

Семинар по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ

16—17 марта 1976 г. в Ленинграде в ЛПИ им. М. И. Калинина проводился первый семинар по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ, посвященный взаимному ознакомлению участников с ведущимися работами в этой области. Свыше 50 его человек представляли 25 научно-исследовательских институтов и высших учебных заведений 18 городов СССР.

Заседание семинара открылось обзорным докладом о проблемах моделирования радиационных повреждений в кристаллах (В. В. Кирсанов, ИЯФ АН КазССР). Приведем краткое содержание некоторых представленных сообщений.

В ФТИ АН УССР рассчитываются спектры первично выбитых атомов (ПВА) под воздействием нейтронов, протонов, γ -частиц и ионов. Результаты получены с учетом как упругих, так и неупругих ядерных моделей: оптической и промежуточного состояния (В. А. Ямницкий).

В НИИ ядерной физики ТПИ рассмотрено в модели парных столкновений влияние каналирования первичных электронов, позитронов, протонов и других частиц, приводящего к изменению распределения прицельных параметров, на спектр образованных ими ПВА. Расчеты для электронов в Si подтверждаются опытом (С. А. Воробьев).

В ЛПИ им. М. И. Калинина рассчитаны методом Монте-Карло по схеме последовательных соударений угловое и энергетическое распределение прошедших через металлическую пластинку и обратно рассеянных от нее электронов. Обнаружено, что расстояние максимума кривой распределения поглощенной энергии от поверхности облучения на порядок меньше, чем для кривой, рассчитанной по схеме укрупненных соударений (А. И. Мелькер).

В ЛПИ разработан способ имитации радиационного воздействия нейтронов и высокоэнергетических протонов с помощью электронных ускорителей. Имитация достигается путем облучения изделий гамма-квантами тормозного спектра с минимальной энергией более 20 МэВ. Получено экспериментальное подтверждение данного способа имитации при сопоставлении характера воздействия протонов и гамма-квантов высоких энергий на основании характеристик кремния (В. Ф. Космач).

Чудиновым В. Г. (ИФМ УНЦ АН СССР) рассчитан в континуальном приближении отвод тепловой энергии от области прохода каскада столкновений для металлов и изоляторов. Показано, что в металле при температуре, близкой к $0,5 T_{пл}$, начинается плавление и образуется вакансионная петля. Это приводит к скачкообразному изменению ряда физических свойств. В изоляторах плавление в большинстве пиков происходит даже при нулевой температуре.

В ИАЭ им. И. В. Курчатова разработаны машинные программы и завершены исследования по моделированию образования и стигма дефектов в каскадах, проведены расчеты спектров ПВА в условиях нейтринного облучения, а также моделирование некоторых механизмов радиационной ползучести (Ю. Р. Кеворкян).

Михлин Э. Я. (ФЭИ) и Нелаев В. В. (ИЯЭ АН БССР) провели модельные расчеты зоны рекомбинации

пар Френкеля в α — Fe в условиях всестороннего сжатия и без него. Показано, что сжатие (относительная деформация $\epsilon = 10^{-3}$) приводит к увеличению зоны рекомбинации примерно в три раза. Остуда следует, что: 1) существуют виды деформаций, позволяющие увеличить интенсивность рекомбинации; 2) среди них, возможно, есть и такие, которые увеличивают зону рекомбинации еще больше, чем было получено в рассмотренном случае.

Для моделирования радиационных повреждений в бинарных кристаллах типа металлических сплавов, интерметаллитов, фаз внедрения в ИПМ АН УССР разработана программа, позволяющая решать динамические задачи по атомным столкновениям, находить минимум потенциальной энергии, определять равновесные конфигурации дефектов (вакансий, междоельных атомов, комплексов) и их энергетические параметры. Учитываются три потенциала парных взаимодействий: А — А, А — В и В — В. Можно исследовать влияние разности в размерах и массе атомов А и В на распространение фокусонов, краудионов и релаксационные процессы, что особенно важно в случае фаз внедрения (В. В. Огородников).

В Институте физики АН ГССР рассчитаны зависимость полного сечения рассеяния холодных нейтронов на вакансии и окружающих ее смещенных атомах от длины волны λ нейтронов в интервале λ от 2 до 12 Å (В. Л. Светлик).

Другие сообщения были посвящены результатам моделирования различных дефектов.

В ИФМ УНЦ АН СССР разработаны программы для БСЭМ-6, написанные на АЛГОЛе для расчета энергетических и геометрических характеристик точечных дефектов в металлах. Возможен учет тепловых колебаний. С использованием одного и того же потенциала получены значения энергии образования вакансии в меди $E_v^F = 0,978$ эВ, энергии миграции $E_m^v = 1,005$ эВ, энергии связи дивакансии $E_B = 0,3$ эВ, энергии образования френкелевской пары $E_F = 4,2$ эВ. Получена температурная зависимость E_v^F в интервале 0—400 К (И. Е. Подчинов).

В ИФТТ АН СССР смоделировано термоактивное движение дислокации, взаимодействующей со случайно расположенными препятствиями. Рассмотрены также модели простых дислокационных комплексов (С. И. Зайцев).

В ИЯФ АН КазССР разработаны две машинные модели, позволяющие имитировать скольжение дислокации под действием напряжения с преодолением дефектов различной мощности и размеров (В. В. Кирсанов).

Математическое моделирование когерентной двойниковой границы, некогерентной двойниковой границы (т. е. содержащей винтовую двойниковую дислокацию) и полной винтовой дислокации в ОЦК кристалле проведено в ФТИ АН УССР. Определены напряженное состояние, энергия атомов на границе и в районе ядра дислокации, а также размеры, энергия и структура ядра двойниковой дислокации. Показано, что отсутствует сложное пространственное распределение ядра, характерное для полных винтовых дислокаций (В. С. Бойко).

В ИФМ УНЦ АН СССР исследованы в модели решеточного газа структура, ширина, свободная поверх.

ностная энергия и подвижность межфазных границ ориентации (111) и (100) ГЦК кристалла в функции температуры и движущейся силы фазового перехода. Рассмотрены кинетика и механизм роста кристалла в однокомпонентной двухфазной системе. При исследовании равновесия найдено, в частности, что в металлах ширина межфазной границы ГЦК кристалла, находящегося в контакте с собственным расплавом, порядка 4—5 межатомных расстояний, в то время как межфазная граница кристалл — пар является атомно-резкой (В. О. Есин).

В отделе физики и математики Башкирского филиала АН СССР рассчитана атомная конфигурация клиновид-

ной дислокационной микротрещины в ОЦК кристалле с суммарным вектором Бюргера, равным двум параметрам решетки. Показано, что раскрытие трещины превосходит радиус действия межатомных сил, так что поверхность трещины может считаться свободной (Ш. Х. Ханнанов).

На семинаре были обсуждены формы обмена программами и другой информацией и намечены тематические планы следующих заседаний. Ближайшие из них состоятся в июне 1976 г. и в январе — феврале 1977 г. в Ленинграде.

ГРУППИ Ю. В.

Научно-технические связи

Визит делегации ERDA в СССР

С 22 мая по 5 июня 1976 г. в СССР находилась с визитом американская делегация во главе с заместителем директора Администрации по энергетическим исследованиям и разработкам (ERDA) США Ричардом У. Робертсом. Делегация была принята председателем советской части советско-американской совместной Комиссии по сотрудничеству в области мирного использования атомной энергии Председателем ГКАЭ СССР А. М. Петросьянцем, Министром энергетического машиностроения СССР В. В. Кротовым, заместителем Министра энергетики и электрификации СССР Н. Д. Мальцевым. Делегаты посетили ИАЭ им. И. В. Курчатова, ФЭИ в Обнинске, НИИАР им. В. И. Ленина в Димитровграде, Ленинградскую, Нововоронежскую, Белоярскую АЭС, АЭС с реактором ВВ-350 в г. Шевченко и Ижорский завод в Ленинграде. Американские специалисты интересовались организацией и координацией работ по атомной энергетике в СССР; системой надзора за безопасной эксплуатацией АЭС; ролью и удельным весом атомной энергетики в энергетическом балансе страны в будущем; работами, ведущимися в СССР, по использованию естественных источников энергии (геотермальной, солнечной, ветра, приливов и отливов и т. п.). В свою очередь д-р Робертс ознакомил советских специалистов с некоторыми планами ERDA по развитию атомной энергетики США. Предполагается, что бюджет ERDA в 1977 г. составит 7 млрд. долл. (в настоящее время 4 млрд. долл.), причем половина его предназначена для научно-исследовательских работ. Краткосрочные планы ERDA направлены на увеличение добычи угля (с 600 млн. т до

1 млрд. т в 1985 г.) и развитие ядерной энергетики. Объем добычи нефти останется в этот период на прежнем уровне. Долгосрочные планы ERDA (после 2000 г.) связаны с использованием АЭС с быстрыми реакторами, а также солнечной и термоядерной энергии. ERDA осуществляет программу (с окончанием в 1982—1983 гг.) оценки имеющихся в США запасов урана, на которую выделяется 40—50 млн. долл., и программу по исследованию топливного цикла, переработке ядерного топлива и захоронению радиоактивных отходов. На последнюю в будущем году будет израсходовано 60 млн. долл. Значительно возрастает финансирование работ по техническому использованию солнечной энергии. Если до сих пор на эти цели было затрачено около 13 млн. долл., то в 1977—1978 гг. предполагается израсходовать 150—200 млн. долл. Несколько изменена и конкретизирована программа развития быстрых реакторов. После пуска в 1983 г. быстрого реактора на р. Кляч последует трехлетний (а не пятилетний, как это предполагалось ранее) демонстрационный период. В 1986 г. должен быть пущен крупный прототипный («предкоммерческий») реактор-размножитель, а еще через три года — первый (из целой серии) промышленный быстрый реактор. Однако до 1995 г. быстрые реакторы не будут играть еще значительной роли в энергетике США. Было отмечено, что основной проблемой ядерной энергетики США в настоящее время (в частности, программы развития быстрых реакторов) являются не вопросы технологии, а отношение к ней общественного мнения.

АРИФМЕТЧИКОВ Е. Ф.