

**УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК**

548.0:539.186

**ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ  
В КРИСТАЛЛАХ***В. М. Агранович, В. В. Кирсанов*

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение . . . . .	3
2. Межатомные потенциалы . . . . .	6
3. Особенности динамики радиационных повреждений в кристаллах (фокусоны и краудиноны, обедненные зоны, анизотропия пороговых энергий смещения и зоны спонтанной аннигиляции) . . . . .	10
4. Моделирование дефектов, возникающих в процессе облучения, и их взаимодействий . . . . .	27
5. Моделирование процессов отжига . . . . .	38
6. Машинное моделирование изменения свойств облученных образцов . . . . .	43
7. Заключительные замечания. Перспективы . . . . .	46
Цитируемая литература . . . . .	48

«Сначала мы расценивали машинный метод лишь как вспомогательное средство для построения точных аналитических формул. К сожалению, постепенно выяснилось, что наши надежды граничат с безнадежностью, а машинное моделирование процессов оказывается тем единственным подходом, в рамках которого удастся с единой точки зрения охватить весь круг наблюдаемых физических явлений».

*Дж. Виньярд*<sup>10</sup>

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Бурный рост атомной энергетики, а также широкое развитие работ в области термоядерного синтеза, делают радиационное материаловедение одним из важнейших разделов современной физики твердого тела. Хотя в этой области исследований накоплен обширный экспериментальный материал, изучение изменений физических свойств твердых тел под облучением в результате их структурной перестройки (радиационное повреждение) продолжает преподносить сюрпризы. За последние пять-десять лет были экспериментально обнаружены и начали интенсивно изучаться такие явления, как радиационная аморфизация, радиационное охрупчивание, радиационное распухание недеформируемых металлов и сплавов, радиационное упрочнение, радиационно-стимулированная диффузия и др.

Экспериментальные исследования в этой области продолжают развиваться, причем в связи с намечающимся в будущем более широким использованием реакторов на быстрых нейтронах особый интерес приобретает изучение поведения твердых тел в условиях высоких доз и потоков ней-

© Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», «Успехи физических наук», 1976 г.

тронов (до  $10^{16}$  нейтронов/см<sup>2</sup>сек). Работы же в области термоядерного синтеза делают весьма актуальным изучение влияния на свойства твердых тел потоков нейтронов более высоких энергий ( $E \approx 6 - 14$  Мэв).

Естественно поэтому, что прогнозирование поведения материалов в этих условиях требует создания достаточно полной теории радиационных повреждений. Хотя такого рода теория начала развиваться еще на заре атомной энергетики, сколько-нибудь завершенной картины всего комплекса физических явлений в твердых телах, возникающих при воздействии на них высоких потоков ядерных частиц, в настоящее время не существует. Возможно, это обстоятельство связано с небольшим количеством имеющихся ныне достаточно чистых и решающих экспериментов.

Не исключено, однако, что относительно медленное развитие теории радиационных повреждений обусловлено и отношением к ней самих физиков-теоретиков. Так, многие из них часто высказывают сомнение в том, может ли исследование радиационных повреждений быть для них достаточно серьезным занятием\*). Принимая, однако, во внимание актуальность проблем радиационного материаловедения, вряд ли можно согласиться с такой точкой зрения.

Первые попытки качественного объяснения процессов, происходящих при попадании бомбардирующей частицы в кристалл, предпринимались давно, и здесь прежде всего следует отметить работу Вигнера 1942 г. Создание же точной количественной теории столкнулось с целым рядом трудностей, главная из которых связана с тем, что при попытке описать развитие радиационного повреждения в кристалле исследователь сталкивается с проблемой многих тел.

Поток бомбардирующих частиц, попадая в кристалл и взаимодействуя с атомами мишени, создает первично выбитые (смещенные) атомы (ПВА). Энергетический спектр ПВА и их пространственное распределение неоднородны даже в случае бомбардировки моноэнергетическими частицами. Неравномерно распределенные в пространстве ПВА с разнообразными энергиями образуют в материале каскады атом-атомных соударений, которые могут резко отличаться один от другого. Каждый каскад может содержать до нескольких тысяч одновременно движущихся и взаимодействующих атомов. Велика вероятность наложения каскадов и их отдельных ветвей, особенно при высоких потоках.

Каждый каскад соударений в течение своего времени жизни (порядка  $10^{-13} - 10^{-14}$  сек) оставляет после себя набор разнообразнейших дефектов, начиная от вакансий и междоузельных атомов и кончая сложными их комплексами. Каждое послекаскадное («эмбриональное») распределение дефектов по размерам и в пространстве стремится со временем прийти в равновесие с окружающей кристаллической решеткой. Но в любое время по этому неустановившемуся дефектному распределению в условиях облучения может пройти новый каскад, и его развитие может тогда резко отличаться от соответствующего процесса в идеальной решетке. Все это подвержено влиянию тепловых колебаний решетки, механических напряжений, электрических полей и т. д.

Попытки аналитически описать различные стадии развития радиационных повреждений предпринимались и предпринимаются до сих пор. Естественно, что в силу указанных выше причин их возможности весьма ограничены. Более успешным оказалось недавно возникшее направление машинного моделирования. По-видимому, именно с этим направлением

---

\*) В качестве курьеза напомним, что еще более крайняя точка зрения, как пишет Пайерлс<sup>136</sup>, принадлежит Паули, который аналогичное сомнение высказывал очень давно относительно исследований в области теории твердого тела вообще.

в настоящее время следует связывать надежды на построение достаточно полной физической картины радиационных повреждений в твердых телах.

Обращая основное внимание на постановку и результаты машинного моделирования, мы покажем ниже, каким образом его использование позволяет получить те качественно новые закономерности, которые характерны для упорядоченных систем, состоящих из огромного числа взаимодействующих друг с другом частиц.

В зависимости от применяемых методов машинные модели в теории радиационного повреждения делятся на причинные, стохастические и смешанные. В первом случае решаются уравнения движения системы многих частиц, во втором — в алгоритм расчета методом Монте-Карло вводится элемент случайности.

Фундаментальной работой, фактически, основавшей направление машинного моделирования радиационных повреждений, явилась работа, выполненная в Брукхейвенской лаборатории США Виньярдом и его сотрудниками<sup>1</sup>. В этой работе была предложена первая машинная модель динамики радиационного повреждения. В настоящее время моделирование с помощью ЭВМ проникло во все основные задачи радиационной физики, и с помощью машинных моделей исследован довольно широкий круг физических явлений.

Для того чтобы дать более или менее полное общее представление о полученных при этом новых результатах, мы начнем с работ по динамике радиационных повреждений, непосредственно примыкающих к направлению Виньярда (энергия первично выбитого атома  $E \leq 1 - 2$  кэв; см. гл. 2,3). В рамках модели Виньярда и ряда ее обобщений был проведен анализ структуры каскадов атом-атомных соударений (разбиение каскада на динамические краудионы и фокусоны; выброс внедрений на периферию каскада; образование внутренней зоны, обогащенной вакансиями), открыта анизотропия пороговой энергии смещений и изучено влияние на нее тепловых колебаний атомов, (оказавшееся весьма существенным), введено понятие о зонах спонтанной рекомбинации пар Френкеля и дана оценка их объемов, изучены столкновения динамических краудионов и фокусонов с дефектами решетки и обнаружена обусловленная тепловыми колебаниями локализация каскадов.

Переход к рассмотрению динамики радиационных повреждений при более высоких энергиях первично выбитых атомов ( $E > 1 - 2$  кэв) потребовал качественного изменения процедуры машинного моделирования. Более детально о ее особенностях речь идет в разделе в) гл. 3. Здесь же мы лишь отметим, что в рамках этого подхода, существенно использующего упомянутые выше результаты машинного моделирования низкоэнергетических каскадов, был произведен анализ послекаскадных дефектных структур (распределения различного рода дефектов по размерам) в зависимости от энергии первично выбитого атома.

Использование метода машинного моделирования позволило изучить сложные атомные конфигурации дефектов решетки и определить также их важнейшие характеристики: энергии образования и связи, энергии активации перемещения и т. д. (см. гл. 4). Одним из наиболее важных и интересных выводов, который оказывается возможным сделать на основе полученных при этом результатов, — это наличие непрерывной эволюции дефектов с увеличением их размера и переход в совершенные дислокационные петли (вакансионного и междоузельного типа). Кроме того, машинное моделирование позволило рассмотреть также и радиационный отжиг возникающих при облучении дефектных образований и, таким образом, исследовать насыщение зависимостей изменения физических свойств кристалла, наблюдаемое при возрастании дозы облучения (см. гл. 5).

Разумеется, весьма интересным является возможность исследования не только различного рода дефектных структур, возникающих при облучении, но и их влияние на наблюдаемые физические свойства кристаллов. Оказывается (см. гл. 6), что методы машинного моделирования и здесь позволяют получить ряд интересных результатов (например, исследовать влияние дефектных распределений на подвижность дислокаций).

Следует отметить, что почти все упомянутые выше результаты были получены на моделях, имитирующих кубические металлы, что обусловлено относительной простотой в них вида межатомного взаимодействия. Однако попытки моделировать развитие радиационного повреждения в материалах с более сложным взаимодействием, и, в частности, в биатомных материалах, также предпринимались, и мы остановимся на них ниже.

Основопологающая работа Виньярда и его сотрудников<sup>1</sup> была опубликована в 1960 г. За истекшие пятнадцать лет возникшее направление исследований бурно развивалось. Цель данного обзора и состоит в том, чтобы осветить полученные за прошедшее время основные результаты.

В связи с этим, в последующих разделах мы более подробно обсудим различные подходы к моделированию тех или иных аспектов и стадий развития радиационного повреждения, попытаемся систематизировать имеющуюся здесь информацию и, в заключение, наметим возможные пути и перспективы дальнейших исследований. Начнем же с обсуждения одного из основных вопросов построения дискретных моделей, а именно, с вопроса о выборе вида потенциала межатомного взаимодействия.

Учитывая специфику машинного моделирования, мы вынуждены будем в отдельных местах при описании методов приводить схематическое представление алгоритмов в виде простейших блок-схем и пользоваться в отдельных случаях специальной терминологией. Мы надеемся при этом, что такого рода блок-схемы окажутся полезными для читателей, которые интересуются не только имеющимися ныне физическими результатами машинного моделирования радиационных дефектов, но также и самими методами их получения.

Расчеты на ЭВМ с помощью построенного и отработанного алгоритма, в известном смысле напоминают экспериментальные исследования, так что недаром в последнее время появился термин «машинный эксперимент». С этим же связано появление в тексте выражений «наблюдаем», «видим» и т. д. В то же время хотелось бы подчеркнуть, что при постановке «машинного эксперимента», как и при создании новой теории, очень важным является не только фантазия и физическая интуиция, но также и умение отбросить все второстепенные факторы. ЭВМ пока что еще не являются всемогущими!

## 2. МЕЖАТОМНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ

Важнейшая особенность обсуждаемых здесь методов моделирования радиационных повреждений связана как с отказом от их описания в рамках теории упругости, так и от использования так называемой газовой модели. При моделировании предполагается, что, как это и имеет место в действительности, атомы или ионы в твердых телах в результате взаимодействия друг с другом образуют кристаллическую решетку того или иного типа, структура которой начинает нарушаться при возникновении в решетке первично выбитых атомов. Так как развитие радиационного повреждения — многоатомный процесс, то при попытке моделировать его на микроскопическом уровне исследователь прежде всего сталкивается с необходимостью иметь в явном виде межатомное взаимодействие. Поэтому проблема потенциала межатомного взаимодействия является одной

из важнейших, в связи с чем, прежде чем перейти к описанию используемых ныне потенциалов, представляется уместным сделать несколько замечаний, связанных с их выбором. Выбранный потенциал должен, конечно, правильно описывать реальное межатомное взаимодействие в кристалле в весьма широком интервале энергий, ибо, например, в задачах динамики радиационных повреждений сталкивающиеся атомы могут иметь энергии от нуля до нескольких десятков килоэлектрон-вольт. В то же время выбранный потенциал должен быть представлен достаточно простой функцией или же не очень громоздким набором функций. Иначе на анализ каждого межатомного взаимодействия ЭВМ будет затрачиваться слишком большое время, так что суммарное время анализа всех взаимодействий (например, ансамблей из 500—10 000 атомов) разрастается до таких пределов, что делает решение задачи практически недостижимым. Ниже показано, каким образом различные авторы пытаются найти оптимальное решение.

Подчеркнем лишь, что представление потенциальной энергии системы атомов в виде суммы парных взаимодействий является лишь приближенным. Однако в подавляющем большинстве расчетов многочастичные силы вообще не принимались во внимание. С их последовательным учетом и оценкой роли связана одна из неизученных проблем машинного моделирования радиационных дефектов (см. ниже).

На рис. 1 и в табл. I приведены в графической и аналитической формах примеры межатомных парных потенциалов, обычно используемых

Т а б л и ц а I

Потенциалы межатомного взаимодействия

Элемент	Область, расстояний, Å	Потенциал, эв
Железо I <sup>5,6</sup>	< 2,40	-2,195976 (r <sup>-3,097910</sup> ) <sup>3</sup> + 2,704060r <sup>-7,436448</sup>
	2,40—3,00	-0,639230 (r <sup>-3,115829</sup> ) <sup>3</sup> + 0,477871r <sup>-1,581570</sup>
	3,00—3,44	-1,115035 (r <sup>-3,066403</sup> ) <sup>3</sup> + 0,466892r <sup>-1,547967</sup>
	< 2,40	-4,719041 (r <sup>-3,569932</sup> ) <sup>3</sup> - 0,395690r <sup>+0,809049</sup>
Железо II <sup>5</sup>	2,40—3,00	-0,886887 (r <sup>-3,083269</sup> ) <sup>3</sup> + 0,437641r <sup>-1,450695</sup>
	3,00—3,44	-1,057432 (r <sup>-3,069839</sup> ) <sup>3</sup> + 0,434665r <sup>-1,441617</sup>
	< 2,65	-4,198744 (r <sup>-3,017659</sup> ) <sup>3</sup> + 0,607270r <sup>-2,519887</sup>
Вольфрам <sup>5</sup>	2,65—3,32	-0,235362 (r <sup>-5,610045</sup> ) <sup>3</sup> + 5,091237r <sup>-20,297978</sup>
	3,32—3,80	-4,254329 (r <sup>-3,446692</sup> ) <sup>3</sup> + 1,593157r <sup>-5,866373</sup>
	2,00—2,53	-1,496112 (r <sup>-2,731297</sup> ) <sup>3</sup> - 0,599656r <sup>-1,614190</sup>
Ванадий <sup>7</sup>	2,53—3,17	0,095514 (r <sup>-0,304042</sup> ) <sup>3</sup> - 2,201314r <sup>-4,625125</sup>
	3,17—3,63	-1,430039 (r <sup>-3,361421</sup> ) <sup>3</sup> - 0,309466r <sup>-1,095655</sup>

при моделировании. Для одноатомных кристаллов наиболее удачным представляется выбор потенциала для α-железа (α-Fe), выполненный Эргинсом, Виньярдом и Энглертом <sup>3</sup>. Этот потенциал задан различным образом на различных интервалах расстояния. Для r < 0,7l<sub>0</sub> (l<sub>0</sub> — половина ребра куба в ОЦК решетке) использовался экранированный кулоновский потенциал

$$V(r) = \frac{0,7}{r} 8573 \exp(-6,547r). \tag{1}$$

В интервале 0,7 < r < 1,35l<sub>0</sub> применялся потенциал Борна — Майера

$$V(r) = 8573 \exp(-6,547r). \tag{2}$$

Для 1,35 < r < 2,0 использовался потенциал Морзе

$$V(r) = D \{ \exp[-2\alpha(r - r')] - 2 \exp[-\alpha(r - r')] \}, \tag{3}$$

где  $D = 0,223 \text{ эв}$ ,  $\alpha = 1,3885 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $r' = 2,845 \text{ \AA}$ . В интервале  $2,0 < r < 2,5l_0$  снова использовался потенциал Морзе, но умноженный на произвольно выбранную функцию от  $r$ , которая равна 1 при  $r = 2l_0$  и гладко уменьшается до 0,1 при  $r = 2,5l_0$ . Для  $r > 2,5l_0$  потенциал  $V(r)$  выбирался равным нулю.

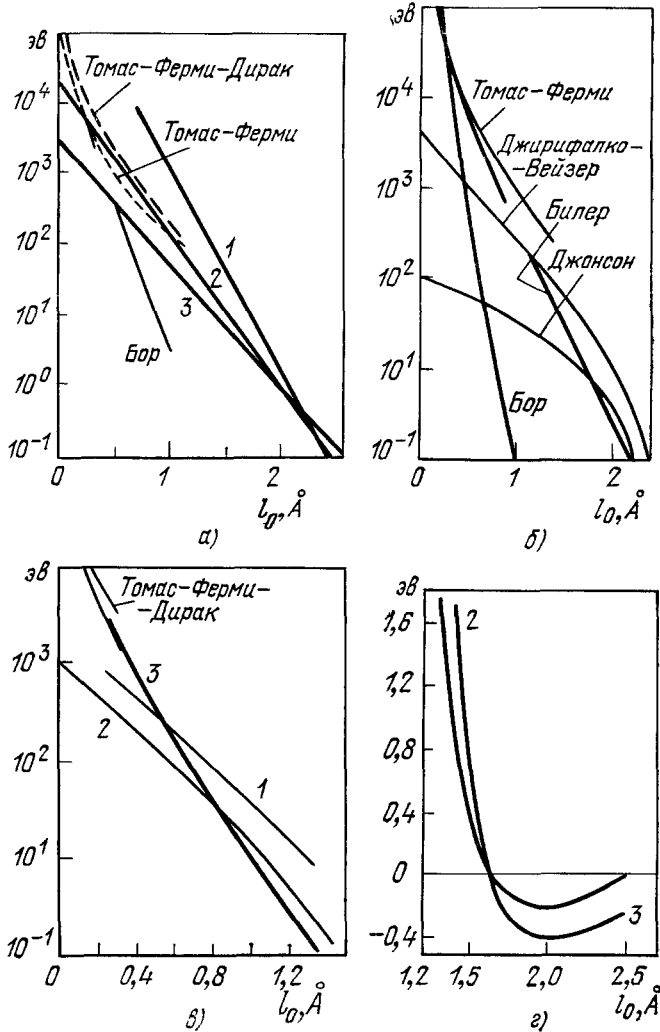


Рис. 1. Межатомные потенциалы, используемые при моделировании радиационного повреждения (выделены жирной линией и пронумерованы). По оси абсцисс — межатомное расстояние  $l_0$  (А), по оси ординат — энергия  $V$  (эв). а) Для меди 1, б) для вольфрама 2, в, г) для  $\alpha$ -железа ( $l_0 = 1,43 \text{ \AA}$ ) <sup>34</sup>.

При небольших расстояниях между атомами этот составной потенциал (см. рис. 1) имеет характер отталкивания, при больших — слабого притяжения. Сравнение упругих модулей, полученных экспериментально, и упругих модулей, подсчитанных с помощью данного потенциала, дает вполне удовлетворительное совпадение (табл. II).

Этим потенциалом удовлетворяются основные потребности дискретной модели: в соединении с небольшими поверхностными силами (о них см. ниже) он дает устойчивую объемноцентрированную решетку с пра-

Таблица II

Упругие постоянные $\times 10^{11}$ , <i>дин/см<sup>2</sup></i>	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{14}$	$B = (C_{11} + 2C_{12})/3$
Эксперимент, $T \approx 0^\circ\text{K}$	23,7	14,1	11,6	17,3
Расчет	19,2	16,4	10,4	17,3

вильными константами решетки, правильную величину первых трех упругих модулей, при малых расстояниях сливается с потенциалами Томаса — Ферми и Томаса — Дирака; кроме этого, он дает приемлемую пороговую энергию смещения<sup>3</sup>. Несмотря на указанные достоинства этого потенциала, с его помощью не удается моделирование устойчивых кристаллических решеток некоторых типов.

Те же Эргинсой, Виньярд и Энглерт<sup>3</sup>, чтобы придать устойчивость ОЦК решетке, были вынуждены при машинном моделировании приложить к двум поверхностным слоям атомов рассматриваемой области кристалла («микрорекристаллита») небольшие по модулю силы, имитирующие дополнительное притяжение. Этим они, естественно, резко ограничили возможности модели<sup>\*</sup>), так как в этом случае во избежание ошибок развивающийся процесс (например, каскад атом-атомных соударений) нельзя «подпускать» близко к границам «микрорекристаллита», что требует увеличения его объема по сравнению со случаем, не требующим введения дополнительных поверхностных сил.

Заметим, что в некоторых случаях при развитии каскада возможны такие ситуации, когда возникает существенное перекрытие волновых функций более чем двух частиц. Именно в этом случае энергия взаимодействия уже не представляется суммой двухчастичных энергий, а будет состоять из членов, в которых оказываются связанными координаты трех и более атомов (многочастичные силы).

К сожалению, попытки включить в машинные модели расчеты взаимодействия с учетом многочастичных сил наталкиваются на ограниченные пока возможности современных ЭВМ. Даже наиболее мощные ЭВМ затрачивают на эти расчеты недопустимо большое время (учитывая необходимость их многократной повторяемости; см., например,<sup>8</sup>).

Еще более сложную задачу представляет выбор потенциалов, удобных для моделирования в биатомных кристаллах. Здесь тоже пока используются только достаточно грубые приближения. Применяется, например, предложенная Риммером и Коттреллом<sup>9</sup> для случая потенциала взаимодействия атомов инертного газа с атомами металла простая процедура. Считая, что взаимодействие центральное и парное, и что потенциалы металл — металл ( $E_M$ ) и газ — газ ( $E_G$ ) известны, потенциал металл — газ  $E_{M-G}$  в рамках этого приближения определяется следующим образом:

$$E_{M-G}(r) = \frac{1}{2} [E_M^i(2r_M) + E_G^i(2r_G)], \quad (4)$$

где  $r_M$  — «радиус» атома металла,  $r_G$  — «радиус» атома газа, а  $r = r_M + r_G$  — расстояние между центрами атомов металла и газа.

<sup>\*</sup>) В частности, именно эти ограничения модели препятствуют машинному моделированию интересных физических процессов, возникающих при бомбардировке поверхностей кристаллов потоками быстрых ионов. Обзор соответствующих эффектов см. в 136, 137.

Для каждого данного значения  $r$  разыскивается пара значений  $r_m$  и  $r_r$ , которые дают минимальное значение функции (4). Это минимальное значение (4) и берется в качестве потенциала металл — газ, соответствующего межатомному расстоянию  $r$ . Так как сами потенциалы  $E_m$  и  $E_r$  сложны, даже эта простая процедура Риммера — Коттрелла, повторяющаяся множество раз при анализе ансамбля взаимодействующих атомов, требует больших затрат машинного времени.

Несмотря на подчеркнутые трудности с выбором атом-атомных потенциалов, ряд важных физических результатов машинного моделирования, как это следует из уже выполненных расчетов, к счастью, слабо изменяется при дальнейших уточнениях качественно правильных (см. выше) парных потенциалов первого приближения. По-видимому, это обусловлено большим числом атомов в каскаде и при формировании дефектов. Уточнение потенциалов остается, конечно, необходимым, и это должно стимулировать дальнейшее развитие теории атом-атомных взаимодействий.

### 3. ОСОБЕННОСТИ ДИНАМИКИ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ В КРИСТАЛЛАХ (ФОКУСОНЫ И КРАУДИОНЫ, ОБЕДНЕННЫЕ ЗОНЫ, АНИЗОТРОПИЯ ПОРГОВЫХ ЭНЕРГИЙ СМЕЩЕНИЯ И ЗОНЫ СПОНТАННОЙ АННИГИЛЯЦИИ)

В этой главе будут рассмотрены модели, имитирующие быстро протекающие процессы (время жизни порядка  $10^{-13}$  сек), происходящие от момента начала движения ПВА до момента окончания каскада соударений, когда энергия соударяющихся атомов становится сравнимой с тепловой. Бомбардирующая частица, рассеиваясь на атомах решетки, может сообщить им кинетическую энергию, величина которой колеблется в широких пределах. Для нейтронного облучения в реакторах, например, кинетическая энергия ПВА может оказаться в интервале от 0 до нескольких десятков килоэлектрон-вольт. Развитие процесса при этом будет зависеть от того, в какой области данного интервала окажется энергия ПВА. В области малых энергий такой атом будет терять энергию на упругие столкновения с другими атомами. При больших энергиях  $E > E_{\text{возб}}$  столкновения приобретают неупругий характер с возникновением значительных электронных возбуждений вплоть до ионизации.

Основное внимание исследователей обычно концентрируется на области упругих столкновений. Это в какой-то мере оправдано тем, что в большинстве технически важных случаев облучения (например, облучение в реакторе нейтронами с энергией около  $1 \text{ Мэв}$ ) ПВА с энергией  $E < E_{\text{возб}}$  преобладают в энергетическом спектре атомов отдачи. О судьбе же ПВА с энергиями в области неупругих столкновений предполагается, что эти атомы теряют энергию на электронные возбуждения и ионизацию, не производя структурных изменений в решетке.

Подойдя же к энергетической границе, разделяющей упругие и неупругие столкновения (например, для  $\text{Cu} \mid E_{\text{возб}} \approx 6 \text{ кэв}^{10}$ ), они сливаются с ПВА первой области. Но даже если и ограничиться только областью упругих столкновений, энергетический диапазон ПВА остается все же еще очень широким. В связи с этим можно попытаться ввести энергетический порог, разделив каскады соударений в упругой области на каскады при высоких (влияние решетки минимально) и каскады при низких энергиях (кристаллическая решетка оказывает заметное влияние). Оценки, произведенные с помощью простейших моделей, например, Томпсоном<sup>11</sup>, подтверждают обоснованность такого разделения. Мы будем следовать этому разделению, помня, что при использовании достаточно мощных ЭВМ оно вообще может и не потребоваться.



а) Брукхейвенский метод  
(модель Виньярда)

В 1960 г. Виньярдом с сотрудниками<sup>1,12</sup> была предложена модель, позволяющая достаточно полно рассматривать низкоэнергетические каскады соударений в меди при гипотетической нулевой температуре 0 °K (в исходном состоянии все атомы идеальной кристаллической решетки покоятся). Эту модель авторы реализовали с использованием наиболее мощных тогда цифровых вычислительных машин. До работы Виньярда с сотрудниками теория смещений атомов в твердых телах под влиянием быстрых частиц развивалась Харрисоном и Зейтцем<sup>13</sup>, Снайдером и Нейфельдом<sup>14</sup>, Кинчином и Пизом<sup>15</sup> и другими.

Во всех этих работах предполагается, что инициируемый ПВА каскад является последовательностью независимых атом-атомных соударений и что исходные позиции соударяющихся атомов произвольны. Таким образом, в этих работах не принималась во внимание кристаллическая упорядоченность атомов. При этом, однако, было введено оказавшееся весьма важным понятие о пороговой энергии смещения атома из своего места. Проведенные при указанных допущениях расчеты числа смещенных атомов оказывались, как правило, в плохом согласии с теми оценками, которые можно было выполнить на основе данных эксперимента (например, при бомбардировке нейтронами расхождение достигало 20 раз<sup>16</sup>). Естественно было допустить, что эти расхождения связаны с упрощениями каскадных моделей.

В поисках выхода было выдвинуто несколько гипотез. Отказавшись от одного из предположений простых каскадных теорий, Зейтц и Кёлер<sup>17</sup> ввели понятие о «температурном клине (пике)». Предполагалось, что при соударении возмущается целая макроскопическая область решетки, которая локально разогревается. Позднее эти клинья разделили на два класса: 1) тепловые клинья (возбуждение столь мало, что атомы не покидают свои узлы), 2) клинья смещения (возбуждение так велико, что многие атомы в клине смещаются из узлов решетки). К последнему классу относятся и пики Бринкмана<sup>18</sup>.

Подвергнув сомнению второе допущение каскадных теорий, Зеегер<sup>19</sup> обратил внимание на то, что в металлах каскад может развиваться так, что из возмущенной области выносятся много атомов посредством цепочек замещений (динамических краудионов), распространяющихся вдоль по плотноупакованным кристаллографическим направлениям. На месте прохождения каскада тогда образуется зона, имеющая квазиморфный характер, плотность атомов в которой может быть много меньше обычной (обедненные зоны Зеегера).

Хотя все эти модели носят чисто качественный характер, они правильно отражают отдельные детали динамики радиационного повреждения в кристаллах, и в них отчетливо подчеркнуты недостатки простых каскадных теорий. Все это подготовило почву для создания более точного количественного описания, оказавшегося возможным только благодаря использованию ЭВМ.

Суть модели Виньярда заключается в следующем. Рассматривается конечная область кристалла («микрорекристаллит») вокруг начального положения смещаемого атома, где атомы взаимодействуют посредством парных, центральных сил, отвечающих потенциалам типа, например, потенциала Борна — Майера. Силы сцепления, обусловленные электронами проводимости (в первой работе<sup>1</sup> речь шла о меди), имитировались постоянными, направленными внутрь «микрорекристаллита» силами, приложенными к граничным атомам. Остальная часть кристалла (взятая

бесконечной) заменяется упругим континуумом. Движение атомов в области микроскопического рассмотрения, т. е. в области «микросталлита», описывается классическими уравнениями движения (относительно обоснования такой процедуры см. у Холмса<sup>20</sup>).

Дополнительные граничные силы, упругие и вязкие, используются для моделирования ответной реакции бесконечной матрицы, окружающей

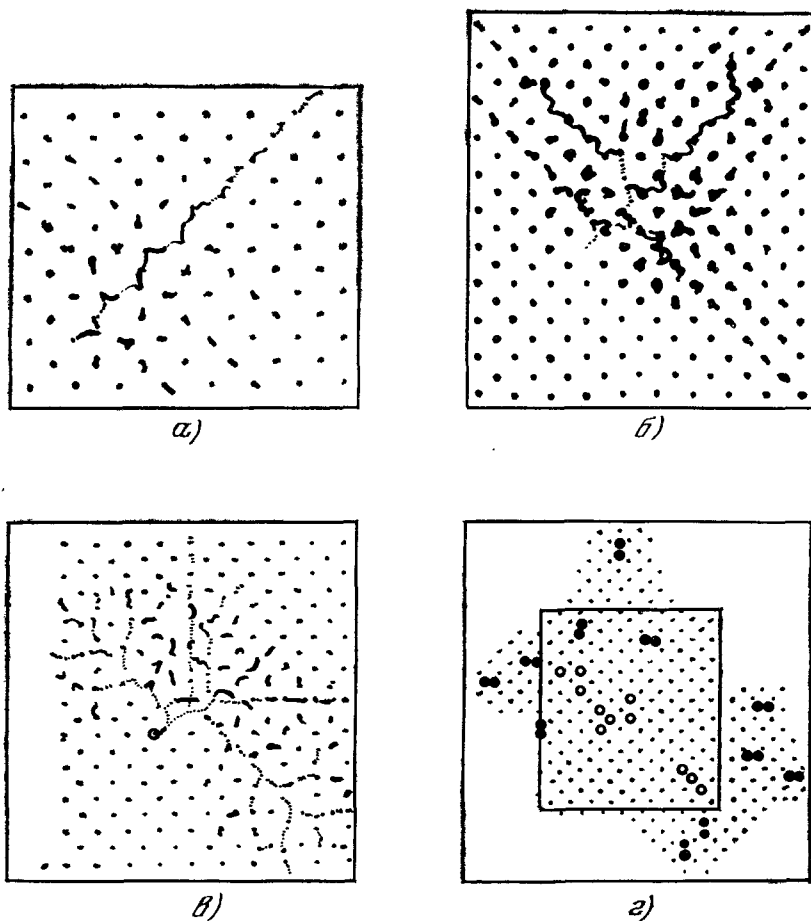


Рис. 2. Траектории атомов, участвующих в каскадах соударений в ГЦК кристалле меди (а—в) и послекаскадная структура (з)<sup>1</sup>.

● — междоузельные атомы; ○ — вакансии.  $E_0, \theta_0$  — начальная энергия и угол ПВА;  $E_0(\theta_0)$ : 50 (а), 100 (б), 400 (в);  $\theta_0 = 10^\circ \text{K} [011]$ .

«микросталлит». Выбираемый размер «микросталлита» и его форма определялись задаваемой энергией ПВА, оперативной памятью ЭВМ и содержанием решаемой задачи. Расчет каскада соударений начинается заданием одному из атомов «микросталлита» начальной скорости и продолжается до тех пор, пока возмущение не затухает и не заканчивается формированием структуры поврежденной области. Большое количество атомов (в первых задачах уже 500—1000) и, следовательно, большое количество связанных уравнений движения делают задачу чрезвычайно громоздкой и аналитически неразрешимой. Применение же ЭВМ снимает эту трудность.

За принципиальной простотой модели Виньярда стоит достаточно громоздкая методика ее реализации. Учитывая, что вопросы реализации модели уже обсуждались (см. 1, 12, 21), мы ограничимся лишь тем, что приведем здесь типичную блок-схему алгоритма, моделирующего каскад соударений (см. табл. III с использованием обычной терминологии). Подробные программы расчета по модели Виньярда читатель может найти в работах 22, 23.

С помощью модели Виньярда удалось составить представление об особенностях протекания каскадов соударений при низких энергиях

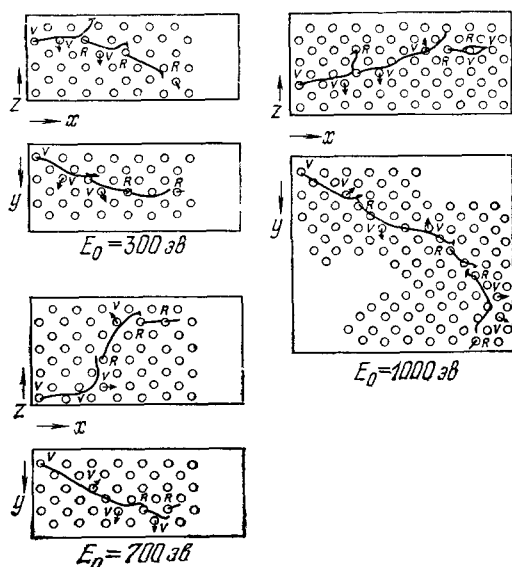


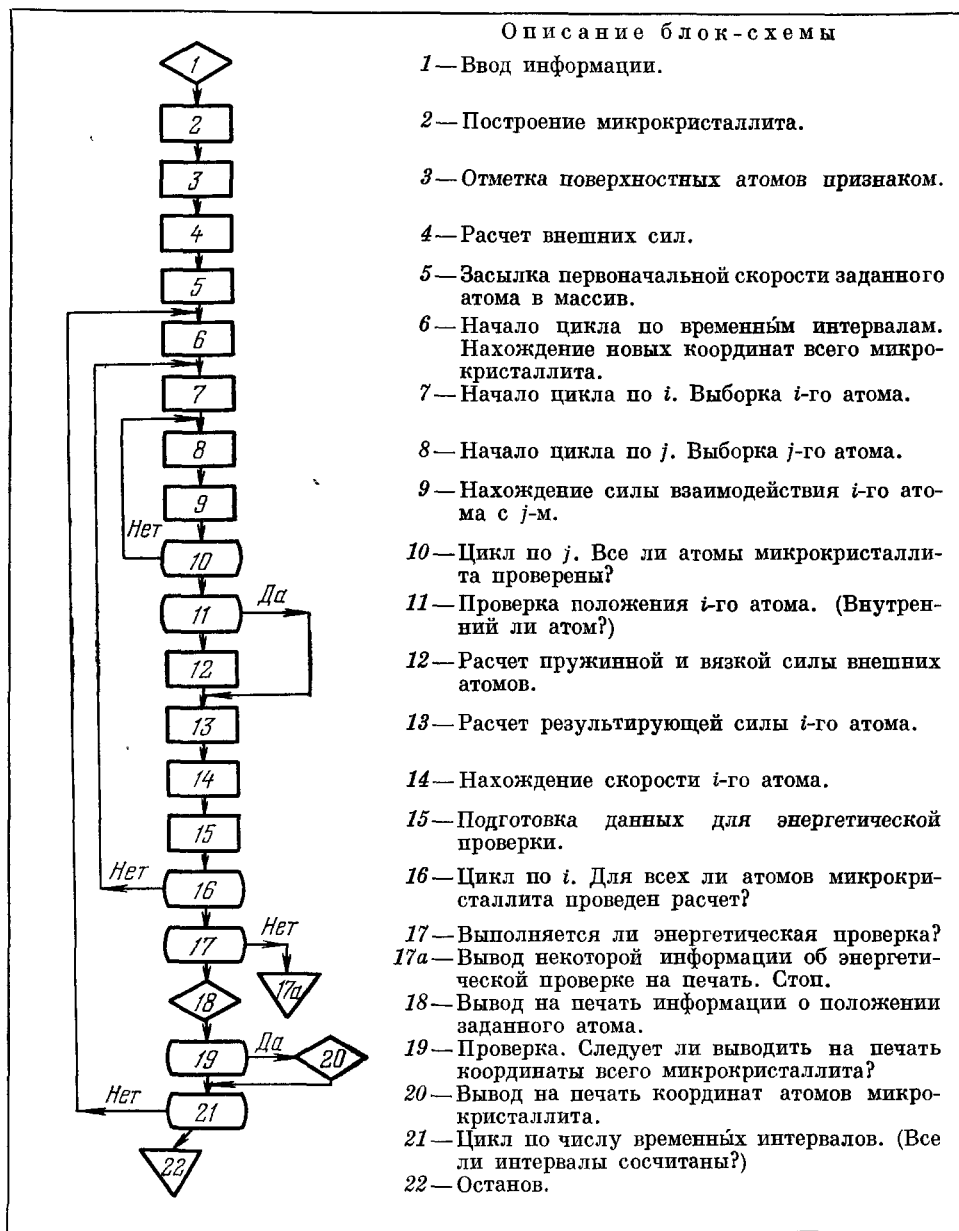
Рис. 3. Каскады соударений при средних энергиях ПВА в ОЦК кристалле  $\alpha\text{-Fe}^4$ . Ветвление полностью не показано, выделены траектории наиболее энергичных атомов. V — места образования вакансий, R — места образования замещений,  $E_0$  — начальная энергия ПВА.

(энергия ПВА  $E = 0-1500$  эв) и низких температурах облучаемого кристалла 1, 3, 4, 24-31. Модель дала возможность «увидеть» каскад соударений в любой момент его развития. В качестве примера на рис. 2 и 3 приведены траектории соударяющихся атомов в каскаде при различных начальных энергиях ПВА для двух типов кристаллической решетки (ГЦК и ОЦК).

Было установлено, что на развитие каскада при низких энергиях ПВА сильное влияние оказывает правильное расположение атомов в решетке. Весь каскад разбивается на цепочки соударений, которые особенно выражены в плотноупакованных направлениях. Основным механизмом смещения при низких энергиях является динамическое замещение. ПВА сам не идет в междоузлие, а замещает одного из своих соседей. Это могут быть ближайшие соседи, вторые или третьи, что зависит от начального направления движения ПВА. Соседи более далекие могут быть замещены только при энергиях выше 70 эв (для  $\alpha\text{-Fe}$ ).

Замещения посредством выбитых атомов образуют вытянутые последовательности коррелированных замещений (динамические краудионы), а внедрения создаются через несколько атомных расстояний от вакансии. Эти последовательности, как следует из расчетов каскадов, являются наиболее важным механизмом, приводящим к разделению внедрения и вакансии. Для небольшой области направлений было найдено, что

Таблица III

Блок-схема алгоритма, моделирующего каскад соударений<sup>23</sup>

помимо образования одиночной вакансии на месте ПВА может происходить формирование небольших вакансионных кластеров.

Стабильная форма внедрения в упомянутых двух типах решеток имеет вид «гантельной» конфигурации, ориентированной в направлении  $\langle 100 \rangle$  для ГЦК решетки<sup>1, 31</sup> и в направлении  $\langle 110 \rangle$  в ОЦК решетке<sup>3</sup> (более полно об этом см. в гл. 4).

Машинные расчеты подтвердили предположение простых каскадных теорий о существовании пороговой энергии смещения ( $E_d$ ), но внесли мно-

го нового в ее содержание. Во-первых, изменилось ее определение. Результаты моделирования показывают, что под пороговой энергией смещения  $E_d^{hkl}$  следует понимать минимальную энергию, необходимую для образования стабильной пары дефектов в направлении  $(hkl)$ , т. е. такую энергию, которую нужно сообщить атому, чтобы он образовал цепочку замещений, бóльшую по длине, чем радиус рекомбинации (см. гл. 4).

Во-вторых, модель Виньярда выявила сильную зависимость пороговой энергии смещения от кристаллографического направления. В большинстве случаев легче всего идет образование стабильных дефектов в направлении  $\langle 100 \rangle$  ( $E_d^{100} \cong 22$  эв для меди и  $E_d^{100} \approx 17$  эв для  $\alpha$ -Fe). Вблизи направления  $\langle 111 \rangle$  и ряда других направлений порог резко возрастает ( $E_d^{111} \approx 80$  эв для меди и  $E_d^{111} \approx 55$  эв для  $\alpha$ -Fe).

Ломер и Пеппер<sup>32</sup> в своих экспериментах подтвердили наличие анизотропии пороговой энергии смещения. Эти авторы, используя облучение монохроматическими электронами с энергией 0,3—2,0 Мэв монокристалла  $\alpha = \text{Fe}$  повышенной чистоты при температуре ниже 25 °К, определили пороговые энергии смещения атомов для направлений  $\langle 111 \rangle$  и  $\langle 100 \rangle$ . Они, однако, получили значения  $E_d^{100} \approx 20$  эв и  $E_d^{111} \approx 30$  эв, т. е., хотя и отметили наличие анизотропии вблизи 0 °К, но одновременно показали, что эта анизотропия не столь резкая, как это предсказывает машинная модель Виньярда. Дальнейшие исследования на машинных моделях, но уже с учетом тепловых колебаний атомов решетки, устранили это противоречие<sup>37</sup> (см. ниже).

Эргинсой и др.<sup>4</sup> проследили эволюцию каскада соударений с повышением энергии ПВА (см. рис. 3). Меняя энергию ПВА в интервале 100—1500 эв, они установили, что при всех энергиях, вплоть до 1500 эв, радиационное повреждение в  $\alpha = \text{Fe}$  состоит из вакансий и внедрений. «Обедненные зоны» и дефекты более сложные, чем небольшие скопления вакансий, не были обнаружены.

Как оказалось, число пар Френкеля увеличивается приблизительно линейно с повышением энергии ПВА согласно формуле  $N_d \approx E/2E_d$ , где  $E_d \approx 50$ —55 эв. Влияние же кристаллической решетки проявляется в появлении цепочек соударений и приводит к пространственному разобщению внедрений и вакансий. Вакансии в основном сосредотачиваются вблизи ПВА, а внедрения — по периферии.

Детальный подсчет замещений не производился, но приблизительно их число в четыре раза больше, чем  $N_d$ . Если ранее было установлено<sup>3</sup>, что каскад от ПВА с энергией ниже 100 эв напоминает клубок цепочек атом-атомных соударений, то с повышением энергии ПВА этот клубок начинает распадаться на отдельные клубки (субкаскады).

Такое впечатление создается за счет того, что сначала ПВА, в затем и вторично смещенные атомы, обладая высокой энергией, проходят расстояния, равные нескольким постоянным решетки, не производя актов замещения и не останавливаясь в междоузельном положении. Эти проходы напоминают случаи каналирования, но только напоминают, так как ни в одном каскаде (вплоть до 1500 эв) не было отмечено случая, когда выбитый атом прошел бы достаточно длинный путь, чтобы попасть под классификацию «канализованного».

Это наблюдение привело указанных выше авторов работы<sup>4</sup> к выводу, что процессы каналирования не играют какой-либо существенной роли в развитии радиационного повреждения при низких и промежуточных энергиях, исключая случаи специального облучения вдоль каналов решетки. Основная причина, по их мнению, заключается в том, что для выбитых из своих мест атомов вероятность попадания в канал крайне мала.

б) Влияние тепловых колебаний  
на анизотропию пороговых энергий  
смещения и распространение динамических  
краудионов

В целой серии исследований, проведенных за последние годы, неоднократно отмечалось, что температура кристалла, находящегося под облучением быстрыми частицами, существенно влияет на динамику радиационного повреждения<sup>20, 33-35</sup>. В связи с этими работами как раз и возникла, изученная авторами обзора<sup>37, 40</sup>, актуальная проблема учета тепловых колебаний решетки в рамках методов машинного моделирования радиационных повреждений в кристаллах.

Так как каскад смещений развивается со скоростями, существенно превышающими скорость звука в кристалле<sup>36</sup>, можно считать, что динамические процессы повреждения идут в решетке, атомные тепловые колебания которой как бы мгновенно остановлены. Тепловые смещения в этом случае напоминают смещения, вызванные наличием структурных дефектов. Поэтому тепловые смещения должны особенно заметно сказываться на тех динамических процессах радиационного повреждения, для протекания которых существенно регулярное расположение атомов в кристалле, т. е., например, на распространение цепочек атом-атомных столкновений (фокусоны, краудионы), каналирование и т. д. В связи со сказанным возникает вопрос о том, каким образом при моделировании радиационных повреждений по методу Виньярда следует вводить в уравнения движения тепловые смещения атомов, которые из-за атом-атомного взаимодействия в кристалле являются, вообще говоря, скоррелированными.

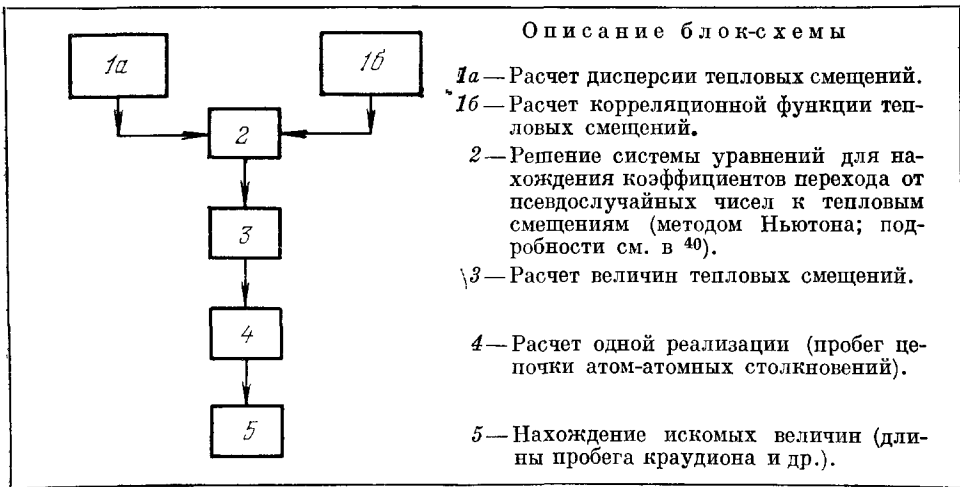
Как было показано Ван-Хове<sup>38</sup>, наиболее общие корреляционные зависимости в кристалле отражает функция парных корреляций в пространстве и времени  $G(\mathbf{r}, t)$ . В классическом случае она описывает среднюю плотность атомов в точке  $\mathbf{r}$  в момент  $t$ , если какой-либо атом находился в момент времени  $t = 0$  в начале координат  $\mathbf{r} = 0$ , т. е. описывает корреляции в положении двух различных атомов в различные моменты времени. Функция  $G(\mathbf{r}, t)$  близка к функции пространственных парных корреляций  $g(\mathbf{r})$ , если выполняется условие  $r_0/v \equiv t_1 \ll t_0$ , где  $r_0$  — радиус действия корреляций,  $t_0$  — характерное время корреляции,  $v$  — скорость распространения процесса. Для твердых тел  $r_0 \approx 10^{-8}$  см,  $t_0 \approx 10^{-13}$  сек<sup>39</sup>, откуда  $t_1/t_0 \approx 10^5/v$ , где  $v$  — в см/сек. Так как процессы радиационного повреждения распространяются со скоростями, намного превышающими скорость звука в кристалле, то  $t_1 < t_0$  и, таким образом, оправдано статическое приближение.

В связи с этим в работе<sup>37</sup> случайные, но пространственно скоррелированные в статическом приближении, тепловые смещения атомов в виде начальных условий введены в систему уравнений движения атомов из области «микрорешетки». После появления ПВА эти уравнения интегрируются на ЭВМ и, таким образом, формируется отдельная реализация случайного процесса. Для определения искомых величин (длин пробега, энергетических потерь и т. п.) проводится усреднение по результатам большого числа реализаций, т. е. по всем возможным при данной температуре кристалла тепловым смещениям. Следовательно, учет тепловых смещений оказывается возможным при одновременном использовании метода статистических испытаний (метод Монте-Карло) и модели Виньярда.

В работе<sup>37</sup> корреляционные функции случайных смещений атомов определялись с использованием дебаевского приближения. Структура общего моделирующего алгоритма приведена в табл. IV. Не приводится блок-схема расчета одной реализации из-за ее громоздкости, но в общих

Таблица IV

Блок-схема общего алгоритма моделирующего процесса динамики радиационного повреждения с учетом тепловых колебаний



чертах она напоминает уже приведенную ранее (см. табл. IV). Остановимся более подробно на полученных при этом физических результатах. С использованием упомянутого выше моделирующего алгоритма была решена задача <sup>40</sup> о распространении ветвей каскада соударений (цепочек коррелированных атом-атомных столкновений) в кристалле  $\alpha$ -Fe в широком интервале температур.

Было установлено, что с появлением тепловых колебаний в цепочках атом-атомных столкновений всех видов (динамические краудионы, фокусоны) возникает значительное усиление рассеяния энергии, что с повышением температуры приводит к существенному уменьшению длины пробега краудиона. Так, например, длина пробега краудиона, найденная без учета тепловых смещений, в  $\alpha$ -Fe в направлении  $\langle 111 \rangle$  для ПВА с энергией  $E_0 = 50$  эв равна  $22d$ , где  $d$  — межатомное расстояние. Этот же пробег при учете уже нулевых колебаний уменьшается до  $11d$ , а при  $T = 424$  °К сокращается еще до  $8d$ .

Поскольку механизм краудионов рассматривается как одна из причин возникновения устойчивых пар Френкеля, становится актуальным вопрос об устойчивости вакансии и внедренного атома, находящихся на столь малых расстояниях. Как показали Виньярд и др. <sup>3</sup>, вокруг вакансии существует (см. также гл. 4) так называемая зона аннигиляции, при попадании в которую междоузельный атом переходит в нормальное положение, а вакансия исчезает. При учете тепловых колебаний размеры зоны аннигиляции не вычислялись.

Но в то же время следует ожидать, что повышение температуры эту зону увеличивает. Если же теперь учесть уменьшение длины пробега краудиона с температурой, о котором говорилось выше, то приходим к выводу, что при высоких температурах краудионный механизм образования стабильных дефектов перестает, вообще говоря, «работать». В то же время при достаточно низких температурах значение этого процесса не вызывает сомнения.

В связи с вопросами, которые обсуждались выше, большой интерес представляют упоминавшиеся в разделе а) гл. 3 результаты экспериментов, выполненных Ломером и Пеппером <sup>32</sup>. Напомним, что в соответствии с результатами Виньярда <sup>3</sup> для  $\alpha$ -Fe пороговые энергии смещения для

разных кристаллографических направлений равны:  $E_d^{100} = 17$  эв,  $E_d^{111} = 55$  эв. В то же время Ломер и Пеппер получили значения  $E_d^{100} = 20$  эв и  $E_d^{111} = 30$  эв. Эти экспериментальные данные можно понять, если учесть результаты расчетов с учетом тепловых смещений.

Прежде чем переходить непосредственно к оценке энергии  $E_d$  на основании таких расчетов, заметим, что для определения величины  $E_d$  необходимо знать размер области спонтанной аннигиляции (см. раздел а) гл. 3). Относительно ее размеров в настоящее время имеется лишь та информация, которая содержится в работах Виньярда и др.<sup>1,3</sup>, где, однако, тепловое движение не принималось во внимание. В этих работах было показано, что в  $\alpha$ -Fe длина аннигиляции равна трем постоянным решеткам для направления  $\langle 111 \rangle$  и двум постоянным решеткам для направления  $\langle 100 \rangle$ . Поскольку в этих случаях длины аннигиляции весьма малы, так что в процессе аннигиляции принимает существенное участие небольшое количество атомов, вряд ли следует ожидать заметного влияния теплового движения на длину аннигиляции. Последнее связано с тем, что при низких температурах средняя кинетическая энергия атома в области аннигиляции велика по сравнению со средней тепловой энергией.

Поэтому, если принять, что при 25 °К (условия эксперимента Ломера и Пеппера) длины аннигиляции имеют такое же значение, как и найденные в работах<sup>1,3</sup>, то на основании результатов<sup>40</sup> получается, что при учете тепловых колебаний  $E_d^{(111)} \approx 26$  эв, а  $E_d^{100} \approx 18$  эв. Эти значения  $E_d$  находятся в согласии с данными эксперимента. Отметим также, что хорошее согласие с экспериментом полученных значений  $E_d$  свидетельствует также о том, что найденная в работе<sup>3</sup> величина области аннигиляции для  $\alpha$ -Fe при низких температурах правильна.

Отмеченное существенное сокращение длин пробега краудионов с повышением температуры должно приводить в этих условиях еще к одному эффекту, а именно, к пространственной локализации каскада соударений. Указанное обстоятельство затрудняет отток энергии из области каскада и должно способствовать образованию пиков, в известном смысле аналогичных обсуждавшимся ранее Зейтцем, Бринкманом и Кёлером.

#### в) Каскады соударений при высоких энергиях

Как показали Эргинсой и другие<sup>4</sup>, каскады, инициируемые первично выбитыми атомами с энергией менее 1,5 кэв, можно имитировать с помощью модели Виньярда. Однако большая часть повреждений, например, в реакторной технике, вызывается каскадами, инициируемыми ПВА с энергиями в диапазоне 1—1000 кэв. Если и в этом случае идти по пути, предложенному Виньярдом (что в принципе возможно), то мы столкнемся с трудностями, связанными с ограниченной памятью ЭВМ. Уже в процессе имитации каскада от ПВА с энергией 1 кэв приходится решать около 1500 уравнений движения, для каскада же, например, от ПВА с энергией 20 кэв, потребуется решить более 30 000 уравнений движения, и т. д. Все это вынуждает идти по пути поисков более простого, хотя, конечно, и более грубого подхода. Одним из таких подходов к решению обсуждаемой проблемы является машинная модель динамических процессов радиационных повреждений, особенно интенсивно разрабатываемая и используемая Билером и Беско<sup>2, 41-46</sup>.

В отличие от метода Виньярда, где решаются уравнения движения большого коллектива связанных атомов, упомянутые авторы моделируют высокоэнергетические каскады соударений, прослеживая ветвящуюся последовательность бинарных столкновений каждого из смещенных



атомов до полной его остановки\*). Предполагается, что в каждом случае участниками столкновения являются движущийся выбитый атом (в начале развития каскада — это ПВА) и атом-мишень, покоящийся на своем нормальном месте в кристаллической решетке. Направления выхода для сталкивающихся партнеров и энергия, переданная атому-мишени, точно рассчитываются в приближении бинарных, упругих соударений (все делается в рамках классической теории соударений<sup>48</sup>). Для описания соударений в металлах использовались потенциалы Эргинсоа, Виньярда и Энглерта<sup>3</sup> для  $\alpha$ -Fe и Гибсона, Голанда и Виньярда<sup>1</sup> для Cu. Потенциал, используемый в расчетах с вольфрамом, был сконструирован посредством комбинации потенциала Томаса — Ферми с потенциалом Джонсона<sup>49</sup> (см. рис. 1).

В методе Билера и Беско машина следит за траекторией ПВА до полной его остановки, запоминая при этом координаты, энергии и направления скорости всех тех атомов, которые были смещены в процессе движения ПВА. Затем ЭВМ аналогичным образом прослеживает и за траекториями вторичных смещенных атомов, третичных и т. д. При этом в первую очередь прослеживаются траектории наиболее быстрых атомов. Атом предполагается смещенным со своего места, если полученная им энергия выше пороговой<sup>43</sup>. В памяти ЭВМ места образования смещенных атомов фиксируются как вакансии, места же остановок выбитых атомов — как внедрения. Когда энергия смещенного атома становится меньше пороговой, атом искусственно останавливается в одном из ближайших к данной точке его движения атомных мест, которое выбирается в качестве центра «гантельной» конфигурации внедрения. Эта конфигурация формируется из подошедшего атома и атома, ранее занимавшего это место. Так как все данные о формировании дефектов записываются систематически в таблицу повреждения, это дает возможность проследить также и за внутрикаскадным радиационным отжигом.

Если вблизи «гантели» имеются вакансии, способные к спонтанной аннигиляции, то ближайшая из них выбирается в качестве партнера для рекомбинации. Если таковых нет, то внедрение принимается за стабильное и помещается в таблицу повреждения. Таким образом, в теории Билера и Беско модель каскада соударений допускает использование таких результатов моделирования низкоэнергетических каскадов, как значения пороговых энергий смещения, величины зон спонтанной аннигиляции, конфигурации внедрений, вакансий и их кластеров (см. разделы а) и б) гл. 3).

Обсудим основные результаты, полученные с помощью модели Билера — Беско для кубических металлов. Вид траекторий каскадов соударений, рассчитанных по модели ветвящихся бинарных соударений, приведен на рис. 4, где изображена плоская проекция сети траекторий в трехмерной решетке.

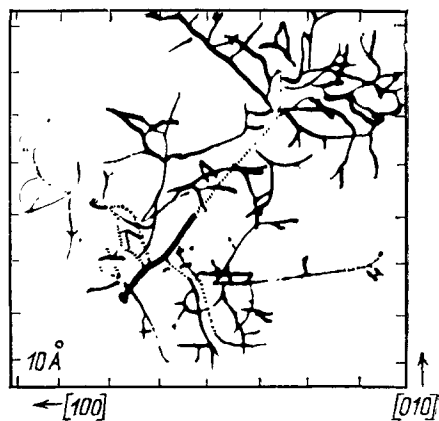


Рис. 4. Проекция траекторий выбитых со своих мест атомов в каскаде соударений в  $\alpha$ -Fe в плоскости (001)<sup>2</sup>.

Этот каскад инициирован ПВА с энергией 5 кэв, ушедшим со своего места в нижнем конце толстой сплошной линии. Точки — следы вторичных выбитых атомов. Сплошные тонкие линии изображают траектории выбитых атомов более высокого порядка.

\*) Это приближение для машинного моделирования впервые использовал Йошида<sup>47</sup> при изучении каскадов в бесструктурном Ge.

Как показано на рис. 4, размер области, охваченной каскадом, обычно определяется продвижением выбитых атомов более высоких порядков, а не первично и вторично выбитых атомов. В большинстве случаев энергия ПВА (в диапазоне  $0,5 \leq E \leq 25$  кэв) полностью передается вторичным атомам в пределах  $10-80 \text{ \AA}$  его продвижения в ( $\alpha$ -Fe и Cu). Нижний предел согласуется с результатами, полученными по модели Виньярда <sup>4</sup>.

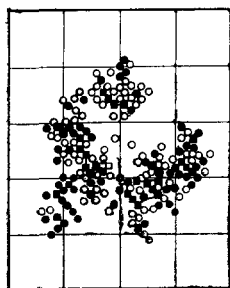


Рис. 5. Проекция соударившихся атомов в слое толщиной в две постоянные решетки на плоскость (001)<sup>2</sup>.

Сечение произведено через объем каскада соударений от ПВА с энергией 5 кэв (●, □ — атомы верхнего и нижнего слоя).

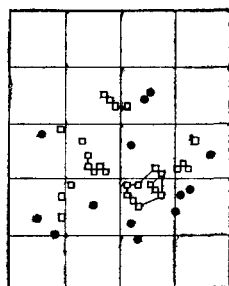


Рис. 6. Распределение вакансий (□) и внедрений (●) в результате каскада от ПВА с энергией 5 кэв<sup>2</sup>.

Интерес представляет пространственное распределение атомов, соударяющихся в процессе развития каскада (сюда входят все атомы, которые получают энергию). Послекаскадное распределение дефектов является прямым следствием этого распределения. Пример распределения соударяющихся атомов приведен на рис. 5, где изображено поперечное сечение объема, и где сосредоточены соударившиеся атомы для 5-кэв каскада.

На рис. 6 изображено в виде примера послекаскадное распределение дефектов: вакансий, внедрений и их кластеров, которое здесь является наиболее важным результатом. Данные о них приведены в табл. V—IX.

Таблица V

Объемы, охваченные каскадом атомных соударений в  $\alpha$ -Fe и меди (в единицах атомного объема)

Энергия ПВА, кэв	Объем, охваченный каскадом соударения		Энергия ПВА, кэв	Объем, охваченный каскадом соударения	
	$\alpha$ -Fe	Медь Cu		$\alpha$ -Fe	Медь Cu
0,5	300	450	10	4850	6 300
1	550	800	15	7150	9 250
2,5	1320	1750	20	9500	12 250
5	2550	3350			

Они имеют характер средних, полученных усреднением по большому числу (около  $10^2$ ) каскадов с одинаковыми начальными энергиями, но с разными начальными направлениями движения ПВА, каждый раз выбиравшихся случайным образом, исходя из равномерного распределения по углам.

При моделировании каскадов в области высоких начальных энергий ПВА (0,5—20 кэв) было обнаружено, что наибольшие из «эмбриональных»

Таблица VI

Доля общего числа вакансий, содержащихся в  $n$ -вакансионном кластере, для послекаскадного распределения дефектов в  $\alpha$ -Fe

Размер кластера ( $n$ -вакансий)	Энергия ПВА, $\kappa\text{эВ}$						
	0,5	1	2,5	5	10	15	20
1	0,352	0,326	0,328	0,336	0,350	0,356	0,351
2	0,208	0,194	0,211	0,191	0,202	0,193	0,203
3	0,129	0,125	0,125	0,145	0,135	0,129	0,131
4—6	0,254	0,243	0,196	0,244	0,202	0,196	0,203
7—9	0,057	0,112	0,090	0,057	0,072	0,079	0,070
$\geq 10$	0	0	0,04	0,057	0,039	0,047	0,042

Таблица VII

Доля общего числа вакансий, содержащихся в  $n$ -вакансионном кластере, для послекаскадного распределения дефектов в меди

Размер кластера ( $n$ -вакансий)	Энергия ПВА, $\kappa\text{эВ}$						
	0,5	1	2,5	5	10	15	20
1	0,377	0,362	0,350	0,372	0,378	0,384	0,392
2	0,200	0,225	0,222	0,213	0,200	0,214	0,218
3	0,160	0,129	0,129	0,136	0,135	0,139	0,131
4—6	0,213	0,200	0,205	0,180	0,203	0,185	0,180
7—9	0,030	0,070	0,059	0,068	0,053	0,048	0,052
$\geq 10$	0,020	0,014	0,035	0,031	0,031	0,030	0,027

Таблица VIII

Доля и среднее число вакансий в  $n$ -вакансионном кластере для низкоэнергетического и высокоэнергетического каскада в меди и  $d$ -железе

Металл и энергия ПВА, $\kappa\text{эВ}$	Размер кластера ( $n$ -вакансий)					
	1	2	3	4—6	7—9	$\geq 10$
Cu: 0,5—1	0,37	0,21	0,14	0,21	0,05	0,02
2,5—20	0,38	0,21	0,14	0,19	0,06	0,03
$\bar{n}$	1	2	3	4,6	7,7	12,3
Fe: 0,5—1	0,34	0,20	0,13	0,23	0,10	—
2,5—20	0,35	0,20	0,13	0,21	0,07	0,04
$\bar{n}$	1	2	3	4,7	7,7	12,2

кластеров, найденных в  $\alpha$ -Fe и Cu, были кластеры вакансионного типа и содержали они около 20 вакансий. В то же время кластеры междоузельных атомов были гораздо мельче: наибольшими в  $\alpha$ -Fe и W были три-вдвдрения, а в Cu — тетравдвдрения. Возможно, это явилось следствием того, что в исследуемых металлах пространственное распределение дефек-

Таблица IX

Доля общего числа внедрений в *n*-междоузельном кластере для послекаскадного распределения дефектов в  $\alpha$ -Fe и Cu

n	Энергия ПВА ( <i>кэв</i> )						
	0,5	1	2,5	5	10	15	20
$\alpha$ -Fe							
1	0,98	0,97	0,96	0,95	0,94	0,94	0,94
2	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,06	0,06
3	0	0	0,002	0,001	0,003	0,003	0,003
Cu							
1	0,97	0,95	0,93	0,92	0,90	0,90	0,91
2	0,03	0,05	0,07	0,07	0,09	0,09	0,08
3	0	0,003	0	0,01	0,01	0,01	0,01
4	0	0	0	0	< 0,001	< 0,001	< 0,001

тов имело вид ядра, обогащенного вакансиями, и оболочек, где располагались отдельные внедрения. Эта картина отвечает идеям Бринкмана о структуре пика смещений и Зеегера об «обедненной зоне».

Из табл. VI, VII ясно видны изменения, имеющие место в распределении по размерам вакансионных кластеров в зависимости от начальной энергии ПВА. Относительное суммарное число кластеров  $V(1) + V(2) + V(3)$ , усредненное по всем каскадам данной энергии, остается примерно постоянным. Эти конфигурации содержат 68% вакансий, образовавшихся в  $\alpha = \text{Fe}$ , и около 73% — в Cu.

Низкоэнергетическое распределение (0,5—2,5 *кэв*) «эмбриональных» кластеров по размерам, содержащих более чем три вакансии, отличается от высокоэнергетического (5—20 *кэв*) (см. табл. VII). В  $\alpha$ -Fe большие кластеры ( $\geq 10$  вакансий) существуют только в высокоэнергетическом распределении, и их среднее число увеличивается с энергией ПВА. Это приводит к большому разнообразию кластерных конфигураций при больших энергиях ПВА. Как уже указывалось, в диапазоне энергий ПВА, от 0,5 до 20 *кэв* междоузельные атомы образуют почти исключительно только одиночные внедрения, дивнедрения и тривнедрения. По крайней мере 99% внедрений, производимых в меди, падает на эти конфигурации. В  $\alpha$ -Fe в этих конфигурациях находится 99,5% внедрений.

Распределения «эмбриональных» кластеров внедрений по размерам в зависимости от начальной энергии ПВА приведены в табл. IX. Как указывает Билер<sup>50</sup>, проводивший сравнение выводов машинного эксперимента с экспериментальными исследованиями поврежденного состояния методом ионной микроскопии, хорошее качественное согласие имеется для ГЦК и ОЦК систем<sup>51, 52</sup>. Согласие имеет место для объема области повреждения при данной энергии ПВА, для распределений кластеров вакансий по размерам и для расположения вакансий в поврежденной области.

В заключение еще раз подчеркнем, что описанная выше модель и модель Виньярда в настоящее время являются основными машинными моделями изучения радиационных дефектов. Их особое значение состоит в том, что они позволяют изучать не только элементарные процессы радиационного повреждения (фокусоны, краудионы, зоны аннигиляции и т. д.), но и находить распределения кластеров различного рода по размерам.

В условиях облучения такого рода «эмбриональные» кластеры могут оказывать существенное влияние на ход различных физических процессов. В частности, в делящихся материалах именно их количество и распределение по размерам определяет механизм зарождения газовых пар (о кинетике газового распухания при гомогенном и гетерогенном зарождении газовых пор см. <sup>52</sup>).

### г) Каскады соударений в биатомных кристаллах

Разупорядочивающее действие облучения обсуждалось еще в работе Вигнера <sup>53</sup>. Наблюдалось же оно неоднократно для ряда упорядоченных сплавов (например,  $\text{Cu}_3\text{Au}$  и  $\text{Ni}_3\text{Mn}$  <sup>54</sup>). Одним из возможных процессов, объясняющих это разупорядочение, является распространение цепочек замещающих соударений. Это предположение стимулировало машинные расчеты динамических процессов радиационного повреждения в бинарных кристаллах. Моделирование динамики радиационного повреждения в бинарных кристаллах было предпринято Виньярдом <sup>25</sup> для  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , Торренсом, Чэддертоном и Морганом <sup>55, 56</sup> для щелочных галоидов, Джексоном, Легли и Эдвардсом <sup>57</sup> для  $\text{Fe}_3\text{Al}$ . Все эти авторы в своих расчетах использовали Брукхейвенский метод <sup>1</sup>.

Как уже отмечалось ранее, для бинарных кристаллов при использовании этого метода сразу же возникают трудности с выбором потенциалов взаимодействия. Не сообщая данных об использованных им потенциалах для упорядоченного  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , Виньярд <sup>25</sup> впервые отметил интересную особенность распространения цепочек атом-атомных соударений вдоль направления  $\langle 100 \rangle$  в этом сплаве. В направлении  $\langle 100 \rangle$  чередуются тяжелые атомы золота и легкие атомы меди. После соударения легкого атома меди с атомом золота первый совершает движение вперед — назад — вперед между двумя ближайшими атомами Au. Эти многократные толчки позволяют все же колеблющемуся атому Cu передать большую часть своей кинетической энергии атому Au, и цепочка соударений, вопреки первоначальным ожиданиям, уверенно распространяется вдоль  $\langle 100 \rangle$  при энергиях ПВА от 25 до 100 эв, приводя к заметному разупорядочению.

Более детальные расчеты для биатомных кристаллов провели Торренс, Чэддертон и Морган <sup>55, 56</sup>. Они исследовали движение ионов в кристаллах хлоридов калия и натрия. В хлориде калия щелочные и галоидные ионы приблизительно одинаковы по массе, а в хлориде натрия их массы примерно относятся как 2 : 1. «Микрокристаллит» модели содержал 1000 ионов. При моделировании взаимодействия ионов учитывались две составляющие: электростатическую силу (притягивающую или отталкивающую в зависимости от знака взаимодействующих ионов) и отталкивающую силу, появляющуюся за счет наложения замкнутых электронных оболочек соседних ионов. Электростатическая составляющая описывалась потенциалом

$$V(r)_{\text{электростат}} = \frac{\alpha e_1 e_2}{\epsilon r}, \quad (5)$$

где  $\alpha$  — поправка на поляризацию ионов (была приблизительно равна 0,5 для KCl и 0,64 для NaCl),  $e_1$  и  $e_2$  — заряды на ионах,  $\epsilon$  — статическая диэлектрическая постоянная (принималась равной 1 для ближайших соседей и 2 — для всех последующих).

Вторая составляющая описывалась потенциалом

$$V(r)_{\text{отталкив}} = \frac{\Lambda}{r^n}, \quad (6)$$

где  $n = 9$  для  $K^+ - K^+ =$ ,  $K^+ - Cl^- =$  и  $Cl^- - Cl^-$ -взаимодействий,  $n = 8$  для  $Na^+ - Cl^-$ -взаимодействий и  $n = 7$  для  $Na^+ - Na^+$ -взаимодействий. Величины  $\Lambda$  для каждого из потенциалов находились при подгонке равновесной ионной конфигурации в модельном кристалле к имеющейся в действительности.

Как показали моделирующие расчеты, пороговая энергия смещения для обеих солей анизотропна и имеет минимум около направления  $\langle 100 \rangle$ .

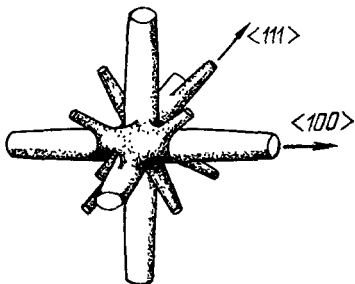


Рис. 7. Зависимость пороговой энергии смещения от направления движения иона в KCl<sup>58</sup>.

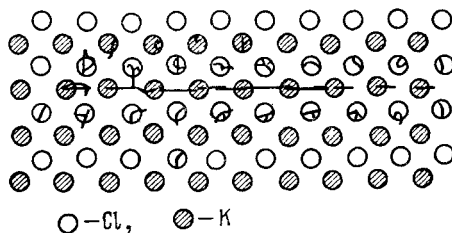


Рис. 8. Переход динамического краудина в статический.

Иону K сообщалась энергия в 30 эв под углом  $5^\circ$  к  $\langle 110 \rangle$ . Это привело к образованию симметричного внедрения в виде краудина на линии  $\langle 110 \rangle$  на расстоянии шести постоянных решетки от ПВА.

Порог этот примерно равен 25—30 эв для KCl (K и Cl) и изменяется в пределах от 20 эв (Na) и до 90 эв (Cl) для NaCl. В последнем случае скаывается большая разница масс ионов Na и Cl. По направлениям  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$  порог имеет максимум выше 150 эв (рис. 7). Разделение пары

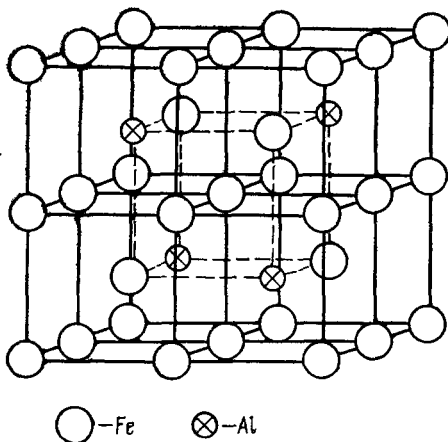


Рис. 9. Едини́чный блок сверхрешетки ( $Fe_3Al$ ).

вакансия — междуузельный атом происходит посредством цепочек замещения. Щелочные и галогенные ионы в обеих солях образовывали внедрения в виде конфигурации статического краудина вдоль  $\langle 110 \rangle$  (рис. 8).

Учитывая, что процесс смещения в ионных кристаллах представляет интерес с точки зрения образования центров окраски, Чэддертон, Морган и Торренс проверили несколько возможных механизмов их образования. В частности, с помощью ЭВМ была изучена возможность механизма, предложенного Варли<sup>58</sup>. Согласно Варли многократно ионизованный ион галогена вследствие сильного отталкивания от шести окружающих его щелочных ионов должен покинуть свое место прежнего расположения.

Чэддертон, Морган и Торренс<sup>55, 56</sup> в рамках своей модели получили результат, противоречащий механизму Варли. Движение многократно ионизованного иона происходило вдоль направлений  $\langle 110 \rangle$  и  $\langle 111 \rangle$ , но ожидаемых замещений не наблюдалось.

Последней, из известных авторам моделей динамики радиационных повреждений в бинарных сплавах, была модель Джексона, Легли и Эдвардса<sup>57</sup> для упорядоченного кристалла  $Fe_3Al$  (рис. 9). «Микрокристаллит»

содержал 559 атомов, связанных парными силами взаимодействия (Fe—Al, Fe—Fe). Взаимодействием Al—Al авторы пренебрегали из-за большого расстояния между этими атомами.

Были рассчитаны каскады соударений с различными энергиями и начальными направлениями скорости ПВА без учета тепловых колебаний. Как и в одноатомных кристаллах пороговая энергия, необходимая для формирования устойчивого атомного смещения в Fe<sub>3</sub>Al, оказалась сильно зависящей от направления движения ПВА. Так пороговая энергия в цепочке <100>, состоящей из атомов железа, оказалась равной 22 эв (ср. с величиной 17 эв в чистом α-Fe, найденной Эргинсом и др. <sup>3</sup>).

В направлении же <110> порог оказался равным 44 эв. Интересно, что и в α-Fe и в Fe<sub>3</sub>Al порог в направлении <110> оказался в два раза выше, чем порог в направлении <100>. Направление <111> в кристалле Fe<sub>3</sub>Al заметно отличается от направлений <110> и <100>, где цепочки атомов содержат только атомы железа или только атомы алюминия. Именно, цепочки <111> в Fe<sub>3</sub>Al содержат атомы алюминия, разделенные тремя атомами железа (рис. 10), так что для них должны существовать несколько (четыре) пороговых энергий смещения.

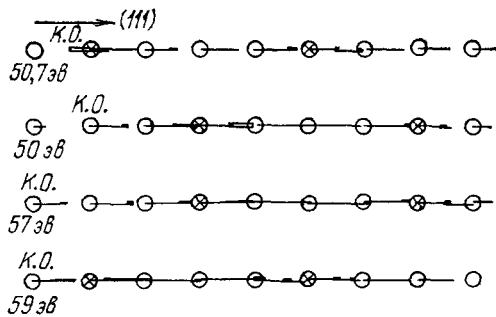


Рис. 10. Цепочки соударений в направлении <111> (Fe<sub>3</sub>Al).

Слева указаны энергии первично выбитых атомов (К. О. — кноск-он), основавших цепочки.

Оказалось, что независимо от исходного положения ПВА устойчивого смещения не происходит (вплоть до энергии 98 эв). Наибольшие по длине цепочки соударений развиваются, когда ПВА является атомами Fe. Во всех случаях присутствие атомов Al в цепочке препятствовало передаче энергии по ней. По сравнению со случаем чистого железа

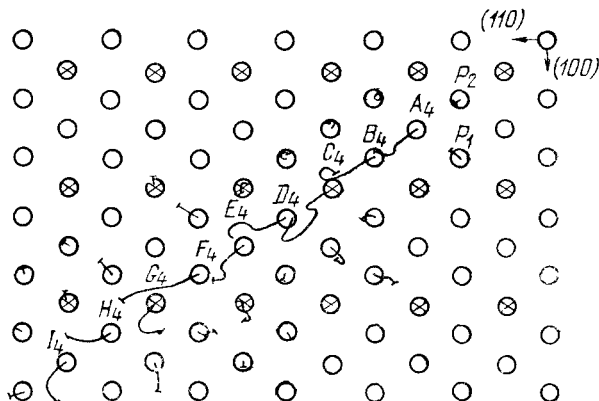


Рис. 11. Цепочка соударений в направлении <111> с начальной энергией  $E_0 = 107$  эв и начальным углом к оси цепочки  $\theta_0 = 1^\circ$  (Fe<sub>3</sub>Al).

для инициирования одинаковых по длине цепочек замещения в Fe<sub>3</sub>Al требовалась большая начальная кинетическая энергия. В случаях, когда ПВА были направлены под небольшими углами к оси цепочки, присутствие атомов Al всегда вызывало дополнительную дефокусировку (рис. 11).

Кроме того, дополнительная дефокусировка отмечалась и в случае, когда атом алюминия находился в «линзах» (в ближайшем окружении цепочки) (рис. 12), что обусловлено малостью массы атомов Al относительно атомов Fe (легкие атомы Al имеют большую тенденцию к смещению

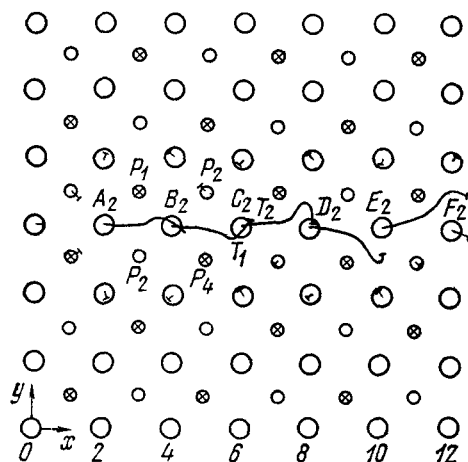


Рис. 12. Дефокусировка в направлении  $\langle 100 \rangle$  при начальной энергии  $E_0 = 107 \text{ эВ}$  ( $\text{Fe}_3\text{Al}$ ).

со своих нормальных мест в решетке, чем атомы Fe). В случае, когда цепочка соударений окружена попеременно атомами Al и Fe, вначале инициированная в направлении  $\langle 100 \rangle$ , она проявляла тенденцию к повороту в плоскость  $\langle 100 \rangle$ , где расположены ряды атомов Al.

Большинство цепочек соударений имеет место в направлениях  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$ , которые, как указывалось состоят полностью из атомов Al или Fe. Поэтому разупорядочение в этих направлениях оказалось малым. Ранее предполагалось, что наибольшее разупорядочение должно иметь место при распространении цепочек соударений в направлении  $\langle 111 \rangle$ , состоящем из атомов Al и Fe. Однако в действительности в этом направлении цепочка замещений возникает с трудом, поэтому и здесь разупорядочение оказалось небольшим (при энергиях до  $89 \text{ эВ}$ ).

В заключение следует отметить, что хотя приведенные выше результаты получены на трех разных типах бинарных кристаллов ( $\text{Cu}_3\text{Au}$ , щелочные галоиды и  $\text{Fe}_3\text{Al}$ ), во всех случаях наблюдаются общие закономерности. Как и в одноатомных материалах, окончательное статическое повреждение состоит из дефектов Френкеля, сформировавшихся в результате прохождения цепочек замещений (динамических крауддионов). Сами ПВА ни в одном из рассмотренных случаев не становятся внедрениями. Внедрения же формируются в виде гантельной конфигурации или статического крауддиона.

Пороговая энергия смещения обладает четко выраженной анизотропией, но по величине она выше, чем в одноатомных кристаллах, из-за неоднородности в атомном составе цепочек соударений. Эта же неоднородность ответственна и за дополнительную дефокусировку и за дополнительную анизотропию в распространении цепочек: цепочки в направлениях с однородным составом атомов имеют большие длины пробега, чем цепочки в направлениях с неоднородным составом.

Полученные результаты свидетельствуют, что динамическое разупорядочение создают только высокоэнергетические цепочки соударений



с дефокусировкой. При малых же энергиях в направлениях, где типы атомов чередуются, устойчивые замещения вообще отсутствуют. Экспериментально этот эффект должен приводить к отсутствию процесса разупорядочения при достаточно низких энергиях бомбардирующих частиц. Правда, сделанные выше выводы получены лишь без учета теплового движения атомов. Как это показано для одноатомных металлов (см. раздел б) гл. 3), роль тепловых колебаний может оказаться кардинальной, так что соответствующее обобщение рассмотренных в этом параграфе моделей необходимо.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ, ВОЗНИКАЮЩИХ В ПРОЦЕССЕ ОБЛУЧЕНИЯ, И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

В настоящее время дискретные машинные модели широко используются для моделирования атомных конфигураций дефектов, полей смещений вокруг них, взаимодействия дефектов, а также для определения других их важнейших характеристик.

Современная экспериментальная техника позволяет проводить непосредственное наблюдение дефектов кристаллической решетки и их скоплений (кластеров), появляющихся в результате облучения. Кластеры размером более 5–10 Å прямо наблюдаются с помощью электронной микроскопии на просвет (см. работы <sup>59–62</sup>). Главнейший недостаток этого метода связан с невозможностью наблюдать дефекты решетки диаметром меньше 5 Å. Не удастся определять тип дефектов, если их размеры достаточно малы, даже если их концентрации велики.

Часть этих затруднений снимается при использовании автоионного микроскопа, позволяющего наблюдать мелкие кластеры, отдельные вакансии и междоузельные атомы <sup>63–66</sup>, правда, только для материалов с высокими температурами плавления. Тем не менее применение этих двух методов а также результатов теории контраста изображения в трансмиссионном электронном и автономном микроскопах, позволило достичь определенных успехов в изучении дефектной структуры облученных образцов.

Установлено, что дефекты в облученном образце обладают сложным распределением по размерам (рис. 13), которое сильно зависит от условий облучения (температуры, дозы, вида излучения, энергетического спектра излучения) <sup>67, 69–71</sup>. Изменяясь по размерам, дефекты меняют свою форму. На микрофотографиях в области больших размеров они имеют форму колец. Более мелкие дефекты (менее 50 Å) видны в форме треугольников, квадратов или «черных точек».

Для того чтобы понимать, что же фактически видит экспериментатор, изучая дефектные структуры, необходимо уметь отождествлять наблюдаемые образования с конкретными атомными конфигурациями. Надежда на получение информации об этих конфигурациях, об эволюции конфигу-

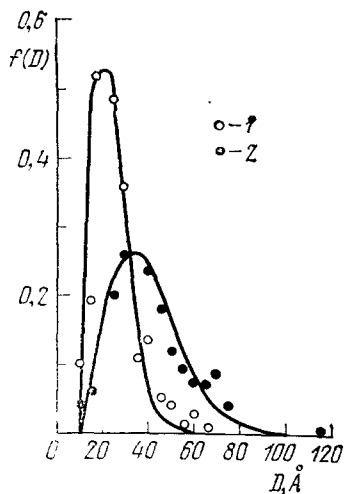


Рис. 13. Экспериментальное распределение вакансионных кластеров по размерам <sup>67</sup> для случаев облучения протонами с энергией 0,7 Мэв (1) и быстрыми нейтронами (2) удовлетворительно описываются (сплошные линии) распределением Рэлея:  $f(D) = A(D/\Delta^2) \exp(-D^2/2\Delta^2)$  ( $D$  — диаметр кластера,  $A$  и  $\Delta$  — постоянные) <sup>68</sup>.

раций с увеличением числа простейших дефектов, входящих в кластер, как раз и связывается ныне с возможностями дискретных машинных моделей.

Кроме того, от машинных моделей, естественно, следует ожидать информацию и о взаимодействии дефектов друг с другом. Знание же возможных реакций с участием дефектов могло бы пролить свет и на перестройку распределений дефектов в процессах облучения и отжига. Упомянутые выше надежды оказались в значительной мере оправданными.

#### а) Моделирование атомных конфигураций и определение основных характеристик радиационных дефектов

При моделировании атомных конфигураций дефектов наметились два основных направления: используются дискретные модели, в основе своей напоминающие уже рассмотренную нами модель Виньярда для динамических случаев радиационного повреждения<sup>1</sup> и модели, аналогичные использованной Джонсоном<sup>5-7, 49, 72-74 \*</sup>).

В первом случае в начальных условиях задается пробная конфигурация дефекта, тогда как атомы микрокристаллита принимаются покоящимися или, если пробная конфигурация симметрична, какому-нибудь атому придается небольшая начальная энергия, инициирующая дальнейшие перестройки. ЭВМ затем решает уравнения движения атомов до такого момента времени, пока фактически не достигается статическая конфигурация дефекта. Таким образом были исследованы конфигурации вакансий, внедренных атомов и их комплексов, стабильность пар Френкеля и др.

Гибсон, Голанд, Милграм и Виньярд<sup>1</sup> в целях экономии машинного времени и для более быстрого установления в микрокристаллите равновесной конфигурации дефекта предложили вводить искусственную диссипацию энергии. Когда полная кинетическая энергия системы достигает максимума, скорости всех атомов при той же конфигурации искусственно приравняются нулю, и так эта операция выполняется периодически (\*\*).

Так как точное значение этого максимума иногда трудно установить (из-за появления ложных всплесков на кривой спада энергии со временем), то искусственная диссипация может применяться и в несколько иной форме<sup>28, 79</sup>. Именно, кинетическая энергия всех атомов искусственно обращается в нуль в наперед заданные моменты времени (рис. 14).

После того как кинетическая энергия системы уменьшится примерно на три порядка, искусственное затухание удаляется и конфигурация дополнительным расчетом проверяется на устойчивость. Блок-схема типичного расчета атомной конфигурации дефекта по модели Виньярда приведена в табл. X.

Весьма популярная сейчас модель Джонсона отличается от модели Виньярда главным образом методикой численного расчета стабильных атомных конфигураций дефектов. Точно так же, как в модели Виньярда, атомы ограниченной области решетки «кристаллита» рассматриваются как взаимодействующие друг с другом частицы. Между атомами задается центральное парное взаимодействие  $\varphi_{ij}$  (см. табл. I), которое учитывается для соседей в двух ближайших координационных сферах.

\*) В создании этой модели приняли участие Хантингтон и Зейтц<sup>75</sup>, Эшелби<sup>76</sup>, Тьюворт<sup>77</sup>, Зеегер и Манн<sup>78</sup>, Джонсон и Браун<sup>72</sup>. Джонсон наиболее активно использует ее.

\*\*) Искусственная диссипация энергии не влияет на вид искомой стабильной конфигурации дефекта, а уменьшает характерное время релаксации системы к ней.

В модели Джонсона кристаллит окружен упругой средой, в которой размещены остальные атомы решетки. В отличие от динамической модели Виньярда, модель Джонсона может быть названа статической, поскольку в ней не рассматривается движение атомов, а методом итераций ищется лишь минимум потенциальной энергии системы.

С помощью упомянутых машинных моделей или их аналогов различными авторами рассчитан ряд простейших дефектов и их скоплений,

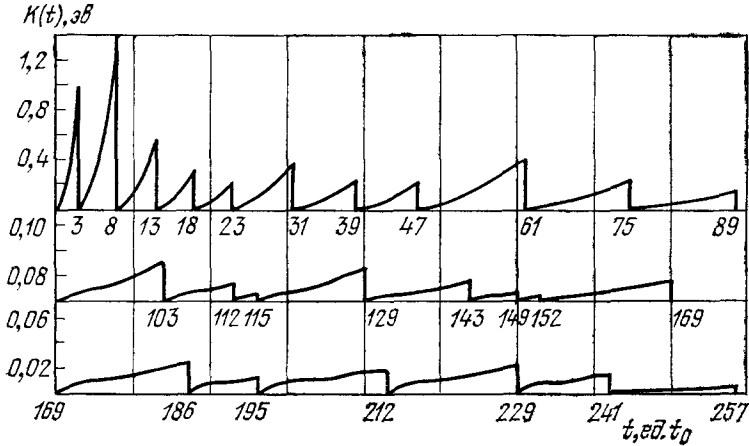


Рис. 14. Кинетическая энергия системы с искусственной диссипацией как функция времени ( $t_0 = 2,4 \cdot 10^{-15}$  сек) в задаче о комплексе из двух внедрений<sup>28</sup>.

наличие которых можно было ожидать в облученных материалах. В расчетах определялись следующие характеристики дефектов: атомная конфигурация, энергия связи кластеров, энергия активации перемещения, размеры дефектов, объемные изменения на один дефект и т. д. Имеющиеся результаты этих вычислений обширны. Для ряда простейших дефектов

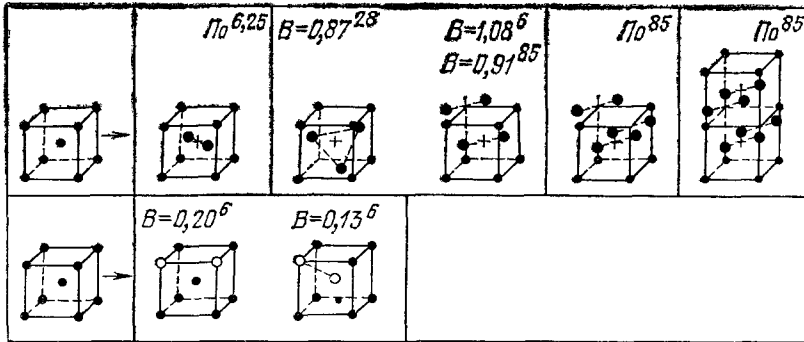


Рис. 15. Атомные конфигурации простейших дефектов в кристаллах с ОЦК решетками. В — энергия связи дефектов в кластере (эв), ● — атомы, принимающие участие в образовании междоузельного дефекта, ○ — вакансии. Смещения атомов окружения не показаны.

они представлены в табл. XI. На рис. 15 приведены атомные конфигурации простейших дефектов в ОЦК кристаллах. Дефектные структуры размещены в порядке увеличения числа элементарных дефектов, входящих в них. Следует сразу отметить, что это нельзя считать исчерпывающей характеристикой кластера, так как кластеры, даже обладающие одинаковым числом элементарных дефектов, могут отличаться атомной

Таблица X

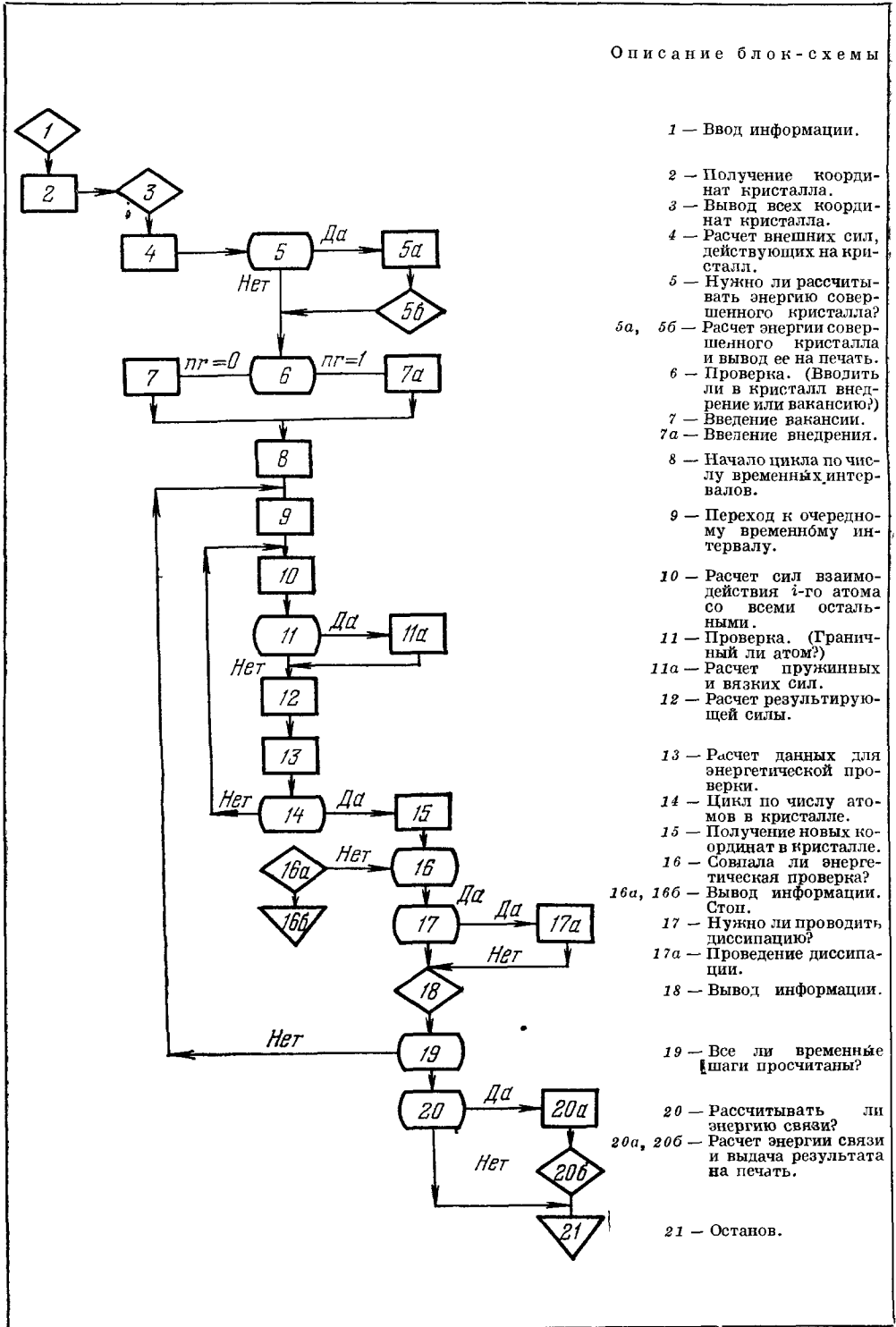
Блок-схема расчета атомной конфигурации вакансий, внедрения и их комплексов<sup>80</sup>

Таблица XI

Характеристики дефектов, найденные в результате моделирующих расчетов

Металл	Дефект											
	Вакансия			Дивакансия		Тривакансия		Тетравакансия	Одиночное внедрение			Дивнедрение
	$E_m$	$E_f$	$\Delta V$	$E_m$	$\Delta V$	$E_m$	$\Delta V$	$\Delta V$	$E_m$	$E_f$	$\Delta V$	$E_m$
Cu	0,42 <sup>72,73</sup>	0,40	0,53 <sup>81</sup>	0,07 <sup>73</sup>	1,0 <sup>81</sup>	0,66 <sup>82</sup>	1,5 <sup>81</sup>	1,5—2,0 <sup>81</sup>	0,05 <sup>72</sup>		2,20 <sup>72</sup>	0,26 <sup>72</sup>
$\alpha$ -Fe	0,68 <sup>82</sup>	0,68 <sup>6</sup>	0,66 <sup>82</sup>		0,1 <sup>6</sup>				0,33 <sup>6</sup>			0,18 <sup>6</sup>
$\gamma$ -Fe	1,32 <sup>5</sup>	1,49 <sup>5</sup>	0,78 <sup>6</sup>						0,15 <sup>5</sup>		4,08 <sup>5</sup>	
Ni	1,32 <sup>5</sup>	1,49										
	эксперимент	эксперимент										
	1,5 <sup>83</sup>	1,35 <sup>84</sup>										

$E_m$  — энергия активации перемещения дефектов ( $\text{эВ}$ ),  $E_f$  — энергия образования дефекта ( $\text{эВ}$ ),  $\Delta V$  — изменение объема кристалла на один дефект (в ед. ат. объема).

конфигурацией. Например, в ГЦК решетке кластер из двух внедренных атомов, как показали моделирующие расчеты<sup>25</sup>, обладает как минимум тремя устойчивыми атомными конфигурациями.

Атомная конфигурация кластера — наиболее важная его характеристика. В нее входит и описание атомов, находящихся в непосредственной близости от дефекта. Смещения этих атомов со своих мест в большинстве случаев анизотропны.

Особый интерес представляет эволюция конфигураций кластеров с увеличением их размеров. Наиболее последовательно этот вопрос изучался Баллоу и Перреном<sup>85</sup>. Используя модель  $\alpha$ -Fe, построенную по аналогии с моделью Виньярда и состоящую из блоков от 2000 до 5488 взаимодействующих атомов, они проследили эволюцию атомной конфигурации кластера из внедрений. Начальная стадия этой эволюции изображена на рис. 15.

Одиночное внедрение у них приняло конфигурацию «гантели» (расщепленного внедрения) в направлении  $\langle 110 \rangle$ , что подтвердило результат Виньярда<sup>25</sup>. Бивнедрение состояло из пары расщепленных внедрений с осями, параллельными между собой и параллельными направлению  $\langle 110 \rangle$ . Энергия связи бивнедрения оказалась равной 0,91 эВ, что ниже, чем у Джонсона<sup>6</sup> (1,08 эВ). На рис. 16, а приведена картина релаксации атомов вокруг бивнедрения в виде проекции атомной конфигурации на плоскость  $\{110\}$ . Как и в случае одиночного внедрения, наблюдается предпочтительная релаксация атомов вдоль направления  $\langle 111 \rangle$ .

Для кластера, состоящего из трех внедрений, найдено, что единственно стабильной конфигурацией для него является такая конфигурация, когда три параллельных расщепленных внедрения  $\langle 110 \rangle$  образуют пластинку в плоскости  $\{110\}$ . Это важный результат, так как он приводит к двумерной форме зародыша и определяет плоскость его зарождения. Расположение внедрений и релаксация атомов окружения показаны на рис. 16, б.

Выбор плоскости зарождения подтверждается, когда добавляются следующие внедрения (см. рис. 16, а — 19). Они продолжают пластинку в плоскости  $\{110\}$ , но при этом намечается тенденция удаления дефекта упаковки сдвигом в направлении  $[001]$ .

По мере роста пластинки дефект упаковки постепенно удаляется, пока для 16 внедрений полностью не исчезает, и пластинка становится совершенной дислокационной петлей с вектором Бюргера  $a/2 [111]$

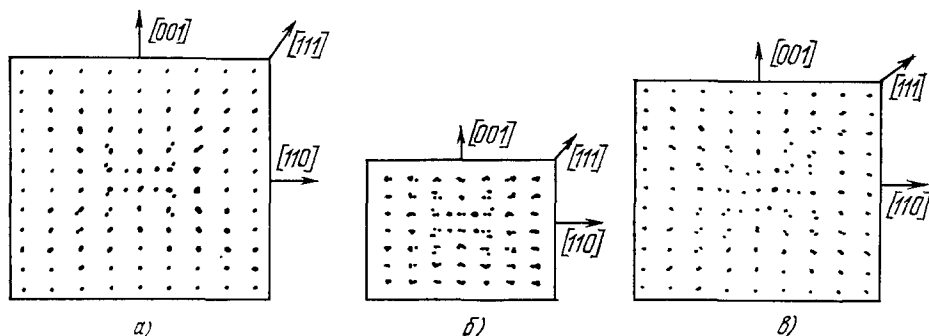


Рис. 16. Эволюция конфигураций междоузельного атома в  $\alpha$ -Fe<sup>85</sup>. а) Проекция на плоскость (110) атомов, смещенных вокруг бивнедрения; б) проекция на плоскость (110) атомов, смещенных вокруг тривнедрения; в) проекция на плоскость (110) атомов, смещенных вокруг кластера из четырех внедрений.

(см. рис. 18, 19). Такие петли внедрений действительно наблюдались после низкотемпературного облучения<sup>86-87</sup>.

Эволюция кластера вакансионного вида не исследовалась так последовательно, как это сделано Баллоу и Перреном для кластера междоузельного типа. Смоделировав ряд кластеров вплоть до пентавакансии, Виньярд<sup>81</sup> нашел, что объединение вакансий энергетически выгодно, т. е. вакансионные кластеры обладают положительной энергией связи. Кроме этого, он установил, что по мере роста вакансионного кластера увеличивается число стабильных конфигураций.

Анализ атомных конфигураций пентавакансий указывает на то, что возможны два пути дальнейшего роста вакансионных кластеров: или в виде дисков атомной толщины, или в виде объемных образований, служащих в дальнейшем зародышами пор. Первый путь развития исследовался в работах А. Н. Орлова, Р. Д. Дохнер и Ю. М. Плишкина, И. Е. Подчиненова.

Орлов и Дохнер<sup>88</sup>, используя модель, в своей основе напоминающую модель Джонсона, рассмотрели кластер из семи вакансий в плоскости (111) ГЦК кристалла. Начальные положения атомов, окружающих вакансионный кластер, они рассчитали в рамках теории упругости<sup>89</sup>. В этом расчете рассматриваемый кластер представлялся многогранной дислокационной петлей. Атомы, удаленные от ядра дефекта, фиксировались в своих положениях, а равновесные координаты атомов ядра дефекта определялись путем минимизации энергии совокупности этих атомов, взаимодействие которых описывалось потенциалом Морзе. Минимизация производилась на ЭВМ.

В результате расчетов было найдено, что смещения слоя атомов, непосредственно примыкающих к комплексу вакансий, перпендикулярные его плоскости  $u_x$ , таковы, что происходит сильное сближение атомных плоскостей, смежных с плоскостью кластера. Расстояние между ними ( $d_1$  на рис. 20, а) становится равным  $1,3d$  ( $d$  — нормальное меж-

плоскостное расстояние). Смещения же атомов, параллельные плоскости кластера  $u_r$ , значительно меньше по величине и вблизи пластинки меняются немонотонно с расстоянием (рис. 20, б).

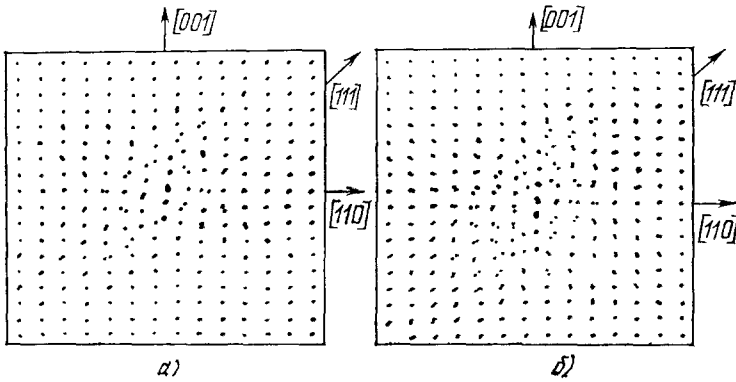


Рис. 17. Эволюция атомной конфигурации междоузельного кластера в  $\alpha\text{-Fe}^{85}$ . Проекция на плоскость (110) атомов, смещенных вокруг кластеров, состоящих из девяти атомов (а) и 16 атомов (б) внедрения. В последнем случае атомы границы сдерживаются на своих местах <sup>85</sup>.

Энергия образования кластера из семи вакансий  $E_f^7 = 18,94 \text{ эв}$ , а энергия связи  $E_B^7 = 6,22 \text{ эв}$ . Обладая такой значительной энергией связи, данный кластер является стабильным дефектом и может в дальнейшем служить зародышем призматической дислокационной петли.

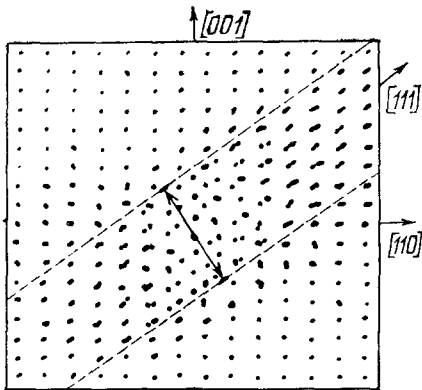


Рис. 18. Кластер из 16 внедрений в  $\alpha\text{-Fe}$ , когда граничное сдерживание удаляется и атомы границы упруго смещаются <sup>85</sup>.

Пластина из внедрений становится дислокационной петлей, которая понижает свою энергию скольжения в {111} поворотом в  $B'D'$ .

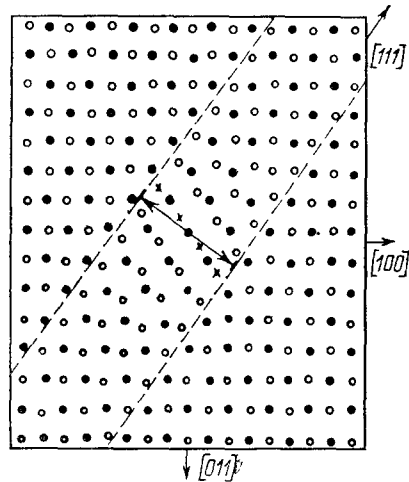


Рис. 19. Разрез атомной конфигурации кластера из 16 внедрений в  $\alpha\text{-Fe}$  (по (011)-поверхности призмы скольжения <sup>85</sup>).

Окончательное положение стороны петли. ● — атомы верхней плоскости; ○ — атомы нижней плоскости.

Подобные расчеты были проведены также для шестиугольного кластера большего радиуса, образованного из данного удаления следующего ряда атомов, т. е. состоящего из 19 вакансий. Они привели к аналогичным результатам, причем  $d_1 = 1,1$  (см. рис. 20). Это означает, что при-

лежащие плоскости столь близки, что возникшее образование можно рассматривать как сформулированную дислокационную петлю.

Такой же, состоящий из 19 вакансий, кластер, был рассчитан с помощью модели Виньярда Плишкиным и Подчиненовым<sup>90</sup>. Расчет атомной

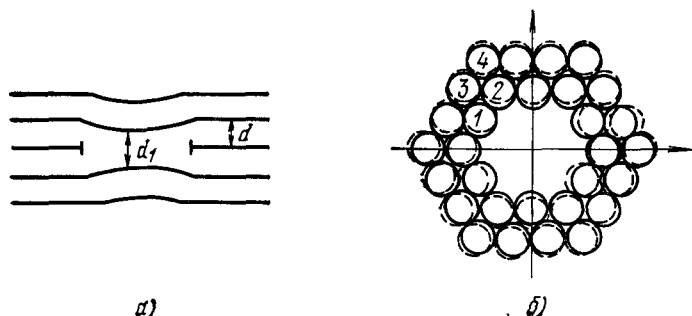


Рис. 20. Смещения атомов, окружающих кластер из семи вакансий<sup>90</sup>. а) Деформация плоскостей {111} вблизи кластера ( $d$  — нормальное межплоскостное расстояние,  $d_1$  — расстояние между плоскостями, соседними с плоскостью вакансионного диска); б) участок плоскости {111}, содержащей кластер. Штриховой линией показаны смещения атомов. Смещения в единицах межатомного расстояния: 1 — 0,040, 2 — 0,029, 3 — 0,014 и 4 — 0,011.

конфигурации показал, что вдоль границы вакансионной плоскости возникает призматическая дислокация. В отличие от решения, полученного Орловым и Дохнер и дающего однотипное направление смещения атомов (от центра в плоскости дефекта и к центру в соседних плоскостях),

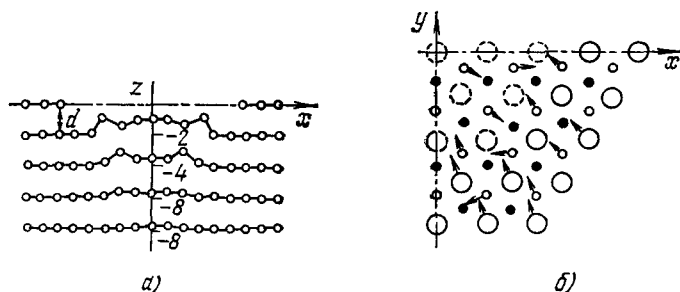


Рис. 21. Смещения атомов вокруг вакансионного кластера из 19 вакансий<sup>90</sup>. а) Проекция на плоскость, перпендикулярную к плоскости скопления. (расстояния указаны в Å); б) проекции атомов плоскостей, лежащих выше (малые светлые кружки) и ниже (темные кружки) плоскости дефекта (штриховые кружки соответствуют вакансиям).

модель Виньярда привела к довольно сложной геометрии смещений (рис. 21), которая напоминает картину смещения атомов вокруг одиночной вакансии, когда атомы в разных координационных сферах имеют разные знаки смещения.

#### б) Взаимодействие дефектов

Среди расчетов, моделирующих статическое взаимодействие дефектов между собой, первыми были расчеты по изучению стабильности пары Френкеля в  $\text{Cu}^1$ , а затем и в  $\alpha = \text{Fe}^3$ . С помощью модели Виньярда вначале рассчитывалась конфигурация внедренного атома («гантельная» конфигурация). Затем одно из решеточных мест в соседстве с внедренным атомом освобождалось (создавалась вакансия), и последующие расчеты, уже для пары Френкеля, выполнялись с полученными так начальными условиями.



Таким образом, было установлено (для  $\alpha$ -Fe), что все так образованные близкие пары неустойчивы относительно рекомбинации при любой ориентации линии, соединяющей вакансию и центр масс «гантельной» конфигурации внедрения. Все вторые соседи оказались также неустойчивыми относительно рекомбинации (рис. 22). Если же ось дефекта лежала в плотноупакованном направлении  $\langle 111 \rangle$ , минимальное удаление дефектов стабильной пары было особенно большим. Для меди ситуация была аналогична.

Взаимодействие точечных дефектов с дислокационными петлями моделировалось Дохнер<sup>91</sup> и Плишкиным и Подчиновым<sup>90</sup>. Дохнер, используя метод моделирования, который ранее использовался для определения конфигурации вакансионного кластера<sup>88</sup>, исследовала взаимодействие зародыша призматической дислокационной петли, состоящего из семи вакансий в плоскости  $\{111\}$  ГЦК кристалла, с вакансией на малых расстояниях.

В расчетах определялась энергия взаимодействия вакансии с кластером, состоящим из  $n$ -вакансий. Эта энергия равна (с обратным знаком) энергии их связи  $E_B^i$  ( $i$  — номер узла, в котором находится вакансия):

$$E_B^i = E_f^{1,0} - E_f^{1,i}, \quad (7)$$

т. е. равняется разности энергий образования одиночной вакансии ( $E_f^{1,0}$ ) и вакансии при наличии дефектного кластера (дислокационной петли) ( $E_f^{1,i}$ ).

Анализ проведенных расчетов показал, что энергию взаимодействия можно приближенно аппроксимировать аналитически для  $0 \leq \theta \leq \pi$  ( $\theta$  — полярный угол относительно контура дислокации):

$$E_B(r, \theta) = Ar^{-n} (1 - B \sin \theta), \quad (8)$$

где  $r$  — величина радиуса-вектора, проведенного из вакансии на линию дислокации. Для меди  $A = 0,575 \text{ эв}$ ,  $n \approx 2,2$ ,  $B = 0,46$  ( $r$  — в единицах ближайшего межатомного расстояния).

По найденной в работе<sup>91</sup> зависимости  $E_B(r, \theta)$  можно установить, что энергия связи вакансионного кластера с вакансией, расположенной около центра кластера в соседней с ним плоскости, мала, и, таким образом, петле энергетически более выгодно присоединять вакансии в своей плоскости, чем в прилегающих к ней плоскостях около ее центра (что привело бы к перестройке петли в объемное скопление вакансий). Таким образом, как и следовало ожидать, вакансии стремятся в сжатые участки окружения, а не в растянутые. Сама же призматическая дислокация за счет такого характера взаимодействия имеет тенденцию к росту в своей плоскости, а не к перестройке в поры.

Плишкин и Подчинов<sup>90</sup>, используя модель Виньярда, рассмотрели взаимодействие вакансии с кластером, состоящим из 19 вакансий и расположенного в плоскости  $\{111\}$  ГЦК решетки, и получили аналогичные результаты.

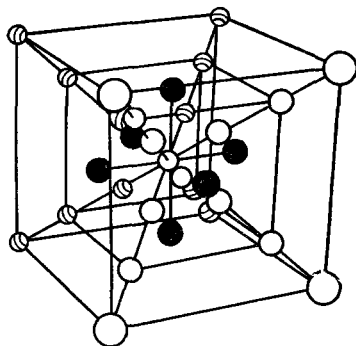


Рис. 22. Область рекомбинации пары Френкеля в  $\alpha$ -Fe при  $0^\circ\text{K}$ . В центре куба расположена вакансия. Внедрения, расположенные в одном из 24  $\langle 111 \rangle$ -положений (светлые шары) или в шести из  $\langle 100 \rangle$ -положений (темные шары), будут рекомбинировать с ней.

Модель Вицьярда, как уже указывалось, позволяет моделировать как каскады, так и структурные дефекты. Это дает возможность рассмотреть реакции динамических краудионов и фокусонов с различного рода структурными дефектами, что весьма важно для анализа радиационных повреждений при больших дозах.

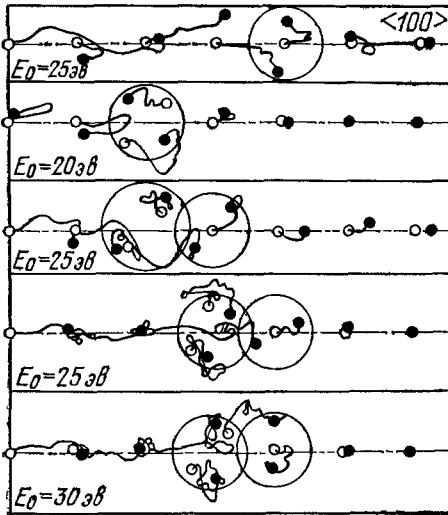


Рис. 23. Взаимодействие динамического краудиона с различной начальной энергией с внедренным атомом<sup>30</sup>.

В верхней атомной цепочке «гантель» отсутствует. Движение атомов окружения не показано.  $\theta_0 = 3^\circ$ .

почки соударений, как это показано на рис. 23. В таком возмущенном атомном ряду было рассчитано несколько серий атомных соударений с различными начальными энергиями ПВА.

Как показали моделирующие расчеты, реакция динамического краудиона с «гантелью» сильно зависит от энергии ПВА. До определенного порога (энергия атома цепочки соударений, ближайшего к «гантели»,  $E \approx 13$  эв) цепочка замещений, подойдя к «гантели», отражается от нее и прерывает свое продвижение, отдавая энергию на переход «гантели» в другую плоскость (см. рис. 23). «Гантель» в этом случае служит своеобразным экраном, так как дальнейшая передача энергии по цепочке на ней практически обрывается.

Выше указанного порога энергии динамического краудиона уже хватает, чтобы преодолеть «гантель», чаще всего производя замещение одного из ее атомов и выталкивая его в соседнюю ячейку. Это, однако, также приводит к прерыванию динамического краудиона и к образованию комплекса из двух внедренных атомов (две «гантели» в соседних ячейках). Такая конфигурация комплекса метастабильна, и комплекс со временем переходит в более стабильную конфигурацию, изображенную на рис. 15.

Аналогично рассчитывались и реакции с вакансиями. Было установлено, что реакция динамического краудиона с вакансией также является энергетически зависимой. До определенного энергетического порога (энергия атома цепочки соударений, ближайшего к вакансии,  $E \approx 1,5$  эв) динамический краудион, подойдя к вакансии (рис. 24), не может ее преодолеть и, аннигилируя с ней, прекращает свое продвижение.

Если сравнить кристалл с вакансией до и после прохождения динамического краудиона, приходим к выводу, что основным результатом

этой возможности и рассмотрели взаимодействие цепочек атом-атомных соударений с междуузельным атомом и вакансией в ОЦК решетке ( $\alpha$ -Fe)<sup>30</sup>, применяя моделирующий алгоритм, описанный ранее (см. гл. 3).

Дефекты были помещены в область прохождения динамического краудиона, что представляет наибольший интерес с точки зрения ожидаемых физических эффектов. В частности, междуузельный атом помещался в микрокристаллит в виде «гантельной» конфигурации. В микрокристаллите в качестве начальных условий использовалась ранее рассчитанная равновесная конфигурация, включающая смещения окружающих «гантель» атомов. «Гантель» помещалась на разных расстояниях по отношению к первому атому цепочки соударений, как это показано на рис. 23.

такой реакции оказывается фактически перемещение вакансии из ее первоначального положения в положение, отвечающее началу цепочки соударений. Таким образом, краудион перебрасывает вакансию за очень короткое время и на несколько постоянных решетки.

С увеличением энергии динамический краудион преодолевает вакансию, не захлопывая ее, и продолжает свое продвижение. В этом случае при одной и той же начальной энергии ПВА «гантельное» внедрение

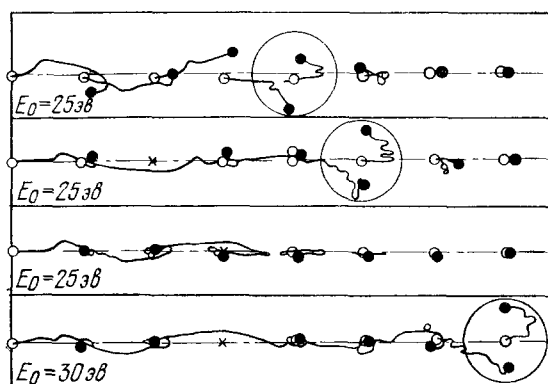


Рис. 24. Взаимодействие динамического краудиона с различной начальной энергией с вакансией (X)<sup>30</sup>.

В верхней атомной цепочке вакансия отсутствует. Движение атомов окружения не показано.  $\theta_0 = 5^\circ$ .

образуется на одно межатомное расстояние, дальше, чем в случае без вакансии (последнее было подтверждено также Михлиным и Нелаевым для меди<sup>92</sup>). При этом, если вакансия первоначально находится вблизи начала цепочки, то образуется комплекс из двух вакансий. Случаи, когда динамический краудион преодолевает вакансию, но не выносит внедрение за пределы ее зоны спонтанной аннигиляции, естественно, сводится к первому типу реакции.

Позднее были произведены моделирующие расчеты реакций динамических краудионов с двойниковыми границами, тяжелыми примесями<sup>93</sup> и выделениями второй фазы<sup>94</sup>. В первом случае «наблюдались» остановки динамических краудионов на препятствии — дефекте и выпадение внедренных атомов. Это напоминало рассмотренные выше реакции взаимодействия динамических краудионов с междоузельными атомами. В перечисленных случаях (междоузельного атома, двойниковой границы, и тяжелой примеси) наблюдается как бы декорирование указанных дефектов внедренными атомами.

В случае выделений второй фазы (при этом были рассмотрены реакции краудионов с зонами Гинье — Престона; см.<sup>94</sup>) было отмечено их растворение в процессе облучения за счет переноса вещества второй фазы динамическими краудионами. Последнее было обнаружено и в экспериментах на реакторе<sup>94</sup>.

Выше мы остановились лишь на основных результатах и направлениях исследований дефектов и их взаимодействий. В настоящее время эта область машинного моделирования представлена обширной литературой, к которой мы и отсылаем читателя (вакансии<sup>6, 72, 95-99</sup>, внедрения<sup>6, 74, 99, 100</sup>, примеси<sup>7, 99, 101-103</sup>, дислокации<sup>104-116</sup>, свободные поверхности<sup>99</sup>, поры<sup>99</sup>, выделения<sup>7, 99, 101-103</sup>, антифазные домены и антифазные границы<sup>50, 117</sup>, здесь везде идет речь о статическом взаимодействии дефектов).

## 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОТЖИГА

«Эмбриональное» распределение по размерам и в пространстве дефектов, оставшихся на месте прохождения каскадов соударений, со временем в результате процессов отжига претерпевает значительные изменения. Во время облучения каскады соударений непрерывно иницируются в облучаемом материале, и одновременно происходит отжиг существующего дефектного распределения как термическими, так и радиационно стимулированными движущими силами.

Учитывая последнее, при имитации процессов отжига их удобно разделять (что и делается в большинстве работ) на радиационный и термический отжиг. Первый, как известно, при низкотемпературном облучении приводит к насыщению в изменении свойств облучаемого материала с дозой. Термический отжиг обуславливается термически активируемым взаимодействием дефектов и, следовательно, особенно важен при более высоких температурах.

## а) Р а д и а ц и о н н ы й о т ж и г

Купер, Кёлер и Маркс<sup>118</sup> первыми отметили наличие радиационного отжига в экспериментах с дейтронным облучением благородных металлов при 10 °К. Они предложили для эффективной скорости изменения концентрации пар Френкеля (число пар Френкеля на атом решетки) следующее соотношение:

$$\frac{dn}{dt} = J_0(1 - \beta n), \quad (9)$$

где  $J_0$  — скорость производства дефектов (пар Френкеля), обусловленная бомбардировкой,  $\beta J_0$  — вероятность того, что существующая пара Френкеля аннигилирует с какой-либо иной парой. Если в приведенном соотношении  $J_0$  и  $\beta$  считать константами, то

$$n = \frac{1}{\beta} [1 - \exp(-J_0 \beta t)]. \quad (10)$$

Это означает, что должна существовать определенная концентрация насыщения  $n_{\max} = 1/\beta$  дефектами Френкеля. Радиационный отжиг объясняется спонтанной (а не термически активируемой) рекомбинацией вакансий и междоузельных атомов; они взаимно уничтожаются, если расстояние между ними становится меньше определенной критической величины. Если исходить из наличия такой области спонтанной рекомбинации (см. гл. 4), то необходимо уметь связать именно с ней величину  $\beta$ .

Люк и Зицман<sup>119</sup> для случая электронного облучения, когда образуются отдельные пары Френкеля, связали величину  $\beta$  с размером области спонтанной рекомбинации следующим образом. Когда все вакансии и междоузельные атомы, образованные бомбардирующим потоком, находятся на достаточно больших расстояниях друг от друга, общая концентрация нестабильных мест в решетке равняется сумме величин  $i\alpha_0$  ( $i$  — число междоузельных атомов на атом в решетке,  $\alpha_0$  — объем области спонтанной рекомбинации) и  $v\alpha_0$  ( $v$  — число вакансий на атом в решетке). В действительности же некоторые вакансии располагаются настолько близко друг к другу, что их области спонтанной рекомбинации перекрываются.

То же справедливо и для междоузельных атомов. Таким образом, величина  $\alpha_0$  должна быть заменена функцией  $\alpha(v, i)$ , которая падает с увеличением концентрации дефектов. Для того чтобы определить эту функцию, в работах<sup>119-121</sup> были использованы методы машинного моде-

лирования, причем рекомбинация задавалась, если сравнить со сказанным в гл. 4, весьма упрощенно. Именно, предполагалось, что область рекомбинации имеет вид куба со стороной, равной шести межатомным расстояниям ( $\alpha_0 = 7^3 = 343$ ). Расчеты процесса отжига проводились в микрокристаллите — трехмерной кубической решетке с числом атомов, достигавшим  $101^3$ .

Используя генератор случайных чисел, сначала находились пространственные координаты вакансий (их полное число определяется заданной дозой). Затем формировались стабильные пары Френкеля, т. е. находились таким же образом и координаты соответствующих внедрений. Предполагалось при этом, что расстояние вакансии — междоузельный атом каждой устойчивой первичной пары Френкеля, случайно, и изменяется в пределах 4—21 периода решетки. Таким образом, не учитывались первичные нестабильные пары Френкеля, у которых расстояние вакансии — внедрение находилось внутри  $\alpha_0$ .

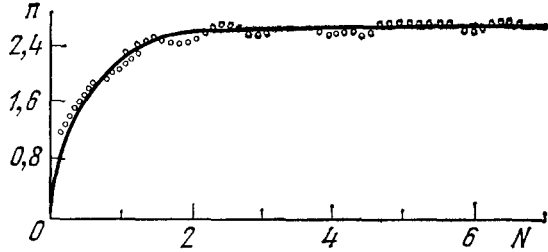


Рис. 25. Концентрация оставшихся дефектов  $n$  как функция дозы облучения <sup>121</sup>.

Если по мере увеличения числа пар Френкеля в рассматриваемом объеме координаты, вновь появившегося внедрения попадали в пределы области рекомбинации уже существующей вакансии, то соответствующие дефекты считались рекомбинированными. На рис. 25 показана зависимость от дозы числа «выживших» пар Френкеля, полученная указанным выше способом. По осям координат отложены:  $N$  — полное число первоначально образовавшихся пар Френкеля (величина  $N$  пропорциональна дозе облучения) и  $n$  — оставшаяся часть тех дефектов Френкеля, которые «выжили» после радиационного отжига. При облучении с постоянной скоростью доза  $N = at$ , где  $a = \text{const}$ .

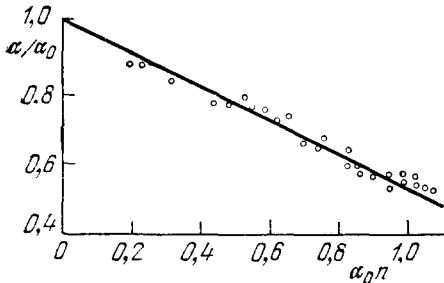


Рис. 26. Зависимость эффективного размера области спонтанной рекомбинации  $\alpha/\alpha_0$  от концентрации дефектов <sup>121</sup>.

этой зависимости функцию  $\alpha = \alpha(n)$  (рис. 26). Результаты расчетов для  $\alpha$  могут быть представлены в виде

$$\alpha/\alpha_0 = 1 - 0,47\alpha_0 n \quad (\alpha_0 n \leq 1). \quad (11)$$

Использование этой, найденной в машинных расчетах, зависимости подтверждается экспериментальными результатами Баларина и Хаузера <sup>122</sup>.

Аналогичный метод был использован в работе <sup>123</sup> для изучения радиационного отжига при нейтронном облучении. В то время как при электронном облучении можно считать, что в основном образуются пары Френкеля, в случае нейтронного облучения необходимо учитывать также

и более сложные дефектные структуры, их геометрию и распределение, образовавшиеся после прохождения каскадов соударений Люк, Брадач, Цицман<sup>123</sup> в своей модели приняли во внимание найденные Яном<sup>124-125</sup> особенности дефектной структуры, которая имеет место после прохождения одиночного каскада

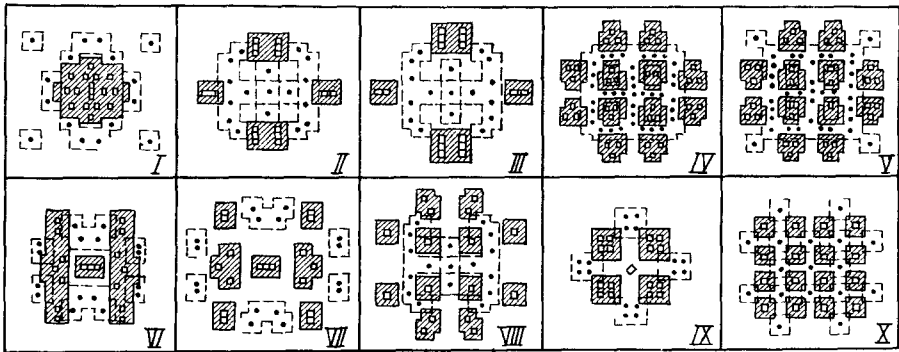


Рис. 27. Послекаскадные структуры (до радиационного отжига), использованные для моделирующих расчетов.

Схемы изображают структуру каскадов в золоте (I—III), меди (IV—IX) и алюминии (X) согласно расчетам Яна. Структуры меняются от гетерогенных (I) до гомогенных (X) ● — внедрения □ — вакансии, обведенные зоны рекомбинации

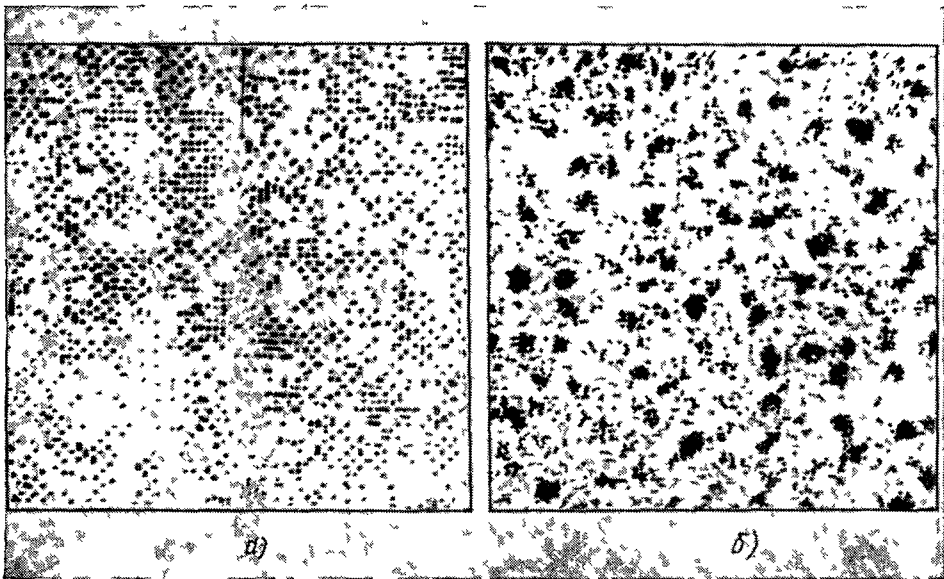


Рис. 28. Картины распределения дефектов при дозе  $\alpha_0 N = 5,31$  и концентрации дефектов  $\alpha_0 n = 1,47$  для Al каскада (а) и для Au-каскада (б).

Темные кружки — вакансии, светлые — внедрения

Согласно Яну в изолированных каскадах вакансии распределены по меньшему объему, чем внедрения. Это разделение дефектов разных типов заметнее для более жестких потенциалов межатомного взаимодействия. Поэтому различным металлам присущи различные послекаскадные структуры (рис. 27). Послекаскадные структуры (для одного каскада)

в золоте и алюминии, например, очень сильно отличаются: в алюминии — это гомогенная смесь вакансий, а в золоте внедрения располагаются вокруг группирующихся вакансий.

Если в случае электронного облучения радиационный отжиг возникал при наложении пар Френкеля, то при нейтронном облучении ЭВМ позволяет рассмотреть дефектные структуры «выживающие» после наложения различных послекаскадных структур (\*). При этом удается выявить влияние вида послекаскадных структур на результаты радиационного отжига. Полученные результаты наглядно демонстрируют влияние вида послекаскадных «затравочных» структур на общее распределение дефектов после отжига. Один из

примеров такого влияния приведен на рис. 28. Так как послекаскадные структуры (до отжига) в алюминии и золоте различны (см. рис. 27), различными оказываются также и последствия радиационного отжига. Именно, при одной и той же дозе облучения распределения дефектов после отжига в объеме кристалла для Al и Au оказываются качественно различными (для Al — гомогенное, а для Au — гетерогенное распределение дефектов).

Зависимости концентраций «выживших» дефектов от дозы также оказались чувствительными к послекаскадной структуре (рис. 29). Это указывает на то, что многочисленные расхождения в дозовых зависимостях свойств облученных образцов различных материалов, по крайней мере частично, возникают из-за разной структуры в них послекаскадных повреждений.

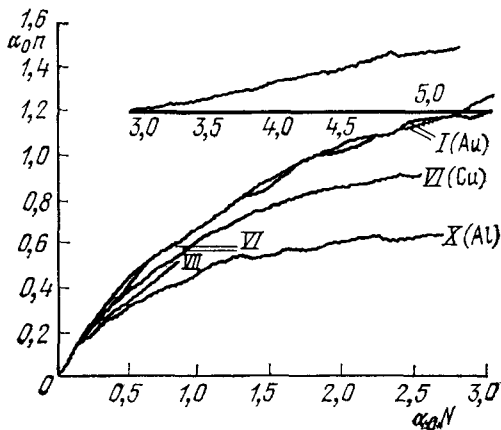


Рис. 29. Зависимости от дозы для некоторых послекаскадных структур (см. рис. 27). Для каскадов I и VI было проведено по два расчета.

### б) Термический отжиг

Машинную модель, имитирующую термический отжиг «эмбрионального» радиационного повреждения, предложил Билер<sup>50</sup>. В модели Билера предполагаются известными энергии активации перемещения различного рода дефектов при учете их взаимодействия друг с другом. Вообще говоря, такие данные могут быть получены независимо (см., например, гл. 4), используя разобранные выше методы машинного моделирования. Различного рода дефекты обладают разными энергиями активации и, следовательно, разными средними временами перемещения.

В модели Билера в приближении средних времен перескоков ЭВМ прослеживает эволюцию заданного в начальный момент времени «эмбрионального» распределения дефектов, принимая во внимание возможность их случайного блуждания, слияния и развала (выбор дефекта из ансамбля и направление его перескока «разыгрывает» в течение всего времени отжига генератор случайных чисел). Полная блок-схема алгоритма Билера,

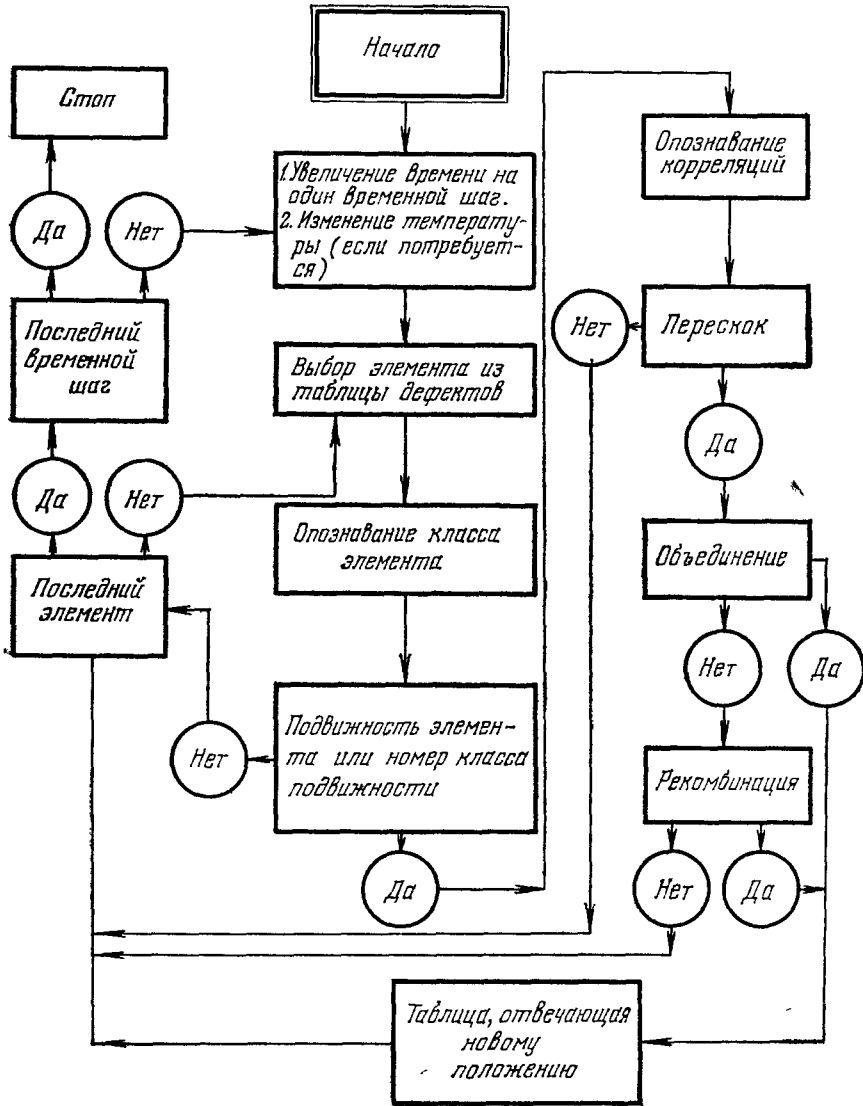
\*) Один из механизмов радиационного отжига — захват краудина вакансионным кластером. В связи с изучением зависимости критического сдвигового напряжения от интегральной дозы быстрых нейтронов аналитически этот механизм был рассмотрен в работе одного из авторов и Михлина<sup>126</sup>. Там же рассмотрена кинетика роста кластеров, состоящих из внедренных атомов, обусловленная захватом краудина.

моделирующего термический отжиг послекаскадных структур, приведена в табл. XII.

Прежде чем говорить о полученных Билером результатах, заметим, что для многих металлов и сплавов энергии активации перемещений

Таблица XII

Блок-схема алгоритма, моделирующего термический отжиг



внедрений в несколько раз меньше, чем энергий активации перемещений вакансий. Поэтому в широкой области температур вакансии на первом этапе отжига могут считаться неподвижными, в то время как внедрения могут собираться в кластеры. В этой области температур первичная дефектная структура относительно быстро превращается в собрание кластеров междоузельных атомов в поле относительно неподвижных одиночных вакансий и дивакансий и неподвижных более крупных вакан-



сионных кластеров. Распределение вакансионных кластеров по размерам при этом остается близким к их первичному распределению. Если каскад произвел большие вакансионные кластеры, то около 42% дефектов, произведенных вначале, по данным Билера<sup>50</sup>, выдерживают имитацию краткосрочного термического отжига.

В том случае, когда после прохождения каскада не остаются большие вакансионные кластеры, то только 30% дефектов, произведенных каскадом, выдерживают кратковременный отжиг. Процесс кратковременного отжига, по определению, длится до тех пор, пока все внедрения не соберутся в неподвижные кластеры. На это, например, в  $\alpha$ -Fe требуется около 200 перескоков на внедрение (примерно одна микросекунда). График непрерывного уменьшения доли внедренных атомов в подвижных конфигурациях в процессе кратковременного отжига приведен на рис. 30.

Процесс долгосрочного отжига, по Билеру, следует за кратковременным и зависит в основном от миграции вакансий, так как фактически все внедрения оказываются уже собранными в неподвижные кластеры. Столкновения между подвижными вакансионными конфигурациями и небольшими кластерами внедрений приводят снова к появлению подвижных внедрений. Например, столкновения дивакансий и вакансий с тривнедрениями приводят к появлению единичных внедрений и бивнедрений. Отношение скоростей аннигиляции — кластерообразование для долгосрочного отжига не отличается от такового при краткосрочном отжиге.

Около 58% аннигиляций и 42% кластерообразований, по Билеру, имеют место за время краткосрочного отжига в случае «эмбрионального» повреждения с большими вакансионными кластерами. Если принять это же соотношение для долгосрочного отжига, то, учитывая, что только 42% дефектов переносят краткосрочный отжиг, около 18% дефектов, произведенных в каскадах, должны перенести оба отжига. Аналогично можно ожидать, что около 9% дефектов первоначально образующих «эмбриональное» повреждение, не содержащее большие вакансионные кластеры, переживут как краткосрочный, так и долгосрочный отжиг.

Безусловно, термический отжиг играет важнейшую роль в развитии радиационных повреждений кристаллов. Это обстоятельство делает весьма актуальной постановку дальнейших машинных экспериментов в рамках модели Билера или же ее обобщений (см. также<sup>138,139</sup>). В настоящее время применение этой модели ограничено лишь простейшими последовательными структурами из-за отсутствия информации о взаимодействии друг с другом дефектов сложной структуры.

## 6. МАШИННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ СВОЙСТВ ОБЛУЧЕННЫХ ОБРАЗЦОВ

Выше были рассмотрены известные ныне модели машинного моделирования радиационных дефектов, позволяющие найти в том или ином приближении типы дефектных структур, возникающих под влиянием жестких излучений ядерных частиц. Ясно, однако, что нахождение дефектных структур, т. е. нахождение распределений в пространстве различного

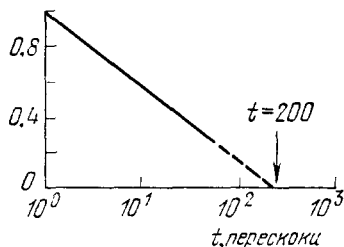


Рис. 30. Результаты моделирования отжига.

По оси ординат представлена доля внедрений в подвижных конфигурациях. Результаты относятся к каскадам с энергией 5—20 кэв в  $\alpha$ -Fe.

рода дефектов кристаллической решетки, является лишь первым шагом исследования. Следующий же его этап должен состоять в изучении влияния всей совокупности дефектов на изменение тех или иных физических свойств твердых тел при облучении.

Оказывается, что и на этой стадии исследования методы машинного моделирования могут оказаться весьма полезными. В настоящее время, однако, имеется лишь один пример такого моделирования, позволивший получить целый ряд интересных физических результатов. Речь идет о направлении исследований, которое было начато Форменом и Мейкином<sup>127-129</sup>. В этих работах была предложена методика машинного эксперимента, моделирующего перемещение дислокаций через произвольную совокупность препятствий. Такого рода препятствиями для дислокации являются, как известно, точечные дефекты, дислокационные петли, кластеры и т. п. Обсуждаемый метод позволяет определить влияние облучения (т. е. влияние всей совокупности дефектов решетки) на изменение критического напряжения сдвига в облученных образцах.

#### а) Процедура моделирования движения дислокаций в кристалле с дефектами и основные результаты

Как известно, упрочнение в металлах и сплавах связано с сопротивлением, оказываемым различными типами препятствий, движению дислокаций. Во многих случаях препятствие-дефект взаимодействует со скользящей дислокацией локально, поэтому хорошим приближением может быть рассмотрение препятствия как «точечного барьера». Сущность обсуждаемого здесь метода машинного моделирования состоит в следующем. Сначала с использованием генератора случайных величин в плоскости скольжения дислокации получается случайное распределение дефектов. При этом, вообще говоря, принимается, что эти дефекты могут различаться как по своей природе, так и по размерам.

В соответствии с программой, заложенной в ЭВМ, дислокация под влиянием приложенного напряжения свободно движется лишь до тех пор, пока на ее пути не появляется какое-либо препятствие. На препятствии дислокация закрепляется и прогибается между соседними парами дефектов. При этом в программе учтено, что для тех дефектов, для которых при заданном напряжении угол между плечами дислокации у препятствия ( $\Phi$ ) меньше критического угла ( $\Phi_c$ ) (каждому типу дефектов отвечает свой критический угол), закрепления не возникает, и дислокация срывается с препятствия.

Критические углы  $\Phi_c$  для разного рода дефектов в этой модели считаются известными. Ясно, что для очень слабых дефектов  $\Phi_c \rightarrow \pi$ , в то время как для бесконечно мощных дефектов  $\Phi_c \rightarrow 0$ . Вообще говоря, величина  $0 < \Phi_c < \pi$  может быть найдена при специальном рассмотрении взаимодействия того или иного дефекта с дислокацией.

По мере увеличения приложенного напряжения (в обсуждаемых машинных экспериментах напряжение  $\sigma$  принимало дискретный ряд возрастающих значений) дислокация перемещается до тех пор, пока ей не оказывается преодоленной вся совокупность барьеров (рис. 31). Естественно, что при этом каждому значению приложенного напряжения соответствует вполне определенное пройденное дислокацией расстояние. Соответствующая функциональная зависимость приведена на рис. 32. Максимальное значение приложенного напряжения, при котором дислокация проходит всю совокупность препятствий, принимается за критическое напряжение сдвига. Машинные эксперименты Формена и Мейкина

позволяют определить зависимость этого критического напряжения от вида нарушений решетки.

В том случае, когда дислокация встречает достаточно мощные препятствия ( $\Phi_c \leq 10^\circ$ ), она для продвижения использует локальные окна

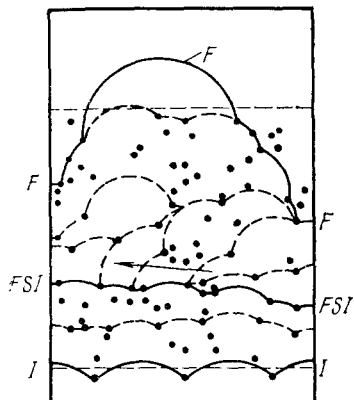


Рис. 31. Движение дислокации через конфигурацию из 100 препятствий с углом срыва  $130^\circ$ . Приведены исходная (I) и окончательная (F) позиции и позиция при последнем увеличении напряжения (FSI). Штриховой линией показаны промежуточные позиции

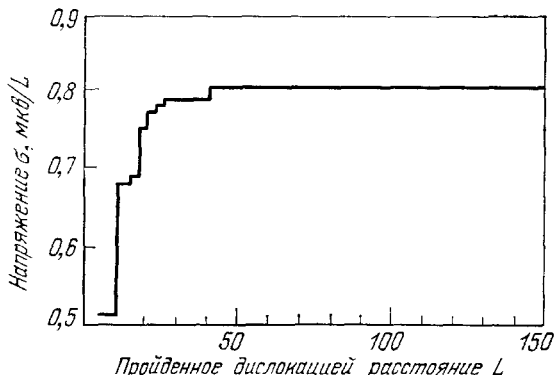


Рис. 32. Типичное изменение напряжения с проникновением дислокации в произвольную конфигурацию барьеров шириной  $100L$  (угол срыва  $10^\circ$ ).

в расположении барьеров («слабые» места). При наличии такого окна дислокация прорывается через расположение барьеров, как это показано на рис. 33. Во время такого прорыва остальная часть дислокации остается неподвижной. Вокруг же небольших групп прочных препятствий образуются петли.

При слабых барьерах, для которых  $\Phi_c \geq 160^\circ$ , дислокационная линия остается относительно прямой, так как на преодоление сопротивления требуется небольшое напряжение. В этом случае петли не образуются, а результаты моделирования находятся в соответствии с теорией Фриделя<sup>140</sup>. Рассмотрение смеси препятствий с различной прочностью приведено в работе<sup>128</sup>.

Формен<sup>129</sup> также применил описанную выше методику моделирования к проблеме петлевого упрочнения в ГЦК кристаллах. Он впервые рассчитал детально движение скользящей дислокации через произвольное расположение дислокационных петель. Критическое напряжение сдвига, полученное им для петлевого упрочнения, оказалось имеющим вид

$$\sigma_c = \frac{1}{4} \mu B \sqrt{N} d, \quad (12)$$

где  $N$  — объемная плотность всех петель,  $d$  — диаметр петли,  $\mu$  — модуль сдвига,  $B$  — вектор Бюргерса. Последний расчет особенно важен для

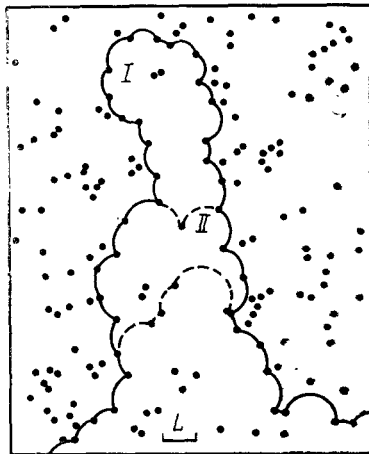


Рис. 33. Дислокация, использующая легкий путь движения через произвольную конфигурацию прочных препятствий (угол срыва  $10^\circ$ ).

Удаление препятствий I и II позволило бы дислокации проникнуть дальше в расположение барьеров.

изучения последствий радиационных повреждений, в которых происходит по мере укрупнения переход дефектных кластеров в дислокационные петли (см. гл. 4). В этом же плане представляет интерес и работа Предводителя, и Ничуговского<sup>130</sup>, рассмотревших в рамках машинной модели Формена — Мейкина движение дислокации через дислокационный «лес».

#### б) Моделирование термоактивируемого движения дислокаций через препятствия

Результаты Формена и Мейкина относятся только к области низких температур, где можно пренебречь термоактивируемым преодолением препятствий движущейся дислокацией. Логическим продолжением этих работ является машинная модель, предложенная Зайцевым и Надгорным<sup>131</sup>. Эти авторы в рамках машинной модели Формена и Мейкина предложили учитывать также и термоактивируемые высвобождения дислокации дефектом даже в том случае, когда  $\Phi > \Phi_c$ . Вероятность такого термоактивируемого процесса разыгрывалась по методу Монте-Карло. При этом в качестве случайных величин считались соответствующие место и время ожидания активации.

Расчеты с использованием этой модели еще только начинаются. Установлено, что характер движения дислокации существенно зависит от температуры. Ясно, что на результаты таких расчетов должна сказываться скорость нагружения, поскольку при достаточно быстром нагружении термоактивируемые освобождения дислокаций не могут быть существенны.

### 7. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ. ПЕРСПЕКТИВЫ

Дальнейшее развитие машинных экспериментов сталкивается с целым рядом проблем. О многих из них речь шла выше. Здесь же хотелось бы еще раз подчеркнуть огромное значение для развития машинного моделирования радиационных повреждений дальнейшего анализа потенциалов атом-атомных взаимодействий. Именно, отсутствие здесь необходимых данных препятствует получению результатов в кристаллах более сложных, чем простейшие кубические металлы. В настоящее время, например, не ясно, каким образом следует моделировать радиационные дефекты в ковалентных кристаллах, где выбивание атома из его узла обязательно приводит к существенному изменению его электронной структуры.

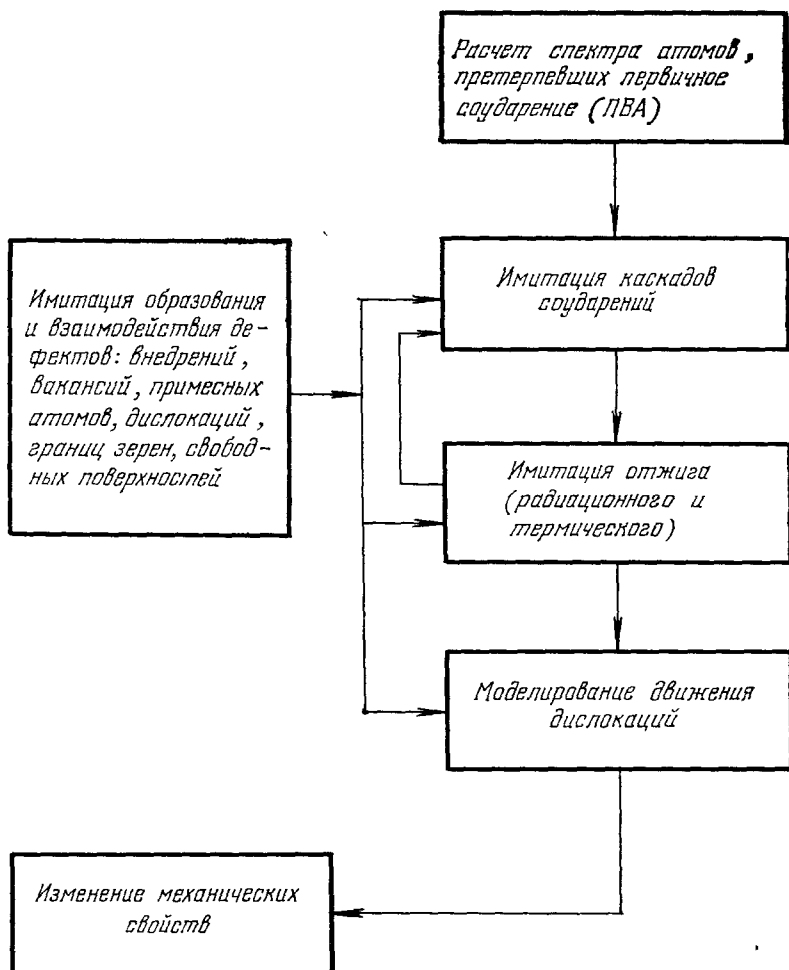
Если, однако, отвлечься от проблемы атом-атомных потенциалов или, например, рассматривать среды, где такие потенциалы известны, то ближайшее будущее развития машинного моделирования радиационных повреждений, по-видимому, будет связано с разработкой комплексных моделирующих систем, которые будут объединять в себе различные более частные алгоритмы, многие из которых были упомянуты выше.

Вопрос о создании такого рода систем впервые обсуждался в 1969 г. на Венском симпозиуме по радиационным повреждениям<sup>132</sup>. Там же обсуждалась предварительная структура такой системы (табл. XIII). Предполагается, что расчет должен начинаться с нахождения характеристик ПВА. Наиболее удобным для выполнения спектральных расчетов ПВА является при этом метод Монте-Карло<sup>133</sup>. Зная начальную энергию ПВА и направление его движения, можно провести моделирование каскада соударений, используя один из алгоритмов гл. 3.

Выбор необходимого алгоритма должен осуществляться с учетом температуры облучаемого образца, предыстории участка, где развивается каскад. Конфигурации дефектов «эмбрионального» повреждения должны

Таблица XIII

Структура системы, моделирующей воздействие облучения на механические свойства



рассчитываться с помощью алгоритмов, описанных в гл. 4. Первичное распределение дефектов, оставшихся после прохождения каскада, сразу должно быть введено в качестве начальных условий в алгоритм краткосрочного, а затем и долгосрочного отжига (гл. 5).

Алгоритмы гл. 6 свяжут новую структуру с изменением свойств. Такой совместный расчет можно ускорить, заготовив заранее библиотеки атомных конфигураций дефектов с их основными характеристиками. Более того, в отдельном кристалле в случае невзаимодействующих каскадов можно попытаться заготовить библиотеку каскадов для набора начальных направлений и энергий ПВА.

Реализация такой системы алгоритмов требует применения наиболее мощных ЭВМ. Дальнейшее же развитие и совершенствование самой системы будет во многом зависеть от прогресса электронной вычислительной техники. Так, одним из возможных путей развития машинного моделирования радиационного повреждения может быть создание даже спе-

циализированной вычислительной машины. Такие проекты применительно к другим задачам многих взаимодействующих частиц уже обсуждаются (например, Ски, Веллман, Спит и Хаан предложили схему процессора для расчетов с помощью алгоритма Янга в рамках модели Изинга<sup>134</sup>).

В заключение подчеркнем, что многие из обсуждавшихся выше методов могут с успехом быть использованы для решения и таких задач физики твердого тела, которые не связаны с радиационными повреждениями. Среди них упомянем, например, некоторые задачи диффузии примесей в кристаллах и их захвата на ловушках, «трубочную» диффузию примесей вдоль дислокаций, диффузию и кластерообразование долгоживущих квазичастиц (например, экситонов) и т. д.

Естественно, что перечень такого рода задач может быть продолжен.

Авторы выражают искреннюю благодарность Э. Л. Андроникашвили, по инициативе которого был написан этот обзор, за незабываемые стимулирующие дискуссии, и А. Н. Орлову, просмотревшему рукопись этого обзора, за целый ряд полезных советов.

Институт спектроскопии АН СССР,  
пос. Красная Пахра (Московская обл.)

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. J. B. Gibson, A. M. Golland, M. Milgram, G. H. Vineyard, *Phys. Rev.* **120**, 1229 (1960).
2. J. R. Beeler, *ibid.* **150**, 470 (1966).
3. C. Erginsoy, G. H. Vineyard, A. Englert, *ibid.* **A133**, 595 (1964).
4. C. Erginsoy, G. H. Vineyard, A. Shimizu, *ibid.* **A139**, 118 (1965).
5. R. A. Johnson, *ibid.* **145**, 423 (1966).
6. R. A. Johnson, *ibid.* **A134**, 1329 (1964).
7. R. A. Johnson, G. J. Dienes, A. C. Damask, *Acta Met.* **12**, 1215 (1964).
8. T. L. Gilbert, A. C. Wahl, *J. Chem. Phys.* **47**, 3425 (1967).
9. D. E. Rimmer, A. H. Cottrell, *Phil. Mag.* **2**, 1345 (1957).
10. Дж. Винийард, в кн. Физика кристаллов с дефектами, т. 3, Тбилиси, ИФ АН ГССР 1966, стр. 5.
11. M. W. Thompson, *Defects and Radiation Damage in Metals*, Cambridge, Univ. Press, 1969 (имеется перевод: Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М., «Мир», 1971).
12. Дж. Вайниард, УФН **74**, 435 (1961).
13. W. A. Harrison, F. Seitz, *Phys. Rev.* **A98**, 1530 (1955).
14. W. S. Snyder, J. Neufeld, *ibid.* **97**, 1636 (1955); **99**, 1326 (1955); **103**, 862 (1956).
15. G. H. Kinshin, R. S. Pease, *Rept. Progr. Phys.* **18**, 1 (1955).
16. G. J. Dienes, G. H. Vineyard, *Radiation Effects in Solids*, N.Y., Interscience Publishers, Inc., 1957 (имеется перевод: Дж. Динс, Дж. Винийард, Радиационные эффекты в твердых телах, М., ИЛ, 1960).
17. F. Seitz, J. S. Koehler, *Sol. State Phys.* **2**, 307 (1956).
18. J. A. Brinkman, *J. Appl. Phys.* **25**, 961 (1954).
19. A. Seeger, in: *Proc. of 2nd Intern. Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy*, v. 6, Geneva, 1958, p. 250.
20. Д. К. Холмс, цит. в<sup>10</sup> сборник, т. 3, стр. 51.
21. А. Н. Орлов, в кн. Действие ядерных излучений на материалы, М., Изд-во АН ССРСР, М., 1962, стр. 238.
22. A. Larsen, Brookhaven Nat. Lab. Report 7979.
23. В. В. Кирсанов, Э. Я. Осипова, Динамика радиационного повреждения при гипотетическом 0°K (сборник программ 1). Препринт НИИ атомных реакторов П-145, Мелекес, 1972.
24. G. H. Vineyard, C. Erginsoy, in: *Proc. of Conference on Crystal Lattice Defects*, Kyoto, Japan, 1962, p. 189.
25. G. H. Vineyard, *J. Phys. Soc. Japan* **18**, Suppl. 3, 144 (1963).
26. В. И. Клименков, В. В. Кирсанов, Э. Я. Осипова, АЭ **23**, 356 (1967).

27. В. И. Клименков, В. В. Кирсанов, З. Я. Осипова, в кн. Тезисы докладов межвузовской конференции по вопросам радиационной физики, Томск, Изд. Томского ун-та, 1967, стр. 82.
28. В. И. Клименков, В. В. Кирсанов, З. Я. Осипова, Кристаллография **13**, 1060 (1968).
29. В. В. Кирсанов, в кн. Радиационная физика твердого тела и реакторное материаловедение, М., Атомиздат, 1970, стр. 27.
30. В. М. Агранович, В. В. Кирсанов, ФТТ **13**, 3373 (1971).
31. A. H. Domingos, A Theoretical Study of Radiation Damage in Aluminium. Ph. D. Thesis (University of Washington, 1963), p. 109 (Ref. «Dissert. Abstr.» **25** (2), 1097 (1964)).
32. J. N. Lomer, M. Peppercorn, Phil. Mag. **16**, 1119 (1967).
33. R. Nelson, M. Thompson, H. Montgomery, *ibid.* **7**, 1385 (1962).
34. J. Sanders, J. Fluit, Physica **30**, 129 (1964).
35. Т. С. Пугачева, ФТТ **9**, 102 (1967).
36. С. Т. Конобеевский, Действие облучения на материалы, М., Атомиздат, 1967.
37. В. М. Агранович, В. В. Кирсанов, ФТТ **11**, 674 (1969).
38. L. Van-Nove, Phys. Rev. **95**, 249 (1954).
39. В. Ф. Турчин, Медленные нейтроны, М., Госатомиздат, 1963.
40. В. М. Агранович, В. В. Кирсанов, ФТТ **12**, 2671 (1970).
41. J. R. Beeler, Jr., J. Appl. Phys. **35**, 2226 (1964).
42. J. R. Beeler, D. G. Besco, in: Radiation Damage in Solids, v. 1, Vienna, IAEA, 1962, p. 43.
43. J. R. Beeler, D. G. Besco, J. Phys. Soc. Japan **18**, Suppl. 3, 159 (1963).
44. J. R. Beeler, D. G. Besco, J. Appl. Phys. **34**, 2873 (1963).
45. J. R. Beeler, D. G. Besco, Phys. Rev. **A134**, 530 (1964).
46. J. R. Beeler, J. Nucl. Mat. **15**, 1 (1965).
47. M. Ioshida, J. Phys. Soc. Japan **16**, 44 (1961).
48. M. T. Robinson, O. S. Oen, Phys. Rev. **132**, 2385 (1963).
49. R. A. Johnson, in: Diffusion in Body-centered, Cubic Metals, Cleveland, ASM, Ohio, ASB, 1965, p. 375 (имеется перевод: Р. А. Джонсон, в кн. Диффузия в металлах с ОЦК решеткой, М., «Металлургия», 1969, стр. 357).
50. J. R. Beeler, in: Symposium on Radiation Damage in Reactor Materials, v. 2, Vienna, IAEA, 1969, SM-120/E-1.
51. M. J. Attardo, J. M. Galligan, Phys. Rev. Lett. **17**, 191 (1966).  
P. Petroff, J. Washburn, in: Intern. Conference on Vacancies and Interstitials in Metals, v. 2, Kernforschungsanlage, Jülich, Germany, 1968, p. 485.
52. В. М. Агранович, Э. Я. Михлин, АЭ **12**, 385 (1962).  
В. М. Агранович, Э. Я. Михлин, Л. П. Семенов, *ibid.* **15**, 400 (1963).  
V. M. Agranovich et al; in: Proc. of the 3rd Intern. Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy, v. 11, N.Y., UNO, 1965, p. 162.
53. E. P. Wigner, J. Appl. Phys. **17**, 857 (1946).
54. D. E. Thomas, in: Nuclear Metallurgy v. 3, N.Y., Amer. Inst. of Min. Met. and Petrol Eng., N.Y., 1956, S.R., N 3.  
L. R. Aronin, J. Appl. Phys. **25**, 344 (1954).
55. L. T. Chadderton, D. V. Morgan, I. Torrens, Phys. Lett. **20** (4), 4 (1966).
56. I. Torrens, L. T. Chadderton, Phys. Rev. **159**, 671 (1967).
57. R. O. Jackson, H. P. Leighly, J., D. R. Edwards, Phil. Mag. **25**, 1169 (1972).
58. J. J. O. Varley, Nature **174**, 886 (1954).
59. В. Л. Еуге, J. Phys. **F 3**, 422 (1973).
60. M. Rühle, Phys. Stat. Sol. **19**, 263 (1967).
61. M. Rühle, in: Radiation Damage in Reactor Materials, v. 1, Vienna, IAEA, 1965, p. 113.
62. G. Thomas, Transmission Electron Microscopy of Metals, N.Y., Wiley, 1963 (имеется перевод: Г. Томас, Электронная микроскопия кристаллов. Прямое исследование металлов в просвечивающем электронном микроскопе, М., ИЛ, 1963).
63. E. W. Müller, J. Appl. Phys. **27**, 474 (1956).
64. Э. В. Мюллер, УФН **77**, 481 (1962).
65. Э. В. Мюллер, УФН **92**, 291 (1967).
66. А. Л. Суворов, УФН **101**, 21 (1970).
67. К. Л. Меггле, дит. в <sup>61</sup>сборник, v. 1, 1969, p. 159.
68. В. В. Кирсанов, Комплексы точечных дефектов в облученных кубических металлах, распределение их по размерам. Препринт НИИ атомных реакторов П-60, Мелекесс, 1969.

69. M. J. Makin, A. D. Whapham, F. J. Minter, *Phil. Mag.* **7**, 285 (1962).
70. K. L. Merkle, in: *Proc. of Symposium on the Nature of Small Defect Clusters*, Ed. M. J. Makin, AERE-R 5269, Harwell, England, 1966, p. 8.
71. R. P. Tucker, S. M. Ohr, M. S. Wechsler, цит. в <sup>61</sup> сборник, в. 1, 1969, p. 132.
72. R. A. Johnson, E. Brown, *Phys. Rev.* **127**, 446 (1962).
73. R. A. Johnson, *J. Phys. Chem. Sol.* **26**, 75 (1965).
74. R. A. Johnson, *Phys. Lett.* **19**, 191 (1965).
75. H. B. Huntington, F. Seitz, *Phys. Rev.* **61**, 315, 324 (1942).
76. J. D. Eshelby, *J. Appl. Phys.* **25**, 255 (1954).
77. I. Tewordt, *Phys. Rev.* **109**, 61 (1958).
78. A. Seeger, E. Mann, *J. Phys. Chem. Sol.* **12**, 326 (1960).
79. В. И. Клименков, В. В. Кирсанов, З. Я. Осипова, в кн. Труды межвузовской конференции по радиационной физике, Томск, Изд. Томского ун-та, 1970, стр. 55.
80. В. В. Кирсанов, З. Я. Осипова, Моделирование структурных дефектов и процессов динамики радиационного повреждения в кристалле с дефектами (сборник программ 3). Препринт НИИ атомных реакторов П-147, Мелекес, 1972.
81. G. H. Vineyard, *Disc. Farad. Soc.*, No. 31, 7 (1961).
82. J. R. Beeler, Jr., цит. в <sup>70</sup> сборник, p. 173.
83. A. Seeger, D. Schumacher, in: *Lattice Defects in Quenched Metals*, Ed. R. M. J. Cotterill, M. Doiyama et al., N.Y., Academic Press, 1965, p. 15.
84. A. Seeger, in: *Proc. of Symposium on Irradiation in Solids and Reactor Materials*, Vienna, IAEA, 1962, p. 67.
85. R. Bullough, R. C. Perrin, *Proc. Roy. Soc. A305*, 541 (1968).
86. M. E. Downey, B. L. Euge, *Phil. Mag.* **11**, 53 (1965).
87. B. L. Euge, A. F. Bartlett, *ibid.* **12**, 261.
88. Р. Д. Дохнер, А. Н. Орлов, *Изв. АН СССР, сер. физ.* **31**, 851 (1967).
89. Р. Д. Дохнер, А. Н. Орлов, *ФММ* **25**, 972 (1968).
90. Ю. М. Плишкин, И. Е. Подчиненов, *ФММ* **32**, 254 (1971).
91. Р. Д. Дохнер, *ФТТ* **11**, 1124 (1969).
92. Э. Я. Михлин, В. В. Нелаев, *ФТТ* **14**, 2153 (1972).
93. В. В. Кирсанов, в кн. Вопросы атомной науки и техники, ХФТИ-74-47, Харьков, ФТИ АН УССР, 1974, 3.
94. П. П. Гринчук, В. В. Кирсанов, *ФММ* **38**, 756 (1974).
95. R. A. Johnson, *Phil. Mag.* **16**, 553 (1967).
96. J. R. Beeler, R. A. Johnson, *Phys. Rev.* **156**, 677 (1967).
97. R. M. J. Cotterill, M. Doiyama, цит. в <sup>83</sup> сборник, p. 653.
98. M. Doiyama, R. M. J. Cotterill, *Phys. Rev.* **A137**, 994 (1965).
99. J. R. Beeler, Jr., цит. в <sup>51</sup> сборник, в. 2, p. 598.
100. R. Perrin, R. Bullough, цит. в <sup>70</sup> сборник, p. 43.
101. R. A. Johnson, A. C. Damask, *Acta Met.* **12**, 443 (1964).
102. R. A. Johnson, *ibid.* **13**, 1259 (1965).
103. R. A. Johnson, *ibid.* **15**, 513 (1967).
104. R. Bullough, R. C. Perrin, *AERE Report T. P. 292*, Harwell, England, 1968.
105. M. Doiyama, R. M. J. Cotterill, in: *Lattice Defects and Their Interaction*, Ed. R. R. Hasiguti, N.Y., Gordon and Breach, 1967, p. 35.
106. A. Englert, H. Томпа, *J. Phys. Chem. Soc.* **21**, 306 (1961).
107. A. Englert, H. Томпа, *ibid.* **24**, 1145 (1965).
108. M. Doiyama, R. M. J. Cotterill, *Phys. Lett.* **13**, 110 (1964).
109. R. M. J. Cotterill, M. Doiyama, *Phys. Rev.* **145**, 465 (1966).
110. M. Doiyama, R. M. J. Cotterill, *Phys. Lett.* **14**, 79 (1965).
111. M. Doiyama, R. M. J. Cotterill, *Phys. Rev.* **150**, 448 (1966).
112. R. Chang, L. J. Graham, *Phys. Stat. Sol.* **18**, 99 (1966).
113. P. C. Gehlen, A. R. Rosenfield, G. T. Hahn, *Techn. Report No. 2 to the Office of Naval Research. Contract Nonr-5052 (00), NRO39-089*.
114. M. J. Norgett, R. C. Perrin, E. J. Savino, *J. Phys.* **F2**, L73 (1972).
115. P. C. Gehlen, R. G. Hoagland, M. F. Kanninen, *Scr. met.* **6**, 445 (1972).
116. J. O. Schiffgens, K. E. Garrison, *J. Appl. Phys.* **43**, 3240 (1972).
117. J. R. Beeler, Jr., *Phys. Rev.* **A138**, 1259 (1965).
118. H. G. Cooper, J. S. Koehler, J. W. Marx, *ibid.* **97**, 559 (1955).
119. G. Lück, R. Sizmann, *Phys. Stat. Sol.* **5**, 683 (1964).
120. G. Lück, R. Sizmann, *ibid.* **6**, 263.
121. G. Lück, R. Sizmann, *ibid.* **14**, K61 (1966).
122. M. Balarin, O. Hanser, *ibid.* **10**, 475 (1965).
123. G. Lück, H. Bradarsch, R. Sizmann, *Nukleonik* **8**, 256 (1966).
124. R. Jan, *Phys. Stat. Sol.* **6**, 925 (1964).



125. R. Jan, *ibid.* 7, 299; 8, 331.
126. В. М. Агранович, Э. Я. Михли, ФТТ 9, 1089 (1967); 11, 1895 (1969).
127. A. J. E. Foreman, M. J. Makin, *Phil. Mag.* 14, 911 (1966).
128. A. J. E. Foreman, M. J. Makin, *Can. J. Phys.* 45, 511 (1967).
129. A. J. E. Foreman, *Phil. Mag.* 17, 353 (1968).
130. А. А. Предводителев, Г. И. Ничуговский, *Кристаллография* 17, 166 (1972).
131. С. Н. Зайцев, Э. М. Надгорный, ФТТ 15, 2669 (1973).
132. J. R. Beeler, Jr., *цит. в*<sup>61</sup> *сборник*, т. 1, 1969, р. 3.
133. С. М. Ермаков, *Метод Монте-Карло и смежные вопросы*, М., «Наука», 1971.
134. E. Schee, V. P. Veltman, L. Speet, S. De Naan, *Comput. Phys. Comm.* 5, 104 (1973).
135. Р. Пайерлс, в кн. *Теоретическая физика XX века*, М., ИЛ, 1962, стр. 165.
136. В. М. Агранович, *цит. в*<sup>10</sup> *сборник*, т. 2, стр. 247.
137. В. М. Агранович, Н. М. Омеляновская, в кн. *Радиационные и другие дефекты в твердых телах*, т. 1. Тбилиси, 1974, стр. 240.
138. D. G. Dorgan, *Rad. Eff.* 2, 249 (1970).
139. J. M. Laporte, *ibid.* 22, 153 (1974).
140. Дж. Фридель, *Дислокации*, М., «Мир», 1967, гл. 8, § 4.

