

## СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 539.12.043

### РАСЧЕТ ПОРОГОВЫХ ЭНЕРГИЙ СМЕЩЕНИЯ В КОРРОЗИОННОСТОЙКИХ АУСТЕНИТНЫХ СТАЛЯХ

© 2024 г. Р. Е. Воскобойников<sup>a, b, \*</sup>

<sup>a</sup>Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Каширское ш., 31, Москва, 115409 Россия

<sup>b</sup>Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, пл. Курчатова, 1, Москва, 123182 Россия

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

Поступила в редакцию 28.03.2024 г.

После доработки 22.05.2024 г.

Принята к публикации 20.06.2024 г.

Методом молекулярной динамики (МД) смоделировано первичное дефектообразование в ГЦК-модельном сплаве на основе Fe–Cr–Ni, химический состав которого совпадает с концентрацией трех основных компонентов в коррозионностойких аустенитных сталях типа X18H10. Сгенерированная выборка, включающая в себя 12 960 событий образования радиационных дефектов, инициированных первично-выбитыми атомами (ПВА) Fe, Cr и Ni с энергиями  $100 \text{ эВ} \leq E_{\text{РКА}} \leq 5 \text{ кэВ}$  вдоль пятнадцати неэквивалентных кристаллографических направлений, использована для расчета средних пороговых энергий смещения. Показано, что в исследуемом материале средние пороговые энергии смещения атомов Fe, Cr и Ni совпадают и равны  $\langle E_d \rangle = 28 \pm 1 \text{ эВ}$ . Полученные данные МД-моделирования использованы для построения зависимости  $E_d$  от  $E_{\text{РКА}}$ , которая распадается на два линейных фрагмента, определяемых механизмом дефектообразования. Определили значение  $E_{\text{CC}} \approx 0.8 \text{ кэВ}$ , при котором образование изолированных точечных дефектов при низких энергиях ПВА  $E_{\text{РКА}} \leq E_{\text{CC}}$  сменяется дефектообразованием в каскадах столкновений, инициируемых ПВА с энергиями  $E_{\text{РКА}} \geq E_{\text{CC}}$ . На основании полученных результатов МД-моделирования модифицировали каскадную функцию в модели Кинчина–Пиза, чтобы учесть зависимость пороговых энергий смещения  $E_d$  от энергии  $E_{\text{РКА}}$ .

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, первичное дефектообразование, аустенитные стали типа X18H10, пороговая энергия смещения, модель Кинчина–Пиза, NRT-стандарт

DOI: 10.31857/S0015323024090051, EDN: KEYGOQ

#### ВВЕДЕНИЕ

Структурные элементы активных зон современных коммерческих ядерных энергетических установок поколений II, III и III+ за время эксплуатации аккумулируют дозу до  $\sim 10$  сна [1]. По разным оценкам, конструкционные материалы реакторов IV поколения на быстрых нейтронах и реакторов синтеза к концу расчетного срока службы могут накопить до 200 сна [2–4]. Так как уровень радиационных повреждений при облучении материалов в исследовательских реакторах на тепловых/ быстрых нейтронах, составляет  $\sim 3\text{--}5/15\text{--}20$  сна/год соответственно [1], экспериментальные программы тестирования существующих и разработки новых реакторных конструкционных материалов и покрытий с использованием только исследовательских реакторов потребовали бы чрезмерных временных и материальных затрат, в то время как при облу-

чении на специализированных ускорителях дозу  $\sim 10^2$  сна можно набрать менее чем за сутки.

Начиная со второй половины XX столетия, облучение пучками заряженных частиц интенсивно используется для проведения фундаментальных и прикладных исследований радиационных эффектов в твердых телах. В отличие от облучения нейтронами в ядерном реакторе, энергию налетающих частиц, температуру мишени, флюенс, скорость набора дозы и т.п. легко контролировать и изменять при облучении на ускорителе. Кроме того, при проведении пучковых экспериментов образцы не активируются в процессе облучения [1] и, следовательно, не требуют каких-то особенных мер предосторожности и специальных условий пробоподготовки и исследования микроструктуры и химического состава. Однако моделирование реакторного облучения пучками заряженных частиц является

эффективным инструментом при создании новых материалов и прогнозировании их свойств в операционных условиях активных зон ядерных энергетических установок только в тех случаях, когда проведено сопоставление и верификация закономерностей первичного дефектообразования, накопления радиационных дефектов и структурно-фазовых превращений при облучении нейтронами и быстрыми частицами на ускорителе.

Основным источником радиационных дефектов, возникающих в твердых телах при облучении быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии, являются каскады смещений. Небольшие характерные времена и линейные размеры каскадов смещений не позволяют наблюдать за первичным дефектообразованием в реальном времени экспериментальными методами. Наиболее подходящим способом исследования этого процесса является компьютерное моделирование методом молекулярной динамики (МД) [5].

Успешные исследования первичного дефектообразования методом МД проводятся на протяжении нескольких десятилетий [6]. За прошедшее 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, дислокациями, границами зерен, атомами примесей и т.д. [7]. Однако для решения большого класса материаловедческих задач детализация метода МД часто оказывается избыточной, линейные размеры и максимальная накопленная доза, напротив, недостаточными, а трудозатраты и вычислительные ресурсы, необходимые для проведения расчетов, чрезмерными.

В случаях, когда для планирования эксперимента на ускорителе или решения иных прикладных материаловедческих задач требуется только рассчитать тормозные способности, проективные пробеги, накопленную дозу, коэффициенты распыления, ионное перемешивание и т.п., оказывается достаточно приближений и функционала программного обеспечения типа SRIM [8–13].

Для проведения корректных расчетов при помощи SRIM необходимо задать адекватные параметры материала мишени, в число кото-

рых наравне с плотностью и химическим составом входят и пороговые энергии смещения  $E_d$ . Значения  $E_d$ , которые используются в SRIM по умолчанию, определены для однокомпонентных материалов и, вообще говоря, могут и не отражать реальных пороговых энергий смещения различных аллотропных модификаций одного и того же однокомпонентного материала (так, например, графит и алмаз имеют пороговые энергии смещения 30 и 40 эВ соответственно). Отличия пороговых энергий смещения, заданных в SRIM по умолчанию, от реальных пороговых энергий смещения в многокомпонентных твердых растворах могут оказаться еще более заметными. В частности, ниоткуда не следует, что пороговые энергии смещения в чистых  $\alpha$ -Fe, Cr и Ni будут совпадать с пороговыми энергиями смещения атомов Fe, Cr и Ni в аустенитных сталях и жаропрочных никелевых сплавах.

Целью проводимых исследований является расчет пороговых энергий смещения в коррозионноустойчивых аустенитных сталях типа X18H10 (аналог AISI 304). Выбор материала обусловлен широким использованием сталей этого класса для изготовления направляющих каналов, головок, хвостовиков, дистанционирующих решеток серийных тепловыделяющих сборок, элементов системы управления и защиты, выгородок и других внутрикорпусных устройств водо-водяных энергетических реакторов ВВЭР-440 и ВВЭР-1000 советского и российского производства.

## ФОРМУЛИРОВКА ЗАДАЧИ

При упругом рассеянии быстрых частиц на атомах мишени последним передается часть кинетической энергии налетающей частицы. Атомы облучаемого материала смещаются из своих равновесных положений в узлах кристаллической структуры, и если переданная им энергия превышает некоторое пороговое значение, в результате такого упругого рассеяния образуется одна или несколько устойчивых пар точечных дефектов вакансионного и междоузельного типа (пар Френкеля). В силу анизотропии кристаллической структуры, пороговые энергии, необходимые для образования пары Френкеля при смещении атомов мишени вдоль различных кристаллографических направлений, могут существенно отличаться. С другой стороны, за исключением специальных случаев облучения тонких монокристаллов узкоколлимированными пучками, кристаллическая структура поликристаллического материала ориентирована случайным образом по отношению к направле-

нию движения быстрых частиц, и число образующихся в результате облучения радиационных дефектов усредняется по всем кристаллографическим направлениям.

Для простого расчета каскадной функции, т.е. оценки числа пар Френкеля  $N_{FP}$ , образовавшихся в материале под действием облучения, широко используется NRT-стандарт [14]:

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

где  $E_{PKA} \geq 2E_d$  — это кинетическая энергия, переданная от быстрой частицы первично выбитому атому (ПВА) мишени в результате упругого рассеяния,  $E_d$  — соответствующая пороговая энергия смещения. Таким образом, переписав (1) в виде

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

можно решить обратную задачу и определить пороговую энергию смещения  $E_d(hkl)$  вдоль кристаллографического направления  $\langle hkl \rangle$ , если смоделировать образование  $N_{FP}$  пар Френкеля ПВА с энергией  $E_{PKA}(hkl)$  и начальным импульсом вдоль  $\langle hkl \rangle$ . В силу стохастической природы образования радиационных дефектов моделирование процесса первичного дефектообразования необходимо повторить несколько раз с одним и тем же набором параметров, иницируя ПВА в разных местах моделируемого кристалла в разные моменты времени. Минимальный необходимый размер репрезентативной статистической выборки определили *a posteriori* при помощи простой процедуры, описанной в [15].

Чтобы определить пороговую энергию смещения для оценки накопленных повреждений и расчетов с использованием SRIM, пороговые энергии смещений вдоль конкретных кристаллографических направлений необходимо усреднить (подробнее об использованном методе усреднения см. [16]):

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

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

Принимая во внимание многокомпонентный химический состав семейства рассматриваемых аустенитных хромоникелевых сталей X18H10, для корректного расчета уровня накапливаемых

радиационных повреждений пороговые энергии смещения необходимо определить для всех основных компонентов, т.е. для атомов Fe, Cr и Ni.

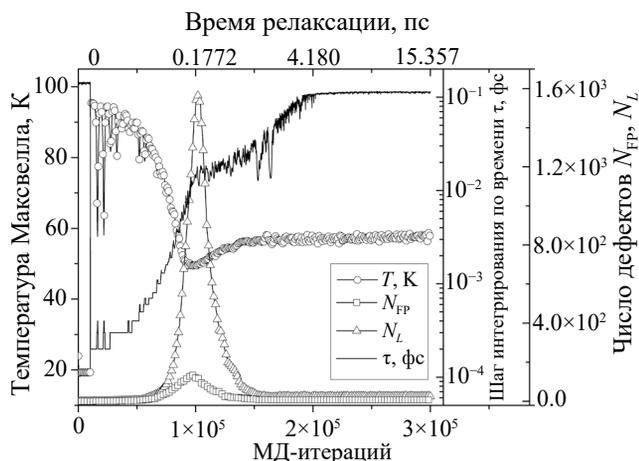
## ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ

При МД-моделировании процесса первичного дефектообразования в неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr–Ni с кристаллической структурой ГЦК, химический состав которого совпадает с содержанием трех основных компонент в коррозионностойкой аустенитной стали типа X18H10, для вычисления сил межатомного взаимодействия использованы полуэмпирические потенциалы [17], построенные с использованием метода внедренного атома [18]. Выбор [17] для проведения исследований обусловлен тщательной подгонкой потенциала на расстояниях от 0.5 Å до равновесного параметра решетки. Проведенный в [17] сравнительный анализ показал, что именно этот интервал значений является определяющим для корректного описания первичного дефектообразования в облучаемых материалах.

На коротких расстояниях парная часть потенциалов [17] уже модифицирована подстановкой универсального потенциала ZBL [9, 11], и, таким образом, сами потенциалы [17] пригодны для МД-моделирования процесса упругого рассеяния высокоэнергетичных ПВА на атомах кристаллической структуры трехкомпонентных модельных ГЦК-сплавов на основе Fe–Cr–Ni.

Моделирование первичного дефектообразования в трехкомпонентном неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr–Ni проводили в изолированной системе с постоянным объемом и фиксированным числом частиц  $NVE$  (микроравновесный статистический ансамбль). Моделируемый кристалл имеет форму куба, грани которого совпадают с кристаллографическими плоскостями  $\langle 100 \rangle$ . На всех гранях кристалла использованы периодические граничные условия. Для интегрирования уравнений движения атомов использовали алгоритм скоростей Верле [19] с переменным шагом интегрирования  $\tau$  по времени, см. рис. 1.

Размер моделируемого кристалла  $N_{box}$  выбрали в зависимости от энергии  $E_{PKA}$ , из расчета  $E_{PKA} / N_{box} \approx 10^{-2}$  эВ/ат (см. табл. 1), так, чтобы смещенные атомы не выходили за его пределы. Параметр решетки неупорядоченного твердого раствора определили из условия нулевых действующих внутренних напряжений. Перед введением ПВА моделируемый кристалл привели в состояние термодинамического равновесия в те-



**Рис. 1.** Изменение температуры Максвелла  $T$ , шага интегрирования по времени  $\tau$ , числа смещенных атомов  $N_L$  и числа пар Френкеля  $N_{FP}$  в процессе эволюции 2 кэВ каскада смещений, инициированного атомом Fe в трехкомпонентном модельном сплаве Fe–Cr–Ni с кристаллической структурой ГЦК.

чение  $1.0 \times 10^4$  итераций, см. рис. 1. Температуру кристалла в процессе релаксации атомных смещений, инициированных ПВА, не контролировали. После релаксации атомных смещений нагрев кристалла, вызванный введением ПВА, не превышал  $\approx 40^\circ$  ни в одном из компьютерных экспериментов.

ПВА с энергией  $E_{PKA}$  из табл. 1 вводили вдоль одного из пятнадцати кристаллографических направлений  $\langle 100 \rangle, \langle 101 \rangle, \langle 102 \rangle, \langle 103 \rangle, \langle 104 \rangle, \langle 111 \rangle, \langle 112 \rangle, \langle 113 \rangle, \langle 114 \rangle, \langle 122 \rangle, \langle 123 \rangle, \langle 124 \rangle, \langle 203 \rangle, \langle 133 \rangle, \langle 134 \rangle$  в произвольном месте моделируемого кристалла в произвольный момент времени. Для каждой пары параметров  $(E_{PKA}, \langle hkl \rangle)$ , где  $\langle hkl \rangle$  – одно из перечисленных выше кристаллографических направлений, сгенерирована статистическая выборка из 24 событий первичного дефектообразования. МД-моделирование процессов генерации радиационных дефектов повторили для ПВА Fe, Cr и Ni. Всего сгенерировали  $15 \times 24 \times 12 \times 3 = 12\,960$  событий первичного дефектообразования в рассматриваемом модельном сплаве Fe–Cr–Ni.

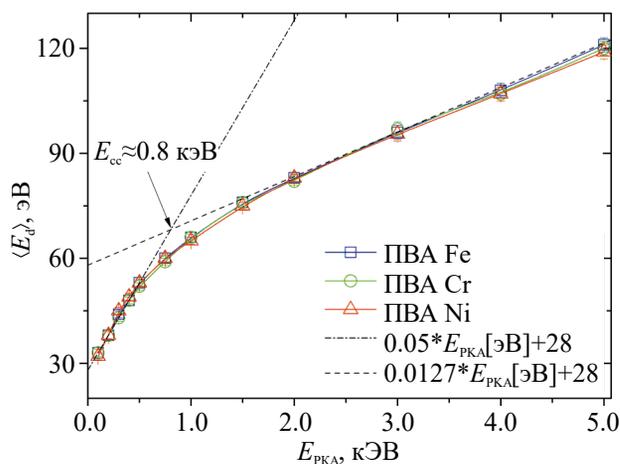
Для идентификации и визуализации смещений атомов из равновесных позиций в узлах кристаллической структуры и первичных повреждений, возникающих в модельном сплаве Fe–Cr–Ni, использовали критерий Линдемманна [20], метод ячеек Вигнера–Зейтса [21, 22] и кластерный анализ [23]. Радиус сферы Линдемманна составлял  $0.2a$ , где  $a$  – равновесный параметр решетки при температуре моделирования. При определении кластеров точечных дефектов в качестве радиуса обрезания был использован радиус второй координационной сферы.

**Таблица 1.** Число атомов  $N_{box}$  в моделируемом кристалле в зависимости от энергии ПВА  $E_{PKA}$

$E_{PKA}$ , эВ	Число атомов в моделируемом кристалле, $N_{box}$
100	23 328
200	23 328
300	30 400
400	40 656
500	50 784
750	75 816
1000	97 556
1500	148 104
2000	202 612
3000	296 352
4000	397 808
5000	500 000

### РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ, АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ

Пороговые энергии смещения  $\langle E_d \rangle$  в неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr–Ni, усредненные по всем пятнадцати кристаллографическим направлениям как функция  $E_{PKA}$ , показаны на рис. 2. Полученные значения  $\langle E_d \rangle$  ложатся на одну кривую и не зависят от типа ПВА (Fe, Cr или Ni), инициирующего первичное дефектообразование. Проведенные расчеты не выявили отличий пороговых энергий смещения атомов Fe, Cr и Ni в рассматриваемом модельном сплаве Fe–Cr–Ni во всем исследованном интервале энергий  $E_{PKA}$ .



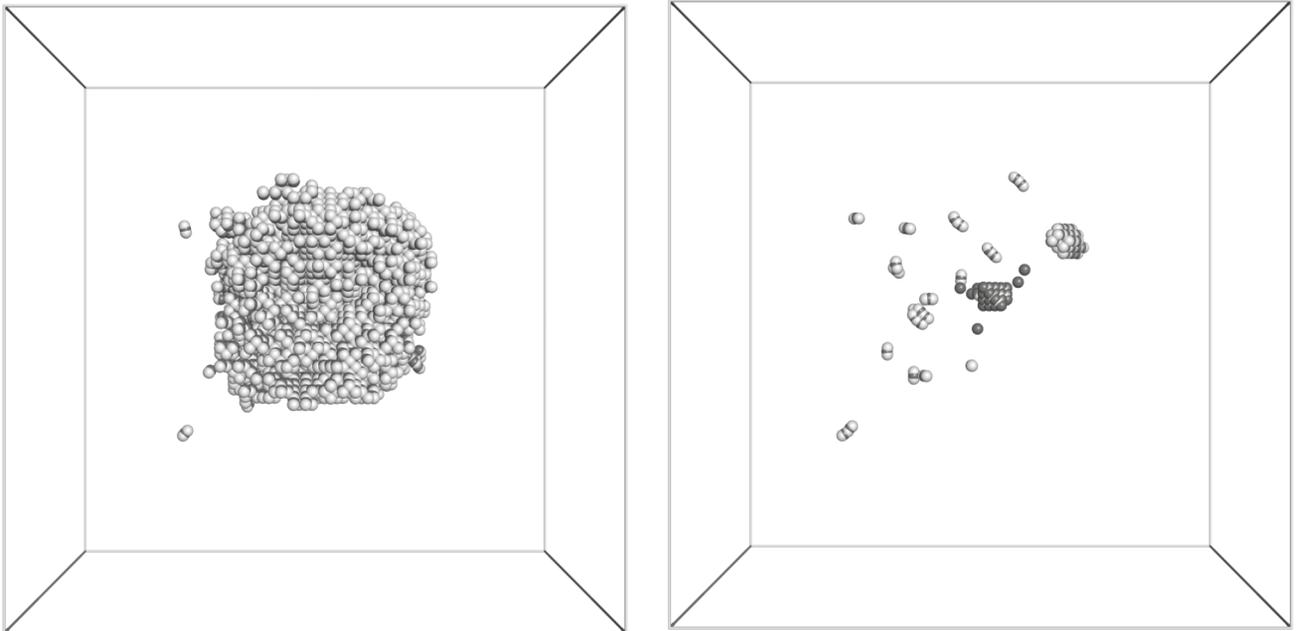
**Рис. 2.** Зависимость средней пороговой энергии смещения  $\langle E_d \rangle$  от  $E_{PKA}$ . 95%- доверительный интервал показан планками.

Зависимость  $\langle E_d \rangle$  от  $E_{РКА}$  на рис. 2 распадается на два линейных участка, недвусмысленно указывая на два доминирующих механизма первичного дефектообразования. При относительно больших энергиях  $E_{РКА}$  ПВА инициирует каскад столкновений. Ключевым отличием дефектообразования в каскадах является формирование вакансионных и междоузельных кластеров, см. пример на рис. 3. Эффективность образования дефектов в каскадах сравнительно невелика благодаря рекомбинации междоузельных атомов и вакансий в каскадной области смещений, и величина  $\langle E_d \rangle$  оказывается повышенной. При низких энергиях  $E_{РКА}$  ПВА не создает каскадной области смещений, см. пример на рис. 4. Результатом упругого рассеяния ПВА на атомах мишени в этом случае являются подпороговые смещения атомов Fe–Cr–Ni-сплава из узлов кристаллической структуры и создание изолированных вакансий и междоузельных атомов. Из-за пространственного разделения рекомбинация дефектов в этом случае затруднена, и эффективность дефектообразования, отражением которой является относительно низкая энергия пороговых смещений  $\langle E_d \rangle$ , показанная на рис. 2, в результате повышается.

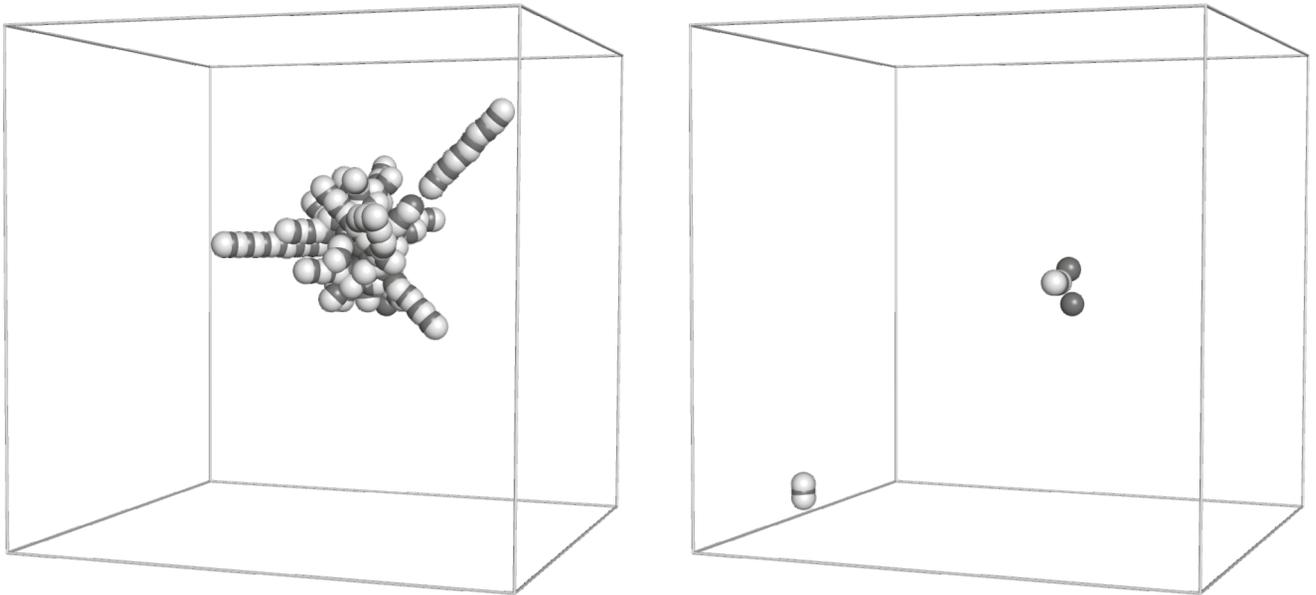
При увеличении  $E_{РКА}$  плавный переход от одного механизма дефектообразования к другому начинается при значениях  $E_{РКА} \approx 500$  эВ и происходит в интервале энергий ПВА  $E_{РКА}$

$500 \text{ эВ} \leq E_{РКА} \leq 2 \text{ кэВ}$ , см. рис. 2. О величине минимальной энергии  $E_{cc}$ , которую необходимо передать ПВА, чтобы инициировать каскад смещений в рассматриваемом материале, можно судить по пересечению асимптот  $\langle E_d \rangle$  при малых и больших значениях  $E_{РКА}$ , см. рис. 2. В случае рассматриваемого модельного твердого раствора Fe–Cr–Ni эта энергия составляет  $E_{cc} \approx 0.8$  кэВ.

Линейная зависимость  $\langle E_d \rangle$  от  $E_{РКА}$  заслуживает отдельного комментария. NRT стандарт/модель Кинчина–Пиза [14, 24], широко используемые для оценки уровня накопленных повреждений, не предполагают никакой функциональной зависимости пороговой энергии смещения  $\langle E_d \rangle$  от  $E_{РКА}$ . Линейная зависимость  $\langle E_d \rangle$  от  $E_{РКА}$  на рис. 2 указывает на потерю энергии ПВА за счет подпороговых взаимодействий, доля которых в диссипации энергии ПВА велика, см. также рис. 1, на котором для сравнения приведены значения числа смещенных атомов  $N_L$  и числа пар Френкеля  $N_{FP}$ , определенных соответственно методами эквивалентных сфер Линдемманна, и ячеек Вигнера–Зейтца. Число  $N_L$  учитывает атомы, смещенные из узлов кристаллической структуры на расстояния 20% параметра решетки и более, и даже в этом случае на максимумах  $N_L$  превосходит  $N_{FP}$  на порядок величины. Если в  $N_L$  также учесть атомы с меньшими смещениями, огромная разница между большим числом



**Рис. 3.** Каскад столкновений, инициированный атомом Fe с энергией  $E_{РКА} = 4$  кэВ. Слева показан момент, соответствующий максимальному числу смещенных атомов. Справа приведена окончательная конфигурация точечных дефектов и их кластеров после релаксации каскада столкновений. Черным и белым цветом обозначены соответственно вакансии и смещенные атомы.



**Рис. 4.** Упругое рассеяние ПВА Fe с энергией,  $E_{РКА} = 300$  эВ на атомах трехкомпонентного неупорядоченного твердого раствора Fe–Ni–Cr. Слева показано образование цепочек последовательных замещающих столкновений. Справа показано окончательное расположение изолированных вакансий и междоузельных атомов после релаксации каскада столкновений. Черным и белым цветом обозначены соответственно вакансии и смещенные атомы.

смещенных атомов и фактическим числом образовавшихся дефектов будет еще более очевидна.

Средняя пороговая энергия смещения  $\langle E_d \rangle$  возрастает с ростом  $E_{РКА}$  (рис. 2). Чтобы “очистить”  $\langle E_d \rangle$  от вклада слабых взаимодействий ПВА с окружающими атомами, не приводящих к образованию точечных дефектов, необходимо экстраполировать полученную линейную зависимость  $\langle E_d \rangle$  от  $E_{РКА}$  в область  $E_{РКА} \rightarrow 0$ , см. рис. 2. Полученное значение  $\langle E_d \rangle = 28 \pm 1$  эВ и будет “чистой” пороговой энергией смещения атомов Fe, Cr и Ni в неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr–Ni, усредненной по всем смоделированным кристаллографическим направлениям.

Следует, однако, отметить, что использование параметра  $\langle E_d \rangle = 28 \pm 1$  эВ в качестве пороговой энергии смещения при расчете каскадной функции (1) в представлении Кинчина–Пиза неизбежно приведет к существенной переоценке числа пар Френкеля, образованных в неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr–Ni, облучаемом быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии. Отклонение от реальной величины  $N_{FP}$  в сторону бóльших значений будет тем значительнее, чем выше энергия ПВА.

Результаты МД-моделирования первичных повреждений в модельном сплаве Fe–Cr–Ni указывают на то, что реальный вклад подпороговых смещений атомов, не приводящих к образованию радиационных дефектов, в диссипацию энергии ПВА оказывается выше, чем это

предсказывает модель Кинчина–Пиза. Чтобы корректно учесть потери энергии ПВА на подпороговые смещения атомов из равновесных положений в узлах кристаллической структуры мишени, выражение (1) для расчета каскадной функции предлагается модифицировать следующим образом:

$$N_{FP} = \frac{0.8E_{РКА}}{2(\chi E_{РКА} + E_\chi)}, \quad (4)$$

где параметры  $\chi$  и  $E_\chi$  определяются значением энергии ПВА  $E_{РКА}$  и в зависимости от режима первичного дефектообразования принимают значения, приведенные в табл. 2 (см. также рис. 2). Верхняя строчка значений параметров  $\chi$  и  $E_\chi$  в табл. 2 отвечает режиму образования изолированных вакансий и междоузельных атомов при низких энергиях ПВА  $E_{РКА} \leq E_{cc}$ . Увеличение энергии ПВА  $E_{РКА}$  выше значения  $E_{cc}$  ведет к переходу от образования изолированных точечных дефектов к дефектообразованию в каскадах смещений и соответствующей сме-

**Таблица 2.** Значения параметров  $\chi$  и  $E_\chi$  модифицированной каскадной функции (4)

$E_{РКА}$	$\chi$	$E_\chi$ , эВ
$2E_\chi \leq E_{РКА} \leq E_{cc}$	0.05	28
$E_{РКА} \geq E_{cc}$	0.0127	58

не значений параметров  $\chi$  и  $E_\chi$  при вычислении каскадной функции (4).

### ВЫВОДЫ

Методами МД смоделировано образование радиационных дефектов в модельном неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr–Ni, химический состав которого совпадает с концентрацией трех основных компонентов в коррозионно-стойких аустенитных сталях типа X18H10. Всего сгенерировано 12 960 событий первичного дефектообразования, инициированных Fe, Cr и Ni ПВА с энергиями  $100 \text{ эВ} \leq E_{\text{РКА}} \leq 5 \text{ кэВ}$  и начальными импульсами вдоль пятнадцати различных кристаллографических направлений.

Полученные результаты использованы для расчета средних пороговых энергий смещения  $\langle E_d \rangle$  атомов Fe, Cr и Ni в рассматриваемом материале.

1. Проведенные расчеты не выявили отличий пороговых энергий смещения атомов Fe, Cr и Ni в рассматриваемом трехкомпонентном модельном сплаве Fe–Cr–Ni во всем исследованном интервале энергий  $E_{\text{РКА}}$ .

2. Средняя пороговая энергия смещения атомов Fe, Cr и Ni в рассматриваемом материале составляет  $\langle E_d \rangle = 28 \pm 1 \text{ эВ}$ .

3. Зависимость  $E_d$  от  $E_{\text{РКА}}$  распадается на два фрагмента, определяемых доминирующим механизмом дефектообразования. При низких энергиях ПВА  $E_{\text{РКА}} \leq E_{\text{cc}}$  преобладает образование изолированных точечных дефектов. При высоких энергиях ПВА  $E_{\text{РКА}} \geq E_{\text{cc}}$  дефектообразование происходит в каскадах столкновений. Значение  $E_{\text{cc}} \approx 0.8 \text{ кэВ}$  в рассматриваемом материале определили по пересечению асимптот зависимости  $E_d$  при низких и высоких  $E_{\text{РКА}}$ .

4. Применение NRT стандарта / модели Кинчина–Пиза с использованием рассчитанной средней пороговой энергии смещения  $\langle E_d \rangle = 28 \pm 1 \text{ эВ}$  ведет к сильной переоценке уровня создаваемых радиационных повреждений в неупорядоченном твердом растворе Fe–Cr–Ni. Отклонение в сторону больших значений будет тем значительнее, чем выше энергия ПВА  $E_{\text{РКА}}$ .

5. На основании полученных 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  $E_{\text{РКА}}$ .

Автор выражает благодарность проф. В.А. Бородину, НИЯУ МИФИ и НИЦ “Курчатовский институт”, за обсуждение существующих мето-

дов определения уровня накопленных повреждений в конструкционных материалах, подвергаемых облучению нейтронами и / или пучками заряженных частиц. Работа выполнена 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/>.

Как автор данной работы заявляю, что у меня нет конфликта интересов.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Was G.S., Averback R.S. 6.07–Radiation Damage Using Ion Beams, in Konings R.J.M. Eds. Comprehensive Nuclear Materials. Elsevier. 2012. V. 6. P. 195–226.
2. Allen T., Busby J., Meyer M., Petti D. Materials challenges for nuclear systems // Materials Today. 2010. V. 13. № 12. P. 14–23.
3. Zinkle S.J., Was G.S. Materials challenges in nuclear energy // Acta Mater. 2013. V. 66. № 3. P. 735–758.
4. Development of Radiation Resistant Reactor Core Structural Materials, IAEA Scientific Forum 2007 Global Challenges and the Development of Atomic Energy: The Next 25 Years. [Электронный ресурс] [https://www.iaea.org/About/Policy/GC/GC51/GC51InfDocuments/English/gc51inf-3-att7\\_en.pdf](https://www.iaea.org/About/Policy/GC/GC51/GC51InfDocuments/English/gc51inf-3-att7_en.pdf) (дата обращения: 25.02.2024).
5. Cai W., Li J., Uberuaga B.P., Yip S. 1.18 – Molecular Dynamics, in Konings R.J.M. Eds. Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition). Elsevier. 2020. V. 1. P. 573–594.
6. Nordlund K. Historical review of computer simulation of radiation effects in materials // J. Nucl. Mater. 2019. V. 520. P. 273–295.
7. Nordlund K., Zinkle S.J., Sand A.E., Granberg F., Averback 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.
8. 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.
9. Ziegler J.F., Biersack J., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Matter 1st ed. Pergamon Press. 1985. 321 p.
10. Ziegler J.F. SRIM-2003 // Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B. 2004. V. 219–220. P. 1027–1036.
11. Ziegler J.F., Biersack J.P., Ziegler M.D. SRIM—The Stopping Range of Ions in Matter // SRIM Co. 2008. 405 p.
12. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. SRIM – The stopping and range of ions in matter // Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B. 2010. V. 268. P. 1818–1823.

13. Дистрибутив SRIM-2013 [Электронный ресурс] <http://www.srim.org/SRIM/SRIM-2013-Std.e> (дата обращения: 25.02.2024).
14. *Norgett L.K., Robinson M.T., Torrens I.M.* A proposed method for calculating displacement dose rates // Nucl. Eng. Design. 1975. V. 33. P. 50–54.
15. *Voskoboinikov R.* Optimal sampling of MD simulations of primary damage formation in collision cascades // Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B. 2020. V. 479. P. 18–22.
16. *Vladimirov P.V., Borodin V.A.* First-principles and classical molecular dynamics study of threshold displacement energy in beryllium // Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B. 2017. V. 393. P. 195–199.
17. *Stoller R.E., Tamm A., Béland L.K., Samolyuk G.D., Stocks G.M., Caro A., Slipchenko L.V., Osetsky Yu. N., Aabloo A., Klintonberg M., Wang Y.* Impact of Short-Range Forces on Defect Production from High-Energy Collisions // J. Chem. Theory Comput. 2016. V. 12:6. P. 2871–2879.
18. *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.
19. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Clarendon, Oxford. 1987. 408 p.
20. *Lindemann F.A.* The calculation of molecular vibration frequencies // Zeitschrift für Physik. 1910. V. 16. P. 609–612.
21. *Nordlund K., Averback R.S.* Point defect movement and annealing in collision cascades // Phys. Rev. B. 1997. V. 56. № 5. P. 2421–2436.
22. Wigner-Seitz defect analysis [Электронный ресурс] [https://www.ovito.org/docs/current/reference/pipelines/modifiers/wigner\\_seitz\\_analysis.html](https://www.ovito.org/docs/current/reference/pipelines/modifiers/wigner_seitz_analysis.html) (дата обращения: 25.02.2024).
23. *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.
24. *Kinchin G.H., Pease R.S.* The Displacement of Atoms in Solids by Radiation // Rep. Prog. Phys. 1955. V. 18. P. 1–51.

## CALCULATION OF THRESHOLD DISPLACEMENT ENERGIES IN AUSTENITIC STAINLESS STEELS

**R. E. Voskoboinikov<sup>1, 2, \*</sup>**

<sup>1</sup>*National Research Nuclear University MPhI, Moscow, 115409 Russia*

<sup>2</sup>*National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, 123182 Russia*

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

Molecular dynamics (MD) simulations were applied to study primary damage formation in a Fe–Ni–Cr ternary model alloy with chemical composition that coincides with Fe, Ni, and Cr content in AISI type 304 stainless steel. A representative sample of 12 960 radiation damage formation events initiated by Fe, Ni, and Cr primary knock-on atoms (PKA) with PKA energy  $100 \text{ eV} \leq E_{\text{PKA}} \leq 5 \text{ keV}$  along fifteen crystallographic directions is employed for evaluation of the average threshold displacement energies. It is established that the average threshold displacement energies of Fe, Ni, and Cr atoms in the considered material are identical and equal to  $\langle E_d \rangle = 28 \pm 1 \text{ eV}$ . As a function of  $E_{\text{PKA}}$ , the actual average threshold displacement energy  $E_d$  comprises of two linear segments that depend on the governing mechanism of primary damage formation. PKAs with energies  $E_{\text{PKA}} \leq E_{\text{cc}}$ , where  $E_{\text{cc}} \approx 0.8 \text{ keV}$ , generate isolated vacancies and interstitial atoms, whereas PKAs with energies  $E_{\text{PKA}} \geq E_{\text{cc}}$  produce radiation damage in collision cascades. Using the obtained results of MD simulations, we modified the cascade function in the Kinchin–Pease model in order to take into account the dependence of the actual threshold displacement energy  $E_d$  on PKA energy  $E_{\text{PKA}}$ .

**Keywords:** molecular dynamics, primary damage formation, AISI type 304 stainless steel, threshold displacement energy, Kinchin–Pease model, NRT standart