

Третий семинар по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ

В работе семинара, состоявшегося 1—3 февраля 1977 г. в Ленинградском политехническом институте им. М. И. Калинина, участвовало более 90 чел. из 48 научных учреждений страны. Доклады, представленные на обсуждение, были посвящены моделированию дефектов реальных кристаллов.

Семинар открылся обзорным докладом Э. М. Надгорного и С. И. Зайцева (Ин-т физики твердого тела АН СССР) о международной конференции по машинному моделированию в материаловедении, проходившей в апреле 1976 г. в США.

О расчете энергетических характеристик вакансий вблизи ядра дислокации рассказал И. Е. Подчиненов (Ин-т физики металлов УНЦ АН СССР). Для этого моделировался кристаллит ГЦК решеткой, вычислялась энергия образования вакансий и исследовался потенциальный рельеф для ее перемещения вдоль линии дислокации. Равновесную конфигурацию кристаллита с дислокацией рассчитывали динамическим методом. В дальнейшем для увеличения скорости счета использовался вариационный метод.

Спектр частот нормальных колебаний идеального кристаллита Fe (116 атомов), окруженного подвижным остатком, качественно согласуется со спектром, полученным в опытах по неупругому рассеянию нейтронов, хотя максимальная частота меньше экспериментальной на 15% (В. П. Жуков, ИАЭ им. И. В. Курчатова). Равновесные положения атомов определялись с помощью машинного моделирования вариационным методом, спектр рассчитывается аналитическим методом. Рассматривался кристаллит α — Fe, содержащий атом углерода в междоузлии. Введение в октаэдрическую пустоту в центре кристаллита атома углерода изменяет вид нормальных колебаний, причем у 11 колебаний частоты лежат выше основного спектра.

Стохастической вакансионной модели самодиффузии в кристалле с краевой дислокацией в направлении $\langle 211 \rangle$ посвятил свой доклад Ю. М. Плишкин (ИФМ УНЦ АН СССР). Для выявления существенных черт диффузии вдоль дислокационной трубки модель с ГЦК решеткой заменялась гипотетической — плоской с простой квадратной решеткой. Такая модель позволяет учесть энергетические барьеры миграции вакансий, которые различны в матрице и в ядре дислокации. Фактором, определяющим быструю диффузию вдоль дислокационной трубки, служит высокая плотность вакансий вблизи ядра дислокации.

Машинное моделирование самодиффузии вдоль краевых дислокаций по вакансионному механизму — тема доклада В. Р. Фидельмана (ГГУ им. Н. И. Лобачевского). Трубочная самодиффузия для ряда ГЦК и ОЦК металлов моделировалась квазидинамическим методом с использованием потенциалов эффективного межзонного взаимодействия, получающихся в теории псевдопотенциала. Для ГЦК металлов (Al, Au, Ag, Cu, Ni) получена энергия образования E_v^F и миграции E_v^m вакансий в двух различных положениях в ядре дислокации. Энергия активации самодиффузии ($E_v^F + E_v^m$) в этом случае составляет 50—80% энергии в бездислокационном кристалле. В ОЦК металлах (α — Fe, Mo, W) моделировалась структура ядра дислокаций трех различных типов. Для нескольких положений в ядре

дислокации выполнены расчеты E_v^F и E_v^m . Сравнение полученной энергии активации с экспериментальными и расчетными значениями в соответствующих бездислокационных металлах дает ее снижение на 20—50%.

При решении квазидинамической задачи о вычислении энергии образования вакансионных структур в кремнии использовалось представление парного взаимодействия атомов модельного кристаллита с распространением взаимодействия на вторых соседях (доклад М. А. Чубисова, Ин-т физики высоких энергий АН КазССР). Определена энергия образования наиболее устойчивых конфигураций вакансионных структур $E_{вп}^F$. Значения энергии $E_v^F = 2,68$ эВ и $E_{v2}^F = 4,23$ эВ удовлетворительно согласуются с расчетными данными других авторов, а для E_v^F и с экспериментом.

Доклад Т. Е. Кузнецовой (ЛПИ им. М. И. Калинина) был посвящен изучению изменения периодического потенциала при растяжении одномерной цепочки атомов. Вследствие взаимодействия атомов локальная деформация отдельных связей может превысить среднюю деформацию цепочки. Если при этом тепловая энергия меньше образовавшегося в результате растяжения потенциального барьера ΔU , а локальная деформация больше критической, то связь разрывается. Если она восстанавливается, то аналогичная ситуация разрыва возникает в другом месте цепочки. В результате в напряженном одномерном кристаллите возникают колебания частотой порядка частоты атомных колебаний в ненапряженном кристаллите и значительно меньшей, связанной с переходом через энергетический барьер ΔU .

Моделирование на ЭВМ активационного разрыва связей в одномерной цепочке рассматривалось в докладе М. Г. Зайцева (МГПИ им. В. И. Ленина). Попадание на данную связь флуктуации энергии E_Φ моделировалось сообщением двум центральным атомам цепочки равных и противоположных скоростей $v = \sqrt{E_\Phi/m}$ (m — масса атома). Наблюдающийся при достаточной большой энергии разрыв является не квазистатическим процессом. Большая часть энергии тратится не на растяжение рвущейся связи, а на быстрое раздвижение окружающих ее атомов, и передается цепочке. Если вся энергия сообщена одному из атомов, то необходимая для разрыва цепочки энергия увеличивается примерно в 3 раза по сравнению со случаем ее симметричного распределения.

О найденной равновесной атомной конфигурации ядра $\langle 100 \rangle$ — краевой дислокации методом итераций сообщил В. В. Кирсанов (ИЯФ АН КазССР). Положение граничных атомов в пределах итераций оставалось неизменным. Получено хорошее согласие с результатами расчетов, выполненных динамическим методом. Кроме того, на основании анализа большого числа экспериментальных данных обнаружено, что послерадиационное распределение дефектных кластеров по размерам подчиняется закону Релея, а это позволяет распределять кластеры по размерам в модели Формана — Мейкина.

Результаты исследования ансамбля хаотически распределенных дислокаций на начальных стадиях воз-

врата показали, что изменение плотности дислокаций со временем достаточно хорошо соответствует уравнениям реакций второго порядка (В. М. Даниленко, Ин-т металлофизики АН УССР). Соответствие результатов экспериментальным данным по кинетике изменения плотности дислокаций при отжиге деформированных прокаткой монокристаллов молибдена получено для случая, когда микроструктура деформации характеризуется хаотическим распределением дислокаций противоположных знаков.

При рассмотрении влияния на электропроводность металлов флаттер-эффекта ансамбля колеблющихся дислокаций аналитически получен вид дополнительного взаимодействия электронов с дислокациями (доклад С. В. Божокина, ЛПИ им. М. И. Калинина), причем это взаимодействие может быть представлено как неупругий процесс поглощения или испускания электронами некоторых квазичастиц. Рассчитаны часть дислокационного сопротивления, зависящая от температуры, спектр собственных частот дислокации и найдена оптическая ветвь колебаний, связанная с дислокацией.

Результаты моделирования импульсного и статического силового воздействия на монокристаллит молибдена из 341-го атома показали, что температура в процессе сжатия повышается до 10^3 градусов и происходит размытие распределения межатомных расстояний и уменьшение их на 0,5—1% (Л. Г. Гурвич, ИЯФ АН УССР). Взаимодействие между атомами описывается потенциалом, имеющим два минимума, которые соответствуют расстояниям до ближайших (первых) и вторых соседей. К поверхностным атомам приложены силы, имитирующие всестороннее сжатие 10^3 и 10^6 бар. При сообщении поверхностным атомам импульса (0,5 и 2 эВ на атом) сначала происходит сжатие, затем обратное смещение на расстояния, сравнимые с периодом решетки, вплоть до отрыва атомов оболочки от кристаллита при большем импульсе.

При термоактивированном движении дислокации

через двумерную сетку случайно расположенных точечных препятствий, которые «формируются» на фронте дислокации по мере ее продвижения, обнаружено возникновение упрочнения за счет влияния небольшого числа сильных препятствий (В. Н. Выдашенко, ФТИ низких температур АН УССР). Получены распределения углов огибания и длина сегментов, устанавливающиеся при длительном термоактивированном движении дислокации, в двух предельных случаях при $T \rightarrow 0$ и $T \rightarrow \infty$ (T — температура). Исследованы процессы последовательного срыва дислокации с соседних препятствий, рассмотрено ее «продавливание» через сетку сильных стопоров, в промежутках между которыми располагается большое число слабых препятствий.

О результатах моделирования взаимодействия дислокаций, расчета равновесных дислокационных конфигураций при строгом учете самодействия дислокаций, а также моделирования безактивационного прохождения дислокаций друг через друга сообщалось в докладе Г. В. Бушуевой (МГУ).

Результаты моделирования полосы скольжения, сформированной в материале под действием ультразвука, излагались в докладе Г. М. Зиненковой (МГУ). Экспериментально установлено, что характерным элементом структуры при этом являются дислокационные петли. В качестве модели линии скольжения взята цепочка круговых петель, и в этой модели рассчитаны компоненты напряжения сдвига в плоскостях, параллельных плоскости залегания петель, и в самой плоскости скольжения.

Полуэмпирическим методом расчета доказаны возможность существования полувакансии и пары полувакансии в кремнии (Г. В. Гадияк, Ин-т теоретической и прикладной механики СО АН СССР).

Кроме перечисленных оригинальных сообщений на семинаре были прочитаны лекции по некоторым актуальным темам.

ТРУШИН Ю. В.

В институтах и конструкторских бюро

Радиационный контур

с раздельной циркуляцией гамма-носителя

В реакторе ИРТ-М Института физики АН Латв. ССР в сентябре 1976 г. выведен на номинальную мощность 100 000 г.экв. радиационный контур РК-ЛМ, предназначенный для создания полей γ -излучения в широком диапазоне мощности дозы [1—3]. В качестве γ -носителя использовался жидкометаллический сплав индий — галлий — олово с температурой плавления 11°C (весовые доли 22; 66 и 12% соответственно). Общее его количество в контуре 3000 см³.

Технологические параметры РК-ЛМ близки к расчетным, где учитывалась методика оптимизации [4], связывающая активацию, циркуляцию и самопоглощение γ -носителя.

Контур (рис. 1) состоит из генератора активности 3, расположенного в заполненном водой первого контура реактора кожухе 2, который размещен у грани активной зоны 1. Генератор выполнен в виде двухрядного змеевика из нержавеющей трубки диаметром 7 мм. Объем сплава составляет 370 см³. Его активация про-

исходит тепловыми и резонансными нейтронами реактора в процессе циркуляции по генератору активности. Последний коммуникациями 15 соединен со смесительной камерой 4 и образует циркуляционную петлю. К смесительной камере подключены циркуляционные петли двух независимых облучателей 7, 8 оригинальной конструкции. Камера каналом 5 соединена со сборником сплава 6. Конструкция смесительной камеры, сборника сплава и расположение коммуникаций обеспечивают независимое подключение циркуляционных петель путем включения электромагнитных насосов, а также самослив γ -носителя при отключении насоса соответствующей петли и автоматическую компенсацию его объема. Сборник сплава одновременно является системой очистки γ -носителя. К нему подключен бесконтактный индукционный уровнемер 10 и хранилище сплава 11.

Смесительная камера позволяет выбирать различные программы работы циркуляционных петель и облу-