



مقاومت ساختاری آلیاژهای $\text{Cu}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$ و $\text{Cu}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}$ در برابر تابش نوترون

مریم امینی^۱، بهنام آزادگان^{۱*}، حامد اکبرزاده^۲، رضا قرائی^۱

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه حکیم سبزواری، ۳۹۷، سبزوار-ایران

۲. گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه حکیم سبزواری، ۳۹۷، سبزوار-ایران

چکیده:

طراحی مواد هسته‌ای دارای مقاومت بالا برای قرارگیری در برابر نوترون، یک چالش اساسی در مواردی نظیر طراحی ساختمان تأسیسات هسته‌ای و سیستم‌های فضاپیمایی محسوب می‌شود. نوترون می‌تواند سبب تغییر در خصوصیات مکانیکی مواد سازنده مخزن تحت فشار رآکتور و همچنین سبب اختلال در عملکرد زیرسیستم‌های الکترونیکی فضاپیما گردد. در این تحقیق، ابتدا با استفاده از روش NRT، به بررسی میزان خسارت‌های تولید شده در سه ساختار خالص مس، زیرکونیوم و آهن پرداخته؛ سپس از دو عنصر زیرکونیوم و آهن به عنوان ناخالصی برای طراحی آلیاژهای مس - زیرکونیوم و مس - آهن استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد که مقاومت ساختاری آلیاژ مس - آهن در برابر تابش نوترون، بیشتر از مس - زیرکونیوم است.

کلیدواژه‌ها: نوترون، آلیاژ، NRT، دینامیک مولکولی.

Structural resistance of $\text{Cu}_{0.8}\text{Zr}_{0.2}$ and $\text{Cu}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$ alloys under neutron irradiation

Maryam Amini¹, Behnam Azadegan^{1*}, Hamed Akbarzadeh², Reza Gharaei¹

1. Department of Physics, Faculty of Basic Science, Hakim Sabzevari University, P.O. Box 397, Sabzevar, Iran

2. Department of Chemistry, Faculty of Basic Sciences, Hakim Sabzevari University, P.O. Box 397, Sabzevar, Iran.

Abstract:

Designing nuclear materials with high radiation resistance under neutron irradiation is an important challenge for designing the reactor pressure vessel (RPV) structure and the infrastructures of spacecraft systems. Because neutron can change the mechanical properties of RPV building materials and disrupt the CubeSat's electronic subsystems. In this research, we firstly investigate the number of defects in three pure structures such as Copper, Zirconium and Iron by using NRT method. Then we use the Zirconium and Iron as impurities for building Copper-Zirconium and Copper-Iron alloys and by molecular dynamic method show that the structure resistance of Copper-Iron under neutron irradiation is higher than Copper-Zirconium.

Keywords: Neutron, Alloy, NRT, Molecular dynamic.

¹ Email: azadegan@hsu.ac.ir

۱. مقدمه

امروزه تابش‌های نوترونی یکی از پرتوهای پرکاربرد در راستای تحقیقات هسته‌ای به شمار می‌آیند که به دلیل اهمیت‌شان در پژوهش‌هایی نظیر پزشکی و طراحی ساختمان رآکتور، توجه بسیاری را به خود جلب نموده‌اند.

یکی از چشمه‌های تولیدکننده‌ی این پرتو به‌منظور کاربردهایی نظیر نوترون‌درمانی و تولید رادیوداروها، رآکتورهای هسته‌ای می‌باشند. ماده‌ی ساختاری مخزن تحت فشار رآکتور^۲ در طول بهره‌برداری از رآکتور هسته‌ای، به طور مداوم در معرض پرتوهای یونیزه‌کننده که مهم‌ترین آن‌ها نوترون‌ها می‌باشند قرار دارد. از طرفی علاوه بر رآکتورهای هسته‌ای، فضاپیماهایی نظیر تاسواره‌ها^۳ که در خارج جو زمین قرار دارند، به‌طور قابل توجهی مستعد آسیب ناشی از تابشی نظیر نوترون هستند. بنابراین علی‌رغم کاربرد نوترون در زمینه‌های مختلف، این پرتو می‌تواند سبب تغییر در خصوصیات مکانیکی مواد مخزن تحت فشار رآکتور و همچنین سبب اختلال در عملکرد زیرسیستم‌های الکترونیکی فضاپیما گردد. بنابراین طراحی مناسب مواد مورد استفاده در مخزن تحت فشار رآکتور و مدیریت خوب حرارتی و تابشی فضای فضاپیماها به‌وسیله‌ی در نظرگیری مواد مناسب برای طراحی بدنه‌ی آن‌ها، بسیار مهم می‌باشد [۱].

بنابر توضیحات ارائه شده، مطالعات تابش نوترونی یکی از مطالعات بسیار مهم در زمینه‌ی پرتوشناسی محسوب می‌شوند که از اواسط دهه‌ی ۱۹۷۰ برای توسعه‌ی پوشش‌های محافظ هسته‌ای آغاز شده و به سایر کاربردهای ساختار هسته‌ای نفوذ یافته‌اند. باید توجه داشت که یکی از پیامدهای اصلی برهم‌کنش ذرات پرنرژی نظیر نوترون‌ها و ذرات بارداری مثل یون‌ها یا الکترون‌ها با مواد، شکل‌گیری نقص‌های شبکه است که این نقص‌ها ناشی از انتقال انرژی پرتو به اتم‌ها می‌باشند. بنابراین طراحی مواد هسته‌ای موجود در پوشش‌های حفاظتی بدنه‌ی رآکتور، فضاپیماها و دیگر ساختمان‌های در معرض تابش، از اهمیت ویژه‌ی برخوردارند و پژوهش‌های تجربی و تئوری بسیاری برای بررسی مقاومت تابشی ساختارهای مختلف انجام شده‌اند.

به‌عنوان نمونه ساختارهایی نظیر، آلیاژهای NiFe و NiCoCr [۱] و آلیاژ Fe (90%) Cr (10%) [۲]، در برابر تابش نوترون مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

در میان عناصر موجود در طبیعت، عنصر مس یکی از مهم‌ترین عناصر مورد استفاده برای طراحی ساختارهای تحت تابش می‌باشد و تاکنون مطالعات بسیاری برای بررسی میزان نقص‌های تولید شده در ساختار مس که بر اثر برخورد پرتو با ماده ایجاد شده، انجام شده‌اند [۳]. علی‌رغم بررسی‌های انجام شده، مطالعه‌ی آلیاژهای مربوط به این عنصر هنوز به‌طور کامل انجام نشده و علت پیشنهاد این آلیاژها، قرارگیری عنصری با خواص متفاوت در کنار مس و تغییر خواص مکانیکی، انتقال حرارتی و مقاومت تابشی آن می‌باشد. به‌عنوان مثال، اضافه نمودن ۱/۲-۰ درصد وزنی زیرکونیوم به مس و ساخت آلیاژ مس - زیرکونیوم می‌تواند سبب افزایش مقاومت حرارتی ساختار، بدون کاهش قابل توجه در خواص الکتریکی آن شود [۴]. از طرفی وجود آهن در آلیاژ مس، تأثیر مفیدی بر مقاومت در برابر خوردگی آلیاژ و همچنین خواص مکانیکی نظیر مقاومت کششی داشته و قرارگیری این دو عنصر در کنار یکدیگر، آلیاژی با خواص فیزیکی و مکانیکی خوب نظیر رسانندگی الکتریکی و گرمایی ایجاد می‌نماید [۵].

در این تحقیق، ابتدا توسط روش NRT^۴، مقاومت ساختاری مس، زیرکونیوم و آهن خالص در برابر تابش نوترون و در انرژی‌های مختلف مورد بررسی قرار می‌گیرد؛ سپس با انتخاب مس به عنوان عنصر اصلی، ساختارهای آلیاژی مس - زیرکونیوم و مس - آهن ساخته شده و در برابر تابش نوترون با یکدیگر مقایسه می‌شوند؛ که روش مورد استفاده برای بررسی مقاومت ساختاری این دو آلیاژ دینامیک مولکولی می‌باشد.

² Reactor Pressure Vessel (RPV)

³ CubeSats

⁴ Norgertt-Robinson-Torrens (NRT)

۲. روش کار

۲.۱. استفاده از روش NRT برای مقایسه‌ی مقاومت ساختاری ساختارهای خالص در برابر تابش

فرایند کلی ایجاد نقص توسط نوترون، بدین صورت است که نوترون برخوردی، پس از طی میانگین مسیر آزاد^۵ درون ماده، با برخوردی سربه‌سر، بیشترین مقدار انرژی خود را به اتم هدف که PKA^۶ نامیده می‌شود منتقل نموده و این اتم با حرکت خود درون ساختار و برخوردهای پی‌درپی، می‌تواند چندین اتم را از موقعیت‌های بلوری خود جابه‌جا نماید و آشناری از اتم‌های جابه‌جا شده از مکان شبکه را به راه اندازد. این جابه‌جایی‌ها سبب ایجاد نقایص نقطه‌ای مختلفی از جمله جفت‌های فرنکل^۷ و خوشه‌های ناشی از آن‌ها درون ماده می‌شوند که این خوشه‌ها منجر به تورم، سخت‌شدن و شکنندگی ساختار شده و در نهایت باعث تخریب و شکسته‌شدن مواد می‌گردند^۳ و^۲]. بنابراین حذف خسارت‌ها و تأثیرات مربوط به نقص‌های نقطه‌ای ناشی از تابش، کلید بهبود خواص مکانیکی مواد تابش‌دیده خواهند بود.

در این پژوهش، قبل از بررسی اثر تابش‌دهی توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ابتدا تعداد خسارت‌های تولیدشده در سه ساختار خالص مس، زیرکونیوم و آهن را با یکدیگر مقایسه می‌نماییم. به‌منظور به‌دست آوردن تعداد خسارت‌ها در اثر حرکت PKA دارای انرژی‌های مختلف درون ماده، از فرمول NRT استفاده گردیده که توسط معادله‌ی ۱ بیان می‌شود.

$$N_{NRT} = \frac{0.8T_{damage}}{2T_{threshold}} \quad (1)$$

در این جا، T_{damage} مقدار انرژی منتقل شده به اتم‌های شبکه است و این انرژی ناشی از دست دادن انرژی توسط توقف الکترونی در آبشار جابه‌جایی‌های اتمی بوده که با استفاده از معادله‌ی ۲ محاسبه می‌گردد.

$$T_{damage} = \frac{T}{1+g(\epsilon)k_{cascade}} \quad (2)$$

در معادله‌ی ۲، T انرژی منتقل شده به اتم هدف است که براساس معادله‌ی ۳ به دست خواهد آمد.

$$T = T_{max} \frac{t}{\epsilon_p^2} \quad (3)$$

در اینجا t یک پارامتر برخورد بدون بعد است که براساس روابط موجود در مرجع [۶] تعریف شده و با جای‌گذاری آن در رابطه‌ی ۳ می‌توان رابطه‌ی بین T ، T_{max} و زاویه‌ی مرکز جرم پرتابه‌ی منحرف شده را به‌دست آورد. در معادله‌ی ۲ پارامترهایی نظیر $k_{cascade}$ و $g(\epsilon)$ دو پارامتری هستند که به‌منظور نام‌گذاری معادلات ۴ و ۵ به کار گرفته شده و پارامتر $g(\epsilon)$ وابستگی را بطه به کمیت ϵ که انرژی منتقل شده‌ی بدون بعد می‌باشد را نشان می‌دهد [۶].

$$k_{cascade} = 0.1337Z_{target}^{\frac{1}{5}} \left(\frac{Z_{target}}{A_{target}}\right)^{1/2} \quad (4)$$

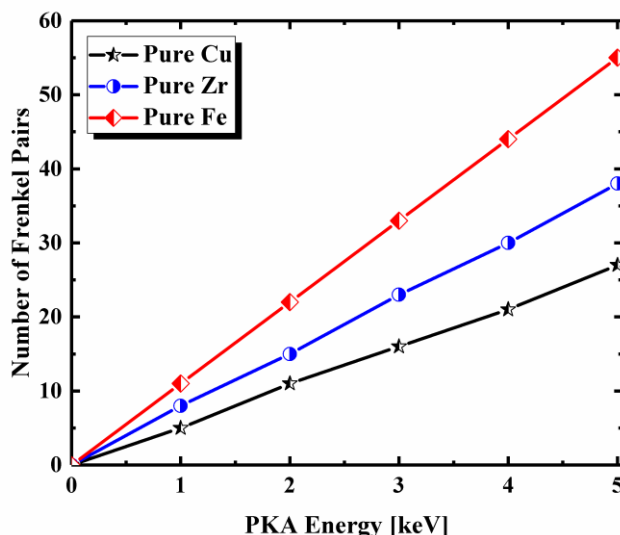
$$g(\epsilon) = \epsilon + 0.40244\epsilon^{3/4} + 3.4008\epsilon^{1/6} \quad (5)$$

⁵ Mean Free Path (mfp)

⁶ Primary Knock-on Atom (PKA)

⁷ Frenkel Pairs

به کمک معادلات فوق، میزان نقص‌های نقطه‌ای تولیدشده در اثر حرکت PKAهای دارای انرژی‌های مختلف در ساختارهای خالص به دست آمده و در نهایت نمودارهای شکل ۱ به عنوان تابعی از انرژی PKA رسم گردیده‌اند.



شکل ۱. تعداد جفت‌های فرنکل محاسبه شده توسط مدل NRT برای ساختارهای خالص بر حسب انرژی PKA.

همان‌طور که نمودارهای شکل ۱ نشان می‌دهند، با افزایش انرژی PKA، میزان خسارت‌های باقی‌مانده درون ساختارها افزایش می‌یابد و از طرفی ساختارهای خالصی نظیر زیرکونیوم و آهن، خسارت تابشی بیشتری را نسبت به مس خالص تجربه خواهند کرد. بنابراین انتخاب مس به عنوان عنصر اصلی برای ساخت آلیاژ، گزینه‌ی مناسبی خواهد بود و می‌توان با انتخاب ۰/۸ درصد وزنی از این عنصر و تنها ۰/۲ درصد وزنی ناخالصی، تأثیرات متفاوت ناخالصی‌ها بر عملکرد مقاومتی مس خالص در برابر تابش نوترون را بررسی کرد. لازم به ذکر است که به دلیل درصد بالای مس در این آلیاژها، حرکت اتم مس به عنوان PKA از احتمال بیشتری برخوردار بوده و در این صورت مس به عنوان پرتابه و زیرکونیوم یا مس به عنوان اتم هدف خواهند بود. بنابراین با محاسبه‌ی معادلات NRT می‌تواند دریافت که در صورتی که اتم هدف زیرکونیوم باشد، چون مقدار انرژی آستانه‌ی جابه‌جایی^۸ آن برابر با ۴۰ الکترون‌ولت است، مقادیر خسارت‌های تولیدشده تقریباً مشابه خسارت‌های ایجادشده در ساختار خالص زیرکونیوم می‌شود و در حالتی که اتم هدف مس باشد، با $T_{\text{threshold}}$ برابر با ۳۰ الکترون‌ولت، نتایج به نتایج مس خالص نزدیک خواهند شد. چنین محاسبات و مقایسه‌هایی برای آلیاژ مس - آهن نیز انجام شده و در این محاسبات، $T_{\text{threshold}}$ برای آهن ۴۰ الکترون‌ولت است [۶]. بنابراین با در نظرگیری تمام احتمالات برخورد، می‌توان از روش NRT برای محاسبه‌ی میزان نقص‌های نقطه‌ای تولیدشده در اثر برخورد نوترون در آلیاژها نیز استفاده کرد.

⁸ Displacement threshold energy ($T_{\text{threshold}}$)

نتایج به دست آمده در این بخش، حاصل از محاسبات عددی بوده و همان طور که می‌دانیم، شرایط محاسبات عددی ایده‌آل هستند و اثرات متفاوت تابش، نظیر تغییرات دمایی و ویژگی‌های ساختاری و مکانیکی ساختارها را در نظر نمی‌گیرند؛ بنابراین لازم است که در کنار این روش، مقاومت ساختاری آلیاژها در برابر تابش، توسط روش دینامیک مولکولی نیز مورد مطالعه قرار گیرد.

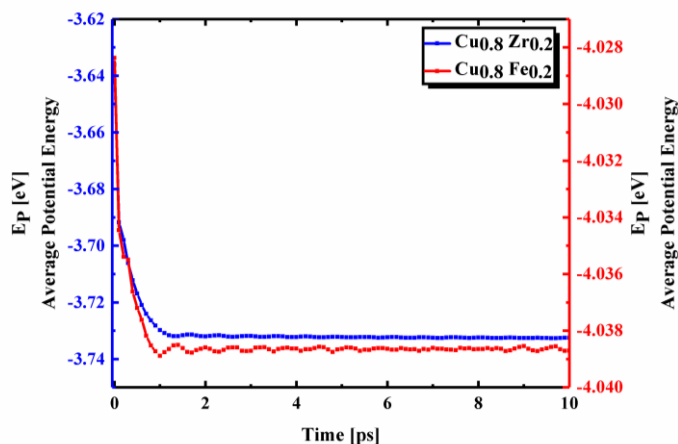
۲.۲. ساخت ساختار و اعمال پتانسیل مناسب به سیستم در روش دینامیک مولکولی

در طول سال‌های اخیر، روش دینامیک مولکولی به دلیل در نظر گرفتن دینامیک سیستم و قابلیت بررسی زیرساختارها و خسارت‌های ایجاد شده در حین فرایند تابش دهی، یکی از روش‌های بسیار پرکاربرد می‌باشد. بنابراین در این پژوهش به منظور مطالعه دینامیک مولکولی ساختارهای تحت تابش، از کد محاسباتی لمپس^۹ که یک بسته نرم‌افزاری دینامیک مولکولی می‌باشد، استفاده گردیده است [۷].

برای انجام شبیه‌سازی، ابتدا ساختار سلول اصلی، براساس ساختار سلول واحد مس خالص که پارامتر ثابت شبکه‌ی آن دارای مقدار $3/496$ آنگستروم بوده، ساخته شده است. در این شبیه‌سازی، سلول اصلی دارای طول ضلع $108/499$ آنگستروم است و دارای تعداد 108000 اتم می‌باشد. به منظور ساخت آلیاژهای بر پایه‌ی مس که از ناخالصی‌های زیرکونیوم و آهن ساخته می‌شوند، $0/2$ درصد وزنی از عنصر زیرکونیوم و آهن را به ساختار مس خالص اضافه نموده و آلیاژهای مس - زیرکونیوم و مس - آهن را به ترتیب به دست می‌آوریم. لازم به ذکر است که در تمامی محاسبات، شرایط مرزی دوره‌ای^{۱۰} به سیستم اعمال گردیده است. در دینامیک مولکولی، به منظور مدل کردن سیستم‌های شامل عناصر فلزی، از پتانسیلی نظیر EAM¹¹ استفاده می‌شود که موارد کاربرد این دسته از پتانسیل‌ها، بیشتر در شبیه‌سازی ساختارهایی نظیر فلزی، نیم‌رساناها، برخی گازها و مایعات می‌باشد.

۳.۲. پایدارسازی ساختارها

پس از ساخت ساختارهای آلیاژی و اعمال پتانسیل‌های مناسب بین اتم‌های تشکیل دهنده‌ی ساختار، به منظور پایدارسازی ساختار و رساندن سیستم به پایین‌ترین مقدار انرژی پتانسیل، نیاز به آرام‌سازی^{۱۲} ساختار وجود دارد که در طول زمان 10 پیکوثانیه و در دمای 100 کلین انجام شده است. شکل ۲ پایدارشدن دو ساختار را به خوبی نمایش می‌دهد.



شکل ۲. تغییرات انرژی پتانسیل ساختارهای آلیاژی در طی زمان 10 پیکوثانیه.

⁹ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulation

¹⁰ Periodic Boundary Conditions

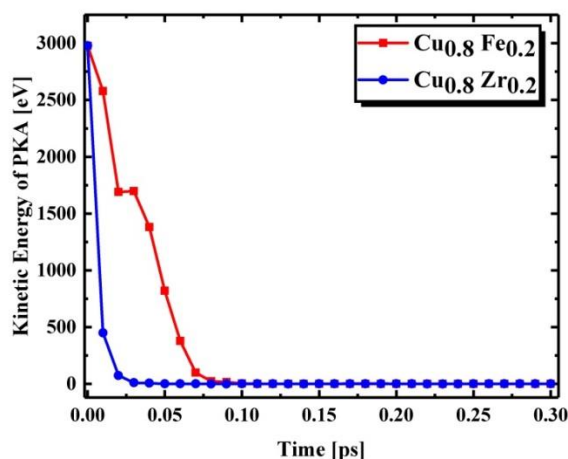
¹¹ embedded-atom method

¹² Relaxation

برای شبیه‌سازی ساختارها از هنگرد NVT و NVE در محاسبات استفاده شده، که در هنگام استفاده از هنگرد NVT، کل ساختار شبیه‌سازی در شرایط دما، حجم و تعداد ذرات ثابت با دمای ۱۰۰ کلوین قرار گرفته و هنگرد ایزوله‌ی NVE با شرایط انرژی، حجم و تعداد ذرات ثابت با هدف اعمال شرایط آزمایشگاهی در شبیه‌سازی تابش‌دهی ساختارها، اعمال شده‌است. شبیه‌سازی ساختارها شامل سه مرحله‌ی به تعادل‌رسانی، فرایند تابش‌دهی و بازسازی ساختار می‌باشد که ۶۶ پیکوثانیه زمان برای انجام تمامی مراحل صرف گردیده‌است.

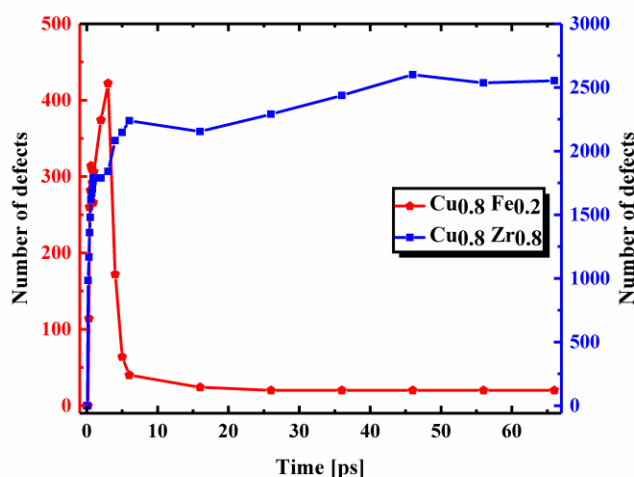
۴.۲. مطالعه‌ی دینامیک مولکولی خسارت‌های ناشی از تابش

در این بخش خسارت‌های تابشی ناشی از برخورد نوترون $0.05/\text{Mg}$ مگاالکترون‌ولت به ساختار مورد بررسی قرار گرفته و به‌منظور شبیه‌سازی خسارت‌های ناشی از آن، از PKA دارای انرژی ۳ کیلوالکترون‌ولت در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده گردیده‌است. درنهایت، رفتار ساختارها، قبل و پس از تابش‌دهی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. شکل ۳ توانایی آلیاژها در متوقف نمودن PKA را نشان می‌دهد.



شکل ۳. تغییرات انرژی جنبشی PKA به‌عنوان تابعی از زمان.

همان‌طور که شکل ۳ نشان می‌دهد، زمان متوقف‌سازی PKA درون دو آلیاژ مختلف، نسبت به برخی فلزها و اکسیدها که فاز بالستیک خود را با صرف زمان بیشتری به اتمام می‌رسانند کمتر است [۸]. ولی علاوه‌بر قدرت توقف PKA در زمانی کوتاه و اتمام فاز بالستیک، خسارت‌های تابشی ایجادشده در طول زمان شبیه‌سازی نیز از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. بنابراین با رسم نمودارهای شکل ۴، عملکرد مقاومتی دو آلیاژ را به‌طور دقیق مورد بررسی قرار می‌دهیم.



شکل ۴. تغییرات تعداد خسارت‌های ایجاد شده در دو آلیاژ مختلف به‌عنوان تابعی از زمان.

براساس شکل ۴ می‌توان دریافت که قرارگیری ناخالصی آهن درون ساختار مس، سبب می‌شود که آلیاژ مس - آهن پس از تجربه نمودن آشپار خسارت ناشی از حرکت PKA درون ساختار خود، شروع به بازسازی ساختار نموده، نقص‌های نقطه‌ای ایجاد شده درون ساختار را کاهش دهد و در نهایت ساختار کریستالی خود را بازسازی نماید. این درحالی‌است که براساس نمودار آبی‌رنگ شکل ۴ که مربوط به آلیاژ مس دارای ناخالصی زیرکونیوم است، مشاهده می‌شود که پس از حرکت PKA درون ساختار و ایجاد خسارت‌های ساختاری، سیستم توانایی بازسازی خود را نداشته و نمی‌تواند خسارت‌های ناشی از تابش را کنترل نماید. زیرا افزایش نقص‌های ساختاری، بازده استرس‌های موجود در زیرکونیوم را کاهش داده که این تغییرات مکانیکی بر روی مقاومت ساختاری آلیاژ مس - زیرکونیوم تأثیرگذار است و با مطالعات لی^{۱۳} و همکارانش بر روی α -Zirconium مطابقت دارد [۹]. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که اضافه نمودن ۰/۲ درصد وزنی ناخالصی آهن به مس، سبب ایجاد آلیاژ پدیدارتری نسبت به آلیاژ دارای ۰/۲ درصد وزنی ناخالصی زیرکونیوم می‌شود.

۳. نتیجه‌گیری

باتوجه به اهمیت طراحی و ساخت ساختارهای مقاوم در برابر تابش نوترون، در این پژوهش ابتدا با استفاده از روش NRT، مقاومت ساختاری سه ساختار خالص مس، زیرکونیوم و آهن در برابر انرژی‌های مختلف PKA مورد بررسی قرار گرفت؛ سپس با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تابش‌دهی ساختارهای آلیاژی، مقاومت ساختاری دو آلیاژ مس - زیرکونیوم و مس - آهن در برابر نوترون با یکدیگر مقایسه گردید. نتایج نشان می‌دهند که علی‌رغم قدرت توقف خوب دو آلیاژ برای PKA، آلیاژ مس - آهن نسبت به مس - زیرکونیوم، گزینه‌ی مناسب‌تری برای مقاومت در برابر تابش محسوب می‌شود. زیرا با حرکت PKA درون آلیاژ مس - زیرکونیوم و ایجاد خسارت‌های ساختاری، به‌دلیل کاهش بازده استرس‌های موجود در زیرکونیوم، این رفتار بر کل ساختار تأثیر گذاشته و قدرت بازآرایی مجدد را از ساختار می‌گیرد که این امر در نهایت سبب عدم مقاومت آلیاژ مس - زیرکونیوم در برابر تابش می‌شود.

¹³ Li



۴. مراجع

- 1) Granberg, Fredric, et al. "Mechanism of radiation damage reduction in equiatomic multicomponent single phase alloys." *Physical review letters* 116.13 (2016): 135504.
- 2) Warriar, M., and M. C. Valsakumar. "Study of Molecular Dynamics Collision Cascades in 1000 Random Directions in Crystal Fe (90%) Cr (10%) in the Energy Range 0.1 to 5 KeV." *Fusion Science and Technology* 65.2 (2014): 229-234.
- 3) Warriar, M., et al. "Statistical study of defects caused by primary knock-on atoms in fcc Cu and bcc W using molecular dynamics." *Journal of Nuclear Materials* 467 (2015): 457-464.
- 4) Franczak, Krystian, et al. "Research of mechanical and electrical properties of Cu–Sc and Cu–Zr alloys." *Archives of Civil and Mechanical Engineering* 20.1 (2020): 1-15.
- 5) Beloshenko, V. A., V. Yu Dmitrenko, and V. V. Chishko. "Modifying the structure and properties of Cu-Fe composites by the methods of pressure formation." *The Physics of Metals and Metallography* 116.5 (2015): 456-466.
- 6) Iwamoto, Yosuke, et al. "Calculation of displacement cross-sections for structural materials in accelerators using PHITS event generator and its applications to radiation damage." *Journal of Nuclear Science and Technology* 51.1 (2014): 98-107.
- 7) Plimpton, Steve. "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics." *Journal of computational physics* 117.1 (1995): 1-19.
- 8) Buchan, J. T., et al. "Molecular dynamics simulation of radiation damage cascades in diamond." *Journal of Applied Physics* 117.24 (2015): 245901.
- 9) Li, Yingying, et al. "Point defect effects on tensile strength of α - zirconium studied by molecular dynamics simulations." *Nuclear Materials and Energy* 20 (2019): 1006