

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.004

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ДИСПЕРСИОННОГО УПРОЧНЕНИЯ КОГЕРЕНТНЫМИ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫМИ ФАЗАМИ В ОЦК ВОЛЬФРАМЕ

Юлия Равильевна Шарапова^{1†}, Арсений Максимович Казаков²,
Александр Сергеевич Семенов³, Мария Николаевна Семенова⁴,
Жанна Геннадьевна Рахматуллина⁵, Елена Александровна Корзникова⁶

^{1, 2, 5, 6} Уфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди, 32, 450008, Уфа, Россия

^{3, 4} Политехнический институт (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном, ул. Тихонова, 5/1, 678170, Мирный, Россия

^{2, 5, 6} Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, Россия

¹ulya_usinsk@mail.ru[†]

²arseny.m.kazakov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8278-8705>

³sash-alex@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>

⁴Mariya_Semyonova86@mail.ru

⁵ishmitovazhanna@mail.ru

⁶elena.a.korznikova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

Аннотация. Дисперсионное упрочнение играет важную роль в изменении механических свойств конструкционных материалов. Особенно важно понимать механизм такого упрочнения в материалах, используемых при экстремальных воздействиях. Вольфрам применяется в виде защитного материала в ядерных реакторах, и при облучении в нем накапливаются дефекты и выделяются различные когерентные и некогерентные дисперсные частицы. Изучение взаимодействия дислокаций с выделившимися фазами поможет обеспечить длительную и безопасную работу реактора. В данной работе представлены результаты молекулярно-динамического моделирования взаимодействия краевой дислокации с частицей, содержащей атомы рения с различной стехиометрией, возникающие в реальности в процессе трансмутации вольфрама с ОЦК кристаллической решеткой когерентной основному металлу. Полученные результаты демонстрируют повышение напряжения течения по мере увеличения среднего размера частицы, при этом зависимость от температуры является слабовыраженной. В силу того, что данный вид дефектов является одним из многих (поры, границы зерен, некогерентные частицы), целесообразным представляется продолжение работы в ключе моделирования движения дислокации в поле напряжений, индуцированным рядом вышеупомянутых дефектов. Исследование влияния макроскопических дефектов на динамику движения дислокации в кристалле вольфрама является важным для понимания стабильности кристаллической решетки материала в далеких от равновесия условиях.

Ключевые слова: вольфрам, метод молекулярной динамики, дисперсионное упрочнение, деформация, температура, дефект.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УУНиТ» (соглашение № 075-03-2023-119/1) молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» для Шараповой Ю.Р. (проведение расчетов), гранта НШ-4320.2022.1.2 для Казакова А.М. (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ № 21-12-00275 для Корзниковой Е.А. (постановка задачи, концептуализация исследования).

Для цитирования: Шарапова Ю.Р., Казаков А.М., Семенов А.С., Семенова М.Н., Рахматуллина Ж.Г., Корзникова Е.А. Молекулярно-динамический анализ дисперсионного упрочнения когерентными интерметаллидными фазами в ОЦК вольфраме // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 4. С. 455–461. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.004.

Original article

MOLECULAR DYNAMIC ANALYSIS OF DISPERSION HARDENING BY COHERENT INTERMETALLIC PHASES IN BCC TUNGSTEN

Yulia R. Sharapova^{1†}, Arseny M. Kazakov², Alexander S. Semenov³, Mariya N. Semenova⁴, Zhanna G. Rahmatullina⁵, Elena A. Korznikova⁶^{1, 2, 5, 6} Ufa University of Science and Technology, Zaki Validi Str., 32, Ufa, 450008, Russia^{3, 4} Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University named after M. K. Ammosov, Tihonov Str., 5/1, Mirny, 678170, Russia^{2, 5, 6} Institute for Metals Superplasticity Problems of Russian Academy of Sciences, Khalturina Str., 39, Ufa, 450001, Russia¹ulya_usinsk@mail.ru[†]²arseny.m.kazakov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-8278-8705>³sash-alex@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9940-3915>⁴Mariya_Semyonova86@mail.ru⁵ishmitovazhanna@mail.ru⁶elena.a.korzniikova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5975-4849>

Abstract. Dispersion hardening plays an important role in changing the mechanical properties of structural materials. It is especially important to remember the mechanism of such hardening in materials used under extreme influences. Tungsten is used as a protective material in nuclear reactors, and when irradiated, defects accumulate in it and various coherent and incoherent dispersed particles are released. Studying the interaction of dislocations with the released phases will help ensure long-term and safe operation of the reactor. This paper presents the results of molecular dynamic modeling of the interaction of an edge dislocation with a particle containing rhenium atoms with different stoichiometry, which arise in reality during the transmutation of tungsten with a BCC crystal lattice coherent to the base metal. The obtained results demonstrate an increase in the flow voltage as the average particle size increases, while the dependence on temperature is weakly expressed. Due to the fact that this type of defects is one of many (pores, grain boundaries, incoherent particles), it seems appropriate to continue working in the key of modeling the movement of dislocation in the stress field induced by a number of the above-mentioned defects. The study of the effect of macroscopic defects on the dynamics of dislocation motion in a tungsten crystal is important for understanding the stability of the crystal lattice of the material in conditions far from equilibrium.

Keywords: tungsten, molecular dynamics method, dispersion hardening, deformation, temperature, defect.

Acknowledgements: The research was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the state assignment of UUST (agreement No. 075-03-2023-119/1) «Youth Scientific Laboratory of REC «Metals and Alloys Under Extreme Impacts» for Yu.R. Sharapova (calculations), grant No. Nsh-4320.2022.1.2 for A.M. Kazakov (analysis and discussion), grant of the Russian Science Foundation No. 21-12-00275 for E.A. Korznikova (problem statement, research conceptualization).

For citation: Sharapova, Yu. R., Kazakov, A. M., Semenov, M. N., Semenova, A. S., Rahmatullina, Zh. G. & Korznikova, E. A. (2023). Molecular dynamic analysis of dispersion hardening by coherent intermetallic phases in bcc tungsten. *Fundamental'nye problemy sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(4), 455–461. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.04.004.

Введение

В металлургии высокая прочность конструкционных материалов может быть достигнута за счет различных механизмов упрочнения: упрочнение твердым раствором, дислокационное упрочнение, фазовые превращения и т.д. Среди таких механизмов особенно выделяется дисперсионное упрочнение. Чаще всего осажденная фаза представляет собой интерметаллид, который является некогерентным по отношению к основной матрице. Именно такие частицы наиболее эффективно препятствуют движению дислокаций и вызывают наиболее сильный эффект упрочнения. Помимо упроч-

нения, выделения дисперсных частиц приводит к нежелательному охрупчиванию, что может привести к негативным последствиям при эксплуатации материалов при экстремальных воздействиях. Даже если не получается исключить чрезмерное выделение дисперсных частиц, важно понимать последствия эволюции структуры и изменения механических свойств.

Дисперсионное упрочнение в сплавах вольфрама и рения особенно важно для изучения. Эти материалы широко используются в качестве защитных материалов в ядерных реакторах, например, в международном экспериментальном термоядерном реакторе [1], где прочность и структурная целостность играют

ключевую роль в отношении длительной и безопасной эксплуатации реактора.

При таких экстремальных воздействиях вольфрам подвергается нейтронным бомбардировкам, плазменному нагреву и т.д. В результате в материале образуется большое число дефектов, таких как дислокационные петли и вакансионные поры, которые показаны на рис.1 [2].

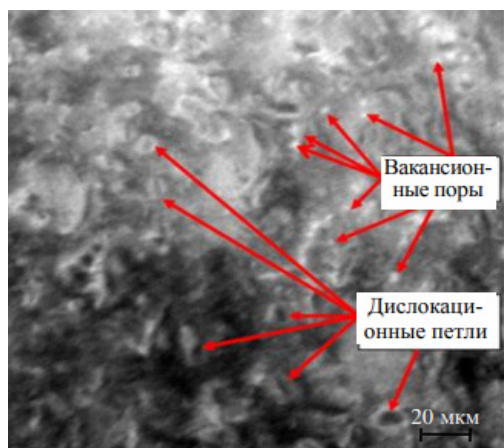


Рис.1. Радиационные дефекты в вольфраме

Fig.1. Radiation defects in tungsten

Кроме того, поскольку вольфрам подвергается радиационному облучению, атомы в узлах кристаллической решетки могут трансмутировать в атомы рения. В таком случае возможно образование различных фаз, которые изучались в работе [3]. Помимо некогерентных интерметаллидных фаз, в вольфраме возможно образование когерентной ОЦК фазы как раз за счет трансмутации части атомов вольфрама в рений. В таком случае локальное искажение кристаллической решетки не такое сильное, как в случае с интерметаллидами.

Проводить экспериментальные исследования по изучению взаимодействия дислокаций с дисперсными частицами в вольфраме не представляется возможным, поскольку на сегодняшний день технологические возможности не позволяют рассмотреть непосредственно процесс радиационного облучения на уровне микроструктуры. Исследование микроструктуры после экстремального воздействия тоже может дать неверный результат, поскольку между радиационным воздействием и последующим изучением структуры проходит определенное количество времени, за которое структура претерпевает изменения. Поэтому актуальным и подходящим методом исследования последствий экстремальных воздействий является компьютерное моделирование.

В частности, метод молекулярной динамики (МД) является хорошим инструментом для исследования проблем ядерной энергетики. Авторы работ [4] рассматривали образование различных дефектов в радиационно-облученном вольфраме. Кроме того, в работе [3] представлен детальный анализ взаимодействия краевой дислокации с дисперсными частицами в вольфраме при молекулярной статике.

Опираясь на результаты исследований [3], в данной работе представлены результаты изучения взаимодействия краевой дислокации с некогерентной обогащенной рением ОЦК фазой в вольфраме в рабочем интервале температур 600-1400 К [5].

Методика исследования

Для этого исследования был использован метод МД, который ранее доказал свою эффективность для анализа различных аспектов трансформации кристаллической решетки под воздействием внешних факторов, включая изучение краудеонов [6], термостабильность армированных углеродных нанотрубок [7], анализ фазовых переходов, вызванных деформацией [8], исследование локализации энергии в металлах в результате нестабильности делокализованных колебательных мод [9] и многих других.

Моделирование проводилось с использованием свободного пакета для классической молекулярной динамики Large scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [10] и EAM потенциала для вольфрама [11]. Программа Open Visualization Tools была использована для визуализации результатов моделирования [12].

Расчетная ячейка представляет собой монокристалл ОЦК вольфрама, в который внедрена краевая дислокация [11]. Координатные оси x , y , z ориентированы вдоль кристаллографических направлений $[-112]$, $[1-11]$ и $[110]$, соответственно. Линейные размеры расчетных ячеек равны $55 \times (10-40) \times 38$ нм³, чтобы рассмотреть различную плотность дефектов [5, 13-17]. Таким образом, общее число атомов в ячейках равно 1,3, 2,6 и $5,2 \times 10^6$, соответственно. Для деформации прикладывалась постоянная во времени нагрузка со скоростью $\epsilon_{xy} = 10^8$ с⁻¹. Компоненты напряжения, отличные от σ_{yz} , контролируются равными нулю. Параметр решетки вольфрама составляет $a = 3,16$ Å. Длина вектора Бюргера дислокации b равна $a \times \sqrt{3}/2 = 2,736$ Å. Для интегрирования уравнений движения атомов использовался метод Верле четвертого порядка с шагом интегрирования 2 фс.

Чтобы в расчетной ячейке находилась только одна дислокация, по оси z наложены фиксированные граничные условия. По двум другим направлениям наложены периодические граничные условия. На рис.2 изображена расчетная ячейка.

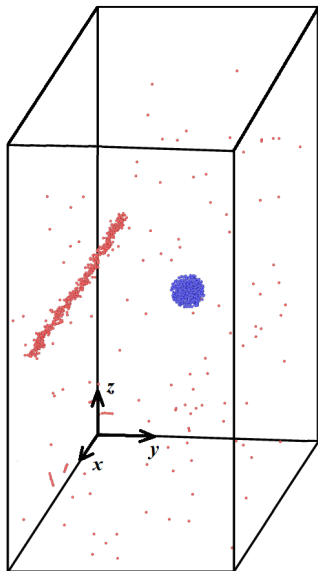


Рис.2. Визуализация расчетной ячейки. Красным цветом показаны атомы вокруг ядра дислокации, синим цветом показана когерентная ОЦК фаза

Fig.2. Visualization of the simulation cell. The atoms around the dislocation core are shown in red, the coherent BCC phase is shown in blue

Для создания когерентной ОЦК фазы в сферической области заданного размера часть атомов вольфрама заменялась на рений в нужном соотношении (50 и 75 %).

Результаты и обсуждение

Было проведено исследование взаимодействия краевой дислокации с когерентной ОЦК фазой при 6 различных параметрах моделирования, которые указаны в таблице 1, где D – диаметр фазы.

Таблица 1. Параметры моделирования для всех рассмотренных случаев

Table 1. Simulation parameters for all considered cases

| № | C_{Re} (ат. %) | L_y , нм | D , нм |
|---|------------------|------------|----------|
| 1 | 50 | 10 | 3 |
| 2 | 50 | 20 | 3 |
| 3 | 50 | 20 | 5 |
| 4 | 50 | 40 | 5 |
| 5 | 75 | 10 | 3 |
| 6 | 75 | 20 | 3 |

На рис.3 представлен типичный график кривой напряжение-деформация при взаимодействии дислокации с частицей.

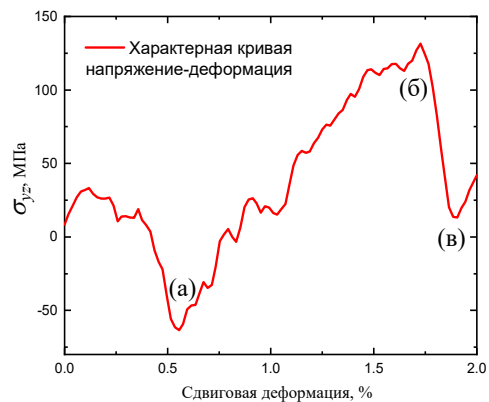


Рис.3. Образец кривой напряжение-деформация для данного взаимодействия

Fig.3. Sample of the stress-strain curve for this interaction

Сдвиговая деформация моделировалась до 2 %, что является достаточным для того, чтобы дислокация преодолела частицу. На (а) наблюдается небольшое притяжение между частицей и дислокацией, в результате чего дислокация прикрепляется к частице. Затем идет линейный рост, который сопровождается выгибанием дислокации при взаимодействии с исследуемой фазой. Точка (б) соответствует критическому напряжению сдвига, после которого дислокация отрывается от частицы. На (в) дислокация заново начинает движение по расчетной ячейке за счет периодических граничных условий.

На рис.4 подробно показана эволюция структуры в процессе сдвиговой деформации.

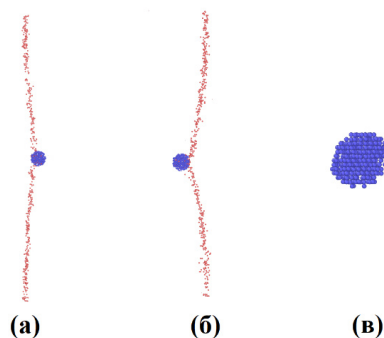


Рис.4. Положение дислокации и частицы в различные моменты времени. (а) – в момент прикрепления; (б) – в момент отрыва; (в) – перерезанная частица после отрыва дислокации

Fig.4. The position of the dislocation and the particle at different instants in time. (a) – at the moment of attachment; (b) – at the moment of separation; (c) – the cut particle after dislocation separation

Как видно из рис.4, дислокация перерезает когерентную ОЦК частицу на величину одного вектора Бюргерса. При моделировании большей степени деформации величина критического напряжения, необходимого для перерезания, будет меньше.

Для оценки влияния температуры на взаимодействие дислокации с когерентной ОЦК фазой на рис.5 представлен график зависимостей напряжение-деформация для первого случая (см. Табл.1).

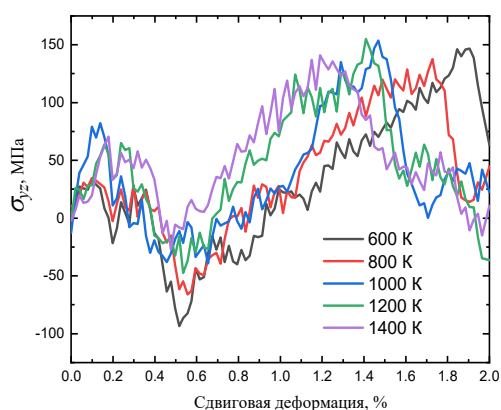


Рис.5. Кривые напряжение-деформация для 1-го случая из Табл.1. Цветом показаны соответствующие температуры моделирования

Fig.5. The stress-strain curves for the 1st case from Table 1. The simulation temperatures are shown in color

Как следует из рис.5, повышение температуры приводит к тому, что перерезанию частицы дислокацией наступает при меньшей степени деформации. Однако температурное влияние на величину критического напряжения сдвига незначительно: с одной стороны, повышение температуры положительно влияет на способность дислокации перерезать частицу. С другой стороны, так как мы рассматриваем надбарьерное скольжение дислокаций в кристалле, то тепловые флуктуации замедляют перемещение дислокации в расчетной ячейке. Кроме того, данный тип дефекта является очень слабым по сравнению с другими возможными фазами [3]. Данная тенденция аналогична для всех случаев, представленных в таблице 1.

В таблице 2 представлены значения критического напряжения сдвига для всех рассмотренных случаев.

При изменении параметра L_y , который варьировался для изучения различных плотностей дефектов согласно экспериментальным данным [5, 13-17], никакой зависимости выявлено не было. Можно предположить, что при наличии более прочного дефекта, например,

интерметаллидной фазы, значение данного параметра будет влиять на величину критического напряжения сдвига. Увеличение диаметра поры с 3 нм до 5 нм приводит к росту величины критического напряжения сдвига в среднем на 30%. Повышение содержания атомов рения в когерентной ОЦК фазе также приводит к росту величины критического напряжения сдвига: увеличение концентрации атомов рения в частице с 50 % до 75 % влечет за собой прирост критического напряжения сдвига на 35-40 %.

Таблица 2. Критическое напряжение сдвига при взаимодействии краевой дислокации с когерентной ОЦК фазой

Table 2. The critical shear stress in the interaction of the edge dislocation with the coherent BCC phase

| № | σ_{yz}^{max} , МПа | | | | |
|---|---------------------------|-------|--------|--------|--------|
| | 600 К | 800 К | 1000 К | 1200 К | 1400 К |
| 1 | 146 | 137 | 153 | 155 | 141 |
| 2 | 152 | 149 | 156 | 146 | 143 |
| 3 | 183 | 198 | 179 | 190 | 187 |
| 4 | 182 | 191 | 185 | 178 | 192 |
| 5 | 195 | 194 | 201 | 199 | 200 |
| 6 | 197 | 200 | 181 | 194 | 203 |

Заключение

В данной работе представлены результаты молекулярно-динамического моделирования взаимодействия краевой дислокации с когерентной ОЦК фазой в вольфраме. Увеличение размера дефекта и концентрации атомов рения в нем приводит к увеличению критического напряжения сдвига, в то время как температура слабо влияет на динамику данного взаимодействия. Полученные результаты согласуются с исследованием, выполненным в молекулярной статике [3]. Будущие исследования будут направлены на изучение взаимодействия дислокации с некогерентными фазами в вольфраме.

Список литературы

1. Knaster J., Moeslang A., Muroga T. Materials research for fusion // Nature Physics. 2016. V. 12. P. 424-434.
2. Singh B.N., Golubov S.I., Trinkaus H., Serra A., Osetsky Y.N., Barashev A.V. Aspects of microstructure evolution under cascade damage conditions // Journal of Nuclear Materials. 1997. V. 251. P. 107-122.
3. Bonny G., Bakaev A., Terentyev D. Assessment of hardening due to non-coherent precipi-

tates in tungsten-rhenium alloys at the atomic scale // *Scientific Reports*. 2019. V. 9. P. 16215.

4. Zhang Z., Yabuuchi K., Kimura A. Defect distribution in ion-irradiated pure tungsten at different temperatures // *Journal of Nuclear Materials*. 2016. V. 480. P. 207–215.

5. Tanno T., et al. Precipitation of solid transmutation elements in irradiated tungsten alloys // *Materials Transactions*. 2008. V. 49. P. 2259–2264.

6. Shelepev I.A., Kolesnikov I.D. 2022 Excitation and propagation of 1-crowdion in bcc niobium lattice // *Materials. Technologies. Design*. 2022. V. 4, N 1. P. 5–10.

7. Yankovskaya U.I., Zakharov P.V. Heat resistance of a Pt crystal reinforced with CNT's // *Materials. Technologies. Design*. 2021. V. 3, N 4. P. 64–67.

8. Chen H., Tsou N. The analysis of thermal-induced phase transformation and microstructural evolution in Ni-Ti based shape memory alloys by molecular dynamics // *Computer Modeling in Engineering & Sciences*. 2019. V. 120, N 2. P. 319–332.

9. Morkina A.Y., Bachurin D.V., Dmitriev S.V., Semenov A.S., Korznikova E.A. Modulational instability of delocalized modes in fcc copper // *Materials*. 2022. V. 15, N 16. P. 5597.

10. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *Journal of Computational Physics*. 1995. V. 117, N 1. P. 1–19.

11. Bonny G., Bakaev A., Terentyev D., Mastrikov Y. A. Interatomic potential to study plastic deformation in tungsten-rhenium alloys // *Journal of Applied Physics*. 2017. V. 121, N 16. P. 165107.

12. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2009. V. 18, N 1. P. 015012.

13. Hwang T., et al. Effect of neutron irradiation on rhenium cluster formation in tungsten and tungsten-rhenium alloys // *Journal of Nuclear Materials*. 2018, V. 507. P. 78–86.

14. Fukuda M., Tanno T., Nogami S., Hasegawa A. Effects of Re content and fabrication process on microstructural changes and hardening in neutron irradiated tungsten // *Materials Transactions*. 2012. V. 53. P. 2145–2150.

15. Tanno T., Fukuda M., Nogami S., Hasegawa A. Microstructure Development in Neutron Irradiated Tungsten Alloys // *Materials Transactions*. 2011. V. 52. P. 1447–1451.

16. Nemoto Y., Hasegawa A., Satou M., Abe K. Microstructural development of neutron irradi-

ated W–Re alloys // *Journal of Nuclear Materials*. 2000. V. 283. P. 1144–1147.

17. Fukuda M., Yabuuchi K., Nogami S., Hasegawa A., Tanaka T. Microstructural development of tungsten and tungsten-rhenium alloys due to neutron irradiation in HFIR // *Journal of Nuclear Materials*. 2014. V. 455. P. 460–463.

Информация об авторах

Ю. П. Шарапова – научный сотрудник молодежной НИЛ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» Уфимского университета науки и технологий.

А. М. Казаков – студент, сотрудник молодежной НИЛ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» Уфимского университета науки и технологий, лаборант Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

А. С. Семенов – доктор физико-математических наук, доцент, директор Политехнического института (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном.

М. Н. Семенова – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры Фундаментальной и прикладной математики Политехнического института (филиал) Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова в г. Мирном.

Ж. Г. Рахматуллина – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник молодежной НИЛ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» Уфимского университета науки и технологий; младший научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

Е. А. Корзникова – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий молодежной НИЛ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» Уфимского университета науки и технологий; ведущий научный сотрудник Института проблем сверхпластичности металлов РАН.

References

1. Knaster, J., Moeslang, A. & Muroga, T. (2016). Materials research for fusion. *Nature Physics*, 12, 424–434.

2. Singh, B. N., Golubov, S. I., Trinkaus, H., Serra, A., Osetsky, Y. N. & Barashev, A. V. (1997). Aspects of microstructure evolution under cascade damage conditions. *Journal of Nuclear Materials*, 251, 107–122.

3. Bonny, G., Bakaev, A. & Terentyev, D. (2019). Assessment of hardening due to non-coherent precipitates in tungsten-rhenium alloys at the atomic scale. *Scientific Reports*, 9, 16215.
4. Zhang, Z., Yabuuchi, K. & Kimura, A. (2016). Defect distribution in ion-irradiated pure tungsten at different temperatures. *Journal of Nuclear Materials*, 480, 207–215.
5. Tanno, T., Fukuda, M., Nogami, S. & Hasegawa, A. (2011). Microstructure Development in Neutron Irradiated Tungsten Alloys. *Materials Transactions*, 52, 1447–1451.
6. Shelepev, I. A. & Kolesnikov, I. D. (2022). Excitation and propagation of 1-crowdion in bcc niobium lattice. *Materials. Technologies. Design*, 4(1), 5–10.
7. Yankovskaya, U. I. & Zakharov, P. V. (2021). Heat resistance of a Pt crystal reinforced with CNT's. *Materials. Technologies. Design*, 3(4), 64–67.
8. Chen, H. & Tsou, N. (2019). The analysis of thermal-induced phase transformation and microstructural evolution in Ni–Ti based shape memory alloys by molecular dynamics. *Computer Modelling in Engineering & Sciences*, 120(2), 319–332.
9. Morkina, A. Y., Bachurin, D. V., Dmitriev, S. V., Semenov, A. S. & Korznikova, E. A. (2022). Modulational instability of delocalized modes in fcc copper. *Materials*, 15(16), 5597.
10. Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 17(1), 1–19.
11. Bonny, G., Bakaev, A., Terentyev, D. & Matrikov, Y. A. (2017). Interatomic potential to study plastic deformation in tungsten-rhenium alloys. *Journal of Applied Physics*, 121(16), 165107.
12. Stukowski, A. (2009). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012.
13. Hwang, T., et al. (2018). Effect of neutron irradiation on rhenium cluster formation in tungsten and tungsten-rhenium alloys. *Journal of Nuclear Materials*, 507, 78–86.
14. Fukuda, M., Tanno, T., Nogami, S. & Hasegawa, A. (2012). Effects of Re content and fabrication process on microstructural changes and hardening in neutron irradiated tungsten. *Materials Transactions*, 53, 2145–2150.
15. Nemoto, Y., Hasegawa, A., Satou, M. & Abe, K. (2000). Microstructural development of neutron irradiated W–Re alloys. *Journal of Nuclear Materials*, 283, 1144–1147.
16. Tanno, T., et al. (2008). Precipitation of solid transmutation elements in irradiated tungsten alloys. *Materials Transactions*, 49, 2259–2264.
17. Fukuda, M., Yabuuchi, K., Nogami, S., Hasegawa, A. & Tanaka, T. (2014). Microstructural development of tungsten and tungsten-rhenium alloys due to neutron irradiation in HFIR. *Journal of Nuclear Materials*, 455, 460–463.

Information about the authors

Yu. R. Sharapova – Researcher of the youth research laboratory «Metals and Alloys under Extreme Impacts», Ufa University of Science and Technology.

A. M. Kazakov – Student, Researcher of the youth research laboratory «Metals and Alloys under Extreme Impacts», Ufa University of Science and Technology, Laboratory assistant of the Institute for Metals Superplasticity Problems RAS.

A. S. Semenov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Head of the Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University named after M. K. Ammosov.

M. N. Semenova – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Associate Professor of the Department of Fundamental and Applied Mathematics, Mirny Polytechnic Institute (branch) of North-Eastern Federal University named after M. K. Ammosov.

Zh. G. Rahmatullina – Junior Researcher of the youth research laboratory «Metals and Alloys under Extreme Impacts», Ufa University of Science and Technology; Junior Researcher of the Institute for Metals Superplasticity Problems RAS.

E. A. Korznikova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of the youth research laboratory «Metals and Alloys under Extreme Impacts», Ufa University of Science and Technology; Leading Researcher of the Institute for Metals Superplasticity Problems RAS.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 07.07.2023; одобрена после рецензирования 24.07.2023; принята к публикации 07.08.2023.

The article was received by the editorial board on 07 July 23; approved after reviewing 24 July 23; accepted for publication 07 Aug. 23.