

УДК 544.022.341, 544.022.38

УПРУГОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВАКАНСИОННОЙ ПОРЫ С РАДИАЦИОННЫМИ ДЕФЕКТАМИ В ОЦК-МЕТАЛЛАХ Fe и V — МЕТОДЫ РАСЧЁТА

А.Б. Сивак, П.А. Сивак

НИИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Расчёт сил стоков вакансионных пор для радиационных дефектов, являющихся параметрами феноменологических моделей радиационной повреждаемости материалов, требует знания энергии взаимодействия радиационных дефектов с упругими полями, создаваемыми вакансионными порами в объёме материала. Прямой расчёт энергии взаимодействия методом молекулярной статистики требует огромных вычислительных ресурсов и поэтому не пригоден для использования в расчётах сил стоков. В настоящей статье предложен вычислительно эффективный подход к расчёту энергии взаимодействия, который при этом не вносит значительной погрешности в расчёты. Данный подход основан на совместном использовании разных методов: метод молекулярной статистики используется для расчёта дипольных тензоров радиационных дефектов и создаваемых вакансионными порами полей упругих деформаций, а взаимодействие пор с радиационными дефектами (упругими диполями) рассчитывается с помощью анизотропной линейной теории упругости. Обоснованность применения такого подхода демонстрируется путём прямого сравнения его результатов с результатами применения только метода молекулярной статистики, в котором используется в качестве тестовой задачи расчёт взаимодействия сферических вакансионных пор с значениями диаметра 2 и 20 параметров решётки и собственных точечных дефектов для ОЦК-металла Fe. Методом молекулярной статистики рассчитаны поля упругих деформаций сферических вакансионных пор диаметром от 2 до 20 параметров решётки в ОЦК-металлах Fe и V.

Ключевые слова: вакансионные поры, упругие поля, энергия взаимодействия, радиационные дефекты, железо, ванадий, молекулярная статика, анизотропная теория упругости.

ELASTIC FIELDS OF VACANCY VOIDS AND THEIR INTERACTION WITH RADIATION DEFECTS IN BCC METALS Fe AND V — CALCULATION METHODS

A.B. Sivak, P.A. Sivak

NRC «Kurchatov Institute», Moscow, Russia

The calculation of the sink strengths of vacancy voids for radiation defects, which are the parameters of phenomenological models of radiation damage of materials, requires knowledge of the energy of interaction of the radiation defects with the elastic fields created by vacancy voids in the bulk of the material. Direct calculation of the interaction energy by the molecular statics method demands huge computational resources and, therefore, is not suitable for the sink strength calculations. Here we propose a computationally efficient approach to the calculations of the interaction energy, which does not introduce a significant error in the calculations. This approach is based on the joint use of different methods: the molecular statics method is used to calculate the elastic strain fields created by vacancy voids, and their interaction with radiation defects is calculated using the anisotropic linear theory of elasticity (radiation defects are treated as elastic dipoles). The validity of using this approach is demonstrated by the direct comparison of its results with the results obtained by the molecular static method solely using as a test problem the calculation of the interaction between spherical vacancy voids with diameter values 2 and 20 lattice parameters and self-point defects for bcc metal Fe. Elastic deformation fields of the spherical vacancy voids with the diameter in the range from 2 to 20 lattice constants for Fe and V metals are calculated by molecular statics.

Key words: vacancy voids, elastic fields, interaction energy, radiation defects, iron, vanadium, molecular statics, anisotropic theory of elasticity.

DOI: 10.21517/0202-3822-2021-44-1-119-135

ВВЕДЕНИЕ

В теории радиационных повреждений металлов ключевыми параметрами являются силы стоков радиационных дефектов (стоками являются дефекты кристаллической решётки: внешние поверхности, межзёренные границы, дислокации, вакансионные поры и т.д.) [1]. Для определения влияния упругих полей стоков радиационных дефектов на их силы стока необходимо иметь возможность рассчитывать пространственную зависимость энергии взаимодействия упругого поля стока с радиационным дефектом (РД). Наиболее удобным способом расчёта силы стока с учётом его взаимодействия с РД является кинетический метод Монте-Карло (КМК) [2]. Расчёт энергии взаимодействия с использованием метода молекулярной статистики (МС) требует огромных вычислительных ресурсов и потому непригоден. Нужен

более вычислительно эффективный подход к расчёту энергии взаимодействия, который при этом не вносил бы существенной погрешности. В теории упругости используется представление о точечных дефектах как упругих диполях [3—5], с помощью которого можно рассчитать их энергию взаимодействия с упругими полями, создаваемыми другими дефектами микроструктуры или внешними нагрузками. Описанный способ учёта упругого взаимодействия между стоком и РД в расчётах сил стоков КМК-методом впервые был предложен в [6] и использован для определения сил стоков прямолинейных дислокаций в ОЦК- и ГЦК-металлах (Fe, V, Cu, Pu) [6—12]. В этих работах упругие поля дислокаций рассчитывались в рамках анизотропной линейной теории упругости (АЛТУ). В [6] на примере Fe было показано, что энергия взаимодействия собственных точечных дефектов с дислокацией, рассчитанная с помощью континуального подхода, прекрасно согласуется прямыми атомистическими расчётами МС-методом за пределами дислокационного ядра, чей размер был найден равным $\sim 3a$, где a — параметр решётки. Схожие КМК-модели использовались для расчётов влияния упругого взаимодействия РД со стоками на силы стоков для прямолинейных дислокаций [13, 14], пор [14], а также полукотерентных межфазных границ [15].

В теории радиационных повреждений металлов (например, [1, 16, 17]) обычно полагается, что вакансионные поры (ВП) являются нейтральными стоками РД, т.е. силы стока ВП одинаковы для собственных межузельных атомов (СМА) и вакансий. Предположение это делается на основе того, что поля деформаций, создаваемых порами, являются короткодействующими относительно далекодействующих дислокационных, и поэтому взаимодействием этих полей с РД можно пренебречь. Если же взаимодействием упругого поля поры с РД не пренебрегают (например, [14, 18]), упругое поле сферических ВП определяется с помощью континуальных упругоизотропных моделей (задача Эшелби [5, 19, 20]). Однако реальные материалы, во-первых, упругоанизотропны, а во-вторых, поверхность пор представляет собой сложный объект, для которого упругие модели [19, 20] могут оказаться слишком наивными. Конкретные атомистические расчёты, подтверждающие обоснованность перечисленных упрощений, насколько известно авторам, ранее не проводились.

В настоящей работе рассчитываются упругие поля сферических ВП диаметром от $2a$ до $20a$ в ОЦК-металлах Fe и V с помощью атомистического подхода (МС). Взаимодействие сферических ВП с РД (вакансия, СМА) рассчитывается путём совместного использования МС-метода и АЛТУ: МС-метод используется для расчёта дипольных тензоров РД и создаваемых ВП полей упругих деформаций (на основе массива координат атомов модельного кристаллита, содержащего пору), а взаимодействие упругих полей ВП с РД как упругим диполем рассчитывается в рамках АЛТУ. Обоснованность применения такого комбинированного подхода к расчёту энергий взаимодействия ВП с РД демонстрируется путём непосредственного сравнения с результатами применения только МС-метода на примере расчётов для сферических ВП различных размеров ($2a$ и $20a$) для ОЦК-металла Fe.

МЕТОДИКА РАСЧЁТОВ

Геометрические и энергетические характеристики ВП. Размер сферической ВП можно характеризовать объёмом и/или диаметром. Объём поры V удобно определить как

$$V = n_v \Omega, \quad (1)$$

где n_v — количество вакантных узлов решётки, содержащихся в ВП; Ω — атомный объём. Тогда диаметр ВП D можно определить с использованием известного соотношения между объёмом и диаметром сферы как

$$D = a \sqrt[3]{3n_v/\pi}. \quad (2)$$

По мере увеличения размера ВП формируется свободная поверхность внутри кристалла. Поверхностную энергию поры γ можно рассчитать как

$$\gamma = E^F/S = E^F/(\pi D^2), \quad (3)$$

где E^F — энергия образования поры; $S = \pi D^2$ — площадь поверхности поры. Энергия образования поры рассчитывалась как

$$E^F = U_{\text{ВП}} - U + n_V E_c, \quad (4)$$

где U — потенциальная энергия идеального бездефектного кристаллита; $U_{\text{ВП}}$ — потенциальная энергия кристаллита того же размера с ВП, содержащей n_V вакантных узлов решётки, после релаксации; E_c — энергия когезии (ВП образуется как объединение n_V дефектов Шоттки).

Для расчётов использовались потенциалы межатомного взаимодействия, разработанные в рамках метода погружённого атома: потенциал M07 из [21] и потенциал [22] для ОЦК-металлов Fe и V соответственно, достаточно точно описывающие объёмные и поверхностные свойства кристаллов.

Расчёты энергетических и кристаллографических характеристик ВП осуществлялись МС-методом (минимизация потенциальной энергии кристаллита после формирования стартовой конфигурации дефекта осуществлялась методом градиентного спуска до тех пор, пока максимальная действующая на атомы сила в кристаллите не становилась менее 10^{-7} эВ/нм) в кубических модельных кристаллитах (рёбра вдоль $\langle 100 \rangle$ кристаллографических направлений) с жёсткими граничными условиями. Размер модельных кристаллитов выбирался достаточно большим, чтобы не оказывать заметного влияния на рассчитываемые величины (табл. 1).

Т а б л и ц а 1. Обозначения и геометрические характеристики (количество вакантных узлов решётки n_V , содержащихся в ВП, диаметр ВП D) рассмотренных сферических ВП и размеры кубических модельных кристаллитов (длина стороны кристаллита L , число подвижных атомов кристаллита $n_{\text{св}}$, число содержащихся в жёсткой границе атомов $n_{\text{гр}}$), использовавшихся для расчётов их энергетических характеристик в ОЦК-металлах Fe и V

ВП	n_V	D, a	L, a	$n_{\text{св}}$	$n_{\text{гр}}$
V ₁	1	0,985	29	25 991 — n_V	25 398
V ₉	9	2,05	29	25 991 — n_V	25 398
V ₁₅	15	2,43	29	25 991 — n_V	25 398
V ₂₇	27	2,95	29	25 991 — n_V	25 398
V ₅₉	59	3,83	29	25 991 — n_V	25 398
V ₁₃₇	137	5,08	69	512 191 — n_V	159 318
V ₂₂₉	229	6,02	69	512 191 — n_V	159 318
V ₁₀₃₇	1037	9,97	69	512 191 — n_V	159 318
V ₂₂₇₇	2277	13,0	69	512 191 — n_V	159 318
V ₃₅₂₇	3527	15,0	79	794 241 — n_V	210 798
V ₅₀₆₅	5065	16,9	79	794 241 — n_V	210 798
V ₈₃₆₃	8363	20,0	99	1 634 941 — n_V	335 358

Упругие поля пор. Упругое поле деформаций, создаваемых в кристаллите порой, рассчитывалось из значений координат атомов модельного кристаллита после окончания процесса минимизации потенциальной энергии кристаллита, описанного ранее. Используемая для этого методика описана в [23], где она применялась для расчёта упругих полей деформаций, создаваемых межузельными дислокационными петлями в ОЦК Fe.

Взаимодействие ВП с РД. Энергия взаимодействия ВП с РД может быть рассчитана как

$$E^{\text{int}} = E_{\text{ВП\&РД}}^F - E_{\text{ВП}}^F - E_{\text{РД}}^F, \quad (5)$$

где $E_{\text{ВП\&РД}}^F$, $E_{\text{ВП}}^F$, $E_{\text{РД}}^F$ — энергии образования комплекса ВП—РД, ВП и РД соответственно. Значения E^{int} могут быть на порядки меньше, чем значения энергий образований в (5), поэтому энергии образования необходимо вычислять с высокой точностью. Основной вклад в погрешность определения энергий образования вносят граничные эффекты (размер модельного кристаллита, тип граничных условий) и допускаемая величина погрешности определения минимума потенциальной энергии кристаллита в процессе его релаксации. Для минимизации первой составляющей погрешности расчёты E^{int} проводились для модельных кристаллитов разных размеров, чтобы определить размер, для которого граничные эффекты практически отсутствуют. Для исключения второй составляющей погрешности проводилась глубокая релаксация модельных кристаллитов (до тех пор, пока максимальная действующая на атомы сила в кристаллите не становилась менее 10^{-8} эВ/нм).

Тестовые расчёты с использованием кубических кристаллитов с жёсткими граничными условиями, содержащими в своём центре пору V_9 или V_{8363} , показали, что для расчёта E^{int} с точностью не хуже 10^{-5} эВ необходимо, чтобы вакансии и СМА находились не ближе $10a$ и $25a$ к жёсткой границе кристаллита соответственно. Исходя из этих требований, для расчётов взаимодействия поры V_9 с вакансией и СМА выбраны кристаллиты с длиной стороны $39a$ и $69a$ соответственно, а для расчётов взаимодействия поры V_{8363} с вакансией и СМА выбраны кристаллиты размером $69a$ и $99a$ соответственно.

В рамках АЛТУ упругое взаимодействие между РД (упругим диполем) и упругим полем деформаций ВП в первом приближении (размерное взаимодействие первого порядка) может быть записано как [3—5]

$$E_{\text{size}}^{\text{int}} = -P_{ij}\varepsilon_{ij}, \quad (6)$$

где P_{ij} — дипольный тензор РД; ε_{ij} — тензор упругих деформаций ВП. Дипольные тензоры РД, рассчитанные МС-методом в настоящей работе для Fe, приведены в табл. 2.

Т а б л и ц а 2. Компоненты дипольных тензоров (в эВ) вакансии и $\langle 110 \rangle$ гантельного СМА (расщепление гантели вдоль $[110]$) в Fe в кристаллографической системе координат (оси вдоль направлений $\langle 100 \rangle$)

Дефект	P_{11}	P_{22}	P_{33}	P_{12}	P_{13}	P_{23}
Вакансия	1,248	1,248	1,248	0	0	0
Гантель $[110]$	17,273	17,273	22,816	6,200	0	0

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Энергетические характеристики ВП. В табл. 3 сведены результаты расчётов МС-методом энергии образования сферических ВП различных размеров. Из приведённых результатов видно, что при размерах пор больше $\sim 10a$ их поверхностная энергия практически перестаёт зависеть от размера поры и имеет значение $\sim 2,1$ Дж/м² для Fe и V. В [24] путём сопоставления экспериментальных данных для разных металлов была получена корреляционная зависимость, позволяющая оценить их поверхностную энергию: $\gamma = 0,25 H(0)/A$, где $H(0)$ — когезионная энергия при абсолютном нуле температуры, $A = 1,612 N_A^{1/3} V^{2/3}$, N_A — число Авогадро, V — молярный объём. Пользуясь данным соотношением и экспериментальными значениями $H(0)$ для Fe и V из [25], в [24, 26] получены значения γ , равные 2,06 и 2,28 Дж/м² для Fe и V соответственно. Как видно, эти значения и расчётные значения γ (см. табл. 3) согласуются между собой. Для Fe при использовании потенциала M07 поверхностная энергия плоских поверхностей $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ составляет 2,012, 1,869 и 2,316 Дж/м² соответственно по данным [21]. Усредняя приведённые значения для плоских поверхностей, получим величину 2,07 Дж/м², которая практически совпадает с полученной здесь величиной для сферической поверхности (2,1 Дж/м²).

Т а б л и ц а 3. Энергия образования E^F , поверхностная энергия γ и релаксационный объём V^R сферических вакансионных пор разных диаметров D в ОЦК-металлах Fe и V

ВП	D, a	Fe			V		
		E^F , эВ	γ , Дж/м ²	V^R , Ω	E^F , эВ	γ , Дж/м ²	V^R , Ω
V_1	1,0	2,104	1,36	−0,10	2,488	1,43	−0,20
V_9	2,0	13,18	1,96	−1,60	16,47	2,18	−1,47
V_{15}	2,4	17,88	1,90	−1,11	19,21	1,81	−0,62
V_{27}	3,0	29,30	2,10	−2,62	33,89	2,16	−1,89
V_{59}	3,8	45,47	1,94	−2,79	50,33	1,90	−2,95
V_{137}	5,1	85,14	2,07	−6,36	96,76	2,09	−5,95
V_{229}	6,0	129,56	2,23	−10,77	147,40	2,26	−4,31
V_{1037}	10,0	333,08	2,10	−21,22	371,43	2,08	−19,27
V_{2277}	13,0	576,61	2,15	−35,43	638,38	2,11	−22,46
V_{3527}	15,0	771,26	2,15	−43,44	853,45	2,11	−27,55
V_{5065}	16,9	959,42	2,10	−52,51	1057,98	2,06	−39,94
V_{8363}	20,0	1361,26	2,13	−75,83	1499,57	2,09	−51,60

Упругие поля деформаций ВП. Полученные в результате обработки МС-данных (координаты атомов) поля деформаций, создаваемые сферическими ВП, сведены в базу данных. В качестве примера на

рис. 1, 2 показаны виды на изоповерхности $\varepsilon_{ij} = \pm 0,02\%$, где $i, j = 1, 2, 3$ и $\text{Tr } \varepsilon = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = \pm 0,02\%$ для ВП диаметром $5a$ (V_{137}) и $20a$ (V_{8363}) в ОЦК-металлах Fe и V. Координатные оси X , Y и Z направлены вдоль кристаллографических направлений $\langle 100 \rangle$, начало координат совпадает с центром поры. Из шести компонент тензора деформаций на рис. 1, 2 представлены только две (ε_{11} и ε_{23}), так как из-за высокой точечной симметрии кристалла относительно центра поры изоповерхности для ε_{22} и ε_{33} могут быть получены из ε_{11} с помощью поворотов на 90° вокруг осей Z и Y соответственно, а изоповерхности для ε_{13} и ε_{12} — из ε_{23} с помощью поворотов на 90° вокруг оси Z по часовой стрелке и оси Y против часовой стрелки соответственно.

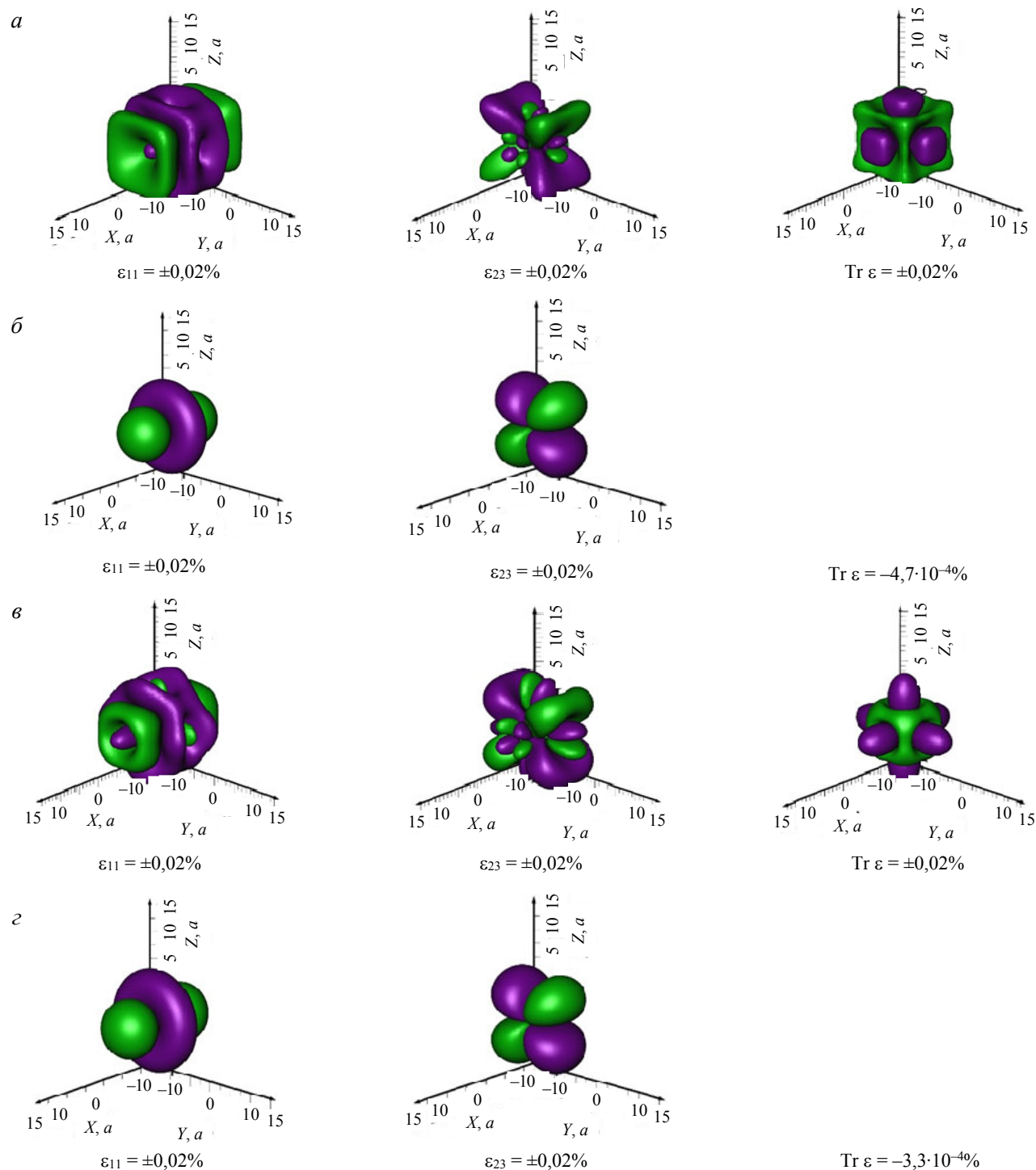


Рис. 1. Поле деформаций, создаваемое сферической порой V_{137} ($D = 5a$) в атомистической модели (*a*, *в*) и в упругоизотропной континуальной модели Эшелби (*б*, *г*) в Fe (*a*, *б*) и V (*в*, *г*): вид на изоповерхности $\varepsilon_{ij} = \pm 0,02\%$ ($i, j = 1, 2, 3$) и $\text{Tr } \varepsilon = \pm 0,02\%$ ($\text{Tr } \varepsilon = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$); зелёный и фиолетовый цвета относятся к значениям $+0,02\%$ и $-0,02\%$ соответственно

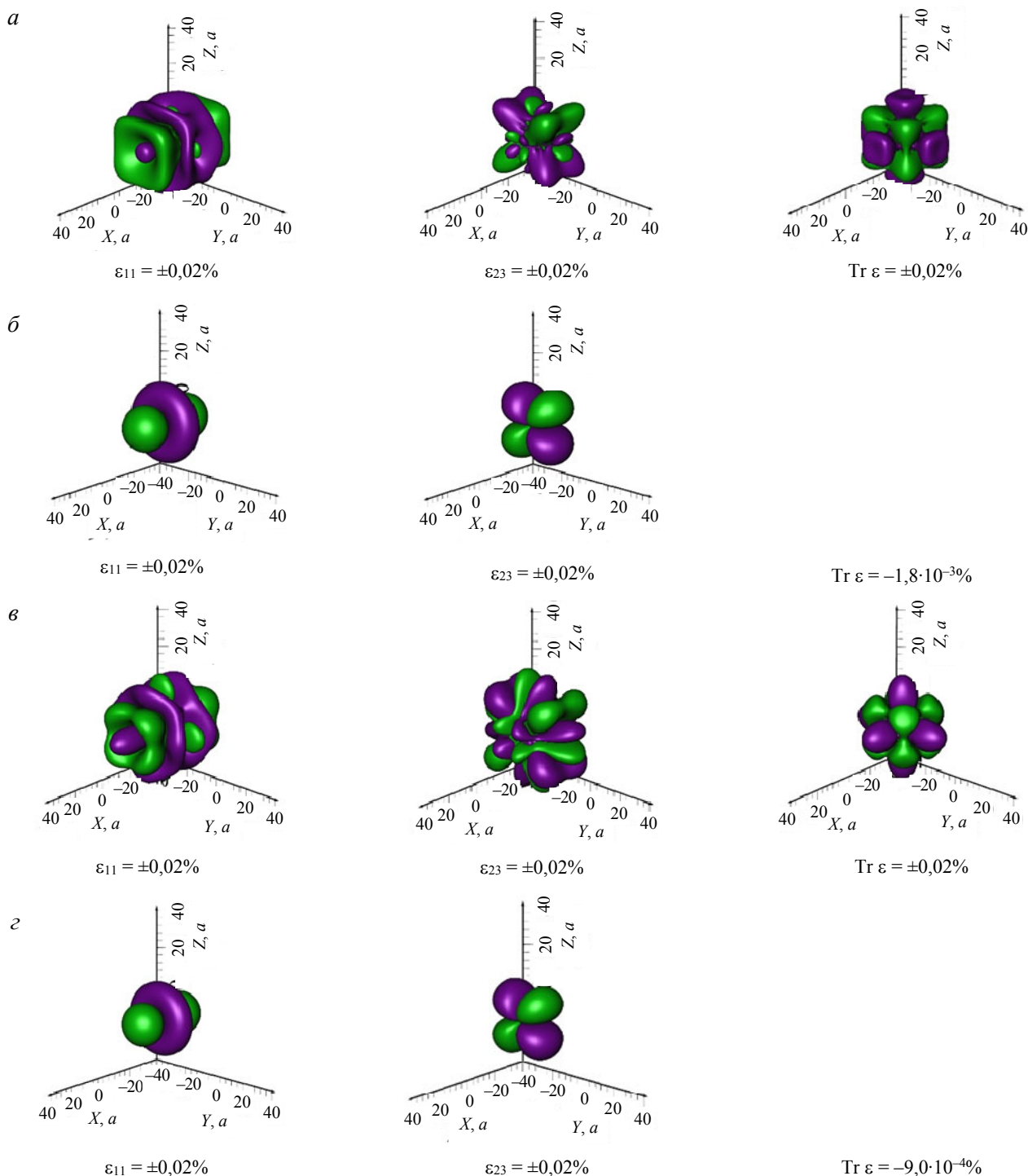


Рис. 2. Поле деформаций, создаваемое сферической порой V_{8363} ($D = 20a$) в атомистической модели (а, в) и в упругоизотропной континуальной модели Эшелби (б, г) в Fe (а, б) и V (в, г): вид на изоповерхности $\epsilon_{ij} = \pm 0,02\%$ ($i, j = 1, 2, 3$) и $\text{Tr } \epsilon = \pm 0,02\%$ ($\text{Tr } \epsilon = \epsilon_{11} + \epsilon_{22} + \epsilon_{33}$); зелёный и фиолетовый цвета относятся к значениям $+0,02\%$ и $-0,02\%$ соответственно

На рис. 3, 4 показаны зависимости собственных значений $\epsilon^{(1)}$, $\epsilon^{(2)}$, $\epsilon^{(3)}$ и $\text{Tr } \epsilon$ от расстояния до поверхности поры для кристаллографических направлений $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, проходящих через центр ВП диаметром $2a$ (V_9) и $20a$ (V_{8363}) в ОЦК-металлах Fe и V (данные для всех рассмотренных в работе ВП приведены в Приложении А). На рис. 1—4 также приведены соответствующие данные в упругоизотропном приближении, базирующемся на модели Эшелби [5, 19, 20] (Приложение Б).

Как видно на рис. 1—4, результаты расчётов по атомистической модели и по упругоизотропной континуальной модели Эшелби не согласуются друг с другом не только количественно, но и качественно: изоповерхности $\epsilon_{ij} = \text{const}$ в атомистической модели и континуальной модели Эшелби топологически различны; в атомистической модели объёмная деформация не мала и имеет координатную зависимость в отличие

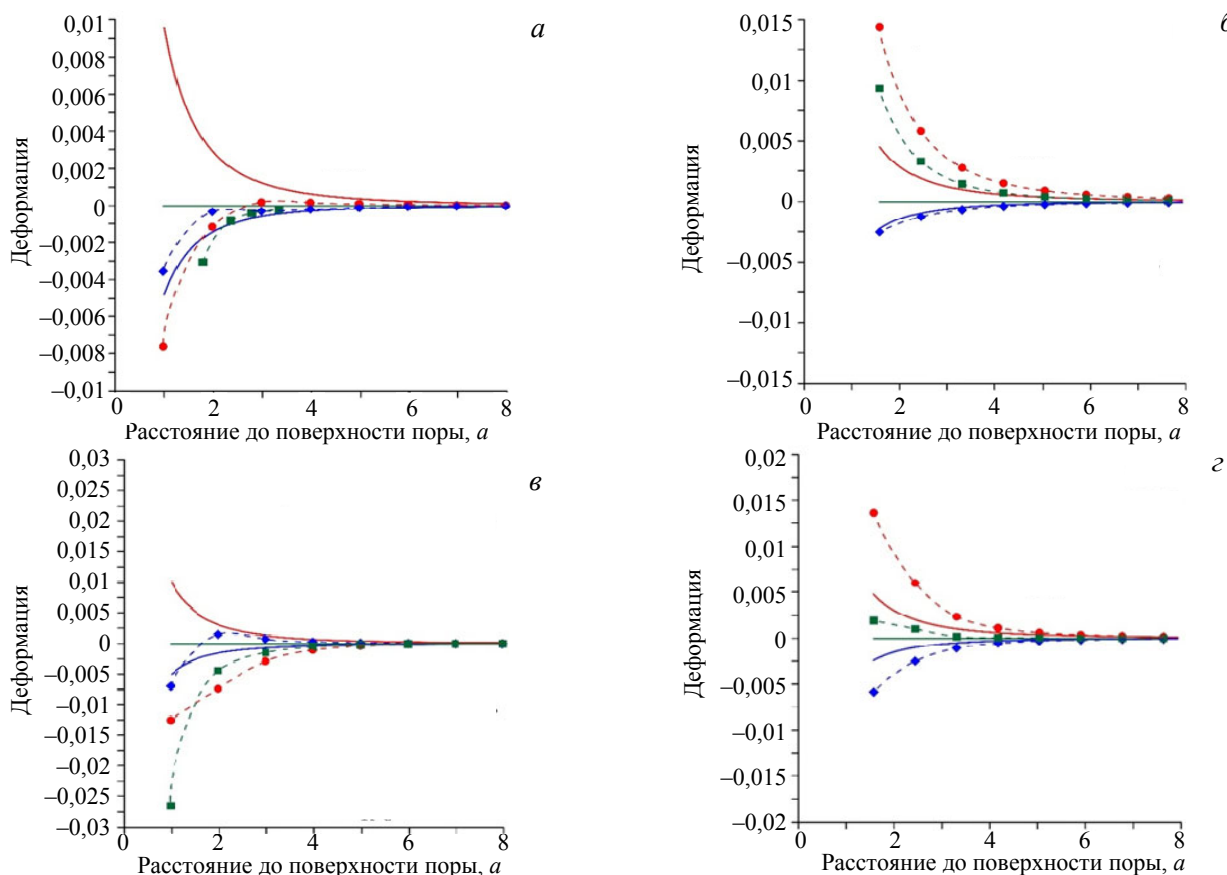


Рис. 3. Зависимости собственных значений $\varepsilon^{(1)}$ и $\varepsilon^{(2)} = \varepsilon^{(3)}$ и следа тензора упругих деформаций $\text{Tr } \varepsilon = \varepsilon^{(1)} + \varepsilon^{(2)} + \varepsilon^{(3)}$, создаваемых сферической порой V_9 (диаметр $2a$), от расстояния до поверхности ВП в направлении $\langle 100 \rangle$ или $\langle 111 \rangle$ в Fe и V. Собственный вектор, соответствующий $\varepsilon^{(1)}$, параллелен рассматриваемому конкретному направлению: а — Fe, направление $\langle 100 \rangle$; б — Fe, направление $\langle 111 \rangle$; в — V, направление $\langle 100 \rangle$; г — V, направление $\langle 111 \rangle$; атомистическая модель — $\varepsilon^{(1)}$ (●), $\varepsilon^{(2)} = \varepsilon^{(3)}$ (◆), $\text{Tr } \varepsilon$ (■), континуальная модель Эшелби — $\varepsilon^{(1)}$ (—), $\varepsilon^{(2)} = \varepsilon^{(3)}$ (—), $\text{Tr } \varepsilon$ (—)

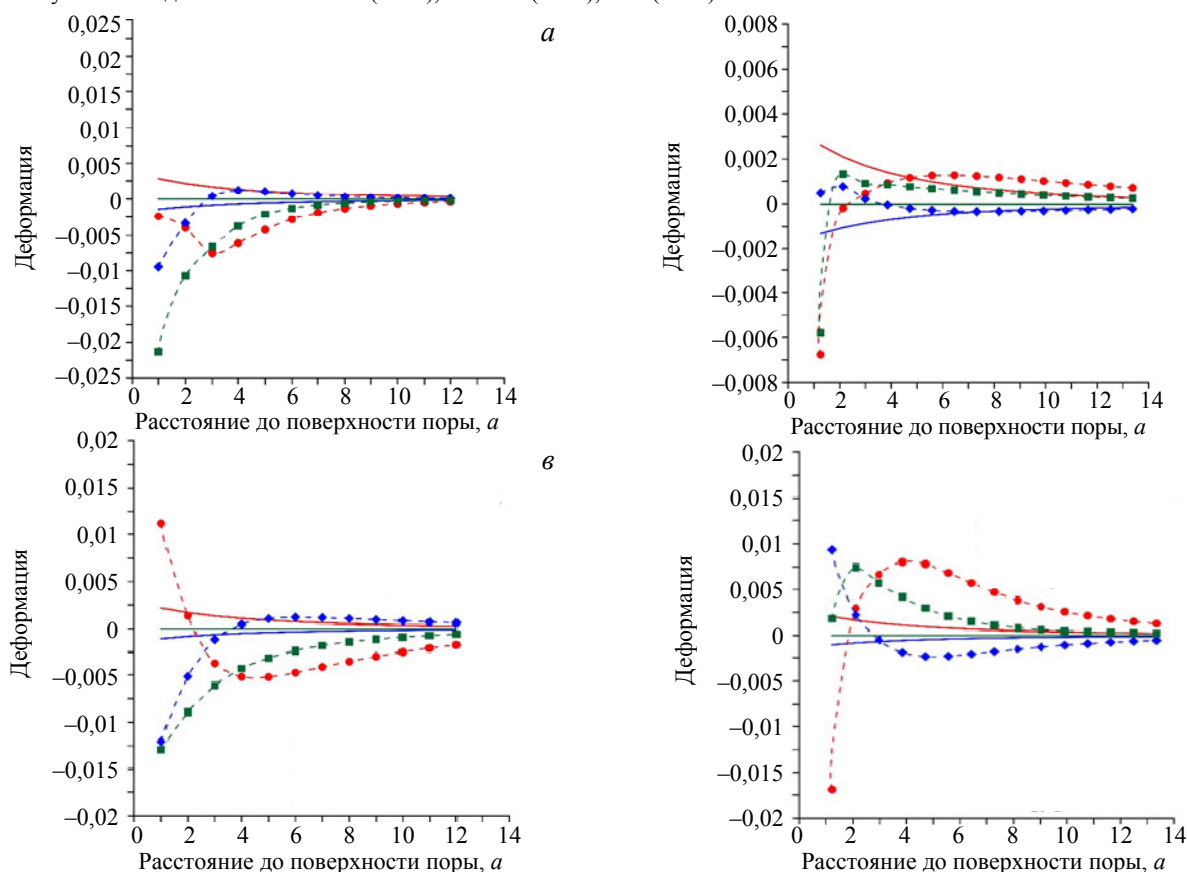


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, для сферической поры V_{8363} (диаметр $20a$)

от континуальной модели Эшелби. Качественные различия не могут быть объяснены только использованием изотропного приближения в континуальной модели Эшелби, так как значение показателя упругой анизотропии A в кристалле V равно 0,78, что довольно близко к значению $A = 1$ в случае упругой изотропии, а топологически изоповерхности компонент тензора деформаций в атомистической модели в Fe и V схожи, несмотря на сильно различающиеся значения A (2,36 и 0,78 для Fe и V соответственно). Причиной качественных различий является принятое в континуальной модели Эшелби предположение о том, что силы, приложенные к внутренней поверхности поры, имеют равномерное распределение и направлены к центру поры (Приложение Б). В атомистических же моделях силы, возникающие в кристаллите после удаления атомов из его центра при формировании поры, имеют сложное пространственное распределение, могут быть направлены как к центру поры, так и от него (рис. 5).

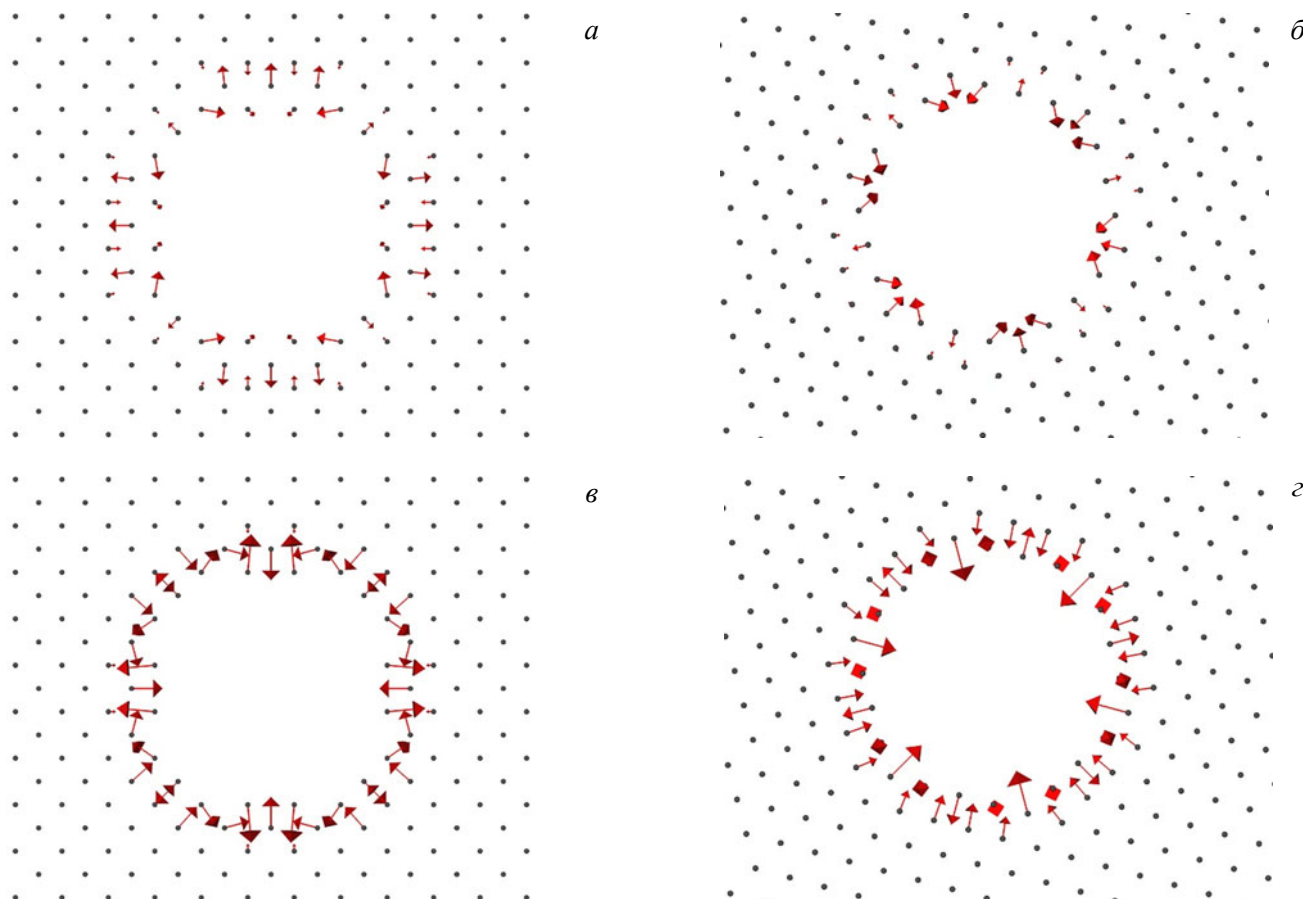


Рис. 5. Силы, возникающие в кристаллите после удаления атомов из его центра при формировании сферической поры V_{137} : а — Fe, плоскость (100); б — Fe, плоскость (111); в — V, плоскость (100); г — V, плоскость (111); • — атомы; $\rightarrow$ — силы, действующие на атомы. Показан вид на сечение кристаллита толщиной в один параметр решётки, проходящее через центр кристаллита

В связи с этим при определении влияния упругих полей ВП на их силы стока для радиационных дефектов необходимо использовать упругие поля ВП, полученные либо с использованием атомистических моделей, либо гибридных атомистическо-континуальных моделей (например, модель, в которой рассчитывается реакция упругой среды на поле объёмных сил, возникающих при формировании поры в кристалле, определяемых с помощью атомистического подхода).

Создаваемые порами поля упругих деформаций являются значительно менее дальнедействующими по сравнению с дислокационными полями. Например, в Fe и V для пор диаметром $2a$ и $20a$ абсолютные значения компонент тензора деформаций становятся меньше 0,02% на расстояниях от поверхности ВП больше $\sim 9a$ и $\sim 26a$ соответственно. Значения компонент тензора деформаций, создаваемых прямолинейными дислокациями, могут достигать подобных значений на расстояниях от дислокации на один-два порядка больше в зависимости от типа дислокации [6].

Взаимодействие РД с ВП. Положение СТД относительно поверхности поры будем характеризовать указанием ячейки Вигнера—Зейтца (ЯВЗ), в которой он расположен. Для этого введём последовательную нумерацию ЯВЗ, образующих цепочку ячеек вдоль рассматриваемых направлений $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, начиная её с единицы от ЯВЗ, граничащей с вакантными ЯВЗ, образующими пору. В табл. 4 приведено соответствие координат X, Y, Z и номеров ЯВЗ для рассматриваемых пор и направлений. За расстояние от поверхности поры до СТД будем принимать величину $r_s = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2} - 0,5D$, где X, Y, Z — координаты ЯВЗ, содержащей в себе СТД, D — диаметр поры (см. табл. 1).

Таблица 4. Соответствие координат X, Y, Z (в $a/2$) и номеров ЯВЗ для рассматриваемых пор и направлений

Пора	Направление	Номер ЯВЗ					
		1	2	3	4	5	6
V ₉	[001]	(0 0 2)	(0 0 4)	(0 0 6)	(0 0 8)	(0 0 10)	(0 0 12)
	[111]	(2 2 2)	(3 3 3)	(4 4 4)	(5 5 5)	(6 6 6)	(7 7 7)
V ₈₃₆₃	[001]	(0 0 20)	(0 0 22)	(0 0 24)	(0 0 26)	(0 0 28)	(0 0 30)
	[111]	(12 12 12)	(13 13 13)	(14 14 14)	(15 15 15)	(16 16 16)	(17 17 17)

Энергия взаимодействия ВП с РД E^{int} рассчитывалась для РД (вакансия и $\langle 110 \rangle$ гантельные конфигурации СМА в ориентациях $[110]$ и $[\bar{1}10]$ в различных положениях относительно ВП V₉ и V₈₃₆₃, находящихся на проходящих через центр ВП прямых вдоль направлений $[001]$ и $[111]$ (рис. 6). Значение E^{int} для

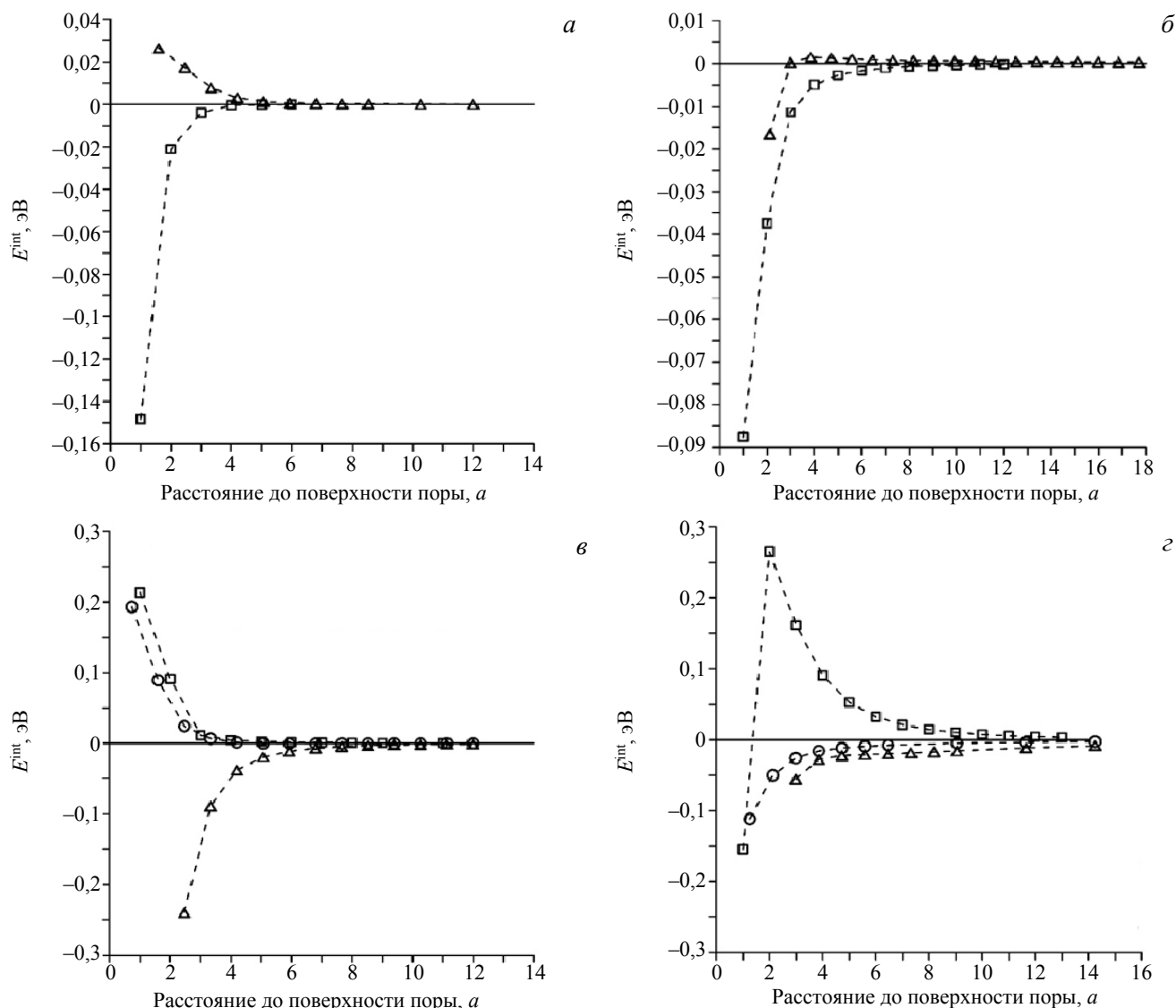


Рис. 6. Зависимости рассчитанной МС-методом энергии взаимодействия ВП с вакансией (а, б, □ — направление $\langle 100 \rangle$, гантель $[110]$, △ — направление $\langle 111 \rangle$) и СМА (в, г, □ — направление $[100]$, гантель $[110]$, △ — направление $[111]$, гантель $[\bar{1}10]$) от расстояния между СТД и поверхностью ВП в Fe: а, в — V₉; б, г — V₈₃₆₃

вакансий превышает по модулю среднюю энергию тепловых колебаний атомов ($|E^{\text{int}}| > 1,5k_B T$), когда вакансии находятся в ЯВЗ с номерами, не превышающими 2 при $20^\circ\text{C} < T < 700^\circ\text{C}$ (табл. 5). Значения E^{int} для СМА, как правило, на порядок больше, чем для вакансии при одинаковом их расположении относительно ВП (см. рис. 6). Как следствие, взаимодействие СМА с ВП является более дальнедействующим: $|E^{\text{int}}| > 1,5k_B T$ для ЯВЗ, содержащих СМА, с номерами до 6 и 4 при 20 и 750 °C соответственно (см. табл. 5).

Т а б л и ц а 5. Максимальные номера ЯВЗ в направлениях [001] и [111], для которых $|E^{\text{int}}| > 1,5k_B T$ при T , равных 20, 350, 700 °C в Fe

Пора	Направление	СТД		
		Вакансия	СМА	
			Гантель [110]	Гантель $[\bar{1}10]$
V ₉	[001]	2 / 2 / 2	3 / 3 / 2	3 / 3 / 2
	[111]	1 / 1 / 1	5 / 4 / 3	2 / 2 / 1
V ₈₃₆₃	[001]	2 / 2 / 1	6 / 5 / 4	6 / 5 / 4
	[111]	2 / 2 / 2	4 / 3 / 3	3 / 2 / 1

Если вакансия находится вплотную к поверхности поры (номер её ЯВЗ равен 1), то фактически пора с вакансией представляет собой единый объект — пора, содержащая на одну вакансию больше, чем исходная. Энергия связи вакансии с порой при этом может быть довольно значительной. Значения энергии связи поры с вакансией, находящейся на полюсе поры $\langle 100 \rangle$, составляет 1,26 и 1,43 эВ для пор V₉ и V₈₃₆₃ соответственно. Энергии связи поры с вакансией, находящейся на полюсе $\langle 111 \rangle$, меньше (особенно для V₉) и составляет 0,16 и 1,13 эВ для пор V₉ и V₈₃₆₃ соответственно. Энергия связи поры V₉ с СМА, вышедшим на её поверхность, составляет 4,5 эВ, соответствующее значение для поры V₈₃₆₃ находится в диапазоне 2,3—2,5 эВ в зависимости от точки выхода на поверхность поры.

В процессе релаксации модельного кристаллита созданный вблизи поверхности поры СТД может терять устойчивость и двигаться к поверхности поры, изменяя её размер: вакансия присоединяется к поре, увеличивая её размер, а СМА, выходя на поверхность поры, уменьшает её размер. В табл. 6 приведены максимальные номера ЯВЗ в направлениях [001] и [111], находящиеся в которых СТД в процессе релаксации теряют устойчивость и выходят на поверхность поры.

Т а б л и ц а 6. Максимальные номера ЯВЗ в направлениях [001] и [111], в которых находящиеся СТД в процессе релаксации теряют устойчивость и выходят на поверхность поры в Fe

Пора	Направление	СТД		
		Вакансия	СМА	
			Гантель [110]	Гантель $[\bar{1}10]$
V ₉	[001]	—	1	1
	[111]	—	2	—
V ₈₃₆₃	[001]	—	1	1
	[111]	2	3	1

Представим рассчитываемую МС-методом энергию взаимодействия в виде суммы двух слагаемых: $E^{\text{int}} = E_{\text{size}}^{\text{int}} + E_X^{\text{int}}$, где $E_{\text{size}}^{\text{int}}$ — размерная энергия взаимодействия (6), а под E_X^{int} будем понимать все прочие вклады в полную энергию взаимодействия. В случае, когда вклад размерного взаимодействия по модулю больше всех прочих вкладов ($|E_{\text{size}}^{\text{int}}| > |E_X^{\text{int}}|$), выполняется двойное неравенство $0 < E^{\text{int}}/E_{\text{size}}^{\text{int}} < 2$. Если $|E_{\text{size}}^{\text{int}}| \gg |E_X^{\text{int}}|$, $E^{\text{int}}/E_{\text{size}}^{\text{int}} \approx 1$. Рассчитанные зависимости величины $E^{\text{int}}/E_{\text{size}}^{\text{int}}$ от расстояния между СТД и поверхностью ВП в направлениях [100] и [111] для рассматриваемых СТД и ВП в Fe приведены на рис. 7.

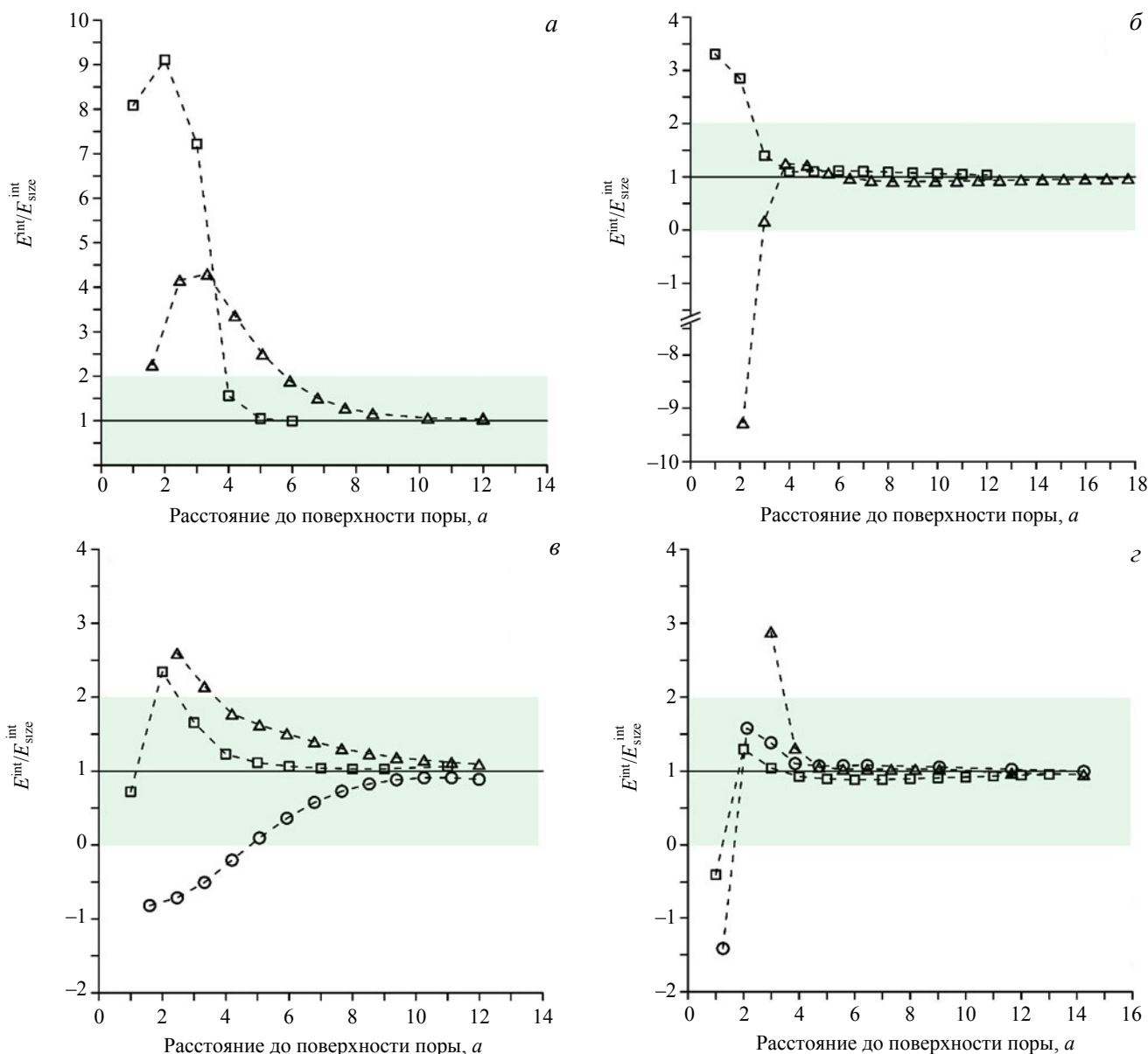


Рис. 7. Зависимости рассчитанной МС-методом энергии взаимодействия ВП с вакансией (*а, б*, $\square$ — направление $\langle 100 \rangle$, Δ — направление $\langle 111 \rangle$) и СМА (*в, г*, $\square$ — направление $[100]$, гантель $[110]$, Δ — направление $[111]$, гантель $[110]$, $\circ$ — направление $[111]$, гантель $[\bar{1}10]$), нормированной на величину размерной энергии взаимодействия, от расстояния между СТД и поверхностью ВП в Fe: *а, в* — V_9 ; *б, г* — V_{8363}

На рис. 7 видно, что на расстояниях от поверхности ВП V_9 и V_{8363} , превышающих $8a$ и $4a$ соответственно, размерное взаимодействие практически целиком определяет полную энергию взаимодействия ($E^{\text{int}}/E_{\text{size}}^{\text{int}} \approx 1$). На самых коротких расстояниях r_s наблюдаются значительные расхождения между E^{int} и $E_{\text{size}}^{\text{int}}$. В табл. 7 приведены максимальные номера ЯВЗ в направлениях $[001]$ и $[111]$, для которых размерное взаимодействие СТД, находящихся в них, с ВП не вносит основной вклад в полную энергию взаимодействия. Видно, что прочие вклады в энергию взаимодействия доминируют на довольно значитель-

Т а б л и ц а 7. Максимальные номера ЯВЗ, содержащих СТД, для которых $0 > E^{\text{int}}/E_{\text{size}}^{\text{int}} > 2$ в Fe

Пора	Направление	СТД		
		Вакансия	СМА	
			Гантель $[110]$	Гантель $[\bar{1}10]$
V_9	$[001]$	4	3	3
	$[111]$	6	4	5
V_{8363}	$[001]$	3	2	2
	$[111]$	3	4	2

ных расстояниях от поверхности поры для вакансий (V_9 , направление $[111]$), но, как уже было отмечено ранее, значения E^{int} малы сами по себе (см. рис. 6, а, б, табл. 5), поэтому учёт одного только размерного взаимодействия при решении диффузионных задач для вакансий не приведёт к заметному влиянию на результаты. Вклад размерного взаимодействия в полное взаимодействие для СМА становится основным на заметно более близких расстояниях от поверхностей пор, чем для вакансий.

Различия между двумя способами определения энергии взаимодействия (МС-расчёт или учёт только упругого (размерного) взаимодействия) существенны для расчётов сил стоков, если по величине эти различия превосходят энергию тепловых флуктуаций $1,5k_B T$ в пространственной области, сравнимой по объёму с объёмом стока. В табл. 8 приведены максимальные значения номеров ЯВЗ, для которых $|E^{\text{int}} - E_{\text{size}}^{\text{int}}| > 1,5k_B T$ при $T = 20, 350, 700$ °С, в направлениях $[001]$ и $[111]$. Видно, что для вакансий различия несутся вплоть до самых малых расстояний вакансии до поверхности пор при всех рассматриваемых температурах — усреднённое по всем направлениям максимальное значение номеров ЯВЗ составляет 1,75 при 20 °С и 1,5 при более высоких температурах. При комнатной температуре усреднённые максимальные номера ЯВЗ для СМА (3,25) заметно выше, чем для вакансий. С ростом температуры средние значения снижаются, приближаясь к соответствующим значениям для вакансий: 2,25 и 2,0 при 350 и 700 °С соответственно.

Т а б л и ц а 8. Максимальные значения номеров ЯВЗ, в которых $|E^{\text{int}} - E_{\text{size}}^{\text{int}}| > 1,5k_B T$ при T , равных 20, 350, 700 °С, для направлений $[001]$ и $[111]$

Пора	Направление	СТД		
		Вакансия	СМА	
			Гантель $[110]$	Гантель $[\bar{1}10]$
V_9	$[001]$	2 / 2 / 2	4 / 2 / 1	4 / 2 / 1
	$[111]$	1 / 1 / 1	4 / 3 / 3	3 / 2 / 2
V_{8363}	$[001]$	2 / 1 / 1	3 / 2 / 2	3 / 2 / 2
	$[111]$	2 / 2 / 2	3 / 3 / 3	2 / 2 / 2

Проведённые оценки позволяют обоснованно надеяться на корректность предлагаемого подхода к учёту влияния взаимодействия ВП с СТД путём определения только размерного вклада в задаче определения сил стока вакансионных пор при температурах выше 20 и 350 °С для вакансий и СМА соответственно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ОЦК-металлах Fe и V с помощью атомистического подхода (молекулярная статика) рассчитаны поля упругих деформаций, создаваемых сферическими вакансионными порами диаметром от $2a$ до $20a$. Сравнение с результатами расчётов по упругоизотропной континуальной модели Эшелби показало, что результаты расчётов по атомистической модели и модели Эшелби не согласуются друг с другом не только количественно, но и качественно. Причиной этого является чрезмерно упрощающее предположение в модели Эшелби о том, что силы, приложенные к внутренней поверхности поры, имеют равномерное распределение и направлены к центру поры. В связи с этим при определении влияния упругих полей вакансионных пор на их силы стока для радиационных дефектов необходимо использовать упругие поля пор, рассчитанные либо с использованием атомистических моделей, либо гибридных атомистическо-континуальных моделей, учитывающих реакцию упруго-анизотропной среды на поле объёмных сил, возникающих при формировании поры в кристалле, определяемых с помощью атомистического подхода (пора формируется путём удаления атомов из узлов решётки без релаксации кристаллита).

Для расчёта энергии взаимодействия пор с радиационными дефектами (вакансии, СМА) предложен вычислительно эффективный гибридный подход, не вносящий значительной погрешности относительно атомистического подхода в расчёты сил стоков. Гибридный подход основан на совместном использовании разных методов: метод молекулярной статистики используется для расчёта дипольных тензоров радиационных дефектов и создаваемых вакансионными порами полей упругих деформаций, а взаимодействие пор с радиационными дефектами (упругими диполями) рассчитывается с помощью анизотропной линейной теории упругости. Обоснованность применения такого подхода демонстрируется путём прямого сравнения его результатов с результатами применения только метода молекулярной статистики, используя

в качестве тестовой задачи расчёт взаимодействия сферических вакансионных пор разных размеров ($2a$ и $20a$) и радиационных дефектов для ОЦК-металла Fe.

Работа поддержана НИЦ «Курчатовский институт» (приказ № 1934а от 28.09.2020) и выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Golubov S.I., Barashev A.V., Stoller R.E. 1.23 — Reaction rate theory. — *Comprehensive Nuclear Materials* (Second Edition), Elsevier, 2020, vol. 1, p. 717—753, doi: 10.1016/B978-0-12-803581-8.00663-9.
2. Becquart C.S., Mousseau N., Domain C. Kinetic Monte Carlo simulations of irradiation effects. — *Ibid.*, p. 754—778, doi: 10.1016/B978-0-12-803581-8.11685-6.
3. Kröner E. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. — *Arch. Rational Mech. Anal.*, 1959, vol. 4, p. 273—334, doi: 10.1007/BF00281393.
4. Eshelby J.D. The continuum theory of lattice defects. — In: Seitz F., Turnbull D. (Eds.). *Solid State Physics*. — New York: Academic Press, 1956, vol. 3, p. 79—144, doi: 10.1016/S0081-1947(08)60132-0.
5. Teodosiu C. *Elastic Models of Crystal Defects*. — Berlin: Springer—Verlag, 1982.
6. Sivak A.B., Romanov V.A., Chernov V.M. Diffusion of self-point defects in body-centered cubic iron crystal containing dislocations. — *Crystallogr. Rep.*, 2010, vol. 55(1), p. 97—108, doi: 10.1134/S1063774510010153.
7. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A., Sivak P.A. Kinetic Monte-Carlo simulation of self-point defect diffusion in dislocation elastic fields in BCC iron and vanadium. — *J. Nucl. Mater.*, 2011, vol. 417, p. 1067—1070, doi:10.1016/j.jnucmat.2010.12.176.
8. Sivak A.B., Sivak P.A. Efficiency of dislocations as sinks of radiation defects in fcc copper crystal. — *Crystallogr. Rep.*, 2014, vol. 59(3), p. 407—414, doi: 10.1134/S1063774514030183.
9. Sivak A.B., Sivak P.A., Romanov V.A., Chernov V.M. Dislocation sinks efficiency for self-point defects in iron and vanadium crystals. — *Inorg. Mater.: Appl. Res.*, 2015, vol. 6(2), p. 105—113, doi: 10.1134/S2075113315020161.
10. Sivak A.B., Sivak P.A., Romanov V.A., Chernov V.M. Effect of external stresses on efficiency of dislocation sinks in BCC (Fe, V) and FCC (Cu) crystals. — *Inorg. Mater.: Appl. Res.*, 2015, vol. 6(5), p. 466—472, doi:10.1134/S2075113315050184.
11. Sivak A.B., Sivak P.A., Romanov V.A., Chernov V.M. Hydrogen diffusion in the elastic fields of dislocations in iron. — *Phys. Atom. Nucl.*, 2016, vol. 79(7), p. 1199—1203, doi: 10.1134/S1063778816070115.
12. Сивак А.Б., Коровин С.В., Сивак П.А. Эффективности дислокационных стоков для радиационных дефектов в ГЦК-кристалле Pu. — *ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы*, 2018, т. 3(94), с. 23—30.
13. Subramanian G., Perez D., Uberuaga B.P., Tomé C.N., Voter A.F. Method to account for arbitrary strains in kinetic Monte Carlo simulations. — *Phys. Rev. B*, 2013, vol. 87, 144107, doi: 10.1103/PhysRevB.87.144107.
14. Carpentier D., Jourdan T., Le Bouar Y., Marinica M.-C. Effect of saddle point anisotropy of point defects on their absorption by dislocations and cavities. — *Acta Materialia*, 2017, vol. 136, p. 323—334, doi: 10.1016/j.actamat.2017.07.013.
15. Vattré A., Jourdan T., Ding H., Marinica C., Demkowicz M.J. Non-random walk diffusion enhances the sink strength of semicoherent interfaces. — *Nature Communications*, 2016, vol. 7, 10424, doi: 10.1038/ncomms10424.
16. Brailsford A.D., Bullough R. The rate theory of swelling due to void growth in irradiated metals. — *J. Nucl. Mater.*, 1972, vol. 44, p. 121—135, doi: 10.1016/0022-3115(72)90091-8.
17. Wiedersich H. On the theory of void formation during irradiation. — *Radiat. Eff.*, 1972, vol. 12, p. 111—125, doi: 10.1080/00337577208231128.
18. Borodin V.A., Ryazanov A.I., Abromeit C. Void bias factors due to the anisotropy of the point defect diffusion. — *J. Nucl. Mater.*, 1993, vol. 207, p. 242—254, doi: 10.1016/0022-3115(93)90266-2.
19. Eshelby J.D. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. — *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 1957, vol. 241, p. 376—396, doi:10.1098/rspa.1957.0133.
20. Eshelby J.D. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion. — *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 1959, vol. 252, p. 561—569, doi:10.1098/rspa.1959.0173.
21. Malerba L., Marinica M.C., Anento N., Björkas C., Nguyen H., Domain C., Djurabekova F., Olsson P., Nordlund K., Serra A., Terentyev D., Willaime F., Becquart C.S. Comparison of empirical interatomic potentials for iron applied to radiation damage studies. — *J. Nucl. Mater.*, 2010, vol. 406, p. 19—38, doi: 10.1016/j.jnucmat.2010.05.017.
22. Mendeleev M.I., Han S., Son W., Ackland G.J., Srolovitz D.J. Simulation of the interaction between Fe impurities and point defects in V. — *Phys. Rev. B*, 2007, vol. 76, 214105, doi: 10.1103/PhysRevB.76.214105.
23. Sivak A.B., Romanov V.A., Chernov V.M. Strain fields and crystallographic characteristics of interstitial dislocation loops of various geometry. — In: *BCC Iron*, AIP Conference Proceedings, 2008, vol. 999, p. 118—133, doi: 10.1063/1.2918098.
24. Tyson W.R. Surface energies of solid metals. — *Canadian Metallurgical Quarterly*, 1975, vol. 14(4), p. 307—314, doi: 10.1179/000844375795049997.
25. Kittel C. *Introduction to solid state physics*. — In: 8th edition. Hoboken. — NJ: John Wiley & Sons, Inc, 2005.
26. Tyson W.R., Miller W.A. Surface free energies of solid metals: estimation from liquid surface tension measurements. — *Surface Science*, 1977, vol. 62, p. 267—276, doi: 10.1016/0039-6028(77)90442-3.
27. Hill R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. — *Proc. Phys. Soc. A*, 1952, vol. 65(5), p. 349—354, doi:10.1088/0370-1298/65/5/307.

ЗАВИСИМОСТИ УПРУГИХ ПОЛЕЙ, СОЗДАВАЕМЫХ СФЕРИЧЕСКИМИ ВП, ОТ РАССТОЯНИЯ ДО ИХ ПОВЕРХНОСТИ В ИЗБРАННЫХ НАПРАВЛЕНИЯХ

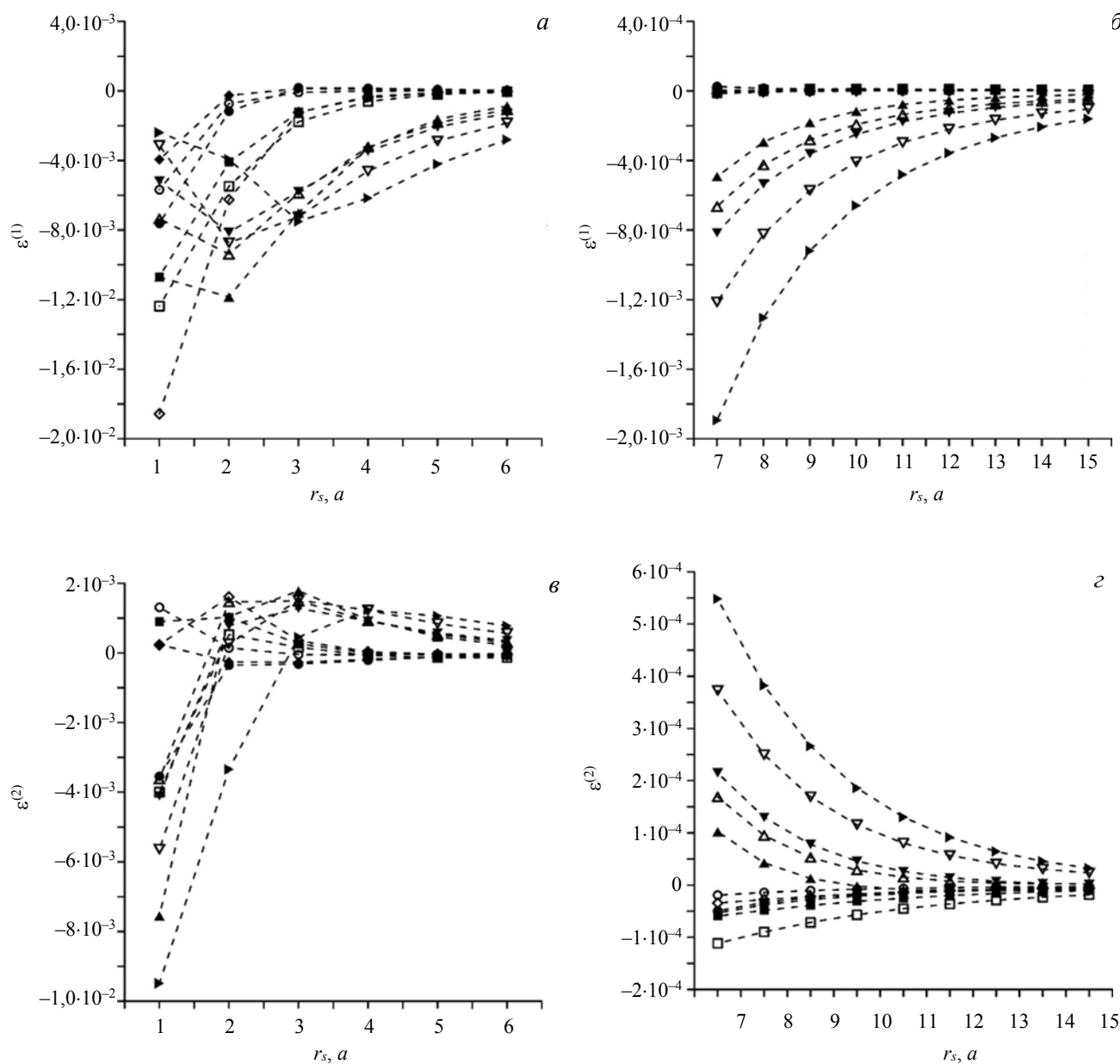


Рис. А.1. Зависимость собственных значений $\varepsilon^{(1)}$ (а, б) и $\varepsilon^{(2)} = \varepsilon^{(3)}$ (в, г) тензора упругих деформаций ВП от расстояния до поверхности ВП в направлениях $\langle 100 \rangle$ в Fe. Собственный вектор, соответствующий $\varepsilon^{(1)}$, параллелен рассматриваемому конкретному направлению $\langle 100 \rangle$: • — V_9 ; ○ — V_{15} ; ◆ — V_{27} ; ◇ — V_{59} ; ■ — V_{137} ; □ — V_{229} ; ▲ — V_{1037} ; △ — V_{2277} ; ▼ — V_{3527} ; ▽ — V_{5065} ; ► — V_{8363}

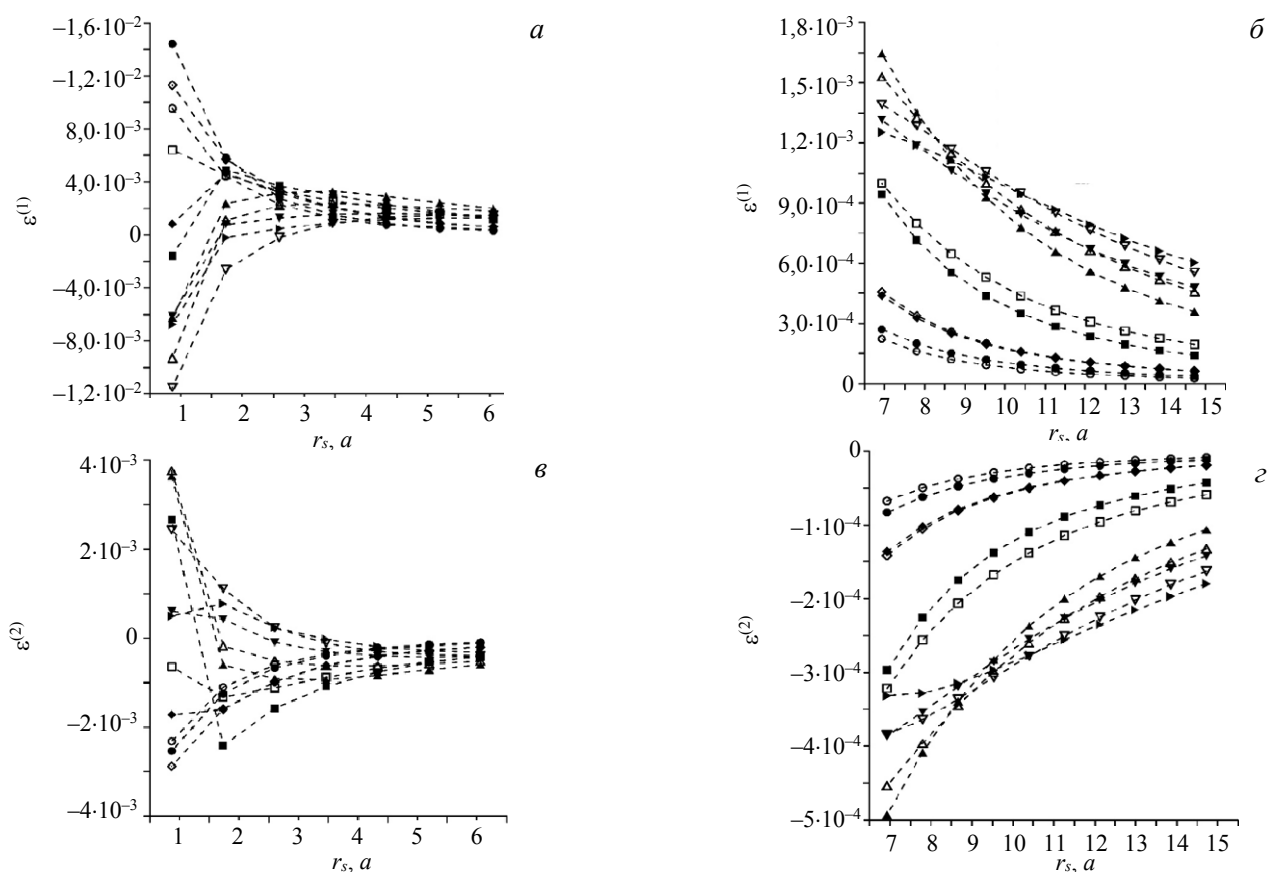


Рис. А.2. Зависимость собственных значений $\varepsilon^{(1)}$ (а, б) и $\varepsilon^{(2)} = \varepsilon^{(3)}$ (в, г) тензора упругих деформаций ВП от расстояния до поверхности ВП в направлениях $\langle 111 \rangle$ в Fe. Собственный вектор, соответствующий $\varepsilon^{(1)}$, параллелен рассматриваемому конкретному направлению $\langle 111 \rangle$: ● — V9; ○ — V15; ◆ — V27; ◇ — V59; ■ — V137; □ — V229; ▲ — V1037; △ — V2277; ▼ — V3527; ▽ — V5065; ► — V8363

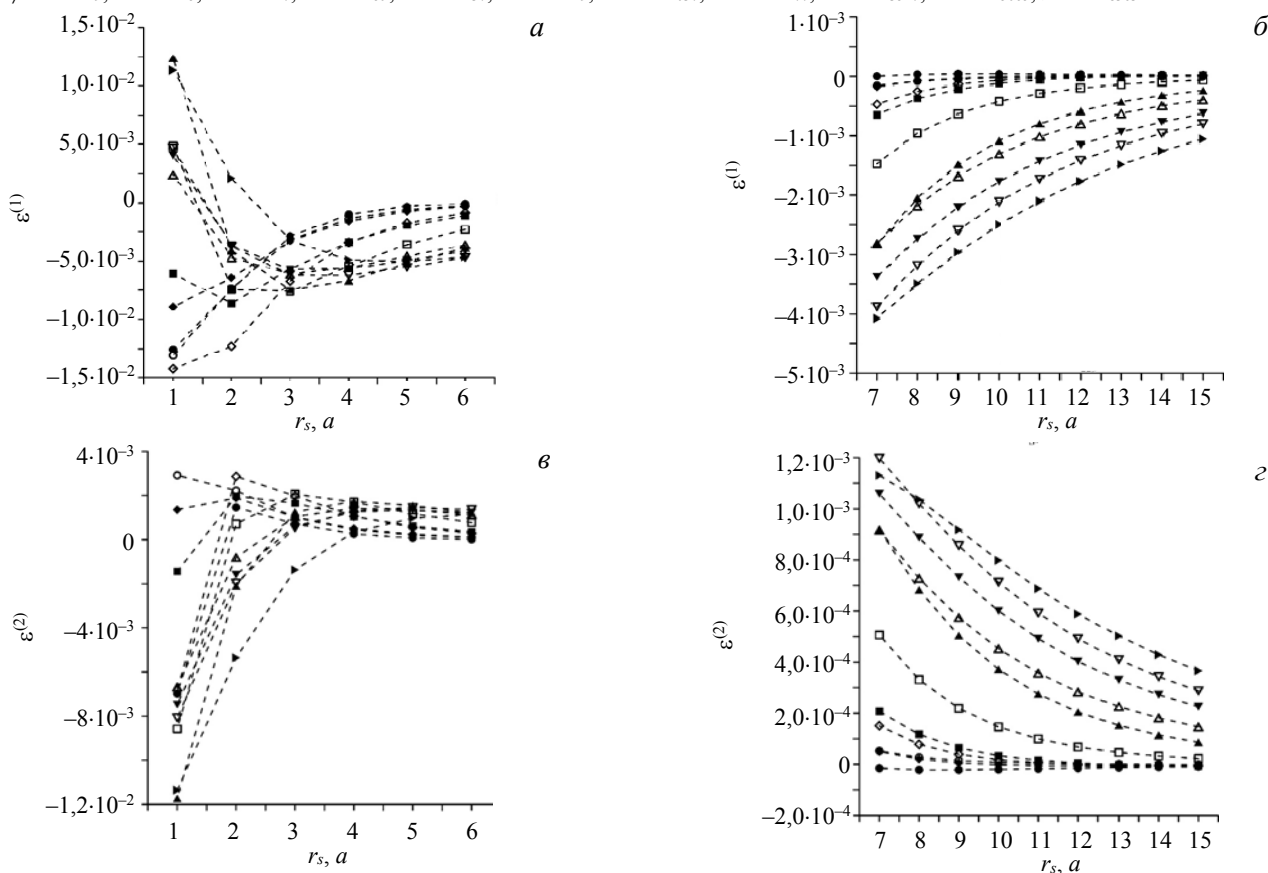


Рис. А.3. Зависимость собственных значений $\varepsilon^{(1)}$ (а, б) и $\varepsilon^{(2)} = \varepsilon^{(3)}$ (в, г) тензора упругих деформаций ВП от расстояния до поверхности ВП в направлениях $\langle 100 \rangle$ в V. Собственный вектор, соответствующий $\varepsilon^{(1)}$, параллелен рассматриваемому конкретному направлению $\langle 100 \rangle$: ● — V9; ○ — V15; ◆ — V27; ◇ — V59; ■ — V137; □ — V229; ▲ — V1037; △ — V2277; ▼ — V3527; ▽ — V5065; ► — V8363

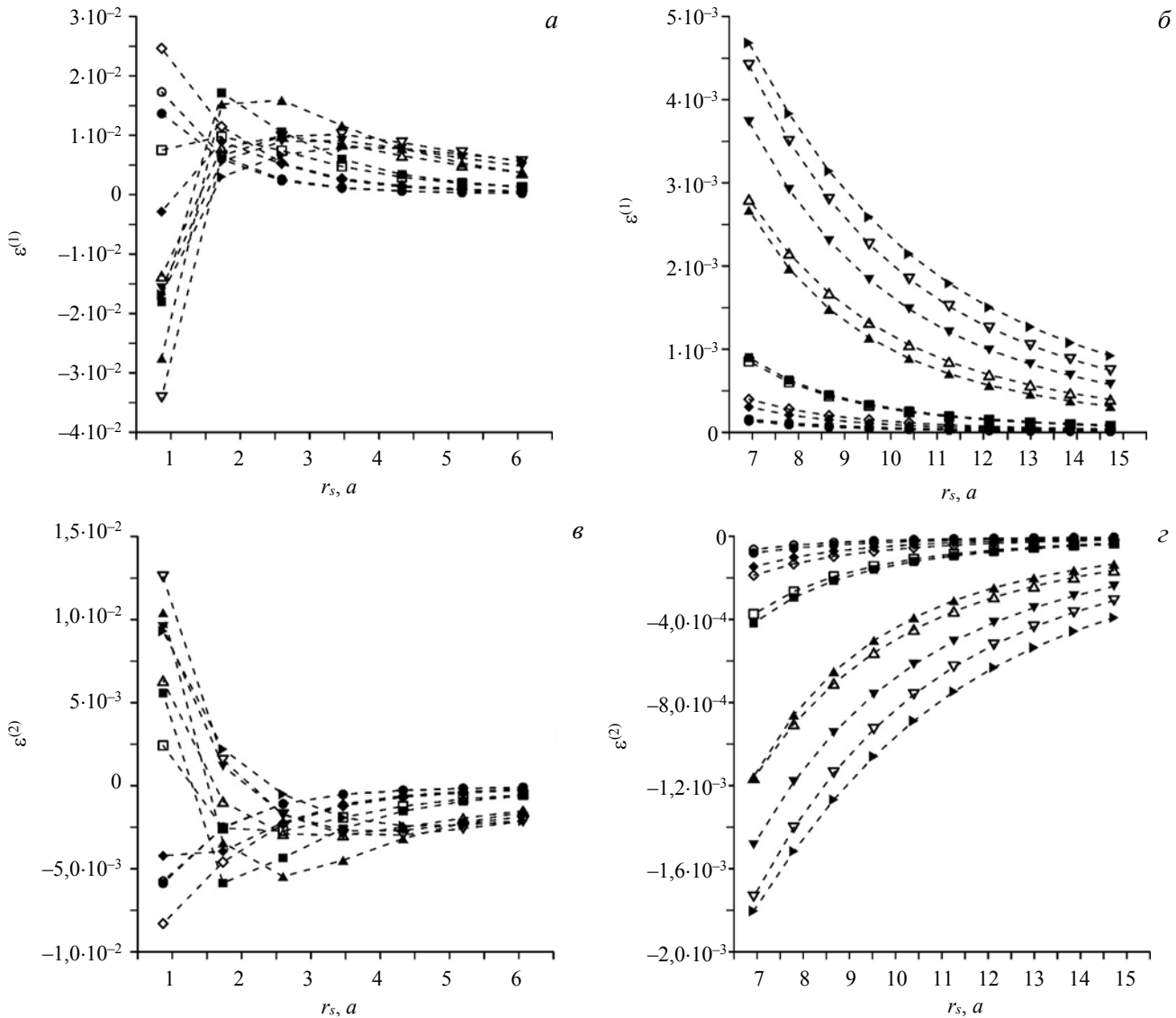


Рис. А.4. Зависимость собственных значений $\varepsilon^{(1)}$ (а, б) и $\varepsilon^{(2)} = \varepsilon^{(3)}$ (в, г) тензора упругих деформаций ВП от расстояния до поверхности ВП в направлениях $\langle 111 \rangle$ в V. Собственный вектор, соответствующий $\varepsilon^{(1)}$, параллелен рассматриваемому конкретному направлению $\langle 111 \rangle$: • — V₉; ○ — V₁₅; ◆ — V₂₇; ◇ — V₅₉; ■ — V₁₃₇; □ — V₂₂₉; ▲ — V₁₀₃₇; △ — V₂₂₇₇; ▼ — V₃₅₂₇; ▽ — V₅₀₆₅; ► — V₈₃₆₃

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

УПРУГОИЗОТРОПНАЯ КОНТИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ СФЕРИЧЕСКОЙ ПОРЫ

Поле деформаций, создаваемое сферической порой, можно определить, пользуясь континуальными моделями, предложенными Дж. Эшелби [19, 20]. Пусть упругое тело представляет собой шар радиусом R и объемом V с концентрической сферической полостью. Приложим равномерно по поверхности нормальные к поверхности полости силы (силы направлены к центру поры) такой величины, чтобы объем полости уменьшился на δv (радиус сферической полости при этом становится равным r_0). В этом случае возникнет поле упругих деформаций [5]:

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{rr} &= -\frac{2C}{r^3} \left(1 - \frac{1-2\nu}{1+\nu} \frac{r^3}{R^3} \right), \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{C}{r^3} \left(1 + 2 \frac{1-2\nu}{1+\nu} \frac{r^3}{R^3} \right), \\ \text{Tr} \varepsilon &= 6 \frac{1-2\nu}{1+\nu} \frac{C}{R^3} \end{aligned} \right\}, \quad (\text{Б.1})$$

где

$$C = \frac{\delta v}{4\pi \left(1 + 2 \frac{1-2\nu}{1+\nu} \frac{r_0^3}{R^3} \right)}. \quad (\text{Б.2})$$

Изменение объёма упругого тела, вызванное порой, равно [5]

$$V^R = 12\pi C \frac{1-\nu}{1+\nu}. \quad (\text{Б.3})$$

Так как выражение (Б.3) устанавливает взаимосвязь между величинами V^R и C , можно брать величину V^R в качестве параметра, определяющего упругое поле поры. Перепишем в соответствующем виде выражение (Б.1):

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{rr} &= -\frac{V^R}{6\pi r^3} \frac{1+\nu}{1-\nu} \left(1 - \frac{1-2\nu}{1+\nu} \frac{r^3}{R^3} \right), \quad \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{\varphi\varphi} = \frac{V^R}{12\pi r^3} \frac{1+\nu}{1-\nu} \left(1 + 2 \frac{1-2\nu}{1+\nu} \frac{r^3}{R^3} \right), \\ \text{Tr} \varepsilon &= \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{V^R}{2\pi R^3} = \frac{2}{3} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{V^R}{V} \end{aligned} \right\}. \quad (\text{Б.4})$$

Переходя из сферических координат к декартовым, получим для тензора деформаций

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{ij} &= \frac{V^R}{4\pi r^3} \frac{1+\nu}{1-\nu} \left(\frac{\delta_{ij}}{3} - \frac{x_i x_j}{r^2} \right) + \frac{2}{9} \frac{V^R}{V} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \delta_{ij}, \\ r &= \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} \end{aligned} \right\}. \quad (\text{Б.5})$$

Как видно из (Б.1) или (Б.4), след тензора деформаций $\text{Tr} \varepsilon$ одинаков во всех точках упругого тела. Для комбинаций величин V^R и V , указанных в табл. 1 и 3, $\text{Tr} \varepsilon$, определённый по (Б.4), по модулю не превышает $4 \cdot 10^{-3}\%$, поэтому второе слагаемое в (Б.5) слабо влияет на вид изоповерхностей $\varepsilon_{ij} = \pm 0,02\%$, представленных на рис. 1, 2. При проведении расчётов по (Б.5) значения коэффициента Пуассона ν полагались равными 0,30 для Fe и 0,36 для V. Эти значения получены методом Фогта—Ройса—Хилла [27] из значений упругих постоянных c_{11} (243,4 ГПа для Fe и 227,5 ГПа для V), c_{12} (145,0 ГПа для Fe и 119,3 ГПа для V), c_{44} (116,0 ГПа для Fe и 42,0 ГПа для V), соответствующих используемым в работе потенциалам межатомного взаимодействия [21, 22] для Fe и V.



Александр Борисович Сивак,
к.ф.-м.н., начальник лабора-
тории; НИЦ «Курчатовский
институт», 123182 Москва,
пл. Академика Курчатова 1,
Россия
Sivak_AB@nrcki.ru



Полина Александровна Си-
вак, инженер; НИЦ «Курча-
товский институт», 123182,
Москва, пл. Академика Кур-
чатова 1, Россия
Sivak_PA@nrcki.ru

Статья поступила в редакцию 18 декабря 2020 г.

После доработки 1 января 2021 г.

Принята к публикации 14 января 2021 г.

Вопросы атомной науки и техники.

Сер. Термоядерный синтез, 2021, т. 44, вып. 1, с. 119—135.