УДК 544.022.382

**ТЕРМИЧЕСКАЯ ДИССОЦИАЦИЯ ДИМЕЖУЗЛИЙ В ОЦК Fe И V:
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ***Д.Н. Демидов, А.Б. Сивак, П.А. Сивак**НИИ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Методом молекулярной динамики рассчитаны температурные зависимости времени жизни димежузлий до диссоциации для ОЦК-металлов Fe (900—1450 K) и V (650—1100 K). На основе рассчитанных данных предложены аналитические зависимости, позволяющие экстраполировать полученные данные в область более низких температур. Определены энергии активации диссоциации димежузлий: 0,98 эВ и 0,60 эВ в Fe и V соответственно. Для типичных для радиационно-стойких конструкционных материалов значений сил стоков радиационных дефектов (10^{15} — 10^{16} м⁻²) определены температурные границы, ниже которых подавляющее количество димежузлий поглощается на стоках, не успев продиссоциировать: 690—810 K и 410—500 K для Fe и V соответственно. Определены атомные механизмы диффузии и диссоциации димежузлий.

Ключевые слова: железо, ванадий, димежузлия, энергия связи, энергия диссоциации, время жизни до диссоциации, средний пробег до диссоциации, коэффициент диффузии, механизмы диффузии, механизмы диссоциации.

**THERMAL DISSOCIATION OF DI-INTERSTITIALS IN BCC FE AND V:
A MOLECULAR DYNAMICS STUDY***D.N. Demidov, A.B. Sivak, P.A. Sivak**NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia*

Temperature dependences of the dissociation lifetime of di-interstitials in bcc metals Fe (900—1450 K) and V (650—1100 K) have been calculated by molecular dynamics. Based on the calculated data, analytical dependences allowing one to extrapolate the obtained data to the lower temperature region have been proposed. The activation energies of di-interstitial dissociation have been determined: 0.98 eV and 0.60 eV in Fe and V, respectively. For typical values of radiation defect sink strengths for radiation resistant structural materials (10^{15} — 10^{16} m⁻²), temperature limits have been determined, below which the overwhelming amount of di-interstitials is absorbed by the sinks before their dissociation. These limits are 690—810 K and 410—500 K for Fe and V, respectively. The atomic mechanisms of the diffusion and the dissociation of di-interstitials have been determined.

Key words: iron, vanadium, di-interstitials, binding energy, dissociation energy, dissociation lifetime, mean displacement before dissociation, diffusivity, diffusion mechanisms, dissociation mechanisms.

DOI: 10.21517/0202-3822-2019-42-2-99-107

ВВЕДЕНИЕ

Диффузия радиационных дефектов к стокам (дислокации, границы зёрен, субграницы, поверхности раздела фаз, др.) и их поглощение приводят к эволюции микроструктуры конструкционных материалов ядерных и термоядерных реакторов и, как следствие, к изменению их физико-механических свойств (радиационная ползучесть, радиационное охрупчивание и вакансионное распухание материалов). Поэтому для построения физических моделей изменения свойств материалов под радиационными, механическими и термическими нагрузками необходимо знать характеристики радиационных дефектов, которые являются параметрами таких моделей.

В процессе повреждающего нейтронного каскадообразующего облучения образуются не только собственные точечные дефекты (СТД), но и их кластеры [1—3]. Одними из самых часто образующихся типов кластеров СТД являются димежузлия — два собственных межузельных атома (СМА), находящихся на небольшом расстоянии друг от друга. Димежузлия в ОЦК-металлах Fe и V, являющихся основной перспективных конструкционных материалов ядерных и термоядерных реакторов (ферритно-мартенситные стали, сплавы ванадия), обладают относительно невысокой энергией связи: ~0,8—1,1 эВ в Fe [4—6] и ~0,5—0,7 эВ в V [7]. Это делает возможным их диссоциацию за время, сравнимое по порядку величины со временем, необходимым для миграции димежузлия от места образования до места поглощения на стоке, т.е. времена жизни димежузлия до диссоциации и до поглощения на стоке могут оказаться сравнимыми при температурах, представляющих практический интерес (до ~1000 K для феррит-

но-мартенситных сталей и до ~ 1500 К для сплавов ванадия). Поэтому при построении физических моделей диффузии радиационных дефектов к стокам необходимо учитывать возможность их диссоциации и знать температурные зависимости времени жизни димежузлий до диссоциации. Экспериментальное изучение диссоциации димежузлий затруднительно ввиду того, что явление протекает на малых пространственных (несколько нм) и временных (менее нескольких нс) масштабах. Метод молекулярной динамики (МД) позволяет проводить исследования на указанных масштабах, поэтому используется в настоящей работе. Заметим, что для W энергия связи димежузлия значительно выше, чем для Fe и V, и составляет 2,311 эВ по данным [8], поэтому в указанной работе во всём исследованном МД-методом температурном диапазоне (300—900 К) диссоциация не наблюдалась. В [9] наблюдалась диссоциация димежузлий в Fe при температурах выше 800 К (энергия связи димежузлия равна 0,83 эВ для использовавшегося в [9] потенциала межатомных взаимодействий по данным [10]), однако количественные характеристики диссоциации димежузлий определены не были, так как работа [9] была посвящена определению диффузионных характеристик кластеров СМА.

В настоящей работе МД-методом рассчитываются температурные зависимости времени жизни димежузлий до диссоциации для ОЦК-металлов Fe (900—1450 К) и V (650—1100 К). На основе рассчитанных данных предлагаются аналитические зависимости, позволяющие экстраполировать полученные данные в область более низких температур. Оцениваются средние пробеги димежузлий до диссоциации для оценки вероятности диссоциации димежузлий в процессе их миграции на стоки. Помимо этого, изучаются атомные механизмы диффузии и диссоциации димежузлий.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

В МД-моделировании диффузии и диссоциации димежузлий использовались потенциалы межатомного взаимодействия [11] и [12] для Fe и V соответственно, так как эти потенциалы хорошо описывают набор экспериментальных данных о свойствах СТД для указанных металлов. Расчётная ячейка представляла собой куб с длиной рёбер $13a$ (a — постоянная кристаллической решётки, её значение выбиралось таким образом, чтобы при заданной температуре T давление P в кристаллите было равно нулю с точностью до $0,1$ эВ/нм³), на который наложены периодические граничные условия. Моделируемая система представляла собой микроканонический ансамбль. Интегрирование уравнений движения выполнялось методом Верле [13].

Определение положений СМА, составляющих димежузлие, проводилось путём анализа числа атомов в ячейках Вигнера—Зейтца по всему кристаллиту: если в одной ячейке находилось два атома, считалось, что положение СМА совпадает с положением этой ячейки. В процессе моделирования периодическая граница переопределялась таким образом, чтобы в центре кристаллита всегда находился один из двух СМА, в соответствии с предложенной в [14] методикой исключения влияния периодической границы на результаты моделирования диффузии дефектов. В качестве критерия диссоциации димежузлия было выбрано условие разбегания двух составляющих его СМА на расстояние больше $5a$, так как анализ рассчитанных траекторий их движения показал, что при выполнении этого условия их дальнейшая диффузия становилась некоррелированной относительно друг друга.

В качестве начальных положений атомов использовались их положения после релаксации методом молекулярной статики (МС) модельного кристаллита, содержащего два СМА на расстоянии первых ближайших соседей (БС) друг от друга. Начальные скорости атомов задавались случайным образом в соответствии с распределением Максвелла для заданной температуры T . Поскольку начальные положения атомов соответствовали минимуму потенциальной энергии, то в процессе термализации ансамбль атомов стремился к температуре, примерно равной $T/2$ (в гармоническом приближении равенство было бы строгим). Ансамблю атомов давалось 5 пс на то, чтобы прийти в термическое равновесие. После этого, чтобы поднять температуру кристаллита к целевому значению T , производилось переопределение скоростей атомов (модули скоростей всех атомов умножаются на одну и ту же константу, равную корню из отношения целевого значения температуры к текущему её значению). После переопределения скоростей ансамблю атомов вновь давалось

время 5 пс на приход к термическому равновесию, вновь определялась средняя температура за этот промежуток времени и вновь производилось переопределение скоростей. Такая процедура повторялась 10 раз, что обеспечивало точность достижения целевой температуры T на уровне 0,1%. Таким образом, весь процесс приведения модельного кристаллита к желаемым термодинамическим условиям занимал 55 пс. Выбранный способ плавного подъёма температуры кристаллита от значения $T/2$ к целевой температуре T обусловлен стремлением минимизировать вероятность диссоциации димежузлия во время переходного процесса. События, происходящие во время этой переходной стадии моделирования, не учитывались при расчёте свойств дефектов, чтобы не вносить в них систематическую погрешность. Так, время жизни димежузлия отсчитывалось от конца переходной стадии. Если же во время переходной стадии происходила диссоциация димежузлия, расчёт обрывался и не учитывался в последующей обработке результатов.

Для определения среднего времени жизни димежузлия до диссоциации $\langle\tau\rangle$ при каждой T моделировалось 50—130 траекторий движения димежузлия до момента его диссоциации (меньшее количество траекторий соответствует меньшим температурам). Такое количество траекторий позволяло получать стандартную ошибку для $\langle\tau\rangle$ в пределах 10—20%. Нижняя температурная граница моделирования выбиралась исходя из того, чтобы было возможно зафиксировать необходимое количество актов диссоциации за приемлемое время расчётов. Верхняя температурная граница определялась условием, чтобы за время переходного процесса (55 пс) вероятность диссоциации не превышала 50—70%. Температурные диапазоны, пригодные для моделирования, оказались следующими: 900—1450 К для Fe, 650—1100 К для V.

Для оценки средних пробегов димежузлий до диссоциации МД-методом рассчитаны температурные зависимости коэффициента диффузии димежузлия в температурных диапазонах 150—1000 К для Fe и 200—800 К для V. Границы температурного интервала моделирования диффузии димежузлий определялись возможностью получения достаточно длинных траекторий для надёжного определения коэффициента диффузии: снизу по температуре ограничение возникало из-за роста требуемого для вычислений времени с понижением температуры, сверху по температуре — из-за роста частоты диссоциации димежузлий с повышением температуры. Для каждой температуры моделировалось 50 траекторий движения димежузлий. Моделирование отдельной траектории останавливалось в случае выполнения критерия диссоциации или после того, как составляющие димежузлия СМА совершали $5 \cdot 10^4$ скачков. По каждой отдельной траектории рассчитывался свой коэффициент диффузии в соответствии с [14—16]. В качестве величины коэффициента диффузии димежузлия при заданной T бралось среднее по рассчитанным 50 значениям. В качестве погрешности бралась стандартная ошибка, рассчитанная по указанной выборке из 50 значений. Погрешности в среднем равны 4%, максимальное значение — 13% для V при 200 К.

Для анализа возникающих в процессе моделирования пространственных конфигураций димежузлия определялись длительности пребывания двух СМА на расстоянии i -х БС друг от друга и число реализаций таких состояний, где $i = 0, 1, \dots, 35$ (координационные сферы с номерами от 1 до 35 входят в шар с радиусом $5a$). Под состоянием с $i = 0$ имеется в виду ситуация, когда в одной ячейке Вигнера—Зейтца находятся одновременно три атома, т.е. расстояние между положениями двух СМА равно нулю. Далее пространственная конфигурация, при которой два составляющих димежузлия СМА находятся на расстоянии, равном радиусу i -й координационной сферы, обозначается для краткости «конфигурация i -БС».

Чтобы корректно оценить время пребывания димежузлия в конфигурации 0-БС (это состояние не является стабильным и часто перестраивается в конфигурацию 1-БС и обратно), за это время принималось всё время, в течение которого димежузлие совершало частые (менее 0,8 пс между последовательными конфигурациями) скачки в 1-БС и возвращалось обратно за аналогично малое время. Величина 0,8 пс подбиралась эмпирически из анализа диффузионных траекторий.

Энергия связи E^B и энергия взаимодействия E^{int} двух СМА рассчитывались МС-методом в кубических модельных кристаллитах с жёсткими граничными условиями, содержащих $33 \cdot 201 + 2$ подвижных атомов. Минимизация потенциальной энергии кристаллитов производилась методом градиентного спуска.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Время жизни димежузлий до диссоциации. Результаты МД-расчётов температурных зависимостей $\langle \tau \rangle$ для Fe и V и их аррениусовские аппроксимации показаны на рис. 1 (энергия активации E^{AD} и предэкспоненциальный множитель τ_0 сведены в таблице). Можно видеть, что при всех рассматриваемых температурах время жизни димежузлия до диссоциации больше в Fe, чем в V, что согласуется с различием в значениях энергии диссоциации E^D для этих металлов (см. таблицу).

Рис. 1. Температурная зависимость среднего времени жизни димежузлий до диссоциации для Fe (●) и V (■): — — аррениусовские аппроксимации расчётных данных

в настоящей работе температурных интервалов E^{AM} равны 0,092 эВ для Fe и 0,136 эВ для V. Если использовать указанные значения E^{AM} вместо МС-значения энергии миграции E^M для расчёта энергии диссоциации (величина E^{DA} в таблице), то различия между энергией диссоциации E^{DA} и энергией активации диссоциации E^{AD} значительно снизятся и будут составлять всего несколько сотых электронвольта, что означает их согласие в пределах погрешности определения величины E^{AD} .

Параметры аррениусовских аппроксимаций среднего времени жизни димежузлий до диссоциации (τ_0 и E^{AD}) и энергий диссоциации E^D и E^{DA} , рассчитанных различными способами, для Fe и V

Материал	τ_0 , пс	E^{AD} , эВ	$E^D = E^B + E^M$, эВ	$E^{DA} = E^B + E^{AM}$, эВ
Fe	0,0124	0,980	1,130	0,976
V	0,0845	0,602	0,679	0,647

Среднее перемещение димежузлий до диссоциации. Поскольку возможность диссоциации димежузлий влияет на их роль в процессах радиационной повреждаемости материалов, необходимо оценить температурную зависимость среднего пробега димежузлий до диссоциации $\zeta(T)$ в Fe и V. Величину ζ можно рассчитать с помощью соотношения Эйнштейна, зная коэффициенты диффузии димежузлия D^d :

$$\zeta = \sqrt{6\langle \tau \rangle D^d}. \quad (1)$$

Результаты МД-расчётов величин D^d при различных T в диапазоне 150—1000 К для Fe и V представлены на рис. 2, а. Значение $\langle \tau \rangle$ для этого температурного диапазона рассчитано с помощью аррениусовской аппроксимации

$$\langle \tau \rangle = \tau_0 \exp(E^{AD}/k_B T), \quad (2)$$

τ_0 и E^{AD} приведены в таблице. Рассчитанные с использованием (1, 2) температурные зависимости ζ показаны на рис. 2, б. Хотя на рис. 2, а видно, что зависимость $D^d(T)$ отличается от аррениусовской, зависимость $\zeta(T)$ в аррениусовских координатах имеет практически линейный вид (см. рис. 2, б). Аппроксимация расчётных значений ζ выражением

$$\zeta = \zeta_0 \exp(W\beta) \quad (3)$$

дала значения для ζ_0 , равные 0,038 нм и 0,124 нм для Fe и V соответственно, и для W , равные 0,451 эВ и 0,226 эВ для Fe и V соответственно.

Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента диффузии димежузлия D^d : 1 — 1000; 2 — 800; 3 — 700; 4 — 500; 5 — 450; 6 — 400; 7 — 350; 8 — 300; 9 — 250; 10 — 200; 11 — 150 K (а) и его среднего пробега до диссоциации ζ : 1 — 809; 2 — 687; 3 — 496; 4 — 407 K (б) в Fe (●) и V (■)

На основании полученных зависимостей $\zeta(T)$ произведём оценку того, будут ли успевать димежузлия добираться до стоков радиационных дефектов прежде, чем произойдёт их диссоциация. Для этого используем соотношение для силы стоков

$$k^2 = \frac{6}{\langle R^2 \rangle}, \quad (4)$$

где $\langle R^2 \rangle$ — средний квадрат пробега дефекта до поглощения на стоке. По результатам анализа [17] значения k^2 для зарубежных малоактивируемых ферритно-мартенситных сталей (Eurofer, JLF-1), включая дисперсно-упрочнённые оксидами, попадают в диапазон 10^{15} — 10^{16} м⁻². В отечественной малоактивируемой ферритно-мартенситной стали ЭК-181 плотность дислокаций (около 90% от общего числа дислокаций — винтовые) составляет $\sim 10^{15}$ м⁻² [18], что соответствует значению $k^2 \sim 10^{16}$ м⁻². Поэтому для дальнейших оценок величина k^2 взята равной 10^{15} — 10^{16} м⁻². Для выбранного диапазона значений k^2 соотношение (4) даёт для среднего пробега дефектов до поглощения на стоке диапазон значений 24,5—77,5 нм. На рис. 2, б горизонтальными линиями отмечены эти значения как нижние границы диапазона, в котором подавляющая часть образующихся под облучением димежузлий будет поглощаться на стоках, не успевая диссоциировать. Из полученных результатов следует, что диссоциация димежузлий не успевает происходить до их поглощения на стоках при температуре ниже ~690—810 K в Fe и ~410—500 K в V.

Атомные механизмы диффузии и диссоциации димежузлий. На рис. 3 показаны значения доли времени χ , которое составляющие димежузлие СМА проводили на расстоянии i -БС, по отношению к среднему времени жизни до диссоциации при температуре 900—1450 K в Fe и 650—1100 K в V. Для всех температур прослеживается наличие пиков для расстояний 1-, 2-, 3-, 4-, 7-, 13-БС как для Fe, так и для V. Кроме того, при повышенных температурах появляются пики для расстояния 21-БС. Из приве-

данных на рис. 3 следует, что при наименьших рассмотренных температурах (900 К для Fe и 650 К для V) СМА проводят на расстояниях 1-, 2-, 3-, 4-, 7- и 13-БС 99% и 98% времени для Fe и V соответственно. При наибольших рассмотренных температурах (1450 К для Fe и 1100 К для V) эта величина принимает значения 78% и 82% для Fe и V соответственно.

Рис. 3. Зависимость средней доли времени χ , которое составляющие димежузлия СМА проводили на расстоянии i -БС друг от друга: a — Fe; b — V

Относительно высокие значения χ для расстояний i -БС, где $i = 1, \dots, 4$, обуславливаются, в основном, конфигурациями состоящих из двух гантелей $\langle 110 \rangle$, которые формируют димежузлия с высокими значениями энергии связи (рассчитаны МС-методом): 0,884, 0,591, 0,747, 0,504 эВ в Fe и 0,494, 0,401, 0,511, 0,408 эВ в V. Заметно более низкая энергия связи для расстояний 2- и 4-БС коррелирует с более низкими значениями χ для этих расстояний (см. рис. 3). Максимальные энергии связи двух гантелей $\langle 110 \rangle$ на расстояниях 5- и 6-БС ниже в разы и составляют всего 0,200 и 0,128 эВ для Fe и 0,119 и 0,136 эВ для V, из-за этого значения χ для этих расстояний малы.

Визуальный анализ диффузионных траекторий димежузлий показал, что они содержат значительное количество прямых участков вдоль направлений $\langle 111 \rangle$ с длинами, много больше длины элементарного скачка СМА. В качестве примера на рис. 4 показаны диффузионные траектории двух СМА, составляющих димежузлие, для Fe и V при 700 К. Это свидетельствует о том, что периодически два связанных СМА реориентируются в гантельные $\langle 111 \rangle$ конфигурации и двигаются друг относительно друга по краудинному

Рис. 4. Диффузионные траектории СМА (красные и синие линии), составляющих димежузлие, при $T = 700$ К: a — Fe; b — V

механизму по двум соседним параллельным плотноупакованным направлениям. Как следует из рис. 5, в таком случае должны образовываться конфигурации 1-, 2-, 3-, 4-, 7-, 13-, 21-БС и т.д. в полном согласии

Рис. 5. Соседние строчки узлов вдоль направлений $[111]$. Первая гантель $[111]$ расположена в нижней строчке в позиции $(0, 0, 0)$, вторая поочередно располагается в одном из узлов верхней строчки, над которыми указаны соответствующие им номера БС. Под узлами указаны их координаты в единицах $a/2$

с наблюдаемой картиной на рис. 3.

На рис. 6 представлены рассчитанные МС-методом зависимости энергии взаимодействия E^{int} двух параллельноориентированных гантелей $[111]$, находящихся в показанных на рис. 5 позициях (первый СМА всегда находится в позиции $(0, 0, 0)$, второй СМА — в одном из узлов соседней строчки узлов по плотноупакованному направлению $[111]$). Видно, что значения E^{int} максимальны (по абсолютной величине) для конфигурации 3-БС: $-1,27$ эВ и $-1,06$ эВ для Fe и V соответственно. Соседние конфигурации 1- и 7-БС обладают лишь на несколько сотых электронвольта меньшими значениями E^{int} . При движении второй гантели $[111]$ влево от положения 3-БС притяжение между СМА ослабевает заметно быстрее, чем при его движении вправо (см. рис. 6). Такая специфика профиля E^{int} должна приводить к тому, что для двух гантелей $[111]$, образующих димежузлие, конфигурации 1-, 3- и 7-БС возникают гораздо чаще прочих как в Fe, так и в V, в Fe конфигурации 2- и 4-БС возникают реже, чем 13- и 21-БС, в V конфигурация 4-БС возникает реже, чем 21-БС, а конфигурации 2- и 13-БС — примерно с одинаковой частотой.

Рис. 6. Зависимость энергии взаимодействия E^{int} двух $\langle 111 \rangle$ гантелей, образующих димежузлие, которые находятся в приведенных на рис. 5 позициях: Fe (●) и V (■)

На рис. 7 показаны температурные зависимости величины χ для конфигураций 1-, 2-, 3-, 4-, 7-, 9-,

Рис. 7. Температурные зависимости доли времени, которое димежузлия проводят в конфигурациях 1- (●), 2- (▴), 3- (■), 4- (◈), 7- (▴), 9- (◈), 13- (◈), 21-БС (★) в Fe (а) и в V (б)

13-, 21-БС в Fe и V. С ростом температуры значения χ ожидаемо падают для конфигураций с высокими значениями энергии связи (1-, 3-, 7-БС) и растут для конфигураций с низкими значениями энергии связи (2-, 4-, 13-, 21-БС). Отметим, что несмотря на то, что наибольшей энергией связи в Fe обладает димежузлие, состоящее из двух гантелей $\langle 110 \rangle$ на расстоянии 1-БС (0,884 эВ), наибольшим значением χ обладает конфигурация 3-БС, что является следствием того, что у этой конфигурации достаточно высокая энергия связи для димежузлия, как состоящего из двух гантелей $\langle 110 \rangle$ (0,747 эВ), так и из двух гантелей $\langle 111 \rangle$ (0,782 эВ).

Как видно на рис. 7, с ростом температуры растёт вероятность образования конфигураций, для которых расстояние между двумя СМА (две гантели $\langle 111 \rangle$) велико. В случае, если произойдёт реориентация этих гантелей $\langle 111 \rangle$ в гантели $\langle 110 \rangle$ в тот момент, когда расстояние между ними велико (например, 13- и 21-БС), энергия взаимодействия двух СМА значительно уменьшится, так как на этих расстояниях энергия взаимодействия гантелей $\langle 110 \rangle$ значительно меньше, чем для гантелей $\langle 111 \rangle$. Таким образом, значительно уменьшится скоррелированность миграции двух СМА, составляющих димежузлие и соответственно вырастет вероятность диссоциации димежузлия. Кроме того, возможен и другой механизм диссоциации, когда две гантели $\langle 111 \rangle$ разбегаются друг относительно друга по краудионному механизму на расстояние большее 31-БС: следующее по плотноупакованной цепочке расстояние 42-БС (см. рис. 5) уже превышает критерий диссоциации на рис. 5, а. На рис. 6 видно, что на расстояниях больше 31-БС энергия взаимодействия двух гантелей $\langle 111 \rangle$ действительно мала, что подтверждает обоснованность выбранного критерия диссоциации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено МД-исследование термической диссоциации димежузлий для температурных диапазонов 900—1450 К и 650—1100 К в ОЦК Fe и V соответственно. Получены температурные зависимости среднего времени жизни димежузлий до диссоциации и их аналитические приближения, позволяющие экстраполировать полученные данные в область более низких температур. Определены энергии активации диссоциации димежузлий: 0,98 эВ и 0,60 эВ в Fe и V соответственно.

С помощью рассчитанных МД-методом температурных зависимостей коэффициентов диффузии димежузлий для температурных диапазонов 150—1000 К и 200—800 К в ОЦК Fe и V соответственно и полученных температурных зависимостей среднего времени жизни димежузлий до диссоциации определены зависимости средних пробегов димежузлий до их диссоциации. Для типичных значений сил стоков радиационных дефектов в радиационно-стойких конструкционных материалах (10^{15} — 10^{16} м⁻²) определены температуры, ниже которых большая часть димежузлий поглощается на стоках, не успев продиссоциировать: 690—810 К и 410—500 К для Fe и V соответственно.

Анализ расстояний между двумя СМА, составляющими димежузлие, в процессе его диффузии показал, что наибольшие доли времени СМА проводят на расстояниях 1-, 3- и 7-БС (максимальное значение доли времени — для расстояния 3-БС). При 900 К для Fe и 650 К для V СМА проводят на расстояниях 1-, 2-, 3-, 4-, 7- и 13-БС 99% и 98% времени для Fe и V соответственно. При наибольших рассмотренных температурах (1450 К для Fe и 1100 К для V) эта величина принимает значения 78% и 82% для Fe и V соответственно.

Диффузия димежузлия носит смешанный характер 1D/3D. Периодически два связанных СМА в стабильной конфигурации (две гантели $\langle 110 \rangle$) реориентируются в конфигурацию, состоящую из двух гантелей $\langle 111 \rangle$, и двигаются друг относительно друга по краудионному механизму по двум соседним параллельным плотноупакованным направлениям.

Диссоциация димежузлий происходит за счёт двух механизмов. Первый механизм реализуется, если происходит реориентация гантелей $\langle 111 \rangle$ в гантели $\langle 110 \rangle$ в тот момент, когда расстояние между ними достаточно велико (например, 13- и 21-БС). В этом случае энергия взаимодействия двух СМА значительно уменьшится, так как на этих расстояниях энергия взаимодействия гантелей $\langle 110 \rangle$ значительно меньше, чем для гантелей $\langle 111 \rangle$, а значит, значительно уменьшится скоррелированность миграции этих СМА и вырастет вероятность диссоциации димежузлия. Второй механизм реализуется в случае, если

две гантели $\langle 111 \rangle$ разбегаются друг относительно друга по краудинному механизму на расстояние больше 5 параметров решётки, где энергия их взаимодействия становится мала.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-08-01205-а с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://ckp.nrcki.ru/>.

REFERENCES

1. **Stoller R.E., Odette G.R., Wirth B.D.** Primary damage formation in bcc iron. — *J. Nucl. Mater.*, 1997, vol. 251, pp. 49—60.
2. **Morishita K., Diaz de la Rubia T.** A molecular dynamics simulation study of displacement cascades in vanadium. — *J. Nucl. Mater.*, 1999, vol. 271—272, pp. 35—40.
3. **Nordlund K., Wallenius J., Malerba L.** Molecular dynamics simulations of threshold displacement energies in Fe. — *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B*, 2006, vol. 246, pp. 322—332.
4. **Malerba L., Marinica M.C., Anento N.** Comparison of empirical interatomic potentials for iron applied to radiation damage studies. — *J. Nucl. Mater.*, 2010, vol. 406, pp. 19—38.
5. **Romanov V.A., Sivak A.B., Chernov V.M.** Crystallographic, energetic and kinetic characteristics of self-point defects and their clusters in BCC iron. 6. Clusters of self interstitial atoms. — *VANT. Ser. Materialovedenie i novye materialy (Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Material authority and new materials)*, 2006, vol. 1(66), pp. 223—232 (in Russian).
6. **Calder A.F., Bacon D.J.** A molecular dynamics study of displacement cascades in α -iron. — *J. Nucl. Mater.*, 1993, vol. 207, pp. 25—45.
7. **Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A.** Energetic, kinetic and crystallographic characteristics of self-point defects in vanadium and iron crystals. — In: *Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA 2007)*. Monterey, California, April 15—19, 2007, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, 2007, pp. 1—12.
8. **Zhou W.H., Zhang C.G., Li Y.G., Zeng Z.** Creeping motion of self interstitial atom clusters in tungsten. — *Sci. Rep.*, 2014, vol. 4, № 5096, pp. 1—4.
9. **Anento N., Serra A., Osetsky Yu.N.** Atomistic study of multimechanism diffusion by self-interstitial defects in α -Fe. — *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2010, vol. 18, № 025008, pp. 1—18.
10. **Ryabov V.A., Pechenkin V.A., Molodtsov V.L., Terentyev D.** Contribution of di-SIA to mass transport in Fe—Cr alloys. — *J. Nucl. Mater.*, 2016, vol. 472, pp. 43—46.
11. **Romanov V.A., Sivak A.B., Chernov V.M.** Crystallographic, energetic and kinetic characteristics of self-point defects and their clusters in BCC iron. — *VANT. Ser. Materialovedenie i novye materialy (Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Material authority and new materials)*, 2006, vol. 1(66), pp. 129—232 (in Russian).
12. **Romanov V.A., Sivak A.B., Sivak P.A., Chernov V.M.** Equilibrium and diffusion characteristics of self-point defects in vanadium. — *VANT. Ser. Termoyadernyi sintez (Problems of Atomic Science and Technology. Ser. Thermonuclear Fusion)*, 2012, issue 2, pp. 60—80 (in Russian).
13. **Verlet L.** Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard—Jones molecules. — *Phys. Rev.*, 1967, vol. 159, pp. 98—103.
14. **Osetsky Yu.N.** Atomistic study of diffusional mass transport in metals. — *Defect and Diffusion Forum*, 2001, v. 188—190, pp. 71—92.
15. **Sivak A.B., Romanov V.A., Chernov V.M.** Diffusion characteristics of self-point defects in BCC iron. — *Perspektivnye materialy (Perspective materials)*, 2009, № 6, pp. 5—11 (in Russian).
16. **Guinan M.W., Stuart R.N., Borg R.J.** Fully dynamic computer simulation of self-interstitial diffusion in tungsten. — *Phys. Rev. B*, 1977, vol. 15, pp. 699—710.
17. **Zinkle S.J., Snead L.L.** Designing radiation resistance in materials for fusion energy. — *Ann. Rev. Mat. Res.*, 2014, vol. 44, pp. 241—267.
18. **Vershinina T., Leont'eva-Smirnova M.** Dislocation density evolution in the process of high-temperature treatment and creep of EK-181 steel. — *Mater. Charact.*, 2017, vol. 125, pp. 23—28.

AUTHORS

Demidov D.N. NRC “Kurchatov Institute”, pl. Akademika Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; Demidov_DN@nrcki.ru

Sivak A.B. NRC “Kurchatov Institute”, pl. Akademika Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; Sivak_AB@nrcki.ru

Sivak P.A. NRC “Kurchatov Institute”, pl. Akademika Kurchatova 1, 123182 Moscow, Russia; Sivak_PA@nrcki.ru

Received 5 February 2019

Revised 24 March 2019

Accepted 26 March 2019

Problems of Atomic Science and Technology
Ser. Thermonuclear Fusion, 2019, vol. 42, issue 2, pp. 99—107