

Н.О. МИКИТЕНКО

Південноукраїнський національний педагогічний університет ім. К.Д. Ушинського  
(Вул. Старопортофранківська, 26, Одеса 65020; e-mail: mykytenkon@gmail.com)РАДІАЦІЙНО-СТИМУЛЬОВАНЕ ФОРМУВАННЯ  
“ВАЖКИХ КЛАСТЕРІВ” В БІНАРНИХ КРИСТАЛАХ

УДК 53.09

Робота присвячена дослідженню особливостей радіаційного дефектоутворення в бінарних кристалах, що складаються з атомів з масами, які значно розрізняються. Використовується класичний метод молекулярної динаміки, але в модифікованій моделі, яка є альтернативою моделі парних зіткнень. Розроблена комп'ютерна програма, яка реалізує молекулярно-динамічний підхід з алгоритмом Верле. Результати роботи свідчать про те, що існує певний інтервал енергій інцидентних частинок, в якому можливе формування так званих “важких” кластерів, тобто кластерів, які складаються з більш важких атомів.

*Ключові слова:* радіаційне дефектоутворення, бінарні кристали, метод молекулярної динаміки, комп'ютерне моделювання.

## 1. Вступ

Хоча вивчення радіаційних дефектів у матеріалах на фундаментальному рівні потребує проведення *ab initio* розрахунків, одержання практично застосовних результатів на цьому шляху є надто складним завданням, навіть при великих об'ємах обчислювальних ресурсів. Отже подальший пошук шляхів створення радіаційно-стійких матеріалів неминує пов'язаний з результатами комп'ютерного моделювання та їх порівнянням з експериментом [1].

Методом молекулярно-динамічного (МД) моделювання ми дослідили особливості утворення радіаційних дефектів в результаті пружних зіткнень в бінарних кристалах, що складаються з атомів з масами, які значно розрізняються (наприклад, сполуки U-Al). Маса Al ( $m_{Al}$ ) приблизно у дев'ять разів менша порівняно з масою U ( $m_U$ ). Тому цей приклад добре відповідає сформульованій задачі. Радіаційно-стимульовані процеси в таких матеріалах мають свою специфіку, яку важливо враховувати при радіаційній обробці матеріалів електрон-

ної техніки [2], в умовах нейтронного опромінення реакторних матеріалів [3], тощо.

Атом кристалічної ґратки зміщується, якщо він отримує енергію більшу, ніж енергія зміщення  $E_d$  [4]. Порогова енергія інцидентної частинки  $E_{thr}$  – це мінімальна енергія, яка забезпечує передачу атому ґратки у пружному зіткненні енергію зміщення  $E_d$ . В свою чергу,  $E_d$  – це мінімальна енергія, яку треба передати атому ґратки для його переходу у міжвузля. Порогова енергія інцидентних частинок,  $E_{thr}$  визначається за формулою:

$$E_d = \frac{m_{ion}}{M} E_{thr}, \quad (1)$$

де  $E_d$  – енергія зміщення атома з вузла в міжвузля,  $E_{thr}$  – порогова енергія,  $m_{ion}$  – маса бомбардируючої частинки,  $M$  – маса атома у кристалічній ґратці.

Якщо прийняти середнє типове значення  $E_d \approx 25$  еВ і припустити, що, наприклад, опромінювання здійснюється іонами азоту ( $N^+$ ), то у сплаві U-Al маємо порогову енергію зміщення атома Al  $\approx 48$  еВ та атома U  $\approx 425$  еВ. Це означає, що в інтервалі енергій  $\approx 48$ –425 еВ для  $N^+$  іонів у кри-

сталічній ґратці сплаву U–Al зміщення зі своїх вузлів буде можливе тільки для атомів Al.

Метою даної роботи є вивчення особливостей виникнення радіаційних дефектів у бінарних кристалах, що складаються з атомів з масами, які значно розрізняються, а також знаходження залежності ймовірності формування так званих “важких” кластерів від енергії бомбардируючих частинок та відношення мас атомів в бінарному кристалі.

## 2. Моделювання процесу утворення “важких” кластерів в бінарних кристалах

Моделювання починаємо зі значень кінетичної енергії, що відповідають пороговій енергії для зміщення “легких” атомів (у нашому прикладі Al)  $E_{\text{thr}} \geq 48$  еВ. При збільшенні значення  $E_{\text{thr}}$  в інтервалі енергій  $\approx 48\text{--}425$  еВ спостерігаємо зміщення атомів Al, і внаслідок цього оточення атомів U розупорядковується. При цьому можна чекати, що атоми U будуть зближуватись, формуючи так звані “важкі” кластери. Результати комп’ютерного моделювання підтверджують це припущення. Урахування формування “важких” кластерів (кластерів, що складаються з “важких” атомів) є важливим при вирішенні різних задач радіаційної фізики.

### 2.1. Модель утворення радіаційних дефектів

У методі МД рух атомів кристала описується рівняннями руху класичної механіки із заданим потенціалом взаємодії [5, 6]. Якщо система складається з  $N$  частинок, то сила, що діє на  $i$ -й атом,  $F_i$  обчислюється як векторна сума сил, що діють з боку інших  $N - 1$  атомів. Тоді для  $i$ -го атома рівняння руху записується:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \sum_{i \neq j}^{N-1} \mathbf{F}(r_{ij}), \quad (2)$$

$$\mathbf{F}(r_{ij}) = - \sum \frac{\partial U(\mathbf{r}_{ij})}{\partial x_i}, \quad (3)$$

де  $m$  – маса атома,  $\mathbf{r}_i(t)$  – радіус-вектор  $i$ -го атома,  $r_{ij}$  – відстань між атомами  $i$  та  $j$ ,  $\mathbf{F}(r_{ij})$  – сила, що діє на  $i$ -й атом з боку інших  $j$  атомів.

Ключовим питанням в МД-моделюванні є вибір потенціалу взаємодії між атомами. Його вибір залежить від природи матеріалу, що досліджується,

і задачі дослідження. У найпростішому випадку передбачається парна взаємодія між частинками кристала [7]. У наближенні парних взаємодій повну потенціальну енергію системи з  $N$  частинок можна записати як суму всіх енергій  $U_{ij}$  між  $i$  та  $j$  частинками. Позначивши через  $r_{ij} := |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$  відстань між  $i$  та  $j$  атомами, маємо

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j>i}^N U_{ij}(r_{ij}). \quad (4)$$

Одним з популярних потенціалів, що використовується при МД-моделюванні атомарних процесів в кристалах, є потенціал Ленарда-Джонса [8–10]:

$$U(r_{ij}) = \frac{A}{r_{ij}^{12}} - \frac{B}{r_{ij}^6}, \quad (5)$$

де  $A = 4\epsilon\sigma^{12}$ ,  $B = 4\epsilon\sigma^6$ ,  $r$  – міжатомна відстань,  $\epsilon$  – глибина потенціальної ями,  $\sigma$  – відстань, на якій міжатомний потенціал дорівнює нулю.

Цей потенціал, як правило, використовують для досліджень, де основна увага приділяється одержанню якісних результатів, а не розрахунку кількісних параметрів матеріалу.

У випадку нашої модельної ґратки параметри різнорідних атомів були визначені як середні для параметрів обох потенціалів. Слід зазначити, що модельна ґратка не відповідає реальній ґратці сполуки U–Al, і введені позначення є умовними:

1. Спочатку була змодельована ґратка, що складається тільки з U атомів та підібрані значення параметрів потенціалу, які забезпечують стабільність цієї ґратки.

2. Також була збудована модельна ґратка для Al атомів, та підібрані відповідні параметри потенціалу.

3. Значення параметрів потенціалу для різнорідних атомів одержані як середні значення:

$$X_{ij} = \frac{X_{ii} + X_{jj}}{2}, \quad (6)$$

де  $X_{ij}$  – значення параметрів потенціалу взаємодії між Al–U атомами,  $X_{ii}$  – значення параметрів потенціалу взаємодії між атомами Al,  $X_{jj}$  – значення параметрів потенціалу взаємодії між атомами U.

Треба підкреслити, що комп’ютерний експеримент проводиться на модельній бінарній ґратці, характерною рисою якої є велика різниця у масах атомів. Саме вплив цієї особливості ґратки на

Таблиця 1. Параметри потенціалів модельної ґратки

№	$A_1$	$B_1$	$A_2$	$B_2$	$A_3$	$B_3$
1	$3,7 \cdot 10^{-12}$	$0,16 \cdot 10^{-6}$	$2,7 \cdot 10^{-12}$	$0,017 \cdot 10^{-6}$	$3,2 \cdot 10^{-12}$	$0,09 \cdot 10^{-6}$
2	$3,5 \cdot 10^{-12}$	$0,12 \cdot 10^{-6}$	$2,5 \cdot 10^{-12}$	$0,012 \cdot 10^{-6}$	$3,0 \cdot 10^{-12}$	$0,066 \cdot 10^{-6}$
3	$3,1 \cdot 10^{-12}$	$0,09 \cdot 10^{-6}$	$2,1 \cdot 10^{-12}$	$0,01 \cdot 10^{-6}$	$2,6 \cdot 10^{-12}$	$0,05 \cdot 10^{-6}$

радіаційне дефектоутворення треба було дослідити. Тому при побудові модельної ґратки ми використали реальні параметри потенціалів Al ( $\sigma = 1,1646 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon = 0,2703 \text{ eV}$ ) та Pb ( $\sigma = 1,1836 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon = 0,2348 \text{ eV}$ ) [11]. В тексті ми говоримо про сполуки U-Al, оскільки вони відносяться до важливих реакторних матеріалів. А нас, зрештою, цікавить результат, що визначається великою різницею мас атомів.

В табл. 1 наведені параметри потенціалів для модельної кубічної ґратки, де  $A_1$ ,  $B_1$  це значення параметрів потенціалу модельної ґратки для легких атомів (Al),  $A_2$ ,  $B_2$  відповідно для важких атомів (U), та  $A_3$ ,  $B_3$  це значення параметрів потенціалу для різнорідних атомів. Рядки у табл. 1 відповідають варіаціям параметрів потенціалу, які здійснювались для перевірки їх впливу на одержані результати.

Для моделювання процесу утворення радіаційних дефектів в бінарних кристалах була розроблена комп'ютерна програма, яка базується на МД методі з алгоритмом Верле [12]. Згідно з алгоритмом, положення частинок та їх швидкість на кожному часовому кроці визначаються рівняннями:

$$\mathbf{r}_i^n = \mathbf{r}_i^{n-1} + \Delta t \mathbf{v}_i^{n-1} + \frac{(\Delta t)^2}{2m} \mathbf{F}_i^{n-1}, \quad (7)$$

$$\mathbf{v}_i^n = \mathbf{v}_i^{n-1} + \frac{\Delta t}{2m} (\mathbf{F}_i^n + \mathbf{F}_i^{n-1}),$$

$$\mathbf{F}_i^n = - \sum_{j,j \neq i}^N \frac{\partial U_{ij}^n}{\partial \mathbf{x}_i}, \quad (8)$$

де  $i$  – номер частинки,  $i = \overline{1, N}$ ,  $n$  – номер кроку інтегрування,  $\Delta t$  – величина кроку інтегрування,  $\mathbf{F}_i^n$  – сила, що діє на  $i$ -й атом з боку інших  $j$  атомів.

Комп'ютерна програма написана мовою C# .NET Framework [13, 14] з використанням можливостей потужного графічного двигуна Unity3d [15]. Програма має графічний інтерфейс, де відображена динаміка атомів, додаткові вікна з параметрами програми та інформацією про вибрані

атоми. Програма має два основних класи. Перший проводить розрахунки динаміки атомів, використовуючи алгоритм Верле. Другий несе відповідальність за надання результатів в режимі реального часу.

Моделювання радіаційного дефектоутворення здійснювалось у три етапи [16]:

1. Ініціалізація модельної системи. Атоми знаходяться у вузлах модельної кубічної ґратки. Вибір типу модельної ґратки в нашому випадку не повинен впливати на якісні результати. Граничні умови задаються квазіпружними силами. Модельна ґратка містить 1000 атомів.

2. Релаксація модельної ґратки до стану рівноваги, що досягається інтегруванням диференціальних рівнянь за алгоритмом Верле. Температура модельної ґратки вводиться з використанням стандартного МД підходу [17].

3. Дослідження радіаційного дефектоутворення.

На відміну від розрахунків, у яких моделюються пружні зіткнення інцидентних частинок з атомами ґратки, використовуючи, наприклад, потенціал Борна-Майєра [18–20], ми вводимо у модель так звані випадкові зовнішні сили ( $ZC$ ,  $F_R$ ), що імітують удари атомів модельної ґратки зовнішніми частинками з певною частотою та певною кінетичною енергією.

Як відзначено вище, ми ввели зовнішню силу  $F_R$  для моделювання дії інцидентної частинки на атом модельної ґратки. Ця сила відповідає передачі атому певної кінетичної енергії. Ми використали формулу (9) для того, щоб у комп'ютерному експерименті величина  $F_R$  відповідала певній енергії. При цьому ми виходили з припущення, що середня енергія зміщення  $E_d = 25 \text{ eV}$ . У комп'ютерному експерименті ми поступово підвищували величину  $F_R$ , доки атоми починали необоротно покидати свої вузли. Ясно, що це значення  $F_R$  відповідає енергії 25 eV. Ми знаємо також величини  $t$  (рис. 1) і  $M$ . Таким чином, за допомогою формули (9) ми встановлюємо зв'язок між кінетичною

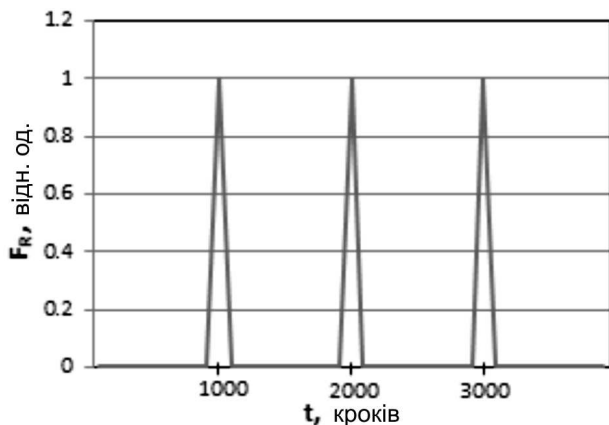


Рис. 1. Ілюстрація дії зовнішньої сили  $F_R$  з середньою частотою, яка визначається середнім інтервалом між піками. Тривалість імпульсу не відповідає масштабу рис. 1 і дорівнює 5–10 кроків

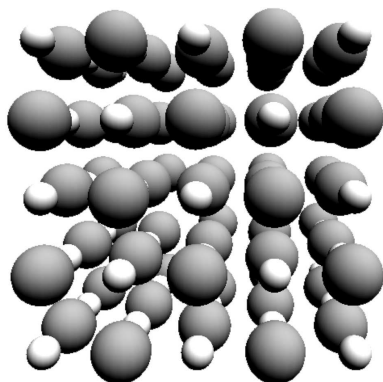


Рис. 2. Фрагмент модельної ґратки з двома типами атомів з різними масами

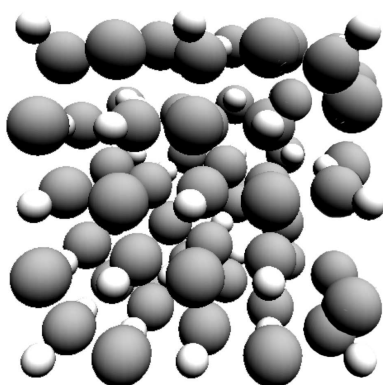


Рис. 3. Фрагмент модельної ґратки з “важкими” кластерами (наприклад, праворуч у верхньому та у нижньому кутах)

енергією, що передається атому, та величиною  $F_R$ , через співвідношення:

$$\frac{(F_R t)^2}{2M} = 25 \text{ eВ}, \tag{9}$$

де  $t$  – тривалість імпульсу,  $M$  – маса модельної частинки. Таким чином, на рис. 5 та 6 відповідні значення енергії пов’язані з  $F_R$  згідно з виразом (9).

Дія  $F_R$  на атоми визначається випадковою функцією, яка дає відповідну середню частоту ударів (рис. 1) та розподіл напрямів ударів. Випадкові числа дає стандартна платформа .NET Framework, в якій використовується аддитивний генератор випадкових чисел [21]. Цей генератор формує випадкове число відповідно до співвідношення:

$$x_{n+1} = (x_n + x_{n-k}) \bmod l, \tag{10}$$

де порядок  $k$  та модуль  $l$  – фіксовані цілі позитивні числа,  $x_1, \dots, x_n$  – довільні числа. Кожний  $n + 1$  член послідовності залежить від  $n$  попереднього.

З урахуванням зовнішньої сили  $F_R$  загальна сила, що діє на  $i$ -й атом, згідно з виразом (8), представляється у вигляді [22]:

$$F_i^n = - \sum_{j, j \neq i}^N \frac{\partial U_{ij}^n}{\partial x_i} + F_R. \tag{11}$$

На рис. 2 зображений фрагмент модельної ґратки (125 атомів). На цьому фрагменті можна побачити ефект формування “важких” кластерів (рис. 3).

### 2.2. Результати та їх обговорення

“Важкі кластери” створюються внаслідок розупорядкування початкової ґратки під дією швидких іонів. Міжатомні відстані у початковій модельній ґратці мають певне значення: між атомами з різною масою  $a = 5,3 \text{ \AA}$  та між атомами з однаковою масою  $2a = 10,6 \text{ \AA}$ . Як вказано вище, здійснюється бомбардування іонами таких енергій, при яких зміщуються тільки “легкі” атоми. Комп’ютерна програма видає у будь-який момент часу координати всіх атомів, а також відстані між найближчими атомами  $\Delta x$  у процесі бомбардування модельної ґратки. Критерієм створення кластера є виникнення конфігурації атомів з однаковою масою, у якій відстань  $\Delta x$  дорівнює  $a$ . Комп’ютерний

експеримент дозволив виявити кінетику накопичення “важких кластерів” з 2, 3 та більшою кількістю атомів (рис. 4). На рис. 4 відображена область I переходу двоатомних “важких кластерів” у триатомні.

Залежність  $\tau_i$  від відношення мас атомів кристала  $m_{A1}/m_{U_i}$  для різних енергій опромінювання відображено на рис. 5. Звісно, величина  $\tau_i$  обернено пропорційна ймовірності створення певного “важкого” кластера. Були проведені модельні комп’ютерні експерименти зі значеннями мас атомів, що наведені в табл. 2. Передбачається, що використовуються моноенергетичні джерела іонів. Енергії іонів, що бомбардують кристал, були вибрані таким чином, щоб вони були розташовані у інтервалах, що відповідають зміщенню тільки більш легких атомів:

1. Для співвідношення мас  $m_{A1}/m_{U_1}$  енергії до-рівнювали 70 eВ, 85 eВ, 107 eВ, 150 eВ, 205 eВ, 300 eВ, 350 eВ, 425 eВ.

2. Для співвідношення мас  $m_{A1}/m_{U_2}$  енергії до-рівнювали 70 eВ, 85 eВ, 107 eВ, 150 eВ, 205 eВ.

3. Для співвідношення мас  $m_{A1}/m_{U_3}$  енергії до-рівнювали 70 eВ, 85 eВ, 107 eВ.

(Підкреслені порогові енергії бомбардуючих іонів для трьох співвідношень мас, наведених у табл. 2.)

На рис. 6 відображена енергетична залежність  $\tau_i$  для різних відношень мас атомів  $m_{A1}/m_{U_i}$ .

Одержані результати, відображені на рис. 5 і 6, вказують на певні особливості утворення “важких кластерів” в залежності від відношення мас атомів бінарної ґратки та енергії іонних пучків. Природно, що інтервал енергій, в якому має місце утворення “важких кластерів”, звужується при зменшенні відношення  $m_{A1}/m_{U_i}$ . На рис. 5 бачимо, що для  $E > E_5$  “важкі кластери” не утворюються. Результати моделювання показали, що у разі зна-

Таблиця 2. Значення мас атомів у модельних ґратках, що досліджуються у комп’ютерному експерименті, та відповідних порогових енергій іонів ( $E_{thr}$ ) для бомбардуючих іонів

№	$m_{A1}$ , ат. од.	$m_{U_i}$ , ат. од.	$E_{thr}$ для атомів $m_{A1}$ , eВ	$E_{thr}$ для атомів $m_{U_i}$ , eВ
1	27	238	48	425
2	27	115	48	205
3	27	60	48	107

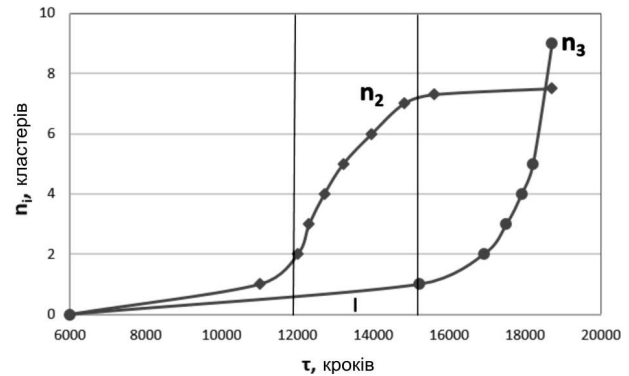


Рис. 4. Кінетика накопичення “важких кластерів” з 2 та 3 атомів

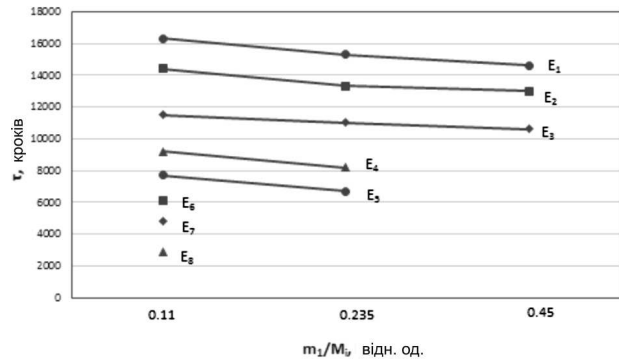


Рис. 5. Залежність  $\tau$  від співвідношення мас атомів кристала  $m_{A1}/m_{U_i}$  для різних енергій бомбардируючих іонів:  $E_1 = 70$  eВ,  $E_2 = 85$  eВ,  $E_3 = 107$  eВ,  $E_4 = 150$  eВ,  $E_5 = 205$  eВ,  $E_6 = 300$  eВ,  $E_7 = 350$  eВ,  $E_8 = 425$  eВ

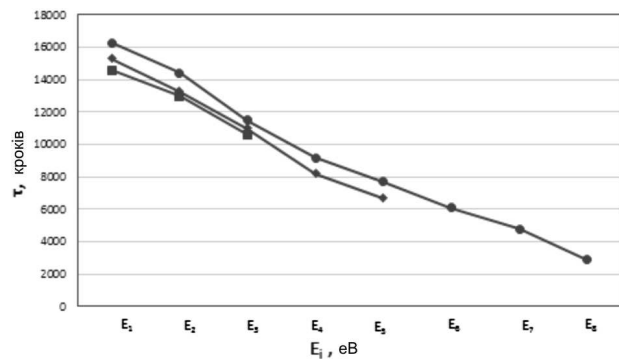


Рис. 6. Енергетична залежність  $\tau_i$  для різних відношень мас атомів  $m_{A1}/m_{U_i}$  (див. рис. 5)

чних зміщень “важких атомів” одночасно з “легкими” ймовірність утворення “важких кластерів” різко зменшується. На рис. 6 бачимо симбатну енергетичну залежність ймовірності утворення “важких

кластерів” в енергетичних інтервалах, що відповідають певним відношенням  $m_{A1}/m_{U_i}$ . Характерно, що для  $E = E_3$  ймовірності утворення “важких кластерів” мало відрізняються для всіх досліджених  $m_{A1}/m_{U_i}$ .

### 3. Висновки

1. Досліджено процеси радіаційного дефектоутворення у бінарних кристалах, в яких маси атомів значно розрізняються.

2. Використано модифіковану модель для вивчення процесів утворення радіаційних порушень у кристалах методом МД. Розроблено відповідну комп’ютерну програму.

3. Встановлено, що в бінарних кристалах, в яких маси атомів значно розрізняються, при радіаційному опроміненні створюються так звані “важкі” кластери. Ймовірність утворення “важких” кластерів певним чином залежить від відношення мас різномірних атомів, а також від енергії моноенергетичного іонного опромінення.

4. Встановлено енергетичні залежності ймовірності утворення “важких” кластерів.

5. Феномен радіаційно-стимульованого утворення “важких” кластерів важливо враховувати при використанні радіаційних методів в електронній техніці та вирішенні інших технічних задач.

*Автор вдячний професору А.Ю. Ківу за детальне обговорення результатів та важливі зауваження.*

1. S.C. Parker, E.T. Kelsey, P.M. Oliver, and J.O. Titiloye, *Faraday Discuss.* **95**, 75 (1993).
2. D. Fink, I. Klinkovich, O. Bukelman, R.S. Marks, A. Kiv, D. Fuks, W.R. Fahrner, and L. Alfonta, *Biosens. Bioelectron.* **24**, 2702 (2009).
3. R.E. Stoller and L.K. Mansur, *An Assessment of Radiation Damage Models and Methods*, Oak Ridge National Laboratory, Report Number ORNL/TM-2005/506 (2005).
4. M.T. Robinson and I.M. Torrens, *Phys. Rev. B* **9**, 5008 (1974).
5. T. Schlick, *Molecular Modeling and Simulation* (Springer, Berlin, 2002).
6. S. Zhen and G.J. Davies, *Phys. Status Solidi A* **78**, 595 (1983).
7. F. Ercolessi, *A Molecular Dynamics Primer* (Spring College in Computational Physics, ICTP, Trieste, 1997).
8. D. Frenkel and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation, 2-nd edition* (Academic Press, San Diego, 2002).
9. R. Baragiola, *Nucl. Instrum. Methods B* **237**, 520 (2005).
10. K.K. Wittmaack, *J. Appl. Phys.* **96**, 2632 (2004).

11. Б.М. Исаков, *Перспективные материалы* **6**, 92 (2011).
12. E. Hairer, Ch. Lubich, and G. Wanner, *Acta Numerica* **1**, 399 (2003).
13. A. Troelsen, *Pro C# 2010 and the .NET 4 Platform, 5-th edition* (APRESS, 2010).
14. P.J. Deitel and H.M. Deitel, *C# 2010 for Programmers, 4-th edition* (Prentice Hall, 2010).
15. A. Gutterman, *Intermediate Scripting*, <http://unity3d.com/learn/tutorials/modules/intermediate/scripting> (2013).
16. T. Diaz de la Rubia and M.W. Guinan, *J. Nucl. Mater.* **174**, 151 (1990).
17. L.M. Dupuy, E.B. Tadmor, R.E. Miller, and R. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **95**, (2005).
18. V.I. Gaydaenko and V.K. Nikulin, *Chem. Phys. Lett.* **7**, 360 (1970).
19. G.V. Lewis and A. Catlow, *J. Phys. Chem.* **18**, 1149 (1985).
20. S.A. Kiselev, S.R. Bickham, and A.J. Sievers, *Phys. Rev. B* **50**, 9135 (1994).
21. D.E. Knuth, *The Art of Computer Programming, Vol 2, 3-rd edition* (Addison-Wesley, Reading, MA, 1997).
22. N. Mykytenko, D. Fink, and A. Kiv, *J. Comput. Sci.* **6**, 34 (2015).

Одержано 20.12.14

Н.А. Микитенко

### РАДИАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННОЕ ФОРМИРОВАНИЕ “ТЯЖЕЛЫХ КЛАСТЕРОВ” В БИНАРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Резюме

Работа посвящена исследованию особенностей радиационного дефектообразования в бинарных кристаллах с атомными массами, которые значительно различаются. Использовался классический метод молекулярной динамики, но в модифицированной модели, которая является альтернативой модели парных столкновений. Разработана компьютерная программа, которая реализует молекулярно-динамический подход по алгоритму Верле. Результаты работы свидетельствуют о том, что существует определенный интервал энергий инцидентных частиц, в котором возможно формирование так называемых “тяжелых” кластеров, т.е. кластеров, состоящих из более тяжелых атомов.

Н. Mykytenko

### RADIATION-INDUCED FORMATION OF “HEAVY” CLUSTERS IN BINARY CRYSTALS

Summary

Radiation-induced formation of defects in binary crystals with significantly different atomic masses has been studied. The classical molecular dynamics method is used for a modified model that is an alternative for that with pair collisions. A computer program realizing the Verlet algorithm in the framework of the molecular dynamics approach is developed. The results obtained testify to the existence of a certain interval of incident particle energies, at which the so-called “heavy” clusters, i.e. clusters composed of heavier atoms, can be formed.