

МД МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ САМООБЛУЧЕНИЯ НА ДИНАМИКУ ДИСЛОКАЦИЙ В δ -Pu

А.В. Караваев, В.В. Дремов, Г.В. Ионов

ФГУП «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики имени академика Е.И. Забахина», г. Снежинск, Россия (a.v.karavayev@vniitf.ru, a.v.karavaev@gmail.com)

Самооблучение радиоактивных материалов, таких как плутоний и сплавы на его основе, приводит к постоянному рождению первичных радиационных дефектов и продуктов распада, например, радиогенного гелия, их накоплению, диффузионной миграции по решетке, кластеризации и т.п. Микроструктура систем точечных дефектов является важным фактором, влияющим на механические свойства материала. В рамках молекулярной динамики с помощью метода термодинамического интегрирования (МТИ) выполнено исследование равновесной термодинамики систем радиационных дефектов. Выполнены исследования поведения радиогенного гелия в ГЦК Pu-Ga сплавах, получены равновесные параметры гелиевых пузырьков, согласующиеся с экспериментально наблюдаемыми. Выполнены исследования поведения кластеров радиационных дефектов в Pu-Ga сплавах, получены их равновесные параметры. С помощью разработанного метода релаксации напряжений выполнено исследование динамики дислокаций в кристаллической решетке под действием сдвиговых напряжений вплоть до практически нулевых скоростей деформации. Выполнены оценки напряжения Пайерлса и квазистатических упругопластических характеристик материала. Моделирование выполнено как в отсутствие других дефектов кристаллической структуры, так и в присутствии радиационных дефектов различной морфологии. Показано, что нанометровые гелиевые пузырьки вызывают закрепление дислокаций, что приводит к повышению квазистатического предела упругости материала. Выполнены количественные оценки изменения статического предела текучести от возраста материала, хорошо согласующиеся с наблюдаемыми в эксперименте значениями. Разработанные методики позволяют перенести технологию расчетов на прогнозирование поведения других ядерно-активных и конструкционных материалов под воздействием интенсивных радиационных нагрузок.