

УДК 621.039.53

О.Я. Хрущева (6 курс, каф.ЭЯФ), Е.Е. Журкин, доц., к.ф.-м.н.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПРЕЦИПИТАЦИИ ПРИМЕСИ В α -ЖЕЛЕЗЕ В УСЛОВИЯХ НЕЙТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Наличие примесей в корпусных сталях водо-водяных реакторов (ВВР) может существенным образом влиять на их механические свойства. Одной из важных характеристик микроструктуры данных материалов являются физические характеристики новых фаз (преципитатов), образующихся из атомов примеси и их стабильность при облучении. В работе изучалось поведение одной из типичных примесей в реакторных материалах – меди, в условиях нейтронного облучения методами компьютерного моделирования на атомарном масштабе. Свойства альфа-железа с введенной малой добавкой меди изучались методом Метрополиса Монте-Карло, адаптированным применительно к каноническому ансамблю при постоянном давлении. Для исключения граничных эффектов рассматривались модельные боксы, содержащие 1024 и 65536 атомов, на которые накладывались периодические граничные условия. Изначальные распределения замещающей примеси меди выбиралось изотропно по всему объему бокса. Было показано, что при $T=300,600$ К Cu имеет тенденцию к образованию преципитатов в чистом железе. При введении в модельный кристалл радиационных дефектов, образованных в результате каскадов ПВА, атомы меди также собираются в преципитаты, образуя устойчивые комплексы с вакансионными кластерами. В тоже время известно, что при нейтронной бомбардировке в железе образуются большое число дислокаций. При введении в модельный кристалл краевой дислокации (вектор Бюргерса $\langle 100 \rangle$) наблюдается сегрегация меди вдоль линии дислокации.