ФИЗИКА МЕТАЛЛОВ И МЕТАЛЛОВЕДЕНИЕ, 2023, том 124, № 5, с. 400–408

СТРУКТУРА, ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ДИФФУЗИЯ

УДК 539.12.043

ДИФФУЗИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КЛАСТЕРОВ СОБСТВЕННЫХ МЕЖДОУЗЕЛЬНЫХ АТОМОВ В ВАНАДИИ: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ

© 2023 г. Д. Н. Демидов[a], *, А. Б. Сивак[a], П. А. Сивак[a]

[a]НИЦ "Курчатовский институт", пл. Академика Курчатова, 1, Москва, 123098 Россия

**e-mail: Demidov_DN@nrcki.ru*

Поступила в редакцию 30.01.2023 г.
После доработки 17.03.2023 г.
Принята к публикации 18.03.2023 г.

Методом молекулярной динамики исследованы температурные зависимости диффузионных характеристик радиационных дефектов – кластеров собственных междоузельных атомов (СМА), содержащих до пяти СМА, – в температурном диапазоне 300–1000 K в ОЦК-V. Диффузионные характеристики включали в себя коэффициент диффузии, корреляционный множитель меченых атомов, среднее перемещение до смены направления миграции, частоту смены направления миграции, др. Определены значения энергии активации диффузии и энергии активации смены направления миграции для рассмотренных типов дефектов для разных температурных диапазонов. Обсуждаются зависимости механизма диффузии кластеров СМА (1D vs 3D) от температуры и размера кластеров и их возможное влияние на параметры феноменологических моделей изменения микроструктуры материала под облучением (стоковые силы сферических поглотителей).

Ключевые слова: ванадий, молекулярная динамика, радиационные дефекты, кластеры собственных межузельных атомов, коэффициенты диффузии, механизмы диффузии

DOI: 10.31857/S0015323023600132, **EDN:** OKWTMC

ВВЕДЕНИЕ

Диффузия радиационных дефектов к стокам (дислокации, границы зерен, субграницы, поверхности раздела фаз, и т.д.) и их поглощение приводят к эволюции микроструктуры конструкционных материалов термоядерных и ядерных реакторов и, как следствие, к изменению их физико-механических свойств (радиационно-ускоренная ползучесть, радиационное охрупчивание и радиационное вакансионное распухание материалов) [1]. Для построения физических моделей изменения свойств материалов под радиационными, механическими и термическими нагрузками необходимо знать характеристики радиационных дефектов, которые являются параметрами таких моделей. В качестве модельного материала в настоящей работе выбран ванадий как металл, являющийся основой малоактивируемых ванадиевых сплавов (например, V–4Ti–4Cr), рассматриваемых в качестве кандидатных конструкционных материалов для бланкета перспективных термоядерных установок [2–4] и оболочек твэлов реакторов деления на быстрых нейтронах [5, 6].

В процессе повреждающего нейтронного каскадообразующего облучения, характерного для термоядерного источника нейтронов, образуются не только собственные точечные дефекты (СТД), но и их кластеры [7]. По результатам молекулярно-динамического (МД) моделирования каскадов атомных столкновений с повреждающей энергией от 1 до 50 кэВ в ванадии 68% оставшихся после окончания каскада собственных междоузельных атомов (СМА) не образуют кластеров, при этом в кластерах размером от двух до пяти СМА содержится 31% СМА [8, 9]. Примем за размер кластера q число содержащихся в кластере СМА, а кластер СМА размером q будем обозначать здесь и далее как q-СМА.

Экспериментальное определение свойств СМА и их небольших кластеров затруднено малостью их пространственных размеров (~ нм). Поэтому для их изучения применяются методы компьютерного моделирования: в [10–16] были рассчитаны энергии образования и диффузионные характеристики одиночных СМА и их кластеров (до 61-СМА) в V. Ограничением методов компьютерного моделирования является высокая чувствительность результатов к используемому потенциалу межатомного взаимодействия. Проведенное в [17] сравнение экспериментальных данных с результатами расчетов в рамках теории функционала электронной плотности (ТФЭП) в отношении

упругих модулей кристалла V показало их значительное рассогласование, что делает проблематичным ее применение для описания свойств СТД, а также использование потенциалов, чьи параметры подогнаны к такого рода данным. В связи с этим результаты работ [10–13] требуют проверки и уточнения с использованием надежного потенциала межатомного взаимодействия, согласованного с известными экспериментальными данными. В работе [17] было показано, что потенциал межатомного взаимодействия R01 [14], разработанный для ОЦК-металла V, хорошо описывает известные из эксперимента объемные свойства кристаллов (упругие постоянные при 0 K, температурная зависимость параметра решетки a), свойства СМА и вакансий, пороговые энергии смещения, и в связи с этим потенциал R01 был рекомендован для МД-моделирования каскадов атомных столкновений и СТД. Ранее с этим потенциалом уже были определены кристаллографические, энергетические и диффузионные свойства 2-СМА [15, 16], а также проведено моделирование каскадов атомных столкновений [8, 9].

В настоящей работе для ванадия с использованием потенциала R01 методом молекулярной статики (МС) определяются кристаллографические и энергетические характеристики кластеров СМА с $q = 3$–5, а МД-методом – их диффузионные характеристики в диапазоне температур $T = 300$–1000 K. Обсуждаются зависимости механизма ($1D$ vs $3D$) диффузии кластеров СМА от температуры и размера кластеров и их возможное влияние на параметры феноменологических моделей изменения микроструктуры материала под облучением (стоковые силы сферических поглотителей).

МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И РАССЧИТЫВАЕМЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Молекулярная статика. Для МС-расчетов использована методика, описанная в [16], позволяющая рассчитывать энергии образования q-СМА с $q = 3$–5 с точностью не менее 10^{-3} эВ. Для каждого рассматриваемого размера кластера q рассчитывали различные атомные конфигурации, чтобы определить наиболее энергетически выгодную конфигурацию с энергией образования $E^{\mathrm{F}}(q)$. Энергии связи q-СМА $E^{\mathrm{B}}(q)$ определяли относительно наиболее энергетически выгодной конфигурации $(q-1)$-СМА: $E^{\mathrm{B}}(q) = E^{\mathrm{F}}(q-1) + E^{\mathrm{F}}(1) - E^{\mathrm{F}}(q)$.

Молекулярная динамика. Для МД-моделирования диффузии кластеров СМА с $q = 3$–5 и определения на этой основе их диффузионных характеристик использована та же методика, что и в [18], в которой проводили аналогичные расчеты для ОЦК-Fe. В качестве стартовых конфигураций кластеров СМА выбирали их наиболее энергетически выгодные конфигурации, которые совпадают с таковыми для кластеров аналогичных размеров в Fe [18]. Определяли следующие характеристики:

– коэффициент диффузии D кластера СМА;

– коэффициент диффузии меченых атомов D^{tr} при диффузии кластера СМА (коэффициент самодиффузии в расчете на один СМА);

– корреляционный множитель для меченых атомов $f^{\mathrm{tr}} = D^{\mathrm{tr}}/D$;

– среднее перемещение кластера до смены направления миграции l_{ch};

– частота смены направления миграции кластера ν^{ch}.

Величина f^{tr} чувствительна к механизму диффузии дефекта, ее можно использовать в качестве индикатора изменения механизма диффузии кластеров СМА при изменении температуры или размера кластера. Например, в случае одномерной (1D) диффузии краудиона $f^{\mathrm{tr}} = 0$ [19], а в случае $3D$-диффузии ⟨110⟩ гантели по механизму Джонсона $f^{\mathrm{tr}} = 0.4151 \pm 0.0001$ [16]. На практике механизм диффузии кластеров СМА, как правило, смешанный, когда кластеры совершают некоторое число скачков вдоль одного из направлений ⟨111⟩, а затем меняют это направление миграции на другое, что является следствием смены направления миграции.

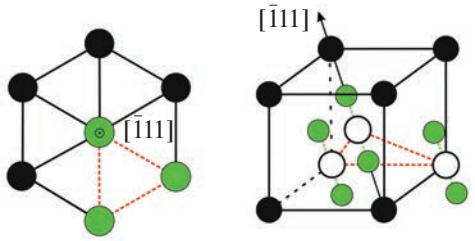
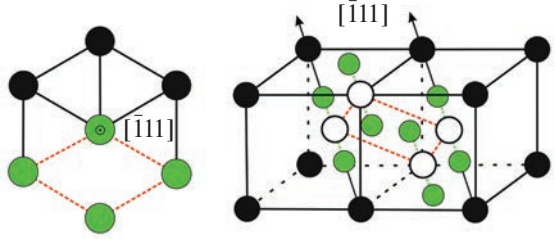
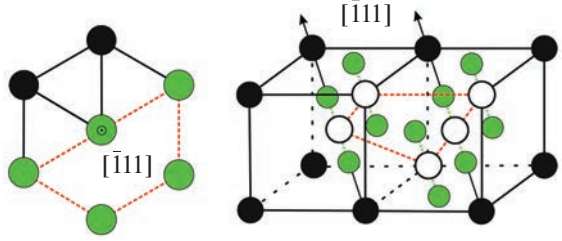
Другими удобными величинами, позволяющими характеризовать соотношение $1D/3D$-диффузии, являются среднее перемещение кластера до смены направления миграции [20, 21] и частота смены направления миграции [18].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Кристаллографические и энергетические характеристики кластеров СМА. В табл. 1 представлены кристаллографические конфигурации, энергии образования и энергии связи наиболее энергетически выгодных кластеров СМА в V, рассчитанные МС-методом. Эти кластеры представляют собой набор краудионов или гантельных СМА с расщеплением вдоль ⟨111⟩. В проекции на плоскость, нормальную к направлению расщепления, СМА занимают наиболее компактно набор соседних плотноупакованных направлений.

Сравнение полученных в настоящей работе значений E^{F} для 3-, 4-СМА с ТФЭП-данными [11] (табл. 1) показало, что E^{F} в [11] значительно ниже, чем в настоящей работе, что обусловлено нереалистично низким значением E^{F} для 1-СМА в [11] (2.14 эВ), которое даже меньше E^{F} для вакансии (2.37 эВ [11]). Значения E^{B} и E^{F}, полученные в [11], не согласуются между собой. В табл. 1 приведены значения E^{B} из [11], а в скобках рядом

Таблица 1. Энергия образования E^F и энергия связи E^B наиболее энергетически выгодных q-СМА (q = 3—5) по данным настоящей работы и [10, 11]

q	Кристаллографическая конфигурация	E^F, эВ	E^B, эВ
3		8.05 7.55 [10] 5.13 [11]	0.93 1.33 [10] 0.89 (0.72) [11]
4		9.61 9.37 [10] 6.05 [11]	1.61 1.49 [10] 1.78 (1.22) [11]
5		11.38 11.08 [10]	1.40 1.61 [10]

с ними – пересчитанные нами значения по значениям E^F из [11]. Эти значения E^B ниже значений настоящей работы на ~25%. Численное согласие результатов настоящей работы с результатами [10] заметно лучше (табл. 1). Однако пространственные конфигурации наиболее устойчивых кластеров в [10] отличны от приведенных в табл. 1: СМА расщеплены не вдоль направления ⟨111⟩, а вдоль промежуточных между ⟨110⟩ и ⟨111⟩ направлений.

Диффузионные характеристики кластеров СМА. На рис. 1 приведены рассчитанные температурные зависимости коэффициента диффузии D и корреляционного множителя f^{tr} для q-СМА (q = = 3–5) в V. Для сравнения на этом же рисунке приведены аналогичные зависимости для одиночных СМА (1-СМА) и 2-СМА, полученные ранее в [14–16].

Таблица 2. Подгоночные параметры A, B и C выражения (1) для q-СМА (q = 1–5)

q	A	B, эВ	$C \times 10^3$, эВ^2
1	6.48 ± 0.07	0.089 ± 0.007	1.80 ± 0.15
2	7.75 ± 0.22	0	2.70 ± 0.30
3	7.15 ± 0.18	0.112 ± 0.017	0
4	7.83 ± 0.04	0.014 ± 0.004	2.04 ± 0.07
5	7.85 ± 0.14	0.056 ± 0.014	0.28 ± 0.02

В высокотемпературной области значения D рассмотренных дефектов различаются слабо: при 1000 K максимальное различие наблюдается между 1- и 5-СМА (в 2.4 раза). В низкотемпературной области различие становится значительным: значение D для 5-СМА, наибольшее среди значений D для q-СМА (q = 1–5) при $T \le 400$ K, в 9 раз больше, чем для 1-СМА.

Температурные зависимости D не линейны в аррениусовских координатах (рис. 1а), во всем рассмотренном диапазоне температур с хорошей точностью аппроксимируются выражением:

$$D\ [\text{см}^2/\text{с}] = \exp\left(-A - \beta B - C\beta^2\right), \qquad (1)$$

чьи подгоночные параметры A, B и C, полученные методом наименьших квадратов, сведены в табл. 2.

С увеличением размера кластера q от 1 до 5 происходит значительное увеличение степени одномерности диффузии, о чем свидетельствует падение f^{tr} от ~0.3–0.4 для 1-СМА до 0.03–0.06 для 4- и 5-СМА (рис. 1б). Качественно схожая зависимость f^{tr} от q была получена ранее для Fe в [18]:

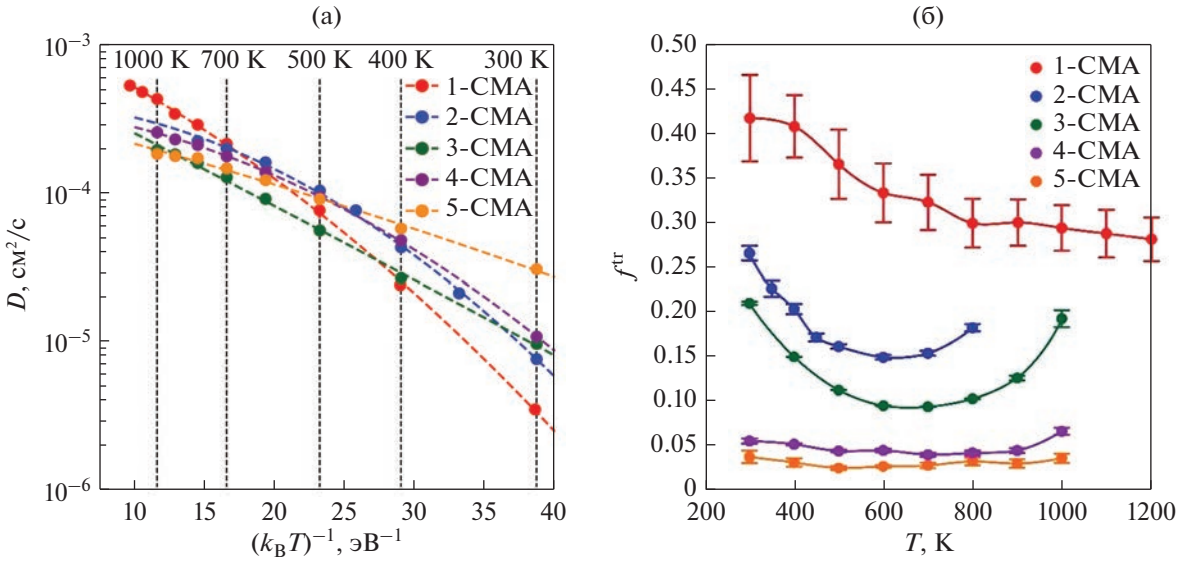


Рис. 1. Температурные зависимости D (а) и f^{tr} (б) для q-СМА (q = 1–5) в V. Пунктирные линии — соотношение (1) с параметрами из табл. 2.

f^{tr} падает от ~0.3 для 1-СМА до 0.03–0.08 для 3-, 4- и 5-СМА.

Визуальный анализ диффузионных траекторий подтверждает вывод об усилении вклада 1D-механизма миграции в перемещение q-СМА с ростом q, как можно убедиться из представленных на рис. 2 примеров диффузионных траекторий q-СМА (q = 1–5) при T = 400 K. Диффузия 5-СМА при T = 400 K является практически полностью одномерной (наблюдали единичные случаи смены направления миграции за все время моделирования), в то время как при T = 300 K такие смены направления миграции не наблюдали ни разу за все время моделирования.

При этом значения f^{tr} не обращаются в ноль в случае 5-СМА при $T \le 400$ K. Это является следствием того, что атомы, составляющие расположенные в соседних плотноупакованных направлениях СМА, формирующих кластер, время от времени меняются местами между собой, покидая “свои” плотноупакованные направления. Таким образом, даже если кластер все время двигается одномерно, ему не удается полностью “замести следы” своего движения, что приводит к ненулевому D^{tr}, и, как следствие, к ненулевому f^{tr}.

Коэффициенты диффузии q-СМА (q = 1–4), полученные в настоящей работе, заметно выше полученных в [10], так как высокоподвижные краудионные конфигурации в [10] являются метастабильными и существуют значительно меньшую долю времени, чем в настоящей работе. В [13] наиболее энергетически выгодными конфигурациями кластеров СМА являются наборы из краудионов, формирующие с увеличением размера краевые дислокационные петли с вектором Бюргерса 1/2⟨111⟩. Наименьший из рассмотренных в [13] кластеров СМА представляет собой набор из 7 краудионов. Его коэффициент диффузии близок к значениям, полученным в настоящей работе для 5-СМА для всего рассмотренного диапазона температур, что, по-видимому, является следствием одинакового (краудионного) механизма диффузии этих кластеров.

Частота смены направлений миграции кластеров СМА и их среднее перемещение до смены направления миграции. На рис. 3 представлены температурные зависимости частоты смены направления миграции ν^{ch} и среднего перемещения дефекта до смены направления миграции l_{ch} для q-СМА (q = = 1–5) в V. Погрешности на графиках ν^{ch} и l_{ch} не указывали, если они были меньше размера точек на графиках. Величины ν^{ch} и l_{ch} сильно зависят от q во всем диапазоне рассмотренных значений q, поэтому эти величины более удобны для определения соотношения 1D/3D-диффузии для кластеров СМА по сравнению с f^{tr}.

Температурные зависимости ν^{ch} не являются линейными в аррениусовских координатах во всем рассмотренном диапазоне температур (рис. 3а). Хорошее описание МД-данных с помощью аррениусовских зависимостей возможно получить лишь для частных диапазонов температур. Подгоночные параметры таких зависимостей (предэкспоненциальный множитель ν_0 и энергия активации смены направления миграции E^{ch}) с указанием диапазонов температур данных, по которым они были построены, сведены в табл. 3 (подгоночные значения ν_0 и E^{ch} получены методом наименьших

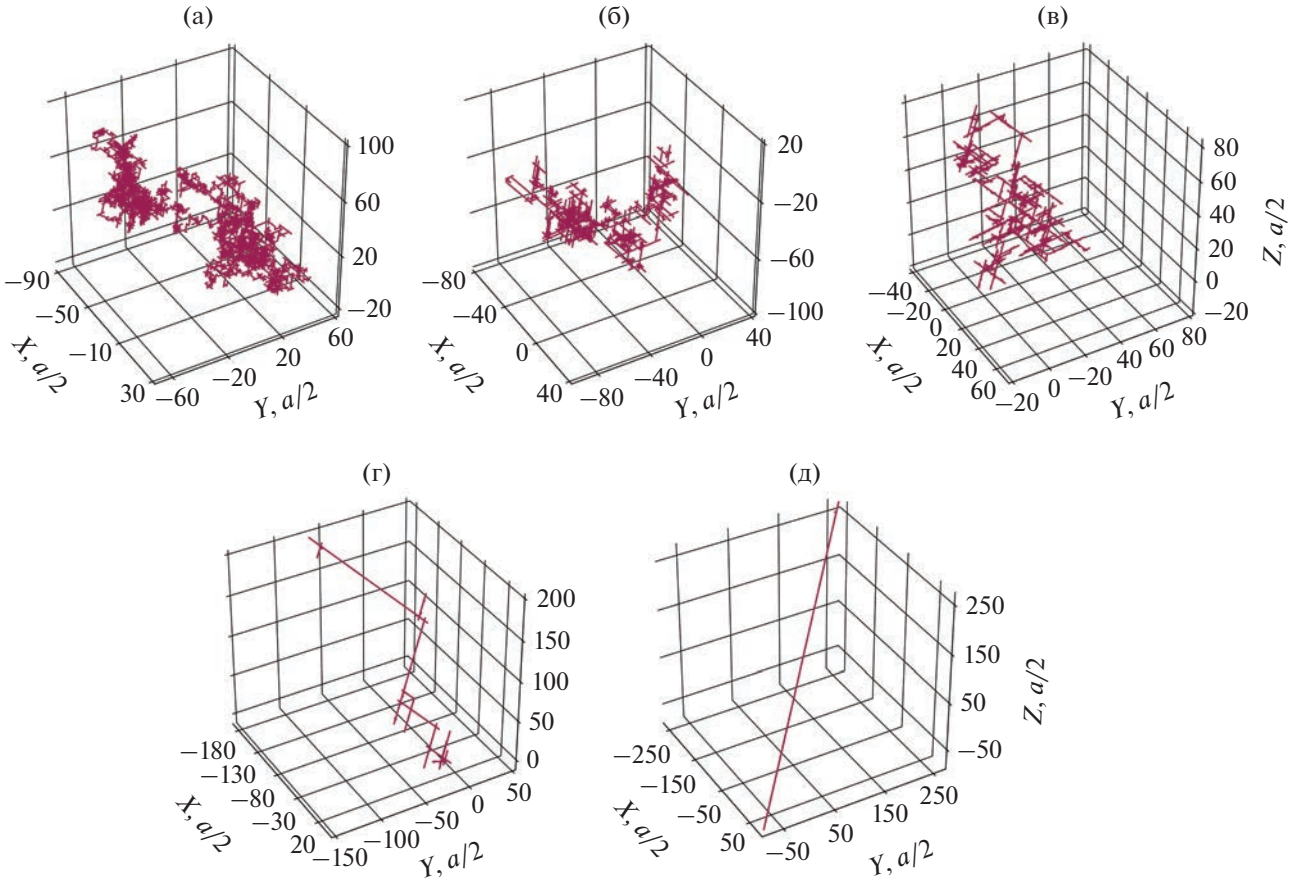


Рис. 2. Примеры диффузионных траекторий q-CMA при 400 K длительностью t: а – $q = 1$, $t = 6$ нс, б – $q = 2$, $t = 11$ нс, в – $q = 3$, $t = 52$ нс, г – $q = 4$, $t = 40$ нс, д – $q = 5$, $t = 26$ нс.

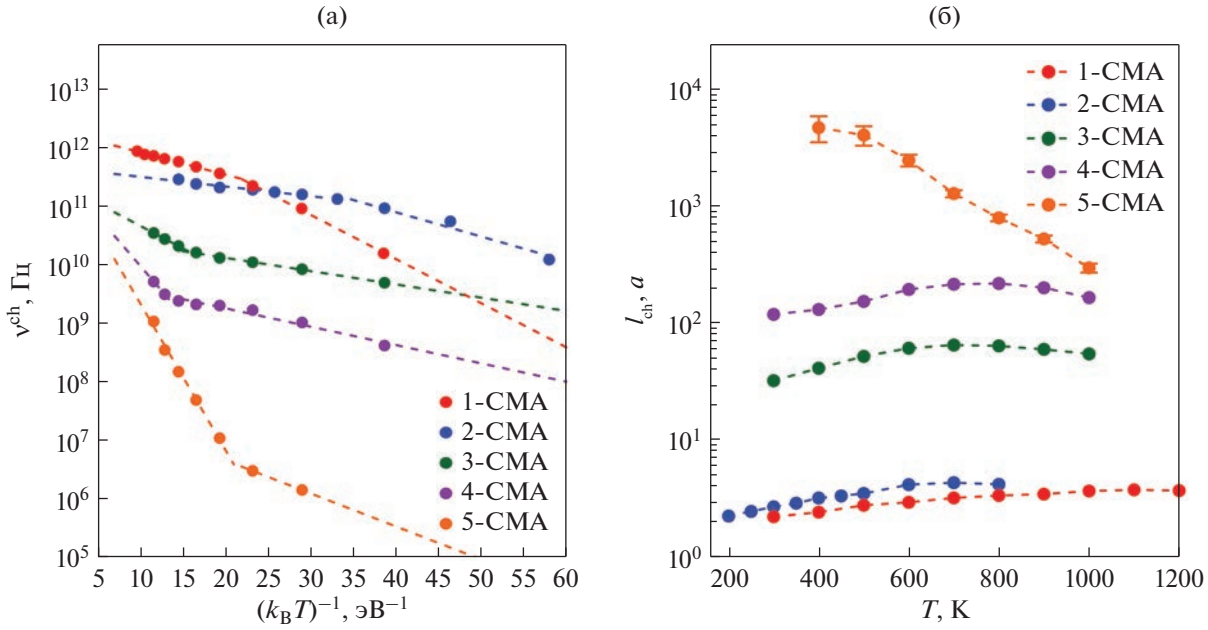


Рис. 3. Температурные зависимости ν^{ch} (а) и l_{ch} (б) для q-CMA ($q = 1–5$) в V.

Таблица 3. Параметры аррениусовских аппроксимаций температурных зависимостей ν^{ch} для q-СМА (q = 1–5) в V

q	Низкотемпературная аппроксимация			Высокотемпературная аппроксимация		
	ν_0, Гц	E^{ch}, эВ	диапазон T, K	ν_0, Гц	E^{ch}, эВ	диапазон T, K
1	$(1.3 \pm 0.3) \times 10^{13}$	0.173 ± 0.008	300–500	$(2.0 \pm 0.1) \times 10^{12}$	0.088 ± 0.003	500–1200
2	$(3.6 \pm 2.6) \times 10^{12}$	0.096 ± 0.012	200–350	$(4.6 \pm 0.4) \times 10^{11}$	0.038 ± 0.004	350–800
3	$(3.7 \pm 0.2) \times 10^{10}$	0.052 ± 0.002	300–800	$(2.7 \pm 0.1) \times 10^{11}$	0.176 ± 0.004	800–1000
4	$(7.6 \pm 1.4) \times 10^{9}$	0.072 ± 0.007	300–850	4.7×10^{11}	0.389	850–1000
5	6.2×10^{7}	0.130	400–550	$(7.0 \pm 3.0) \times 10^{11}$	0.58 ± 0.03	550–1000

квадратов, погрешности не указаны в случае нехватки данных для проведения статистического анализа).

В области низких температур (см. табл. 3) значение E^{ch} меняется слабо с ростом q от 3 до 5: $E^{ch} \sim$ ~ 0.1 эВ для q-СМА с q = 3–5 в V ($E^{ch} \sim 0.2$ эВ в Fe [18]). При этом значение ν_0 падает на три порядка: от 3.7×10^{10} до 6.2×10^{7} Гц в V (от 8.4×10^{10} до 1.4×10^{7} Гц в Fe [18]).

В области высоких температур (см. табл. 3) с увеличением q от 3 до 5 наблюдается рост E^{ch} от 0.18 до 0.58 эВ (от 0.39 до 1.13 эВ в Fe [18]). Значение ν_0 при этом растет от 2.7×10^{11} до 7.0×10^{11} Гц в V (от 1.0×10^{12} до 4.5×10^{13} Гц в Fe [18]).

Такое качественно различающееся поведение зависимостей величин E^{ch} и ν_0 от размера кластера СМА для низко- и высокотемпературных областей как в V, так и в Fe обусловлено, по всей видимости, доминированием разных механизмов смены направлений миграции кластеров СМА при разных температурах. Исходя из приведенных выше особенностей размерных зависимостей $E^{ch}(q)$ и $\nu_0(q)$, можно предположить, что при низких T доминирующим является механизм, при котором происходит поочередная смена направлений расщепления ⟨111⟩ гантелей, составляющих кластер. В пользу этого свидетельствует слабо зависящая от q величина E^{ch} и сильное падение ν_0 с ростом q. При высоких T доминирующим становится механизм, при котором направления расщепления ⟨111⟩ гантелей, составляющих кластер, происходит одновременно, на что указывает увеличение E^{ch} с ростом q, а также отсутствие падения ν_0 с ростом q.

Величина l_{ch} для 1-СМА растет от $2.2a$ до $3.8a$ с повышением T от 300 до 1000 K (рис. 3б) и равна в среднем $3a$ для V, что согласуется с падением f^{tr} с температурой (рис. 1б). Для 2-СМА величина l_{ch} увеличивается от $2.3a$ до $4.4a$ с ростом T (рис. 3б), что также согласуется со снижением f^{tr} с температурой (рис. 1б). В диапазоне T от 300 до 1000 K величина l_{ch} для q-СМА с q = 3, 4, 5 изменяется в пределах от $33a$ до $66a$, от $94a$ до $218a$, от $156a$ до $4686a$ соответственно. Для приведенных на рис. 2 диффузионных траекторий l_{ch} имеет значения $2.4a$, $3.2a$, $32.6a$, $118a$, $4686a$ для q = 1, 2, 3, 4, 5 соответственно.

Стоковые силы различных элементов микроструктуры для радиационных дефектов, являющиеся параметрами феноменологических моделей изменения микроструктуры материала под повреждающим облучением, чувствительны к механизму диффузии дефектов и могут различаться на несколько порядков величины для $3D$- и $1D$-механизмов диффузии [20]. Так, стоковая сила k^2 сферических поглотителей (например, вакансионные поры) радиусом R, концентрацией N (число поглотителей в единице объема) и соответствующей объемной долей $f_V = 4/3\pi R^3 N$, для $3D$-механизма диффузии ($l_{ch} \sim a$) [22] равна:

$$k_{3D}^2 = \frac{3f_V}{R^2}\frac{1-f_V}{1-1.8f_V^{1/3}+f_V-0.2f_V^2} \approx \frac{3f_V}{R^2}, \qquad (2)$$

а для для $1D$-механизма диффузии ($l_{ch} \to \infty$) [21]:

$$k_{1D}^2 = 6\left(\pi R^2 N\right)^2 = \frac{27}{8}\frac{f_V^2}{R^2}. \qquad (3)$$

Из (2), (3) следует, что отношение k_{3D}^2/k_{1D}^2 равно:

$$\frac{k_{3D}^2}{k_{1D}^2} = \frac{8}{9}f_V^{-1}\frac{1-f_V}{1-1.8f_V^{1/3}+f_V-0.2f_V^2} \approx \frac{8}{9}f_V^{-1}. \qquad (4)$$

Например, при $f_V = 10^{-3}$, $k_{3D}^2/k_{1D}^2 = 1082$.

Стоковую силу сферического поглотителя для дефектов со смешанным $1D/3D$-механизмом диффузии дефекта можно определить с помощью выражения [24],

$$\frac{k^2}{k_{1D}^2} = \frac{1}{2}\left[1+\sqrt{1+4x^{-2}}\right], \qquad (5)$$

где

$$x^2 = \frac{l_{ch}^2 k_{1D}^2}{12} + \frac{k_{1D}^4}{k_{3D}^4}. \qquad (6)$$

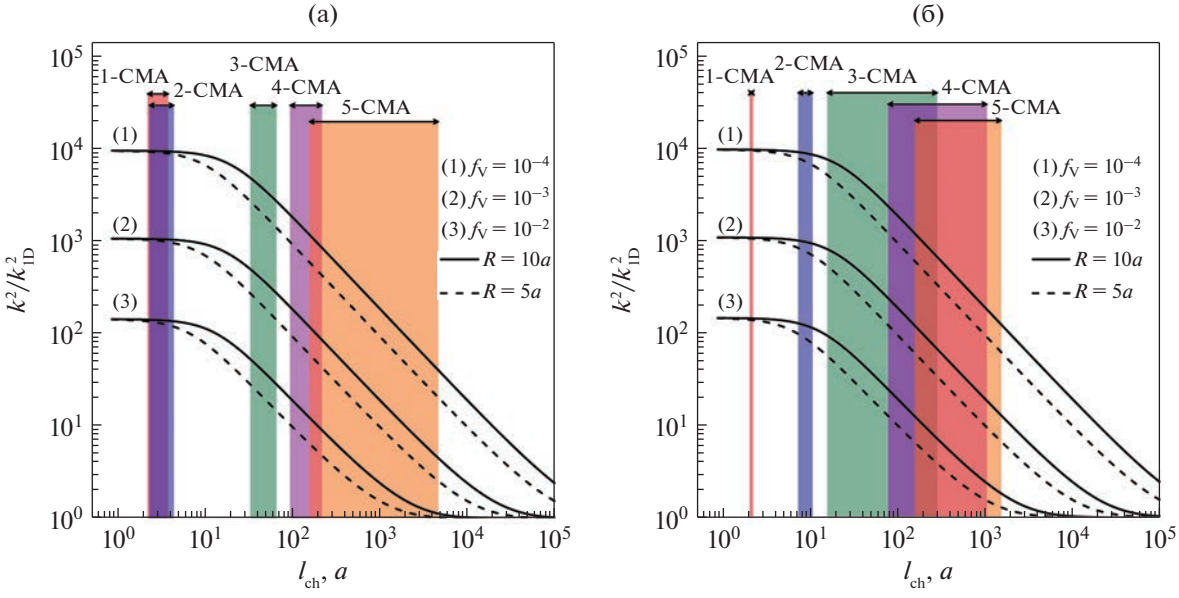


Рис. 4. Зависимости k^2/k_{1D}^2 для сферических поглотителей от l_{ch}, рассчитанные с помощью (2)–(6). Цветовыми полями указаны диапазоны МД-значений l_{ch} для q-СМА (q = 1–5) при 300 K ≤ T ≤ 1000 K: (а) V; (б) Fe.

С помощью (2)–(6) определим значения l_{ch}, при которых $k^2 = 1/2\,k_{3D}^2$ и $k^2 = 2k_{1D}^2$:

$$l_{ch} = 6k_{1D}k_{3D}^{-2} \approx 3\sqrt{1.5}R \quad \text{при} \quad k^2 = 1/2\,k_{3D}^2; \qquad (7)$$

$$l_{ch} = \sqrt{6}k_{1D}^{-1} = \frac{4}{3}Rf_V^{-1} \quad \text{при} \quad k^2 = 2k_{1D}^2. \qquad (8)$$

Из (7), (8) видно, что: 1) если $l_{ch} \le R$, то $k^2 \approx k_{3D}^2$; 2) если $l_{ch} \gg Rf_V^{-1}$, то $k^2 \approx k_{1D}^2$. Для иллюстрации выполнения этих соотношений на рис. 4 представлены зависимости k^2/k_{1D}^2 для сферических поглотителей от l_{ch}, рассчитанные с помощью уравнений (2)–(6) для разных значений R и f_V (указаны на рисунке). Цветовыми полями на рисунке указаны диапазоны значений l_{ch} для q-СМА, полученные МД-методом при 300 K ≤ T ≤ ≤ 1000 K в настоящей работе для V (также для сравнения представлены данные для Fe [18]). Например, для пор с $R \ge 10a$ в V можно сделать вывод, что влияние 1D-механизма диффузии на силу стока необходимо учитывать для q-СМА с $q \ge 3$, а для СМА и 2-СМА влияние 1D-механизма недостаточно, чтобы вызвать заметные изменения k^2.

Поскольку стоковые силы элементов микроструктуры для радиационных дефектов чувствительны к механизму диффузии радиационных дефектов, то разность потоков радиационных дефектов разного знака (вакансии, СМА) на элементы микроструктуры будет определяться не только скоростью генерации радиационных дефектов (сна), но и распределением создаваемых в каскадах кластеров СМА по размерам, характерным для данного нейтронного спектра. В ванадии, как показали результаты исследования [8, 9], распределение создаваемых в каскадах кластеров СМА по кластерам разного размера практически не зависит от повреждающей энергии каскада. Различие в поведении материала под облучением в разных нейтронных спектрах будет определяться различиями в соотношении передачи кинетической энергии нейтронов атомам материала по реакциям упругого и неупругого рассеяния нейтронов [25, 26], а также разной скоростью ядерных реакций, приводящих к трансмутации элементов сплава, в т.ч. разной скоростью наработки газовых примесей (H, He) [27].

Распределение создаваемых в каскадах атомных столкновений СМА по кластерам разного размера в V выглядит следующим образом [8]: 68% СМА содержится в виде 1-СМА, 19% – в виде 2-СМА, 7% – в виде 3-СМА, 3% – в виде 4-СМА, 1% – в виде 5-СМА, 1% – в виде q-СМА с $q > 5$. Как показано в [15], при температурах выше 400–500 K термическая диссоциация 2-СМА происходит быстрее, чем 2-СМА успевает добраться до стоков (разброс температур обусловлен рассмотренным диапазоном плотностей стоков), т.е. вклад 2-СМА в кинетику эволюции микроструктуры при $T > 500$ K практически отсутствует и можно упрощенно считать, что в каскадах образуется 87% 1-СМА. Отметим, что для ванадиевых сплавов, рассматриваемых в качестве кандидатов на роль конструкционного материала активных зон быстрых и гибридных реакторов, нижняя граница окна рабочих температур составляет около 350°C (~620 K). Энергия диссоциации 3-СМА в V

(1.1 эВ – определяется как сумма энергии связи 3-СМА 0.93 эВ (табл. 1) и энергии миграции 1-СМА 0.17 эВ [17]) примерно равна энергии диссоциации 2-СМА в Fe (1.13 эВ [15]), поэтому для 3-СМА в V можно воспользоваться оценками [15] для 2-СМА в Fe в отношении температуры, при которой такие кластеры диссоциируют быстрее, чем добираются до стоков (700–800 K). Таким образом, в V при температурах выше 800 K можно считать, что 94% СМА формируются в виде 1-СМА.

Возникающие под нейтронным облучением поры в некоторых металлах выстраиваются в упорядоченную периодическую структуру (решетка пор), обладающую тем же набором элементов симметрии, что и кристаллическая решетка металла [28]. Одно из необходимых условий для возникновения этого явления состоит в том, что значительная часть кластеризованных СМА, создаваемых в процессе облучения, должна мигрировать одномерно (первым, в качестве гипотезы, это условие выдвинул Формен [29]; моделирующие подтверждения этой гипотезы для ОЦК-кристалла W получены в [30–32]). Однако в ОЦК-кристалле V возникновение решетки пор под нейтронным облучением не наблюдали [28]. Хотя отсутствие экспериментальных данных об образовании решетки пор под нейтронным облучением в ванадии не является однозначным доказательством невозможности ее возникновения при каких-то специфических условиях проведения эксперимента, тем не менее этот факт можно рассматривать как свидетельство в пользу того, что в ванадии под нейтронным облучением не создается достаточного количества одномерно мигрирующих кластеров СМА. Это согласуется с выводом настоящей работы о том, что подавляющая часть дефектов междоузельного типа, образующихся в каскадах атомных столкновений, в ванадии мигрирует трехмерно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены различные кристаллографические конфигурации содержащих от трех до пяти СМА, МС-методом рассчитаны их энергии образования E^F (8.05, 9.61, 11.38 эВ для 3-, 4-, 5-СМА соответственно) и энергии связи E^B (0.93, 1.61, 1.40 эВ для 3-, 4-, 5-СМА соответственно) в ОЦК-металле ванадия. Их энергии связи значительно выше энергии связи 2-СМА (0.51 эВ), поэтому 3-, 4- и 5-СМА менее подвержены термической диссоциации, чем 2-СМА.

Для кластеров указанных размеров МД-методом промоделированы диффузионные траектории в диапазоне температур 300–1000 K в V. На основе МД-данных рассчитаны температурные зависимости диффузионных характеристик (коэффициент диффузии, корреляционный множитель меченых атомов, частота смены направлений миграции, энергия активации смены направления миграции, среднее перемещение дефекта до смены направления миграции) кластеров, содержащих до пяти СМА. Определен их механизм диффузии (1D-миграция вдоль одного из плотноупакованных направлений ⟨111⟩ с происходящими время от времени сменами направления миграции на другое плотноупакованное направление) и получены аналитические выражения, описывающее температурные зависимости коэффициента диффузии для рассматриваемых кластеров. В разных температурных диапазонах доминируют разные механизмы смены направления миграции кластеров СМА. При низких температурах (300–500 K) доминирует механизм с невысокой энергией активации (~0.1 эВ для всех рассмотренных размеров кластеров). При высоких температурах (800–1000 K) преобладает механизм с высокой энергией активации (0.18, 0.26, 0.58 эВ для 3-, 4-, 5-СМА соответственно). Качественно ту же картину в отношении механизмов смены направления миграции кластеров СМА наблюдали ранее в Fe [18]. Наблюдаемые различия в диффузионных характеристиках кластеров СМА в Fe и V не принципиальны и носят количественный характер.

Среднее перемещение дефекта до смены направления миграции l_{ch} в диапазоне температур 300–1000 K изменяется в пределах 2.2–3.8a для 1-СМА, 2.3–4.4a для 2-СМА, 33–66a для 3-СМА, 94–218a для 4-СМА, 156–4685a для 5-СМА. 1D-механизм миграции слабо влияет на стоковые силы сферических поглотителей, когда l_{ch} меньше радиуса поглотителей.

Вследствие активно протекающей термической диссоциации 2-СМА при $T > 500$ K и 3-СМА при $T > 800$ K, в кинетических моделях радиационного формоизменения, основанных на уравнениях баланса рождения и гибели на стоках радиационных дефектов, можно с хорошей точностью пренебречь образованием 2- и 3-СМА в каскадах атомных столкновений и считать, что 87 и 94% собственных междоузельных атомов образуются в виде одиночных СМА при $T > 500$ K и $T > 800$ K соответственно.

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”, http://ckp.nrcki.ru. Авторы признательны к.ф.-м.н. А.М. Овчаренко за плодотворное обсуждение результатов работы и конструктивные замечания по рукописи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Indenbom V.L., Lothe J.* (Eds.) Elastic strain fields and dislocation mobility / Elsevier Science Publishers B.V.: Amsterdam, The Netherlands, 1992.
2. *Субботин М.Л., Курбатов Д.К., Голубчиков Л.Г.* Социально-экономические аспекты использова-

ния конструкционных материалов, критичных для развития термоядерной энергетики. Ванадиевые сплавы // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2009. Т. 32(1). С. 30–41.

3. *Chen J.M., Chernov V.M., Kurtz R.J., Muroga T.* Overview of the vanadium alloy researches for fusion reactors // J. Nucl. Mater. 2011. V. 417. P. 289–294.
4. *Chernov V.M., Drobyshev V.A., Potapenko M.M., Blokhin D.A., Budylkin N.I., Degtyarev N.A., Izmalkov I.N., Mironova E.G., Kudryavtseva I.E., Tyumentsev A.N., Ditenberg I.A., Grinyaev K.V., Kardashev B.K., Blokhin A.I., Loginov N.I., Romanov V.A., Sivak A.B., Sivak P.A., Psakhie S.G., Zolnikov K.P.* Low activation vanadium alloys for fusion power reactors – the RF results / Proc. 24th Int. Conf. on Fusion Energy (San Diego. CA. 8–13 October 2012). Vienna: IAEA. 2012. Paper FTP/4-5Rb.
5. *Nikitina A.A., Ageev V.S., Leont'eva-Smirnova M.V., Mitrofanova N.M., Naumenko I.A., Tselishchev A.V., Chernov V.M.* Advances in Structural Materials for Fast-Reactor Cores // At. Energy. 2016. V. 119. P. 362–371.
6. *Никулин С.А., Вотинов С.Н., Рожнов А.Б.* Ванадиевые сплавы для ядерной энергетики. М.: Изд. МИСиС. 2014. 206 с.
7. *Stoller R.E., Zarkadoula E.* 1.20 – Primary Radiation Damage Formation in Solids // Comprehensive Nuclear Materials (Second Edition). Elsevier. 2020. V. 1. P. 620–662.
8. *Сивак А.Б., Демидов Д.Н., Зольников К.П., Корчуганов А.В., Сивак П.А., Романов В.А., Чернов В.М.* Первичная радиационная повреждаемость в ОЦК-металлах Fe и V: анализ молекулярно-динамических данных // ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы. 2019. Т. 4(100). С. 25–57.
9. *Shpanskiy Yu.S. and the DEMO-FNS Project Team.* Progress in the design of the DEMO-FNS hybrid facility // Nucl. Fusion. 2019. V. 59. 076014.
10. *Morishita K., De La Rubia T. D., Alonso E., Sekimura N., Yoshida N.* A molecular dynamics simulation study of small cluster formation and migration in metals // J. Nucl. Mater. 2000. V. 283–287. P. 753–757.
11. *Zhang P., Wei M., Li Y., Zhao J., Zheng P., Chen J.* Interactions of solute atoms with self-interstitial atoms/clusters in vanadium: A first-principles study // J. Nucl. Mater. 2021. V. 553. 153055.
12. *Zepeda-Ruiz L.A., Rottler J., Wirth B.D., Car R., Srolovitz D.J.* Self-interstitial transport in vanadium // Acta Mater. 2005. V. 53. P. 1985–1994.
13. *Zepeda-Ruiz L.A., Rottler J., Han S., Ackland G.J., Car R., Srolovitz D.J.* Strongly non-Arrhenius self-interstitial diffusion in vanadium // Phys. Rev. B. 2004. V. 70(6). 060102(R).
14. *Романов В.А., Сивак А.Б., Сивак П.А., Чернов В.М.* Равновесные и диффузионные характеристики собственных точечных дефектов в ванадии // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2012. Т. 35(2). С. 60–80.
15. *Демидов Д.Н., Сивак А.Б., Сивак П.А.* Термическая диссоциация димежузлий в ОЦК Fe и V: Молекулярно-динамическое исследование // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2019. Т. 42(2). С. 99–107.
16. *Демидов Д.Н., Сивак А.Б., Сивак П.А.* Кристаллографические, энергетические и диффузионные характеристики димежузлий в ОЦК-металлах Fe и V // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез. 2019. Т. 42(3). С. 85–96.
17. *Сивак А.Б., Романов В.А., Демидов Д.Н., Сивак П.А., Чернов В.М.* Потенциалы межатомного взаимодействия для моделирования каскадов атомных столкновений и собственных точечных дефектов в ОЦК-металлах Fe и V // ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы. 2019. Т. 4(100). С. 5–24.
18. *Sivak A.B., Demidov D.N., Sivak P.A.* Diffusion characteristics of radiation defects in iron: molecular dynamics data // Probl. At. Sci. Technol. Ser. Thermonucl. Fusion. 2021. V. 44(2). P. 148–157.
19. *Manning J.R.* Diffusion kinetics for atoms in crystals // Toronto, Canada: D. Van Nostrand Company. 1968.
20. *Heinisch H.L., Singh B.N., Golubov S.I.* A kinetic Monte Carlo study of mixed 1D/3D defect migration // J. Comput. Aided Mater. Des. 1999. V. 6. P. 277–282.
21. *Malerba L., Becquart C.S., Domain C.* Object kinetic Monte Carlo study of sink strengths // J. Nucl. Mater. 2007. V. 360. P. 159–169.
22. *Wiedersich H.* On the theory of void formation during irradiation // Radiat. Eff. 1972. V. 12. P. 111–125.
23. *Barashev A.V., Golubov S.I., Trinkaus H.* Reaction kinetics of glissile interstitial clusters in a crystal containing voids and dislocations // Philos. Mag. A. 2001. V. 81. P. 2515–2532.
24. *Trinkaus H., Heinisch H.L., Barashev A.V., Golubov S.I., Singh B.N.* 1D to 3D diffusion-reaction kinetics of defects in crystals // Phys. Rev. B. 2002. V. 66. 060105(R).
25. *Abdou M., Maynard C.* Calculational methods for nuclear heating–Part II: Applications to fusion-reactor blankets and shields // Nucl. Sci. Eng. 1975. V. 56. P. 381–398.
26. *Reali L., Gilbert M.R., Boleininger M., Dudarev S.L.* Intense γ-photon and high-energy electron production by neutron irradiation: effect of nuclear excitation on transport of defects // arXiv:2210.09667.
27. *Khripunov V.I.* Lifetime assessment for the first wall components of a fusion driven hybrid neutron source // Probl. At. Sci. Technol. Ser. Thermonucl. Fusion. 2022. V. 45(2). P. 5–14.
28. *Jäger W., Trinkaus H.* Defect ordering in metals under irradiation // J. Nucl. Mater. 1993. V. 205. P. 394–410.
29. *Foreman A.J.E.* // Harwell Report AERE-R 7135. 1972.
30. *Nandipati G., Setyawana W., Heinisch H.L., Roche K.J., Kurtz R.J., Wirth B.D.* Object kinetic Monte Carlo simulations of radiation damage in neutron-irradiated tungsten part-I: Neutron flux with a PKA spectrum corresponding to the high-flux isotope reactor // arXiv: 1510.02732.
31. *Nandipati G., Setyawana W., Heinisch H.L., Roche K.J., Kurtz R.J., Wirth B.D.* Object kinetic Monte Carlo simulations of radiation damage in neutron-irradiated tungsten part-II: With a PKA spectrum corresponding to 14-MeV neutrons // arXiv:1606.01308.
32. *Li Z.-Z., Li Y.-H., Terentyev D., Castin N., Bakaev A., Bonny G., Yang Z., Liang L., Zhou H.-B., Gao F., Lu G.-H.* Investigating the formation mechanism of void lattice in tungsten under neutron irradiation: from collision cascades to ordered nanovoids // Acta Mater. 2021. V. 219. 117239.