

## Диффузия нанопузырей в ГЦК алюминии

А. С. Антропов<sup>1)</sup>

*Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия*

*Московский физико-технический институт (ГУ), 141701 Долгопрудный, Россия*

Поступила в редакцию 15 июля 2020 г.

После переработки 12 августа 2020 г.

Принята к публикации 12 августа 2020 г.

Существующие теории диффузии газонаполненных и пустых пузырей в твердых телах пока не обладают достаточной предсказательной силой и требуют уточнений, которые могут быть сделаны с использованием моделирования. В работе теоретически обосновывается метод ускоренного молекулярно-динамического моделирования дрейфа пузыря в градиенте давления. С помощью этого метода рассчитывается коэффициент диффузии пустых нанопузырей в алюминии. Теория диффузии путем образования критических террас на гранях дополнена таким образом, чтобы не возникало противоречия с континуальной моделью для макроскопических размеров. Результаты моделирования показывают ключевую роль механизма образования террас в нанопузырях и подтверждают дополненную теорию. Учет влияния газа позволяет сравнить результаты моделирования с экспериментальными данными. В результате сравнения также подтверждается механизм образования террас.

DOI: 10.31857/S1234567820170097

В данной работе речь пойдет о диффузии пузырей (полостей) в объеме зерна металла. Существует множество теоретических моделей процессов, определяющих скорость диффузии в таких условиях. Континуальная теория трех основных механизмов переноса атомов подробно описана в [1, 2]. При этом ключевой параметр одного из механизмов, коэффициент поверхностной самодиффузии, может зависеть от радиуса пузыря [3]. В фасеточных пузырях может играть роль частота образования критических террас на гранях [4, 5]. Газ, находящийся в пузыре, влияет на кинетику процессов на поверхности, причем есть разные подходы к учету этого влияния [6, 7]. Давление газа в этих теориях традиционно определяется как равновесное Лапласовское, однако учет кинетики переходов вакансий и газа между пузырем и объемом матрицы ведет к другому результату [8].

Наблюдение броуновского движения пузырей с помощью электронного микроскопа является наиболее прямым экспериментальным способом верификации описанных теорий. По зависимости коэффициента диффузии от радиуса пузыря предполагают ключевой механизм, однако это затруднено учетом влияния газа. Для нанопузырей в диоксиде урана предполагались как механизм поверхностной самодиффузии [9], так и механизм образования террас [10]; в золоте – аналогично [5, 11]; в меди [12] и алюми-

нии [13] – механизм поверхностной самодиффузии; в ванадии [14] – механизм образования террас.

Таким образом, проверенной количественной теории, способной предсказывать механизм и коэффициент диффузии пузырей в широком диапазоне радиусов и температур пока нет. Атомистическое моделирование может помочь решить эту задачу, последовательно рассматривая все упомянутые факторы. Квантовыми и классическими методами моделируется диффузия точечных дефектов (например [15, 16]). Методами молекулярной динамики (МД) исследуется равновесное состояние пузырей [17–19], а также диффузия небольших кластеров вакансий [20, 21]. Диффузия пузырей моделировалась методами кинетического Монте-Карло [22, 23] и методами “phase-field” [24, 25], которые, однако, не могут в полной мере описывать поверхностные эффекты. Наконец популяции пузырей и выход газа из зерна моделируются континуальными методами [26].

Ранее нами было проведено МД моделирование диффузии полостей в модельной двумерной решетке [27], результаты которого согласовались с континуальной моделью диффузии. Однако в ОЦК уране [28] моделирование показало ключевую роль механизма образования террас. В данной работе впервые результаты моделирования диффузии пузырей сравниваются не только с теорией, но и с экспериментальными данными для типичного ГЦК металла – алюминия. Алюминий интересен и с прак-

<sup>1)</sup>e-mail: antropov@phystech.edu

тической точки зрения, как элемент матрицы ядерных топлив, так как диффузия пузырей влияет на транспорт газовых продуктов деления в них [29, 30]. В работе моделируется диффузия пустых пузырей (кластеров вакансий), однако впоследствии все предложенные методы могут быть распространены на пузыри, содержащие газ. Рассматриваются пузыри наноразмеров (радиус от 9 до 18 Å). Они представляют особый интерес по двум причинам. С одной стороны, именно в них проявляются отклонения от континуальной теории, которые являются главным предметом рассмотрения в данной статье. С другой, нанопузыри являются наиболее подвижными, и их диффузия вносит главный вклад в процессы коалесценции пузырей и выхода газа из зерна в радиационных материалах. Эксперименты по наблюдению броуновского движения пузырей в алюминии также проводились для наноразмеров – от 10 до 30 Å.

Существует три механизма переноса атомов с одной стороны пузыря на другую: объемная самодиффузия, поверхностная самодиффузия и перенос через сам пузырь (испарение-конденсация). Механизм переноса через пузырь в большинстве рассматриваемых материалов выражен очень слабо и им можно пренебречь. Легко показать [1], что в случае пузырей размером порядка  $10^{-9}$ – $10^{-7}$  м поверхностный механизм преобладает над объемным. Выражение для коэффициента диффузии пузыря радиусом  $R$  за счет поверхностной самодиффузии  $D_b^s$  было теоретически выведено в рамках континуального рассмотрения (атомные размеры пренебрежимо малы по сравнению с размерами пузыря) [1, 2]:

$$D_b^s = D_s \frac{3\Omega^{4/3}}{4\pi R^4}, \quad (1)$$

где  $D_s$  – коэффициент поверхностной самодиффузии. По теории свободных блужданий коэффициент поверхностной самодиффузии можно выразить так:

$$D_s = \frac{1}{4} \nu_0 a_0^2 \exp\left(-\frac{G_f + G_m}{kT}\right), \quad (2)$$

где  $G_f$  и  $G_m$  – свободные энергии формирования и миграции наиболее подвижных поверхностных дефектов,  $\nu_0$  – средняя частота тепловых колебаний атомов,  $a_0$  – расстояние между ближайшими атомами поверхностного слоя.

Экспериментально было обнаружено, что в фасеточных пузырях (пузырях с явно выраженными устойчивыми гранями) скорость диффузии может определяться частотой образования критических террас [5]. Для того, чтобы грань переместилась на одну атомную плоскость, на ней должна сначала

образоваться и вырасти терраса (кластер из поверхностных вакансий). Образование террасы повышает свободную энергию системы и из-за этого возникает дополнительный энергетический барьер.

Теория этого механизма была подробно разобрана Биром в статьях [4, 31, 32]. В статье [28] приводится выражение для коэффициента диффузии в случае такого механизма без дополнительных предположений о форме критической террасы и энергии переходного состояния:

$$D_b^t = \frac{3\Omega\nu_0 a_0 N_{cr} K_{cr}}{2\pi R^2} \exp\left(-\frac{G_f + G_m + G_{cr}}{kT}\right), \quad (3)$$

где  $N_{cr}(R)$  – количество вакансий в террасе критического размера,  $K_{cr}(R)$  – количество атомов, окружающих террасу (рис. 1, справа),  $\Omega$  – атомный объем,  $G_{cr}(R)$  – свободная энергия образования критической террасы.

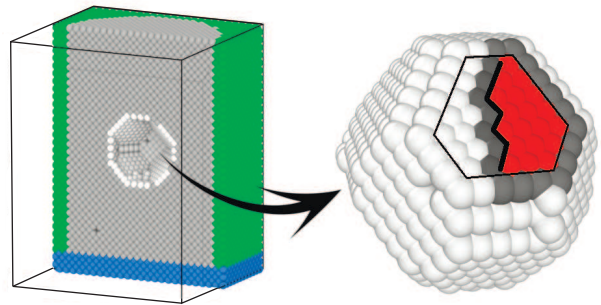


Рис. 1. (Цветной онлайн) Слева – расчетная ячейка для ускоренного метода, синие атомы заморожены, зеленые – термостат, белые – атомы поверхности пузыря. Справа – только атомы поверхности. Показано возможное расположение террасы. Внутри шестиугольника – атомы грани, красные –  $N_{cr}$  атомов террасы, серые –  $K_{cr}$  атомов окружения, жирная линия – ступень

Бир предполагает [32], что  $G_{cr}(R) = \epsilon l_{cr}$ , где  $\epsilon$  – энергия на единицу длины ступени,  $l_{cr}$  – длина критической ступени. Проблема этой теории в том, что в таком случае  $D_b^t$  экспоненциально падает с ростом радиуса (так как  $l_{cr} \sim R$ ) и не переходит в формулу (1) при  $R \rightarrow \inf$  [6]. В этой статье предлагается способ исправления теории Бира. Выражение для свободной энергии, данное Биром, не учитывает конфигурационную энтропию состояния с террасой. Множество вариантов размещения террасы на грани увеличивает эту энтропию  $S_{cr}$ , уменьшая свободную энергию. Поэтому

$$G_{cr}(R) = E_{cr} - TS_{cr} = \epsilon l_{cr} - kT \ln W_{cr}, \quad (4)$$

где  $E_{cr}$  – потенциальная энергия ступени,  $W_{cr}$  – статистический вес состояния с критической террасой.

Учет энтропии террас устраняет вышеупомянутое противоречие: в больших пузырях эта энтропия настолько велика, что, в силу флуктуаций, на гранях всегда есть достаточно большие террасы, и переход атома из террасы на одной грани в террасу на другой не отражается на энергии. В таком случае время появления критической террасы становится меньше характерного времени диффузионного перемещения всех атомов грани на характерный размер пузыря. В итоге коэффициент диффузии определяется как  $\min(D_b^t, D_b^s)$ . Выражение (3) можно переписать в более удобной форме с учетом (4) и (2):

$$D_b^t = D_s \frac{6\Omega N_{cr} K_{cr} W_{cr}}{\pi a_0 R^2} \exp\left(-\frac{\epsilon l_{cr}}{kT}\right). \quad (5)$$

Основной способ численного расчета коэффициента диффузии  $D$  некоторого объекта основан на моделировании его броуновского движения:

$$\overline{\Delta r^2} = 6Dt. \quad (6)$$

В статьях [27, 28] для расчета коэффициента диффузии пузыря мы предложили метод вынуждающей силы. Дополним теоретическое обоснование этого метода. В общей формулировке он опирается на соотношение Эйнштейна: если на объект действует сила  $F$  по оси  $x$ , то:

$$\overline{\Delta x} = \frac{D}{kT} Ft. \quad (7)$$

Соотношение Эйнштейна является следствием флуктуационно-диссипативной теоремы, в которой  $F$  обозначает силу в обобщенном смысле, т.е. наличие в Гамильтониане члена типа  $-Fx$  [33]. Представим, что в некоторой области неподвижного кристалла, содержащей пузырь из  $N_b$  вакансий, на все атомы действует сила  $f$ . При изотермическом перемещении пузыря на  $\Delta x$ , сила совершит работу  $N_b f \Delta x$ . Тогда обобщенная сила  $F = f N_b$ . Легко показать, что в Гамильтониане можно пренебречь энергией создавшихся упругих напряжений, так как она она много меньше работы силы по перемещению пузыря.

Для применения соотношения Эйнштейна в процессе моделирования необходимо подобрать достаточно малую силу, чтобы скорость зависела от нее линейно. С точки зрения элементарных кинетических процессов, наличие силы изменяет энергетические барьеры для атомных прыжков в зависимости от направления. Вероятность прыжка  $\sim \exp(-G_m/kT)$ . Поэтому для того чтобы использовать линейное приближение, необходимо  $f\lambda \ll kT < G_m$ ,  $\lambda$  – межатомное расстояние.

Минимальное различимое перемещение пузыря в дискретной решетке –  $\lambda$ . Характерное время такого перемещения в процессе свободной диффузии, согласно (6),  $\approx \lambda^2/6D$ . Характерное время такого перемещения в процессе дрейфа, согласно (7),  $\approx \lambda kT/N_b f D$ . С учетом указанных выше ограничений на силу  $f$  видно, что этот метод дает выигрыш по времени в случае, когда  $N_b \gg 1$ .

Также в [28] выведен нелинейный аналог этого метода на случай, когда подвижность определяется механизмом образования террас, и энергия активации процесса велика. В таком случае зависимость скорости от силы дается следующей формулой, переходящей в (7) в линейном пределе:

$$V = \frac{4\pi R^2 D_b^t}{3\Omega N_{cr} \cos \phi} \operatorname{sh}\left(\frac{R \cos \phi N_{cr} f}{kT}\right), \quad (8)$$

где  $\phi$  – угол между нормалью к передним граням и направлением силы. В данном случае даже при условии малости изменения барьера для атомных прыжков ( $f\lambda \ll kT$ ) может быть значительным изменение критической энергии террасы ( $R N_{cr} f > kT$ ) и линейное разложение  $\operatorname{sh}$  уже нельзя использовать. Таким образом, линейность зависимости  $V(f)$  в этом диапазоне сил может служить признаком механизма поверхностной самодиффузии, а нелинейность – признаком механизма образования террас.

Расчеты проводились в пакете молекулярно-динамического моделирования LAMMPS с ускорением на GPU [34, 35]. Для взаимодействия атомов алюминия использовался EAM (*Embedded atom model*) потенциал [36], который хорошо описывает fcc и жидкую фазы алюминия. Существует множество работ по описанию поверхностных эффектов в металлах с помощью модели EAM. Однако, так как свойства поверхности не входят в число оптимизируемых параметров при создании потенциала, необходимо проверить правильность их описания. В качестве проверяемых свойств были выбраны энергии образования дефектов на поверхности [111] при нулевой температуре, которые сравнивались с результатами квантово-механических расчетов [37]. Результаты сравнения приведены в табл. 1, выбранный EAM потенциал достаточно хорошо описывает поверхность. Все расчеты проводились для нулевой изобары с периодическими граничными условиями. Для создания пузыря из расчетной ячейки удалялись атомы в сфере заданного радиуса с последующей релаксацией формы пузыря. Линейные размеры ячейки не менее чем в 3 раза превосходили диаметр пузыря. Положение пузыря определялось

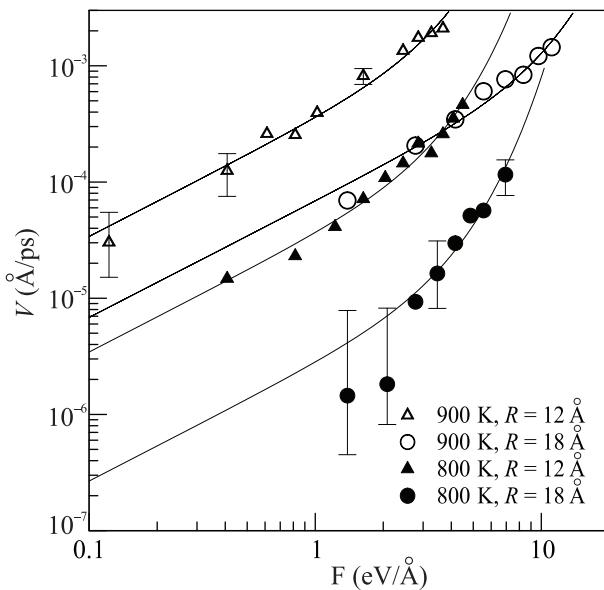
как координаты центра масс группы вакансий, образующих его.

**Таблица 1.** Энергии формирования вакансии и адатома на поверхности [111] в алюминии

	$E_f(\text{vac})$ , эВ	$E_f(\text{ad})$ , эВ
EAM [36]	0.62	0.91
DFT [37]	0.67	1.05

Свободная диффузия пузыря моделировалась в равновесном ансамбле с сохранением числа частиц, объема и полной энергии. Для моделирования дрейфа под действием силы в расчетной ячейке с пузырем замораживался нижний слой атомов, а ко всем остальным прикладывалась сила  $f$ , перпендикулярная замороженному слою. Температура расчетной ячейки поддерживалась постоянной с помощью термостата Ноэ-Гувера, применяемого к атомам, находящимся вне цилиндрической области (см. рис. 1). Моделирование направленной диффузии производилось в диапазоне сил  $f \in [0.0005; 0.01]$  эВ/Å при температурах от 750 до 900 К ( $kT/\lambda \approx 0.018$  эВ/Å).

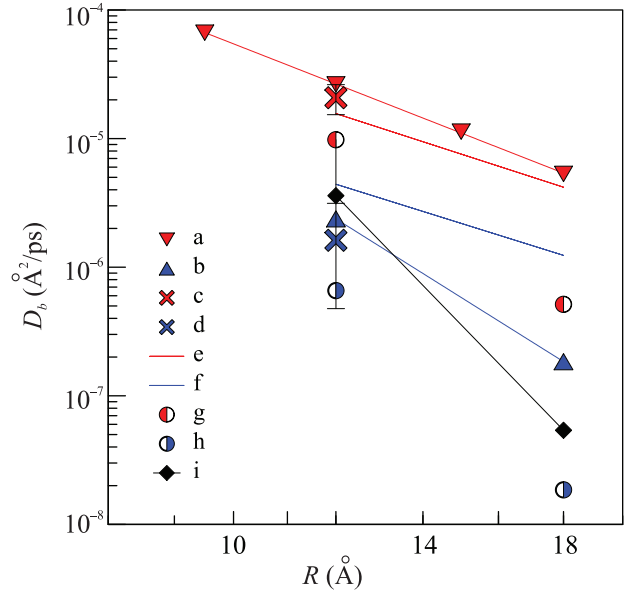
На рисунке 2 показана зависимость скорости пузыря от действующей на него силы  $F = N_b f$  в двойном логарифмическом масштабе для радиусов 12 и 18 Å ( $N_b = 416$  и 1388 атомов соответственно). Точки



**Рис. 2.** Скорость пузыря в зависимости от суммарной действующей силы  $F$ . Аппроксимация по формуле (8)

аппроксимированы зависимостью (8). Прямая с единичным наклоном соответствует линейному пределу, а крутой нелинейный участок – экспоненциальному

пределу. При 900 К точки хорошо ложатся на линейный участок. При понижении температуры начинает проявляться нелинейность, что является признаком механизма образования террас. По линейному пределу были определены подвижности и коэффициенты диффузии пузырей  $D_b^{MD}$ , показанные на рис. 3.



**Рис. 3.** (Цветной онлайн) Коэффициент диффузии пузыря в зависимости от радиуса. a/b – моделирование ускоренным методом  $D_b^{MD}$  для 900/800 К; c/d – моделирование свободной диффузии для 900/800 К; e/f – предсказание  $D_b^s$  (1) для 900/800 К; g/h – предсказание  $D_b^s$  (5) для 900/800 К, i – нормированные на нулевую концентрацию газа экспериментальные данные  $D_b^{\text{exp}}/e^{-n_{gq}}$  для 818 К [13] (см. текст)

На рисунке 3 также показаны коэффициенты, полученные из моделирования свободной диффузии пузырей радиусом 12 Å. Видно, что результаты ускоренного метода согласуются с результатами расчета свободной диффузии в пределах погрешности, при этом, как и было предсказано, они потребовали в 7–15 раз меньше времени. Например, для достаточного смещения при  $T = 900$  К и  $R = 12$  Å и минимальной силе  $f = 0.001$  эВ/Å требуется около ста наносекунд, в то время как при свободной диффузии без силы – около двух микросекунд.

Коэффициент поверхностной самодиффузии был рассчитан в пузырях радиусом 12 и 18 Å аналогично работе [38]. Принадлежность атома к поверхностному слою определялась по объему его ячейки Вороного, был выбран порог  $20 \text{ Å}^3$  при  $\Omega \approx 17.5 \text{ Å}^3$ . Значения  $D_b^s$ , предсказанные формулой (1) на основе рассчитанных значений  $D_s$ , показаны на рис. 3.

Можно предположить, что для 900 К  $D_b^t \approx D_b^s$  и поэтому зависимость от радиуса близка к предсказанию формулы (1), а для 800 К  $D_b^t < D_b^s$  и зависимость определяется механизмом нуклеации террас. По температурной зависимости  $D_b^s$  и  $D_b^{MD}$  (рис. 4) можно

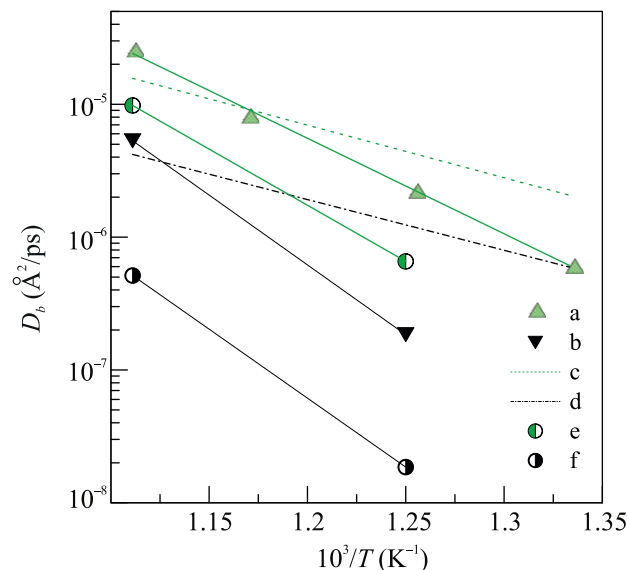


Рис. 4. (Цветной онлайн) Коэффициент диффузии пузыря в зависимости от температуры: a/b – моделирование ускоренным методом  $D_b^{MD}$  для 12/18 Å; c/d – предсказания  $D_b^s$  (1) для 12/18 Å; e/f – предсказания  $D_b^t$  (5) для 12/18 Å

определить энергию активации процессов поверхностной самодиффузии  $E_s^{act}$  (0.77 эВ) и диффузии пузыря  $E_b^{act}$  (1.4/2.0 эВ для 12/18 Å соответственно). Энергия активации диффузии пузыря больше энергии активации самодиффузии и зависит от радиуса, что соответствует механизму образования террас. Дополнительная энергия критической террасы  $E_{cr}^{MD} = E_b^{act} - E_s^{act}$  приведена в табл. 2.

Таблица 2. Значение  $E_{cr}$  из моделирования и теоретическая оценка параметров в формуле (5)

$R, \text{Å}$	$E_{cr}^{MD}, \text{эВ}$	$\epsilon l_{cr}, \text{эВ}$	$N_{cr}, \text{Å}$	$K_{cr}$	$W_{cr}$
12	0.6	0.9	6	8	6
18	1.2	1.3	18	20	20

Для проверки формулы (5), описывающей механизм образования террас, оценим входящие в нее величины для  $R = 12$  и  $18 \text{Å}$ . Предположим (как и в статье [32]), что критическая терраса состоит из половины атомов грани. Потенциальную энергию, приходящуюся на единичную длину ступени  $\epsilon$ , можно оценить из статического моделирования при нулевой температуре. Было получено значение  $\epsilon = 0.07 \text{эВ/Å}$ .

Среднее количество атомов, окружающих террасу,  $K_{cr}$  и среднюю длину ступени  $l_{cr}$  можно оценить из геометрических соображений (рис. 1). Количество возможных расположений террасы на грани  $W_{cr}$  оценить сложнее всего, для этого приблизительно подсчитывалось количество возможных вариантов провести ступень, отсекающую половину грани. Результаты оценки приведены в табл. 1.

Рассчитанная теоретически энергия  $\epsilon l_{cr}$  совпадает с энергией критической террасы из моделирования  $E_{cr}^{MD}$  в пределах 8% для  $R = 18 \text{Å}$  и 30% для  $R = 12 \text{Å}$ . Таким образом, формула (5) объясняет температурную зависимость результата. Абсолютные значения  $D_b^t$ , рассчитанные по (5), приведены на рис. 3 и 4. По порядку они совпадают с результатами моделирования и лучше, чем непрерывная теория (1), предсказывают зависимость от радиуса. Большая ошибка абсолютного значения связана, в первую очередь, с приблизительной оценкой  $W_{cr}$ .

Для сравнения с экспериментальными данными [13] необходимо учесть влияние газа (гелия) на коэффициент поверхностной самодиффузии  $D_s$ , которое было рассмотрено Михлиным [6], а также Вещуновым и Шестаком [7]. Оба подхода предсказывают экспоненциальное падение  $D_s(n_g)$  с ростом концентрации газа  $n_g$ . Воспользуемся оценкой Михлина, в которой есть только один параметр  $q$  – свободный от газа объем вокруг атома на поверхности, необходимый для перескока:

$$D_s(n_g) = D_s(0)e^{-n_g q}. \quad (9)$$

Так как для обоих механизмов (1) и (5)  $D_b \sim D_s$ , то можно привести экспериментальный коэффициент диффузии  $D_b^{exp}$  к нулевой концентрации гелия, разделив его на  $e^{-n_g q}$ . Зависимость равновесной концентрации гелия от радиуса пузырей для алюминия приведена в работе [39] ( $n_g = 0.05$  и  $0.041 \text{Å}^{-3}$  для  $R = 12$  и  $18 \text{Å}$  соответственно). Наилучшее согласование результатов моделирования с экспериментом достигается при  $q = 285 \text{Å}^3$ . Экспериментальные данные для 818 К, приведенные к нулевой концентрации газа, нанесены на рис. 3. Зависимость от радиуса для нормированных результатов эксперимента больше соответствует механизму образования террас, чем механизму поверхностной самодиффузии. Таким образом, эксперимент подтверждает механизм образования террас, обнаруженный в расчетах. В дальнейшей работе планируется определить коэффициент  $q$  напрямую из моделирования.

В результате работы было проведено МД моделирование диффузии пустых нанопузырей в ГЦК алюминии для радиусов от 9 до  $18 \text{Å}$  и температур

от 750 до 900 К. Полученные коэффициенты диффузии сравнивались с предсказаниями двух разных теоретических моделей: континуальной, где скорость определяет только поверхностная самодиффузия, и механизма образования террас.

Энергия активации диффузии рассматриваемых пузырей больше энергии активации поверхностной самодиффузии, а разница соответствует теоретической оценке потенциальной энергии ступени, делящей грань [111] пополам. Это подтверждает ключевую роль механизма образования террас для нанопузырей. Уточнена теория Бира о свободной энергии образования террасы, в которую добавлена конфигурационная энтропия состояния с критической террасой. Оценка коэффициента диффузии по уточненной теории предсказывает полученную в моделировании зависимость от радиуса и температуры, а также абсолютные значения по порядку величины.

Для разных температур зависимость итогового коэффициента диффузии от радиуса соответствует разным механизмам. Так как энергия активации механизмов разная, то наиболее медленным может быть как один, так и другой в зависимости от температуры.

Учет влияния газа позволяет сравнить результаты моделирования с экспериментом. Нормированные для нулевой концентрации газа экспериментальные данные подтверждают зависимость от радиуса, соответствующую механизму образования террас. В настоящий момент ведется работа по моделированию пузырей с гелием для уточнения влияния газа и непосредственного сравнения с экспериментом.

Работа проведена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 18-08-01495).

1. Я. Е. Гегузин, *Движение микроскопических включений в твердых телах*, Металлургия, М. (1971).
2. P. Goodhew and S. Tyler, Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences **377**, 151 (1981).
3. E. Y. Mikhlin and V. Chkuaseli, Phys. Status Solidi (a) **29**, 331 (1975).
4. W. Beere and G. Reynolds, Acta Metallurgica **20**, 845 (1972).
5. L. Willertz and P. Shewmon, Metall. Mater. Trans. B **1**, 2217 (1970).
6. E. Y. Mikhlin, Phys. Status Solidi (a) **56**, 763 (1979).
7. M. Veshchunov and V. Shestak, J. Nucl. Mater. **376**, 174 (2008).
8. L. Noirot, J. Nucl. Mater. **447**, 166 (2014).
9. M. E. Gulden, J. Nucl. Mater. **23**, 30 (1967).

10. C. Baker, J. Nucl. Mater. **71**, 117 (1977).
11. J. Evans and A. van Veen, J. Nucl. Mater. **168**, 12 (1989).
12. R. Barnes and D. Mazey, Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences **275**, 47 (1963).
13. K. Ono, S. Furuno, K. Hojou, T. Kino, K. Izui, O. Takaoka, N. Kubo, K. Mizuno, and K. Ito, J. Nucl. Mater. **191**, 1269 (1992).
14. S. Tyler and P. Goodhew, J. Nucl. Mater. **92**, 201 (1980).
15. É. Bévilion, R. Ducher, M. Barrachin, and R. Dubourg, J. Nucl. Mater. **434**, 240 (2013).
16. G. Smirnov and V. Stegailov, J. Phys. Condens. Matter **31**, 235704 (2019).
17. A. Karavaev, V. Dremov, and G. Ionov, J. Nucl. Mater. **468**, 46 (2016).
18. X.-Y. Liu and D. Andersson, J. Nucl. Mater. **462**, 8 (2015).
19. B. Beeler, D. Andersson, M. W. Cooper, and Y. Zhang, J. Nucl. Mater. **523**, 413 (2019).
20. D. Perez, L. Sandoval, S. Blondel, B. D. Wirth, B. P. Uberuaga, and A. F. Voter, Sci. Rep. **7**, 2522 (2017).
21. N. Gao, L. Yang, F. Gao, R. J. Kurtz, D. West, and S. Zhang, J. Phys. Condens. Matter **29**, 145201 (2017).
22. K. Morishita and R. Sugano, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **255**, 52 (2007).
23. D. Schwen and R. Averback, J. Nucl. Mater. **402**, 116 (2010).
24. S. Hu, C. H. Henager Jr, H. L. Heinisch, M. Stan, M. I. Baskes, and S. M. Valone, J. Nucl. Mater. **392**, 292 (2009).
25. Y. Gao, Y. Zhang, D. Schwen, C. Jiang, C. Sun, and J. Gan, Materialia **1**, 78 (2018).
26. L. Verma, L. Noirot, and P. Maugis, J. Nucl. Mater. **528**, 151874 (2020).
27. А. Антропов, В. Озрин, В. Стегайлов, В. Тарасов, ЖЭТФ **156**, 125 (2019).
28. А. Антропов and V. Stegailov, J. Nucl. Mater. 152110 (2020).
29. M. Veshchunov, V. Ozrin, V. Shestak, V. Tarasov, R. Dubourg, and G. Nicaise, Nuclear Engineering and Design **236**, 179 (2006).
30. M. Tonks, D. Andersson, R. Devanathan, R. Dubourg, A. El-Azab, M. Freyss, F. Iglesias, K. Kulacsy, G. Pastore, S. R. Phillpot, and M. Welland, J. Nucl. Mater. **504**, 300 (2018).
31. W. Beere, Phil. Mag. **25**, 189 (1972).
32. W. Beere, J. Nucl. Mater. **45**, 91 (1972).
33. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, Наука, М. (1976), ч. 1 (т. 5).
34. W. M. Brown, P. Wang, J. S. Plimpton, and A. N. Tharrington, Comput. Phys. Commun. **182**, 898 (2011).

35. V. Stegailov, E. Dlinnova, T. Ismagilov, M. Khalilov, N. Kondratyuk, D. Makagon, A. Semenov, A. Simonov, G. Smirnov, and A. Timofeev, *Int. J. High Perform. Comput. Appl.* **33**, 507 (2019).
36. M. Mendeleev, M. Kramer, C. A. Becker, and M. Asta, *Phil. Mag.* **88**, 1723 (2008).
37. R. Stumpf and M. Scheffler, *Phys. Rev. B* **53**, 4958 (1996).
38. A. Antropov, V. Ozrin, G. Smirnov, V. Stegailov, and V. Tarasov, *J. Phys. Conf. Ser.* **1133**, 012029 (2018).
39. W. Jäger, R. Manzke, H. Trinkaus, G. Crecelius, R. Zeller, J. Fink, and H. Bay, *J. Nucl. Mater.* **111**, 674 (1982).