

В. Г. Чудинов. Моделирование радиационных процессов на ЭВМ. Дефекты кристаллической структуры, которые образуются при радиационном воздействии в твердом теле, являются основной причиной, приводящей к потери работоспособности конструкционных и топливных материалов в ядерных установках. Наиболее существенные успехи в исследовании характеристик таких дефектов получены методами моделирования на ЭВМ ¹.

В докладе обсуждаются атомарные механизмы зарождения некоторых пространственных дефектов, обнаруженных экспериментально (петель дислокаций вакансионного типа в каскадной области (KO) ², пор и газовых пузырей ³, дислокационных петель межузельного типа ⁴, обедненных зон с концентрацией вакансий $\sim 30-40\%$ ⁵). Обсуждаемые результаты получены автором доклада совместно с В. И. Протасовым методом молекулярной динамики (ММД) ⁶.

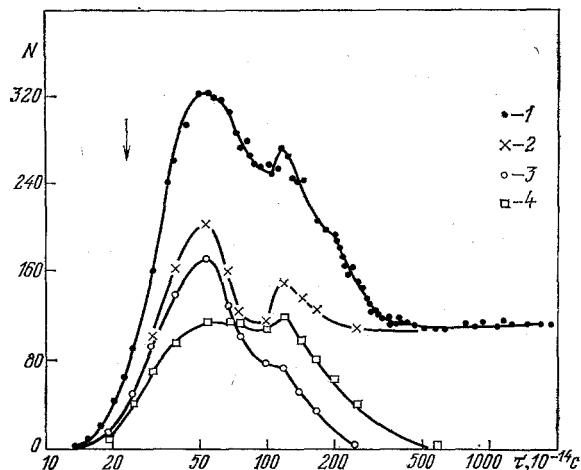
Рассматриваются, главным образом, металлы и соединения из середины периодической системы, облучаемые быстрыми нейтронами.

Показано, что после образования первично выбитого атома (ПВА) и достижения всеми атомами энергии меньше пороговой энергии образования дефектов (ПЭОД), происходит кардинальная перестройка дефектной структуры КО ^{7,8}, которая характеризуется следующими отличительными особенностями:

Во-первых, в условиях значительного возбуждения атомов КО ПЭОД резко уменьшается. За счет этого количество рождающихся в КО дефектов существенно возрастает. На рисунке представлены результаты расчета 5 кэВ каскада в меди. Первой стрелкой отмечено время, к которому все

Зависимость количества дефектов в каскадной области от времени

1 — общее число вакансий, 2 — количество стабильных вакансий; 3 — количество стабильных межузельных атомов; 4 — количество нестабильных пар Френкеля



атомы КО имели энергию меньше ПЭОД (~ 25 эВ). Генерация дефектов завершилась, когда энергия всех атомов была меньше ~ 5 эВ (первый максимум).

Во-вторых, при достижении всеми атомами энергии, меньшей звуковой, наблюдается генерация вакансий и межузельных атомов по безударному, коллективному механизму, т. е. в КО происходит локальное плавление по схеме, предложенной Френкелем ⁹.

В-третьих, на заключительном этапе подпороговой стадии из-за огромных градиентов температур (о них в КО можно говорить только условно), связанных с отводом энергии в окружающую среду, наблюдается направленная диффузия вакансий к центру КО, а межузельных атомов на периферию. За счет диффузии все атомы КО неоднократно изменяют свое месторасположение в кристаллической решетке.

Показано, что в зависимости от времени протекания процессов (оно определяется размерами КО и, следовательно, энергией ПВА и характеристиками среды) могут образовываться скопления вакансий различной формы. Если $\tau \geq 10^{-11}$ с, то вакансии образуют в центре КО пору неправильной формы, которая за счет теплового давления трансформируется в дислокационную петлю Франка вакансионного типа. При $\tau \approx 10^{-12}$ с образуется обедненная зона с повышенной концентрацией вакансий, а при $\tau \approx 10^{-13}$ с (КО порядка 10 \AA) эволюция дефектной структуры отсутствует. Полученные результаты прекрасно коррелируют с экспериментальными данными ^{2,4,5} и находятся в соответствии с двумя другими известными к настоящему времени работами, посвященными близким проблемам ^{10,11}. Все процессы на подпороговых стадиях носят ярко выраженный атермический характер ¹⁵.

Моделирование гомогенного зарождения поры ¹² показало, что в отличие от общепринятой схемы в ГЦК металлах на начальной стадии зарождается скопление вакансий дендритной формы (десятки штук), которые, достигнув определенных размеров, спонтанно трансформируются в пору критического размера. Общая схема зарождения поры: подвижная вакансия — еще более

подвижная дивакансия — дендрит — пора критического размера — рост поры за счет присоединения одиночных вакансий. Наличие легких газовых примесей ускоряет протекание процессов по этой схеме.

Зародышем дислокационных петель межузельного типа является скопление из трех межузельных атомов в гантелевой конфигурации с ортогональными осями, расположенных в соседних узлах кристаллической решетки¹³. Отжиг таких петель происходит путем трансформации первоначально в тетраэдр, а затем в октаэдр дефекта упаковки, который не испускает одиночных межузельных атомов вплоть до предплавиельных температур.

Техническая реализация моделирования рассмотренных процессов оказалась возможной за счет разработки оптимизированного по временным затратам алгоритма ММД¹⁴.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Статистическая физика. — М.: Наука, 1964.
2. Френкель Я. И. Введение в теорию металлов. — Л.: Изд-во АН СССР, 1947.
3. Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. — М.: Мир, 1971.
4. Кирсанов В. В., Орлов А. И. — УФН, 1984, т. 142, с. 219.
5. English C. A. — J. Nucl. Mat., 1982, v. 108—109, p. 104.
6. Кенобаев Ю. В., Коровин Ю. А. Влияние облучения на материалы ядерной техники. — Обнинск, 1981.
7. Stathopoulos A. Y., Morphy S. M. et al. — J. Nucl. Mat., 1982, v. 110, p. 301.
8. Суворов А. Л. Атомная структура и параметры изолированных обедненных зон в металлах: Препринт ИТЭФ-145. — Москва, 1980.
9. Gibson J. B., Goland A. M., Milgram M., Vineyard G. H. — Phys. Rev., 1960, v. 120, p. 1229.
10. Protasov V. I., Chudinov V. G. — Rad. Eff., 1982, v. 66, p. 1.
11. Protasov V. I., Chudinov V. G. — Ibidem, 1984 (in press).
12. Chudinov V. G., Protasov V. I. — Phys. Stat. Sol. (in press).
13. Guinon M. W., Kinney J. H. — J. Nucl. Mat., 1981, v. 103—104, p. 1319.
14. King W. E., Benedek Q. Q. — Ibidem, 1983, v. 117, p. 26.
15. Chudinov V. G., Protasov V. I. — Rad. Eff., 1984, v. 81, p. 83.
16. Chudinov V. G., Protasov V. I. — Ibidem, 1985 (in press).
17. Протасов В. М., Чудинов В. Г. Моделирование на ЭВМ дефектов в кристаллах. — Л.: ФТИ АН СССР, 1980, с. 105.
18. Melker A. I., Romanov S. N. — Phys. Stat. Sol., 1984, v. 122, p. K17.
19. ЭВМ и моделирование дефектов в кристаллах. — Л.: ФТИ АН СССР, 1982.