

ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ

УДК 669.295:539.12.043

МД-МОДЕЛИРОВАНИЕ КАСКАДОВ СТОЛКНОВЕНИЙ В α -Ti. ЧИСЛО ДЕФЕКТОВ, ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ И МОРФОЛОГИЯ КАСКАДНОЙ ОБЛАСТИ СМЕЩЕНИЙ

© 2023 г. Р. Е. Воскобойников^{a, b, *}

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

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

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

Поступила в редакцию 27.03.2023 г.

После доработки 01.07.2023 г.

Принята к публикации 09.07.2023 г.

Методом молекулярной динамики (МД) исследовали радиационные повреждения в каскадах столкновений, инициированных первично выбитыми атомами (ПВА) с энергией $E_{\text{РКА}} = 5, 10, 15, 20$ и 25 кэВ в α -Ti при температурах $T = 100, 300, 600$ и 900 К. Для каждой пары параметров $(E_{\text{РКА}}, T)$ сгенерировали статистическую выборку из 24 каскадов столкновений, размер которой обосновали *a posteriori*. Получили число пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$ и определили время релаксации каскадов столкновений в зависимости от $(E_{\text{РКА}}, T)$. Показано, что средние значения $\langle N_{\text{ФР}}(E_{\text{РКА}}, T) \rangle$ укладываются в $\approx 0.3NRT$, если выбрать пороговую энергию смещения в интервале 28–40 эВ в зависимости от температуры облучения. При высоких энергиях ПВА/низких температурах каскадная область смещений в α -Ti распадается на субкаскады, вытянутые вдоль траекторий высокоэнергетических атомов отдачи, а время релаксации не зависит от $E_{\text{РКА}}$. При низких энергиях ПВА/высоких температурах доминируют каскады столкновений равноосной формы, а время их релаксации монотонно растет с увеличением $E_{\text{РКА}}$.

Ключевые слова: α -Ti, облучение, каскады столкновений, первичные радиационные повреждения, пары Френкеля, кластеры точечных дефектов, молекулярная динамика

DOI: 10.31857/S0015323023600478, EDN: PXRDTU

ВВЕДЕНИЕ

Титан и титановые сплавы занимают четвертое место в списке наиболее широко используемых конструкционных металлических материалов, уступая лишь сталям и сплавам на основе алюминия и магния. Благодаря сочетанию высокой удельной прочности и коррозионной стойкости титан и его сплавы особенно востребованы для изготовления элементов конструкций с малым весом, которые при эксплуатации подвергаются одновременному воздействию внешнего нагружения и химически активных сред. Малая активируемость, быстрое снижение наведенной активности и стабильность механических свойств титановых сплавов в операционных условиях активных зон водо-водяных реакторов подтверждены экспериментально и положены в основу научного обоснования применения титана и его сплавов для изготовления корпусов, теплообменников и другого оборудования новых ядерных энергетических установок различного назначения, обладаю-

щих повышенным ресурсом, высокой надежностью и безопасностью [1–3].

Каскады столкновений — основной источник радиационных повреждений, возникающих в материалах под действием реакторного облучения. Каскады столкновений инициируются первично выбитыми атомами (ПВА) с энергией $E_{\text{РКА}} \geq 1$ кэВ. В силу того, что каскадная область смещений имеет линейные размеры ~ 5 – 30 нм и релаксирует за характерные времена ~ 2 – 20 пс, прямое экспериментальное наблюдение за первичным дефектообразованием в каскадах столкновений затруднительно.

На протяжении нескольких десятилетий моделирование методом молекулярной динамики (МД) успешно используется для исследования первичного радиационного дефектообразования в облучаемых материалах [4, 5]. Проводимые расчеты позволяют определить число пар Френкеля, долю вакансий и междоузлий в кластерах точечных дефектов, влияние дефектной структуры ма-

Таблица 1. Температурная зависимость равновесного параметра решетки a_0 , Å, в α -Ti

T , К	a_0 , Å
0	2.951
100	2.95437
300	2.9594
600	2.967
900	2.9755

териала на радиационное дефектообразование, эффекты высокодозного облучения и т.п. За исключением исследования [6] и работы [7], в которой опубликованы предварительные результаты этой программы моделирования, других работ по моделированию радиационных повреждений в титане не проводилось. Чтобы более детально разобраться в закономерностях первичного дефектообразования в титане, методом МД выполнено моделирование каскадов столкновений в объеме материала в широком интервале энергий ПВА и температур облучения. Статистическая обработка результатов моделирования представлена во второй части проведенного исследования [8].

ИСПОЛЬЗОВАННЫЕ МЕТОДЫ

Для расчета сил межатомного взаимодействия в α -Ti использован межатомный потенциал [9], построенный по методу внедренного атома [10]. Следуя процедуре [11], на коротких расстояниях парную часть потенциала [9] модифицировали подстановкой потенциала Зиглера–Бирсака–Литт-марка (ЗБЛ) [12]. В качестве подгоночного параметра использовали экспериментально измеренную пороговую энергию смещения $E_d = 19 \pm 1$ эВ в α -титане [13, 14]. Для плавного перехода от потенциала ЗБЛ в точке $r_{in} = 0.887$ Å к исходной парной функции взаимодействия [9] в точке $r_{out} = 1.412$ Å применили интерполяцию кубическим сплайном.

Пороговая энергия смещения сконструированного потенциала удовлетворяет соотношению $19 \leq E_d \leq 20$ эВ. Модификация потенциала на коротких расстояниях не повлияла на величину равновесного параметра решетки a_0 , отношение c/a , энергию когезии, энергию образования вакансии, упругие константы, энергию дефекта упаковки и энергию свободной поверхности моделируемого α -Ti [9].

МД-моделирование каскадов столкновений в α -титане выполняли при температурах кристалла $T = 100, 300, 600$ и 900 К. Используя теорему о вириале [15], определили температурную зависимость равновесного параметра решетки a_0 , соответствующего нулевым внутренним напряжениям (табл. 1). Так как анизотропия коэффициента

линейного термического расширения α -Ti в рассматриваемом интервале температур находится в пределах $\approx 3\text{--}4\%$ [16], для всех условий моделирования использовали одну и ту же величину $c/a = 1.585$.

Моделирование каскадов столкновений в α -Ti провели в ансамбле *NVE*. Моделируемый кристалл имел близкую к кубической форму с гранями $(1\bar{1}00)$, $(11\bar{2}0)$ и (0001) . Периодические граничные условия использовали на всех гранях кристалла.

Каскады столкновений инициированы ПВА с энергиями $E_{PKA} = 5, 10, 15, 20$ и 25 кэВ. Для того, чтобы снизить вероятность каналирования и имитировать изотропное пространственное и случайное временное распределение ПВА, последние вводились в различных местах моделируемого кристалла, вдоль одного из кристаллографических направлений $\langle 12\bar{3}2 \rangle$ в разные моменты времени. Для каждой пары параметров (E_{PKA}, T) сгенерировали статистическую выборку из 24 каскадов столкновений.

Оценку тормозных способностей выполнили при помощи программного кода SRIM 2013 [17]. Как показали расчеты, в рассматриваемом интервале энергий на возбуждение электронной подсистемы материала приходится $\sim 10\%$ энергии ПВА. Более того, согласно [18], при энергиях быстрых частиц меньше ~ 10 кэВ/а.е.м. SRIM сильно переоценивает вклад электронных потерь в диссипацию энергии ПВА. Таким образом, влияние электронных потерь на величину радиационных повреждений в α -Ti, создаваемых ПВА с энергиями $5 \leq E_{PKA} \leq 25$ кэВ, ожидается на уровне заметно меньшем воздействия таких факторов как точность используемого межатомного потенциала, подгоночных экспериментальных данных и дисперсии числа пар Френкеля. По этой причине потери энергии ПВА на возбуждение электронной подсистемы мишени не учитывались при МД-моделировании каскадов столкновений в α -Ti. Принимая во внимание линейную зависимость числа пар Френкеля от энергии ПВА, см. следующий раздел, вклад электронных потерь можно легко учесть при необходимости.

Число атомов N_{box} в моделируемом кристалле выбирали так, чтобы на один атом мишени приходилось $\approx 10^{-2}$ эВ энергии ПВА (табл. 2). Перед введением ПВА кристалл α -Ti приводили в состояние термодинамического равновесия при выбранной температуре моделирования в течение 1.5×10^4 МД-итераций. МД-моделирование выполняли без контроля температуры. Изменение температуры Максвелла на разных стадиях релаксации каскада столкновений, инициированного ПВА с энергией $E_{PKA} = 25$ кэВ в α -Ti при $T = 100$ К, показано на рис. 1. Энергия, вносимая ПВА, не извле-

калась из системы. Связанный с этим нагрев моделируемого кристалла после релаксации каскада столкновений не превышал 40 К.

Для МД-моделирования первичного дефектообразования в каскадах столкновений в α -Ti использовали программное обеспечение собственной разработки, оптимизированное для исследования атомарных систем далеких от состояния равновесия. Для интегрирования уравнений движения применили алгоритм скоростей Верле [19]. Уравнения движения интегрировали с переменным шагом по времени. Для ускорения расчета сил межатомного взаимодействия в α -Ti межатомные потенциалы [9] представили в виде полиномиального разложения по степеням r^2 , где r — расстояние между атомами. Дефектную структуру материала определяли тремя различными способами на каждом сотом шаге интегрирования уравнений движения.

На начальной стадии формирования каскадной области смещений относительно небольшое число атомов титана приобретает высокую скорость, тогда как основная часть кристалла α -Ti находится в состоянии термодинамического равновесия, соответствующего выбранной температуре моделирования. Поскольку сходимость алгоритма скоростей Верле [19] зависит от выбора шага интегрирования по времени τ , определяемого скоростью самого быстрого атома, простое интегрирование уравнений движения всех атомов в кристалле приведет к неэффективному использованию вычислительных ресурсов.

Чтобы ускорить вычисления на начальном этапе развития каскада столкновений, исходный алгоритм Верле модифицировали согласно [20]. Моделируемый кристалл разделили на две подсистемы “холодных” и “горячих” атомов, которые рассматривали отдельно. Уравнения движения

Таблица 2. Число атомов N_{box} в моделируемом кристалле α -Ti при различных энергиях ПВА

$E_{\text{РКА}}$, кэВ	N_{box}
5	505 120
10	1 029 600
15	1 499 648
20	2 007 040
25	2 527 840

горячих атомов интегрировались в предположении неподвижности холодных атомов. Ансамбль холодных атомов подстраивали под изменяющуюся конфигурацию подмножества горячих атомов на каждом десятом шаге интегрирования уравнений движения горячих атомов. В процессе развития каскада столкновений число горячих атомов растет за счет передачи энергии холодным атомам до тех пор, пока все атомы в кристалле не станут горячими и используемый алгоритм не сведется к традиционному методу скоростей Верле [19].

Условия разбиения моделируемого кристалла на две подсистемы подбирали на тестовых задачах. Эффективность используемого программного обеспечения и подхода, описанного в [20], подтверждены результатами моделирования радиационных повреждений в α -цирконии [21], алюминии [22], интерметаллидах γ -TiAl [23], α_2 -Ti₃Al [24] и γ -Ni₃Al [25].

Идентификацию радиационных дефектов выполнили методами эквивалентных сфер Линдемманна [26], ячеек Вигнера–Зейтца [27] и кластерным анализом [28]. В методе эквивалентных сфер

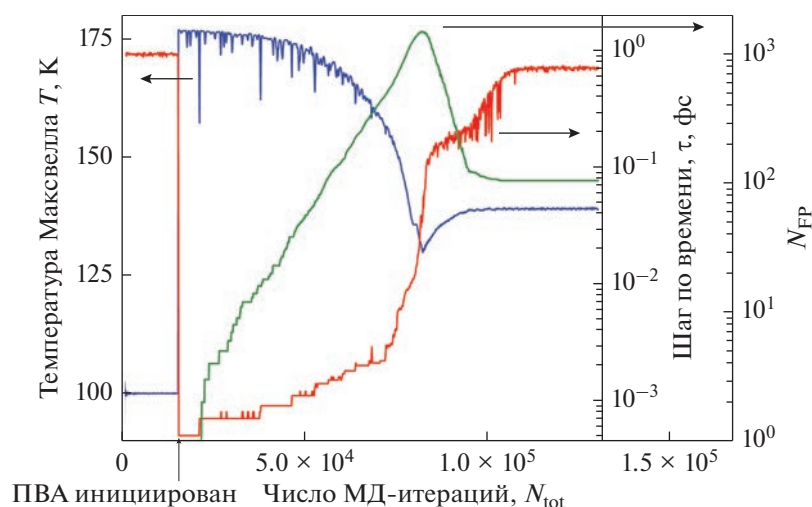


Рис. 1. Изменение температуры Максвелла T , шага интегрирования по времени τ и числа пар Френкеля N_{FP} в процессе релаксации типичного 25 кэВ каскада столкновений в α -Ti при температуре 100 К.

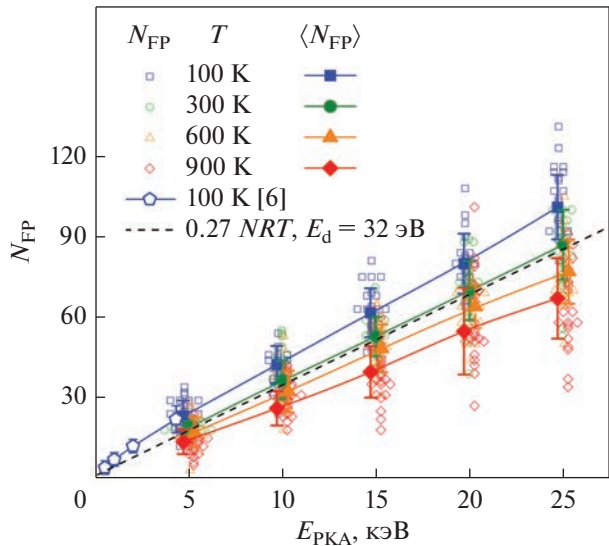


Рис. 2. Число пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$, образованных в каскадах столкновений в α -Ti. Каждый полный символ обозначает число пар Френкеля, оставшихся после релаксации одного каскада столкновений. Значения $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$, полученные усреднением по выборке каскадов с одинаковыми значениями $(E_{\text{РКА}}, T)$, показаны сплошными символами. Планками обозначены соответствующие среднеквадратичные отклонения. Для сравнения приведены результаты [6].

Линдемманна использовали пороговые смещения $0.3a_0$; для идентификации кластеров точечных дефектов при проведении кластерного анализа использован радиус второй координационной сферы.

АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Число пар Френкеля $N_{\text{ФР}}$, образованных в каскадах столкновений в α -Ti, в зависимости от $(E_{\text{РКА}}, T)$ приведено на рис. 2. Каждая точка показывает число пар Френкеля после релаксации одного каскада столкновений. Здесь же приведены результаты моделирования [6]. Всего в [6] было смоделировано 32 каскада столкновений, инициированных ПВА с энергиями $E_{\text{РКА}} \leq 5$ кэВ при температуре $T = 100$ К. Несмотря на небольшую

Таблица 3. Значения E_d , при которых среднее число пар Френкеля в каскадах столкновений в α -Ti совпадает с величиной $0.27NRT$

$T, \text{ K}$	$E_d, \text{ эВ}$
100	28
300	32
600	35
900	40

статистическую выборку и другой использованный межатомный потенциал, число пар Френкеля, образованных в 5 кэВ каскадах столкновений, полученное в [6], совпадает с результатами этого исследования.

Зависимость значений $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$, полученных усреднением $N_{\text{ФР}}$ каскадов с одинаковыми параметрами $(E_{\text{РКА}}, T)$, от $E_{\text{РКА}}$ близка к линейной при всех смоделированных условиях облучения. Принимая во внимание простую функциональную зависимость $\langle N_{\text{ФР}}(E_{\text{РКА}}, T) \rangle$, ее можно легко экстраполировать в область больших значений $E_{\text{РКА}}$. При низких температурах $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ возрастает быстрее, чем при высоких. Увеличение температуры облучения ведет к плавному снижению $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$, и наиболее резкое падение числа пар Френкеля с ростом температуры наблюдается при больших $E_{\text{РКА}}$, см. рис. 2.

Результаты МД-моделирования первичных повреждений в других металлах, см., напр., [5, 28–30], показывают, что среднее число пар Френкеля, оставшихся после релаксации высокоэнергетичных каскадов столкновений составляет 15–30% величины, предсказанной NRT [31], в зависимости от температуры моделирования и энергии ПВА. В случае моделирования первичного дефектообразования в α -Ti, средние значения числа пар Френкеля $\langle N_{\text{ФР}}(E_{\text{РКА}}, T) \rangle$ укладываются в $\approx 0.3NRT$, см. рис. 2, если выбрать значение параметра E_d в интервале 28–40 эВ в зависимости от температуры облучения (табл. 3).

Разброс значений $N_{\text{ФР}}$ в индивидуальных каскадах столкновений в α -Ti при одинаковых $(E_{\text{РКА}}, T)$ достаточно большой, см. рис. 2. Дисперсия $N_{\text{ФР}}$ увеличивается при увеличении энергии $E_{\text{РКА}}$. Зависимость дисперсии $N_{\text{ФР}}$ от температуры неочевидна.

Образование первичных радиационных дефектов в каскадах столкновений – это стохастический процесс. Поэтому результаты моделирования одного каскада не несут никакой важной информации. Чтобы получить статистически значимое число пар Френкеля и другие характеристики облученного материала в зависимости от $(E_{\text{РКА}}, T)$, необходимо сгенерировать репрезентативную выборку.

В проводимом исследовании минимальный необходимый размер репрезентативной выборки обосновали *a posteriori*, используя зависимость среднего $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$ и медианного $[N_{\text{ФР}}]$ значений числа пар Френкеля от числа n каскадов столкновений в серии с одинаковыми значениями параметров $(E_{\text{РКА}}, T)$, см. рис. 3. С увеличением n , как $\langle N_{\text{ФР}} \rangle$, так и $[N_{\text{ФР}}]$ сходятся к своим “стационарным” значениям, определяя тем самым мини-

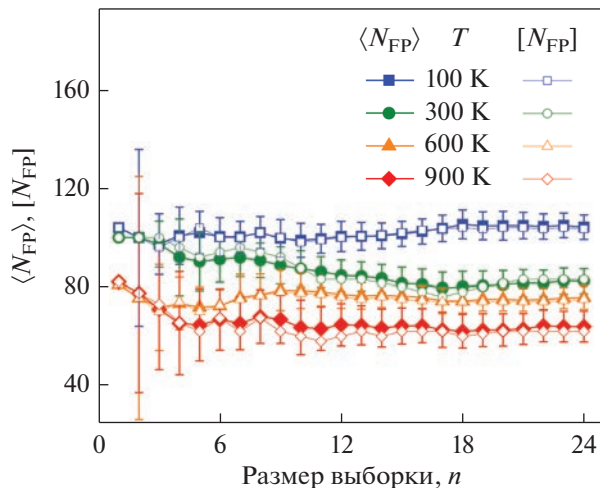


Рис. 3. Медиана $[N_{\text{FP}}]$ и среднее число пар Френкеля $\langle N_{\text{FP}} \rangle$, образованных в результате релаксации 25 кэВ каскадов столкновений, в зависимости от размера статистической выборки n . Планками показан 95% доверительный интервал.

мальное число каскадов столкновений $\tilde{n}$ в выборке с одинаковыми (E_{PKA}, T) , которое необходимо смоделировать (на рис. 3 $\tilde{n} \gtrsim 21$).

В работе [32] отмечено, что дефектообразование в каскадах столкновений в чистых металлах не имеет очевидной зависимости от кристаллической структуры и/или иных физических свойств облучаемых материалов. Согласно [32], различие в числе пар Френкеля, которое наблюдается в чистых металлах и неупорядоченных твердых растворах (но не интерметаллидах, см. [23–25]) связано исключительно с различными средними атомными массами мишеней, причем N_{FP} максимально в легких металлах типа алюминия и минимально в тяжелых металлах типа вольфрама и его сплавов. Образование первичных повреждений в α -Ti также укладывается в эту закономерность в рассмотренном температурном интервале, см. рис. 4.

В примере на рис. 5 показано, как N_{FP} изменяется в процессе эволюции каскадов столкновений, инициированных ПВА с энергией $E_{\text{PKA}} = 5$ кэВ в α -Ti при температуре $T = 100$ К. Все зависимости N_{FP} от времени на финальной стадии эволюции каскадов имеют хорошо различимую угловую точку, по которой можно однозначно определить время окончания релаксации каскадной области смещений.

Время релаксации τ всех смоделированных каскадов, определенное по угловым точкам временных зависимостей $N_{\text{FP}}(t)$, показано на рис. 6. Здесь же рассчитаны соответствующие средние значения $\langle \tau \rangle$ по выборке с одинаковыми (E_{PKA}, T) .

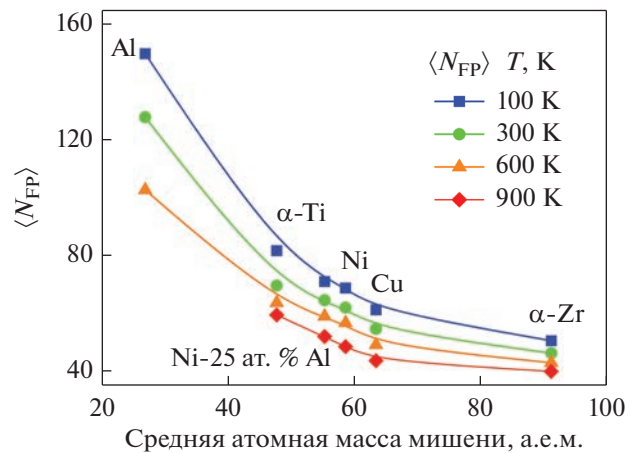


Рис. 4. Взаимосвязь средней атомной массы облучаемых чистых металлов и/или неупорядоченных твердых растворов и среднего числа пар Френкеля N_{FP} , образованных в 20 кэВ каскадах столкновений. Показанная зависимость содержит результаты МД моделирования, опубликованные в работах [21, 22, 25, 28, 33].

При постоянной температуре зависимость среднего времени релаксации $\langle \tau \rangle$ каскада столкновений от энергии ПВА можно разделить на две части. При относительно малых E_{PKA} время релаксации каскадной области смещений монотонно растет с увеличением E_{PKA} . При больших энергиях ПВА время релаксации практически не зависит от E_{PKA} .

Величина E_{PKA} , при которой происходит переход от стадии роста $\langle \tau \rangle$ к стадии “насыщения”, определяется температурой облучения α -Ti. При криоген-

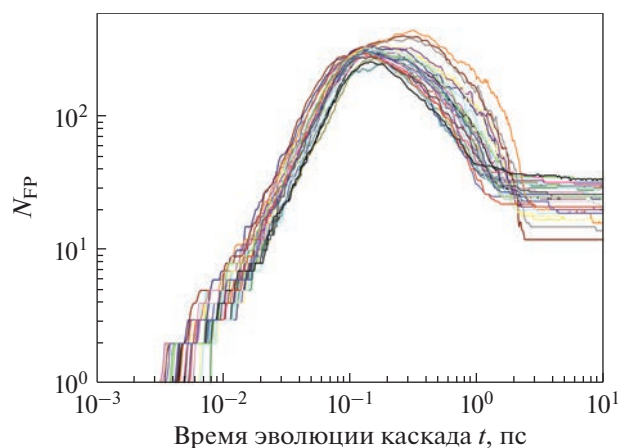


Рис. 5. Изменение числа пар Френкеля N_{FP} в индивидуальных 5 кэВ каскадах столкновений в α -титане при $T = 100$ К в зависимости от времени эволюции каскадной области смещений.

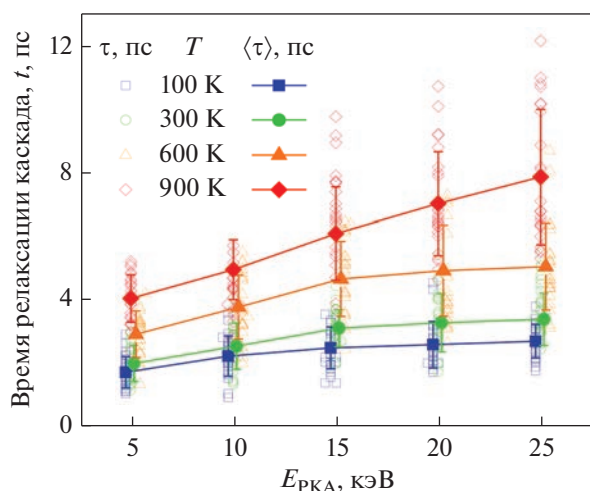


Рис. 6. Время релаксации τ каскада столкновений как функция (E_{PKA}, T) . Полными символами обозначено время релаксации отдельных каскадов. Время релаксации $\langle \tau \rangle$, усредненное по серии каскадов столкновений с одинаковыми значениями (E_{PKA}, T) , показано сплошными символами. Соответствующие среднеквадратичные отклонения отмечены планками.

ных температурах смена зависимости наблюдается в интервале $5 \leq E_{\text{PKA}} \leq 10$ кэВ. При комнатной температуре и $T = 600$ К такой переход протекает уже при энергиях $10 \leq E_{\text{PKA}} \leq 15$ кэВ. При $T = 900$ К стационарные значения $\langle \tau \rangle$ достигаются при еще более высоких E_{PKA} , а сам переход происходит в широком интервале энергий ПВА.

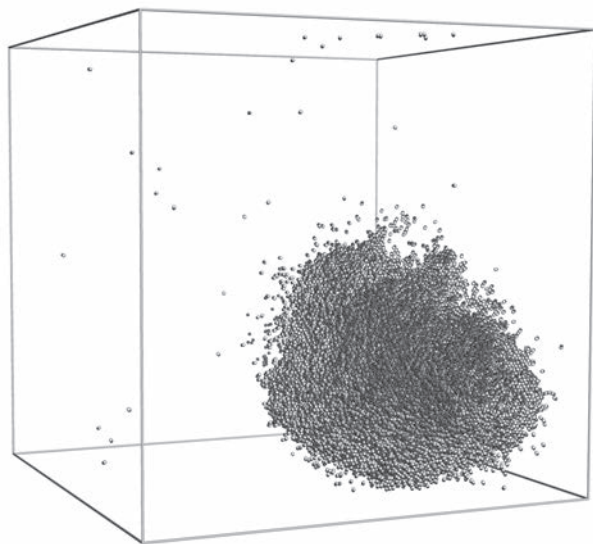


Рис. 7. Каскадная область смещений, созданная ПВА с энергией 25 кэВ в α -титане при $T = 900$ К. Вакансии и смещенные атомы показаны соответственно белым и серым цветом.

В континуальном приближении диссипация энергии изолированной каскадной области смещений представляет собой процесс распространения тепла от точечного импульсного источника мощностью E_{PKA} в бесконечной среде. Соответствующее фундаментальное решение [34] уравнения теплопроводности определяет время релаксации теплового импульса как $\tau \propto E_{\text{PKA}}^{2/3}$, что вполне согласуется с монотонным ростом времени релаксации каскада при увеличении E_{PKA} в интервале низких энергий ПВА на рис. 6, но не объясняет отсутствие зависимости τ от E_{PKA} при больших энергиях ПВА.

Отсутствие зависимости τ от E_{PKA} указывает на образование субкаскадов, см. [22]. Чтобы подтвердить различия в морфологии каскадной области смещений, визуализировали каскады столкновений в момент времени, соответствующий максимуму N_{FP} .

Все каскады столкновений в α -титане можно разделить на две группы. В первом случае каскадная область смещений похожа на деформированную сферу, см. рис. 7. Область атомных смещений второго типа имеет нерегулярную форму и распадается на субкаскады, см. рис. 8.

При низких температурах/высоких энергиях ПВА доминирует морфология каскадной области смещений, приведенная на рис. 8. Из 24 каскадов столкновений, инициированных ПВА с энергией $E_{\text{PKA}} = 25$ кэВ в α -Ti при $T = 100$ К, каскадная область смещений аналогичная рис. 7 наблюдалась только в двух случаях. Остальные каскады распа-

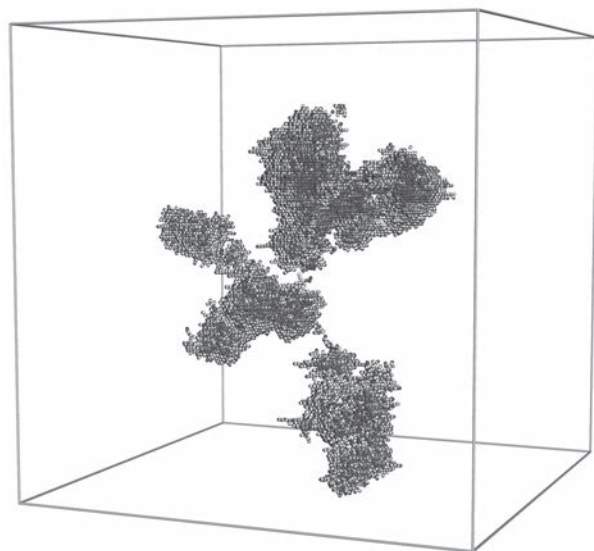


Рис. 8. 25 кэВ каскады столкновений в α -титане при $T = 100$ К преимущественно распадаются на субкаскады. Цветовая кодировка совпадает с рис. 7.

дались на субкаскады подобные показанному на рис. 8.

При увеличении температуры облучения доля 25 кэВ каскадов смещений, идентичных приведенному на рис. 7, увеличивается и при $T = 900$ К достигает $\approx 2/3$. Уменьшение $E_{\text{РКА}}$ также ведет к увеличению доли равноосных каскадов.

Результаты моделирования каскадов столкновений в α -Ti указывают на взаимосвязь времени релаксации каскада и морфологии каскадной области смещений. Время релаксации каскадов столкновений, распадающихся на субкаскады, не зависит от $E_{\text{РКА}}$. Если время релаксации каскадов столкновений увеличивается с ростом $E_{\text{РКА}}$, можно утверждать, что область атомных смещений таких каскадов имеет близкую к равноосной форму.

ВЫВОДЫ

Методом МД исследовали первичное дефектообразование в титане, подвергнутом облучению быстрыми частицами в режиме упругих потерь энергии. Рассмотрели каскады столкновений, инициированные ПВА с энергиями $5 \leq E_{\text{РКА}} \leq 25$ кэВ в α -титане при температуре $100 \leq T \leq 900$ К. Для каждой пары $(E_{\text{РКА}}, T)$ сгенерировали репрезентативную выборку из 24 каскадов. Определили число пар Френкеля и время релаксации каскадов столкновений в зависимости от $(E_{\text{РКА}}, T)$. Среднее число пар Френкеля $\langle N_{\text{ФР}} \rangle \propto E_{\text{РКА}}$ и при необходимости может быть экстраполировано в область более высоких энергий ПВА.

Среднее число пар Френкеля $\langle N_{\text{ФР}}(E_{\text{РКА}}, T) \rangle$ укладывается в $0.3NRT$ при всех $(E_{\text{РКА}}, T)$, если выбрать пороговую энергию смещения $28 \leq E_d \leq 40$ эВ в зависимости от температуры облучения.

Все смоделированные каскады столкновений в α -титане можно разделить на две группы. При низких энергиях ПВА/высоких температурах доминируют каскады равноосной формы, а время их релаксации растет с увеличением $E_{\text{РКА}}$. При высоких энергиях ПВА/низких температурах каскадная область смещений распадается на субкаскады, а время их релаксации практически не зависит от $E_{\text{РКА}}$.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, субсидия № 075-11-2021-085, с использованием ресурсов высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ и центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”, <http://ckp.nrcki.ru/>.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ушков С.С., Кожевников О.А. Опыт применения и значение титановых сплавов для развития атомной энергетики России // Вопросы материаловедения. 2009. Т. 59. № 3. С. 172–187.
2. Орыщенко А.С., Кудрявцев А.С., Михайлов В.И., Леонов В.П. Титановые сплавы для морской техники и атомной энергетики // Вопросы материаловедения. 2011. Т. 65. № 1. С. 60–74.
3. Горынин И.В., Рыбин В.В., Ушков С.С., Кожевников О.А. Титановые сплавы как перспективные реакторные материалы / Радиационное материаловедение и конструктивная прочность реакторных материалов: Юбилейный сборник, посвященный 100-летию акад. И.В. Курчатова и А.П. Александрова. СПб.: ФГУП ЦНИИ КМ “Прометей”. 2002. С. 37–45.
4. Cai W., Li J., Uberuaga B.P., Yip S. 1.18 – Molecular Dynamics / Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition). Elsevier, Amsterdam. 2020. V. 1. P. 573–594.
5. Stoller R.E., Zarkadoulas E. 1.20 – Primary Radiation Damage Formation in Solids / Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition). Elsevier, Amsterdam. 2020. V. 1. P. 620–662.
6. Wooding S.J., Bacon D.J., Phythian W.J. A computer simulation study of displacement cascades in α -titanium // Philos. Mag. A. 1995. V. 72. № 5. P. 1261–1279.
7. Voskoboinikov R.E. A Study of Primary Damage Formation in Collision Cascades in Titanium // Inorg. Mater. Appl. Res. 2022. V. 13. P. 1736–1745.
8. Воскобойников Р.Е. Моделирование каскадов столкновений в α -Ti. Статистика и закономерности образования кластеров точечных дефектов. // ФММ. 2023. Т. 124. № 8. С. 679–686.
9. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 024102-1-14.
10. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B. 1984. V. 29. P. 6443–6453.
11. Gärtner K., Stock D., Weber B., Betz G., Hautala M., Hobler G., Hou M., Sarite S., Eckstein W., Jiménez-Rodríguez J. J., Pérez-Martín A. M. C., Andribet E. P., Konoplev V., Gras-Marti A., Posselt M., Shapiro M. H., Tombrello T. A., Urbassek H.M., Hensel H., Yamamura Y., and Takeuchi W. Round robin computer simulation of ion transmission through crystalline layers // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1995. V. 102. P. 183–197.
12. Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The stopping and range of ions in solids. Vol. 1. Pergamon, Oxford, 1985. 321 p.
13. Shirley C.G., Chaplin R.L. Evaluation of the Threshold Energy for Atomic Displacements in Titanium // Phys. Rev. B. 1972. V. 5. P. 2027–2029.
14. Sattonnay G., Rullier-Albenque F., Dimitrov O. Determination of displacement threshold energies in pure Ti and in γ -TiAl alloys by electron irradiation // J. Nucl. Mater. 1999. V. 275. P. 63–73.
15. Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука. 1976. 376 с.

16. *Russell A.M., Cook B.A.* Coefficient of thermal expansion anisotropy and texture effects in ultra-thin titanium sheet // *Scripta Mater.* 1997. V. 37. № 10. P. 1461–1467.
17. <http://www.srim.org/SRIM/SRIM-2013-Std.e>.
18. *Paul H.* Nuclear stopping power and its impact on the determination of electronic stopping power // *AIP Conf. Proc.* 2013. V. 1525. P. 309–313.
19. *Allen M.P., Tildesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. Clarendon, Oxford, 1987. 408 p.
20. *Marqués L.A., Rubio J.E., Jaraíz M., Enríquez L., Barbolla J.* An improved molecular dynamics scheme for ion bombardment simulations // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 1995. V. 102. P. 7–11.
21. *Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J.* Statistics of primary damage creation in high-energy displacement cascades in copper and zirconium // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 2006. V. 242. P. 68–70.
22. *Воскобойников Р.Е.* Радиационные дефекты в алюминии. Моделирование первичных повреждений в объеме материала // *ФММ.* 2019. Т. 120. № 1. С. 3–10.
23. *Voskoboinikov R.* A contribution of $L1_0$ ordered crystal structure to the high radiation tolerance of γ -TiAl intermetallics // *Instr. Meth. Phys. Res. B.* 2019. V. 460. P. 92–97.
24. *Voskoboinikov R.* An insight into radiation resistance of $D0_{19}$ Ti₃Al intermetallics // *J. Nucl. Mater.* 2019. V. 519. P. 239–246.
25. *Voskoboinikov R.* MD simulations of primary damage formation in $L1_2$ Ni₃Al intermetallics // *J. Nucl. Mater.* 2019. V. 522. P. 123–135.
26. *Lindemann P.* Über die Berechnung molekularer Eigenfrequenzen // *Physikalische Zeitschrift.* 1910. V. 11. P. 609–612.
27. *Nordlund K., Averback R.S.* Point defect movement and annealing in collision cascades // *Phys. Rev. B.* 1997. V. 56. P. 2421–2431.
28. *Voskoboinikov R.E., Osetsky Yu.N., Bacon D.J.* Computer simulation of primary damage creation in displacement cascades in copper. I. Defect creation and cluster statistics // *J. Nucl. Mater.* 2008. V. 377. P. 385–395.
29. *Nordlund K., Sand A.E., Granberg F., Zinkle S.J., Stoller R., Averback R.S., Suzudo T., Malerba L., Banhart F., Weber W.J., Willaime F., Dudarev S., Simeone D.* Primary Radiation Damage in Materials: Review of Current Understanding and Proposed New Standard Displacement Damage Model to Incorporate In-cascade Mixing and Defect Production Efficiency Effects // *OECD Nuclear Energy Agency, Paris.* 2015. 87 p.
30. *Bacon D.J., Osetsky Yu.N., Stoller R., Voskoboinikov R.E.* MD description of damage production in displacement cascades in copper and α -iron // *J. Nucl. Mater.* 2003. V. 323. P. 152–162.
31. *Norgett L.K., Robinson M.T., and Torrens I.M.* A proposed method for calculating displacement dose rates // *Nucl. Eng. Design.* 1975. V. 33. P. 50–54.
32. *Bacon D.J., Gao F., Osetsky Yu.N.* The primary damage state in fcc, bcc and hcp metals as seen in molecular dynamics simulations // *J. Nucl. Mater.* 2000. V. 276. P. 1–12.
33. *Воскобойников Р.Е.* Моделирование первичных радиационных повреждений в никеле // *ФММ.* 2020. Т. 121. № 1. С. 18–24.
34. *Араманович И.Г., Левин В.И.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1969. 288 с.