. 6а и [18], плотность которых может отличаться от исходной плотности облучаемого материала. Восстановленная кристаллическая структура материала, разделяющая расплавленные области, препятствует быстрому массообмену между ними и пространственному выравниванию плотности материала. В результате затвердевания расплавленных областей с плотностью ниже исходной плотности материала формируются вакансионные кластеры. На месте расплавленных областей с плотностью выше исходной плотности материала образуются междоузельные кластеры, см. рис. 6б и [18]. Таким образом, средние значения $\langle N_{vac} \rangle$ и $\langle N_{SIA} \rangle$ в высокоэнергетических каскадах в α -титане при $T = 900$ К оказываются выше, чем при меньших температурах облучения, см. рис. 4 и 5, когда плавления каскадной области смещений не наблюдается.

Энерговыделения в каскадах, инициированных ПВА с энергиями $10 \leq E_{PKA} \leq 15$ кэВ в α -титане, при высоких температурах облучения также оказывается достаточно для локального нагрева и частичного плавления каскадной области смещений, см. рис. 7 и [19]. Однако, в отличие от высокоэнергетических каскадов, размеры расплавленной области в данном случае оказываются относительно невелики, и она затвердевает как единое целое вплоть до полной кристаллизации, см. рис. 7б. Даже если в различных областях расплавленного объема на начальном этапе и возникают какие-то отклонения от исходной плотности материала, быстрому выравниванию плотности в процессе затвердевания ничто не препятствует. Формирование кластеров точечных дефектов в таких случаях не происходит, см. рис. 7в и [19], а $\langle N_{SIA} \rangle$ и $\langle N_{vac} \rangle$ оказываются ниже средних значений, достигаемых в каскадах, инициируемых ПВА с идентичными энергиями в α -титане, но при меньших температурах облучения, см. рис. 4 и 5.

3. СРЕДНЕЕ ЧИСЛО КЛАСТЕРОВ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ, ОБРАЗОВАННЫХ В КАСКАДАХ СТОЛКНОВЕНИЙ В α -Ti

На рис. 8 показано среднее число вакансионных кластеров $\langle Y_{vac} \rangle$, образующихся в одном каскаде столкновений в α -титане, в зависимости от энергии ПВА и температуры облучения. Факторы, оказывающие влияние на значение $\langle Y_{vac} \rangle$, становятся понятны, если дополнить график $\langle Y_{vac} (E_{PKA}, T) \rangle$ зависимостью $\langle N_{FP} (E_{PKA}, T) \rangle$, см. рис. 8. Таким обра-

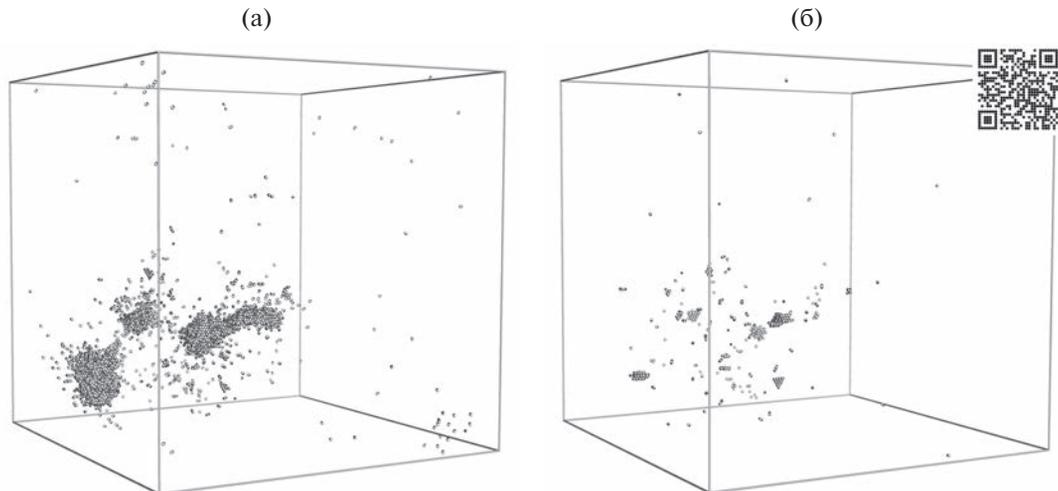


Рис. 6. (а) Образование нескольких локализованных расплавленных фрагментов в процессе релаксации каскадной области смещений 25 кэВ каскада столкновений в α -Ti при температуре $T = 900$ К. Вытянутая расплавленная область позднее также распадается на два фрагмента, см. [18]. (б) Междоузельные и вакансионные кластеры образуются на месте релаксации расплавленных областей. QR-код содержит ссылку на [18].

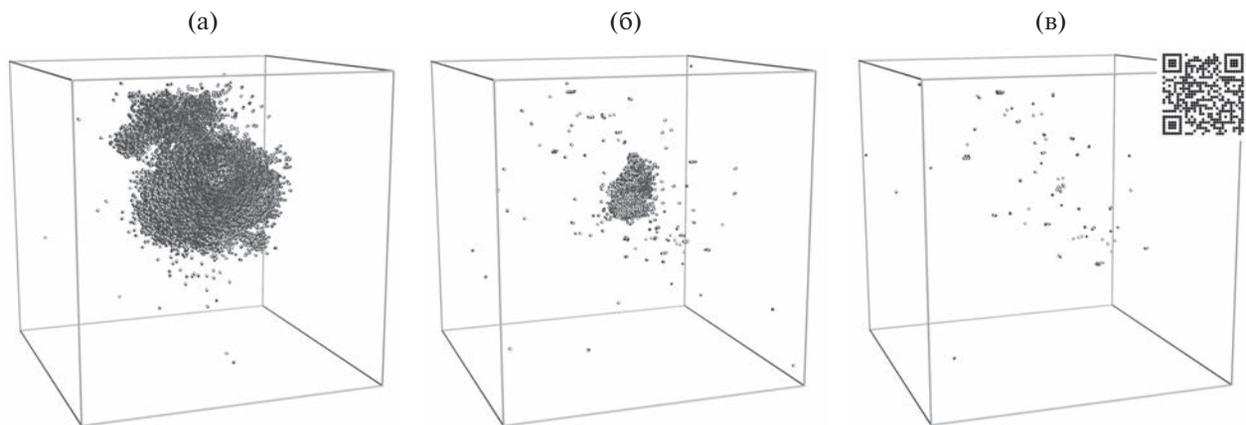


Рис. 7. (а) Каскадная область смещений 15 кэВ каскада столкновений в α -Ti при температуре $T = 900$ К [19]. (б) Энерговыделение в каскадной области смещений ведет к образованию одного зародыша жидкой фазы, который, в отличие от случая, показанного на рис. 6а, затвердевает до полной кристаллизации как единое целое. (в) Если в каскадной области смещений образуется только одна расплавленная область, кластер(ы) точечных дефектов на ее месте не формируются. QR-код содержит ссылку на [19].

зом, становится очевидно, что число вакансионных кластеров на каскад в α -титане определяется числом создаваемых пар Френкеля N_{FP} во всем интервале рассматриваемых температур облучения T и энергий ПВА E_{PKA} : $\langle Y_{vac} \rangle \propto \langle N_{FP} \rangle$.

На рис. 9 представлена зависимость среднего числа междоузельных кластеров $\langle Y_{SIA} \rangle$, образующихся в каскадах столкновений в α -титане, как функция энергии ПВА и температуры облучения (E_{PKA}, T) . В зависимости от температуры облучаемого материала можно предложить три различных сценария формирования междоузельных

кластеров в каскадах столкновений в α -Ti. При температурах $T = 100$ и 300 К среднее значение $\langle Y_{SIA} \rangle$ увеличивается линейно с ростом E_{PKA} . Величина $\langle N_{SIA} \rangle$ одинакова для всех рассматриваемых энергий ПВА, см рис. 5, и число создаваемых кластеров при низких температурах оказывается просто пропорционально числу генерируемых дефектов N_{FP} .

Выпадение из линейной зависимости $\langle Y_{SIA}(E_{PKA}) \rangle$ точки $E_{PKA} = 20$ кэВ на рис. 9 предположительно связано с тем, что при увеличении E_{PKA} средняя величина $\langle Y_{SIA} \rangle$ растет быстрее $\langle N_{FP} \rangle$.

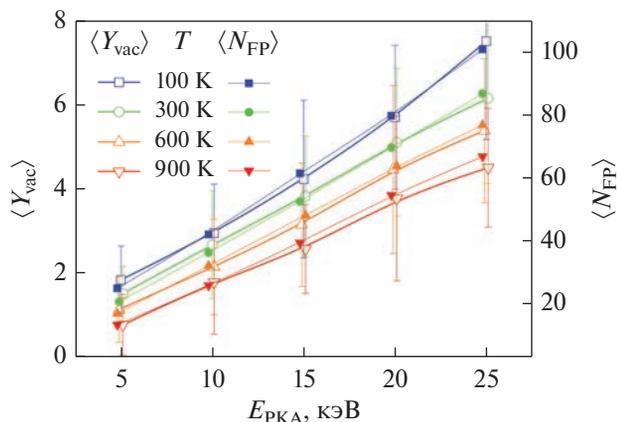


Рис. 8. Среднее число вакансионных кластеров $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$, образующихся в каскадах столкновений в α -титане, в зависимости от (E_{PKA}, T) . Планками показаны среднеквадратичные отклонения $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$. Здесь же для наглядности приведена зависимость $\langle N_{\text{FP}}(E_{\text{PKA}}, T)$.

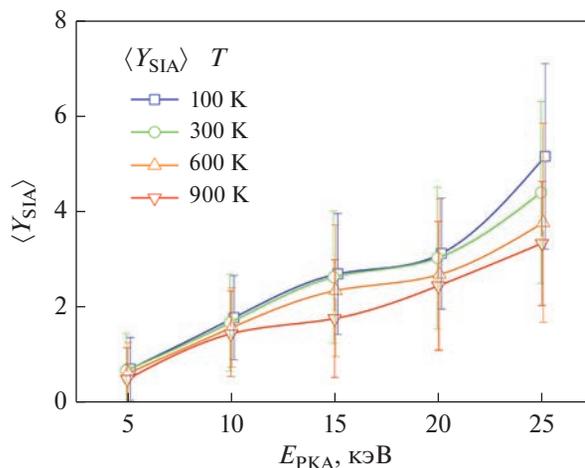


Рис. 9. Среднее число междоузельных кластеров $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$, образующихся в каскадах столкновений в α -титане, в зависимости от (E_{PKA}, T) . Планками показаны среднеквадратичные отклонения $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$.

При неизменных значениях ϵ_i и $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$, см. рис. 3 и 5, такой дисбаланс в какой-то момент неизбежно приведет к дефициту пар Френкеля $\langle N_{\text{FP}} \rangle$ и невозможности сохранения прежнего роста средних значений $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ с увеличением E_{PKA} , что и наблюдается при низких температурах облучения α -титана ПВА с энергиями $E_{\text{PKA}} = 20$ кэВ, см. рис. 9.

Следствием увеличения температуры облучения титана до $T = 600$ К является смена механизма диффузии генерируемых междоузельных дефектов, расположенных в базисной плоскости, см. [15–19]. Изменение одномерной диффузии междоузельных атомов, ди-, три- междоузлий и т.п. на двумерную ведет к повышению вероятности их слияния и образования междоузельных кластеров больших размеров. Увеличение $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ в результате такого взаимодействия, см. рис. 5, сопровождается уменьшением $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ по сравнению с соответствующими значениями, достигаемыми при низких температурах.

Дальнейшее увеличение температуры облучения α -титана до $T = 900$ К может приводить к частичному плавлению каскадной области смещений. Энерговыведения в 5 кэВ каскадах столкновений оказывается недостаточно для локального повышения температуры выше точки плавления, и зависимость Y_{SIA} от энергии ПВА в таких случаях повторяет линейную функцию $Y_{\text{SIA}} \propto E_{\text{PKA}}$, наблюдаемую на рис. 9 при других рассмотренных температурах облучения.

Диссипация энергии ПВА $E_{\text{PKA}} \geq 10$ кэВ ведет к локальному нагреву каскадной области смещений выше температуры плавления. При относи-

тельно невысоких энергиях ПВА $10 \text{ кэВ} \leq E_{\text{PKA}} \leq 15$ кэВ размеры образующегося зародыша жидкой фазы невелики. В процессе релаксации расплавленный материал затвердевает как единое целое, и на его месте не формируются кластеры точечных дефектов, см. рис. 7. Таким образом, увеличение $\langle N_{\text{FP}} \rangle$, вызванное ростом энергии ПВА (т.к. $\langle N_{\text{FP}} \rangle \propto E_{\text{PKA}}$, см. рис. 8 или [2]) не сопровождается увеличением средних значений $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ на рис. 9.

В высокоэнергетичных каскадах, инициированных $E_{\text{PKA}} \geq 20$ кэВ в α -титане при температуре $T = 900$ К, расплавленная область каскада имеет большие размеры и нерегулярную форму. Затвердевание такого зародыша жидкой фазы происходит неравномерно, и в процессе кристаллизации расплавленная область распадается на несколько фрагментов, см. рис. 6, плотность которых отличается от исходной плотности материала. Как было показано в разделе 2, результатом такой “закалки из расплава” изолированных частей изначально единого зародыша жидкой фазы является образование кластеров точечных дефектов и увеличение как среднего размера $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$, так и среднего числа кластеров на каскад $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$, см. рис. 9.

ВЫВОДЫ

Результаты МД-моделирования первичного дефектообразования в каскадах столкновений в α -титане [2] подвергнуты статистической обработке и анализу возможных физических механизмов, определяющих закономерности формирования кластеров точечных дефектов в широком

диапазоне энергий ПВА $5 \leq E_{\text{PKA}} \leq 25$ кэВ и температур облучения $100 \leq T \leq 900$ К. Определены доли вакансий ϵ_v и междоузельных атомов ϵ_i в кластерах точечных дефектов, образованных в индивидуальных каскадах, средние размеры вакансионных $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ и междоузельных $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ кластеров и среднее число вакансионных $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$ и междоузельных $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ кластеров на каскад.

Значения ϵ_i и ϵ_v усреднены по всем каскадам в серии с одинаковыми значениями параметров (E_{PKA}, T) . Показано, что при любых (E_{PKA}, T) для всех средних значений выполняется соотношение $\langle \epsilon_v \rangle > \langle \epsilon_i \rangle$.

Определена зависимость среднего размера вакансионных $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ и междоузельных $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ кластеров, образованных в каскадах столкновений в α -Ti, от энергии ПВА E_{PKA} и температуры облучения T . Установлено, что $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ повторяет зависимость $\langle \epsilon_v \rangle$ от (E_{PKA}, T) , а $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ повторяет зависимость ϵ_i от (E_{PKA}, T) . При низких температурах $T = 100$ и 300 К $\langle N_{\text{vac}} \rangle \approx \langle N_{\text{SIA}} \rangle$ и не зависит от энергии ПВА. При температуре $T = 600$ К средние значения $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ и $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ определяются пространственным разделением и распределением точечных дефектов в каскадной области смещений и конкурирующими процессами кластеризации и рекомбинации вакансий и междоузельных атомов.

При температуре облучения $T = 900$ К средние значения $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ и $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ критически зависят от энергии ПВА. При относительно небольших энергиях ПВА $E_{\text{PKA}} \leq 15$ кэВ в каскадах столкновений в α -титане при высоких температурах доминирует рекомбинация точечных дефектов. Если частичное плавление каскадной области смещений и имеет место, размеры расплавленной области невелики, а ее затвердевание не сопровождается образованием кластеров точечных дефектов. Энерговыведение в каскадах, инициированных ПВА с $E_{\text{PKA}} \geq 20$ кэВ, ведет к формированию расплавленной области, которая в процессе затвердевания распадается на несколько фрагментов, плотность которых отличается от исходной плотности α -титана. Отсутствие массообмена между фрагментами препятствует выравниванию плотности и ведет к формированию кластеров точечных дефектов и синхронному увеличению средних значений $\langle N_{\text{vac}} \rangle$ и $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$.

Сравнение зависимости среднего числа вакансионных кластеров $\langle Y_{\text{vac}} \rangle$, образующихся в одном каскаде столкновений, и зависимости среднего числа пар Френкеля $\langle N_{\text{FP}} \rangle$ от значений параметров (E_{PKA}, T) однозначно указывает на прямую

корреляцию $\langle Y_{\text{vac}} \rangle \propto \langle N_{\text{FP}} \rangle$ при всех энергиях ПВА и температурах облучения α -титана, рассмотренных в этом исследовании.

Среднее число междоузельных кластеров на каскад $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ определяется температурой облучения α -титана. При относительно низких температурах $T = 100$ и 300 К выполняется соотношение $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle \propto \langle N_{\text{FP}} \rangle$ для всех E_{PKA} за исключением $E_{\text{PKA}} = 20$ кэВ, когда наблюдается стагнация увеличения $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ с повышением E_{PKA} , вызванная опережающим ростом $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ по сравнению с $\langle N_{\text{FP}} \rangle$. При температуре облучения $T = 600$ К $\langle Y_{\text{SIA}}(E_{\text{PKA}}) \rangle$ повторяет зависимость $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ при низких температурах, однако смена одномерной диффузии междоузельных дефектов в базисной плоскости на двумерную увеличивает $\langle N_{\text{SIA}} \rangle$ и одновременно снижает $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ по сравнению с их значениями, полученными при температурах $T \leq 300$ К.

Частичное плавление каскадной области смещений при температуре облучения α -титана $T = 900$ К увеличивает $\langle Y_{\text{SIA}} \rangle$ только в высокоэнергетических каскадах. Размеры расплавленной области в каскадах, инициированных ПВА с $E_{\text{PKA}} \leq 15$ кэВ, невелики, и жидкая фаза кристаллизуется как единое целое вплоть до полного затвердевания без образования кластеров. Расплавленная область в каскадах, инициированных ПВА с $E_{\text{PKA}} \leq 20$ кэВ, в процессе кристаллизации распадается на несколько фрагментов с разной плотностью. На месте фрагментов с низкой плотностью после кристаллизации образуются вакансионные кластеры, а на месте фрагментов с высокой плотностью – междоузельные кластеры.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, субсидия № 075-11-2021-085, с использованием ресурсов 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/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Raji A.T., Scandolo S., Mazzarello R., Nsengiyumva S., Haerting M., Britton D.T.* Ab initio pseudopotential study of vacancies and self-interstitials in hcp titanium // *Philos. Mag.* 2009. V. 89. P. 1629–1645.
2. *Воскобойников Р.Е.* МД Моделирование каскадов столкновений в α -Ti. Число дефектов, время релаксации и морфология каскадной области смещений // *ФММ.* 2023. Т. 124. № 8. С. 671–678.
3. *Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J.* Computer simulation of primary damage creation in dis-

- placement cascades in copper. I. Defect creation and cluster statistics // *J. Nucl. Mater.* 2008. V. 377. P. 385–395.
4. *Voskoboinikov R.* Statistics of primary radiation defects in pure nickel // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 2020. V. 478. P. 201–204.
 5. *Voskoboinikov 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.
 6. *Воскобойников Р.Е.* Радиационные дефекты в алюминии. Моделирование первичных повреждений в объеме материала // *ФММ.* 2019. Т. 120. № 1. С. 3–10.
 7. *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.
 8. *Voskoboinikov R.* An insight into radiation resistance of $D0_{19}$ Ti₃Al intermetallics // *J. Nucl. Mater.* 2019. V. 519. P. 239–246.
 9. *Voskoboinikov R.* MD simulations of primary damage formation in $L1_2$ Ni₃Al intermetallics // *J. Nucl. Mater.* 2019. V. 522. P. 123–135.
 10. *Nordlund K., Averback R.S.* Point defect movement and annealing in collision cascades // *Phys. Rev. B.* 1997. V. 56. P. 2421–2431.
 11. *Lindemann P.* Über die Berechnung molekularer Eigenfrequenzen // *Physikalische Zeitschrift.* 1910. V. 11. P. 609–612.
 12. *Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J.* Interaction of $1/311\bar{2}0$ (0001) edge dislocation with point defect clusters created in displacement cascades in α -zirconium // *Mater. Sci. Eng. A.* 2005. V. 400–401. P. 49–53.
 13. *Was G.S.* Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys 2nd Ed. Elsevier, Amsterdam, 2017. 1002 p.
 14. *Gardiner C.* Stochastic Methods. A Handbook for the Natural and Social Sciences 4th Ed. Springer Berlin, Heidelberg, 2009. 447 p.
 15. *de Diego N., Osetsky Y.N., Bacon D.J.* Mobility of interstitial clusters in alpha-zirconium // *Metall Mater Trans A.* 2002. V. 33. P. 783–789.
 16. Пример одномерной диффузии ди-, три- и т.п. междоузлий, расположенных в базисной плоскости, вдоль плотноупакованных кристаллографических направлений $11\bar{2}0$ в α -Ti при низких температурах. <https://youtu.be/RgldmdibdHs>.
 17. Изменение диффузионной подвижности ди-, три- и т.п. междоузлий, расположенных в базисной плоскости, с одного кристаллографического направления $11\bar{2}0$ на другое кристаллографическое направление $11\bar{2}0$ в α -Ti при температурах $T \geq 600$ К. <https://youtu.be/eNluPvqktc4>.
 18. Релаксация каскада столкновений, инициированного ПВА с энергией $E_{\text{ПВА}} = 25$ кэВ в α -титане при температуре $T = 900$ К. <https://youtu.be/roMU-RTats4>.
 19. Релаксация каскада смещений, инициированного ПВА с энергией $E_{\text{ПВА}} = 15$ кэВ в α -титане при температуре $T = 900$ К. <https://youtu.be/JkJKSaPwcfY>.