

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.)

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2022

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт»)

Научный руководитель: **Сивак Александр Борисович**
кандидат физико-математических наук,
начальник расчетно-теоретической лаборатории
Курчатовского комплекса термоядерной
энергетики и плазменных технологий
НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва.

Официальные оппоненты: **Козлов Александр Владимирович**
доктор технических наук, эксперт отдела
научно-инновационного развития
АО «Институт реакторных материалов»,
г. Заречный;

Хомяков Олег Владимирович
кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник,
АО «Высокотехнологический научно-
исследовательский институт неорганических
материалов имени академика А.А. Бочвара»,
г. Москва.

Ведущая организация: ФГБУН Институт физики прочности и
материаловедения Сибирского отделения РАН,
г. Томск.

Защита состоится 28 апреля 2022 г. в 15 ч. 00 мин. на заседании диссертационного совета 02.1.003.01 на базе Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» по адресу: 123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д.1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ «Курчатовский институт» и на сайте <https://www.nrcki.ru>.

Автореферат разослан «___» _____ 2022 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета:
02.1.003.01, к.ф.-м.н.



В.А. Демин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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 затруднено 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 (распухание, ползучесть) 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, 25].

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 димежузлиями (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 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 МС-методом 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 дипольного тензора эффективной седловой конфигурации радиационного дефекта 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, 2019 г., 2021 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), 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 страниц с 18 рисунками и 23 таблицами. Список литературы содержит 164 наименования.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

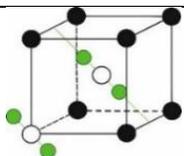
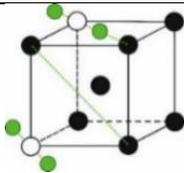
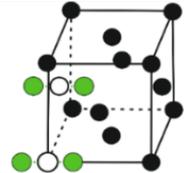
В **первой главе** сделан обзор используемых в диссертационной работе методов многоуровневого моделирования и компьютерных моделей, позволяющих рассчитывать энергетические, кристаллографические, диссоциативные и диффузионные характеристики кластеров СТД при различных температурах и при наличии/отсутствии 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.

Во **второй главе** для кластеров СМА различных размеров (содержащих до пяти СМА) в ОЦК (Fe и V) и ГЦК (Cu) кристаллах, не подверженных внешним нагрузкам, методами молекулярной статики (МС) и молекулярной динамики (МД) определены характеристики: кристаллографические (пространственные конфигурации стабильных и метастабильных

конфигураций, их элементы симметрии), энергетические (энергии образования E^F , энергии связи E^B), диффузионные (коэффициент диффузии D , корреляционный множитель меченых атомов f^{tr} , средняя длина диффузионного пробега до смены направления диффузии l_{ch} , частота смен направлений диффузии ν^R), диссоциативные (время жизни $\langle \tau \rangle$, средний пробег до диссоциации ζ , энергии активации диссоциации). Температурные диапазоны моделирования диффузии: 150—1000 К, 200—800 К, 300—700 К для Fe, V и Cu соответственно. Рассчитаны зависимости силы стока сферических поглотителей k^2 для кластеров СМА различного размера от величины l_{ch} для ОЦК кристаллов кинетическим методом Монте-Карло (КМК) без учета дальнедействующего взаимодействия поглотителей с кластерами и проведен анализ влияния степени одномерности диффузии кластеров на силы стока.

В табл. 1 приведены характеристики наиболее энергетически выгодных конфигураций 2-СМА в Fe, V и Cu: пространственные конфигурации, энергии образования и энергии связи.

Таблица 1. Пространственные конфигурации и энергетические параметры наиболее энергетически выгодных конфигураций 2-СМА в Fe, V и Cu.

	Расстояние между двумя СМА	Конфигурация	Энергии образования E^F и энергии связи E^B , эВ
Fe	1-БС		$E^F = 7,884$ $E^B = 0,884$
V	3-БС		$E^F = 5,819$ $E^B = 0,511$
Cu	1-БС		$E^F = 5,264$ $E^B = 0,830$

В Fe и V обнаружены конфигурации 2-СМА, у которых три атома, находящихся в одной ячейке Вигнера—Зейтца (0-БС), образуют равносторонний треугольник со сторонами, параллельными направлениям типа $\langle 112 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ в Fe и V соответственно. Их энергии образования выше энергий образования стабильных конфигураций 2-СМА на 0,12 и 0,06 эВ в Fe и V соответственно. Относительно частое образование указанных

конфигураций оказывает заметное влияние на коэффициент диффузии 2-СМА, так как 2-СМА в таких конфигурациях не способны перемещаться, а доля времени, в течение которого 2-СМА проводит в данной конфигурации, может составлять до 9%. Наличие таких конфигураций приводит к более сложным механизмам диффузии 2-СМА в Fe и V по сравнению с 2-СМА в Cu.

Рассчитанные температурные зависимости коэффициента диффузии D и корреляционного множителя f^{tr} 2-СМА для Fe, V, Cu представлены на рис. 1.

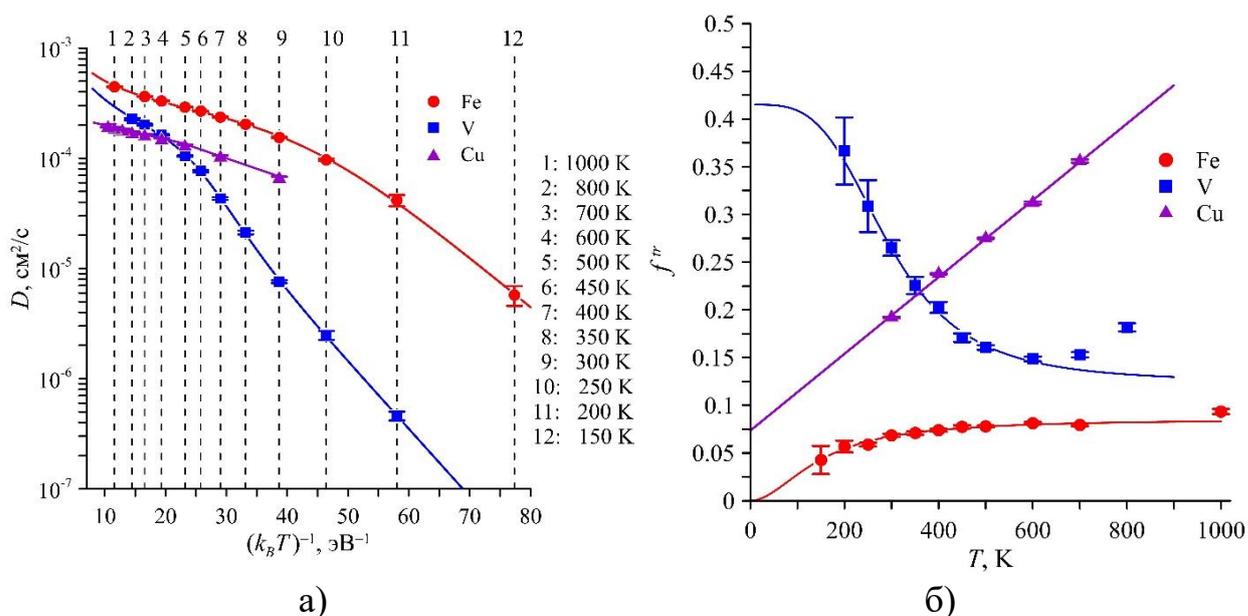


Рисунок 1. Температурные зависимости коэффициента диффузии 2-СМА D (а) и температурные зависимости корреляционного множителя f^{tr} (б) в Fe, V, Cu. Сплошные линии на зависимостях для коэффициента диффузии — аппроксимации данных теоретическими выражениями

Зависимости $D(T)$ в Fe, V, Cu имеют неаррениусовский характер, а значения f^{tr} изменяются с температурой, что обусловлено наличием различных действующих механизмов диффузии (1D и 3D), чьи вклады в общую подвижность 2-СМА зависят от температуры. Значения корреляционного множителя значительно ниже в Fe по сравнению с V (в 2—4 раза в зависимости от температуры), что говорит о том, что вклад 1D-механизма в подвижность 2-СМА значительно больше в Fe по сравнению с V. Для изучения зависимостей $D(T)$ в Fe и V были разработаны кинетические модели диффузии 2-СМА. Полученные с помощью данных моделей теоретические выражения позволяют с высокой точностью описывать рассчитанные с помощью МД метода зависимости $D(T)$ для Fe и V (рис. 1 а). 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 трёхмерный механизм диффузии начнёт превалировать над одномерным механизмом, а энергия активации процесса стремится к величине 0,14 эВ.

Диффузия димежузлия в Cu носит существенно трёхмерный характер: значения f^{tr} заметно отличны от нуля и растут с температурой (рис. 1 б) от 0,17 при 300 К до 0,36 при 700 К.

МД-методом рассчитаны температурные зависимости среднего времени жизни 2-СМА до диссоциации, получены их аналитические приближения. Определены энергии активации диссоциации 2-СМА: 0,98 эВ, 0,60 эВ, 0,88 эВ в Fe, V и Cu соответственно. В случае типичных для радиационно-стойких конструкционных материалов значений сил стоков элементов микроструктуры для РД (10^{15} — 10^{16} м⁻²), моделирующие расчеты показали, что диссоциация 2-СМА не успевает происходить до их поглощения на стоках при температурах ниже 690—810 К в Fe, 410—500 К в V, 630—740 К в Cu.

МД-моделирование 3-, 4-, и 5-СМА в Fe проводилось в температурных диапазонах 300—1200 К. Определены температурные зависимости их коэффициентов диффузии. С помощью анализа рассчитанных диффузионных траекторий определена средняя длина диффузионного пробега до смены направления диффузии l_{ch} и частота смен направлений диффузии ν^R . Проведено сравнение полученных результатов для кластеров большего размера с 2-СМА и одиночными СМА.

При $T \geq 700$ К значения коэффициентов диффузии СМА и их кластеров в Fe различаются слабо (не более 30%). Значения энергии активации диффузии E^{AD} для всех типов кластеров СМА (0,025—0,051 эВ) в 2—4 раза меньше, чем для СМА (0,101 эВ). При комнатной температуре различие значений D для разных типов дефектов в Fe может превышать порядок величины. При $T \leq 400$ К D для 3- и 5-СМА слабо зависит от T ($E^{AD} \leq 0,01$ эВ). Значения E^{AD} кластеров СМА варьируются от 0,004 эВ для 3-СМА до 0,09 эВ для 4-СМА, что заметно ниже значения для СМА (0,24 эВ).

Для 3-, 4-, 5-СМА преобладает 1D механизм диффузии: l_{ch} с ростом T от 300 К до 1200 К меняется от $283a$ до $10,7a$ для 3-СМА, от $1051a$ до $33,5a$ для 4-СМА, от $1535a$ до $48,7a$ для 5-СМА.

КМК-методом получены зависимости силы стока k^2 сферических поглотителей радиусом $R = 10a$, образующих ромбическую решетку пор с постоянными решетки $125a$, $256a$, $250a$, от l_{ch} для 1-, 2-, 3-, 4-, 5-СМА. 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 $k_{3D}^{-1} \approx 252a$ и $k_{1D}^{-1} = 10396a$. В случае, если $l_{ch} \ll k_{3D}^{-1}$, $k^2 \approx k_{3D}^2$. Аналогично, если $l_{ch} \gg k_{1D}^{-1}$, $k^2 \approx k_{1D}^2$. На основе КМК-данных настоящей работы получено, что k^2 отклоняется от k_{3D}^2 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 .

В третьей главе разработаны методики МД-моделирования диффузии радиационных дефектов в ОЦК и ГЦК кристаллах, подверженных нагрузкам различного типа (гидростатические и сдвиговые), и определения диффузионных характеристик дефектов — тензора диффузии, частоты и доли скачков в различных кристаллографических направлениях, др. — по рассчитанным диффузионным траекториям. Эти методики использованы для расчета влияния однородных деформаций различных типов в диапазоне от -1% до $+1\%$ на перечисленные диффузионные характеристики 2-СМА в ОЦК Fe, V в температурном диапазоне 350—800 К и в диапазоне от $-0,5\%$ до $+0,5\%$ для ГЦК Cu при температуре 500 К. Определены механизмы и кристаллографические особенности диффузии 2-СМА во внешних упругих полях. По деформационным зависимостям тензора диффузии определены упругодиффузионные тензоры 2-СМА и дипольные тензоры эффективных седловых конфигураций 2-СМА в Fe, V, Cu.

Тензор диффузии при малых деформациях ε_{ij} можно записать как степенное разложение по деформациям, ограничившись линейным членом:

$$D_{ij} = D_0 \delta_{ij} + d_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (1)$$

где D_0 — треть следа тензора D_{ij} в отсутствие внешних деформаций, d_{ijkl} — упругодиффузионный тензор, δ_{ij} — символ Кронекера. 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 разложить разными способами. Для наших целей наиболее удобным является разложение (здесь и далее используется кристаллографическая система координат с осями вдоль $\langle 100 \rangle$, если не оговаривается иное):

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{\alpha} V_{ij}^{\alpha}, \quad \alpha = 1 \dots 6 \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} V_{ij}^1 &= \delta_{ij}, \quad V_{ij}^2 = \delta_{i1}\delta_{j1} - \delta_{i2}\delta_{j2}, \quad V_{ij}^3 = \delta_{ij} - 3\delta_{i3}\delta_{j3}, \\ V_{ij}^4 &= \delta_{i1}\delta_{j2} + \delta_{i2}\delta_{j1}, \quad V_{ij}^5 = \delta_{i1}\delta_{j3} + \delta_{i3}\delta_{j1}, \quad V_{ij}^6 = \delta_{i2}\delta_{j3} + \delta_{i3}\delta_{j2}. \end{aligned} \quad (3)$$

Соотношение (1) с учетом (2, 3) запишется как

$$D_{ij} = D_0 \delta_{ij} + d^{(\alpha)} \varepsilon_{\alpha} V_{ij}^{\alpha} \quad (4)$$

Для полного определения d_{ijkl} в кристаллах с кубической симметрией, достаточно рассмотреть всего три определенных схемы нагружения: например, \mathbf{V}^1 , \mathbf{V}^2 , \mathbf{V}^4 . Зная d_{ijkl} , можно определить значения дипольного тензора седловых конфигураций дефекта, позволяющие моделировать диффузию дефектов в неоднородных упругих полях.

Собственные значения тензора d_{ijkl} — $d^{(1)}$, $d^{(2)}$, $d^{(4)}$ — для различных температур были получены путем аппроксимации МД-зависимостей компонент тензора D_{ij} от ε_1 , ε_2 и ε_4 в области малых деформаций (ε_1 , ε_2 и $\varepsilon_4 \in [-0,001; 0,001]$) соотношениями (4). Полученные температурные зависимости собственных значений хорошо описываются аналитическими выражениями: $d^{(\alpha)} = A_{\alpha} \cdot 3D_0\beta$, где $A_1 = -0,05$, $-0,75$, $1,65$ эВ для Fe, V, Cu соответственно, $A_2 = 0$, 0 , $-5,39$ эВ для Fe, V, Cu соответственно, $A_4 = 10,32$, $6,40$, $14,09$ эВ для Fe, V, Cu соответственно, $\beta = 1/k_B T$.

С помощью известных теоретических соотношений, используя ранее определенные величины $d^{(\alpha)}$, можно определить дипольный тензор эффективной седловой конфигурации P_{ij}^s , в который вносят вклад все реальные седловые конфигурации (каждая со своим весом):

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

Знание дипольного тензора седловой конфигурации дефекта позволяет КМК-методом моделировать анизотропную диффузию дефекта в

механических полях, создаваемых внешними нагружениями кристалла и/или внутренними источниками (дислокации, субграницы, др.), учитывая как эффекты упругой анизотропии кристаллов, так и симметрии кристалла.

Для нормированного тензора диффузии $\tilde{D}_{ij} = D_{ij} / D$ в ОЦК и ГЦК кристаллах получены теоретические выражения, описывающие его зависимость от тензора упругих деформаций. Для ненулевых компонент \tilde{D}_{ij} получено (введены обозначения $X = (P_{33}^s - P_{11}^s)\beta\varepsilon_2$, $Y = 2P_{12}^s\beta\varepsilon_4$):

$$\tilde{D}_{12} = \text{th}Y \text{ для деформаций } \mathbf{V}^4 \text{ в ОЦК-кристаллах,} \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{D}_{11} &= \frac{3}{2} \cdot \frac{1 + \text{ch}X + \text{sh}X}{1 + 2\text{ch}X} \\ \tilde{D}_{22} &= \frac{3}{2} \cdot \frac{1 + \text{ch}X - \text{sh}X}{1 + 2\text{ch}X} \\ \tilde{D}_{33} &= \frac{3\text{ch}X}{1 + 2\text{ch}X} \end{aligned} \right\} \text{ для деформаций } \mathbf{V}^2 \text{ в ГЦК-кристаллах,} \quad (6)$$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{D}_{11} = \tilde{D}_{22} &= \frac{3}{2} \cdot \frac{\text{ch}Y + 1}{\text{ch}Y + 2} \\ \tilde{D}_{33} &= \frac{3}{\text{ch}Y + 2} \\ \tilde{D}_{12} &= \frac{3}{2} \cdot \frac{\text{sh}Y}{\text{ch}Y + 2} \end{aligned} \right\} \text{ для деформаций } \mathbf{V}^4 \text{ в ГЦК-кристаллах.} \quad (7)$$

На рис. 2 представлены зависимости \tilde{D}_{12} от величины деформации ε_4 , рассчитанные МД-методом и с помощью формулы (5) для Fe и V (поскольку в случае Fe и V рассмотрено несколько температур, удобно строить графики зависимостей от $\varepsilon_4\beta$, объединив на одной кривой данные для всех рассмотренных температур). На рис. 3 представлены зависимости $\tilde{D}_{11}(\varepsilon_2)$, $\tilde{D}_{22}(\varepsilon_2)$ и $\tilde{D}_{12}(\varepsilon_4)$, рассчитанные МД-методом, а также с помощью выражений (6) и (7). Полученные с помощью определенных компонент P_{ij}^s теоретические выражения (5, 6, 7) с высокой точностью воспроизводят МД-данные в Fe, V и Cu при всех рассмотренных температурах, типах и величинах деформаций.

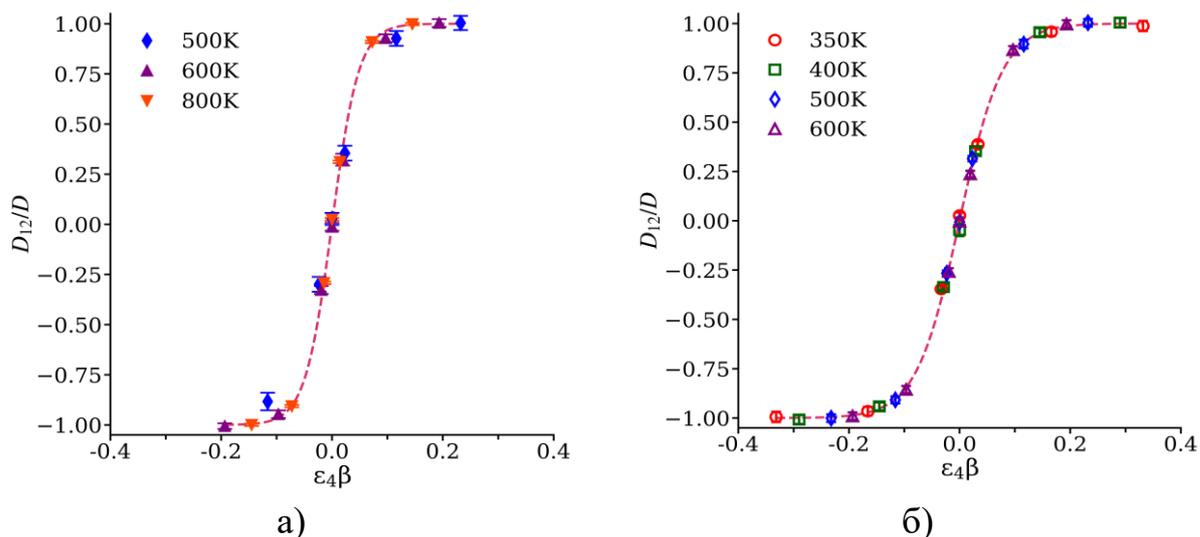


Рисунок 2. Компоненты тензора \tilde{D}_{ij} в зависимости от величин деформаций типа V^4 в Fe (а) и V (б). Символы — МД-данные. Пунктирные линии — выражение (5)

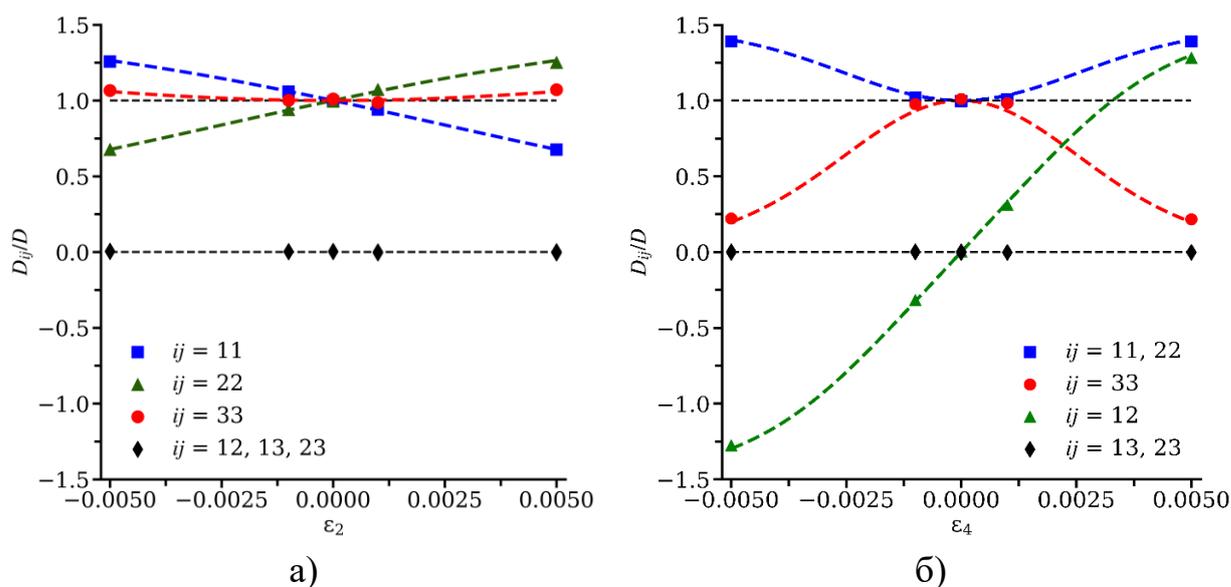


Рисунок 3. Компоненты тензора \tilde{D}_{ij} в зависимости от величин деформаций типа V^2 (а) и V^4 (б). Символы — МД-данные. Пунктирные линии соответствующих символам цветов — выражения (6) и (7)

В четвертой главе кинетическим методом Монте-Карло рассчитаны эффективности дислокационных стоков (эффективность дислокационного стока $\xi = k^2/\rho_d$, где ρ_d — дислокационная плотность, k^2 — сила стока) для 2-СМА в температурном диапазоне 293—1000 К и интервале значений дислокационной плотности $3 \cdot 10^{13}$ — $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ 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. Параметры рассмотренных дислокаций и их обозначения приведены в табл. 2.

Таблица 2. Вектор Бюргерса \mathbf{b} , нормаль к плоскости скольжения \mathbf{n} и направление \mathbf{t} рассмотренных прямолинейных краевых (КД), смешанных (СД) и винтовых (ВД) дислокаций в ОЦК и ГЦК кристаллах.

Кристаллографический класс кристалла	Дислокация	\mathbf{b}	\mathbf{n}	\mathbf{t}
ОЦК	КД1	$1/2[111]$	$[\bar{1}10]$	$[11\bar{2}]$
	КД2	$1/2[111]$	$[11\bar{2}]$	$[\bar{1}10]$
	КД3	$[100]$	$[001]$	$[010]$
	КД4	$[100]$	$[011]$	$[01\bar{1}]$
	ВД1	$1/2[111]$	$[\bar{1}10]$	$[111]$
	ВД2	$[100]$	$[001]$	$[100]$
ГЦК	КД5	$1/2[110]$	$[\bar{1}11]$	$[1\bar{1}2]$
	КД6	$1/2[110]$	$[\bar{1}12]$	$[1\bar{1}1]$
	СД1	$1/2[110]$	$[001]$	$[100]$
	ВД3	$1/2[110]$	$[\bar{1}10]$	$[110]$

Получены аналитические выражения, аппроксимирующие расчетные зависимости эффективности дислокационных стоков от температуры и дислокационной плотности для рассмотренных типов дислокаций и материалов. Эти выражения позволяют определить эффективность ДС для рассмотренных типов дислокаций для любой температуры и дислокационной плотности. 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).

Примеры полученных зависимостей $\xi(T)$ и $\xi(\rho)$, где $\rho = r_0 \sqrt{\pi \rho_d}$, r_0 — радиус поглощения 2-СМА дислокацией, для Fe и Cu представлены на рис. 4. Для сравнения на рис. 4 также приведены расчеты величин ξ в приближении невзаимодействующих линейных стоков (НЛС). Можно видеть, что учет взаимодействия 2-СМА (как упругого диполя) с упругими полями дислокации в разы изменяет величину ξ .

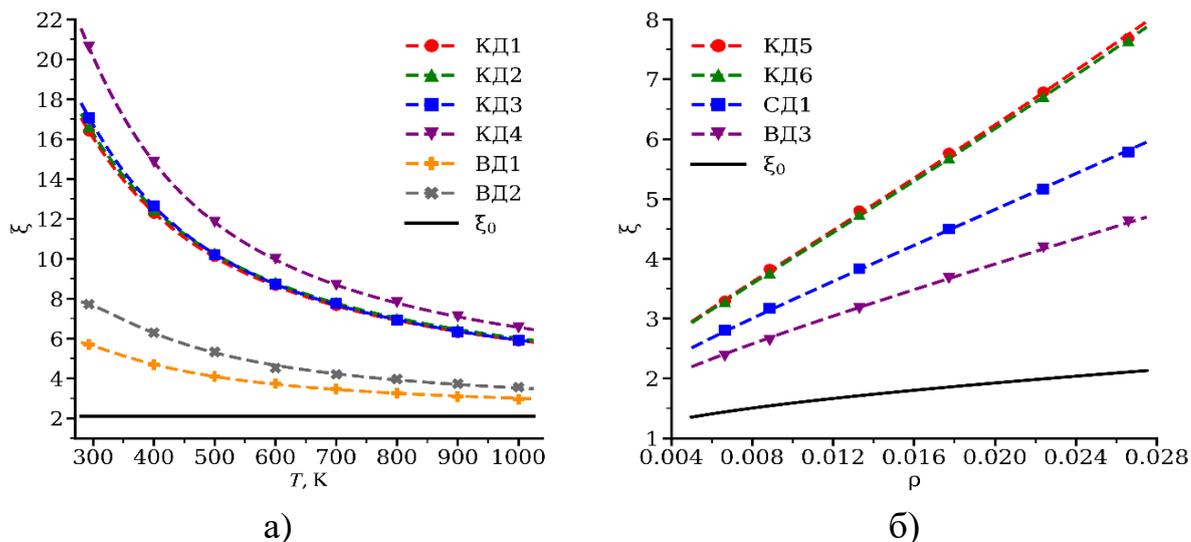


Рисунок 4. Зависимости $\xi(T)$ в Fe, $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ (а); $\xi(\rho)$ в Cu, $T = 500\text{К}$ (б). Пунктирные линии — аналитические аппроксимации. Сплошные линии — эффективность НИС

Влияние кластеризации РД на скорость радиационного вакансионного распухания кристалла, содержащего в качестве стоков РД дислокации и вакансионные поры, можно определить с помощью 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):

$$G^{k\pm} = I^{k\pm}, \quad (8)$$

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 « $k\pm$ » (G — скорость генерации френкелевских пар), $I^{k\pm}$ — поток РД сорта « $k\pm$ » на все стоки РД. Из приведенного уравнения баланса, для максимальной скорости распухания кристалла, содержащего стоки двух сортов — поры и дислокации, можно получить:

$$\dot{S}_{max} = \left(\frac{dS}{d\phi} \right)_{max} = \left(\frac{dS}{d(Gt)} \right)_{max} = \frac{1}{2} \frac{D_1}{2 - D_1} + \frac{D_2 - D_1}{(2 - D_1)(2 - D_2)} \eta^{2+}, \quad (9)$$

где $\phi = Gt$ — доза радиационного повреждения (число созданных облучением френкелевских пар на атом — фпна — за время t), $D_k = 1 - k_{1-,D}^2 / k_{k+,D}^2$ — дислокационный преференс для кластеров СМА размером k относительно моновакансий, η^{2+} — доля СМА, содержащаяся в 2-СМА, от общего числа

создаваемых облучением СМА. Данное выражение получено при упрощающих предположениях, что под действием повреждающего облучения в материале образуются только моновакансии, и что поры являются нейтральными стоками для всех РД. Первое упрощение оправдано, т.к. больше половины вакансий в каскадах атомных столкновений формируются в виде моновакансий, а также потому что энергии связи небольших вакансионных кластеров малы [14, 26], и в процессе диффузии к стокам они быстро диссоциируют и большую часть пути будут добираться до стоков в виде моновакансий. Второе упрощение оправдано для пор большого размера.

Скорость набухания материала значительно меняется с ростом η^{2+} (рис. 5). Наклон графиков всюду положительный за одним исключением – случай, когда в кристалле V содержатся только дислокации ВД1 (рис. 5 а). Для кристалла Cu при $\eta^{2+} = 0$ скорость набухания отрицательна, если кристалл содержит только дислокации типа ВД3, но с ростом η^{2+} знак скорости меняется на противоположный при $\eta^{2+} = 0,39$ (рис. 5 б).

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), в работе были рассчитаны значения $\dot{\epsilon}$ 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 в ОЦК- и ГЦК-кристаллах могут существовать только такие полные дислокации. Ниже приведены полученные на основе аналитических выражений [22] соотношения для скорости деформации ползучести поликристалла, модифицированные с учетом генерации димежузлий:

$$\dot{\epsilon} = \sigma \frac{\beta}{54} \frac{\tilde{P}^+ - P^-}{C_{44}} \text{ для ОЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle), \quad (10)$$

$$\dot{\epsilon} = 0 \text{ для ОЦК-кристаллов } (\mathbf{b} = \langle 100 \rangle), \quad (11)$$

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

Здесь $\tilde{P}^+ = P^+(1 - \eta^{2+}) + P^{2+}\eta^{2+}$, $P^- = P_{12}^-$, $\tilde{P}_n^+ = P_n^+(1 - \eta^{2+}) + P_n^{2+}\eta^{2+}$, $P_n^\pm = P_{12}^\pm / 2$
 $\tilde{P}_d^+ = P_d^+(1 - \eta^{2+}) + P_d^{2+}\eta^{2+}$, $P_d^+ = 9(P_{11}^+ - P_{33}^+) / 16$, $P_d^- = (P_{11}^- - P_{33}^-) / 2$, P_{ij}^\pm —

компоненты дипольного тензора СТД («+» для СМА и «-» для вакансий), C_{11} , C_{12} , C_{44} — упругие постоянные. Расчеты показали, 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 выражения (11) 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 $305^\circ\text{C} < T < 550^\circ\text{C}$ [27]).

Экспериментально полученные значения по величине модуля радиационной ползучести сплава V-4Ti-4Cr для температуры 458°C и напряжения 100 МПа при 200 сн $^{-1}$ составляют $3,8 \times 10^{-6}$ МПа $^{-1}$ сн $^{-1}$ [28]. Расчетное значение модуля радиационной ползучести, оцененное с помощью (10) 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). Кроме того, в соответствии с результатами настоящей работы при $T > 500$ К образовавшиеся димежузлия термически диссоциируют до того, как они доберутся до стоков. 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.

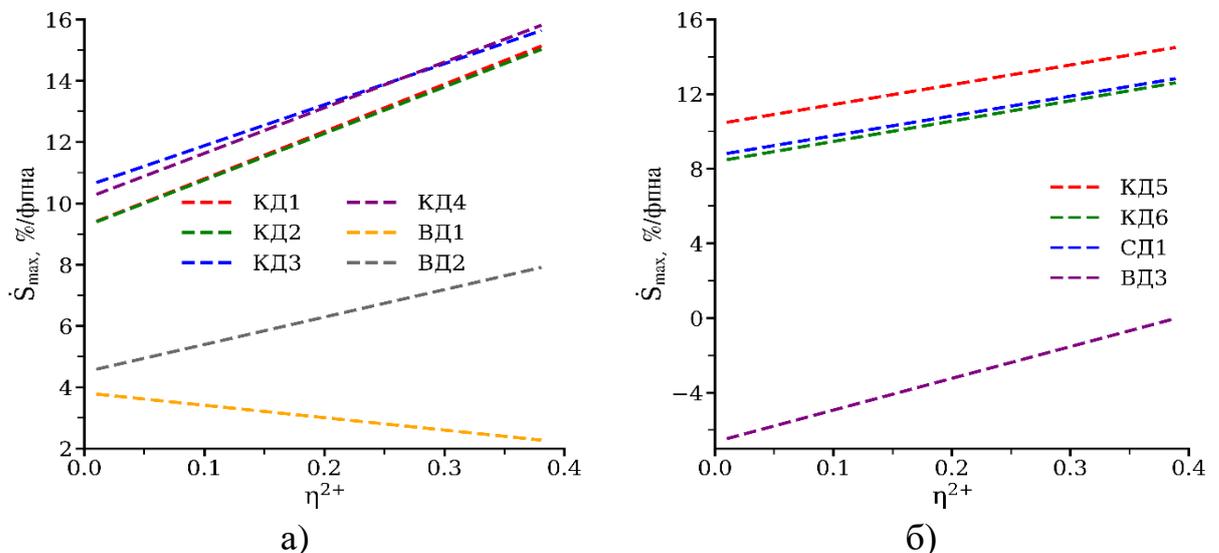


Рисунок 5. Зависимости от η^{2+} максимальной скорости распухания \dot{S}_{\max} при $\rho_d = 3 \cdot 10^{14}$ м $^{-2}$ и $T = 500$ К в V (а) и Cu (б)

Полученные результаты показывают, что доля СМА, содержащихся в 2-СМА, которые образуются под повреждающим облучением в кристалле, заметно влияет на скорость радиационного деформирования 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 Бюргерса $1/2\langle 111 \rangle$. В кристалле Cu увеличение доли СМА, содержащихся в 2-СМА, может изменить знак скорости распухания. Изменение распределения образующихся под облучением РД по кластерам разных размеров могут заметно менять скорость радиационного деформирования кристаллов при неизменной скорости набора повреждающей дозы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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—1200 К). 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 $3 \cdot 10^{13}$ — $3 \cdot 10^{14}$ м⁻² 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 Бюргерса $1/2\langle 111 \rangle$. 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, набухание, упрочнение, др.) под нейтронным повреждающим облучением. Разработанный 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 симметрией кристаллической решетки.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

В рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК:

1. 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. 100(4). С. 5—24.
2. 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.100(4). С. 25—57.
3. Сивак А.Б., Демидов Д.Н., Сивак П.А. Эффективности дислокационных стоков для димежузлий в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) металлах // ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы. 2021. Т.3. С. 30—53.
4. 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.22. №11. С.1164—1170.

В журналах, включенных в библиографические базы данных цитирования Web of Science и Scopus:

5. 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.

6. 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(3). С. 85—96.

7. Shpanskiy Yu. S. and the DEMO-FNS project team (Kuteev B.V., Afanasenko R.S., Ananiev S.S., Demidov D.N. et al.). Progress in the design of the DEMO-FNS hybrid facility // Nuclear Fusion. 2019. Vol. 59. № 076014.

8. Сивак А.Б., Демидов Д.Н., Сивак П.А. Диффузионные характеристики собственных точечных дефектов в меди: молекулярно-динамическое исследование // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2021. Т. 44(1). С. 106—118.

9. Sivak A.B., Demidov D.N., Sivak P.A. Diffusion characteristics of radiation defects in iron: molecular dynamics data // PAS&T/TF. 2021. Vol. 44(2). P. 148—157.

10. 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. №1154.

В других научных изданиях:

11. Свидетельство 2019610138. Программа кластерного анализа пространственных распределений радиационных дефектов «CASDRD»: программа для ЭВМ / Демидов Д.Н. (RU), Сивак А.Б. (RU); правообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» (RU); заявл. 18.12.2018 ; опубл. 10.01.2019, Бюл. № 1. 0,03 Мб.

12. Свидетельство 2021668955. Программа расчета среднего пройденного расстояния радиационными дефектами до смены направления диффузии «MDT1D/3D»: программа для ЭВМ / Демидов Д.Н. (RU), Сивак А.Б. (RU); правообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» (RU); заявл. 10.11.2021; опубл. 22.11.2021, Бюл. № 12. 0,013 Мб.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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 // *Nat. Commun.* 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. 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.100(4). С. 25—57.
27. 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.
28. 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.