

**НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»**

На правах рукописи



ДЕМИДОВ Дмитрий Николаевич

**ДИФфуЗИЯ КЛАСТЕРОВ СОБСТВЕННЫХ МЕЖУЗЕЛЬНЫХ
АТОМОВ В ОЦК (Fe, V) И ГЦК (Cu) КРИСТАЛЛАХ С ВНУТРЕННЕЙ
СТРУКТУРОЙ: МНОГОУРОВНЕВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

Специальность: Физика конденсированного состояния (1.3.8.)

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
кандидат физико-математических наук
Сивак Александр Борисович

Москва — 2021

Содержание

Введение	5
Глава 1 Методы моделирования, используемые для расчета характеристик кластеров СМА	14
1.1 Выбор потенциала межатомного взаимодействия	14
1.2 Метод молекулярной статики.....	20
1.3 Метод молекулярной динамики	21
1.3.1 Определение диффузионных характеристик кластеров СМА...	22
1.3.2 Определение диссоциативных свойств кластеров СМА.....	25
1.4 Кинетический метод Монте-Карло	26
1.5 Теория упругости	28
1.6 Многоуровневый подход.....	29
1.7 Выводы по главе 1	30
Глава 2 Кристаллографические, энергетические и диффузионные характеристики кластеров СМА в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах в отсутствие внешних деформаций.....	31
2.1 Введение.....	31
2.2 Методика моделирования	32
2.2.1 Расчеты методом молекулярной статики	32
2.2.2 Расчеты методом молекулярной динамики	32
2.3 Кристаллографические и энергетические характеристики димежузлий.....	36
2.4 Кристаллографические и энергетические характеристики кластеров из 3—5 СМА.....	38
2.5 Диффузионные характеристики димежузлий.....	39
2.6 Кинетические модели диффузии димежузлий в Fe и V.....	44
2.7 Диффузионные характеристики кластеров из 3—5 СМА в Fe	49
2.8 Реориентации кластеров СМА в процессе диффузии в Fe.....	52
2.9 Термическая диссоциация димежузлий	57

2.10	Выводы по главе 2	60
Глава 3	Влияние внешних нагрузок на диффузионные характеристики димежузлий в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах	62
3.1	Введение.....	62
3.2	Методика моделирования	65
3.3	Тензор диффузии для частных случаев	67
3.4	Зависимости коэффициентов диффузии димежузлий от внешних нагрузок различных типов	70
3.5	Зависимости компонент нормированного тензора диффузии димежузлий от внешних нагрузок различных типов	73
3.6	Упругодиффузионный и дипольный тензоры димежузлий	74
3.7	Выводы по главе 3	79
Глава 4	Эффективности дислокационных стоков для димежузлий в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах.....	81
4.1	Введение.....	81
4.2	Методика моделирования	82
4.3	Типы рассматриваемых дислокаций	84
4.4	Влияние типа дислокаций на эффективность дислокационных стоков..	85
4.5	Влияние дислокационной плотности на эффективность дислокационных стоков	89
4.6	Влияние температуры на эффективность дислокационных стоков	92
4.7	Влияние образования димежузлий на скорость распухания кристаллов под действием повреждающего облучения.....	95
4.8	Влияние образования димежузлий на радиационную ползучесть кристаллов под действием повреждающего облучения	98
4.9	Выводы по главе 4	104
	Заключение.....	106
	Список сокращений и условных обозначений	109
	Литература.....	110

Введение

Актуальность работы

Материалы в активных зонах ядерных и термоядерных реакторов в процессе эксплуатации подвергаются значительным радиационным, температурным и механическим нагрузкам, которые приводят к изменениям микроструктуры и, как следствие, их физико-механических свойств (распухание, упрочнение, ползучесть, др.), определяя ресурс работы материалов. Понимание физико-химической природы, закономерностей и механизмов таких изменений лежит в основе разработки новых конструкционных и функциональных материалов ядерной и термоядерной техники. В существующих феноменологических моделях изменения макроскопических свойств материалов под перечисленными нагрузками используются параметры, определяемые свойствами материала на атомных и микроскопических масштабах: количество и типы радиационных дефектов, образующихся в каскадах атомных столкновений, коэффициенты диффузии радиационных дефектов, их дипольные тензоры, силы стока различных элементов микроструктуры (дислокации, малоугловые границы наклона, вакансионные поры, др.) для радиационных дефектов (собственные точечные дефекты, их кластеры), и многие другие. Экспериментальное определение этих параметров недоступно ввиду малости временных и пространственных масштабов, на которых протекают первичные процессы, изменяющие микроструктуру материалов.

В связи с этим необходимо применять теоретические методы и методы компьютерного моделирования, иерархически выстроенные в многоуровневую модель, позволяющую рассчитать необходимые параметры, в полной мере учитывая как упругую анизотропию материалов, так и реальную симметрию кристаллов и радиационных дефектов. Такой подход дает возможность для развития физически обоснованных моделей изменения макросвойств материалов под повреждающим облучением и проследить влияние кристаллографического класса материала на макроскопическое поведение материалов под облучением.

В качестве объектов исследования в работе выбраны металлы разных кристаллографических классов, имеющие важное значение для ядерной и термоядерной техники: ОЦК Fe и V являются основой перспективных конструкционных материалов (ферритно-мартенситные стали, ванадиевые сплавы) для ядерных и термоядерных реакторов; ГЦК медь и сплавы на ее основе (например, хромциркониевая бронза) используются в качестве функциональных материалов в термоядерных реакторах. В роли предмета исследования выступает диффузия кластеров собственных межузельных атомов (СМА) в кристаллах с внутренней структурой. В процессе взаимодействия повреждающего облучения с материалом возможно образование не только одиночных собственных точечных дефектов (СТД) — СМА и вакансий, но и их кластеров: доля выживших после прохождения каскада СМА, содержащихся в кластерах, может превышать 50% [1]. Одним из наиболее часто образующихся типов кластеров является димежузлие (2-СМА). По молекулярно-динамическим (МД) данным о первичной радиационной повреждаемости в металлах в примерно от 10 до 20% выживших СМА после окончания каскада содержится в 2-СМА, также значительная доля СМА (5—10%) содержится в кластерах из 3—5 СМА [1]. В настоящее время анизотропная диффузия кластеров СМА во внешних и внутренних упругих полях, и, как следствие, вклад кластеров СМА в радиационное деформирование металлов, являются относительно малоизученным, что определяет актуальность темы работы.

Степень разработанности темы исследования

Энергетические, кристаллографические и диффузионные характеристики радиационных дефектов (РД) в металлах активно исследовались методами компьютерного моделирования, начиная с 50-х годов прошлого века [2—5]. В первую очередь исследовались свойства точечных РД — вакансий и СМА. После того как первые исследования первичной радиационной повреждаемости МД-методом показали, что значительная часть точечных РД объединена в кластеры [6—10], началось систематическое изучение их свойств [11—14].

В последние два десятилетия вследствие развития вычислительной техники кинетический метод Монте-Карло (КМК) стал широко использоваться для моделирования диффузии радиационных дефектов и эволюции микроструктуры металлов под облучением [15—18]. Относительно недавно был предложен подход [19], в котором при проведении КМК-расчетов с помощью анизотропной теории упругости учитывается влияние упругих полей, создаваемых элементами микроструктуры, на диффузию точечных РД, рассматриваемых как упругие диполи. С помощью этого подхода в [19—25] было показано, что упругие поля элементов микроструктуры оказывают определяющее влияние на эволюцию микроструктуры материалов под облучением, а значит, и на изменение их макросвойств. Симметрия кристаллов и их дефектов приводит к качественным отличиям в свойствах элементов микроструктур материалов разных кристаллографических классов под облучением: например, преференс (относительная разность сил стока для СМА и вакансий) винтовых дислокаций и малоугловых границ кручения в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах, как оказалось, имеет разный знак [21, 24].

Указанный подход использовался для моделирования диффузии только точечных дефектов. Кластеры точечных дефектов обладают множеством кристаллографически неэквивалентных метастабильных и седловых конфигураций, что делает прямое использование этого подхода затруднительным. В диссертации расширяется область применения данного подхода на кластеры точечных дефектов и демонстрируется его применение для расчета эффективностей дислокационных стоков для кластеров СМА. В опубликованных работах такие попытки до сих пор не предпринимались.

Цели работы

1. Разработать многоуровневый метод моделирования анизотропной диффузии кластеров точечных дефектов во внешних и внутренних упругих полях, учитывающий влияние симметрии кристалла и его упругой анизотропии, для получения физически обоснованных параметров феноменологических моделей радиационного деформирования кристаллов.

2. Оценить вклад кластеров СМА, образующихся в каскадах атомных столкновений, в радиационное деформирование кристаллов разных кристаллографических классов на примере ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлов.

Задачи работы

Для ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллов:

- Определить кристаллографические, энергетические и диффузионные характеристики кластеров СМА различных размеров в отсутствие внешних нагрузок методом молекулярной статики (МС) и МД-методом;
- Исследовать влияние внешних нагрузок разных типов на диффузионные характеристики димежузлий МД-методом;
- С помощью данных, полученных в результате выполнения первых двух задач, определить дипольный тензор эффективной седловой конфигурации димежузлий, позволяющий моделировать анизотропную диффузию димежузлий во внешних и внутренних упругих полях;
- Рассчитать эффективности дислокационных стоков для димежузлий КМК-методом, в котором взаимодействие между дислокациями, являющимися основными стоками радиационных дефектов, и димежузлий (упругими диполями) рассчитывается в рамках анизотропной теории упругости;
- На основе рассчитанных эффективностей дислокационных стоков провести оценку влияния образования димежузлий в процессе повреждающего облучения на скорость радиационного деформирования кристаллов.

Научная новизна

Влияние внешних и внутренних упругих полей на анизотропию диффузии РД может учитываться с помощью дипольного тензора седловой конфигурации РД. Дипольный тензор седловых конфигураций обычно рассчитывается с помощью компьютерного моделирования (МС-методом), т.к. его экспериментальное определение затруднено из-за недостаточной точности имеющихся экспериментальных методик. Однако если РД обладает множеством кристаллографически неэквивалентных метастабильных и седловых конфигураций (как в случае 2-СМА), задача становится практически нерешаемой из-за ее сложности.

В диссертационной работе предложен новый метод расчета дипольного тензора эффективной седловой конфигурации радиационных дефектов, в который вносят вклад все реальные седловые конфигурации. В основе метода лежит МД-расчет деформационных зависимостей тензора диффузии РД. Новый метод впервые позволил определить дипольный тензор эффективной седловой конфигурации 2-СМА для ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллов. Используя эти данные, впервые удалось рассчитать эффективности дислокационных стоков для 2-СМА с учетом упругого взаимодействия между дислокациями и 2-СМА, принимая в расчет влияние упругой анизотропии и симметрии кристаллов. Полученные эффективности дислокационных стоков позволили оценить влияние образования 2-СМА на скорость радиационного деформирования указанных металлов. Ранее подобные данные были получены только для одиночных СТД.

Теоретическая значимость работы

Предложен новый метод расчета дипольного тензора эффективной седловой конфигурации РД, в который вносят вклад все реальные седловые конфигурации. Данный метод пригоден в том числе и для дефектов, обладающих множеством кристаллографически неэквивалентных метастабильных и седловых конфигураций, как это имеет место для кластеров СТД. Получаемые с помощью данного метода дипольные тензоры позволяют моделировать анизотропную

диффузию РД во внешних и внутренних упругих полях с учетом кристаллографического класса исследуемого металла и симметрии РД, учитывать вклад РД в радиационное деформирование металлов в рамках многоуровневого подхода.

Практическая значимость работы

Разработанные модели и полученные с их помощью результаты обеспечивают более глубокое физическое понимание происходящих в металлах под повреждающим облучением процессов, приводящих к таким радиационным явлениям как радиационная ползучесть, радиационное вакансионное распухание, выявляют роль в этих явлениях кластеризации РД при их образовании в каскадах атомных столкновений. Кластеризация может различаться для разных энергетических спектров первично выбитых атомов (ПВА) в реакторах разного типа (например, средняя энергия ПВА в реакторах на быстрых нейтронах и в проектируемых термоядерных реакторах может различаться на порядок). В настоящее время экспериментальное изучение влияния нейтронного облучения с характерным для термоядерных реакторов энергетическим спектром затруднено в связи с отсутствием стационарных термоядерных источников нейтронов. Поэтому построение физически обоснованных многоуровневых моделей на основе методов компьютерного моделирования имеет практическую значимость для разработки научных основ создания конструкционных материалов ядерных и термоядерных реакторов.

Методология и методы исследования

Определение кристаллографических и энергетических характеристик кластеров СМА в ОЦК металлах (Fe, V) и ГЦК-металле (Cu) осуществлялось с использованием МС-метода. Определение диффузионных и диссоциативных характеристик кластеров СМА осуществлялось с помощью МД-метода. Межатомные взаимодействия описывались с помощью полуэмпирических потенциалов, учитывающих эффекты многочастичности взаимодействий. Используемые потенциалы наилучшим образом описывают комплекс известных

из эксперимента данных об объемных свойствах кристаллов и свойствах СТД. Расчет эффективностей дислокационных стоков производился КМК-методом (совместно с анизотропной теорией упругости и с использованием в качестве входных параметров данных, получаемых МС- и МД-методом).

Основные положения, выносимые на защиту

1. Многоуровневый метод моделирования анизотропной диффузии кластеров собственных межузельных атомов во внешних и внутренних упругих полях, позволяющий получать физически обоснованные параметры феноменологических моделей радиационного деформирования кристаллов.
2. Метод определения эффективного дипольного тензора седловых конфигураций радиационных дефектов на основе расчетов методом молекулярной динамики.
3. Разработанные алгоритмы и программы анализа диффузионных траекторий радиационных дефектов, позволяющие рассчитывать диффузионные характеристики, включая тензор диффузии, радиационных дефектов в ОЦК и ГЦК кристаллах.
4. Результаты расчетов характеристик кластеров собственных межузельных атомов, а также эффективностей дислокационных стоков для димежузлий в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах, составляющие основу базы данных для дальнейшего развития физических моделей функциональных свойств ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлов и материалов на их основе.
5. При дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ отношение эффективностей дислокационных стоков для димежузлий и СМА для краевых дислокаций лежит в диапазоне 1,5—2,2 в зависимости от системы скольжения, температуры и материала. Для винтовых дислокаций в Fe и V значения такого отношения ниже (0,7—1,7 в зависимости от системы скольжения, температуры и материала), а в Cu — выше (1,6—2,8 в зависимости от температуры).
6. Доля собственных межузельных атомов, содержащихся в димежузлиях, которые образуются под повреждающим облучением в кристалле, заметно влияет на скорость вакансионного распухания и радиационной ползучести при неизменной

скорости набора повреждающей дозы. Если дислокационный преференс для димежузлий больше, чем для одиночных собственных межузельных атомов, образование димежузлий увеличивает скорость распухания, и наоборот.

Личный вклад автора работы

Личный вклад автора состоял в непосредственном участии в разработке теоретических моделей, построении ЭВМ-моделей, проведении с их помощью моделирующих расчетов, обработке и интерпретации расчетных данных, подготовке докладов на конференциях и семинарах, и подготовке основных публикаций по выполненной работе.

Степень достоверности результатов

Достоверность полученных результатов обусловлена: 1) использованием методов теоретической физики (классическая молекулярная динамика, анизотропная теория упругости, методы Монте-Карло); 2) использованием в атомистических моделях потенциалов межатомного взаимодействия, хорошо описывающих известные экспериментальные результаты для объемных свойств исследуемых кристаллов и их дефектов; 3) сопоставлением результатов с данными других авторов, сравнением результатов моделирующих расчетов с экспериментальными данными.

Апробация работы

Основные работы докладывались и обсуждались на 16 международных и российских конференциях: XV Курчатовская междисциплинарная молодежная научная школа, г. Москва, 2017 г.; Научно-технический семинар Росатома «Конструкционные материалы активных зон быстрых и термоядерных реакторов» (КОМАЗ), г. Москва, 2017 г., 2019 г.; 52-я Школа ПИЯФ по Физике Конденсированного Состояния, г. Санкт-Петербург, 2018 г.; 27th IAEA Fusion Energy Conference (FEC), Gandhinagar, India, 2018; Молодежная конференция по теоретической и экспериментальной физике (МКТЭФ), г. Москва, 2018 г., 2020 г.; 13-й Международный Уральский Семинар «Радиационная физика металлов и сплавов», г. Кыштым, 2019 г.; Отраслевой семинар Росатома «Физика

радиационных повреждений материалов атомной техники» (ФРПМ), г. Обнинск, 2018 г., 2019 г.; Inaugural Symposium for “Computational Materials Program of Excellence”, Moscow, Russia, 2019; Совещание по нейтронным источникам и гибридным системам, стационарным режимам токамака, технологическим системам и материалам ТИН, г. Москва, 2018 г., 2020 г.; International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond, Moscow, Russia, 2020; 4th International Conference on Fusion—Fission sub-critical systems for waste management and safety, Moscow, Russia, 2020 (online); 20th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-20), Granada, Spain, 2021 (online).

Публикации

Результаты работы изложены в 12 публикациях, из них: 4 статьи в научных журналах, входящих в перечень рецензируемых научных журналов и изданий ВАК РФ, 6 статей в журналах, включенных в библиографические базы данных цитирования Web of Science и Scopus, 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Объем и структура работы

Работа состоит из введения, четырех глав и заключения. Полный объем составляет 123 страницы с 18 рисунками и 23 таблицами. Список литературы содержит 164 наименования.

В **первой главе** сделан обзор методов многоуровневого моделирования, применяемых в настоящей работе для расчета характеристик кластеров СМА и эффективностей дислокационных стоков для кластеров. Описаны специфические особенности и вычислительные параметры описываемых методов. Поскольку потенциал межатомного взаимодействия оказывает определяющее влияние на рассчитываемые с помощью МС- и МД-методов характеристики СТД и их кластеров, приведено обоснование выбора используемых потенциалов межатомного взаимодействия для ОЦК (Fe и V) и ГЦК (Cu) кристаллов.

Во **второй главе** МС- и МД-методами определены кристаллографические, энергетические, диффузионные, диссоциативные характеристики кластеров СМА

различных размеров в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах, не подверженных внешним нагрузкам. Проведен анализ влияния степени одномерности диффузии кластеров на силы стока сферических поглотителей.

Третья глава посвящена разработке метода расчета дипольного тензора эффективной седловой конфигурации РД, в основе которого лежит использование рассчитанных МД-методом деформационных зависимостей тензора диффузии РД. Рассмотрено влияние однородных деформаций различных типов на диффузионные характеристики 2-СМА (коэффициент диффузии, тензор диффузии, др.) в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах. Определены их упругодиффузионные тензоры и дипольные тензоры эффективных седловых конфигураций.

В четвертой главе КМК-методом рассчитаны зависимости от температуры и дислокационной плотности эффективностей дислокационных стоков для 2-СМА в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах. Получены соответствующие аналитические выражения, аппроксимирующие расчетные зависимости. Оценено влияние образования димежузлий в процессе повреждающего облучения на скорость вакансионного распухания и радиационной ползучести.

В заключении представлены основные выводы по результатам проведенных исследований.

Автор выражает **благодарность** научному руководителю А.Б. Сиваку за помощь и поддержку на всех этапах научной работы и работы над диссертацией, а также Е.А. Смирнову, В.М. Чернову, Б.В. Кутееву, А.Б. Кукушкину, К.Е. Приходько за полезные советы и дискуссии по теме диссертации.

Глава 1

Методы моделирования, используемые для расчета характеристик кластеров СМА

1.1 Выбор потенциала межатомного взаимодействия

Поскольку потенциал межатомного взаимодействия (ПМВ) оказывает определяющее влияние на рассчитываемые с помощью МС- и МД-методов характеристики СТД и их кластеров, необходимо выбрать такие ПМВ, которые наилучшим образом воспроизводит известные из эксперимента свойства СТД, а также объёмные свойства кристаллов.

При разработке и верификации ПМВ используются разные подходы. Традиционный подход заключается в подгонке параметров потенциалов с целью наиболее точного описания экспериментально известных объёмных и поверхностных характеристик кристаллов (параметр решетки, упругие постоянные, уравнение состояния, когезионная энергия, поверхностная энергия, др.), а также характеристик СТД (энергия образования, энергия миграции, релаксационный объем, др.). [14, 26—28]. В последние двадцать лет получил развитие подход, в котором при подгонке параметров потенциалов наравне с экспериментальными данными используются данные, рассчитанные с использованием теории функционала плотности (ТФП) [29—33]. Каждый из этих подходов обладает своими преимуществами и недостатками. К недостаткам первого можно отнести относительно небольшое количество надежной экспериментальной информации в отношении характеристик СТД, к недостаткам второго — то, что используемые в ТФП физические приближения и упрощения приводят к значительным отклонениям расчетных свойств от наблюдаемых экспериментально [34].

В настоящей работе для проведения МС- и МД-расчетов свойств СТД и их кластеров в ОЦК кристаллах Fe и V выбраны ПМВ R01, разработанные В.А. Романовым [14, 26], т.к. проведенное в [34] сравнение известных ПМВ

показало, что потенциалы R01 для Fe и V наилучшим образом описывают комплекс известных из эксперимента данных об объемных свойствах кристаллов и свойствах СТД. Эти потенциалы разработаны в рамках полуэмпирической модели переходных металлов с учетом их объемных характеристик и свойств собственных дефектов [14, 26]. В рамках этой модели потенциальная энергия кристалла разделяется на две части: первая описывается парными взаимодействиями, вторая представляет собой функцию, зависящую только от объема кристалла.

Воспроизводимые потенциалами R01 объемные свойства ОЦК Fe и V кристаллов сведены в табл. 1.1:

- a_0 — параметр решетки при 0 К,
- B — объемный модуль сжатия,
- C_{44} и $C' = (C_{11} - C_{12})/2$ — сдвиговые модули,
- $A = C_{44}/C'$ — параметр упругой анизотропии,

а свойства СТД — в табл. 1.2, 1.3:

- E^{FP} — энергия образования пар Френкеля (ПФ),
- E^F_{vac} , E^M_{vac} , V^R_{vac} — энергия образования, энергия миграции и релаксационный объем вакансии соответственно,
- E^{SD} — энергия активации самодиффузии,
- $E^F_{\langle 110 \rangle}$, $E^M_{\langle 110 \rangle}$, $V^R_{\langle 110 \rangle}$ — энергия образования, энергия миграции и релаксационный объем $\langle 110 \rangle$ гантельного СМА,
- P_{ij} — дипольный тензор $\langle 110 \rangle$ гантельного СМА,
- ΔE — разность энергий образования $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ гантельных СМА,
- $\delta S/\delta S' = 2[P_{12}/(A(P_{11} - P_{33}))]^2$,
- E^F_{SIA} , E^M_{SIA} , V^R_{SIA} — энергия образования, энергия миграции и релаксационный объем стабильной конфигурации СМА соответственно.

Для сравнения в табл. 1.2—1.3 приведены экспериментальные и ТФП-данные.

Таблица 1.1. Объемные свойства ОЦК Fe и V, определенные с помощью ПМВ R01 и ТФП-расчетов при 0 К, и соответствующие экспериментальные данные.

Fe			
	R01	Эксперимент	ТФП
a_0 , пм	286,65	286,05 ^а	283,39 ^б ; 283,0—284,8 ^в
B , ГПа	173,1	173 ± 2 ^г	189,4 ^б ; 176—201 ^в
C_{44} , ГПа	121,9	121,9 ± 0,5 ^г	97,58 ^б ; 93—126 ^в
C' , ГПа	52,5	52,5 ± 0,3 ^г	65,41 ^б ; 63—85,5 ^в
A	2,32	2,32 ± 0,02 ^г	1,492 ^б ; 1,35—1,65 ^в
V			
	R01	Эксперимент	ТФП
a_0 , пм	302,0	302,1 ^д	299 ^е ; 300 ^е ; 304 ^ж
B , ГПа	160,76	160,76 ^д	192 ^е ; 183 ^е ; 171 ^ж
C_{44} , ГПа	46,80	46,80 ^д	21,9 ^е ; 20,0 ^е
C' , ГПа	58,08	58,08 ^д	59,4 ^е ; 57,9 ^е
A	0,806	0,806 ^д	0,370 ^е ; 0,346 ^е

^а значение, полученное путем экстраполяции экспериментальных значений [35] к 0 К;

^б [36]; ^в [37—42];

^г значение, полученное в [43] при 4,2 К;

^д значение, полученное в [44] путем экстраполяции экспериментальных значений к 0 К;

^е [45]; ^ж [46]

Таблица 1.2. Свойства STD в ОЦК Fe, определенные с помощью ПМВ R01, ТФП-расчетов при 0 К и эксперимента. Все энергии и компоненты дипольного тензора приведены в эВ, релаксационные объемы — в атомных объемах.

	R01	Эксперимент	ТФП
E^{FP}	6,304	6,3 ^a ; 6,6 ^a ; 6,45 ± 1,15 ^b	5,34—6,25 ^B
E^F_{Vac}	1,920	2,0 ± 0,2 ^Г	1,93—2,15 ^B
E^M_{Vac}	0,735	0,7—0,8 ^д ; 0,72 ^е	0,59—0,67 ^ж
V^R_{Vac}	-0,140	—	-0,22 ^з
E^{SD}	2,655	2,66 ^и ; 2,62 ^к ; 2,75 ^л	2,52—2,76 ^к
$E^F_{\langle 110 \rangle}$	4,384	4,45 ± 1,35 ^м	3,41—4,13 ^B
$E^M_{\langle 110 \rangle}$	0,246	0,25 ± 0,04 ^н ; 0,3 ± 0,05 ^о	0,34 ^п
$V^R_{\langle 110 \rangle}$	1,480	1,5 ± 0,2 ^р	1,58 ^т , 1,62 ^з
P_{11}	18,04	—	21,15 ^з
P_{12}	4,99	—	5,12 ^з
P_{33}	20,39	—	25,83 ^з
ΔE	0,243	—	0,70—0,72 ^B
$\delta S/\delta S'$	1,68	1,41 ± 0,3 ^н	0,973 ^з

^a [47];

^b Среднее значение приведенных в [47] экспериментальных данных с учетом погрешности измерений величины электросопротивления ПФ в [48];

^B [49—52]; ^Г [53]; ^д [54]; ^е [55]; ^ж [49, 52]; ^з [56]; ^и [57]; ^к [58]; ^л [59];

^м Энергия образования СМА, вычисленная как разность измеренных значений энергии образования пары Френкеля (6,45 ± 1,15 эВ) и энергии образования вакансии (2,0 ± 0,2 эВ [53]);

^н [60]; ^о [61]; ^п [52]; ^р [62]; ^т [63].

Таблица 1.3. Свойства СТД в ОЦК V, определенные с помощью ПМВ R01, ТФП-расчетов при 0 К и эксперимента. Все энергии приведены в эВ, релаксационный объем — в атомных объемах.

	R01	Эксперимент	ТФП
E^{FP}	5,950	—	5,74 ^а ; 5,88 ^б ; 5,29 ^в
E^F_{Vac}	2,785	2,2 ± 0,4 ^г ; 2,6—2,8 ^д	2,60 ^а ; 2,51 ^б ; 2,48 ^в
E^M_{Vac}	0,423	0,4—0,5 ^е	0,33 ^а ; 0,62 ^б
E^{SD}	3,208	3,1—3,2 ^ж	2,93 ^а ; 3,13 ^б
E^F_{SIA}	3,165	—	3,14 ^а ; 3,367 ^б ; 2,81 ^в
E^M_{SIA}	0,168	0,21 ^з ; 0,18 ^и	≤ 0,01 ^{а, б, в}
V^R_{SIA}	1,505	—	1,310 ^а — 1,472
ΔE	0,418	—	-0,34 ^а , -0,285 ^б , -0,28 ^в

^а [45]; ^б [64]; ^в [30]; ^г [65];

^д Оценка, полученная как разность экспериментальных значений E^{SD} и E^M_{Vac} ;

^е [66—71]; ^ж [72, 73]; ^з [74];

^и Оценка энергии активации миграции, соответствующая пику при 72 К на кривых восстановления электросопротивления после повреждающего облучения тепловыми и быстрыми нейтронами [69], не следующему кинетике первого порядка;

^к [55].

Для расчетов свойств СТД и кластеров СТД в меди выбран ПМВ EAM1, разработанный в [33]. Потенциал EAM1 разработан в рамках метода погруженного атома [75, 76], в котором потенциальная энергия кристаллита состоит из двух частей: первая часть описывает парные взаимодействия, а вторая — многочастичные. При создании ПМВ EAM1 его параметры оптимизировались путём минимизации взвешенного среднеквадратического отклонения выбранных свойств меди от их целевых величин, взятых из эксперимента и ТФП-расчётов. EAM1 был протестирован в [33] в отношении описания известных свойств кристалла, которые не использовались при его параметризации, при этом вновь было получено хорошее согласие в отношении описания таких свойств. В [77]

проведено дополнительное тестирование данного ПМВ на предмет сравнения с другими экспериментальными данными (температурные зависимости коэффициента теплового расширения кристалла и изотермического объемного модуля, производные по давлению упругих постоянных второго порядка) и вновь было получено хорошее согласие. В таблицах 1.4—1.5 приведены объемные свойства кристалла Cu и его СТД, рассчитанные с помощью ПМВ ЕАМ1 в [33, 77], и соответствующие экспериментальные данные. Обозначения в таблицах 1.4—1.5 аналогичны таблицам 1.1—1.3, за исключением того, что параметры СМА (включая компоненты дипольного тензора P_{ij}) приведены для $\langle 100 \rangle$ гантели, как для наиболее устойчивой конфигурации СМА в ГЦК Cu, E_0 — когезионная энергия, P — давление.

Таблица 1.4. Объемные свойства кристалла Cu, рассчитанные с использованием ПМВ ЕАМ1 для 0 К в сравнении с экспериментальными данными.

	ЕАМ1 [33, 77]	Эксперимент
a_0 , пм	361,4925	361,491±0,002 ^а
E_0 , эВ/атом	-3,54022	-3,54 ^б
B , ГПа	138,35	142,03 ^в ; 133,17 ^г ; 141,09 ^д
C_{11} , ГПа	169,88	176,20 ^в ; 164,48 ^г
C_{12} , ГПа	122,59	124,94 ^в ; 117,52 ^г
C' , ГПа	23,65	25,64 ^в ; 23,48 ^г ; 25,87 ^д
C_{44} , ГПа	76,21	81,77 ^в ; 75,39 ^г ; 82,6 ^д
$\partial B/\partial P$	3,345	5,280 ^д ; 5,137 ^е ; 3,910 ^ж ; 5,590 ^з ; 5,80 ^и ; 3,040 ^к
$\partial C_{11}/\partial P$	4,249	5,993 ^д ; 5,733 ^е ; 4,660 ^ж ; 6,363 ^з ; 6,40 ^и
$\partial C_{12}/\partial P$	2,894	4,923 ^д ; 4,839 ^е ; 3,530 ^ж ; 5,203 ^з ; 5,50 ^и
$\partial C_{44}/\partial P$	1,937	2,344 ^д ; 2,664 ^е ; 0,830 ^ж ; 2,350 ^з ; 2,50 ^и
$\partial C'/\partial P$	0,677	0,535 ^д ; 0,447 ^е ; 0,566 ^ж ; 0,580 ^з ; 0,45 ^и
A	3,223	2,941—3,518 ^{в, г, д}

^а 298 К, [78]; ^б [79]; ^в экстраполированные к 0 К экспериментальные значения (10—300 К) [80];

^г 300 К, [80]; ^д 79 К, [81]; ^е 300 К, [82]; ^ж 300 К, [83]; ^з 300 К, [84]; ^и 300 К, [85]; ^к 300 К, [86]

Таблица 1.5. Экспериментально измеренные и рассчитанные характеристики СТД в меди.

	ЕАМ1 [33, 77]	Эксперимент
E^{FP} , эВ	4,346	4,1—5,4 ^a
V_{Vac}^R , Ω	-0,299	-0,25 ^a
E_{Vac}^F , эВ	1,272	$1,28 \pm 0,05^a$
E_{Vac}^M , эВ	0,690	$0,70 \pm 0,02^a$
V_{Vac}^M , Ω	0,109	0,145 ^b
P_{11}, P_{22}, P_{33} , эВ ($P_{ij} = 0$ для $i \neq j$)	18,49, 18,94, 18,94	15,0, 16,5, 16,5 ^a
V_{SIA}^R , Ω	1,843	$1,55 \pm 0,2^a$
E_{SIA}^M , эВ	0,098	0,117 ^a

^a [87]; ^b [88]

Подробный обзор и сравнение различных ПМВ для Fe и V приведены в [34], а для Cu — в [77].

1.2 Метод молекулярной статики

МС-метод позволяет найти такое положение структурных единиц системы (атомов), при котором ее потенциальная энергия будет минимальна. Это достигается за счёт вариации координат структурных единиц до состояния глобального минимума потенциальной энергии [89, 90]. Система рассматривается при абсолютном нуле температуры, поскольку отсутствует учет тепловых колебаний. Однако имеется возможность изучать системы, находящиеся под действием внешних и внутренних упругих полей.

В рамках МС-метода могут использоваться разные типы граничных условий, чей выбор определяется задачами конкретного моделирования. Для целей настоящей работы наиболее удобными оказались жесткие граничные условия (поверхностный слой атомов искусственно фиксируется, не смещаясь в процессе релаксации кристаллита после создания дефекта внутри него).

В настоящей работе МС-методом рассчитывались энергетические и кристаллографические характеристики кластеров СМА. Минимизация потенциальной энергии кристаллита осуществлялась методом градиентного спуска с постоянной скоростью, которая подбиралась эмпирически исходя из компромисса между скоростью выполнения расчетов и необходимостью их сходимости. Размер кристаллитов выбирался достаточно большим, чтобы избежать заметного влияния граничных условий на рассчитываемые параметры. Потенциальная энергия кристаллита после создания в ней стартовой конфигурации радиационного дефекта минимизировалась до тех пор, пока максимальная действующая в кристаллите сила не становилась меньше 10^{-6} эВ/нм.

1.3 Метод молекулярной динамики

Классический МД-метод состоит в моделировании траекторий совокупности структурных единиц вещества (атомов или молекул), каждая из которых подчиняется классическим законам движения. Данное приближение справедливо в тех ситуациях, где можно пренебречь релятивистскими и квантовыми эффектами. Динамика моделируемой системы описывается функцией Гамильтона, Лагранжа или непосредственно уравнениями движения Ньютона. МД-метод позволяет рассчитывать как статические, так и динамические характеристики системы, используя указанные уравнения движения [90].

В настоящей работе для МД-моделирования диффузионных характеристик кластеров использовались модельные кристаллиты кубической формы или формы прямоугольного параллелепипеда с периодическими граничными условиями, представляющие собой микроканонические ансамбли. Значение a выбирали таким образом, чтобы при заданной температуре T давление P в кристаллите было равно нулю с точностью не хуже $0,1$ эВ/нм³. Длины сторон кристаллита выбирались достаточными для исключения влияния граничных условий на определяемые величины. Величину временного шага выбирали таким образом, чтобы смещение самого быстрого атома за одну итерацию было меньше $\sim 0,005a$ (a – параметр решетки). Интегрирование уравнений движения выполняли методом Верле [91].

Местоположения СМА, составляющих кластеров СТД, определялись путём анализа заселённости ячеек Вигнера—Зейтца (ЯВЗ) атомами кристаллита. За положение кластера в случае 2-СМА принималось положение одного из СМА, его составляющих. При моделировании кластеров большего размера в качестве положения кластера принимались координаты ЯВЗ, ближайшей к центру масс кластера.

Для определения диффузионных характеристик кластеров СТД проводилось моделирование нескольких десятков диффузионных траекторий (от 50 до 100), физическое время моделирования каждой из которых было таковым, чтобы в среднем кластер успевал совершить от $5 \cdot 10^4$ до 10^5 скачков в зависимости от необходимой точности расчетов. В качестве стартовых конфигураций кластера выбирались их наиболее устойчивые конфигурации, рассчитанные МС-методом. Для анализа полученных диффузионных траекторий применялся алгоритм [92].

1.3.1 Определение диффузионных характеристик кластеров СМА

Коэффициент диффузии кластеров СМА D рассчитывался по алгоритму [93, 94]:

$$D = \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} D_i = \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \frac{R_{i,j}^2}{6\tau}, \quad (1.1)$$

где N_S — полное число серий разбиений диффузионной траектории на изохронные отрезки длительностью τ , n_i — число отрезков в i -й серии, $R_{i,j}$ — модуль вектора смещения дефекта на j -м отрезке в i -й серии. Величина τ выбиралась исходя из компромисса между точностью вычисления и набором большой статистики, и необходимостью того, чтобы длительность τ была достаточной для учета всех физических особенностей диффузионной траектории. Затем полученные значения D усреднялись по всем смоделированным диффузионным траекториям.

Методика расчета тензора диффузии сходна с методикой определения коэффициента диффузии D . Каждая смоделированная траектория разбивалась на множество изохронных интервалов длительностью τ . Для каждого изохронного интервала определялся вектор перемещения димежузлия \mathbf{R}_{nm} (здесь и далее вектора

и матрицы будут обозначаться жирным шрифтом), где n — номер траектории, а m — номер изохронного интервала. Затем вычислялась величина $\mathbf{D} = \langle \mathbf{R}_{nm} \otimes \mathbf{R}_{nm} \rangle / 2\tau$, где \mathbf{D} — матрица, определяющая тензор D_{ij} в кристаллографических координатах, а операция $\langle \dots \rangle$ означает усреднение по всем n и m . Погрешности компонент тензора D_{ij} рассчитывались, как стандартные ошибки по указанному набору n и m .

Коэффициент диффузии меченых атомов D^{tr} (коэффициент самодиффузии в расчете на один дефект) рассчитывался с использованием соотношения Эйнштейна для случая диффузии в трехмерном пространстве:

$$D^{\text{tr}} = \frac{1}{c_d} \frac{\langle R^2(t) \rangle}{6t}, \quad (1.2)$$

где $\langle R^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)]^2$ — среднеквадратичное смещение меченых атомов, N — число атомов в модельном кристаллите (все атомы кристаллита рассматривались как меченые), $\vec{r}_i(0)$ и $\vec{r}_i(t)$ — начальные и текущие позиции атома i , $c_d = q/N$ — концентрация дефектов (q — число СМА, образующих кластер), t — длительность траектории. Итоговое значение D^{tr} рассчитывалось усреднением значений D^{tr} по всем смоделированным диффузионным траекториям.

Для анализа механизма диффузии кластеров СМА полезен расчет корреляционных факторов диффузии, поскольку определенные их значения могут указывать на тот или иной механизм диффузии. Например, в случае одномерной (1D) диффузии дефекта, корреляционный фактор меченых атомов $f^{\text{tr}} = 0$ [95].

Корреляционный фактор дефекта f^d определялся как

$$f^d = \frac{D}{D^{\text{RW}}}, \quad (1.3)$$

где D^{RW} — коэффициент диффузии, рассчитываемый в приближении случайных блужданий:

$$D^{\text{RW}} = \sum_i \frac{v_i \lambda_i^2}{6}. \quad (1.4)$$

Здесь v_i — частота скачков кластера с длиной скачка λ_i .

Значение f^{tr} определялось как

$$f^{tr} = \frac{D^{tr}}{D}. \quad (1.5)$$

Механизмы диффузии кластеров могут также характеризовать средняя длина диффузионного пробега кластера до смены направления диффузии [15, 17] и частота реориентаций кластера, которые далее обозначаются как l_{ch} и v^R соответственно.

В настоящей работе l_{ch} определялось как $l_{ch} = \sqrt{6D\langle\Delta t_{1D}\rangle}$, где $\langle\Delta t_{1D}\rangle$ — среднее время между двумя последовательными реориентациями. Моменты времени, в которые происходили реориентации кластера, определялись с помощью следующего алгоритма:

1. Строятся цилиндры радиусом ρ , оси которых направлены вдоль плотноупакованных направлений рассматриваемой кристаллической решетки ($\langle 111 \rangle$ в ОЦК-кристаллах и $\langle 110 \rangle$ в ГЦК кристаллах) и проходят через начальное положения кластера СМА на диффузионной траектории.

2. Определяются моменты времени, в которые траектория покидает пределы каждого из этих цилиндров.

3. Наиболее поздний из моментов времени, определенных на шаге 3, принимается за момент времени, в который происходит реориентация кластера.

4. Строятся цилиндры радиусом ρ , чьи оси, направленные вдоль плотноупакованных направлений, проходят через новое положение кластера, соответствующее моменту его последней выявленной реориентации.

5. Шаги 2—4 повторяются, пока не выявляется последняя реориентация на траектории.

По завершении работы данного алгоритма, определяются длительности Δt_{1D} между последовательными моментами реориентаций кластера, чье усреднение дает искомое значение $\langle\Delta t_{1D}\rangle$. Ее погрешность определяется через стандартное отклонение по всему множеству значений Δt_{1D} .

Значение радиуса ρ является параметром алгоритма, который подбирался итеративно таким образом, чтобы его последовательное уменьшение на $a/2$ от некоторого стартового достаточно большого значения (например, $5a$) перестало заметно влиять на общее число обнаруженных одномерных участков и итоговые значения l_{ch} и $\langle \Delta t_{1D} \rangle$. Полученные таким образом значения ρ равны $1,5a$ для 1-, 2-СМА в Fe, V, Cu и $2a$ для 3-, 4-, 5-СМА в Fe, V.

Частота ν^R определялась, как величина, обратная к $\langle \Delta t_{1D} \rangle$. Поскольку интервалы времени между двумя последовательными реориентациями имеют распределение Пуассона, относительную погрешность для частоты реориентаций $\delta \nu_R$ можно определить как $N_R^{-1/2}$, где N_R — общее число зафиксированных реориентаций при заданной температуре.

1.3.2 Определение диссоциативных свойств кластеров СМА

Термическая стабильность кластера СТД характеризуется величиной его энергии связи. 2-СМА в ОЦК-металлах Fe и V обладают относительно невысокой энергией связи: $\sim 0,8$ — $1,1$ эВ в Fe [8, 96, 97] и $\sim 0,5$ — $0,7$ эВ в V [98]. Полученное МС-расчетом значение энергии связи 2-СМА в ГЦК Cu в настоящей работе составило $0,884$ эВ. Это делает возможным диссоциацию 2-СМА за время, сравнимое по порядку величины со временем, необходимым для миграции димежузлия от места образования до места поглощения на стоке, т.е. времена жизни 2-СМА до диссоциации и до поглощения на стоке могут оказаться сравнимыми при температурах, представляющих практический интерес (до ~ 1000 К для ферритно-мартенситных сталей, до ~ 1500 К для сплавов ванадия, до ~ 800 К для хромциркониевых бронз). МС-расчеты энергий связи для 3-, 4-, 5-СМА в Fe показали, что они обладают большей энергией связи ($1,2$ — $2,1$ эВ [99]), что позволяет им сохранять стабильность в указанных температурных диапазонах, поэтому вероятностью их диссоциации можно пренебречь при построении физических моделей диффузии кластеров СМА к стокам. В случае же 2-СМА, необходимо учитывать возможность их диссоциации и знать температурные

зависимости параметров, характеризующих их диссоциацию (среднее время жизни 2-СМА до диссоциации, среднее перемещение 2-СМА до диссоциации).

В качестве критерия диссоциации 2-СМА использовалось такое расстояние между двумя образующих его СМА, при превышении которого в процессе диффузии движение этих СМА переставало коррелировать друг с другом. Критерий диссоциации составил $5a$ для ОЦК Fe и V и $4a$ для ГЦК Cu. При выполнении критерия диссоциации моделирование текущей диффузионной траектории прекращалось.

Среднее время жизни 2-СМА до диссоциации $\langle \tau \rangle$ рассчитывалось как средняя длительность рассчитанных диффузионных траекторий (все траектории рассчитывались до выполнения критерия диссоциации) для заданной температуры.

Среднее перемещение 2-СМА до диссоциации ζ определялось как

$$\zeta = \sqrt{6\langle \tau \rangle D}. \quad (1.6)$$

1.4 Кинетический метод Монте-Карло

КМК-метод широко применяется для моделирования диффузии точечных дефектов и их кластеров в кристаллах, а также для моделирования эволюции микроструктуры кристалла, вызываемых указанной диффузией [100]. Моделирование событий (скачки дефекта в соседние узлы решетки), характеризуемых набором соответствующих вероятностей, осуществляется с помощью разыгрывания случайной величины. КМК-метод позволяет рассчитывать силы стоков различных элементов микроструктуры (дислокации, дислокационные петли, вакансионные поры, границы раздела фаз и т. д.) [15, 17, 19].

В диссертационной работе применяется КМК-метод, основанный на алгоритме «времени пребывания» (он же алгоритм «*n*-fold way» или алгоритм «Bortz-Kalos-Lebowitz» — ВКЛ-алгоритм) [101], который в полной мере позволяет учесть дискретность кристаллической решетки, ее симметрию и механизмы диффузии моделируемых объектов. Вероятность скачка дефекта в соседний узел решетки k ($k = 1, 2, \dots, K$, где K — число соседних узлов решетки, в которые дефект может совершить скачок) рассчитывалась как

$$n_k = \frac{\Gamma_k}{\sum_{i=1}^K \Gamma_i} \approx \frac{\exp(-E_k \beta)}{\sum_{i=1}^K \exp(-E_i \beta)} = \frac{\exp(-E_k^F \beta)}{\sum_{i=1}^K \exp(-E_i^F \beta)}, \quad (1.7)$$

где Γ_k — частота скачков дефекта в соседний узел k , E_k — высота энергетического барьера для скачка из текущего положения дефекта в соседний узел k , E_k^F — энергия образования соответствующей седловой конфигурации, $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура. Выражение (1.7) получено в предположении, что экспоненциальная зависимость частоты скачков от высоты энергетического барьера намного важнее предэкспоненциальных частотных множителей [102]. Из (1.7) видно, что величины n_k определяются только характеристиками седловых конфигураций дефекта.

Расчет эффективностей дислокационных стоков (ДС) ξ для 2-СМА ($\xi = k^2/\rho_d$, где ρ_d — дислокационная плотность, k^2 — сила стока) в настоящей работе осуществлялся КМК-методом, следуя [19, 20]. Рассматривалась ситуация, когда в модельном кристаллите присутствует только один дефект (2-СМА) и один тип стока (дислокация заданного типа). Стартовые позиции дефекта задавали случайным образом в кристаллите. Модельный кристаллит представлял собой прямую призму неограниченной длины, в основании которой лежал квадрат с длиной стороны L . Дислокация располагалась в центре призмы.

На боковые грани призмы накладывались периодические граничные условия: в случае, если дефект покидал кристаллит, он возвращался обратно с противоположной стороны кристаллита. Таким образом, моделировался кристалл, содержащий квадратную сетку параллельных дислокаций с расстояниями между ближайшими дислокациями L ($\rho_d = L^{-2}$). Траектория дефекта рассчитывалась до тех пор, пока он не поглощался дислокацией при приближении к ней на расстояние, меньшее r_0 . После этого в модельный кристаллит вводился новый дефект. Эффективность стока определяется выражением:

$$\xi = \frac{k^2}{\rho_d} = \frac{2dL^2}{\lambda^2 \langle N \rangle}, \quad (1.8)$$

где $\langle N \rangle$ — среднее число скачков, совершенных 2-СМА до поглощения на стоке, $d = 3$ — размерность пространства, в котором происходит диффузии, λ — длина скачка дефекта. Для получения статистически надежных данных моделировалось 10^5 траекторий для каждого типа дислокации, что обеспечивало величину погрешности результатов расчета величины ξ на уровне менее 1% с уровнем доверительной вероятности в 99%.

1.5 Теория упругости

Упругие поля, создаваемые элементами микроструктуры (например, дислокации), приводят к координатной зависимости высот барьеров E_k за счет упругого взаимодействия с дефектом в стабильных и седловых конфигурациях. В диссертационной работе упругие поля прямолинейных дислокаций рассчитываются в рамках анизотропной линейной теории упругости (АЛТУ) алгебраическим методом [103]. Размерное взаимодействие первого порядка дефекта, рассматриваемого как упругий диполь, с создаваемым элементом микроструктуры упругим полем можно рассчитать, как [103—105]

$$E^{\text{int}}(\mathbf{r}) = -P_{ij}\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}), \quad (1.9)$$

где ε_{ij} — тензор упругой деформации, создаваемый элементом микроструктуры, P_{ij} — дипольный тензор дефекта, \mathbf{r} — радиус-вектор положения дефекта в пространстве.

Энергию образования седловой конфигурации E_k^F в деформированном кристалле можно записать в виде суммы двух слагаемых: $E_k^F(\varepsilon_{ij}) = E^F(0) + E_k^{\text{int}}$, где $E^F(0)$ — энергия образования седловой конфигурации в отсутствие деформаций. Тогда выражение (1.7) для вероятностей n_k , используемых в КМК-расчетах, можно преобразовать, сократив множители $\exp(E^F(0))$ в числителе и знаменателе [19]:

$$n_k = \frac{\exp(-E_k^{\text{int}}\beta)}{\sum_{i=1}^K \exp(-E_i^{\text{int}}\beta)}, \quad (1.10)$$

где E_k^{int} — энергия взаимодействия (1.9) дислокации с дефектом в соответствующей седловой конфигурации.

1.6 Многоуровневый подход

Перечисленные выше методы используются совместно в рамках многоуровневого подхода. Полученные с помощью атомистических методов моделирования (МС, МД) данные о свойствах радиационных дефектов (дипольные тензоры седловых конфигураций дефектов) используются для определения влияния упругих полей дислокаций на энергии образования седловых конфигураций этих дефектов в рамках анизотропной теории упругости. Эти данные в свою очередь используются для определения вероятностей скачков дефектов в различных направлениях при КМК-расчетах эффективностей дислокационных стоков. Эффективности дислокационных стоков являются параметрами кинетических уравнений накопления радиационных дефектов под облучением (уравнения химической кинетики), с помощью которых можно определить потоки радиационных дефектов на микроструктурные стоки (дислокации, поры). Зная эти потоки, можно определить скорость переползания дислокаций и, соответственно, скорость деформирования кристалла. Принципиальная схема многоуровневого моделирования, используемая в диссертационной работе, представлена на рис. 1.1.

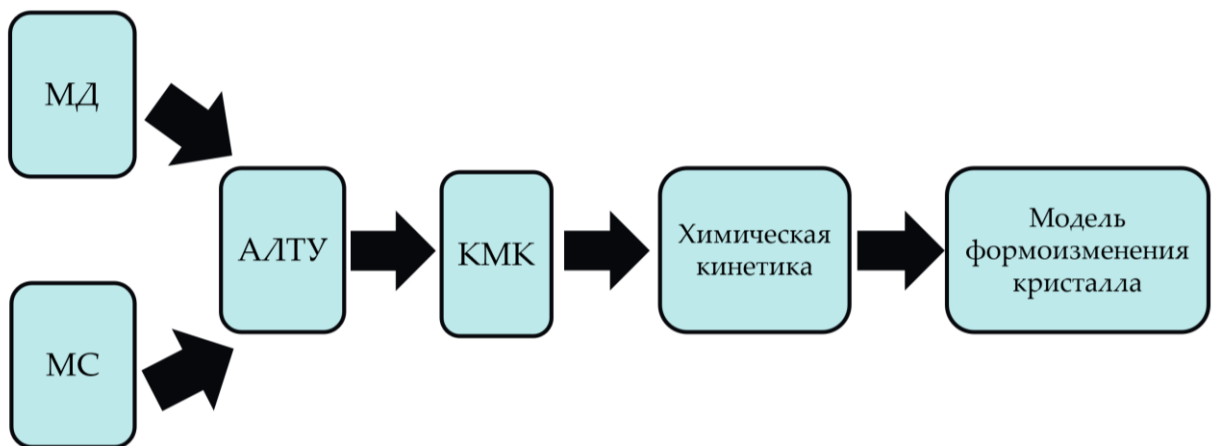


Рисунок 1.1 Используемая схема многоуровневого моделирования

1.7 Выводы по главе 1

Сделан обзор используемых в диссертационной работе методов многоуровневого моделирования и компьютерных моделей, позволяющих рассчитывать энергетические, кристаллографические, диссоциативные и диффузионные характеристики кластеров СТД при различных температурах и при наличии/отсутствии внешних полей деформаций (МС- и МД-методы), а также эффективности дислокационных стоков для кластеров при различных температурах и дислокационных плотностях (КМК-метод совместно с анизотропной теорией упругости с использованием в качестве входных параметров данные, получаемые МС- и МД-методами). Поскольку потенциал межатомного взаимодействия оказывает определяющее влияние на рассчитываемые с помощью МС- и МД-методов характеристики СТД и их кластеров, приведено обоснование выбора используемых в работе потенциалов межатомного взаимодействия для ОЦК (Fe и V) и ГЦК (Cu) кристаллов.

Глава 2

Кристаллографические, энергетические и диффузионные характеристики кластеров СМА в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах в отсутствие внешних деформаций

2.1 Введение

По результатам МД-моделирования [106, 107] каскадов атомных столкновений с повреждающей энергией от 1 до 50 кэВ от 69% до 38% выживших после окончания каскада СМА не образуют кластеров в Fe; в V доля таких СМА практически не зависит от повреждающей энергии и составляет 68%. При этом в кластерах, содержащих от двух до пяти СМА, в Fe содержится от 30% до 41% выживших СМА в зависимости от повреждающей энергии, а в V — 31% вне зависимости от повреждающей энергии.

Экспериментальное определение свойств СМА и их небольших кластеров затруднено малостью их пространственных размеров (~ нм). Поэтому для их изучения активно используются методы компьютерного моделирования: в [14, 19, 108—120] были получены диффузионные характеристики одиночных СМА и их кластеров (до 91-СМА в Fe, 61-СМА в V и 25-СМА в Cu). Ограничением методов компьютерного моделирования является высокая чувствительность результатов к используемому потенциалу межатомного взаимодействия. В [34] сравнение экспериментальных данных для Fe и V с результатами расчетов в рамках теории функционала электронной плотности в отношении упругих модулей кристаллов показало их значительное рассогласование, что делает проблематичным ее применение для описания свойств СТД, а также использование потенциалов, чьи параметры подогнаны к такого рода данным. В связи с этим, многие результаты из перечисленных выше работ требуют проверки и уточнения с использованием надежных потенциалов межатомного взаимодействия, согласующихся с известными экспериментальными данными (см. Главу 1).

В данной главе для ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллов:

- исследуются энергетические и кристаллографические характеристики кластеров СМА, содержащих от 2 до 5 СМА;
- определяются диффузионные характеристики кластеров, содержащих от 2 до 5 СМА, в температурном диапазоне 300—1200 К. Обсуждаются зависимости механизма (1D vs 3D) диффузии кластеров СМА от температуры и размера кластеров и их возможное влияние на эволюцию микроструктуры материала под облучением;
- рассчитываются температурные зависимости времени жизни димежузлий до диссоциации. На основе рассчитанных данных предлагаются аналитические зависимости, позволяющие экстраполировать полученные данные в область более низких температур. Оцениваются средние пробеги димежузлий до диссоциации для оценки вероятности диссоциации димежузлий в процессе их миграции на стоки.

2.2 Методика моделирования

2.2.1 Расчеты методом молекулярной статики

Для расчета МС-методом (раздел 1.2) кристаллографических и энергетических характеристик кластеров СМА использовались кубические модельные кристаллиты с плоскостями огранки $\{100\}$. Длины их ребер выбирались равными $30a$ (количество атомов кристаллита $N = 56791 + q$, где q — число СМА в кластере) для ОЦК кристаллов и $24a$ ($N = 58825 + q$) для ГЦК кристаллов. Такие размеры кристаллитов оказались достаточными для исключения влияния жестких граничных условий на определяемые энергетические характеристики дефектов с точностью до 10^{-3} эВ.

2.2.2 Расчеты методом молекулярной динамики

Для определения МД-методом (раздел 1.3) диффузионных и диссоциативных характеристик 2-СМА использовались кубические модельные кристаллиты с плоскостями огранки $\{100\}$. Длины их ребер выбирались равными $13a$

($N = 4394 + 2$) для ОЦК кристаллов и $10a$ ($N = 4000 + 2$) для ГЦК кристаллов. Такие размеры кристаллитов оказались достаточными для исключения влияния периодических граничных условий на определяемые величины.

Для всех рассмотренных температур T моделировалось от нескольких штук до нескольких десятков траекторий, содержащих десятки тысяч скачков 2-СМА. Ограничение по времени моделирования каждой диффузионной траектории подбиралось так, чтобы 2-СМА успел совершить как минимум $5 \cdot 10^4$ скачков. При достижении критерия диссоциации моделирование текущей диффузионной траектории останавливалось (см. раздел 1.3.2). В табл. 2.1 сведены данные по числу рассчитанных диффузионных траекторий M и суммарным по всем траекториям временам моделирования t_M для рассмотренных материалов и температур.

Таблица 2.1. Число рассчитанных диффузионных траекторий M и суммарное по всем траекториям время моделирования t_M .

T, K	Fe		V		Cu	
	M	$t_M, \text{нс}$	M	$t_M, \text{нс}$	M	$t_M, \text{нс}$
150	2	515	—	—	—	—
200	2	74	4	848	—	—
250	50	551	2	256	—	—
300	50	384	50	1089	100	5091
350	50	311	50	558	—	—
400	50	275	50	439	100	2516
450	60	310	60	396	—	—
500	100	758	100	963	100	1601
600	100	437	100	436	100	1119
700	60	212	160	286	100	562,2
800	—	—	260	150	100	121,4
900	—	—	—	—	100	31,14
1000	60	47	—	—	100	9,232
1100	—	—	—	—	—	3,961

Для моделирования диффузии 3-СМА и 4-СМА в Fe и V так же использовался кристаллит со стороной в 13а, а для 5-СМА — со стороной в 15а ($N = 6750 + 5$). В качестве стартовых конфигураций кластеров 3-,4-,5-СМА выбирались их наиболее устойчивые конфигурации, найденные МС-методом. Для моделирования диффузии 3-, 4-, 5-СМА для каждой рассматриваемой температуры запускалось по 100 задач и, соответственно, получено по 100 диффузионных траекторий. Суммарное по всем траекториям физическое время моделирования для рассмотренных типов кластеров сведены в табл. 2.2.

Таблица 2.2. Суммарное по всем траекториям физическое время моделирования t_s для рассмотренных типов кластеров в Fe и V.

T, К	Fe			V		
	3-СМА	4-СМА	5-СМА	3-СМА	4-СМА	5-СМА
	t_s , мкс	t_s , мкс	t_s , мкс	t_s , мкс	t_s , мкс	t_s , мкс
300	61,5	122	70,9	6,45	54,1	89,51
400	34,7	65,7	47,1	5,59	62,9	85,9
500	21,1	33,1	27,2	4,78	50,0	78,3
700	15,0	17,1	18,7	4,08	29,9	63,5
800	8,81	8,84	12,3	1,47	18,6	40,6
900	5,23	—	5,94	0,389	9,63	16,3
1000	2,63	1,05	3,24	0,105	4,36	7,38
1100	1,34	—	—	—	—	—
1200	0,556	0,126	1,22	—	—	—

Для определения параметров термической диссоциации 2-СМА использовалась специальная методика подготовки начальных условий. В качестве начальных положений атомов использовались их положения после релаксации МС-методом модельного кристаллита, содержащего два СМА на расстоянии первых ближайших соседей (БС) друг от друга. Начальные скорости атомов

задавались случайным образом в соответствии с распределением Максвелла для заданной температуры T . Поскольку начальные положения атомов модельного кристаллита соответствовали минимуму потенциальной энергии, то в процессе термализации ансамбль атомов стремился к температуре, примерно равной $T/2$ (в гармоническом приближении равенство было бы строгим). Ансамблю атомов давалось 5 пс на то, чтобы прийти в термическое равновесие. После этого, чтобы поднять температуру кристаллита к целевому значению T , производилось переопределение скоростей атомов (модули скоростей всех атомов умножаются на одну и ту же константу, равную корню из отношения целевого значения температуры к текущему ее значению). После переопределения скоростей ансамблю атомов вновь давалось время 5 пс на приход к термическому равновесию, вновь определялась средняя температура за этот промежуток времени и вновь производилось переопределение скоростей. Такая процедура повторялась 10 раз, что обеспечивало точность достижения целевой температуры T на уровне 0,1%. Весь переходный процесс приведения модельного кристаллита к желаемым термодинамическим условиям занимал 55 пс. Выбранный способ плавного подъёма температуры кристаллита от значения $T/2$ к целевой температуре T обусловлен стремлением минимизировать вероятность диссоциации димежузлия во время переходного процесса. Время жизни 2-СМА отсчитывалось от конца переходной стадии. Если во время переходной стадии происходила диссоциация 2-СМА, расчёт обрывался и не учитывался в последующей обработке результатов. Остальные параметры модельного кристаллита (размер и число атомов) были аналогичны описанным выше параметрам, использованным для определения коэффициента диффузии 2-СМА.

Для определения среднего времени жизни 2-СМА до диссоциации $\langle\tau\rangle$ при каждой T моделировалось 50—130 траекторий движения димежузлия до момента его диссоциации (меньшее количество траекторий соответствует меньшим температурам). Такое количество траекторий позволяло получать стандартную ошибку для $\langle\tau\rangle$ в пределах 10—20%. Нижняя температурная граница моделирования выбиралась так, чтобы было возможно зафиксировать необходимое

количество актов диссоциации за приемлемое время расчётов. Верхняя температурная граница определялась условием, чтобы за время переходного процесса (55 пс) вероятность диссоциации не превышала 50—70%. Температурные диапазоны, пригодные для моделирования, оказались следующими: 900—1450 К для Fe, 650—1100 К для V и 900—1200К для Cu.

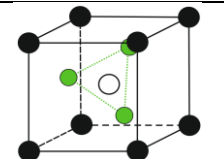
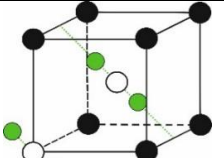
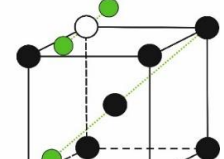
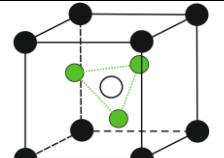
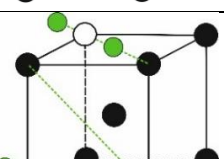
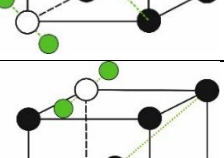
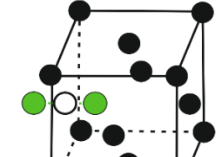
Как показано далее, энергии связи кластеров с $q > 2$ существенно выше, чем у 2-СМА как в Fe, так и в V, поэтому такие кластеры значительно более стабильны и заведомо успевают в процессе диффузии поглотиться на микроструктурном стоке до своей диссоциации. Поэтому вопрос термической диссоциации кластеров СМА размером более чем 2-СМА в настоящей работе не рассматривался.

2.3 Кристаллографические и энергетические характеристики димежузлий

Реализующиеся механизмы диффузии димежузлий во многом определяются тем, какие конфигурации димежузлий являются наиболее энергетически выгодными. 2-СМА имеют множество разнообразных конфигураций, различающихся как расстоянием между составляющими его СМА, так и конфигурациями этих СМА. Энергии образования, энергии связи различных конфигураций 2-СМА в Fe, V и Cu и их наиболее энергетически выгодные конфигурации, рассчитанные МС-методом, представлены в табл. 2.3.

Как показал анализ диффузионных траекторий, проведенный в [117], в процессе диффузии 2-СМА в ОЦК Fe и V возникают такие метастабильные конфигурации 2-СМА, в которых оба СМА, составляющих данный кластер, находятся в одной ЯВЗ. Расстояние между двумя такими СМА будет далее обозначаться как расстояние 0-БС. МС-расчёты показали, что наиболее энергетически выгодными конфигурациями такого типа являются конфигурации, в которых три атома, находящихся в одной ЯВЗ, образуют равносторонние треугольники со сторонами, параллельными направлениям типа $\langle 112 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ в Fe и V соответственно (табл. 2.3). Далее такие конфигурации обозначаются как I_{Δ}^2 . Ранее конфигурации I_{Δ}^2 в ОЦК Fe наблюдались в [108, 110, 114], где расчёты проводились как с использованием потенциального подхода, так и в рамках ТФП.

Таблица 2.3. Кристаллографические конфигурации и энергетические параметры 2-СМА в Fe, V и Cu. Жирным шрифтом выделены значения энергии образования и энергии связи наиболее стабильных конфигураций.

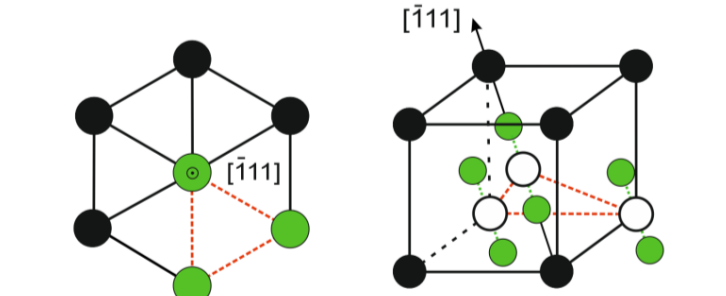
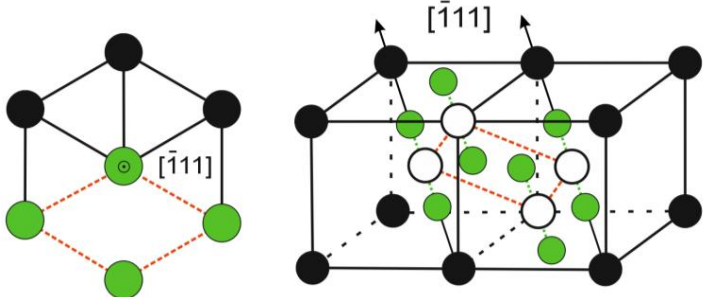
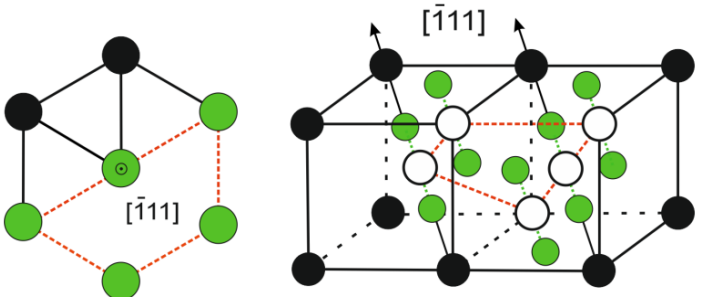
	Расстояние между двумя СМА	Кристаллографическая конфигурация	Энергии образования E^F и энергии связи E^B , эВ
Fe	0-BC		$E^F = 8,008$ $E^B = 0,760$
	1-BC		$E^F = 7,884$ $E^B = 0,884$
	3-BC		$E^F = 7,986$ $E^B = 0,782$
V	0-BC		$E^F = 5,877$ $E^B = 0,453$
	3-BC		$E^F = 5,819$ $E^B = 0,511$
	3-BC		$E^F = 6,090$ $E^B = 0,240$
Cu	1-BC		$E^F = 5,264$ $E^B = 0,830$

В Fe и V 2-СМА, состоящие из двух $\langle 110 \rangle$ гантелей в 1-БС и 3-БС соответственно (см. табл. 2.3), обладают наибольшими значениями E^B среди всех рассчитанных конфигураций. Далее они обозначаются как I_{110}^2 и в Fe, и в V. Конфигурация 2-СМА, состоящая из двух параллельных $\langle 111 \rangle$ гантелей в 3-БС, как в Fe, так и в V обладают наибольшими значениями E^B значениями (величины E^F и E^B приведены в табл. 2.3) среди состоящих из $\langle 111 \rangle$ гантелей 2-СМА. Такая конфигурация далее обозначается как I_{111}^2 .

2.4 Кристаллографические и энергетические характеристики кластеров из 3—5 СМА

В табл. 2.4 приведены энергии образования E^F и энергии связи E^B наиболее устойчивых кластеров размером от 3 до 5 в Fe по данным [14] (расчеты проводились с использованием ПМВ R01, как и в настоящей работе), а также их схематически изображенные пространственные конфигурации (виды в разных направлениях). Как показали МС-расчеты, эти кластеры представляют собой набор краудионов или гантельных СМА с расщеплением вдоль $\langle 111 \rangle$ (далее направление расщепления будем называть ориентацией кластера). В проекции на плоскость, нормальную к направлению расщепления, СМА занимают наиболее компактно набор соседних плотноупакованных направлений.

Таблица 2.4. Кристаллографические конфигурации моделируемых кластеров СМА в Fe, их энергии образования E^F и энергии связи E^B .

Тип кластера	Кристаллографическая конфигурация	Энергия образования и энергия связи кластера, эВ
3-СМА		$E^F = 11,04$ $E^B = 1,230$
4-СМА		$E^F = 13,37$ $E^B = 2,050$
5-СМА		$E^F = 15,95$ $E^B = 1,810$

2.5 Диффузионные характеристики димежузлий

На рис. 2.1 приведены рассчитанные МД-методом для Fe, V, Cu температурные зависимости коэффициента диффузии D в аррениусовских координатах (по оси абсцисс отложена величина β , $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B — постоянная Больцмана) и f^{tr} для 2-СМА. Температурные зависимости коэффициентов диффузии имеют неаррениусовский (нелинейный) характер. Такое поведение обусловлено наличием различных действующих механизмов диффузии, чьи вклады в общую подвижность димежузлия зависят от температуры. Во всём исследованном температурном диапазоне величина D ниже в V, чем в Fe (различие в области 200—300 К достигает двух порядков). Величина D в Cu при $T > 600$ К

является наименьшей среди всех трех рассмотренных металлов.

Температурная зависимость D для 2-СМА в Cu хорошо описывается соотношениями $D = 3,71 \cdot 10^{-4} \cdot \exp(-0,0437 \text{ эВ} \cdot \beta)$ [см²/с] в температурном диапазоне 300—500К и $D = 2,67 \cdot 10^{-4} \cdot \exp(-0,0293 \text{ эВ} \cdot \beta)$ [см²/с] в температурном диапазоне 500—1200К. Механизмы диффузии 2-СМА в Fe и V, как будет показано далее, являются более сложными (по причине большого числа метастабильных конфигураций 2-СМА, близких по энергии образования и вносящих свой вклад в диффузию), чем в Cu, что потребовало построения отдельной кинетической модели диффузии 2-СМА.

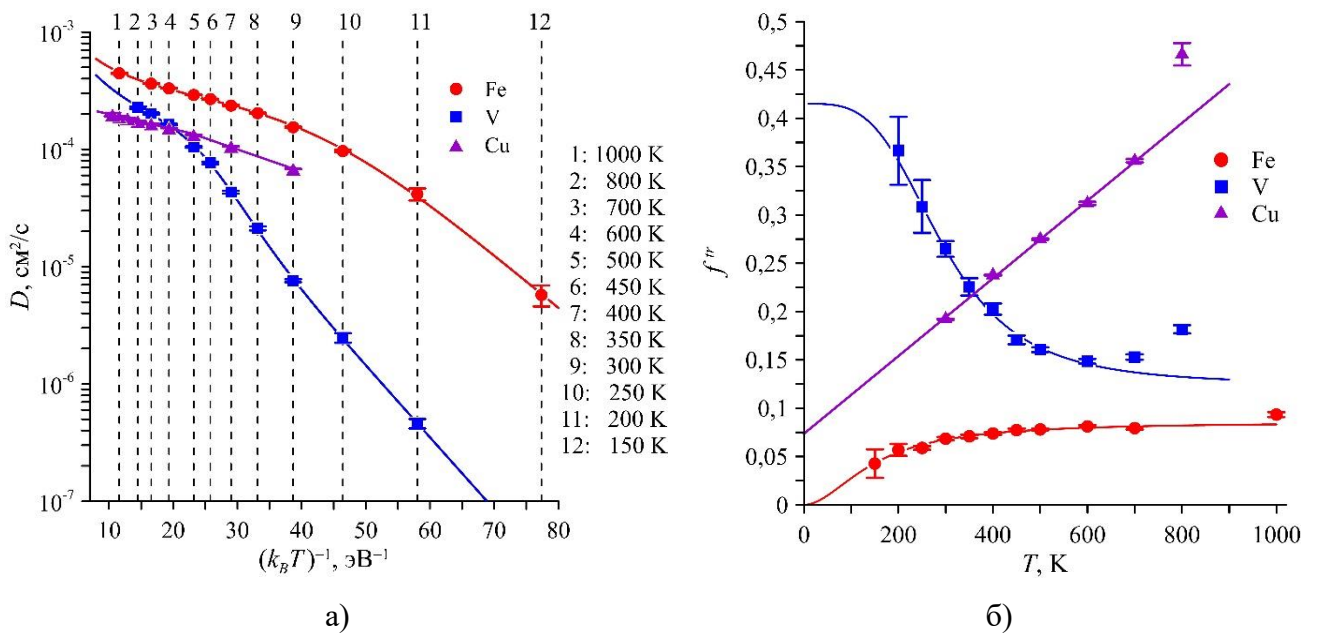


Рисунок 2.1. Температурные зависимости (а) коэффициента диффузии 2-СМА D (сплошные линии — аналитические аппроксимации: (2.8) для Fe, (2.10) для V, набор из двух аррениусовских зависимостей для Cu с параметрами в тексте) и (б) корреляционного множителя f^{tr} (сплошные линии — аналитические аппроксимации (2.1) для Cu и (2.2) для Fe и V) в Fe, V, Cu

Температурная зависимость f^{tr} в Cu в температурном диапазоне 300—700 К хорошо описывается линейной зависимостью:

$$f^{tr}(T) = 4,02 \cdot 10^{-4} \cdot T + 0,0736. \quad (2.1)$$

Температурные зависимости f^{tr} для диффузии СМА в Fe и V удалось описать

с помощью выражения, предложенного в [26]:

$$f^{tr}(T) = f^{tr}(0) - b \left[1 + (T'/T)^m \right]^{-1}, \quad (2.2)$$

где b , T' и m — подгоночные параметры, $f^{tr}(0)$ — значение при асимптотическом стремлении температуры к абсолютному нулю. Выражение (2.2) хорошо аппроксимирует полученные МД-методом в настоящей работе температурные зависимости f^{tr} для димежузлий в Fe и V при значениях параметров $b = -0,082$, $T' = 150$ К, $m = 2,39$, $f^{tr}(0) = 0$ для Fe и $b = 0,109$, $T' = 367$ К, $m = 9,11$, $f^{tr}(0) = 0,260$ для V.

С ростом температуры точность аналитического описания значений f^{tr} существенно снижается, при этом величина f^{tr} во всех трех рассматриваемых металлах отклоняется «вверх» от предсказываемых аналитическими функциями (2.1) и (2.2) значений. Данное явление объясняется тем, что с ростом температуры движение каждого из СМА, образующих 2-СМА, становится все более независимым друг от друга, а величина f^{tr} стремится к значению f^{tr} для одиночных СМА [117]. При дальнейшем повышении температуры это приводит к быстрой диссоциации 2-СМА.

Значение f^{tr} в V и Cu во всем рассматриваемом температурном диапазоне выше, чем для Fe, что говорит о том, что диффузия 2-СМА в указанных металлах является существенно более «трехмерной». При этом можно видеть, что с ростом T до 600 К в V усиливается роль одномерного механизма диффузии, в то время как в Cu видна обратная картина — диффузия с ростом T в Cu становится все более трехмерной. В Fe увеличение степени трехмерности диффузии с ростом T выражено слабо, и она является приблизительно одинаково одномерной во всем рассматриваемом температурном диапазоне.

На рис. 2.2 *a* приведён пример зависимости координат одного из СМА, составляющего димежузлие, от числа скачков в V при 200 К (зависимости в V при всех температурах и в Fe при $T > 400$ К имеют качественно схожий вид). В областях графика между пунктирными линиями 1 и 2, 3 и 4, 5 и 6, 7 и 8 составляющие димежузлие СМА совершают в общей сложности около 80% скачков от всех

скачков данной траектории, однако димежузлие остаётся фактически неподвижным в указанных интервалах длительностью, составляющей около 5% от длительности всей траектории. Анализ координат атомов, составляющих 2-СМА, показал, что такая остановка 2-СМА является следствием образования конфигурации I_{Δ}^2 . Три атома, находящиеся в одной ЯВЗ, располагаются близко к её границам и, вследствие этого, в процессе тепловых колебаний вокруг своих локальных положений равновесия часто пересекают границы ЯВЗ, что алгоритм трактует как скачки СМА, хотя фактически это фиктивные скачки, не отвечающие реальному перемещению 2-СМА. Поэтому для определения доли времени χ_0 , которое 2-СМА проводило в конфигурации I_{Δ}^2 , от общего времени моделирования, был реализован следующий подход. Для диффузионной траектории определяются моменты времени, при которых возникает конфигурация I_{Δ}^2 , и соответствующие им положения 2-СМА. Затем последовательно рассчитываются расстояния d между каждой парой соседних по времени положений. Если $d = 0$, это означает, что диффузии на этом отрезке времени нет, а скачки — фиктивные, т.е. конфигурация I_{Δ}^2 существует в течение всего рассматриваемого отрезка времени. Соответственно доля χ_0 определяется как отношение суммарного времени существования конфигурации I_{Δ}^2 за время моделирования ко времени моделирования. На рис. 2.2 б приведены рассчитанные таким образом температурные зависимости величины χ_0 для Fe и V.

Для температурных зависимостей χ_0 (см. рис. 2.2 б) построена кинетическая модель и на её основе определены аналитические аппроксимации рассчитанных результатов. В модели предполагалось, что стабильная конфигурация I_{110}^2 имеет возможности перехода в метастабильную конфигурацию I_{Δ}^2 , а также в любые другие метастабильные конфигурации. Для упрощения модели все эти метастабильные конфигурации за исключением I_{Δ}^2 были заменены одной эффективной метастабильной конфигурацией I_M^2 . Параметрам, относящимся к описанию конфигураций I_{110}^2 , I_{Δ}^2 , I_M^2 здесь и далее будут присваиваться индексы «3» (3D-диффузия), «t», «m» соответственно. Из метастабильных конфигураций

разрешены только обратные переходы в стабильную конфигурацию. Тогда доля времени χ_0 может быть определена из соотношения:

$$\chi_0 = \frac{\frac{v_{3t}^0}{v_{t3}^0} \exp(-\beta \Delta E_{3t})}{1 + \frac{v_{3t}^0}{v_{t3}^0} \exp(-\beta \Delta E_{3t}) + \frac{v_{3m}^0}{v_{m3}^0} \exp(-\beta \Delta E_{3m})}, \quad (2.3)$$

где v_{ij}^0 — предэкспоненциальные множители для соответствующих переходов из одной конфигурации в другую; $\Delta E_{ij} = E_{ij} - E_{ji}$, E_{ij} — высота энергетического барьера для перехода из конфигурации i в конфигурацию j ($i, j = 3, t, m$). Параметры аналитической аппроксимации (2.3), полученные подгонкой к МД-данным для Fe и V, приведены в табл. 2.5.

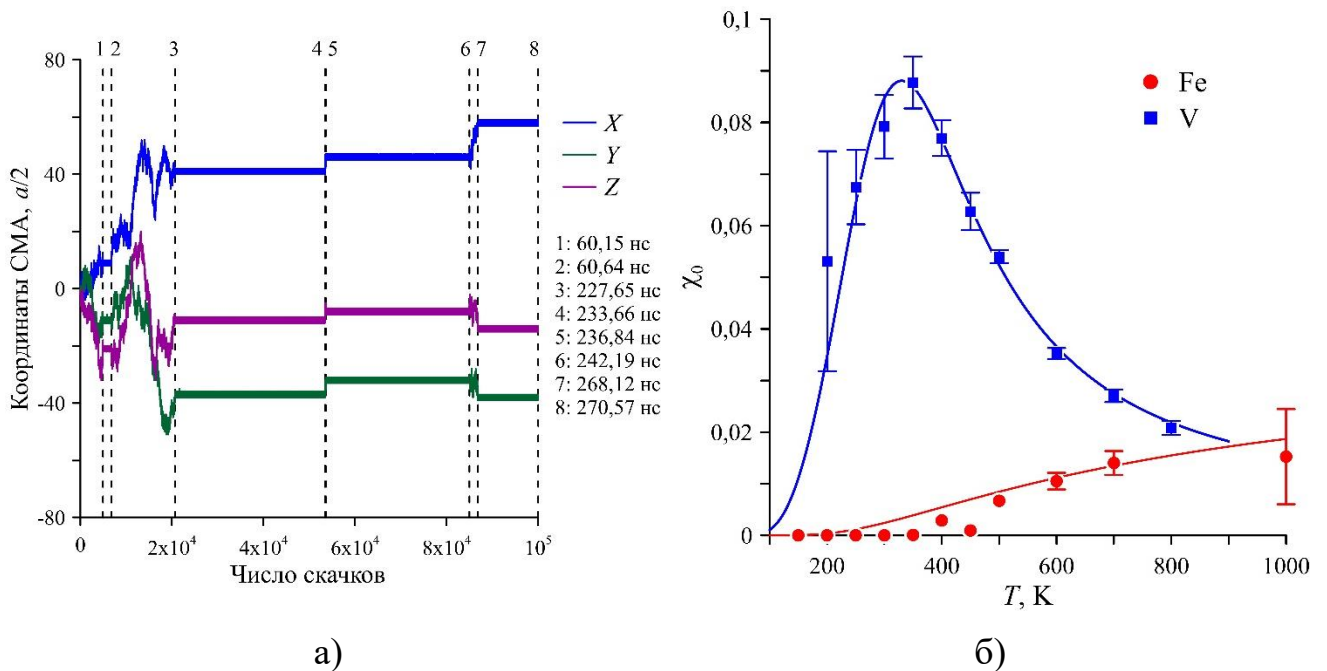


Рисунок 2.2. Свойства конфигурации I_{Δ}^2 : пример зависимости координат X, Y, Z одного из двух СМА, составляющих 2-СМА, от числа скачков, совершенных СМА, для V при 200 К (пунктирные линии 1—7 отмечают возникновения и исчезновения конфигурации I_{Δ}^2 , линия 8 отмечает окончание расчета) (а); температурные зависимости средней доли времени χ_0 для Fe и V (сплошные линии — аналитические приближения (2.3), точки — МД-данные) (б)

Аппроксимации на основании разработанной кинетической модели с хорошей точностью описывают полученные результаты (см. рис. 2.2 б). Несмотря на простоту используемой модели, значения ΔE_{3t} , представленные в табл. 2.5, хорошо согласуются со значениями, рассчитанными напрямую по МС-данным табл. 2.3 (0,124 эВ и 0,058 эВ для Fe и V соответственно).

Таблица 2.5. Параметры аппроксимации (2.3) температурных зависимостей χ_0 для Fe и V.

Материал	v_{3t}^0/v_{t3}^0	v_{3m}^0/v_{m3}^0	ΔE_{3t} , эВ	ΔE_{3m} , эВ
Fe	0,341	7,75	0,114	0,062
V	1,216	306	0,061	0,183

Из анализа представленных на рис. 2.2 данных можно сделать вывод, что образование конфигураций I_{Δ}^2 оказывает влияние на диффузию димежузлий в Fe и V, так как димежузлие проводит в этой неподвижной конфигурации заметную долю времени (до 9% в V при 350 К и до 2% в Fe при 1000 К).

2.6 Кинетические модели диффузии димежузлий в Fe и V

Исходная предпосылка построения кинетических моделей диффузии 2-СМА в Fe и V заключается в том, чтобы просуммировать вклады двух механизмов диффузии с весом времени, которое 2-СМА проводило в конфигурации, обеспечивающей фиксированный механизм:

$$D = \frac{\lambda^2}{6} \left(f_1^d v_1 \frac{t_1}{t} + f_3^d v_3 \frac{t_3}{t} \right), \quad (2.4)$$

где λ — длина элементарного скачка; f_3^d — корреляционный множитель для скачков I_{110}^2 конфигурации (3D-диффузия); f_1^d — корреляционный множитель для скачков I_{111}^2 конфигурации (1D-диффузия); v_1 и v_3 — частоты скачков соответствующих конфигураций; $t = t_0 + t_1 + t_3$ — общее время диффузии; t_0 , t_1 и t_3 — время, проведённое димежузлием в конфигурациях I_{Δ}^2 , I_{111}^2 и I_{110}^2

соответственно. Отношения t_1/t и t_3/t могут быть выражены через величину $\chi_0 = t_0/t$ и величины v_{31} и v_{13} — частоты реориентаций конфигурации I_{110}^2 в I_{111}^2 и обратно соответственно:

$$\begin{aligned} \frac{t_1}{t} &= \frac{v_{31}}{v_{13} + v_{31}}(1 - \chi_0), \\ \frac{t_3}{t} &= \frac{v_{13}}{v_{13} + v_{31}}(1 - \chi_0). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Подстановка (2.5) в (2.4) даёт для коэффициента диффузии D выражение

$$D = \frac{\lambda^2}{6} \frac{f_1^d v_1 v_{31} + f_3^d v_3 v_{13}}{v_{13} + v_{31}} (1 - \chi_0). \quad (2.6)$$

В случае, когда энергетические барьеры для миграции (E_1 и E_3 — энергии миграции по 1D- и 3D-механизмам соответственно) и реориентации (E_{31} и E_{13} — энергии реориентации конфигурации I_{110}^2 в I_{111}^2 и обратно соответственно) в разы выше средней энергии тепловых флуктуаций, температурные зависимости частот этих событий подчиняются аррениусовской кинетике, в противном случае частоты имеют линейную зависимость от T [112, 121]. В Fe по МС-данным [97] и настоящей работы $E_1 = 0,056$ эВ, $E_3 = 0,172$ эВ, $E_{31} = 0,26$ эВ, $E_{13} = 0,158$ эВ. В V по МС-данным настоящей работы $E_1 = 0,057$ эВ, $E_{31} = 0,281$ эВ, $E_{13} = 0,010$ эВ. Значение E_3 для V МС-методом не определялось, но предполагается, что $E_3 > 0,1$ эВ.

Таким образом, для частот миграций и реориентаций в Fe можно применить соотношения

$$\begin{aligned} v_1 &= A_1 \beta^{-1} + B_1, \\ v_3 &= v_3^0 \exp(-\beta E_3), \\ v_{13} &= v_{13}^0 \exp(-\beta E_{13}), \\ v_{31} &= v_{31}^0 \exp(-\beta E_{31}), \end{aligned} \quad (2.7)$$

где v_3^0 , v_{13}^0 , v_{31}^0 , A_1 , B_1 — параметры. Анализ траекторий димежузлий в Fe показал, что вклад 3D-механизма диффузии при всех температурах незначителен: в основном происходит 1D-диффузия вдоль одного из плотноупакованного направления $\langle 111 \rangle$, чередуемая реориентациями димежузлия, приводящими к

смене одного плотноупакованного направления на другое. Поэтому вторым слагаемым в числителе выражения (2.6) можно пренебречь. С учётом этого, а также подставляя (2.7) в (2.6), можно получить формулу, удобную для подгонки МД-результатов:

$$D_{Fe} = A \frac{1 + B\beta^{-1}}{1 + C \exp(\beta\Delta E)} (1 - \chi_0), \quad (2.8)$$

где $A = \frac{\lambda^2}{6} B_1 f_1^d$; $B = \frac{A_1}{B_1}$; $C = \frac{v_{13}^0}{v_{31}^0}$; $\Delta E = E_{31} - E_{13}$; χ_0 — определяется выражением

(2.3) с параметрами из табл. 2.5.

Для V применим набор соотношений

$$\begin{aligned} v_1 &= A_1 \beta^{-1} + B_1, \\ v_3 &= v_3^0 \exp(-\beta E_3), \\ v_{13} &= A_{13} \beta^{-1} + B_{13}, \\ v_{31} &= v_{31}^0 \exp(-\beta E_{31}) \end{aligned} \quad (2.9)$$

где v_3^0 , v_{31}^0 , A_1 , B_1 , A_{13} , B_{13} — параметры. Подстановка (2.9) в (2.6) дала формулу, которая была использована для подгонки МД-данных в V. Анализ показал, что наилучшее описание МД-данных получается, когда параметры B_1 и B_{13} равны нулю. Поэтому получившаяся формула может упрощена и записана как:

$$D_V = \frac{G \exp(-\beta E_3)}{1 + F \beta \exp(-\beta E_{31})} [1 + K \exp(-\beta(E_{31} - E_3))] (1 - \chi_0), \quad (2.10)$$

где $G = \frac{\lambda^2}{6} f_3^d v_3^0$; $F = \frac{v_{31}^0}{A_{13}}$; $K = \frac{f_1^d v_{31}^0 A_1}{f_3^d v_3^0 A_{13}}$; χ_0 — определяется выражением (2.3) с

параметрами из табл. 2.5. Подгонка к МД-данным дала значения параметров аналитических приближений (2.8) и (2.10) для D в Fe и V: $A = 1,75 \cdot 10^{-4}$ см²/с; $B = 20,3$ эВ⁻¹; $C = 0,0126$; $\Delta E = 0,103$ эВ; $G = 1,84 \cdot 10^{-3}$ см²/с; $E_3 = 0,142$ эВ; $F = 108$ эВ; $E_{31} = 0,325$ эВ; $K = 202$.

На рис. 2.1 построены аналитические аппроксимации (2.8) и (2.10) вместе с расчётными МД-данными для Fe и V. Видно, что удалось получить высокую

точность описания расчётных данных как для Fe, так и для V (коэффициент корреляции R в обоих случаях не менее 0,9999).

Для Fe по МС-данным $\Delta E = 0,102$ эВ, что хорошо согласуется с подгоночным значением. Для V рассчитанное МС-методом значение E_{31} равно 0,281 эВ, что также согласуется со значением, полученным подгонкой к МД-данным. Таким образом, статические энергетические барьеры согласуются со значениями, полученными из анализа МД-данных, проведённого с использованием предложенной кинетической модели.

В области криогенных температур аррениусовская кинетика применима для частот всех типов событий. Анализ соотношения (2.6) показывает, что с уменьшением T 1D-механизм диффузии начинает превалировать над 3D-механизмом в случае, если $E_1 + \Delta E < E_3$. При этом с понижением температуры длина одномерных сегментов траектории без смены направления диффузии будет расти, если $E_{13} > E_1$. Такой случай реализуется для Fe: $0,056 \text{ эВ} + 0,102 \text{ эВ} < 0,172 \text{ эВ}$ и $0,158 \text{ эВ} > 0,056 \text{ эВ}$. Одновременное выполнение этих двух неравенств приводит при $T \rightarrow 0$ к асимптотическому стремлению к диффузии димежузлия исключительно по 1D-механизму и, соответственно, к стремлению f^{tr} к нулю (отчетливо видное на рис. 2.1 б) даже несмотря на то, что конфигурация I_{111}^2 является метастабильной. Энергия активации диффузии при этом стремится к величине $E_1 + \Delta E$, равной 0,158 эВ. Если же $E_1 + \Delta E > E_3$, то при $T \rightarrow 0$ диффузия 2-СМА носит всё более трёхмерный характер. Этот случай реализуется для V: $0,057 \text{ эВ} + 0,271 \text{ эВ} > 0,142 \text{ эВ}$. При чистой 3D-диффузии $\langle 110 \rangle$ гантелей по механизму Джонсона $f^{\text{tr}} = 0,4151 \pm 0,0001$ (значение получено авторами методом атомистического кинетического Монте-Карло — моделировалось 30 диффузионных траекторий $\langle 110 \rangle$ гантели, совершающей случайные блуждания, каждая траектория содержала 10^6 скачков дефекта). На рис. 2.1 б видно, что значения f^{tr} растут с понижением T , приближаясь к этой величине. Энергия активации диффузии стремится к величине E_3 , равной 0,142 эВ. Несмотря на похожие энергии активации диффузии в Fe и V при низких

температурах (0,158 эВ и 0,142 эВ соответственно), механизмы диффузии 2-СМА совершенно разные.

Расчёты коэффициентов диффузии 2-СМА D для Fe в [113, 115] с использованием потенциала межатомного взаимодействия [122] дали значения на порядок меньшие по сравнению с результатами настоящей работы. Подобное отличие объясняется тем, что в [113, 115] основной вклад в диффузию 2-СМА вносит 3D-механизм в отличие от настоящей работы, где основной вклад в диффузию 2-СМА вносит 1D-механизм. Так, значения f^{tr} по данным [115] (в расчёте на один СМА, как принято в настоящей работе) варьируются от 0,33 до 0,25 с ростом температуры от 350 до 800 К, в то время как в данной работе f^{tr} варьируются от 0,05 до 0,08 с ростом температуры от 150 К до 700 К (см. рис. 2.1 б). Различие в соотношении вкладов 1D- и 3D-механизмов диффузии происходит из того, что значения разности энергий образования $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ гантелей $\Delta E = E^F_{\langle 111 \rangle} - E^F_{\langle 110 \rangle}$ сильно разнятся для потенциалов [122] и [97]: 0,47 эВ и 0,24 эВ соответственно.

Высокое значение ΔE для потенциала [122] обусловлено тем, что его параметры при разработке определялись в том числе подгонкой к характеристикам СМА, рассчитанными в рамках ТФП, из которых следует, что $\Delta E = 0,7$ эВ [49—51]. Для V величина ΔE по ТФП-данным имеет отрицательное значение около $-0,3$ эВ [31, 45, 64], в то время как для потенциала, использованного в настоящей работе, $\Delta E = 0,42$ эВ. Сравнение экспериментальных значений фактора упругой анизотропии A с ТФП-значениями показывает их значительное рассогласование. Так, в Fe при температуре около 0 К A имеет значение 1,35—1,65 по ТФП-данным [36], в то время как эксперимент даёт значение 2,32 [43]. Для V несоответствие ещё заметней: 0,35—0,37 по ТФП-данным [45] против экспериментального значения 0,81 [44]. Несогласование ТФП-значений с экспериментальными данными в отношении объёмных свойств ОЦК-решетки Fe и V вызывает сомнение в надёжности описания свойств СТД ТФП-методами, особенно в отношении разности энергий различных конфигураций таких анизотропных дефектов с

дальнодействующим упругим полем как СМА.

2.7 Диффузионные характеристики кластеров из 3—5 СМА в Fe

На рис. 2.3 приведены рассчитанные температурные зависимости значений коэффициента диффузии D и значений корреляционного множителя f^{tr} СМА и кластеров СМА размером от 2 до 5 в Fe. В высокотемпературной области значения коэффициентов диффузии рассмотренных дефектов различаются слабо: при 1000 К максимальное различие наблюдается между 2- и 5-СМА и составляет около 30 %. В низкотемпературной области различие становится значительным: например, при 300 К в Fe коэффициенты диффузии СМА и 3-СМА различаются в 36 раз. При температурах ниже 350 К коэффициент диффузии 3-СМА кластеров в Fe выше, чем у всех остальных рассмотренных дефектов.

Температурные зависимости D не являются линейными в аррениусовских координатах (рис. 2.3 *a, в*), поэтому хорошее описание МД-данных с помощью аррениусовских зависимостей возможно получить лишь для частных диапазонов температур. Подгоночные параметры таких зависимостей (предэкспоненциальный множитель D_0 и энергия активации реориентаций E^{AD}) с указанием диапазонов температур данных, по которым они были построены, сведены в табл. 2.6.

В Fe, для 3- и 5-СМА при $T \leq 400$ К $E^{AD} \leq 0,01$ эВ и, как следствие, D слабо зависит от T . Низкое значение E^{AD} для 3-СМА (0,004 эВ) подтверждается прямым молекулярно-статическим расчетом [97] величины энергетического барьера, значение которого оказалось менее 10^{-4} эВ. При $T \geq 700$ К значения E^{AD} рассмотренных кластеров в 2—4 раза меньше, чем для одиночного СМА.

Таблица 2.6. Параметры аррениусовских аппроксимаций температурных зависимостей D для одиночных СМА ($q = 1$) и кластеров СМА ($q = 2 \dots 5$) в Fe.

q	Низкотемпературная аппроксимация			Высокотемпературная аппроксимация		
	$D_0, \text{см}^2/\text{с}$	$E^{\text{AD}}, \text{эВ}$	Диапазон T	$D_0, \text{см}^2/\text{с}$	$E^{\text{AD}}, \text{эВ}$	Диапазон T
1	$2,59 \cdot 10^{-2}$	0,219	250—350 К	$1,25 \cdot 10^{-3}$	0,101	600—1200 К
2	$1,33 \cdot 10^{-3}$	0,056	250—350 К	$6,43 \cdot 10^{-4}$	0,034	400—800 К
3	$2,25 \cdot 10^{-4}$	0,004	300—400 К	$5,38 \cdot 10^{-4}$	0,036	700—1200 К
4	$1,03 \cdot 10^{-3}$	0,086	300—700 К	$5,72 \cdot 10^{-4}$	0,051	700—1200 К
5	$2,82 \cdot 10^{-4}$	0,013	300—500 К	$3,70 \cdot 10^{-4}$	0,025	600—1200 К

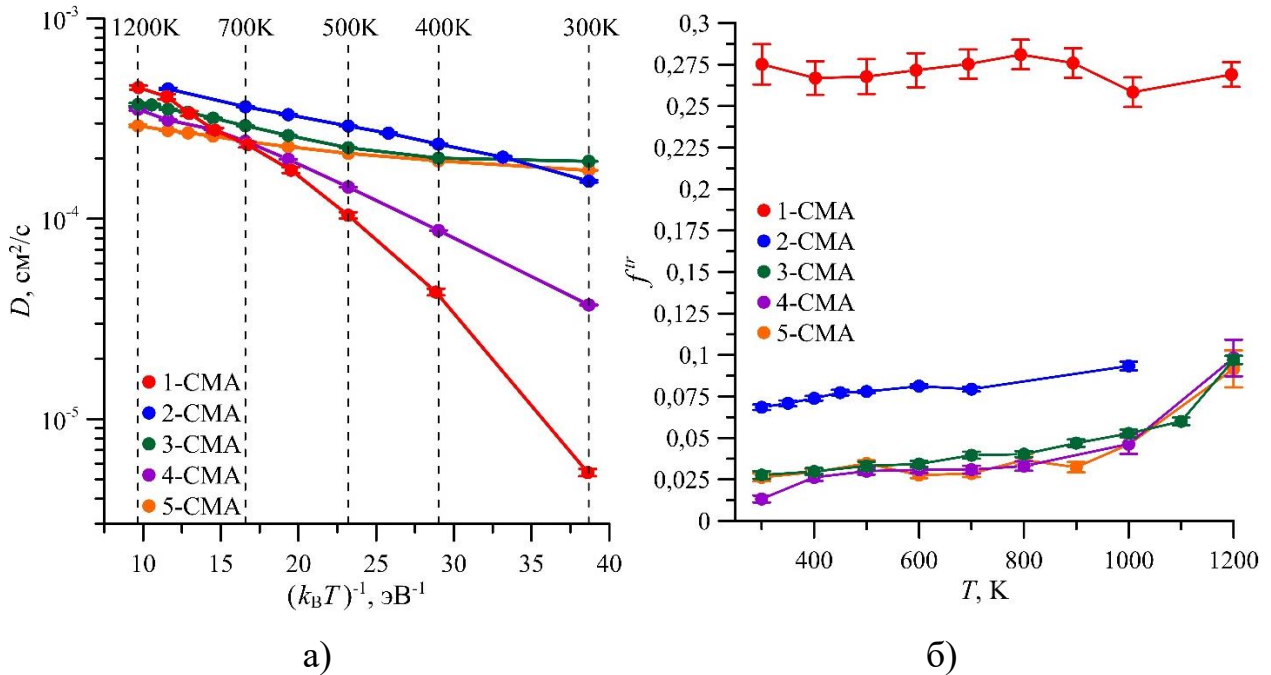


Рисунок 2.3. Температурные зависимости коэффициентов диффузии одиночного СМА и кластеров СМА размером от 2 до 5 для Fe (а) и корреляционный множитель f^{tr} при диффузии одиночных СМА и кластеров СМА для Fe (б)

Полученные в настоящей работе значения для величины E^{AD} в Fe заметно отличаются от значений, полученных в [109], где E^{AD} для 2-, 3- и 5-СМА при всех рассмотренных температурах совпадали в пределах погрешности и составляли

$0,024 \pm 0,004$ эВ. Такое расхождение обусловлено тем, что разница между энергиями образования $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ гантелей ΔE при использовании потенциала [123], используемого в [109], отрицательна ($\Delta E = -0,14$ эВ) в отличие от случая использования потенциала R01 ($\Delta E = 0,24$ эВ). Разность энергий образования кластеров одинакового размера q , состоящих из $\langle 111 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ гантелей, ΔE_q , быстро уменьшается с увеличением кластеров, т.к. при росте кластера, состоящего из $\langle 110 \rangle$ гантелей формируется дефект упаковки, обладающий высокой энергией в ОЦК-кристаллах. Поэтому если ΔE положительна, то для кластеров небольшого размера возможны положительные значения ΔE_q , и для таких кластеров возможна 3D диффузия. В противном случае для кластеров всех размеров будет преимущественно наблюдаться 1D диффузия, и как следствие, схожая энергия активации диффузии, как в [109]. Для потенциала R01, используемого в настоящей работе, $\Delta E_q > 0$ при $q = 2$, и $\Delta E_q < 0$ при $q \geq 3$.

Из рис. 2.3 б, г видно, что с увеличением размера кластера q от 1 до 3 происходит значительное увеличение степени одномерности диффузии: f^{tr} уменьшается от $\sim 0,28$ до $\sim 0,03$ — $0,08$ в зависимости от температуры. При $q \geq 3$ значения f^{tr} практически перестают зависеть от q . Значения f^{tr} не обращаются в ноль даже при практически полностью 1D диффузии кластера, как это имеет место для 5-СМА при 300 К. Это является следствием того, что атомы, составляющие расположенные в соседних плотноупакованных направлениях СМА, формирующих кластер, время от времени меняются местами между собой, покидая «свои» плотноупакованные направления. Таким образом, даже если кластер все время движется одномерно, ему не удастся полностью «замести следы» своего движения, что приводит к ненулевому D^{tr} , и к ненулевому f^{tr} . Фактически, для кластеров с $q \geq 3$ отличие f^{tr} от нуля почти целиком определяется этими обменами местами атомов внутри кластера и не характеризуют механизм диффузии кластера как целого. В связи с этим величина f^{tr} перестает быть информативной в отношении идентификации механизма диффузии кластера, и становится необходимым использование иных характеристик.

2.8 Реориентации кластеров СМА в процессе диффузии в Fe

На рис. 2.4 представлены температурные зависимости частоты реориентаций ν^R и средней длины диффузионного пробега дефекта до смены направления диффузии l_{ch} для СМА и кластеров СМА с $q = 2 \dots 5$ в Fe. Значения погрешности ν^R при различных температурах варьируются от 1% до 50%. Наименее точно величины ν^R определены при температурах ниже 500 К, поскольку за всё время моделирования не удалось набрать достаточную статистику по реориентациям и их общее количество обычно было ~ 10 на все 100 диффузионных траекторий. Если погрешности ν^R и l_{ch} не указаны, значит они меньше размера точек на графиках. Как ν^R , так и l_{ch} имеют значительную зависимость от q во всем диапазоне рассмотренных значений q , поэтому по сравнению с f^{tr} они более удобны для определения соотношения 1D/3D диффузии для кластеров СМА в отличие от f^{tr} .

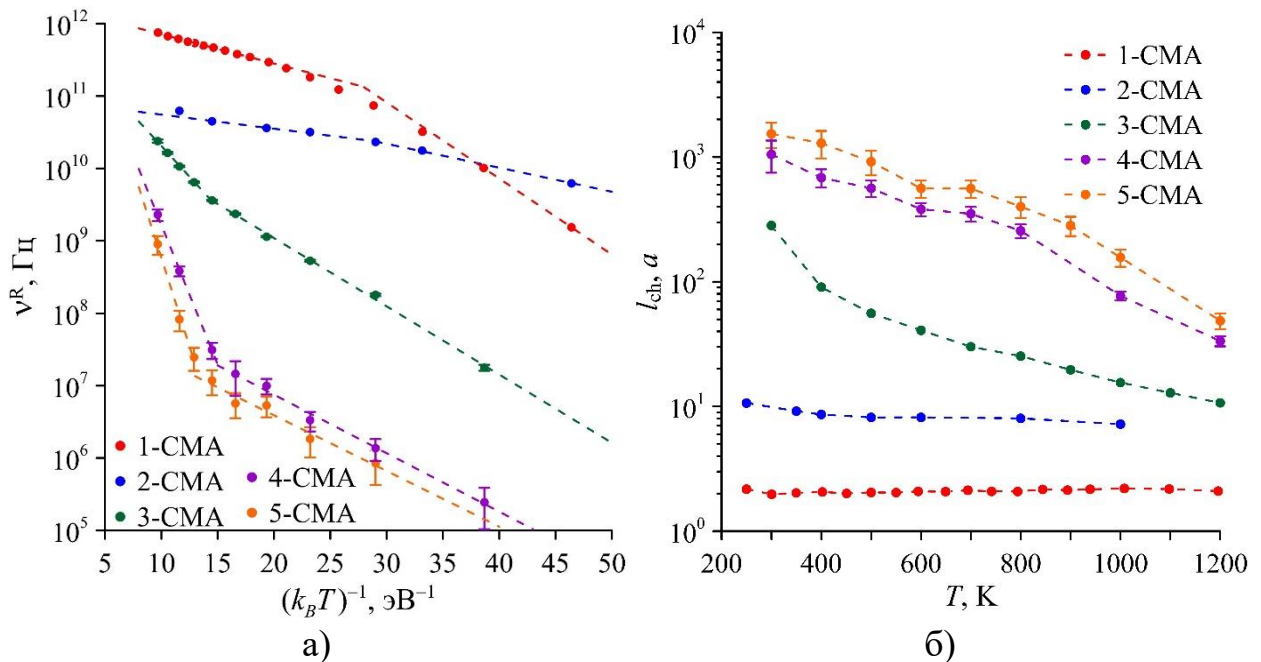


Рисунок 2.4. Температурные зависимости частоты реориентации одиночных СМА и 2-, 3-, 4-, 5- СМА (а) и величины l_{ch} для тех же типов дефектов (б)

Температурные зависимости ν^R не являются линейными в аррениусовских координатах (рис. 2.4, а), поэтому хорошее описание МД-данных с помощью аррениусовских зависимостей возможно получить лишь для частных диапазонов

температур. Подгоночные параметры таких зависимостей (предэкспоненциальный множитель ν_0 и энергия активации реориентаций E^R) с указанием диапазонов температур данных, по которым они были построены, сведены в табл. 2.7.

В Fe, значения E^R для кластеров СМА с $q \geq 3$ при низких температурах близки между собой и равны $\sim 0,2$ эВ. При высоких температурах E^R становится в ~ 2 — 6 раз выше (чем больше q , тем сильнее различие), что свидетельствует о доминировании разных механизмов реориентации кластеров при низких и высоких температурах.

Таблица 2.7. Параметры аррениусовских аппроксимаций температурных зависимостей ν^R для одиночных СМА ($q = 1$) и кластеров СМА ($q = 2 \dots 5$) в Fe.

q	Низкотемпературная аппроксимация			Высокотемпературная аппроксимация		
	ν_0 , Гц	E^R , эВ	Диапазон T	ν_0 , Гц	E^R , эВ	Диапазон T
1	$1,16 \cdot 10^{14}$	0,242	250—300 К	$1,81 \cdot 10^{12}$	0,093	600—1200 К
2	$2,16 \cdot 10^{11}$	0,076	250—400 К	$8,67 \cdot 10^{10}$	0,045	400—800 К
3	$8,38 \cdot 10^{10}$	0,217	300—800 К	$1,01 \cdot 10^{12}$	0,390	800—1200 К
4	$3,11 \cdot 10^8$	0,186	300—700 К	$1,20 \cdot 10^{13}$	0,888	800—1200 К
5	$1,35 \cdot 10^8$	0,177	300—800 К	$4,50 \cdot 10^{13}$	1,125	900—1200 К

Величина l_{ch} для одиночных СМА в Fe с изменением T в диапазоне 250—1200 К практически не изменяется и равна в среднем $2,1a$, что согласуется с отсутствием зависимости f^{tr} от T (рис. 2.4 б). Для 2-СМА, l_{ch} с ростом T от 250 К до 1000 К уменьшается от $10,6a$ до $7,2a$ соответственно, что также согласуется с температурной зависимостью f^{tr} .

Для кластеров с $q \geq 3$, l_{ch} с ростом T от 300 К до 1200 К уменьшается в десятки раз: от $283a$ до $10,7a$, от $1051a$ до $33,5a$, от $1535a$ до $48,7a$ для кластеров с $q = 3, 4, 5$ соответственно.

На рис. 2.5 приведены примеры диффузионных траекторий с величинами l_{ch} последовательно увеличивающимися на порядок от $l_{ch} \approx 1a$ (рис. 2.5 а) до $l_{ch} \approx 1000a$ (рис. 2.5 г).

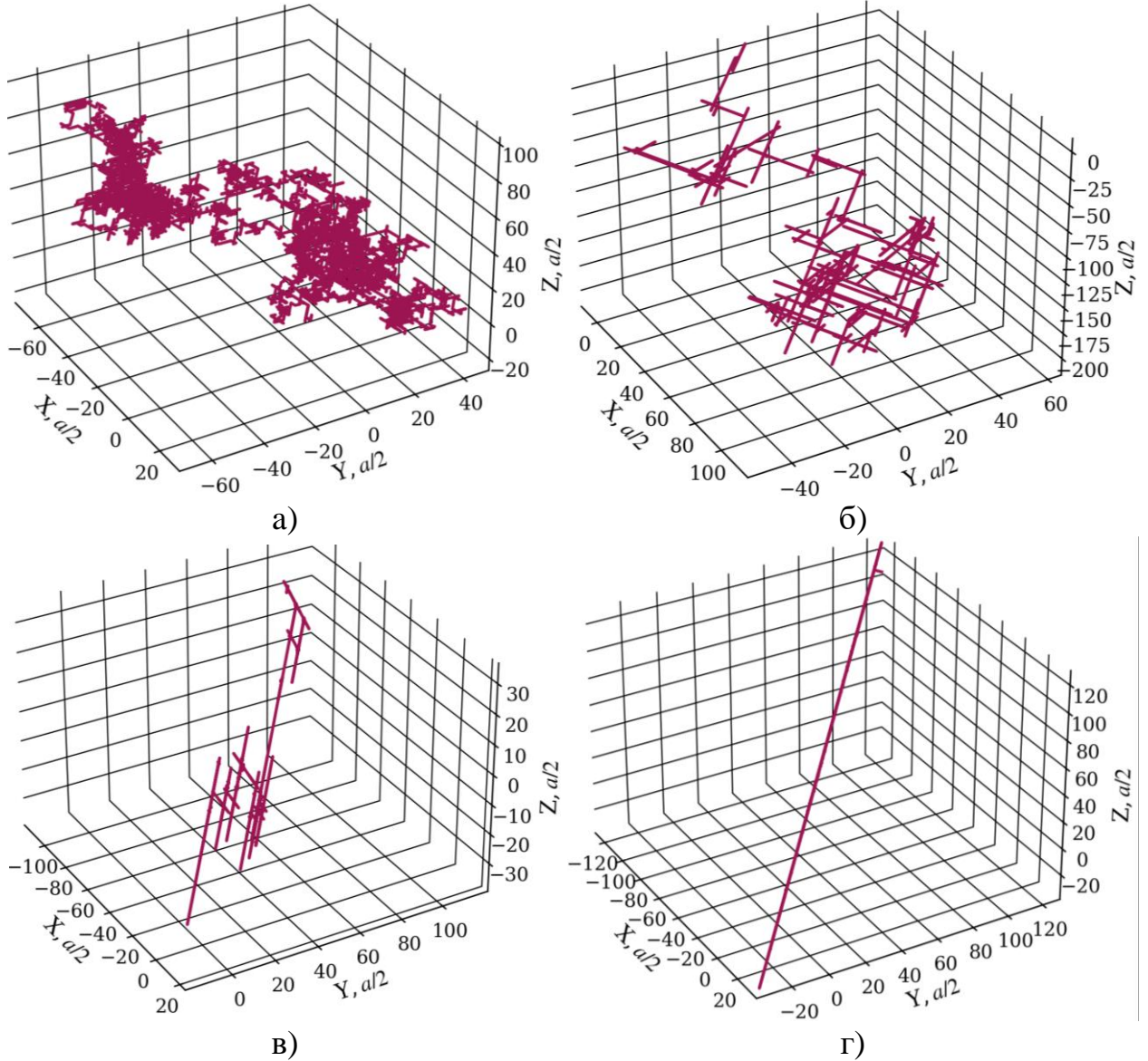


Рисунок 2.5. Диффузионные траектории, соответствующие различным значениям l_{ch} . (а) $l_{ch} \approx 1a$, СМА, $T = 250$ К; (б) $l_{ch} \approx 10a$, 2- СМА, $T = 350$ К; (в) $l_{ch} \approx 100a$, 3-СМА, $T = 400$ К; (г) $l_{ch} \approx 1000a$, 4- СМА, $T = 300$ К

Силы стока различных элементов микроструктуры для радиационных дефектов чувствительны к механизму диффузии дефектов и могут различаться на несколько порядков величины для 3D и 1D механизмов диффузии [15]. Например,

сила стока k^2 сферических поглотителей радиусом R и концентрацией N (число поглотителей в единице объема) равна для случая 3D диффузии [124, 125]:

$$k_{3D}^2 \approx 4\pi RN, \quad (2.11)$$

а для случая 1D диффузии [126]:

$$k_{1D}^2 = 6(\pi R^2 N)^2. \quad (2.12)$$

Например, для $R = 10a$ и $N = (200a)^{-3}$, $k_{3D}^2/k_{1D}^2 \approx 1700$.

Рассчитать силу стока для смешанного 1D/3D механизма диффузии дефекта можно с помощью КМК-метода [15, 17]. Такие расчеты для сферических поглотителей с $R = 10a$ и $N = (200a)^{-3}$ проделаны нами для получения зависимости силы стока k^2 от l_{ch} , пользуясь похожей на предложенную в [17, 125] методикой (в настоящей работе методика отличалась тем, что смена направлений миграции происходила случайно в соответствии с заданной вероятностью такого события, а не через строго фиксированное число скачков дефектов, и тем, что поглотители располагались не случайным образом в расчетной ячейке, а образовывали ромбическую решетку с параметрами $125a$, $256a$, $250a$). На рис. 2.6 приведена полученная зависимость, а также сравнение с МД-данными для l_{ch} в случае кластеров различных размеров в Fe.

По определению величина k^{-1} является диффузионной длиной дефекта от его рождения до гибели на стоке. Обозначим диффузионную длину для случая полностью 3D и 1D диффузии дефектов как k_{3D}^{-1} и k_{1D}^{-1} соответственно. Для рассматриваемой пространственной конфигурации поглотителей из (2.11) и (2.12) следует, что $k_{3D}^{-1} = 252a$ и $k_{1D}^{-1} = 10396a$. Из рис. 2.6 видно, что если $l_{ch} \ll k_{3D}^{-1}$, $k^2 \approx k_{3D}^{-1}$. Аналогично, если $l_{ch} \gg k_{1D}^{-1}$, $k^2 \approx k_{1D}^{-1}$. КМК-значения k^2 отклоняются от k_{3D}^{-1} не более, чем на 10% при $l_{ch} \leq 10a$. Такой критерий можно использовать для оценки необходимости учета степени одномерности диффузии кластеров СМА при построении моделей их диффузии КМК-методом. Например, для рассматриваемой конфигурации поглотителей на основе этого критерия можно сделать вывод, что влияние 1D механизма диффузии на силу стока необходимо учитывать для

кластеров СМА, размером $q \geq 3$. Для СМА и 2-СМА влияние 1D-механизма недостаточно, чтобы вызвать заметные изменения k^2 .

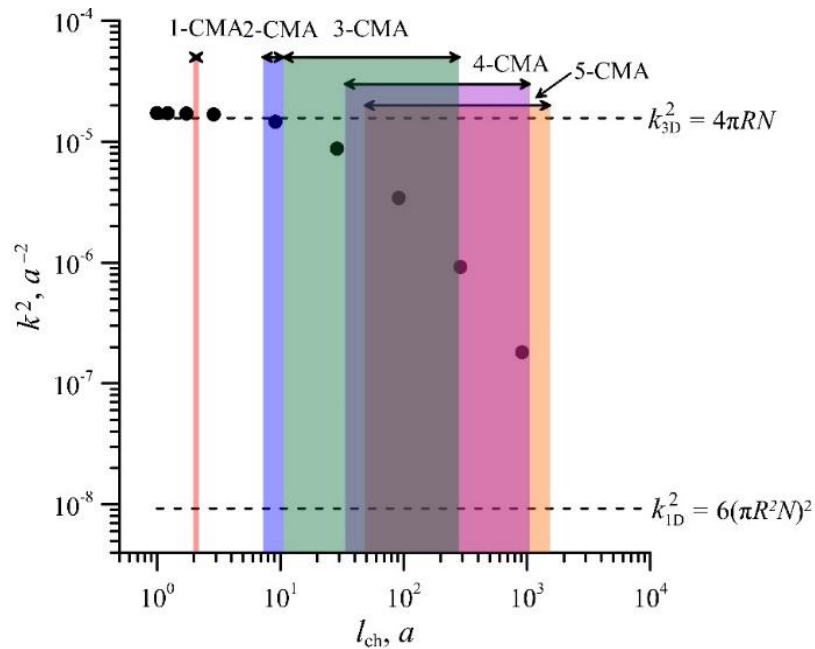


Рисунок 2.6. Зависимость силы стока сферических поглотителей радиусом $R = 10a$ и концентрацией $N = (200a)^{-3}$ от средней длины одномерных сегментов траекторий дефектов. Цветовыми полями указаны диапазоны значений l_{ch} для q -СМА ($q = 1 \dots 5$) в Fe. Пунктирными линиями указаны теоретические значения сил стока для 1D и 3D механизмов диффузии

Кластерные распределения СМА, создаваемых в каскадах атомных столкновений, в общем случае зависят от повреждающей энергии каскадов [106, 107]. Соответственно, нейтронное повреждающее облучение с разными энергетическими нейтронными спектрами будет создавать различные распределения СМА по кластерам разного размера. Т.к. силы стока различных элементов микроструктуры для радиационных дефектов чувствительны к механизму диффузии радиационных дефектов, то разность потоков радиационных дефектов разного знака (вакансии, СМА) на элементы микроструктуры будет определяться не только скоростью генерации радиационных дефектов (сна), но и кластерным распределением СМА, характерным для данного нейтронного спектра.

2.9 Термическая диссоциация 2-СМА

Результаты МД-расчётов температурных зависимостей среднего времени жизни димежузлий до диссоциации $\langle\tau\rangle$ для Fe и V и их аррениусовские аппроксимации показаны на рис. 2.7 а (энергия активации E^{AD} и предэкспоненциальный множитель τ_0 приведены в табл. 2.8). Можно видеть, что при всех рассматриваемых температурах время жизни димежузлия до диссоциации больше в Fe, чем в V, что согласуется с различием в значениях энергии диссоциации E^D для этих металлов (см. табл. 2.8).

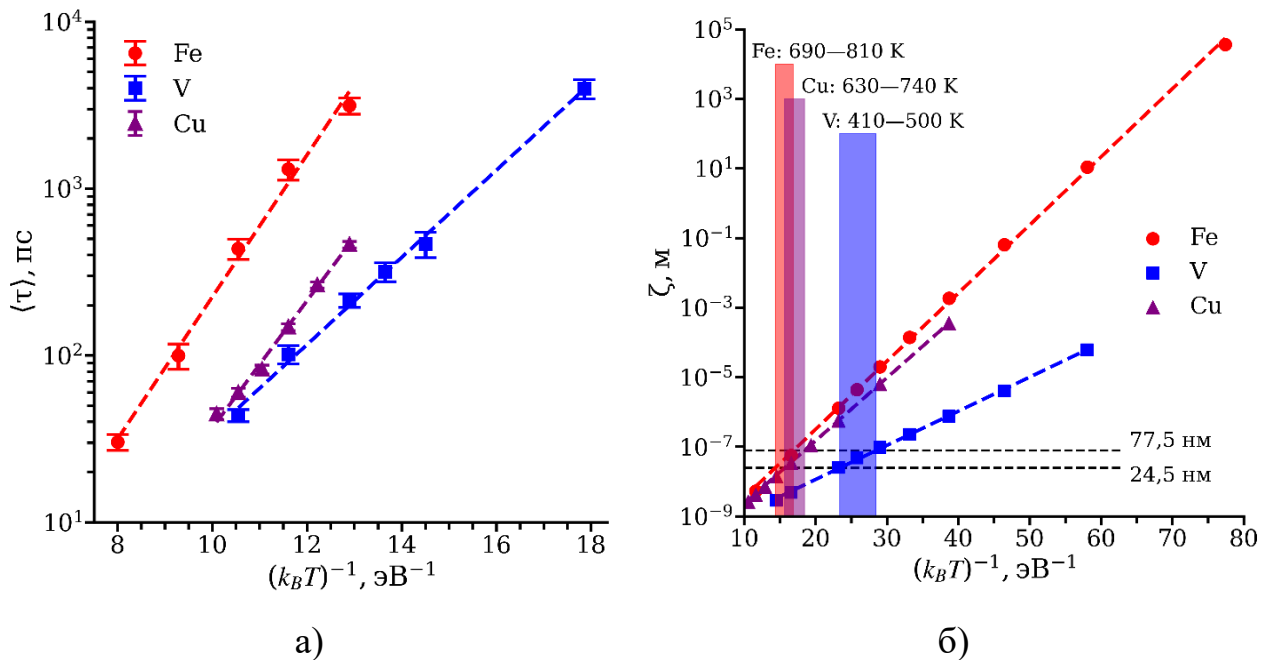


Рисунок 2.7. Температурные зависимости средних времен жизни 2-СМА до диссоциации $\langle\tau\rangle$ (а) и средних пробегов до диссоциации ζ (б). Пунктирные линии — аррениусовские аппроксимации данных. Цветовыми полями показаны температурные области, выше которых подавляющее большинство 2-СМА диссоциирует, не успев поглотиться на стоке (красный для Fe, синий для V, фиолетовый для Cu)

Таблица 2.8 Параметры аррениусовских аппроксимаций среднего времени жизни 2-СМА до диссоциации (τ_0 и E^{AD}) и энергий диссоциации E^D и E^{DA} , рассчитанных различными способами, для Fe и V.

Материал	τ_0 , пс	E^{AD} , эВ	$E^D = E^B + E^M$, эВ	$E^{DA} = E^B + E^{AM}$, эВ
Fe	0,0124	0,980	1,130	0,976
V	0,0845	0,602	0,679	0,647
Cu	0,00569	0,877	0,928	0,913

Рассчитанные зависимости хорошо описываются аррениусовскими аппроксимациями. Сравнение величин E^D и E^{AD} показывает, что E^D заметно выше E^{AD} , особенно в Fe, где различие составило 0,150 эВ. По всей видимости, такое рассогласование объясняется тем, что величина E^D рассчитывается МС-методом, т.е. для 0 К, а величина E^{AD} определялась для высоких температур, особенно для Fe. Для рассматриваемых температурных интервалов E^{AM} равны 0,092 эВ для Fe, 0,136 эВ для V и 0,0832 для Cu. Если использовать указанные значения E^{AM} вместо МС-значения энергии миграции E^M для расчёта энергии диссоциации (величина E^{DA} в таблице), то различия между энергией диссоциации E^{DA} и энергией активации диссоциации E^{AD} значительно снизятся и будут составлять всего несколько сотых электронвольта, что означает их согласие в пределах погрешности определения величины E^{AD} .

Поскольку возможность диссоциации 2-СМА влияет на их роль в процессах радиационной повреждаемости материалов, необходимо оценить температурную зависимость среднего пробега димежузлий до диссоциации $\zeta(T)$ в Fe и V. Величину ζ можно рассчитать с помощью соотношения Эйнштейна, зная коэффициенты диффузии димежузлия D (рис. 2.1 а), используя соотношение (1.6). Значение $\langle \tau \rangle$ для этого температурного диапазона рассчитано с помощью аррениусовской аппроксимации

$$\langle \tau \rangle = \tau_0 \exp(E^{AD}\beta) \quad (2.13)$$

Рассчитанные с использованием (1.6, 2.13) температурные зависимости ζ показаны на рис. 2.7 б. Зависимость $\zeta(T)$ в аррениусовских координатах имеет практически линейный вид. Аппроксимация расчётных значений выражением

$$\zeta = \zeta_0 \exp(W\beta) \quad (2.14)$$

дала значения для ζ_0 , равные 0,038 нм, 0,124 нм и 0,036 нм для Fe, V и Cu соответственно, и для W , равные 0,451 эВ, 0,226 эВ и 0,417 эВ для Fe, V, Cu соответственно.

На основании полученных зависимостей $\zeta(T)$ можно оценить, будут ли успевать 2-СМА добираться до стоков радиационных дефектов прежде, чем произойдёт их диссоциация. Для этого используем соотношение для силы стоков:

$$k^2 = \frac{6}{\langle R^2 \rangle} \quad (2.15)$$

где $\langle R^2 \rangle$ — средний квадрат пробега дефекта до поглощения на стоке. По результатам анализа [127] значения k^2 для конструкционных материалов, например зарубежных малоактивируемых ферритно-мартенситных сталей (Eurofer, JLF-1), включая дисперсно-упрочнённые оксидами, попадают в диапазон 10^{15} — 10^{16} м⁻². В малоактивируемой ферритно-мартенситной стали ЭК-181 плотность дислокаций (около 90% от общего числа дислокаций — винтовые) составляет $\sim 10^{15}$ м⁻² [128], что соответствует значению $k^2 \sim 10^{16}$ м⁻². Поэтому для дальнейших оценок величина k^2 взята равной 10^{15} — 10^{16} м⁻². Для выбранного диапазона значений k^2 соотношение (1.6) даёт для среднего пробега дефектов до поглощения на стоке диапазон значений 24,5—77,5 нм. На рис. 2.7 б горизонтальными линиями отмечены эти значения как нижние границы диапазона, в котором подавляющая часть образующихся под облучением димежузлий будет поглощаться на стоках, не успевая диссоциировать. Из полученных результатов следует, что диссоциация 2-СМА не успевает происходить до их поглощения на стоках при температуре ниже 690—810 К в Fe, 410—500 К в V, 630—740 К в Cu.

2.10 Выводы по главе 2

1. Исследованы энергетические, кристаллографические и диффузионные характеристики 2-СМА в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах методами молекулярной статики и молекулярной динамики с использованием потенциалов межатомного взаимодействия, ранее хорошо себя зарекомендовавших в отношении описания объемных свойств кристаллических решеток, свойств их точечных дефектов, каскадов атомных столкновений.

2. Методом молекулярной статики рассчитаны энергии образования и энергии связи различных конфигураций 2-СМА. Определены наиболее энергетически выгодные конфигурации 2-СМА. Показано, что 2-СМА, состоящие из двух $\langle 110 \rangle$ гантелей на расстоянии первых и третьих ближайших соседей в Fe и V соответственно, обладают наибольшими значениями энергии связи среди всех рассчитанных конфигураций: 0,884 эВ для Fe и 0,511 эВ для V. В Cu наибольшим значением энергии связи (0,884 эВ) обладает конфигурация 2-СМА, состоящая из двух $\langle 100 \rangle$ гантелей на расстоянии первых ближайших соседей.

Для Fe и V, обнаружены конфигурации 2-СМА, у которых три атома находятся в одной ячейке Вигнера-Зейтца. Их энергии образования выше энергий образования стабильных конфигураций 2-СМА на 0,12 эВ и 0,06 эВ в Fe и V соответственно.

3. Методом молекулярной динамики рассчитаны температурные зависимости коэффициентов диффузии кластеров СМА различных размеров в температурном диапазоне 150—1200 К. Показано, что относительно частое образование метастабильных неподвижных 0-БС конфигураций оказывает заметное влияние на диффузию 2-СМА в V (максимальный эффект наблюдается при температуре 350 К, когда 2-СМА проводят в этой конфигурации 9 % времени моделирования).

4. Температурные зависимости коэффициентов диффузии кластеров имеют неарренусовский характер, а значения корреляционного множителя меченых атомов меняются с температурой, что обусловлено наличием различных действующих механизмов диффузии, чьи вклады в общую подвижность кластера

зависят от температуры. Вклад 1D-механизма в подвижность 2-СМА значительно больше в Fe по сравнению с V.

5. На основании предложенной кинетической модели диффузии 2-СМА в Fe и V, построены аналитические аппроксимации температурных зависимостей коэффициентов диффузии, с высокой точностью описывающих расчётные данные. Полученные параметры кинетической модели позволили сделать вывод, что:

- 1) в Fe с понижением температуры диффузия 2-СМА приобретает все более одномерный характер, а энергия активации процесса стремится к величине 0,16 эВ;
- 2) в V с уменьшением температуры трехмерный механизм диффузии начнет превалировать над одномерным механизмом, а энергия активации процесса стремится к величине 0,14 эВ.

6. Зависимость механизма диффузии кластеров СМА от числа составляющих их СМА совместно с зависимостью кластерных распределений СМА от повреждающей энергии каскадов атомных столкновений и с чувствительностью сил стока элементов микроструктуры к механизму диффузии радиационных дефектов приводит к тому, что эволюция радиационной микроструктуры под облучением в разных нейтронных спектрах будет разной при одинаковых повреждающих дозах (сна), что необходимо учитывать при анализе и интерпретации результатов радиационных испытаний материалов ядерной и термоядерной техники.

7. Получены температурные зависимости среднего времени жизни 2-СМА до диссоциации и их аналитические приближения. Определены энергии активации диссоциации 2-СМА: 0,98 эВ, 0,60 эВ, 0,88 эВ в Fe, V и Cu соответственно.

8. Определены температурные зависимости средних пробегов 2-СМА до их диссоциации. Для типичных значений сил стоков радиационных дефектов в радиационно-стойких конструкционных материалах (10^{15} — 10^{16} м⁻²) определены температуры, ниже которых большая часть 2-СМА поглощается на стоках, не успев продиссоциировать: 690—810 К в Fe, 410—500 К в V, 630—740 К в Cu.

Глава 3

Влияние внешних нагрузок на диффузионные характеристики димежузлий в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах

3.1. Введение

Для построения физически-обоснованных моделей деформирования кристаллов под повреждающим облучением (например, радиационная ползучесть, радиационное вакансионное распухание) необходимо определять влияние внешних и внутренних полей упругих деформаций на анизотропию диффузии радиационных дефектов [102, 129—131]. Это влияние можно учесть, если известен дипольный тензор седловой конфигурации диффундирующего дефекта [104, 132, 133]. Дипольный тензор P_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) обычно рассчитывается методами компьютерного моделирования (молекулярная статика) [133—139], поскольку недостаточная точность имеющихся экспериментальных методов затрудняют его экспериментальное определение. В рамках МС-метода разработаны различные методики к расчету дипольного тензора. Первая состоит в суммировании моментов сил, действующих на атомы, зафиксированные в узлах идеальной кристаллической решетки в области, окружающей область подвижных атомов, в которой находится дефект [133—136]. Вторая методика использует связь между дипольным тензором и производными по деформации от энергии образования РД, рассчитанной при постоянной деформации [137]. Третья методика использует пропорциональность дипольного тензора величине усредненных по объему напряжений, создаваемых дефектом в модельном кристаллите с периодическими граничными условиями [138, 139]. Все эти методики расчетов дают одинаковый результат. Однако для РД, имеющего множество кристаллографически неэквивалентных метастабильных и седловых конфигураций, проблема моделирования анизотропной диффузии

становится практически неразрешимой из-за необходимости использовать физически необоснованные упрощения или предположения.

В настоящей работе предлагается другой подход к решению этой задачи. МД-методом рассчитываются деформационные зависимости тензора диффузии дефекта D_{ij} для различных типов деформированного состояния, задаваемого тензором деформаций ε_{kl} ($k, l = 1, 2, 3$). С помощью этих зависимостей определяется упругодиффузионный тензор дефекта d_{ijkl} , компоненты которого являются коэффициентами при линейных членах разложений по степеням деформации рассчитанных деформационных зависимостей. Симметрия кристалла и механизм диффузии дефекта определяют симметрию этого тензора. В соответствие ему ставится дипольный тензор эффективной седловой конфигурации дефекта, который отражает вклады всех реальных седловых конфигураций.

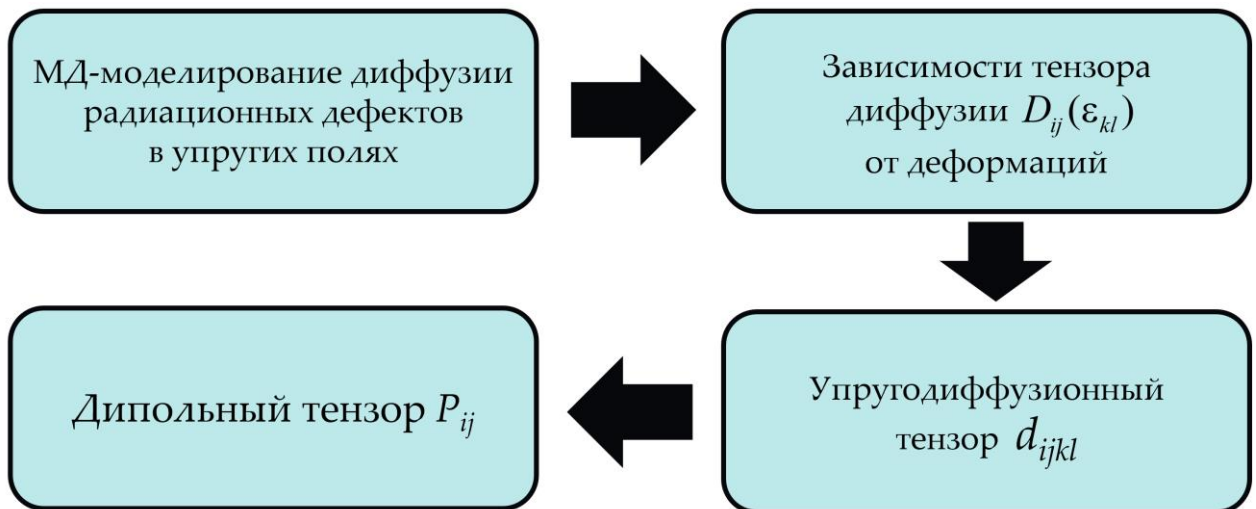


Рисунок 3.1. Схема, иллюстрирующая идею предложенного метода расчета дипольного тензора седловой конфигурации радиационного дефекта

Тензор диффузии при малых деформациях можно записать как степенное разложение по деформациям, ограничившись линейным членом [102]

$$D_{ij} = D_0 \delta_{ij} + d_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (3.1)$$

где D_0 — треть следа тензора D_{ij} в отсутствие внешних деформаций, d_{ijkl} — упругодиффузионный тензор, δ_{ij} — символ Кронекера. В (3.1) и далее используется правило суммирования Эйнштейна по повторяющимися индексам.

Тензор d_{ijkl} имеет ту же симметрию, что и тензор упругих постоянных кристалла c_{ijkl} , а значит, имеет три независимых константы d_{11} , d_{12} , d_{44} (в нотации Фогта) для кристаллов кубической сингонии. В качестве трех независимых констант удобней выбрать три собственных значения тензора d_{ijkl} : $d^{(1)} = d_{11} + 2d_{12}$, $d^{(2)} = d_{11} - d_{12}$, $d^{(4)} = 2d_{44}$.

Тензор деформаций можно представить в виде [102] (здесь и далее используется кристаллографическая система координат с осями вдоль $\langle 100 \rangle$, если не оговаривается иное):

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{\alpha} V_{ij}^{\alpha}, \quad \alpha = 1 \dots 6, \quad (3.2)$$

где

$$\begin{aligned} V^1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, V^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, V^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \bar{2} \end{pmatrix}, \\ V^4 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, V^5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, V^6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Соотношение (3.1) с учетом (3.2, 3.3) запишется как

$$D_{ij} = D_0 \delta_{ij} + d^{(\alpha)} \varepsilon_{\alpha} V_{ij}^{\alpha}. \quad (3.4)$$

Таким образом, для полного определения d_{ijkl} достаточно рассмотреть всего три определенных схемы нагружения: например, \mathbf{V}^1 , \mathbf{V}^2 , \mathbf{V}^4 . Зная d_{ijkl} , можно определить дипольный тензор эффективной седловой конфигурации РД [102], что позволит моделировать диффузию дефектов в упругих полях произвольных типов, включая неоднородные (например, дислокационные поля).

В настоящей работе предлагаемый метод использован для определения дипольного тензора эффективной седловой конфигурации димежузлий в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах.

3.2. Методика моделирования

Моделирование диффузионных траекторий 2-СМА проводилось МД-методом (раздел 1.3). Модельные кристаллиты для Fe, V, Cu представляли собой прямоугольные параллелепипеды, чьи характеристики (направления рёбер, их длины, количество атомов в кристаллите) сведены в табл. 3.1. Деформированное состояние модельных кристаллитов задавалось путем придания их атомам смещений $u_i = \varepsilon_{ij}x_j$, где x_j — координаты атома до деформации.

Среднее число скачков, смоделированных для заданных температур и деформаций, составляло $\sim 6 \cdot 10^6$, а среднее физическое время моделирования — от 2,1 до 4,3 мс. Такой объем полученных данных позволил вычислять диффузионные характеристики с настолько высокой точностью, что влияние на них деформаций кристалла становится заметно даже при уровне деформаций в 0,1%.

Зависимости диффузионных характеристик 2-СМА от величины однородного упругого деформирования кристалла (в интервале от -1% до $+1\%$ в случае Fe и V и $-0,5\%$ до $+0,5\%$ в случае Cu) для деформированных состояний V^1 , V^2 , V^4 рассчитывались для ОЦК-металлов Fe (350—800 К), V (350—600 К) и для ГЦК-металла Cu (500 К). Верхняя граница рассмотренного диапазона температур в Fe выше, чем в V, т.к. димежузлия в Fe более устойчивы к термической диссоциации по сравнению с V и, по большей части, успевают достичь микроструктурных стоков (раздел 2.9).

Таблица 3.1. Характеристики модельных кристаллитов, использовавшихся при моделировании различных типов деформации V^α ($\alpha = 1, 2, 4$).

Тип деформации	Количество атомов	Направления рёбер	Длины рёбер
ОЦК Fe и V			
V^1	4394 + 2	[100]	$13(1 + \varepsilon_1)a$
		[010]	$13(1 + \varepsilon_1)a$
		[001]	$13(1 + \varepsilon_1)a$
V^2	4394 + 2	[100]	$13(1 + \varepsilon_2)a$
		[010]	$13(1 - \varepsilon_2)a$
		[001]	$13a$
V^4	4212 + 2	[110]	$9\sqrt{2}(1 + \varepsilon_4)a$
		$[1\bar{1}0]$	$9\sqrt{2}(1 - \varepsilon_4)a$
		[001]	$13a$
ГЦК Cu			
V^1	4000 + 2	[100]	$10(1 + \varepsilon_1)a$
		[010]	$10(1 + \varepsilon_1)a$
		[001]	$10(1 + \varepsilon_1)a$
V^2	4000 + 2	[100]	$10(1 + \varepsilon_2)a$
		[010]	$10(1 - \varepsilon_2)a$
		[001]	$10a$
V^4	3920 + 2	[110]	$7\sqrt{2}(1 + \varepsilon_4)a$
		$[1\bar{1}0]$	$7\sqrt{2}(1 - \varepsilon_4)a$
		[001]	$10a$

3.3 Тензор диффузии для частных случаев

В процессе диффузии 2-СМА в ОЦК-кристаллах Fe и V два составляющих его СМА практически всегда совершают скачки вдоль плотноупакованных направлений $\langle 111 \rangle$ длиной $\lambda = a\sqrt{3}/2$, а в ГЦК-кристалле Cu — вдоль плотноупакованных направлений $\langle 110 \rangle$ длиной $\lambda = a\sqrt{2}/2$. Доля скачков с иной длиной составляет десятые доли процента от общего числа при всех рассматриваемых температурах и деформациях. Поэтому в дальнейших рассуждениях полагается, что димежузлие может изменить свое текущее положение только за счет скачка одного из СМА в одном из восьми возможных направлений (в первой координационной сфере лежит 8 ближайших узлов решетки) в случае ОЦК-решетки и в одном из двенадцати возможных направлений (в первой координационной сфере лежит 12 ближайших узлов решетки) в случае ГЦК-решетки.

Если предположить, что этот СМА совершает случайные блуждания с вероятностью n_k совершить скачок в направлении k ($k = 1, 2, 3, 4$ для направлений скачков, параллельных направлениям $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$ соответственно, $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = 1$ для ОЦК-решетки; $k = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ для направлений скачков, параллельных направлениям $[110]$, $[1\bar{1}0]$, $[101]$, $[10\bar{1}]$, $[011]$, $[01\bar{1}]$ соответственно, $n_1 + n_2 + n_3 + n_4 + n_5 + n_6 = 1$ для ГЦК-решетки), то тензор диффузии димежузлия D_{ij} будет иметь вид:

$$D_{ij} = D\tilde{D}_{ij}, \quad (3.6)$$

где

$$\tilde{D}_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & n_1 - n_2 - n_3 + n_4 & n_1 - n_2 + n_3 - n_4 \\ n_1 - n_2 - n_3 + n_4 & 1 & n_1 - n_2 + n_3 - n_4 \\ n_1 - n_2 + n_3 - n_4 & n_1 + n_2 - n_3 - n_4 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

в случае ОЦК-решетки и

$$\tilde{D}_{ij} = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 1 - n_5 - n_6 & n_1 - n_2 & n_3 - n_4 \\ n_1 - n_2 & 1 - n_3 - n_4 & n_5 - n_6 \\ n_3 - n_4 & n_5 - n_6 & 1 - n_1 - n_2 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

в случае ГЦК решетки.

В табл. 3.2 приведены следующие из (3.7) и (3.8) частные случаи вида тензора \tilde{D}_{ij} для ОЦК- и ГЦК-решеток при конкретных значениях n_k , которые пригодятся далее при обсуждении результатов.

Таблица 3.2. Частные случаи вида тензора \tilde{D}_{ij} для различных вариантов значений n_k .

	\tilde{D}_{ij}	Обозначение вида \tilde{D}_{ij}
ОЦК		
$n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = \frac{1}{4}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	А
$n_1 = 1, n_2 = n_3 = n_4 = 0$	$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$	Б
$n_1 = n_2 = n_3 = 0, n_4 = 1$	$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$	В
ГЦК		
$n_1 = 1, n_2 = n_3 = n_4 = n_5 = n_6 = 0$	$\tilde{D}_{ij} = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	Г
$n_2 = 1, n_1 = n_3 = n_4 = n_5 = n_6 = 0$	$\tilde{D}_{ij} = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	Д
$n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 0,$ $n_5 = n_6 = \frac{1}{2}$	$\tilde{D}_{ij} = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Е
$n_1 = n_2 = n_5 = n_6 = 0,$ $n_3 = n_4 = \frac{1}{2}$	$\tilde{D}_{ij} = \frac{3}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	Ж

Отметим, что случаи (Б) и (В) в ОЦК-решетке и (Г) и (Д) в ГЦК-решетке соответствуют движению вдоль какого-либо одного кристаллографического направления (полностью одномерная диффузия). Случаи (Е) и (Ж) в ГЦК решетке соответствует плоской диффузии в плоскостях (100) и (010) для (Е) и (Ж), соответственно.

3.4 Зависимости коэффициентов диффузии димежузлий от внешних нагрузок различных типов

На рис. 3.2 представлены зависимости коэффициента диффузии D от величин внешних деформаций различных типов ε_α в Fe и V. Видно, что деформации ε_1 (рис. 3.2 а) слабо влияют на D в Fe (изменения в пределах 20%), и сильно в V (изменения до порядка величины). Слабое влияние ε_1 на D в Fe обусловлено тем, что основной вклад в диффузию 2-СМА вносит краудионный механизм, а для него характерно слабое различие характеристик дефекта (энергии образования, дипольные тензоры P_{ij} , характеризующие взаимодействие дефекта с внешним упругим полем) в основной и седловой конфигурациях.

В V из-за трехмерного механизма диффузии основные и седловые конфигурации 2-СМА имеют сильно различающиеся характеристики, что приводит к сильной зависимости D от ε_1 . Зависимость $D(\varepsilon_1, T)$ хорошо описывается аппроксимацией

$$D(\varepsilon_1, T) = [A(T)\varepsilon_1^2 + B(T)\varepsilon_1 + D(0, T)](1 - \chi_0(\varepsilon_1, T)), \quad (3.9)$$

где $A(T)$ и $B(T)$ — полиномы 2-й степени, параметры которых приведены в табл. 3.3, $\chi_0(\varepsilon_1, T)$ — функциональная зависимость от T и ε_1 доли времени, которое 2-СМА находилось в неподвижной конфигурации с тремя атомами в одной ЯВЗ, $D(0, T)$ и $\chi_0(0, T)$ — функции, чье аналитическое представление приведено в 2.8, 2.10 и 2.3.

Таблица 3.3. Коэффициенты полиномов 2-й степени $A(T)$ и $B(T)$ из (3.9) для Fe и V

Коэффициент полинома при члене	$A(T)$		$B(T)$	
	Fe	V	Fe	V
2-й степени по T	$1,66 \cdot 10^{-6}$	$-3,42 \cdot 10^{-6}$	$-6,94 \cdot 10^{-9}$	$9,06 \cdot 10^{-8}$
1-й степени по T	$-1,98 \cdot 10^{-3}$	$3,16 \cdot 10^{-3}$	$6,78 \cdot 10^{-6}$	$-1,01 \cdot 10^{-4}$
0-й степени по T	$7,94 \cdot 10^{-1}$	$-4,93 \cdot 10^{-1}$	$-2,57 \cdot 10^{-3}$	$2,10 \cdot 10^{-2}$

Величина χ_0 при всех ε_1 и T не превышает 1,5% и 14% в Fe и V соответственно. Т.к. в Fe χ_0 слабо зависит от ε_1 и мало, можно с хорошей точностью считать, что $\chi_0(\varepsilon_1, T) = \chi_0(0, T)$. Значения $\chi_0(\varepsilon_1, T)$ в V хорошо описываются зависимостью

$$\chi_0(\varepsilon_1, T) = E(T)\varepsilon_1^2 + F(T)\varepsilon_1 + \chi_0(0, T), \quad (3.10)$$

где $E(T) = -548 + 2,83T - 2,88 \cdot 10^{-3}T^2$, $F(T) = -13,5 + 8,55 \cdot 10^{-2}T - 9,70 \cdot 10^{-5}T^2$.

На рис. 3.2 б представлены зависимости коэффициентов диффузии D от величины деформации ε_2 при 500 К и 800 К в Fe и V. Зависимости $D(\varepsilon_2)$ являются четными, т.к. вследствие симметрии кристалла его поворот на 90° вокруг оси [001] эквивалентен изменению знака деформированного состояния на противоположный, а поворот кристалла не может изменить свойства его дефектов, в частности, величины D . МД-данные для D с хорошей точностью описываются зависимостями:

$$D(\varepsilon_2, T) = D(0, T)(1 + A\varepsilon_2^2), \quad (3.11)$$

где $A = 436$ для Fe и $A = 1093$ для V.

Отметим, что в случае деформаций $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ в ОЦК решетке, вид тензора диффузии соответствует типу (A).

На рис. 3.2 в представлены зависимости коэффициентов диффузии димежузлий D от величины деформации ε_4 в Fe и V для различных температур. Зависимости $D(\varepsilon_4)$ являются четными в следствие аналогичной случаю деформаций ε_2 , наличию оси симметрии четвертого порядка [001]. Простое аналитическое описание зависимостей $D(\varepsilon_4)$, в отличие от $D(\varepsilon_1)$ и $D(\varepsilon_2)$ невозможно, ввиду наличия взаимодействия с упругим полем не только основной конфигурации димежузлия, но и различных метастабильных конфигураций (например — 0-БС), что вызывает значительное отклонение функции $D(\varepsilon_4)$ от характерного, параболического вида зависимости.

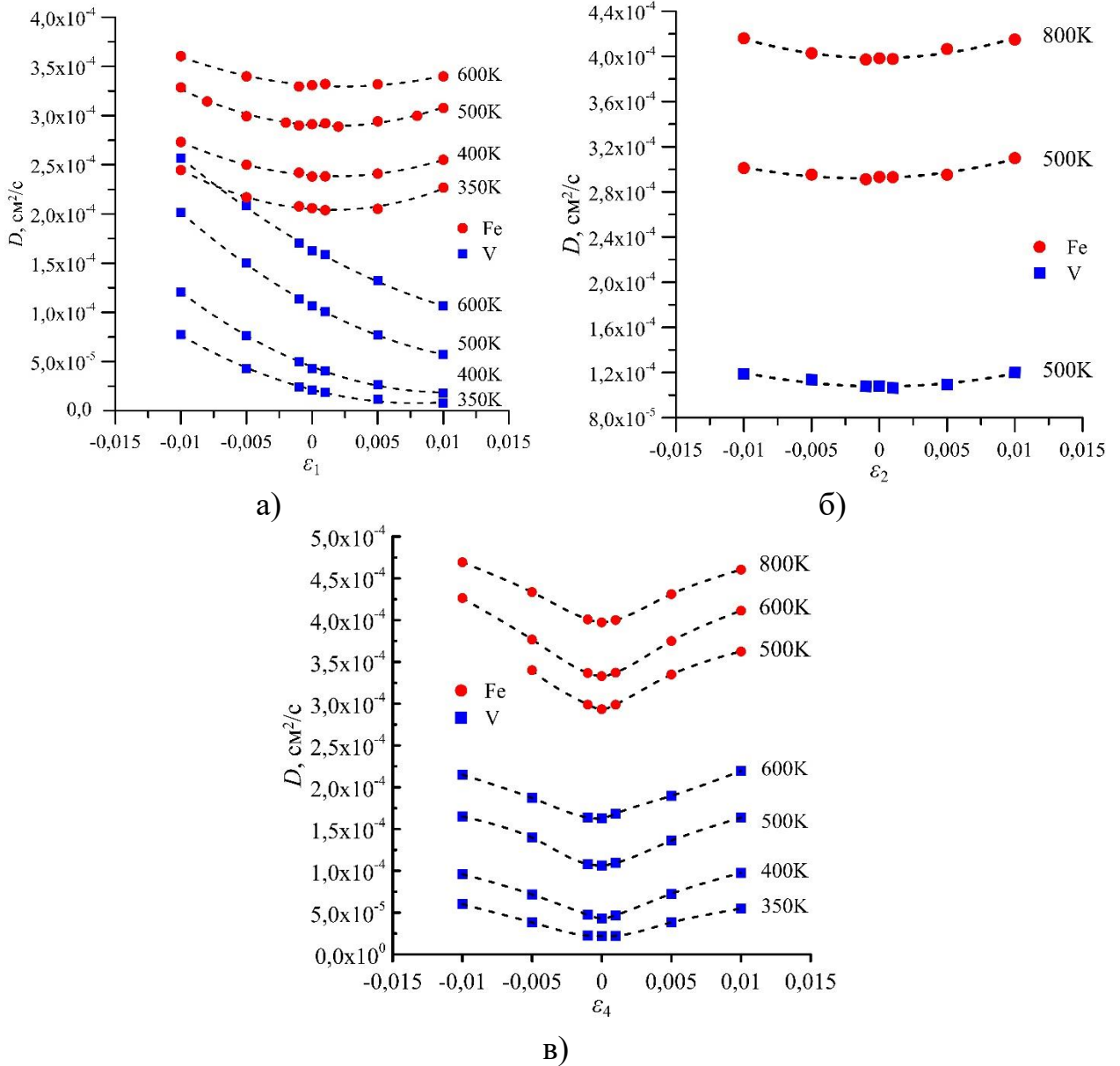


Рисунок 3.2. Зависимости $D(\epsilon_\alpha)$ при разных T в Fe и V

Рассчитанные МД-методом зависимости $D(\epsilon_\alpha)$, где $\alpha = 1, 2, 4$, для димежузлий в Cu при 500 K приведена на рис. 3.3. Эти зависимости хорошо аппроксимируются выражениями:

$$D(\epsilon_1) = D(0)(1 - 9,98\epsilon_1 + 171\epsilon_1^2), \quad (3.12)$$

$$D(\epsilon_2) = D(0)(1 + 4275\epsilon_2^2), \quad (3.13)$$

$$D(\epsilon_4) = D(0)(1 + 36715\epsilon_4^2), \quad (3.14)$$

где $D(0) = 1,33 \cdot 10^{-4}$ см²/с. Зависимости $D(\varepsilon_2)$ и $D(\varepsilon_4)$ — четные по причинам, аналогичным случаям деформаций ε_2 и ε_4 в Fe и V.

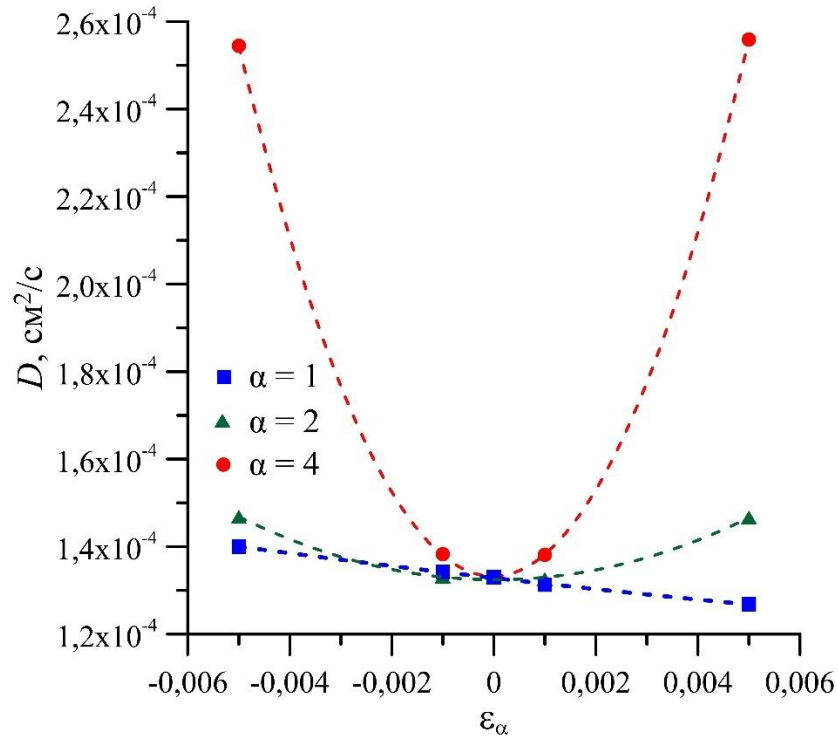


Рисунок 3.3. Зависимости $D(\varepsilon_\alpha)$ для $\alpha = 1, 2, 4$ в Cu при 500 К. Точки — МД-данные. Пунктирные кривые — аппроксимации (3.12), (3.13) и (3.14)

3.5 Зависимости компонент нормированного тензора диффузии от внешних нагрузок различных типов

При $\varepsilon_{ij} = 0$ $\tilde{D}_{ij} = \delta_{ij}$ в пределах расчетной погрешности для рассмотренных T . Деформации \mathbf{V}^1 не меняют симметрию кристалла, поэтому при $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_1 V_{ij}^1$ также должно выполняться $\tilde{D}_{ij} = \delta_{ij}$. Деформации \mathbf{V}^2 и \mathbf{V}^4 понижают симметрию кристалла, что должно приводить к изменению вида \tilde{D}_{ij} , накладывая определенные соотношения для его компонент (табл. 3.4). Для рассчитанных МД-методом зависимостей $\tilde{D}_{ij}(\varepsilon_\alpha)$ в рамках расчетных погрешностей действительно выполняются эти соотношения (рис. 3.4 и 3.5).

Таблица 3.4. Вид нормированного тензора диффузии $\tilde{D}_{ij}(i, j = 1, 2, 3)$ при деформациях \mathbf{V}^α ($\alpha = 1, 2, 4$)

Тип деформации	Компоненты \tilde{D}_{ij}
ОЦК-кристаллы Fe и V	
\mathbf{V}^1	$\tilde{D}_{ij} = \delta_{ij}$
\mathbf{V}^2	$\tilde{D}_{ij} = \delta_{ij}$
\mathbf{V}^4	$\tilde{D}_{11} = \tilde{D}_{22} = \tilde{D}_{33} = 1, \tilde{D}_{12}(\varepsilon_4) = -\tilde{D}_{12}(-\varepsilon_4), \tilde{D}_{23} = \tilde{D}_{13} = 0$
ГЦК-кристалл Cu	
\mathbf{V}^1	$\tilde{D}_{ij} = \delta_{ij}$
\mathbf{V}^2	$\tilde{D}_{11}(\varepsilon_2) = \tilde{D}_{22}(-\varepsilon_2), \tilde{D}_{33}(\varepsilon_2) = \tilde{D}_{33}(-\varepsilon_2), \tilde{D}_{23} = \tilde{D}_{13} = \tilde{D}_{12} = 0$
\mathbf{V}^4	$\tilde{D}_{11} = \tilde{D}_{22}, \tilde{D}_{ii}(\varepsilon_4) = \tilde{D}_{ii}(-\varepsilon_4), \tilde{D}_{23} = \tilde{D}_{13} = 0, \tilde{D}_{12}(\varepsilon_4) = -\tilde{D}_{12}(-\varepsilon_4)$

3.6 Упругодиффузионный и дипольный тензоры димежузлий

Собственные значения упругодиффузионного тензора $d^{(\alpha)}$ могут быть получены путем такой подгонки их значений, чтобы выражение (3.4) описывало бы расчетные зависимости $\tilde{D}_{ij}(\varepsilon_\alpha)$ в области малых ε_α , в которой наблюдается линейный характер таких зависимостей. Для указанной области справедливы выражения, следующие из (3.4):

$$\begin{aligned}
 D(\varepsilon_1) &= D(0) + d^{(1)}\varepsilon_1, \\
 \tilde{D}_{11}(\varepsilon_2) - \tilde{D}_{22}(\varepsilon_2) &= 2d^{(2)}\varepsilon_2 / D(0), \\
 \tilde{D}_{12}(\varepsilon_4) &= d^{(4)}\varepsilon_4 / D(0)
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Подгонка выражениями (3.15) МД-данных, в области $|\varepsilon_\alpha| \leq 0,1\%$ дала для величин $d^{(\alpha)}/(D(0)\beta)$ значения, представленные в табл. 3.5.

Таблица 3.5. Значения $d^{(\alpha)}/(D(0)\beta)$ для кристаллов Fe, V и Cu

	$d^{(\alpha)}/(D(0)\beta)$, эВ	$d^{(\alpha)}/(D(0)\beta)$, эВ	$d^{(\alpha)}/(D(0)\beta)$, эВ
Fe	-0,15	0	20,64
V	-2,25	0	12,80
Cu	4,945	-2,693	14,085

В [102] было аналитически показано, что собственные значения упругодиффузионного тензора в кристаллах кубической сингонии могут быть определены, если известны дипольные тензоры дефекта в основном P_{ij}^e и седловом P_{ij}^s состояниях. В табл. 3.6 приведены полученные в [102] соотношения, связывающие $d^{(\alpha)}$ с P_{ij}^e и P_{ij}^s при различной симметрии. Диффузия димежузлия характеризуется комбинацией различных механизмов диффузии, следовательно, димежузлие обладает множеством различных седловых конфигураций. Тем не менее, с помощью соотношений табл. 3.6 можно получить дипольный тензор эффективной седловой конфигурации, в который вносят вклад все реальные седловые конфигурации (каждая со своим весом).

Таблица 3.6. Собственные значения упругодиффузионного тензора для различных симметрий седловых конфигураций дефекта.

Симметрия	$d^{(1)}/(D(0)\beta)$	$d^{(2)}/(D(0)\beta)$	$d^{(4)}/(D(0)\beta)$
Кубическая	$\text{Tr}(P_{ij}^s - P_{ij}^e)$	0	0
Тетрагональная	$\text{Tr}(P_{ij}^s - P_{ij}^e)$	$P_{11}^s - P_{22}^s$	0
Тригональная	$\text{Tr}(P_{ij}^s - P_{ij}^e)$	0	$2P_{12}^s$
Орторомбическая	$\text{Tr}(P_{ij}^s - P_{ij}^e)$	$(P_{11}^s - P_{33}^s) / 2$	P_{12}^s

Все три рассчитанных собственных значения $d^{(\alpha)}$ отличны от нуля для Cu, что соответствует, согласно табл. 3.6, орторомбической симметрии эффективной

седловой конфигурации 2-СМА. В Fe и V, отличны от нуля значения $d^{(1)}$ и $d^{(4)}$, что соответствует тригональной симметрии эффективной седловой конфигурации 2-СМА. Тогда для компонент P_{ij}^s в случае Fe и V можно получить:

$$\begin{aligned} P_{11}^s &= P_{22}^s = P_{33}^s = \frac{1}{3} \text{Tr } P_{ij}^e + \frac{1}{3} d^{(1)} / (D(0)\beta), \\ P_{12}^s &= d^{(4)} / (D(0)\beta), \\ P_{23}^s &= P_{13}^s = 0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

В случае Cu:

$$\begin{aligned} P_{11}^s &= P_{22}^s = \frac{1}{3} \text{Tr } P_{ij}^e + \frac{1}{3} (d^{(1)} + 2d^{(2)}) / (D(0)\beta), \\ P_{33}^s &= \frac{1}{3} \text{Tr } P_{ij}^e + \frac{1}{3} (d^{(1)} - 4d^{(2)}) / (D(0)\beta), \\ P_{12}^s &= d^{(4)} / (D(0)\beta), \\ P_{23}^s &= P_{13}^s = 0. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Расчет методом молекулярной статики дал для стабильной конфигурации 2-СМА $\text{Tr } P_{ij}^e = 108,33$ эВ, $117,39$ эВ, $100,74$ эВ для Fe, V, Cu, соответственно.

Подставляя расчетные значения $d^{(\alpha)}$ и $\text{Tr } P_{ij}^e$ в (3.8) и (3.9), получим [140, 141]:

$$\begin{aligned} P_{ij}^s [\text{эВ}] &= \begin{pmatrix} 38,38 & 6,40 & 6,40 \\ 6,40 & 38,38 & 6,40 \\ 6,40 & 6,40 & 38,38 \end{pmatrix} \text{ для Fe;} \\ P_{ij}^s [\text{эВ}] &= \begin{pmatrix} 36,06 & 10,32 & 10,32 \\ 10,32 & 36,06 & 10,32 \\ 10,32 & 10,32 & 36,06 \end{pmatrix} \text{ для V;} \\ P_{ij}^s [\text{эВ}] &= \begin{pmatrix} 33,43 & 14,09 & 0 \\ 14,09 & 33,43 & 0 \\ 0 & 0 & 38,82 \end{pmatrix} \text{ для Cu.} \end{aligned} \quad (3.18)$$

Знание дипольного тензора седловой конфигурации дефекта позволяет рассчитать его тензор диффузии для любого деформированного состояния, а также моделировать кинетическим методом Монте-Карло анизотропную диффузию дефекта в механических полях, создаваемых внешними нагрузками кристалла и/или внутренними источниками (дислокации, субграницы, др.), учитывая как

эффекты упругой анизотропии кристаллов, так и симметрии кристалла [19]. Используемые в КМК-методе вероятности n_k могут быть представлены в виде [19, 20] (см. раздел 1.5).

$$n_k = \exp(-E_k^{\text{int}}\beta) / \sum_i \exp(-E_i^{\text{int}}\beta) \quad (3.19)$$

Последовательно используя (1.9) в (3.19), (3.19) в (3.7), (3.8), и вводя обозначения $X = (P_{33}^s - P_{11}^s)\beta\epsilon_2$, $Y = 2P_{12}^s\beta\epsilon_4$, получим:

$$\tilde{D}_{12} = \text{th}Y \text{ для деформаций } \mathbf{V}^4 \text{ в ОЦК-кристаллах,} \quad (3.20)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{D}_{11} &= \frac{3}{2} \cdot \frac{1 + \text{ch}X + \text{sh}X}{1 + 2\text{ch}X} \\ \tilde{D}_{22} &= \frac{3}{2} \cdot \frac{1 + \text{ch}X - \text{sh}X}{1 + 2\text{ch}X} \\ \tilde{D}_{33} &= \frac{3\text{ch}X}{1 + 2\text{ch}X} \end{aligned} \right\} \text{ для деформаций } \mathbf{V}^2 \text{ в ГЦК-кристаллах,} \quad (3.21)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{D}_{11} = \tilde{D}_{22} &= \frac{3}{2} \cdot \frac{\text{ch}Y + 1}{\text{ch}Y + 2} \\ \tilde{D}_{33} &= \frac{3}{\text{ch}Y + 2} \\ \tilde{D}_{12} &= \frac{3}{2} \cdot \frac{\text{sh}Y}{\text{ch}Y + 2} \end{aligned} \right\} \text{ для деформаций } \mathbf{V}^4 \text{ в ГЦК-кристаллах.} \quad (3.22)$$

На рис. 3.4 представлена зависимость (3.20) и соответствующие МД-зависимости для деформаций \mathbf{V}^4 в Fe и V. Для более наглядного и компактного представления данных, рассчитанных при различных температурах, зависимости построены от величины $\beta\epsilon_4$.

На рис. 3.5 представлены зависимости (3.21) и (3.22) и соответствующие МД-зависимости для деформаций \mathbf{V}^2 и \mathbf{V}^4 в Cu.

Можно видеть, что аналитические аппроксимации, использующие в качестве параметра дипольный тензор, с высокой точностью описывает МД-данные для всех рассмотренных значений деформаций, в том числе и в области нелинейной зависимости \tilde{D}_{ij} от деформаций, что выгодно отличает их от выражения (3.15), использующего в качестве параметра упругодиффузионный тензор, которое

аккуратно описывает МД-данные только при $|\varepsilon_4| \leq 0,001$. Таким образом, полученные дипольные тензоры эффективной седловой конфигурации 2-СМА для ОЦК Fe и V и ГЦК Cu позволяют с высокой точностью моделировать анизотропную диффузию 2-СМА в упругих полях различной природы.

Отметим, что в случае Fe и V, из (3.20) следует, что тензор \tilde{D}_{ij} имеет вид (Б) в случае $\varepsilon_4 \geq 1\%$ и (В) в случае $\varepsilon_4 \leq -1\%$) что соответствует одномерной диффузии вдоль направлений $[111]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$.

В случае Cu из (3.21) и (3.22) следует, что с ростом $|\varepsilon_2|$ тензор \tilde{D}_{ij} стремится к виду, соответствующему двумерной диффузии в плоскостях (100) при $\varepsilon_2 > 0$ (Г) и (010) при $\varepsilon_2 < 0$ (Д).

С ростом $|\varepsilon_4|$ тензор \tilde{D}_{ij} стремится к виду, соответствующему одномерной диффузии в направлениях $[110]$ при $\varepsilon_4 > 0$ (Е) и $[1\bar{1}0]$ при $\varepsilon_4 < 0$ (Ж).

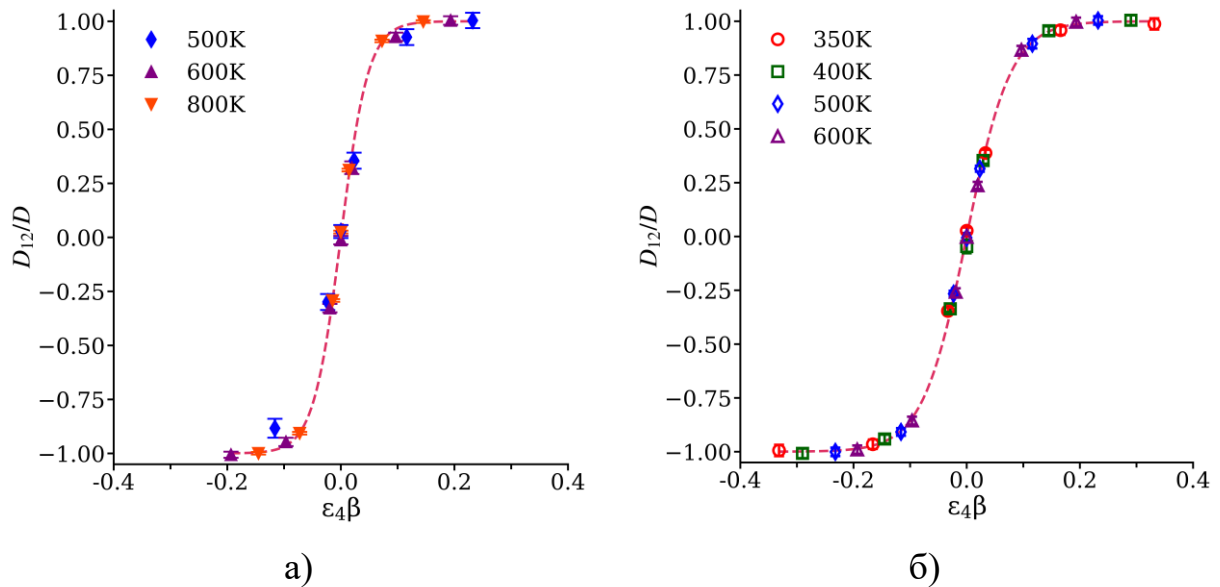


Рисунок. 3.4. Компоненты тензора \tilde{D}_{ij} в зависимости от величин деформаций типа \mathbf{V}^4 в Fe (а) и V (б). Символы — МД-данные. Пунктирные линии соответствующих символом цветов на рисунках — аппроксимация (3.20)

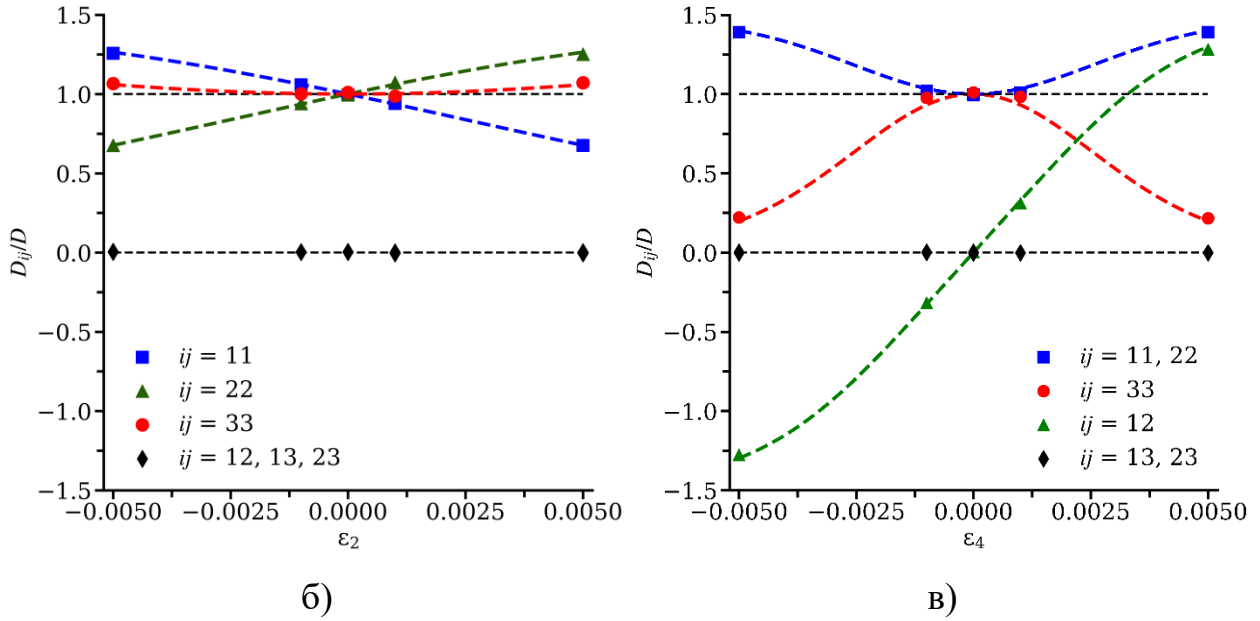


Рисунок. 3.5. Зависимости $\tilde{D}_{ij}(\epsilon_\alpha)$: а) $\alpha = 1$; б) $\alpha = 2$; в) $\alpha = 4$. Символы — МД-данные. Пунктирные кривые — аппроксимации (3.21) и (3.22).

3.7 Выводы по главе 3

1. Предложен новый подход к определению дипольного тензора седловой конфигурации радиационных дефектов. В рамках этого подхода зависимости тензора диффузии РД от величины деформирования кристалла для однородных упругих полей разных типов рассчитываются методом молекулярной динамики. С помощью этих зависимостей определяется упругодиффузионный тензор РД. Симметрия кристалла и механизм диффузии РД определяют симметрию этого тензора. В соответствие ему ставится дипольный тензор эффективной седловой конфигурации РД, который отражает вклады всех реальных седловых конфигураций.

2. Предлагаемый подход реализован для изучения диффузионных характеристик 2-СМА Fe, V и Cu. Симметрия рассчитанного дипольного тензора эффективной седловой конфигурации в Fe и V является тетрагональной, а в Cu — орторомбической. Для всех рассмотренных типов деформаций влияние внешнего поля упругих деформаций на рассчитанный МД-методом нормированный тензор диффузии 2-СМА (отношение тензора диффузии к его следу) полностью

согласуется с теоретическими выражениями, параметрами которых являются компоненты дипольного тензора, в том числе и за пределами области линейной зависимости тензора диффузии от деформаций.

3. Полученные результаты позволяют моделировать анизотропную диффузию 2-СМА во внешних и внутренних упругих полях, учитывать вклад 2-СМА в радиационное деформирование кристаллов.

Глава 4

Эффективности дислокационных стоков для димежузлий в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах

4.1 Введение

Основные радиационные микроструктурные изменения в металлах определяются образованием и диффузией в них радиационных дефектов и реакциями этих дефектов между собой и с дислокациями [142—145]. Кинетика таких процессов существенно зависит от полей упругих напряжений (внешних и внутренних). Дислокации являются основными источниками внутренних напряжений в кристаллах, и поля таких напряжений значительно влияют на кинетические свойства РД (СМА, вакансий и их кластеров), включая их диффузию и поглощение ядрами дислокаций как стоками РД. Такие процессы зависят от кристаллической симметрии и упругой анизотропии кристаллов и типов дефектов [104, 142—146] и определяют поведение микроструктуры и свойств кристаллов при внешних воздействиях разной природы (механических, термических, радиационных).

В определении эффективностей ДС в кристаллах важным является учет взаимодействия между стоками (источниками напряжений) и мигрирующим дефектом, т.к. его конфигурации (стабильные и седловые) обладают различной точечной симметрией на диффузионных путях к стокам. Эффективности ДС нельзя рассчитывать с использованием изотропных приближений (изотропная теория упругости, сферическая симметрия всех конфигураций дефектов [145, 147]) или априори задавать их значения [148—151], т.к. такие приближения приводят к исчезновению качественных различий между кристаллами разных кристаллографических классов, типами дислокаций и РД [21, 152]. Развитый ранее подход [19], в котором диффузия СТД в упругих полях дислокаций моделируется кинетическим методом Монте-Карло с учетом взаимодействия СТД (упругие диполи) и упругих полей в рамках АЛТУ, позволяет сохранить качественное

различие в результатах для кристаллов различных кристаллографических классов. С помощью этого подхода были рассчитаны эффективности ДС для СТД (СМА и вакансии) в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu, Pu) металлах [19, 21, 152].

В настоящей работе область применения данного подхода расширяется для расчета эффективностей ДС для димежузлий. Димежузлия сильнее деформируют кристаллическую решетку, чем одиночные СМА, что приводит к более сильному упругому взаимодействию димежузлий с внешними упругими полями по сравнению с одиночными СМА. Таким образом, вклад димежузлий в радиационное деформирование кристалла под каскадообразующим облучением может быть заметным несмотря на то, что их образуется меньше, чем одиночных СМА.

Рассчитываются эффективности ДС для димежузлий в диапазоне температур 293—1000 К и диапазоне дислокационных плотностей $3 \cdot 10^{13}$ — $3 \cdot 10^{14}$ м⁻² в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах. Рассматриваются полные винтовые (ВД), краевые (КД) и смешанные (СД) дислокации с векторами Бюргерса $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в ОЦК-кристаллах и $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ в ГЦК-кристалле. Получаемые КМК-данные используются для оценки влияния образования димежузлий под повреждающим облучением на скорости вакансионного распухания и радиационной ползучести в рассматриваемых металлах.

4.2 Методика моделирования

Расчет стоковых эффективностей дислокаций для димежузлий проводилось КМК методом. Более общее описание применения данного метода для расчета стоковых эффективностей для дислокаций обсуждалось в разделе 1.4. Значения эффективного дипольного тензора димежузлий в основных и седловых конфигурациях для рассматриваемых металлов приводятся в разделе 3.4.

Упругие поля дислокаций рассчитывались в рамках АЛТУ алгебраическим методом [103]. Использованные при этом упругие постоянные C_{11} , C_{12} , C_{44} соответствуют величинам, которые дают потенциалы межатомного взаимодействия для Fe [14], V [26] и Cu [33]. В таблицах 1.1 и 1.4 приведены их значения, а также значения показателя упругой анизотропии $A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$,

равного единице для упругоизотропных кристаллов. Поскольку фактически моделируется кристалл, содержащий бесконечную квадратную сетку параллельных дислокаций с расстояниями между ближайшими дислокациями L (см. раздел 1.4), необходимо учитывать суперпозицию упругих полей от всех дислокаций. Квадратную сетку дислокаций можно представить как набор дислокационных стенок, в которых расстояние между дислокациями (период) равно L . Расстояние между соседними стенками также равно L . Упругое поле дислокационной стенки рассчитывалось, следуя [153]. Поскольку упругое поле дислокационной стенки экспоненциально спадает на расстояниях от нее больших L [153, 154], при расчете диффузии димежузлий в общем случае достаточно учитывать поля, создаваемые двумя ближайшими к димежузлию дислокационными стенками.

Радиус поглощения r_0 выбирался равным $3,0a$ для ОЦК-кристаллов Fe и V и $2,4a$ для ГЦК-кристалла Cu, следуя [21, 152]. Некоторая неопределенность критерия выбора величины r_0 не оказывает заметного влияния на рассчитанные величины эффективности ДС, так как полевое взаимодействие между дефектами и дислокациями вносит определяющий вклад в величину ξ , как показано в [21, 152].

Тестовые расчеты эффективностей ДС показали, что при $L \geq 200a$ и $T \geq 293$ К, достаточно учитывать поле ближайшей к димежузлию дислокационной стенки, чтобы результаты расчетов совпадали в пределах статистической погрешности (1 %) с результатами, получаемыми с учетом двух ближайших дислокационных стенок. Также тестовые расчеты показали, что при $L \geq 600a$ суперпозиция дислокационных полей от сетки дислокаций не влияет на результаты расчетов в пределах статистической погрешности, поэтому с целью ускорения расчетов учитывалось только взаимодействие димежузлия с ближайшей к нему дислокацией.

Зависимость энергии взаимодействия E^{int} от температуры не учитывалась, т.к.:

1) по результатам [140] дипольный тензор димежузлий не зависит от температуры;

2) в [21, 152] показано, что изменение ε_{ij} с температурой слабо влияет на величины ξ в рассматриваемом температурном диапазоне 293—1000 К.

4.3 Типы рассматриваемых дислокаций

Дислокации могут быть однозначно заданы набором их характеристик: вектор Бюргерса \mathbf{b} , нормаль к плоскости скольжения \mathbf{n} , направление дислокации \mathbf{t} . Дислокации можно также характеризовать набором из вектора \mathbf{b} и двух углов: θ — угол между \mathbf{b} и \mathbf{t} , ϕ — угол между \mathbf{n} и направлением \mathbf{u} , определяемого как векторное произведение \mathbf{b} и единичного вектора вдоль $[001]$. В настоящей работе будут рассмотрены полные краевые ($\theta = 90^\circ$), смешанные ($0^\circ < \theta < 90^\circ$) и винтовые ($\theta = 0^\circ$) дислокации с векторами Бюргерса $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$ и $\mathbf{b} = [100]$ для ОЦК-кристаллов Fe и V и $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[110]$ для ГЦК-кристалла Cu. Вектор \mathbf{u} в соответствии с определением направлен вдоль $[\bar{1}10]$ для дислокаций с $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[111]$ и $\mathbf{b} = \frac{1}{2}[110]$ и вдоль $[010]$ для дислокаций с $\mathbf{b} = [100]$. В табл. 4.1 приведены кристаллографические характеристики и обозначения для всех рассматриваемых дислокаций в ОЦК-кристаллах Fe и V и для некоторых из рассматриваемых дислокаций в ГЦК-кристалле Cu (полностью приведены в [21]).

Таблица 4.1. Вектор Бюргерса \mathbf{b} , нормаль к плоскости скольжения \mathbf{n} , направление \mathbf{t} , углы θ и ϕ рассмотренных прямолинейных краевых (КД), смешанных (СД) и винтовых (ВД) дислокаций в ОЦК и ГЦК кристаллах.

Тип кристалла	Обозначение дислокации	\mathbf{b}	\mathbf{n}	\mathbf{t}	θ	ϕ
ОЦК	КД1	$\frac{1}{2}[111]$	$[\bar{1}10]$	$[11\bar{2}]$	90°	0°
	КД2	$\frac{1}{2}[111]$	$[11\bar{2}]$	$[\bar{1}10]$	90°	90°
	КД3	$[100]$	$[001]$	$[010]$	90°	90°
	КД4	$[100]$	$[011]$	$[01\bar{1}]$	90°	45°
	ВД1	$\frac{1}{2}[111]$	$[\bar{1}10]$	$[111]$	0°	0°
	ВД2	$[100]$	$[001]$	$[100]$	0°	90°
ГЦК	КД5	$\frac{1}{2}[110]$	$[\bar{1}11]$	$[11\bar{2}]$	90°	35°
	КД6	$\frac{1}{2}[110]$	$[11\bar{2}]$	$[1\bar{1}1]$	90°	55°
	СД1	$\frac{1}{2}[110]$	$[001]$	$[100]$	45°	90°
	ВД3	$\frac{1}{2}[110]$	$[\bar{1}10]$	$[110]$	0°	0°

4.4 Влияние типа дислокаций на эффективность дислокационных стоков

На рис. 4.1 представлены рассчитанные зависимости эффективности ДС для димежузлий при 400 К и дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в ГЦК-кристалле Си от углов θ и ϕ . Величина ξ слабо зависит (в пределах 15 %) от системы скольжения дислокации при фиксированном угле θ (рис. 4.1 б). Угол θ оказывает значительно более сильное влияние: ξ растет в 1,5—1,7 (в зависимости от ϕ) при увеличении θ от 0° до 90° (рис. 4.1 а). Зависимость ξ от θ монотонно растет с ростом θ от 0° до 90° .

Качественно схожие результаты получены для ОЦК-металлов Fe и V. Эффективности ДС в первую очередь зависят от угла между дислокацией и вектором Бюргерса (различие эффективностей ДС для КД и ВД составляет $\sim 2,5$), и слабо меняются в зависимости от системы скольжения (рис. 4.2).

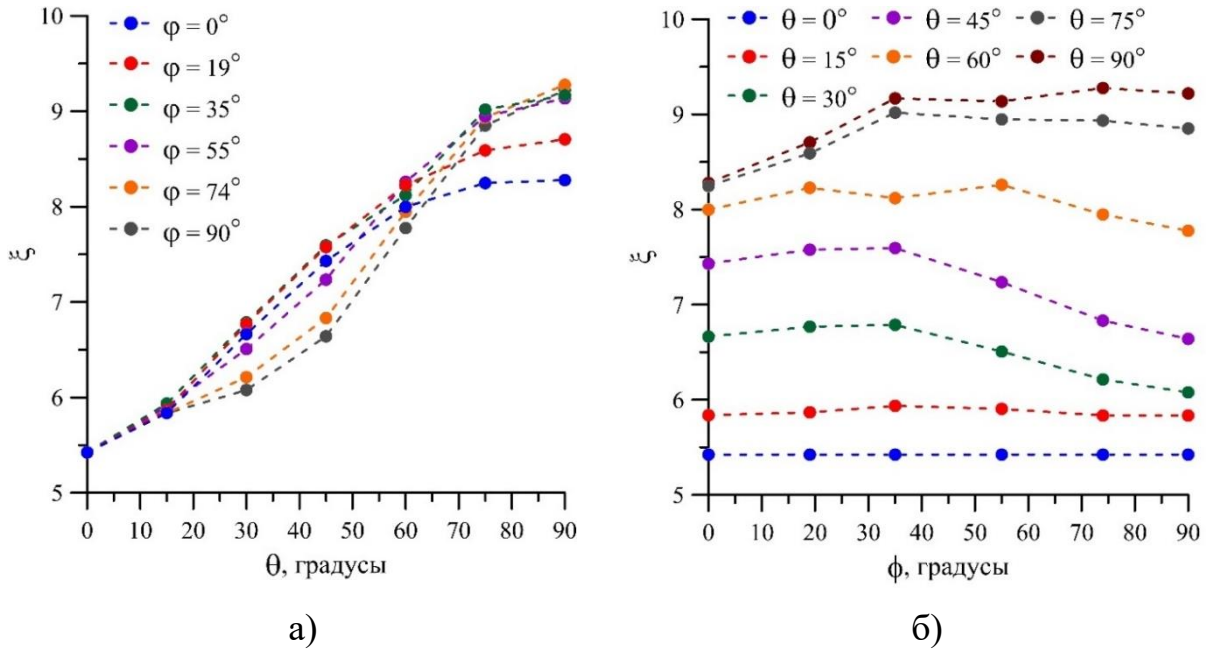


Рисунок. 4.1. Зависимости эффективности ДС для димежузлий при 400 К и дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в Си от угла θ между вектором Бюргерса и линией дислокации (а); от угла ϕ между направлением $[\bar{1}10]$ и нормалью к плоскости скольжения (б)

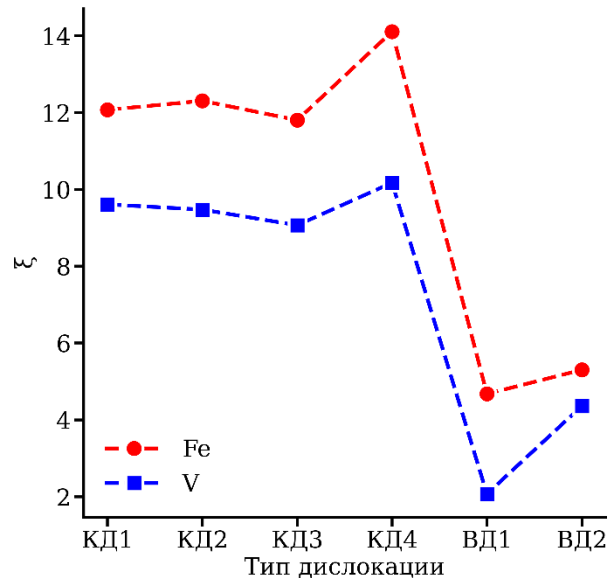


Рисунок 4.2. Зависимости эффективности ДС для димежузлий при 400 К и дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в ОЦК-кристаллах Fe и V от типа дислокации

Для качественного объяснения полученных результатов (рис. 4.1, 4.2), представим энергию взаимодействия $E^{\text{int}}(\mathbf{r}) = -P_{ij}\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ (1.9) в эквивалентном виде:

$$E^{\text{int}} = E_V + E_S, \quad (4.1)$$

где

$$E_V = -\frac{\text{Tr}P}{3} \text{Tr}\varepsilon, \quad (4.2)$$

$$E_S = -\sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii} \left(P_{ii} - \frac{\text{Tr}P}{3} \right) - 2(P_{23}\varepsilon_{23} + P_{13}\varepsilon_{13} + P_{12}\varepsilon_{12}). \quad (4.3)$$

Принимая во внимание, что релаксационный объем дефекта V^R связан со следом его дипольного тензора $\text{Tr}P$ как [155]

$$V^R = \frac{\text{Tr}P}{3B}, \quad (4.4)$$

и что в линейном приближении давление p связано с деформациями как

$$p = -B \text{Tr}\varepsilon, \quad (4.5)$$

выражение (4.2) запишем в виде

$$E_V = pV^R. \quad (4.6)$$

Член E_V , как видно из (4.6), прямо пропорционален давлению p , которое создает дислокация в кристалле. Все КД создают вокруг себя давление, ВД в упругоизотропном приближении не создают давления [103]. В случае упругоанизотропных кристаллов кубической сингонии, ВД не создают давления, только если они направлены вдоль оси симметрии четного порядка [156], как это имеет место с дислокациями ВД2 и ВД3. Дислокация ВД1 направлена вдоль оси симметрии нечетного порядка, поэтому она создает в кристалле давление. Кристалл V близок по своим упругим свойствам к упругоизотропному кристаллу, поэтому давление, создаваемое дислокацией ВД1, на порядок меньше, чем давление, создаваемое такой же дислокацией в Fe, которое является существенно упругоанизотропным кристаллом. Давление, создаваемое КД в Fe, в разы сильнее, чем давление, создаваемое ВД1.

Член E_S стремится к нулю при стремлении характеристической поверхности тензора P к сферической форме. Степень отклонения этой поверхности от сферической формы можно характеризовать с помощью величины ζ , определенной в [21] как

$$\zeta = \left(3 \frac{(P^{(1)} - P^{(2)})^2 + (P^{(1)} - P^{(3)})^2 + (P^{(2)} - P^{(3)})^2}{(P^{(1)})^2 + (P^{(2)})^2 + (P^{(3)})^2} \right)^{1/2}, \quad (4.7)$$

где $P^{(i)}$ — собственные значения дипольного тензора. Как видно из (4.7), $\zeta = 0$ для сферы и $\zeta = 1$ для эллипсоида вращения, чьи большая и малая полуоси различаются длиной в два раза. Подставляя в (4.7) собственные значения дипольного тензора эффективной седловой конфигурации, получим для седловых конфигураций димежузлий значения ζ : 1,13, 0,69 и 0,95 для Fe, V и Cu соответственно.

Перечисленных факторов достаточно для качественного объяснения зависимостей, представленных на рис. 4.1, 4.2:

1) все КД являются более мощными стоками для димежузлий по сравнению с ВД, т.к. E_V для КД значительно больше, чем для ВД, а E_S для КД и ВД — одного порядка;

2) стоковая эффективность ВД1 в V значительно меньше, чем в Fe, т.к., во-первых, E_V на порядок меньше в V, чем в Fe вследствие близости к единице показателя упругой изотропии ванадия, и, во-вторых, E_S значительно меньше в V, чем в Fe из-за того, что характеристическая поверхность дипольного тензора димежузлия в V значительно ближе к сферической, чем в Fe (ζ равно 1,13 для Fe и 0,69 для V);

3) стоковые эффективности ВД2 и ВД3 определяются целиком членом E_S , т.к. для них $E_V = 0$. Тем не менее, их эффективности значительно выше, чем для НЛС, т.к. E_S не мало вследствие сильного отклонения ζ от нуля (ζ равно 1,13 для Fe и 0,95 для Cu).

4.5 Влияние дислокационной плотности на эффективность дислокационных стоков

Обозначим отношение эффективностей ДС для димежузлий и СМА как ψ . Зависимости ξ и ψ рассчитаны для диапазона дислокационных плотностей ρ_d от $3 \cdot 10^{13}$ до $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в диапазоне температур 293—1000 К в Fe, V и Cu для дислокаций различных типов (табл. 4.1.). На рис. 4.3 представлены эти зависимости при 500 К. Полученные КМК-данные во всем рассмотренном диапазоне дислокационных плотностей хорошо описываются эмпирически подобранным соотношением

$$\xi(\rho) = s\xi_0(\rho)(1 + t\rho)^{s-1}, \quad (4.8)$$

где $\rho = r_0\sqrt{\pi\rho_d}$, ξ_0 — эффективность невзаимодействующих линейных стоков (НЛС), рассчитываемая как [152]

$$\xi_0(\rho) = \xi_{0,th}(\rho)(1 - 0,016\xi_{0,th}(\rho)), \quad (4.9)$$

$\xi_{0,th}$ — теоретическое выражение для эффективности НЛС [124, 157],

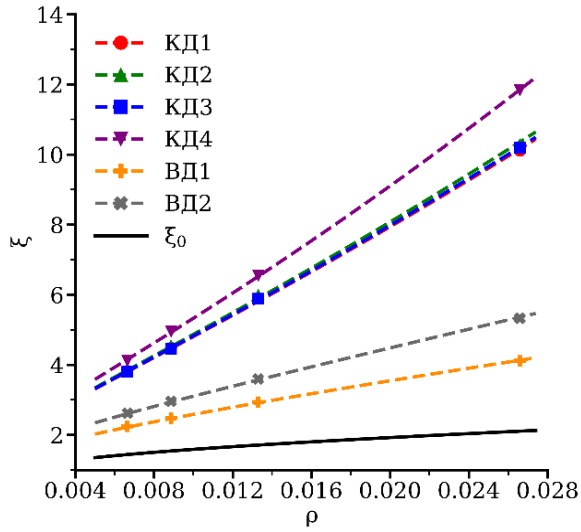
$$\xi_{0,th} = \frac{2\pi(1 - \rho^2)}{\ln(\rho^{-1}) - 0,75 + 0,25\rho^2(4 - \rho^2)}, \quad (4.10)$$

s и t — подгоночные параметры. Результаты подгонки параметра s сведены в табл. 4.2. Параметр t оказался слабозависящим от типа дислокации и температуры и был положен равным 80 в Fe и 55 в V и Cu. Выражение (4.8) с высокой точностью описывает расчетные данные как можно видеть из рис. 4.3.

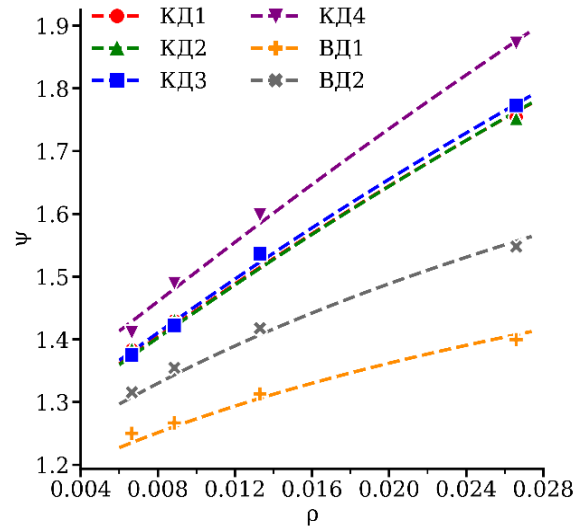
Зависимости $\psi(\rho)$ монотонно падают с уменьшением ρ для всех дислокаций за исключением ВД1 в V (рис. 4.3), для которого особенности взаимодействия упругого поля дислокации с димежузлием приводят к тому, что ξ практически совпадает с ξ_0 . Величина ψ как правило значительно выше единицы (за исключением отмеченного случая ВД1, для которого $\psi < 1$), что является следствием значительно более сильного упругого взаимодействия дислокаций с димежузлиями по сравнению с одиночными СМА.

Таблица 4.2. Значения подгоночного параметра s соотношения (4.8).

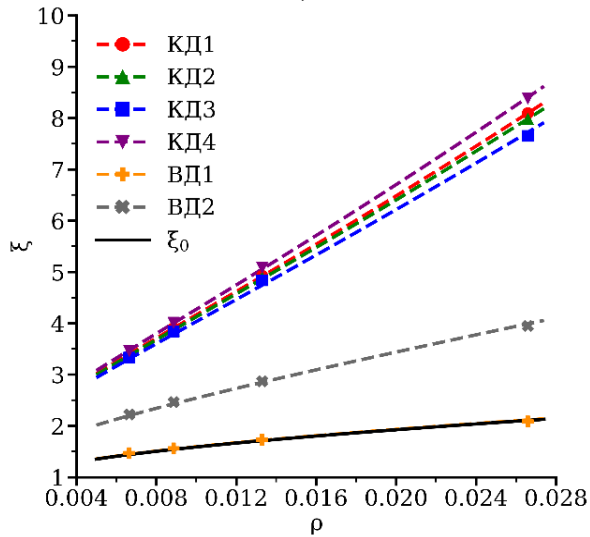
Тип дислокации	T, K							
	293	400	500	600	700	800	900	1000
Fe								
КД1	2,145	1,963	1,844	1,751	1,678	1,620	1,568	1,527
КД2	2,154	1,973	1,855	1,762	1,690	1,628	1,581	1,535
КД3	2,165	1,976	1,846	1,753	1,681	1,619	1,569	1,531
КД4	2,282	2,073	1,936	1,830	1,748	1,686	1,631	1,585
ВД1	1,514	1,405	1,336	1,285	1,247	1,213	1,188	1,164
ВД2	1,684	1,562	1,477	1,396	1,356	1,322	1,292	1,265
V								
КД1	2,147	1,949	1,826	1,729	1,65	1,587	1,541	1,496
КД2	2,131	1,940	1,817	1,719	1,645	1,583	1,536	1,492
КД3	2,098	1,912	1,794	1,706	1,635	1,577	1,526	1,485
КД4	2,192	1,988	1,852	1,754	1,677	1,615	1,561	1,516
ВД1	1,002	1,002	1,002	0,998	0,994	0,994	0,994	0,994
ВД2	1,526	1,430	1,364	1,313	1,266	1,234	1,207	1,184
Cu								
КД5	2,110	1,920	1,796	1,705	1,629	1,572	1,519	1,480
КД6	2,111	1,915	1,788	1,697	1,621	1,563	1,514	1,475
СД1	1,846	1,703	1,603	1,528	1,469	1,421	1,381	1,347
ВД3	1,698	1,548	1,453	1,388	1,336	1,293	1,258	1,230



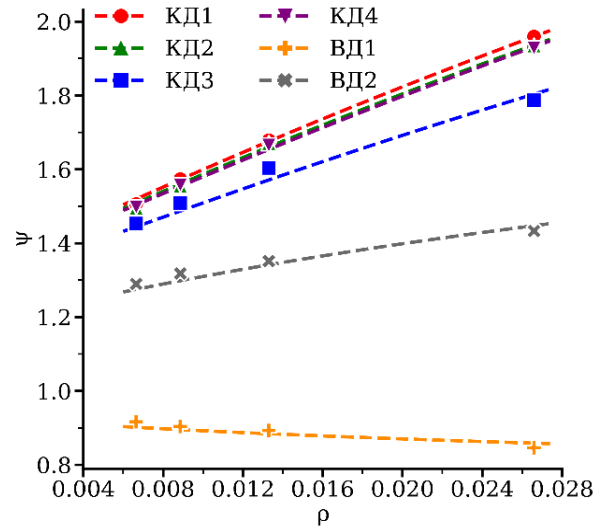
а)



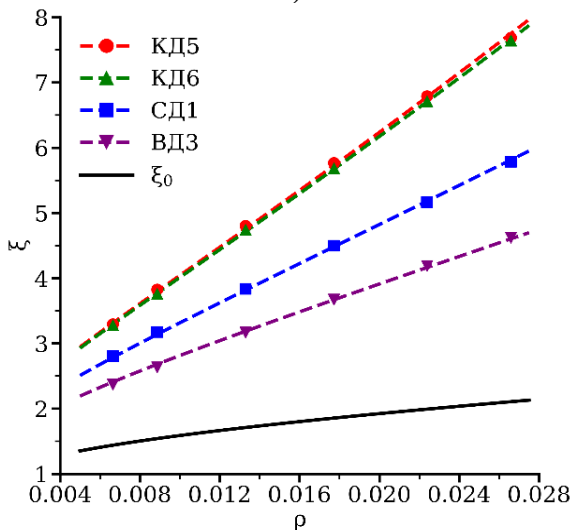
б)



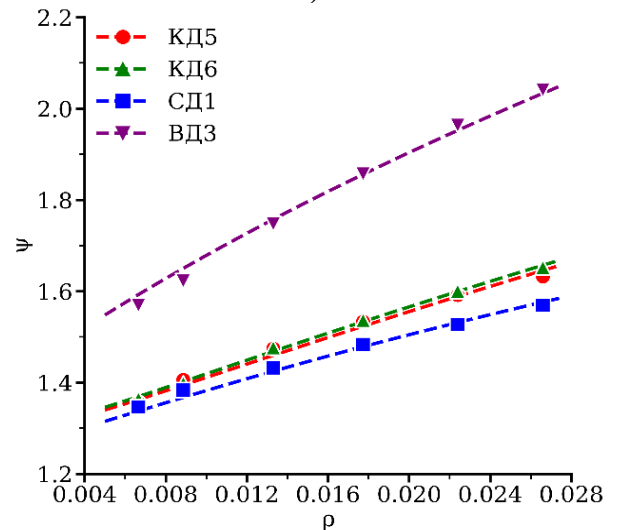
в)



г)



д)



е)

Рисунок 4.3. Зависимости ξ (а, в, д) и ψ (б, г, е) от параметра ρ для 2-СМА при 500 К в Fe (а, б), V (в, г) и Cu (д, е). Пунктирные линии — аппроксимация (4.8) (см. табл. 4.2) Сплошные линии — эффективность НЛС (4.9)

4.6 Влияние температуры на эффективность дислокационных стоков

Представленные в табл. 4.3 значения параметра s монотонно и плавно снижаются с ростом температуры. Зависимости $s(T)$ хорошо аппроксимируются эмпирическим выражением

$$s(T) = \frac{A}{\sqrt{T}} \exp\left(-\frac{T}{B}\right) + 1, \quad (4.11)$$

где A и B — подгоночные параметры, чьи значения сведены в табл. 4.3.

Совместное использование выражений (4.8) и (4.11) позволяет рассчитать эффективность ДС для любой температуры и дислокационной плотности:

$$\xi(\rho, T) = s(T) \xi_0(\rho) (1 + t\rho)^{s(T)-1} \quad (4.12)$$

На рис. 4.4 представлены рассчитанные КМК-методом зависимости $\xi(T)$ и $\psi(T)$ для температурного диапазона 293—1000 К в Fe, V и Cu для дислокаций различных типов (табл. 4.1) при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$. На этом же рисунке приведены аналитические зависимости (4.12). Видно, что расчетные данные и аналитические кривые практически совпадают. Для всех дислокаций $\xi(T)$ стремится к эффективности НЛС с ростом T , но, за исключением случая ВД1 в V, ξ значительно выше ξ_0 в рассмотренном интервале температур.

Таблица 4.3. Значения подгоночных параметров A и B соотношения (4.11) для различных типов дислокаций в Fe, V, Cu.

Тип дислокации	Fe		V		Cu	
	A	B, K	A	B, K	A	B, K
КД1	21,05	4356	21,59	3122	—	—
КД2	21,14	4674	21,26	3203	—	—
КД3	21,51	3946	20,45	3522	—	—
КД4	23,62	4056	22,39	3147	—	—
КД5	—	—	—	—	20,92	3091
КД6	—	—	—	—	20,99	2913
СД1	—	—	—	—	16,35	2540
ВД1	10,91	1351	0	1	—	—
ВД2	13,58	1990	10,90	1629	—	—
ВД3	—	—	—	—	14,64	1402

Значения ψ для КД значительно выше единицы: 1,5—2,2 при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в зависимости от системы скольжения, температуры и материала (рис. 4.4 б, з, е). Это является следствием того, что взаимодействие краевых дислокаций с межузельными дефектами в значительной мере определяется следом дипольного тензора дефекта, а след дипольного тензора димежузлий примерно в два раза больше, чем у одиночных СМА.

В Fe и V значения ψ меньше для ВД, чем для КД: 0,7—1,7 при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в зависимости от системы скольжения, температуры и материала (рис. 4.4 б, з).

В Cu значения ψ для ВД заметно больше, чем для КД: 1,6—2,8 в зависимости от температуры (рис. 4.4 е). Такие высокие значения ψ в данном случае обусловлены малыми значениями эффективности ДС для одиночного СМА, которые, в свою очередь, вызваны малостью взаимодействия упругих полей ВД с СМА из-за близости характеристической поверхности дипольного тензора седловой конфигурации СМА в Cu сферической [21].

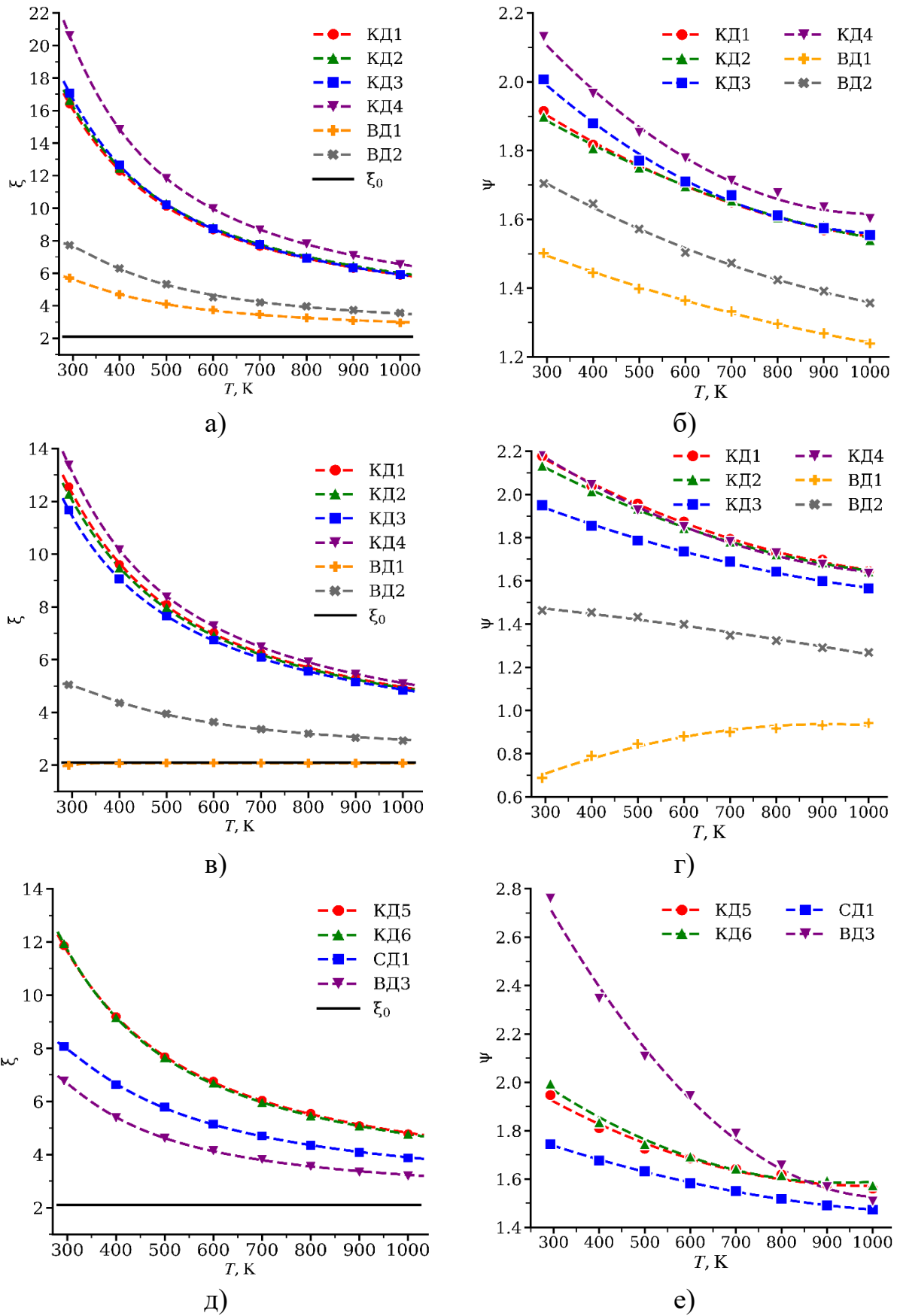


Рисунок 4.4. Температурные зависимости ξ (а, в, д) и ψ (б, г, е) для 2-СМА при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ в Fe (а, б), V (в, г) и Cu (д, е). Пунктирные линии — аппроксимация (4.12). Сплошные прямые линии — эффективность НЛС (4.9)

4.7 Влияние образования димежузлий на скорость распухания кристаллов под действием повреждающего облучения

Рассмотрим влияние кластеризации РД на скорость радиационного вакансионного распухания кристалла, содержащего в качестве стоков РД дислокации и вакансионные поры. Запишем уравнения баланса РД (собственные точечные дефекты и их кластеры) для стационарного случая, пренебрегая реакциями между РД, что оправдано в случае их малых концентраций (малая скорость генерации РД, высокая подвижность РД, высокая плотность стоков):

$$G^{k\pm} = I^{k\pm}, \quad (4.13)$$

где верхний индекс обозначает размер кластера (k — число СТД, содержащихся в кластере) и его сорт («+» для межузельных кластеров, «-» для вакансионных кластеров), $G^{k\pm}$ — скорость генерации РД сорта « $k\pm$ », $I^{k\pm}$ — поток РД сорта « $k\pm$ » на все стоки РД.

При этом должно выполняться

$$G^+ = G^- = G, \quad (4.14)$$

где G — скорость генерации френкелевских пар,

$$G^\pm = \sum_{k=1}^{\infty} kG^{k\pm}. \quad (4.15)$$

Пусть $\eta^{k\pm}$ — доля СТД сорта « \pm », содержащихся в кластере сорта « $k\pm$ », от общего числа образующихся СТД сорта « \pm ». Тогда вклад в общую генерацию СТД сорта « \pm » от РД сорта « $k\pm$ » составит

$$G^\pm(k) = \eta^{k\pm} G^\pm = kG^{k\pm}. \quad (4.16)$$

Поток РД сорта « $k\pm$ » на стоки сорта « S » равен

$$I_S^{k\pm} = k_{k\pm,S}^2 D^{k\pm} C^{k\pm}, \quad (4.17)$$

где $D^{k\pm}$ и $C^{k\pm}$ — коэффициент диффузии и концентрация РД типа « $k\pm$ » соответственно, а $k_{k\pm,S}^2$ — сила стоков сорта « S » для РД сорта « $k\pm$ » ($S = D, V$ для дислокаций и вакансионных пор соответственно, полную силу стока поглотителей

всех сортов обозначим как $k_{k\pm}^2$). Вклад в поток STD сорта « \pm » на стоки сорта « S » от РД сорта « $k\pm$ » равен

$$I_S^\pm(k) = kI_S^{k\pm}. \quad (4.18)$$

Из (4.13) и (4.16)—(4.18) следует, что

$$I_S^\pm(k) = G \frac{k_{k\pm,S}^2}{k_{k\pm}^2} \eta^{k\pm}. \quad (4.19)$$

Скорость распухания для рассматриваемой системы равна разности потоков СМА и вакансий на дислокации или, что эквивалентно, разности потоков вакансий и СМА на поры:

$$\dot{S} = \frac{dS}{d\phi} = \frac{dS}{d(Gt)} = \frac{1}{G} \sum_{k=1}^{\infty} (I_D^+(k) - I_D^-(k)) \quad (4.20)$$

Здесь $\phi = Gt$ — доза радиационного повреждения (число созданных облучением френкелевских пар на атом — фпна — за время t). Подставляя (4.19) в (4.20), получим

$$\dot{S} = \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{k_{k+,D}^2}{k_{k+,D}^2 + k_{k+,V}^2} \eta^{k+} - \frac{k_{k-,D}^2}{k_{k-,D}^2 + k_{k-,V}^2} \eta^{k-} \right). \quad (4.21)$$

Введем упрощающие предположения: 1) под действием повреждающего облучения в материале образуются только моновакансии; 2) поры являются нейтральными стоками для всех РД, для всех типов дефектов их сила стока равна k_v^2 . Первое упрощение оправдано, т.к. значительно больше половины вакансий в каскадах атомных столкновений формируются в виде моновакансий, а также потому что энергии связи небольших вакансионных кластеров малы, и в процессе диффузии к стокам они относительно быстро диссоциируют и большую часть пути будут добираться до стоков в виде моновакансий. Второе упрощение оправдано для пор большого размера. Помимо этого, введем обозначение $D_k = 1 - k_{1-,D}^2 / k_{k+,D}^2$ — дислокационный преференс для кластеров СМА размером k относительно моновакансий. С учетом этих упрощений и новых обозначений (4.21) примет вид

$$\dot{S} = \frac{k_V^2}{k_{1-,D}^2 + k_V^2} \sum_{k=1}^{\infty} D_k \eta^{k+} \frac{k_{k+,D}^2}{k_{k+,D}^2 + k_V^2}. \quad (4.22)$$

Из (4.22) видно, что скорость распухания максимальна, когда силы стока дислокаций и пор примерно равны. Положим $k_{1-,D}^2 = k_V^2$, тогда из (4.22) получим

$$\dot{S}_{\max} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{D_k}{2 - D_k} \eta^{k+}, \quad (4.23)$$

или

$$\dot{S}_{\max} = \frac{1}{2} \frac{D_1}{2 - D_1} + \frac{1}{2 - D_1} \sum_{k=2}^{\infty} \frac{D_k - D_1}{2 - D_k} \eta^{k+}. \quad (4.24)$$

Из последнего соотношения видно, что если $D_k - D_1 > 0$, то образование кластеров СМА размером k под облучением увеличивает скорость распухания, и наоборот. Рассмотрим внимательнее разность $D_k - D_1$:

$$D_k - D_1 = \frac{k_{1-,D}^2}{k_{1+,D}^2} - \frac{k_{1-,D}^2}{k_{k+,D}^2} = k_{1-,D}^2 \left(\frac{1}{k_{1+,D}^2} - \frac{1}{k_{k+,D}^2} \right). \quad (4.25)$$

Из (4.25) видно, что если $D_k - D_1 > 0$, то $k_{k+,D}^2 / k_{1+,D}^2 > 1$, и наоборот.

Если облучение создает только одиночные СМА и димежузлия, формула (4.24) преобразуется в

$$\dot{S}_{\max} = \frac{1}{2} \frac{D_1}{2 - D_1} + \frac{D_2 - D_1}{(2 - D_1)(2 - D_2)} \eta^{2+}. \quad (4.26)$$

На рис. 4.5 *а, в, г* приведены зависимости (4.26) в Fe, V, Cu для рассмотренных типов дислокаций при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ и $T = 500\text{К}$ (численные значения параметров сведены в табл. 4.4). Скорость распухания материала значительно меняется с ростом η^{2+} . Наклон графиков всюду положительный за одним исключением – случай, когда в кристалле V содержатся только дислокации ВД1 (рис. 4.5 *в*). Это обусловлено выполнением неравенства для данного типа дислокаций $\psi = k_{2+,D}^2 / k_{1+,D}^2 < 1$ (рис. 4.3 *г, 4.4 г*), в соответствии с обсуждением выше. Для кристалла Cu при $\eta^{2+} = 0$ скорость распухания отрицательна, если кристалл

содержит только дислокации типа ВДЗ, как было показано в [21], но с ростом η^{2+} скорость распухания становится положительной при $\eta^{2+} = 0,39$ (рис. 4.5 з).

Таблица 4.4. Параметры зависимости (30) максимальной скорости распухания \dot{S}_{\max} от η^{2+} (w и u – линейный и свободный члены соответственно) для разных дислокаций в Fe, V, Cu

Дислокация	Fe		V		Cu	
	w , %/фпна	u , %/фпна	w , %/фпна	u , %/фпна	w , %/фпна	u , %/фпна
КД1	11,78	20,29	15,43	9,257	—	—
КД2	11,67	20,62	15,18	9,243	—	—
КД3	11,98	22,02	13,37	10,54	—	—
КД4	12,25	22,63	14,88	10,14	—	—
КД5	—	—	—	—	10,60	10,38
КД6	—	—	—	—	10,88	8,372
СД1	—	—	—	—	10,59	8,710
ВД1	8,354	7,520	-4,051	3,816	—	—
ВД2	10,68	8,634	8,959	4,497	—	—
ВД3	—	—	—	—	17,02	-6,644

4.8 Влияние образования димежузлий на радиационную ползучесть кристаллов под действием повреждающего облучения

Ранее в [22] на основе уравнений баланса РД (учитывались только одиночные СТД) были получены аналитические выражения для скорости деформации ползучести $\dot{\epsilon} = d\epsilon / d\phi = G^{-1} d\epsilon / dt$ в направлении приложенной нагрузки σ (по механизму ползучести «stress-induced diffusion anisotropy», являющемуся основным при малых внешних напряжениях [143]) для частных случаев нагружения в ОЦК- и ГЦК-кристаллах — направления одноосных нагрузок $\langle 111 \rangle$,

$\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ при равномерном распределении направлений и векторов Бюргерса дислокаций по семействам кристаллографических направлений (отсутствие в кристалле текстуры). Рассматривались только дислокации с $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ и $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$ в ОЦК-кристаллах и $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ в ГЦК-кристаллах, поскольку в соответствии с энергетическим критерием Франка [103] в ОЦК- и ГЦК-кристаллах могут существовать только такие полные дислокации. В железе из-за высокого показателя упругой анизотропии (меняется от 2,32 при 4,2 К до 7,44 при 1173 К) энергетический фактор K краевых дислокаций с $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$ заметно ниже, чем для дислокаций с $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$, поэтому энергии таких дислокаций близки несмотря на то, что их вектора Бюргерса имеют разную длину (энергия дислокации пропорциональна Kb^2). Возможно поэтому при высоких дозах облучения (десятки сна и выше) ферритных сплавов и ферритно-мартенситных сталей значительная часть дислокационной микроструктуры (иногда преобладающая) состоит из дислокаций с $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$ [158, 159]. В ванадии показатель упругой анизотропии в разы ниже (табл. 1.1), и в нем не наблюдалось преобладания дислокаций с $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$ ни до, ни после облучения [160, 161]. Ниже приведены полученные в [22] выражения:

$$\dot{\varepsilon} = \sigma \frac{\beta}{27} g \frac{P^+ - P^-}{C_{44}} \text{ для ОЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle), \quad (4.27)$$

$$\dot{\varepsilon} = 0 \text{ для ОЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \langle 100 \rangle), \quad (4.28)$$

$$\dot{\varepsilon} = \sigma \frac{\beta}{72} \left(g_1 \frac{P_n^+ - P_n^-}{C_{44}} + g_2 \frac{P_d^+ - P_d^-}{C_{11} - C_{12}} \right) \text{ для ГЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle). \quad (4.29)$$

где σ — величина приложенной к кристаллу нагрузки, g равно 1, 3/4, 0 для σ вдоль $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ соответственно, g_1 равно 2, 3/2, 0 для σ вдоль $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ соответственно, g_2 равно 0, 1/4, 1 для σ вдоль $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 100 \rangle$ соответственно, $P^- = P_{12}^-$, $P^+ = (P_{23}^+ + P_{13}^+ + P_{12}^+)/3$, $P_n^\pm = P_{12}^\pm/2$, $P_d^+ = 9(P_{11}^+ - P_{33}^+)/16$, $P_d^- = (P_{11}^- - P_{33}^-)/2$, P_{ij}^\pm — компоненты дипольного тензора СТД («+» для СМА и «-» для вакансий) в

седловой конфигурации, отвечающей скачку в направлениях [111] и [110] для ОЦК- и ГЦК-кристаллов соответственно.

Учет в уравнениях баланса (4.13) образования кластеров СТД под облучением приводит к изменению выражений (4.27—4.29):

$$\dot{\varepsilon} = \sigma \frac{\beta}{27} g \frac{\tilde{P}^+ - P^-}{C_{44}} \text{ для ОЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle), \quad (4.30)$$

$$\dot{\varepsilon} = 0 \text{ для ОЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \langle 100 \rangle), \quad (4.31)$$

$$\dot{\varepsilon} = \sigma \frac{\beta}{72} \left(g_1 \frac{\tilde{P}_n^+ - P_n^-}{C_{44}} + g_2 \frac{\tilde{P}_d^+ - P_d^-}{C_{11} - C_{12}} \right) \text{ для ГЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle), \quad (4.32)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{P}^+ &= P^+ \left(1 - \sum_{k=2}^{\infty} \eta^{k+} \right) + \sum_{k=2}^{\infty} P^{k+} \eta^{k+}, \quad \tilde{P}_n^+ = P_n^+ \left(1 - \sum_{k=2}^{\infty} \eta^{k+} \right) + \sum_{k=2}^{\infty} P_n^{k+} \eta^{k+}, \\ \tilde{P}_d^+ &= P_d^+ \left(1 - \sum_{k=2}^{\infty} \eta^{k+} \right) + \sum_{k=2}^{\infty} P_d^{k+} \eta^{k+}, \quad P^{k+} = P_{12}^{k+}, \quad P_n^{k+} = P_{12}^{k+} / 2, \quad P_d^{k+} = (P_{11}^{k+} - P_{33}^{k+}) / 2, \end{aligned}$$

P_{ij}^{k+} — компоненты дипольного тензора эффективной седловой конфигурации кластеров СМА размером k , отвечающей скачку в направлениях [111] и [110] для ОЦК- и ГЦК-кристаллов соответственно.

Поскольку обычно материалы поликристалличны, то в предположении, что в поликристалле нет выделенных ориентаций зерен, возьмем для параметров g , g_1 и g_2 их усредненные значения по направлениям $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$: $g = 1/2$, $g_1 = 1$, $g_2 = 1/2$. Тогда скорость ползучести для поликристаллов имеет вид:

$$\dot{\varepsilon} = \sigma \frac{\beta}{54} \frac{\tilde{P}^+ - P^-}{C_{44}} \text{ для ОЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle), \quad (4.33)$$

$$\dot{\varepsilon} = 0 \text{ для ОЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \langle 100 \rangle), \quad (4.34)$$

$$\dot{\varepsilon} = \sigma \frac{\beta}{72} \left(\frac{\tilde{P}_n^+ - P_n^-}{C_{44}} + \frac{1}{2} \frac{\tilde{P}_d^+ - P_d^-}{C_{11} - C_{12}} \right) \text{ для ГЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle). \quad (4.35)$$

Если облучение создает только одиночные СМА и димежузлия, то $\tilde{P}^+ = P^+(1 - \eta^{2+}) + P^{2+}\eta^{2+}$, $\tilde{P}_n^+ = P_n^+(1 - \eta^{2+}) + P_n^{2+}\eta^{2+}$, $\tilde{P}_d^+ = P_d^+(1 - \eta^{2+}) + P_d^{2+}\eta^{2+}$.

Для удобства выпишем в явном виде численные значения параметров, определяемых компонентами дипольного тензора СМА, димежузлий и вакансий, рассчитанных в [26, 140, 141, 146]: P^{2+} равно 10,32 эВ для Fe и 6,40 эВ для V; P^+ равно 4,53 эВ для Fe и 1,29 эВ для V; P^- равно -1,68 эВ для Fe и -1,20 эВ для V; $P_d^{2+} = -2,69$ эВ, $P_n^{2+} = 7,05$ эВ, $P_d^+ = -0,27$ эВ, $P_n^+ = 1,11$ эВ, $P_d^- = -2,69$ эВ, $P_n^- = -0,38$ эВ для Cu.

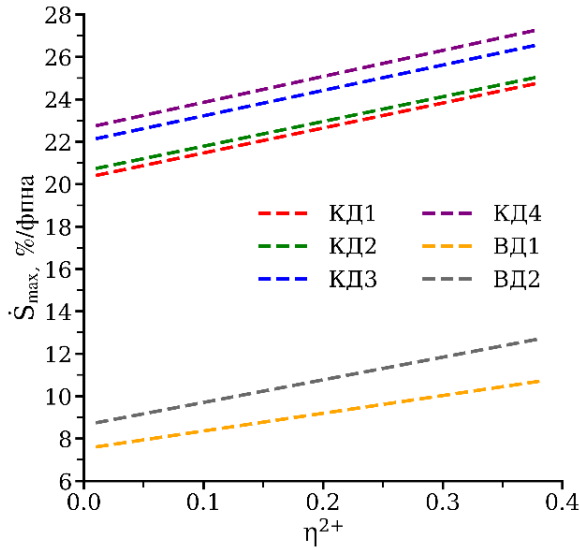
На рис. 4.5 *в, г, е* представлены зависимости скорости ползучести при $\sigma = 100$ МПа от η^{2+} , рассчитанные с использованием соотношений (4.30—4.32) и (4.33—4.35) для монокристалльного и поликристалльного приближений соответственно, для ОЦК-кристаллов Fe и V, содержащих дислокации с $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ кристаллов, и ГЦК-кристалла Cu, содержащего дислокации с $\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle$, при 500 К. Видно, что с ростом η^{2+} от 0 до 0,4 скорость ползучести поликристаллов заметно растет: от 0,22 до 0,30 %/фпна для Fe, от 0,23 до 0,42 %/фпна для V и от 0,15 до 0,21 %/фпна для Cu.

Из выражений (4.31, 4.34) видно, что если все дислокации в ОЦК-кристаллах имеют вектор Бюргерса $\langle 100 \rangle$, то $\dot{\epsilon} = 0$, что коррелирует с наблюдаемой низкой скоростью радиационной ползучести, характерной для ферритно-мартенситных сталей (модуль радиационной ползучести меньше 10^{-6} МПа⁻¹ сн⁻¹ при $305^\circ\text{C} < T < 550^\circ\text{C}$ [162, 163]).

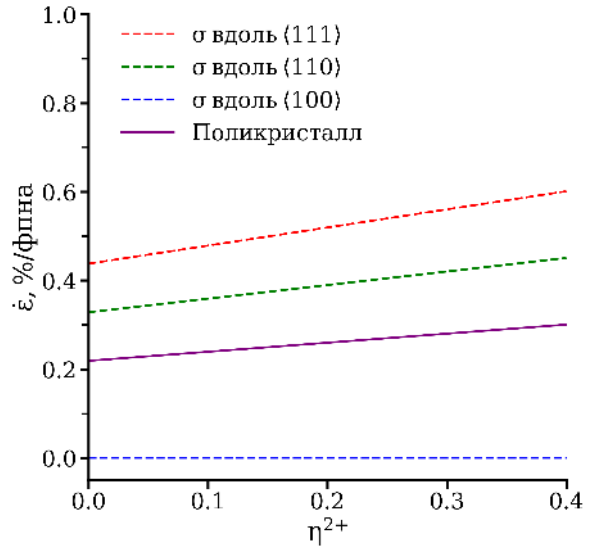
Сравним экспериментально полученные значения [164] по величине радиационной ползучести сплава V-4Ti-4Cr со значениями, получаемыми с помощью (4.33) для V с учетом корректировки для скорости генерации радиационных дефектов связанной с отличием каскадной эффективности от единицы (0,25 для Fe и 0,23 для V при $T \geq 600$ К по данным [106]). В эксперименте [164] испытывались газонаполненные тонкостенные капсулы. Поликристаллический материал отжигался до начала облучения, что оправдывает использование для сравнения соотношения (4.33), полученного для случая отсутствия текстуры в материале. Облучение проводилось в японском реакторе на быстрых нейтронах JOYO до доз 1,8 сн и 5,0 сн при температурах 458°C и 598°C

соответственно и величинах эффективных приложенных напряжений 100, 150 и 200 МПа. При высоких температурах и нагрузках наблюдается влияние других механизмов ползучести кроме переползания дислокаций, обусловленной радиационными дефектами, поэтому сравнение проведем для минимальной температуры (458 °С) и минимального напряжения (100 МПа). При данных условиях величина деформации ползучести составила 0,069 %, что соответствует модулю радиационной ползучести $3,8 \times 10^{-6}$ МПа⁻¹ сн⁻¹. Расчетное значение модуля радиационной ползучести, оцененное с помощью (4.33) с учетом каскадной эффективности, составляет от $3,6 \times 10^{-6}$ МПа⁻¹ сн⁻¹ при $\eta^{2+} = 0$ до $5,1 \times 10^{-6}$ МПа⁻¹ сн⁻¹ при $\eta^{2+} = 0,2$. Отметим, что в ванадии кластеризация СМА относительно невелика, и подавляющая часть повреждаемости сосредоточена в СМА и димежузлиях (68 % в СМА и 19 % в димежузлиях [106]). Кроме того, в соответствии с результатами [116] при $T > 500$ К образовавшиеся димежузлия термически диссоциируют до того, как они доберутся до стоков (см. раздел 2.9). В связи с этим имеет смысл сравнивать экспериментальное значение модуля радиационной ползучести с расчетным значением при $\eta^{2+} = 0$. Видно, что между ними наблюдается хорошее согласие.

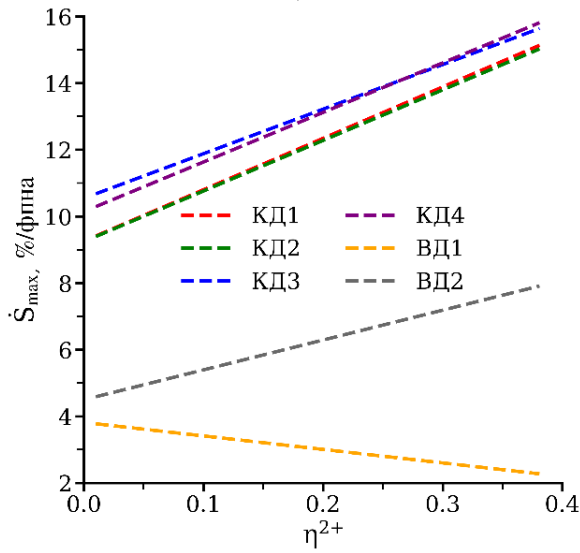
Для меди, в литературе не были найдены экспериментальные данные, которые могли бы быть сравнены напрямую с приведенным расчетными данными.



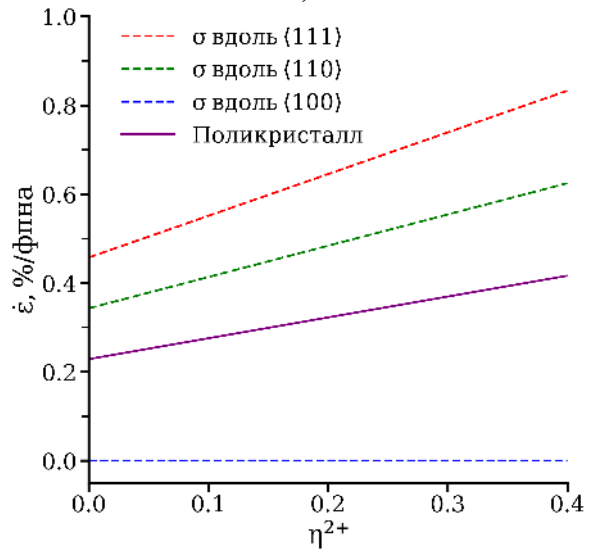
а)



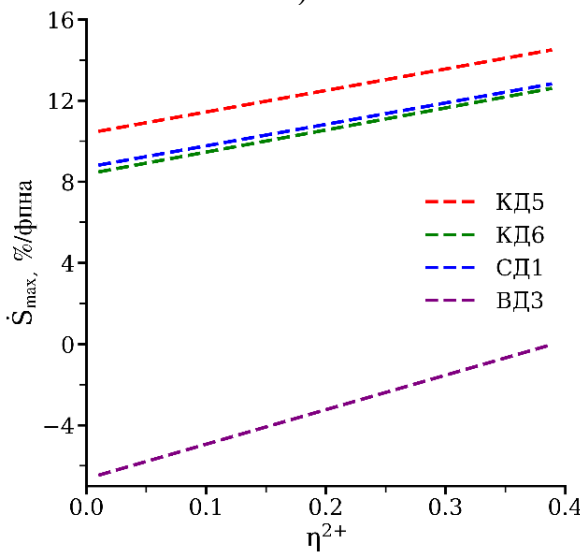
б)



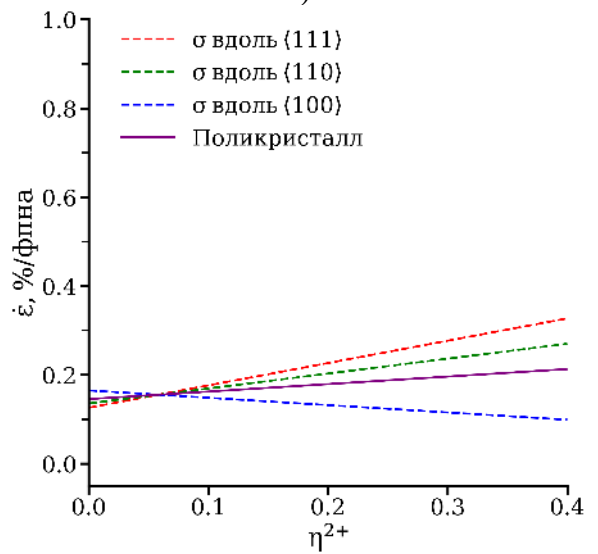
в)



г)



д)



е)

Рисунок 4.5. $\dot{S}_{\max}(\eta^{2+})$ (а, в, д) при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ и $T = 500 \text{ К}$ и $\dot{\epsilon}(\eta^{2+})$ (б, г, е) при $T = 500 \text{ К}$ в Fe (а, б), V (в, г), Cu (д, е)

4.9 Выводы по главе 4

1. Кинетическим методом Монте-Карло рассчитаны эффективности дислокационных стоков для димежузлий в температурном диапазоне 293—1000 К и интервале значений дислокационной плотности $3 \cdot 10^{13}$ — $3 \cdot 10^{14}$ м⁻² в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах. Взаимодействие упругих полей дислокаций с димежузлиями, рассматриваемыми как упругие диполи, рассчитывалось в рамках анизотропной линейной теории упругости. Рассмотрены прямолинейные полные винтовые, краевые и смешанные дислокации в системах скольжения: $\langle 111 \rangle \{110\}$, $\langle 111 \rangle \{112\}$, $\langle 100 \rangle \{100\}$, $\langle 100 \rangle \{110\}$ для Fe и V; $\langle 110 \rangle \{111\}$, $\langle 110 \rangle \{112\}$, $\langle 110 \rangle \{001\}$ в Cu.

2. Получено аналитическое выражение (4.11), аппроксимирующие расчетные зависимости эффективности дислокационных стоков от температуры и дислокационной плотности для рассмотренных типов дислокаций и материалов. Это выражение позволяет определить эффективность ДС для рассмотренных типов дислокаций для любой температуры выше 293 К и дислокационной плотности меньше $3 \cdot 10^{14}$ м⁻². Значения эффективностей ДС для димежузлий могут различаться в разы для разных типов дислокаций и материалов.

3. При $\rho_d = 3 \cdot 10^{14}$ м⁻² отношение эффективностей ДС для димежузлий и СМА для краевых дислокаций лежит в диапазоне 1,5—2,2 в зависимости от системы скольжения, температуры и материала. Для винтовых дислокаций в Fe и V значения такого отношения ниже (0,7—1,7 в зависимости от системы скольжения, температуры и материала), а в Cu — выше (1,6—2,8 в зависимости от температуры).

4. Доля СМА, содержащихся в димежузлиях, которые образуются под повреждающим облучением в кристалле, заметно влияет на скорость вакансионного распухания и радиационной ползучести при неизменной скорости набора повреждающей дозы.

4.1. Если дислокационный преференс для димежузлий больше, чем для СМА, образование димежузлий увеличивает скорость распухания, и наоборот.

Последний случай реализуется для кристалла V, содержащего только винтовые дислокации с вектором Бюргерса $1/2\langle 111 \rangle$. В кристалле Cu увеличение доли СМА, содержащихся в димежузлиях, может изменить знак скорости распухания.

4.2. Сравнение экспериментальных значений модуля радиационной ползучести с расчетными значениями в Fe и V показало их хорошее согласие в области малых нагрузок и невысоких температур (выполняется условие малости тепловой ползучести и консервативного движения дислокаций).

5. Расчетные результаты свидетельствуют о том, что изменение распределения образующихся под облучением РД по кластерам разных размеров могут заметно менять скорость радиационного деформирования кристаллов при неизменной скорости набора повреждающей дозы. Кластерные распределения РД могут зависеть от повреждающей энергии каскадов атомных столкновений, в которых формируются эти РД, а значит и от энергетического спектра налетающих на кристалл частиц, создающих первично выбитые атомы.

Заключение

С помощью разработанной многоуровневой методики определения параметров кластеров собственных межузельных атомов в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах с внутренней структурой, получен ряд результатов, позволяющих уточнить модели радиационного вакансионного распухания материалов под действием повреждающего облучения.

1. Определены энергетические (энергии образования, энергии связи), кристаллографические и диффузионные (коэффициент диффузии дефекта, коэффициент диффузии меченых атомов, корреляционный множитель меченых атомов) характеристики 2-СМА в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах методами молекулярной статики и молекулярной динамики. Определены наиболее энергетически выгодные конфигурации 2-СМА. Рассчитаны температурные зависимости коэффициентов диффузии 2-СМА в температурном диапазоне 150—1000 К для Fe, 200—800 К для V и 300—1200 К для Cu. Полученные температурные зависимости имеют неаррениусовский характер, возникающий из-за существования нескольких механизмов диффузии. Построены аналитические аппроксимации этих зависимостей на основании предложенной кинетической модели диффузии 2-СМА.

2. МД-методом рассчитаны температурные зависимости времени жизни 2-СМА до диссоциации для ОЦК Fe (900—1450 К) и V (650—1100 К) и ГЦК Cu (900—1200К). На основе рассчитанных данных предложены аналитические зависимости, позволяющие экстраполировать полученные данные в область более низких температур. Определены энергии активации диссоциации 2-СМА: 0,98 эВ, 0,60 эВ и 0,88 эВ в Fe, V и Cu соответственно. Для типичных для радиационно-стойких конструкционных материалов значений сил стоков элементов микроструктуры для радиационных дефектов (10^{15} — 10^{16} м⁻²) определены температурные границы, ниже которых большинство 2-СМА поглощается на стоках, не успев продиссоциировать: 690—810 К, 410—500 К, и 630—740 для Fe, V и Cu соответственно.

3. Для ОЦК- и ГЦК-кристаллов, подверженных внешним механическим нагрузкам различного типа (гидростатические, сдвиговые), разработаны методики МД-моделирования диффузии радиационных дефектов и определения по рассчитанным диффузионным траекториям дефектов их диффузионных характеристик: тензора диффузии, частоты и доли скачков в различных кристаллографических направлениях, др. Эти методики использованы для расчета влияния внешних деформаций на диффузионные характеристики 2-СМА в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах в температурном диапазоне 350—800 К. Определены механизмы и кристаллографические особенности диффузии 2-СМА во внешних упругих полях. По рассчитанным деформационным зависимостям тензора диффузии определены упругодиффузионные тензоры 2-СМА и дипольные тензоры эффективных седловых конфигураций 2-СМА в Fe, V, Cu. Полученные результаты позволяют определять тензор диффузии 2-СМА и моделировать их анизотропную диффузию во внешних полях механических напряжений произвольного вида с учетом эффектов как упругой анизотропии кристаллов, так и симметрии кристаллов.

4. Кинетическим методом Монте-Карло рассчитаны эффективности дислокационных стоков для 2-СМА в температурном диапазоне 293—1000 К и интервале значений дислокационной плотности $3 \cdot 10^{13}$ — $3 \cdot 10^{14}$ м² в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах. Взаимодействие упругих полей дислокаций с 2-СМА, рассматриваемыми как упругие диполи, рассчитывалось в рамках анизотропной линейной теории упругости. При дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14}$ м⁻² отношение эффективностей дислокационных стоков для димежузлий и СМА для краевых дислокаций лежит в диапазоне 1,5—2,2 в зависимости от системы скольжения, температуры и материала. Для винтовых дислокаций в Fe и V значения такого отношения ниже (0,7—1,7 в зависимости от системы скольжения, температуры и материала), а в Cu — выше (1,6—2,8 в зависимости от температуры).

5. Доля СМА, содержащихся в 2-СМА, которые образуются под повреждающим облучением в кристалле, заметно влияет на скорость вакансионного распухания при неизменной скорости набора повреждающей дозы.

Если дислокационный преференс для 2-СМА больше, чем для СМА, образование 2-СМА увеличивает скорость распухания, и наоборот. Последний случай реализуется для кристалла V, содержащего только винтовые дислокации с вектором Бюргера $1/2\langle 111 \rangle$. В кристалле Cu увеличение доли СМА, содержащихся в 2-СМА, может изменить знак скорости распухания. Сравнение экспериментальных значений модуля радиационной ползучести с рассчитанными значениями в Fe и V показало их хорошее согласие в области малых нагрузок и невысоких температур (выполняется условие малости тепловой ползучести и консервативного движения дислокаций). Изменение распределения образующихся под облучением СТД по кластерам разных размеров могут заметно менять скорость радиационного деформирования кристаллов при неизменной скорости набора повреждающей дозы.

6. Предложенная в диссертационной работе комбинация методов позволяет моделировать диффузию различных радиационных дефектов (в частности — 2-СМА) в упругих полях, создаваемых элементами микроструктуры и внешними нагрузками, в полной мере учитывая, как упругую анизотропию материалов, так и реальную симметрию кристаллов и их радиационных дефектов. Это дает возможность уточнения параметров феноменологических моделей изменения свойств материалов под повреждающим облучением, сделав их более физически обоснованными за счет учета влияния кластеризации точечных радиационных дефектов, формирующихся в каскадах атомных столкновений.

Рекомендации по использованию результатов. Полученные в работе результаты могут быть использованы для уточнения и лучшего физического обоснования моделей формирования радиационных микроструктур и изменения макросвойств металлов (ползучесть, распухание, упрочнение, др.) под нейтронным повреждающим облучением. Развитый в работе подход по определению эффективного дипольного тензора седловой конфигурации радиационного дефекта с помощью МС- и МД-методов может быть обобщен на другие металлы и сплавы с кубической симметрий кристаллической решетки.

Список сокращений и условных обозначений

АЛТУ — анизотропная линейная теория упругости

ВД — винтовая дислокация

ДС — дислокационный сток

КД — краевая дислокация

КМК — кинетический Монте-Карло

МД — молекулярная динамика

МС — молекулярная статика

ПВА — первично выбитый атом

ПМВ — потенциал межатомного взаимодействия

РД — радиационный дефект

СД — смешанная дислокация

СМА — собственный межузельный атом

СТД — собственный точечный дефект

ТФП — теория функционала плотности

Литература

1. Stoller R.E., Zarkadoula E. 1.20 — Primary Radiation Damage Formation in Solids // Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition). Elsevier. 2020. P. 620—662.
2. Huntington H.B. Mobility of Interstitial Atoms in a Face-Centered Metal // Physical Review. 1953. Vol. 91(5). P. 1092—1098.
3. Hall G.L. Distortion around point imperfections in simple crystals // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1957. Vol. 3(3—4). P. 210—222.
4. Girifalco L., Streetman J. A theoretical calculation of the relaxation of atoms surrounding a vacancy in the body-centered cubic lattice // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1958. Vol. 4(3). P. 182—189.
5. Johnson R.A., Brown E. Point Defects in Copper // Physical Review. 1962. Vol. 127(2). P. 446—454.
6. De la Rubia T., Averback R., Hsieh H. et al. Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Cu and Ni: Thermal spike behavior // Journal of Materials Research. 1989. Vol. 4(3). P. 579—586.
7. Foreman A.J.E., Phythian W.J., English C. A. The molecular dynamics simulation of irradiation damage cascades in copper using a many-body potential // Philosophical Magazine A. 1992. Vol. 5(66). P. 671—695.
8. Calder A.F., Bacon D.J. A molecular dynamics study of displacement cascades in α -iron // J. Nucl. Mater. 1993. Vol. 207. P. 25—45.
9. Phythian W.J., Stoller R.E., Foreman A.J.E. et al. A comparison of displacement cascades in copper and iron by molecular dynamics and its application to microstructural evolution // J. Nucl. Mater. 1995. Vol. 223. P. 245—261.
10. Gao F., Bacon D.J., Flewitt P.E.J. et al. A molecular dynamics study of temperature effects on defect production by displacement cascades in α -iron // J. Nucl. Mater. 1997. Vol. 249. P. 77—86.
11. Osetsky Yu. N., Serra A. Computer simulation of vacancy and interstitial clusters in bcc and fcc metals // J. Nucl. Mater. 1997. Vol. 251. P. 34—48.

12. Marian J., Wirth B.D. Dynamics of self-interstitial cluster migration in pure α -Fe and Fe-Cu alloys // *Physical review B*. 2004. Vol. 65. P. 88—94.
13. Zepeda-Ruiz L.A., Rottler J. Self-interstitial transport in vanadium // *Acta Materialia*. 2005. Vol. 53. P. 1985—1994.
14. Романов В.А., Сивак А.Б., Чернов В.М. Кристаллографические, энергетические и кинетические свойства собственных точечных дефектов и их кластеров в ОЦК железе // *ВАНТ, Сер. Материаловедение и нов. материалы*. 2006. Т. 66. С.129—232.
15. Heinisch H.L., Singh B.N., Golubov S.I. A kinetic Monte Carlo study of mixed 1D/3D defect migration // *J. Comput. Aided Mater. Des.* 1999. Vol. 6. P. 277—282.
16. Theiss S.K., Caturla M.-J., Johnson M.D. et al. Atomic scale models of ion implantation and dopant diffusion in silicon // *Thin Solid Films*. 2000. Vol. 365. P. 219—230.
17. Malerba L., Becquart C.S., Domain C. Object kinetic Monte Carlo study of sink strengths // *J. Nucl. Mater.* 2007. Vol. 360. P.159—169.
18. Chiapetto M., Malerba L., Becquart C.S. Effect of Cr content on the nanostructural evolution of irradiated ferritic/martensitic alloys: An object kinetic Monte Carlo model // *J. Nucl. Mater.* 2015. Vol. 465. P. 326—336.
19. Sivak A.B., Romanov V.A., Chernov V.M. Diffusion of self-point defects in body-centered cubic iron crystal containing dislocations // *Crystallography Reports*. 2010. Vol. 55(1). P. 97—108.
20. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A. et al. Kinetic Monte-Carlo simulation of self-point defect diffusion in dislocation elastic fields in bcc iron and vanadium // *J. Nucl. Mater.* 2011. Vol. 417. P. 1067—1070.
21. Сивак А.Б., Сивак П.А. Эффективность дислокаций как стоков радиационных дефектов в ГЦК-кристалле меди // *Кристаллография*. 2014. Т. 59(3). С. 451—459.
22. Сивак А.Б., Сивак П.А., Романов В.А. и др. Влияние внешних напряжений на эффективность дислокационных стоков в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах // *Перспективные материалы*. 2015. Т. 1. С. 31—40.

23. Subramanian G., Perez D., Uberuaga B.P. et al. Method to account for arbitrary strains in kinetic Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 87. № 144107.
24. Vattre A., Jourdan T., Ding H. et al. Non-random walk diffusion enhances the sink strength of semicoherent interfaces // *Nature Communications*. 2016. Vol. 7. № 10424
25. Carpentier D., Jourdan T., Bouar Y. Le et al. Effect of saddle point anisotropy of point defects on their absorption by dislocations and cavities // *Acta Materialia*. 2017. Vol.136. P. 323—334.
26. Романов В.А., Сивак А.Б., Сивак П.А. и др. Равновесные и диффузионные характеристики собственных точечных дефектов в ванадии // *ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез*. 2012. Т. 35. Вып. 2. С. 60—80.
27. Ackland G.J., Bacon D.J., Calder A.F., Harry T. Computer simulation of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential // *Philos. Mag. A*. 1997. Vol. 75. P. 713—732.
28. Morishita K., Diaz de la Rubia T. A molecular dynamics simulation study of defect production in vanadium // *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 1995. Vol. 396. P. 39—44.
29. Björkas C., Nordlund K. Comparative study of cascade damage in Fe simulated with recent potentials // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*. 2007. Vol. 259. P. 853—860.
30. Björkas C., Nordlund K., Dudarev S. Modelling radiation effects using the ab-initio based tungsten and vanadium potentials // *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*. 2009. Vol. 267. P. 3204—3208.
31. Mendeleev M.I., Han S., Son W., Ackland G.J., Srolovitz D.J. Simulation of the interaction between Fe impurities and point defects in V // *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76. 214105. P. 1—11.
32. Malerba L., Marinica M.C., Anento N. Comparison of empirical interatomic potentials for iron applied to radiation damage studies // *J. Nucl. Mater.* 2010. Vol. 406. P. 19—38.
33. Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A. et al. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 63. № 224106.
34. Сивак А.Б., Романов В.А., Демидов Д.Н. и др. Потенциалы межатомного

- взаимодействия для моделирования каскадов атомных столкновений и собственных точечных дефектов в ОЦК-металлах Fe и V // ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы. 2019. Т. 4 (100). С. 5—24.
35. Nix F.C., MacNair D. The Thermal Expansion of Pure Metals: Copper, Gold, Aluminum, Nickel, and Iron // *Phys. Rev.* 1941. Vol. 60. P. 597—605.
36. Souissi M., Numakura H. Elastic properties of Fe–C and Fe–N martensites // *ISIJ International*. 2015. Vol. 55. No. 7. P. 1512—1521.
37. Vočadlo L., de Wijs G.A., Kresse G. et al First-principles calculations on crystalline and liquid iron at Earth's core conditions // *Faraday Discuss.* 1997. Vol. 106. P. 205—217.
38. Guo G.Y., Wang H.H. Gradient-Corrected Density Functional Calculation of Elastic Constants of Fe, Co and Ni in bcc, fcc and hcp Structures // *Chin. J. Phys. (Taipei)*. 2000. Vol. 38. No 5. P. 949—961.
39. Caspersen K.J., Lew A., Ortiz M. et al Importance of shear in the bcc-to-hcp transformation in iron // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 93. P. 949—961.
40. Sha X., Cohen R.E. First-principles thermoelasticity of bcc iron under pressure // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 74. No 214111. P. 1—6.
41. Zhang H.L., Johansson B., Vitos L. First-principles investigation of technetium carbides and nitrides // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. No 024111. P. 1—5.
42. Shang S.L., Saengdeejing A., Mei Z.G. et al. First-principles calculations of pure elements: Equations of state and elastic stiffness constants // *Comp. Mater. Sci.* 2010. Vol. 48. P. 813—826.
43. Rayne J.A., Chandrasekhar B.S. Elastic constants of iron from 4.2 to 300°K // *Phys. Rev.* 1961. Vol. 122. P. 1714—1716.
44. Bolef D.I., Smith R.E., Miller J.G. Elastic properties of vanadium. I. Temperature dependence of the elastic constants and the thermal expansion // *Phys. Rev. B*. 1971. Vol. 3. P. 4100—4108.
45. Han S., Zepeda-Ruiz L.A., Ackland G.J., Car R., Srolovitz D.J. Interatomic potential for vanadium suitable for radiation damage simulations // *J. Appl. Phys.* 2003. Vol. 93. P. 3328—3335.

46. Nguyen-Manh D., Horsfield A.P., Dudarev S.L. Self-interstitial atom defects in bcc transition metals: Group-specific trends, *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 73. P. 020101(R). P. 1—4.
47. Wollenberger H.J. Point defects / *Physical Metallurgy* (fourth, revised and enhanced edition). Eds. Cahn R.W., Haasen P. Elsevier Science BV, 1996.
48. Maury F., Biget M., Vajda P., Lucasson A., Lucasson P. Anisotropy of defect creation in electron-irradiated iron crystals // *Phys. Rev. B.* 1976. Vol. 14. P. 5303—5313.
49. Domain C., Becquart C.S. Ab initio calculations of defects in Fe and dilute Fe-Cu alloys // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 65. № 024103. P. 1—14.
50. Olsson P., Domain C., Wallenius J. Ab initio study of Cr interactions with point defects in bcc Fe // *Phys. Rev. B.* 2007. Vol. 75. № 014110. P. 1—12.
51. Fu C.-C., Willaime F., Ordejón P. Stability and mobility of mono- and di-interstitials in α -Fe // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. № 175503. P. 1—4.
52. Schepper L.D., Segers D., Dorikens-Vanpraet L et. al. Positron annihilation on pure and carbon-doped α -iron in thermal equilibrium // *Phys. Rev. B.* 1983. Vol 27. P. 5257—5269.
53. Kuramoto E., Yoshida N., Kitajima K. Mechanism of void formation of iron and iron-alloys irradiated by electrons // *Proc. Yamada Conf. V – Point Defects and Defect Interactions in Metals.* Eds. Takamura J., Doyama M. and Kiritani M. University of Tokyo Press, Tokyo. 1982. P. 899—902.
54. Kiritani M. Microstructure evolution during irradiation // *J. Nucl. Mater.* 1994. Vol. 216. P. 220—264.
55. Ma P.-W., Dudarev S.L. Universality of point defect structure in body-centered cubic metals // *Phys. Rev. Mat.* 2019. Vol. 3. № 013605. P. 1—16.
56. Irmer V., Feller-Kniepmeier M. Diffusion of manganese in α -iron single crystals of different purity // *Philos. Mag.* 1972. Vol. 33. Iss. 11. P. 2141—2148.
57. Kučera J., Million B., Růžičková J., Foldyna V., Jakobová A. Self-diffusion of iron in α -phase of iron and Fe-Cr alloys // *Acta Met.* 1974. Vol. 22. P. 135—140.
58. De Schepper L., Knuyt G., Stals L.M. The activation energy for self-diffusion in ferromagnetic α -iron // *J. Phys. Chem. Solids.* 1983. Vol. 44. P. 171—174.

59. Hivert V., Pichon R., Bilder H. et al. Internal friction in low temperature irradiated bcc metals // *J. Phys. Chem. Sol.* 1970. Vol. 31. P. 1843—1855.
60. Schaffer H.E., Butteweg D., Dander W. Defects in high purity iron after 27 K electron irradiation // *Proc. Int. Conf. on Fundamental Aspects of Radiation Damage in Metals, Gatlinburg, 1975.* Eds.
61. Robinson M.T. and Young F.W., Jr. (CONF-751006. Natl. Techn. Inf. Service, Springfield, VA, 22161). P. 463.
62. Tsukuda N., Kitajima K. // *Proc. Yamada Conf. V – Point Defects and Defect Interactions in Metals.* Eds. Takamura J., Doyama M. and Kiritani M. University of Tokyo Press, Tokyo, 1982. P. 172.
63. Chen Z., Kioussis N., Ghoniem N., Seif D. Strain-field effects on the formation and migration energies of self interstitials in α -Fe from first principles // *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 81. № 094102. P. 1—10.
64. Nguyen-Manh D., Dudarev S.L., Horsfield A.P. Systematic group-specific trends for point defects in bcc transition metals: an ab initio study // *J. Nucl. Mater.* 2007. Vol. 367—370. P. 257—262.
65. Janot C., George B., Delcroix P. Point defects in vanadium investigated by Mössbauer spectroscopy and positron annihilation // *J. Phys. F.* 1982. Vol. 12. P. 47—58.
66. Schultz H. In: Ullmaier H. (eds) *Atomic Defects in Metals. Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter (Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology)*, vol 25. Springer, Berlin, Heidelberg, 1991.
67. Takamura S., Okuda S. Recovery of fast neutron irradiated niobium and vanadium at low temperature // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1973. Vol. 35. P. 750—753.
68. Brown B.S., Blewitt T.H., Scott T.L. et. al. Low-temperature fast-neutron radiation damage studies in superconducting materials // *J. Nucl. Mater.* 1974. Vol. 52. P. 215—228.
69. Klabunde C.E., Redman J.K., Sonthern A.L. et. al. Thermal and fission neutron damage in vanadium // *Phys. Stat. Sol. (a).* 1974. Vol. 21. P. 303—307.
70. Vajda P., Biget M. Low-temperature fission neutron damage in vanadium and molybdenum. *Phys. Stat. Sol. (a).* 1974. Vol. 23. P. 251—260.

71. Van Veen A., Eleveld H., Clement M. Helium impurity interactions in vanadium and niobium // *J. Nucl. Mater.* 1994. Vol. 212—215. P. 287—292
72. Peart R.F. Diffusion of V48 and Fe59 in vanadium // *J. Phys. Chem. Solids.* 1965. Vol. 26. P. 1853—1861.
73. Pelleg J. Self-diffusion in vanadium single crystals // *Philos. Mag.* 1974. Vol. 29. P. 383—393.
74. Hayashi T., Fukumoto K., Matsui H. Study of point defect behaviors in vanadium and its alloys by using HVEM // *J. Nucl. Mater.* 2000. Vol. 283—287. P. 234—238.
75. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // *Physical Review B.* 1984. Vol. 29(12). P. 6443—6453.
76. Dunn A.S. Introduction to physical polymer science (2nd edition). By L. H. Sperling, New York, 1992 John Wiley & Sons Inc. John Wiley & Sons Inc., New York, 1992. 594 p.
77. Сивак А.Б., Демидов Д.Н., Сивак П.А. Диффузионные характеристики собственных точечных дефектов в меди: молекулярно-динамическое исследование // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Термоядерный синтез.* 2021. Т. 44. №. 1. С. 106—118.
78. Straumanis M.E., Yu L.S. Lattice parameters, densities, expansion coefficients and perfection of structure of Cu and of Cu—In α phase // *Acta Cryst. A.* 1969. Vol. 25, P. 676—682.
79. Kittel C. Introduction to Solid State Physics // New York: Wiley-Interscience, 1986. 712 p.
80. Overton W.C. Jr., Gaffney J. Temperature variation of the elastic constants of cubic elements. I. Copper // *Phys. Rev.* 1955. Vol. 98. P. 969—977.
81. Van't Klooster P., Trappeniers N.J., Biswas S.N. Effect of pressure on the elastic constants of noble metals from -196 to $+25$ °C and up to 2500 bar. I. Copper // *Physica B.* 1979. Vol. 97. P. 65—75.
82. Hiki Y., Granato A.V. Anharmonicity in noble metals; higher order elastic constants // *Phys. Rev.* 1966. Vol. 144. P. 411—419.

83. Lazarus D. The variation of the adiabatic elastic constants of KCl, NaCl, CuZn, Cu, and Al with pressure to 10,000 bars // *Phys. Rev.* 1949. Vol. 76. P. 545—553.
84. Daniels W.B., Smith C.S. Pressure derivatives of the elastic constants of copper, silver, and gold to 10 000 bars // *Phys. Rev.* 1958. Vol. 111. P. 713—721.
85. Salama K., Alers G.A. Third-order elastic constants of copper at low temperature // *Phys. Rev.* 1967. Vol. 161. P. 673—680.
86. Hofmeister A.M. Pressure derivatives of the bulk modulus // *J. Geophys. Res.* 1991. Vol. 96. P. 21893—21907.
87. Ehrhart P. Atomic defects in metals Cu. — In: Ullmaier H. (ed.). *Atomic Defects in Metals. Landolt-Börnstein — Group III Condensed Matter.* Berlin: Springer-Verlag, 1991. Vol. 25. P. 231—241.
88. Wolfer W.G. 1.01 — Fundamental properties of defects in metals. — In: Konings R.J.M. (ed.). *Comprehensive Nuclear Materials*, Elsevier, 2012, Vol. 1. P. 1—45.
89. Frenkel, D., Smit, B. *Understanding Molecular Simulation.* Elsevier Gezondheidszorg, 2001. 638 p.
90. Heermann D.W. *Computer simulation methods in Theoretical Physics, Second Edition,* Springer Verlag, 1990. 145 p.
91. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // *Phys. Rev.* 1967. Vol. 159. P. 98—103.
92. Демидов Д.Н. Программа для анализа диффузионных траекторий радиационных дефектов «ARDDT» // Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем: Официальный бюллетень Федеральной службы по интеллектуальной собственности (РОСПАТЕНТ). №12. 2019666229.
93. Guinan M.W., Stuart R.N., Borg R.J. Fully dynamic computer simulation of self-interstitial diffusion in tungsten // *Phys. Rev. B.* 1977. Vol. 15. P. 699—710.
94. Osetsky Yu.N. Atomistic study of diffusional mass transport in metals // *Defect and Diffusion Forum.* 2001. Vol. 188—190. P. 71—92.
95. Manning J.R. *Diffusion Kinetics for Atoms in Crystals,* Toronto, Canada: D. Van Nostrand Company, 1968. 257 p.
96. Malerba L., Marinica M.C., Anento N. Comparison of empirical interatomic potentials

for iron applied to radiation damage studies // *J. Nucl. Mater.* 2010. Vol. 406. P. 19—38.

97. Романов В.А., Сивак А.Б., Чернов В.М. Кристаллографические, энергетические и кинетические свойства собственных точечных дефектов и их кластеров в ОЦК-железе. 6. Кластеры собственных межузельных атомов // *ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы.* 2006. Т. 1(66). С. 223—232.
98. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A. Energetic, kinetic and crystallographic characteristics of self-point defects in vanadium and iron crystals // In: *Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA 2007)*. Monterey, California. April, 15—19, 2007. On CD-ROM. American Nuclear Society. LaGrange Park. IL. 2007. P. 1—12.
99. Sivak A.B., Demidov D.N., Sivak P.A. Diffusion characteristics of radiation defects in iron: molecular dynamics data // *PAS&T/TF.* 2021. Vol. 2. P. 148—157.
100. Balbuena J.P., Caturla M.J., Martínez E. Kinetic Monte Carlo Algorithms for Nuclear Materials Applications. In: *Androni W., Yip S. (eds) Handbook of Materials Modeling.* Springer, Cham. 2020. pp. 2193—2214.
101. Bortz A.B., Kalos M.H., Lebowitz J.L. A new algorithm for Monte Carlo simulation of Ising spin systems // *J. Comput. Phys.* 1975. Vol. 17(1). P. 10—18.
102. Dederichs P.H., Schroeder K. Anisotropic diffusion in stress fields // *Phys. Rev. B.* 1978,. Vol. 17. P. 2524—2436.
103. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of Dislocations*, New York: Wiley, 1982, 857 p.
104. Kröner E. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen // *Rational Mech. An.* 1959/60. Vol. 4. P. 273—334.
105. Indenbom V.L., Chernov V.M. Thermally activated glide of a dislocation in a point defect field. In [2]. P. 517—570.
106. Сивак А.Б., Демидов Д.Н., Зольников К.П. и др. Первичная радиационная повреждаемость в ОЦК-металлах Fe и V: анализ молекулярно-динамических данных // *ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы.* 2019. Т. 4(100). С. 25—57.

107. Shpanskiy Yu.S., the DEMO-FNS project team. Progress in the design of the DEMO-FNS hybrid facility // Nuclear Fusion. 2019. Vol. 59. P. 1—8.
108. Gao F., Bacon D.J., Osetsky Yu.N., et. al. Properties and evolution of sessile interstitial clusters produced by displacement cascades in α -iron // J. Nucl. Mater. 2000. Vol. 276. P. 213—220.
109. Osetsky Yu.N., Bacon D.J., Serra A. et. al. One-dimensional atomic transport by clusters of self-interstitial atoms in iron and copper // Philos. Mag. 2003. Vol. 83. P. 61—91.
110. Terentyev D.A., Klaver T.P. et. al. Self-trapped interstitial-type defects in iron // Phys. Rev. Letters. 2007. Vol. 100. № 145503. P. 1—7.
111. Terentyev D.A., Malerba L., Hou M. Dimensionality of interstitial cluster motion in bcc-Fe // Phys. Rev., 2007, Vol. 75, № 104108, P. 1—13
112. Сивак А.Б., Романов В.А., Чернов В.М. Диффузионные характеристики собственных точечных дефектов в ОЦК-железе // Перспективные материалы. 2009. № 6. С. 5—11.
113. Anento N., Serra A., Osetsky Yu.N. Atomistic study of multimechanism diffusion by self-interstitial defects in α -Fe // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2010. Vol. 18. № 025008. P. 1—18.
114. Malerba L., Ackland G.J. et.al. Ab initio calculations and interatomic potentials for iron and iron alloys: achievements within the FP6/perfect project // J. Nucl. Mater. 2010. Vol. 406. P.7—18.
115. Ryabov V.A., Pechenkin V.A. et. al. Contribution of di-SIA to mass transport in Fe—Cr alloys // J. Nucl. Mater. 1997. Vol. 472. P. 43—46.
116. Демидов Д.Н., Сивак А.Б., Сивак П.А. Термическая диссоциация димежузлий в ОЦК Fe и V: Молекулярно-динамическое исследование // ВАНТ, Сер. Термоядерный синтез. 2019. Т. 42. № 2. С. 99—107.
117. Демидов Д.Н., Сивак А.Б., Сивак П.А. Кристаллографические, энергетические и диффузионные характеристики димежузлий в ОЦК-металлах Fe и V // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2019. Т. 42. вып. 3. С. 85—96.

118. Morishita K., Diaz de la Rubia T., Kimura, A. Mobility of self-interstitial atom clusters in vanadium, tantalum and copper // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2001, Vol. 180(1—4), P. 66—71.
119. Zhang P., Wei M., Li Y. et al. Interactions of solute atoms with self-interstitial atoms/clusters in vanadium: A first-principles study // J. Nucl. Mater. 2021. Vol. 553. № 153055.
120. Zepeda-Ruiz L.A., Rottler J., Wirth B. D., et al. Self-interstitial transport in vanadium // Acta Materialia. Vol. 53(7). P. 1985—1994.
121. Dudarev S.L. The non-Arrhenius migration of interstitial defects in bcc transition metals // C. R. Physique. 2008. Vol. 9. P. 409—417.
122. Ackland G.J., Mendeleev M.I., Srolovitz D.J. et al. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron // J. Phys.: Condens. Matter. 2004. Vol. 16. P. 2629—2642.
123. Osetsky Yu.N., Mikhin A.G., Serra A. Study of copper precipitates in α -iron by computer simulation I. Interatomic potentials and properties of Fe and Cu // J. Nucl. Mater. 1994. Vol. 212—215. P. 236—240.
124. Wiedersich H. On the theory of void formation during irradiation, Radiat. Eff. 1972. Vol. 12. P. 111—125.
125. Brailsford A.D., Matthews J.R., Bullough R. The effect of recombination on sink strengths in the rate theory of void-swelling // J. Nucl. Mater. 1979. Vol. 79. P. 1—13
126. Barashev A.V., Golubov S.I., Trinkaus H. Reaction kinetics of glissile interstitial clusters in a crystal containing voids and dislocations // Philos. Mag. A. 2001. Vol. 81. P. 2515—2532.
127. S.J. Zinkle, L.L. Snead. Designing radiation resistance in materials for fusion energy // Ann. Rev. Mat. Res. 2014. Vol. 44. P. 241—267.
128. Vershinina T., Leont'eva-Smirnova M. Dislocation density evolution in the process of high-temperature treatment and creep of EK-181 steel // Mater. Charact. 2017. Vol. 125. P. 23—28.

129. Saralidze Z.K. Radiational growth due to diffusional anisotropy // *At. Energy*. 1978. Vol. 45. P. 697—700.
130. Saralidze Z.K. Indenbom V.L. Chapter 12—Dislocations in irradiated crystals. In *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*. Eds. Elsevier Science Publishers B.V.: Amsterdam, The Netherlands. 1992. Vol. 31. P. 699—744.
131. Sivak A.B., Sivak P.A., Romanov et al. Effect of external stresses on efficiency of dislocation sinks in BCC (Fe, V) and FCC (Cu) crystals // *Inorg. Mater. Appl. Res.* 2015. Vol. 6. P. 466—472.
132. Leibfried G., Breuer N. Point Defects in Metals I. In *Springer Tracts in Modern Physics*. Springer: Berlin/Heidelberg. Germany. 1978. Volume 81. 287 p.
133. Dederichs P.H., Lehmann C., Schober H.R. et al. Lattice theory of point defects // *J. Nucl. Mater.* 1978. Vols. 69—70. P. 176—199.
134. Schober H.R., Ingle K.W. Calculation of relaxation volumes, dipole tensors and Kanzaki forces for point defects // *J. Phys. F Met. Phys.* 1980. Vol. 10. P. 575—581.
135. Simonelli G., Pasianot R., Savino. E.J. Point-defect computer simulation including angular forces in bcc iron // *Phys. Rev. B*. 1994. Vol. 50. P. 727—738.
136. Sivak A.B., Romanov V.A., Chernov, V.M. Influence of stress fields of dislocations on formation and spatial stability of point defects (elastic dipoles) in V and Fe crystals // *J. Nucl. Mater.* 2003. Vol. 323. P. 380—387.
137. Puls, M.P.; Woo, C.H. Diaelastic polarizabilities due to vacancies and interstitials in metals // *J. Nucl. Mater.* 1986. Vol. 139. P. 48—59.
138. Clouet E., Garruchet S., Nguyen H. et al. Dislocation interaction with C in α -Fe: A comparison between atomic simulations and elasticity theory // *Acta Mater.* 2008. Vol. 56. P. 3450—3460.
139. Ma P.-W., Dudarev S.L. Nonuniversal structure of point defects in face-centered cubic metals // *Phys. Rev. Mater.* 2021. Vol. 5. № 013601.
140. Демидов Д.Н., Сивак А. Б., Сивак П. А. Диффузия димежузлий в ОЦК-металлах Fe и V, подверженных внешним нагрузкам разных типов // *Физика Металлов и Металловедение*. 2021. Т. 122(11). С. 1164—1170.

141. Demidov D.N., Sivak A.B., Sivak P.A. New Method for Calculation of Radiation Defect Dipole Tensor and Its Application to Di-Interstitials in Copper // *Symmetry*. 2021. Vol. 13. P. 1154.
142. *Physics of radiation effects in crystals*. Eds. Johnson R.A. and Orlov A.N. Amsterdam: Elsevier. 1986. 723 p.
143. *Elastic strain fields and dislocation mobility*. Eds. Indenbom V.L. and Lothe J. Amsterdam: Elsevier, 1992. 778 p.
144. Слезов В.В., Субботин А.В., Осмаев О.А. Эволюция микроструктуры в облучаемых материалах // *ФТТ*. 2005. Т. 47. С. 463—468.
145. Воеводин В.Н., Неклюдов И.М. Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов. — Киев: Наукова думка, 2006. 376 с.
146. Sivak A.B., Chernov V.M., Dubasova N.A., Romanov V.A. Anisotropy migration of self-point defects in dislocation stress fields in BCC Fe and FCC Cu // *J. Nucl. Mater.* 2007. Vol. 367—370. P. 316—321.
147. Wolfer W.G. The dislocation bias // *J. Computer-Aided Mater. Des.* 2007. Vol. 14. P. 403—417.
148. Brailsford A.D., Bullough R., Hayns M.R. Point defect sink strengths and void-swelling // *J. Nucl. Mater.* 1976. Vol. 60. P. 246—256.
149. Caturla M. J., Soneda N., Alonso E. et al. Comparative study of radiation damage accumulation in Cu and Fe // *J. Nucl. Mater.*, 2000. Vol. 276. P. 13—21.
150. Caturla M.J., Soneda N., Diaz de la Rubia T. Kinetic Monte Carlo simulations applied to irradiated materials: The effect of cascade damage in defect nucleation and growth // *J. Nucl. Mater.* 2006. Vol. 351. P. 78—87.
151. Stoller R.E., Golubov S.I., Domain C., Becquart C.S. Mean field rate theory and object kinetic Monte Carlo: A comparison of kinetic models // *J. Nucl. Mater.* 2008. Vol. 382. P. 77—90.
152. Сивак А.Б., Сивак, П.А., Романов В.А. и др. Эффективность дислокационных стоков для собственных точечных дефектов в кристаллах железа и ванадия // *Перспективные материалы*. 2014. Т. 10. С. 5—16.

153. Сивак А.Б., Сивак П.А., Романов В.А. и др. Взаимодействие собственных точечных дефектов с малоугловыми границами наклона в железе и ванадии // ВАНТ, сер. Термоядерный синтез. 2015. Т. 38(2). С. 43—50.
154. Косевич А.М. Основы механики кристаллической решетки. М.: Наука, 1972. 280 с.
155. Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в металлах. М.: Мир, 1981. 439 с.
156. Инденбом В.Л., Альшиц В.И., Чернов В.М. Дислокации в анизотропной теории упругости. — В кн.: Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ. Л.: Наука, 1980. С. 23—76.
157. Nichols F.A. On the estimation of sink-absorption terms in reaction-rate-theory analysis of radiation damage // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 75. P. 32—41.
158. Gelles D.S. Void swelling in binary Fe-Cr alloys at 200 dpa // J. Nucl. Mater. 1995. Vol. 225. P. 163—174.
159. Gelles D.S. Microstructural examination of commercial ferritic alloys at 200 dpa // J. Nucl. Mater. 1996. Vol. 233—237. P. 293—298.
160. Gelles D.S., Stubbins J.F. Microstructural development in irradiated vanadium alloys // J. Nucl. Mater. 1994. Vol. 212—215. P. 778—783.
161. Ohnuki S., Gelles D.S., Loomis B.A., Garner F.A., Takahashi H., Microstructural examination of simple vanadium alloys irradiated in the FFTF/MOTA // J. Nucl. Mater. 1991. Vol. 179—181. P. 775—778.
162. Porollo S.I., Konobeev Y.V., Ivanov A.A., Shulepin S.V., Leont'eva-Smirnova M.V., Nikolaeva N.S. Swelling and radiation creep of ferrite-martensite steel irradiated in the BN-350 reactor in a wide range of temperature and damaging dose // At. Energy. 2016. Vol. 120. P. 189—198.
163. Toloczko M.B., Garner F.A., Eiholzer C.R. Irradiation creep and swelling of the US fusion heats of HT9 and 9Cr-1Mo to 208 dpa at ~ 400°C // J. Nucl. Mater. 1994. Vol. 212—215. P. 604—607.
164. Fukumoto K., Narui M., Matsui H. et. al. Environmental effects on irradiation creep behavior of highly purified V-4Cr-4Ti alloys (NIFS-Heats) irradiated by neutrons // J. Nucl. Mater. 2009. Vol. 386—388. P. 575—578.