

в «горячих» лабораториях. К ним относятся разработка новых санитарных правил, подробные отчеты действующих предприятий о мерах безопасности, принятых на объектах, о конкретной радиационной обстановке, статистике и т. п. После рассмотрения и утверждения этих докладов компетентными органами страны дается разрешение на продолжение работ. Доклады повторяются в случае изменения технологии на объекте или замены основного оборудования (Франция). Во многих странах разрешение на работу с плутонием возобновляется ежегодно с указанием максимально допустимого для данной лаборатории количества. Обслуживающий

персонал проходит необходимую подготовку и должен обладать высокой квалификацией, а основное оборудование подвергается профилактическому осмотру и ремонту не реже чем через 18 месяцев.

Значительный интерес у зарубежных делегаций вызвал доклад специалистов СССР, в котором изложены основные направления в решении вопросов безопасности при проектировании «горячих» лабораторий и опытных установок в нашей стране. Труды симпозиума будут изданы МАГАТЭ.

РЯБОВ Б. И.

Второй семинар по моделированию радиационных и других дефектов на ЭВМ

Тематика второго семинара, проходившего в Ленинградском политехническом институте им. М. И. Калинина 22—24 июня 1976 г., была посвящена в основном радиационным дефектам.

Семинар открылся обзорным докладом А. Н. Орлова (ФТИ им. А. Ф. Иоффе АН СССР), в котором анализировались публикации по проблеме «Радиационные эффекты и ядерная энергетика» в свете требований, предъявляемых к материалу стенок термоядерного реактора. При решении некоторых задач может быть использовано машинное моделирование, а в отдельных случаях оно является пока единственным доступным методом исследования.

В докладе В. Я. Мигалени (ФТИ АН УССР, Харьков), основанном на результатах оригинальных работ группы авторов, представлена методика расчетов спектров первично выбитых атомов (ПВА), учитывающая упругие и неупругие ядерные процессы при рассеянии нуклонов средней энергии (до 50 МэВ). При такой энергии существенны анизотропия при рассеянии первичных частиц и, следовательно, связанная с ней анизотропия в пространственном распределении ПВА. Создан комплекс программ, позволяющих рассчитывать энергетические и пространственные характеристики ПВА при взаимодействии протонов, нейтронов и тяжелых ионов с энергией порядка 1 МэВ/нуклон с различными материалами. Сечения упругого рассеяния определялись по оптической модели, неупругие процессы при энергии выше 10 МэВ описываются в рамках экситонной модели, учитывающей вклад предравновесного и равновесного компонентов в распад ядра. При взаимодействии тяжелых ионов учитывается экранирование заряда ядра электронами. Приведены результаты расчетов спектров ПВА от протонов с энергией 5—25 МэВ и тяжелых ионов для некоторых конструкционных материалов. Для легких элементов с $A < 40$ учет упругого ядерного рассеяния приводит к увеличению полного числа ПВА в 5—10 раз по сравнению с расчетами без учета ядерных взаимодействий. Рассматривается возможность имитации радиационных повреждений от быстрых и сверхбыстрых нейтронов с помощью протонов и тяжелых ионов.

Доклад В. В. Огородникова (Институт проблем материаловедения АН УССР) был посвящен моделированию радиационных дефектов по методу Вийнъярда для бинарных кристаллов. Исследования проводились на модели кристалла TiC со структурой NaCl. В качестве потен-

циала взаимодействия использован потенциал Морзе. Рассчитана равновесная конфигурация идеального кристалла из 125 атомов в свободном состоянии (без наложения граничных условий на поверхности). Получено практически равномерное сжатие кристалла под действием сил поверхностного натяжения, составившее 4%. Аналогичные расчеты проведены для кристаллов с заданными дефектами (вакансии в металлической и углеродной подрешетках, междоузельные атомы металла и углерода). Энергия, высвобождаемая при выходе вакансии из центра на поверхность, составляет 2,4 эВ, что в этой модели можно принять за энергию образования металлической вакансии. Существенные смещения в сторону вакансии испытывали ближайшие атомы углерода (до 0,25 периода решетки). Междоузельные атомы занимают гантельное положение в направлении $\langle 111 \rangle$.

В докладе Ю. Р. Кеворкяна (ИАЭ им. И. В. Курчатова) изложены результаты работы группы авторов по моделированию каскадов атомных столкновений в α -Fe с учетом неупругих потерь, взаимодействия движущихся атомов с дефектами, возникшими ранее в том же каскаде, и отжига в течение 10^{-7} с при 300 и 800 К. Эффективность смещения падает с энергией ПВА до 15 кэВ. Более 70% вакансий связаны в комплексы, более 80% внедрений — одиночные. Отжиг при 300 К рекомбинирует 90% пар дефектов, при 800 К — 80%. Получены также распределения вакансионных кластеров по размерам до и после отжига и некоторые другие характеристики каскадов.

В докладе Л. К. Кузнецова (ГГУ им. Н. И. Лобачевского, Горький) освещалось моделирование различных процессов, происходящих в ОЦК металлах (α -Fe, Mo, W). В результате расчета каскадов смещений найдено, что (в противоположность выводам Билера) его пространственная конфигурация зависит от направления смещения ПВА. Наиболее стабильными плоскими кластерами вакансий являются скопления, лежащие в плоскости $\langle 110 \rangle$ и имеющие максимальное количество связей типа $\langle 111 \rangle$, объемными — комплексы с формой октаэдра. Энергия образования плоского комплекса пропорциональна количеству вакансий N в комплексе, объемных комплексов — $N^{2/3}$. Движение дислокации в поле случайно распределенных препятствий (в приближении Формена—Мэкина) происходит за счет перегибов дислокационных сегментов. С увеличением напряжения становятся возможными срывы сег-

ментов с препятствий. При больших напряжениях возможно продвижение дислокации за счет прогиба неустойчивых сегментов. На базе диффузионного механизма роста пор разработаны две модели распухания. Зародышами пор считаются атомы He, образовавшиеся в результате (n, α)-реакции. Расчеты, проведенные для нержавеющей стали 304, позволили получить данные о распределении пор по размерам, о распухании, а также оценить влияние условий облучения на эти параметры.

В. В. Коломыткин (ИАЭ им. И. В. Курчатова) представил доклад, посвященный моделированию некоторых механизмов радиационной ползучести на начальной стадии реакторного облучения, когда наиболее существенными препятствиями для дислокаций являются обедненные зоны. С учетом экспериментальных данных, в частности полученных с помощью ионного проектора, проведено моделирование радиационного упрочнения платины. Предполагая, что поверхность обедненной зоны, возрастающая при пересечении зоны дислокацией, характеризуется поверхностной энергией γ , и что полученное расчетом по модели Формена — Мэйкина напряжение сдвига равно напряжению, необходимому для увеличения поверхности зоны, авторы получили $\gamma = 240$ эрг/см². Рассмотрены два механизма радиационной ползучести, действующие одновременно: 1) задержка скользящих краевых дислокаций обедненными зонами и 2) ускоренное облучением перемещение краевых дислокаций. Учитывается неоднородность дальнедействующих дислокационных полей. Результаты сравниваются с экспериментом для α -Zr.

В сообщении С. И. Зайцева и Э. М. Надгорного (Институт физики твердого тела АН СССР) изложены

результаты моделирования движения дислокации через точечные радиационные и иные дефекты. Исследована задача о движении дислокации в плоскости со случайно расположенными неподвижными препятствиями, обладающими собственным упругим полем, типичным для примесных и радиационных дефектов. Препятствие моделируется барьером с потенциалом типа Флейшера — Гиббса с критическим углом отгибания 150°. Движение дислокации рассматривается как последовательность мгновенных перемещений из одного равновесного положения в другое после некоторого времени ожидания. Место активации и время ожидания находятся методом Монте-Карло. Получены зависимости скорости дислокации от напряжения, температуры, высоты барьера, а энергии активации — от напряжения. Расчеты выполнялись для числа препятствий от 10³ до 10⁴ при разных формах площадок. Показано, что процесс активации идет коррелированно через «слабые» углы, а для движения дислокации существенно зарождение и распространение квазиперегиба. При низкой температуре и малом напряжении скорость дислокации зависит от ее длины, но при числе препятствий на дислокации, большем 100, такая зависимость исчезает.

Кроме перечисленных докладов на семинаре было сделано восемь кратких сообщений по моделированию на ЭМВ дислокаций, дислокационных скоплений, межфазных границ и микротрещин в твердых телах. В работе семинара участвовали 75 человек, которые представляли 21 научное учреждение из 10 городов СССР.

ТРУШИН Ю. В.

Международная конференция «Теория и практика ионного обмена»

В работе конференции, проходившей в Англии в Кембридже с 25 по 30 июля 1976 г., участвовало свыше 250 специалистов, представлявших 26 стран мира. Предыдущая конференция состоялась в 1969 г., и достигнутый с тех пор существенный прогресс в практическом применении ионообменных процессов вызвал необходимость в этой встрече ученых для обмена мнениями.

На конференции был заслушан и обсужден 41 доклад по пяти основным направлениям: развитие синтеза ионообменных смол (7 докладов), равновесие и кинетика ионного обмена (10), водоподготовка и очистка воды (10), процессы разделения органических и неорганических материалов (5), гидрометаллургия цветных, редких и радиоактивных элементов (9). Таким образом, основное внимание уделялось исследованиям равновесия и кинетики ионного обмена, использованию ионитов в процессах водоподготовки и переработки отходов, а также в гидрометаллургической промышленности.

Среди сообщений, посвященных развитию синтеза ионообменных смол и влиянию их структуры на реакционную способность, следует выделить доклады «Механизм образования полимерной сетки в стирол-дивинилбензольных сополимерах» (Л. Рубинск, Д. Смит, Англия) и «Влияние структуры смолы на механическую прочность ее зерен» (Л. Голден, Д. Ирвинг, Англия). В первом докладе был рассмотрен механизм образова-

ния макромолекулярного каркаса при сополимеризации стирола с техническим дивинилбензолом. Установлено, что в процессе сополимеризации этих компонентов имеют место спутывание цепей и неравномерное распределение поперечных сшивок. Первые продукты полимеризации обогащены дивинилбензолом (по сравнению со средним содержанием исходных компонентов). Однако неравномерность структуры сополимеров сглаживается вследствие спутывания и взаимного проникновения цепей стирола и дивинилбензола и в результате запаздывающей реакции этих цепей со второй винильной группой дивинилбензола. В итоге получают весьма компактную структуру ионообменных смол.

Во втором докладе сравнивались механические свойства ионитов, полученных на основе сополимеров стирола и акрилонитрила с дивинилбензолом. Выяснилось, что характер ионита и содержание воды в нем оказывают существенное влияние на механическую прочность и гелевые иониты на основе сополимеров стирола и дивинилбензола являются более жесткими, чем иониты на акрилатной основе, и поэтому легче раскалываются. Макропористые структуры осмотически более стойки, но легче деформируются, чем гелевые. Это следует учитывать при выборе типа смолы для практического применения.

В докладе американского специалиста Л. Голдринга «Окислительное разрушение ионообменных смол и его