



**Конкурс работ молодых ученых «Просто о сложном»  
Научно-популярная статья призера II степени Боева Антона Олеговича  
(аспирант 3 года обучения, ФГАОУ ВО "Белгородский государственный  
национальный исследовательский университет", г. Белгород)**

**Компьютерное моделирование в разработке новых радиационноустойчивых материалов<sup>1</sup>**

Изучение физических процессов, происходящих в материалах, ограничено развитием методов исследования. Даже самый мощный микроскоп не позволяет наблюдать за процессами на атомном уровне в реальном времени. Хотя, понимание этих процессов могло бы в тысячи раз ускорить разработку новых материалов. Ведь, в современных исследованиях зачастую открытия происходят случайно. Вот добавим в “этот металл” немного вот “этого вещества” и посмотрим, вдруг что-то интересное получится? Не получилось. Добавим другое вещество... И так далее, пока не получится интересный результат.

Вы спросите, почему в век бурного развития технологий мы до сих пор пользуемся доисторическими методами? На самом деле это не так. Начиная с 70-х годов прошлого века для исследования некоторых процессов на атомном уровне все активнее используется компьютерное моделирование. Одним из самых применяемых методов компьютерного моделирования, позволяющим исследовать структуры размером до нескольких миллионов атомов при повышенных температурах, является молекулярная динамика. В ней атомы представлены в виде шариков, а взаимодействие между ними задается математическими функциями, которые позволяют атомам в компьютере вести себя также, как и в реальности. Точность описания этого взаимодействия напрямую связана с точностью описания физических свойств данного вещества. Однако, создание качественных потенциалов межатомного взаимодействия (математических функций) - это непростая задача, которая под силу только нескольким лабораториям в России.

Было бы идеальным создавать новые материалы полностью на компьютере. Представьте, сколько бы времени это сэкономило! Не нужно проводить долгие эксперименты, вырезать кучу образцов, а если это вещество редкое и дорогое? Но, к сожалению, молекулярная динамика имеет главное ограничение - временное. Дело в том, что для компьютерных исследований требуются огромные вычислительные мощности. И в настоящее время это ограничение примерно составляет несколько десятков наносекунд. Но, несмотря на это, данный метод нашёл широкое применение. В данной работе мы рассмотрим одно из применений молекулярной динамики на примере изучения механизмов влияния атомов титана на радиационную повреждаемость ванадия.

---

<sup>1</sup> Научно-популярная статья основана на материалах публикаций:

1. Картамышев, А.И., Боев, А.О., Максименко, В.Н., Неласов, И.В., Савельев, В.Н., Липницкий, А.Г. Многочастичные потенциалы межатомных взаимодействий в системе Ti-V с учетом угловых взаимодействий для молекулярно динамических расчетов. Научные ведомости БелГУ. Серия: Математика. Физика, 2016, 20 (241), 44, 117 – 128.
2. Boev A.O., Aksyonov D.A., Kartamyshev A.I., Maksimenko V.N., Nelasov I.V., Lipnitskii A.G. Interaction of Ti and Cr atoms with point defects in bcc vanadium: A DFT study. Journal of Nuclear Materials, 2017, 492, 14 – 21.
3. Boev A.O., Nelasov I.V., Maksimenko V.N., Lipnitskii A.G., Saveliev V.N., Kartamyshev A.I. Molecular dynamics simulations of the excess vacancy evolution in V and V-4Ti. Defect and Diffusion Forum, 2017.
4. Boev A. O. et al. Molecular dynamic simulations of the interaction of interstitial atoms with vacancy complexes in V and V-4Ti. AIP Conference Proceedings, 2017.
5. Boev A.O., Zolnikov K.P., Nelasov I.V., Lipnitskii A.G. Molecular dynamics simulation of primary radiation damage in V and V-4Ti alloy. *Unpublished (Under Review) 2018.*

## Радиационные повреждения

Одной из проблем, которой занимается наша лаборатория, является исследование ванадиевых сплавов для термоядерных реакторов, которые только находятся в стадии разработки. Ключевой характеристикой сплавов для термоядерной энергетики является устойчивость к нейтронному облучению (нейтроны являются продуктами термоядерной реакции, которая лежит в основе работы реактора), одним из аспектов которой является стойкость к радиационному набуханию, т.е. процессу объединения точечных дефектов в комплексы и поры, которые приводят к разрушению материала. Сейчас разберем подробнее и понятнее.

Надеюсь, все из Вас знают, что любое вещество состоит из атомов, а в твердых телах все атомы занимают строго определенные положения, образуя кристаллическую решетку? Быстрый нейтрон при соударении передает свою кинетическую энергию атомам кристаллической решетки металла, из которого сделаны стенки реактора. В результате этого начинается **каскад атомных смещений**, то есть атомы выбиваются из своих устойчивых положений (узлов решетки), как шары в бильярде. В свою очередь эти атомы начинают выбивать все новые и новые атомы. Это происходит пока у них хватает энергии. Если атом выбивается из своего положения, то он называется **межузельным атомом**. А в месте, откуда его выбили, остается небольшая пустота - **вакансия**. В совокупности междузельный атом и вакансия являются точечными дефектами кристаллической структуры и называются **парой Френкеля** (Рис. 1), за счет диффузии они могут перемещаться по кристаллической решетке. В момент, когда у атомов закончилась энергия, они уже выбили все, что возможно, начинается **вторая стадия каскада атомных смещений**. Атомам не выгодно находиться в междузельном положении, так как при этом для существования им приходится постоянно расталкивать соседние атомы, а это затруднительно. Им куда выгоднее соединиться с вакансиями, то есть возвращаться в исходные положения в кристаллической решетке. Этот процесс называется **рекомбинацией** точечных дефектов. По истечении некоторого времени, когда каскад “успокаивается”, несмотря на то, что большинство междузельных атомов рекомбинируют с вакансиями, все же остается некоторое количество дефектов (межузельных атомов и вакансий), которые успевают “разбежаться” от места соударения и остаются в виде отдельных дефектов. Такие дефекты называются “**выжившими**”. После этого вакансии могут объединяться и образовывать пустоты побольше, а если к ним будут присоединяться еще вакансии от каскадов, которые прошли недалеко от первого, то эти пустоты могут превращаться в поры (большие дырки). В результате роста таких пор будут ухудшаться свойства данного материала, и он начнет быстро разрушаться. Этот процесс образования и роста пор под действием радиационного облучения нейтронами и называется **распуханием**. Таким образом, развитие каскада атомных смещений состоит из трех стадий: на первой стадии происходит быстрый рост числа дефектов (межузельных атомов и вакансий), на второй стадии происходит их рекомбинация, а на третьей стадии остаются “выжившие” дефекты, которые далее могут перемещаться по кристаллу, объединяться и т.д.

## Компьютерный эксперимент

Из экспериментальных исследований известно, что добавление титана в ванадий снижает величину набухания в десятки раз. Однако, до сих пор не установлена причина этого явления. Единственным методом, который может пролить свет на эту непонятную особенность, является компьютерное моделирование.

Целью нашей работы было найти ответ на вопрос: *почему добавление титана снижает радиационное распухание ванадия?* Первым делом, нужно было найти инструмент, который позволил бы провести компьютерный эксперимент. Программы, которые реализуют метод молекулярной динамики уже были в нашем распоряжении, оставалось определиться с потенциалами межатомных взаимодействий. В этом вопросе есть два пути: использовать уже имеющиеся в мировой базе данных или построить свои. Так как потенциалы для системы титан-ванадий отсутствовали, нам пришлось идти по пути построения своих потенциалов.

Создание потенциалов включает в себя три основных этапа. На первом этапе происходит поиск всевозможных экспериментальных и теоретических данных о свойствах ванадия, титана и системы титан-ванадий в литературе. Например, их кристаллическая структура, расстояние между атомами, температура плавления и т. д. На втором этапе происходит процесс подгонки математической функции, которая в итоге должна воспроизводить все экспериментальные характеристики при моделировании (атомы в компьютере ведут себя также, как в реальности). Если все прошло гладко, то на третьем этапе проводится дополнительное тестирование потенциалов. Спустя некоторое время, мы получили необходимый инструмент для нашего исследования.

Так как метод молекулярной динамики не позволяет проводить длительные компьютерные эксперименты, нам пришлось разбить наше исследование на небольшие задачи.

### **Определить число выживших**

Во-первых, необходимо было установить, сколько дефектов “выживает” в чистом ванадии и сколько в сплаве ванадий-титан. Для этого мы построили образцы и “бомбанули” один из атомов. Каскад пошел! На всякий случай “бомбили” мы три раза: энергией поменьше, энергией побольше, и чем-то средним. На рис. 2 показано изменение числа дефектов (пар Френкеля) со временем. Можно отчетливо увидеть, как на первой стадии оно резко возрастает, затем, на второй оно резко убывает, а на третьей - не меняется. Процесс каскада показан на рис. 3.

Как мы можем увидеть, добавление 4% титана не влияет на количество “выживших” дефектов. А именно они нас и интересуют, так как из них потом образуются поры. Не здесь “собака зарыта”! При визуализации мы обнаружили небольшую зацепку, в чистом ванадии межузельные атомы “убегают” в 2 раза дальше, чем в сплаве с титаном. Если количество дефектов после каскада остается одинаковым, значит, нужно посмотреть, что с ними будет происходить дальше?

### **Титан и вакансии**

После каскада атомных смещений получается такая ситуация: межузельные атомы покидают место попадания нейтрона, а вакансии остаются примерно в этом же месте. Поэтому для простоты эксперимента при моделировании мы рассматривали только область, в которой остались вакансии. Создали структуры чистого ванадия и ванадия с титаном, и поместили туда по 50 вакансий случайным образом (точнее удалили по 50 атомов из 2000, ведь вакансия - это отсутствие атома). Запустили программу и наблюдали, что же будет с ними дальше? И здесь наконец-то мы обнаружили явные различия. В чистом ванадии все вакансии собрались в одну замкнутую линию, которая называется **дислокацией (рис. 4а)**. А

вот титан такого сделать в своем сплаве не позволил. Атомы титана “нахватали” себе по несколько вакансий и затормозили их, не давая объединиться (рис. 4b, 5).

Но для того, чтобы понять, что это отличие в поведении вакансий является главной причиной снижения радиационного распухания, нам было достаточно провести один небольшой компьютерный эксперимент. А именно, мы решили запустить в область вакансий по очереди несколько межузельных атомов, чтобы проверить различие рекомбинации с образовавшимися вакансионными дефектами в ванадии и сплаве ванадий-титан.

### **Титан и межузельные атомы**

После того, как некоторое количество межузельных атомов, запущенных в получившиеся области вакансионных дефектов, начало взаимодействовать с вакансиями, мы оценили вероятность их рекомбинации. Полученные данные нас немного разочаровали: в сплаве ванадия с титаном межузельные атомы рекомбинировали всего в два раза чаще по сравнению с чистым ванадием. Хотя, предполагалось получить отличие минимум в десятки раз.

И тут нами была обнаружена интересная особенность поведения межузельных атомов в присутствии титана: их подвижность была на три порядка ниже, чем в случае чистого ванадия! Этого результата мы не ожидали! Исследование траекторий движения межузельных атомов показало, что в присутствии титана, они попадают в какие-то ловушки, и долгое время просто не могут из них выбраться. А если им все-таки это удастся, то они проходят небольшое расстояние и попадают в новые, в то время как в чистом ванадии межузельные атомы пробегают через весь модельный образец с большой скоростью.

### **Выводы**

Итак, наше исследование позволило сделать следующие выводы о причинах снижения радиационного распухания ванадия, легированного титаном.

После прохождения каскада атомных смещений в кристаллической решетке сплава ванадий-титан в результате попадания нейтрона вакансии остаются в этой области, а межузельные атомы ее покидают. Затем вакансии начинают соединяться в небольшие дефектные группы, а дальнейшему росту препятствует присутствие атомов титана. Межузельные атомы, образуемые в последующих каскадах, попадают в эти области вакансионных дефектов и буквально “застревают” в них, опять же, благодаря титану. И находятся в них до тех пор, пока не пройдет их рекомбинация с вакансиями. При рекомбинации из структуры исчезает один межузельный атом и одна вакансия. Таким образом, в материале постоянно поддерживается определенная концентрация вакансий. А это, в свою очередь, приводит к снижению радиационного распухания, так как к имеющимся пустотам (маленьким порам) не присоединяются новые вакансии.

Понимание механизма снижения радиационного распухания ванадия за счет добавления в него небольшого количества титана позволяет продвинуться в области прогнозирования новых радиационностойких материалов. И приближает возможность разработки новых материалов с помощью компьютера!

Иллюстрации

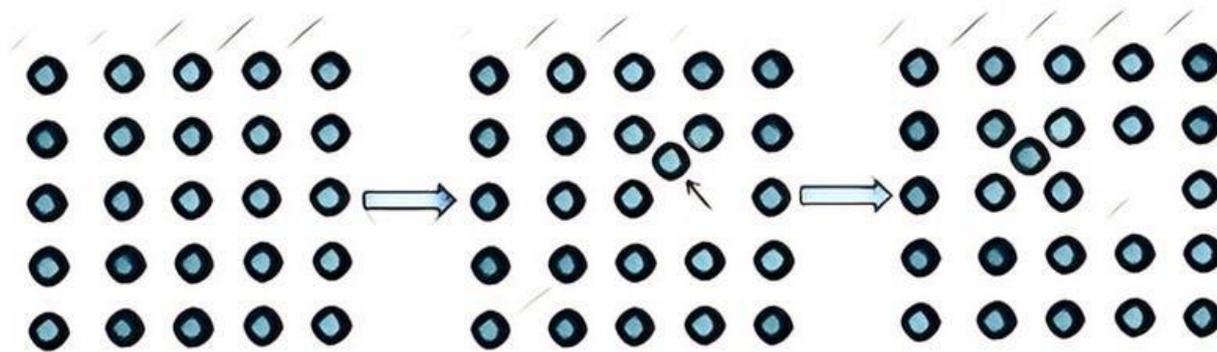


Рис.1. Атом из положения в кристаллической решетке (узла решетки) уходит в межузельное положение, а на его месте появляется пустота. При этом образуется пара Френкеля – межузельный атом и вакансия.

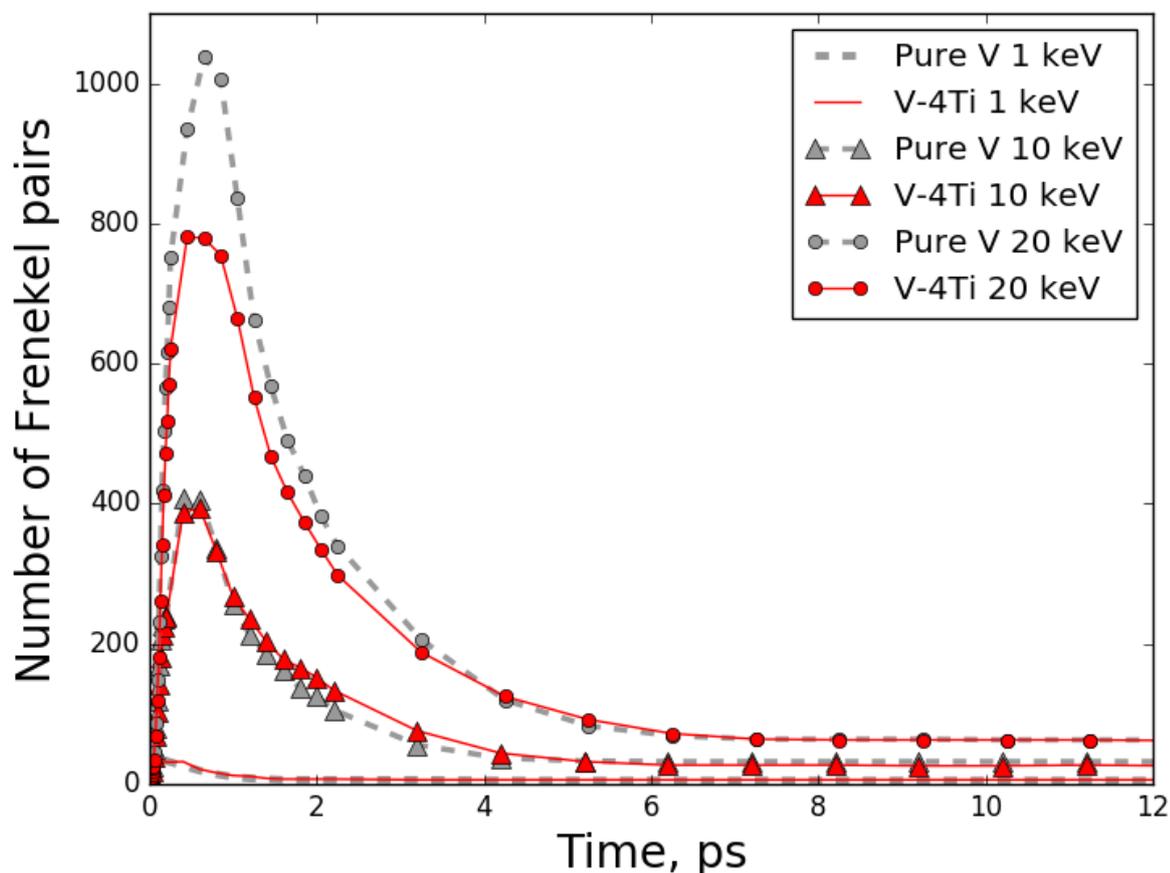
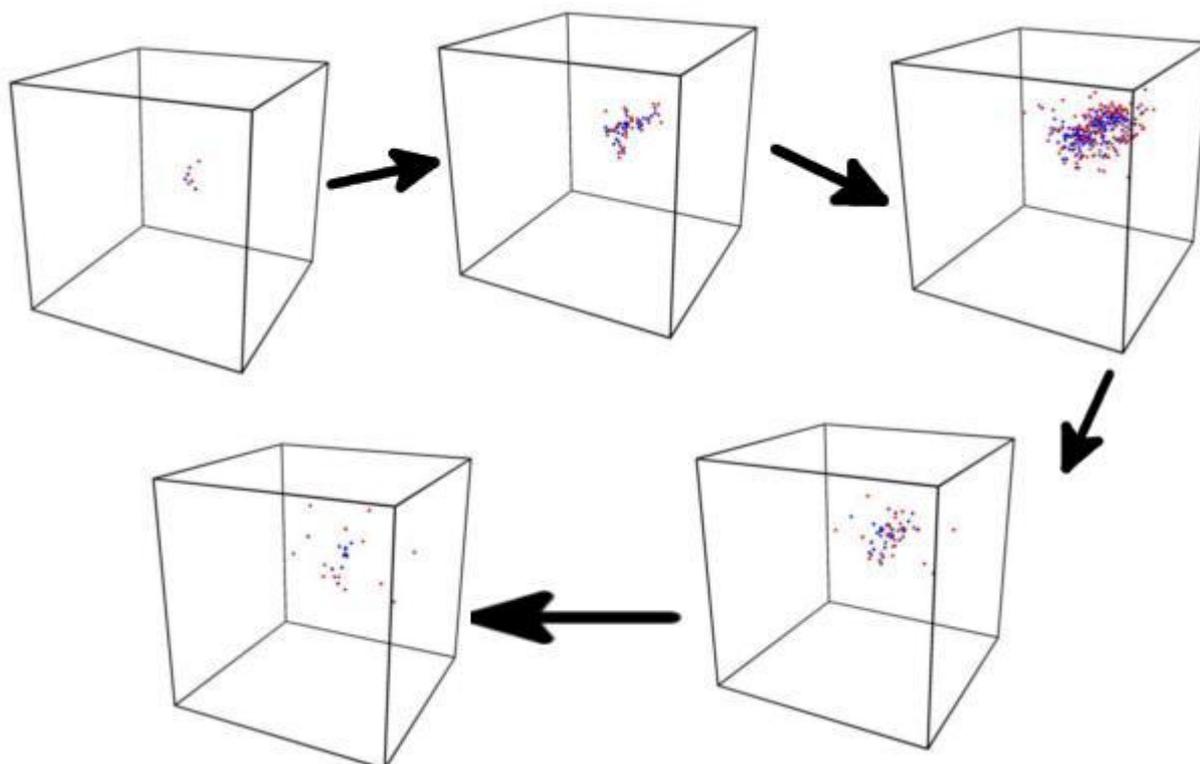
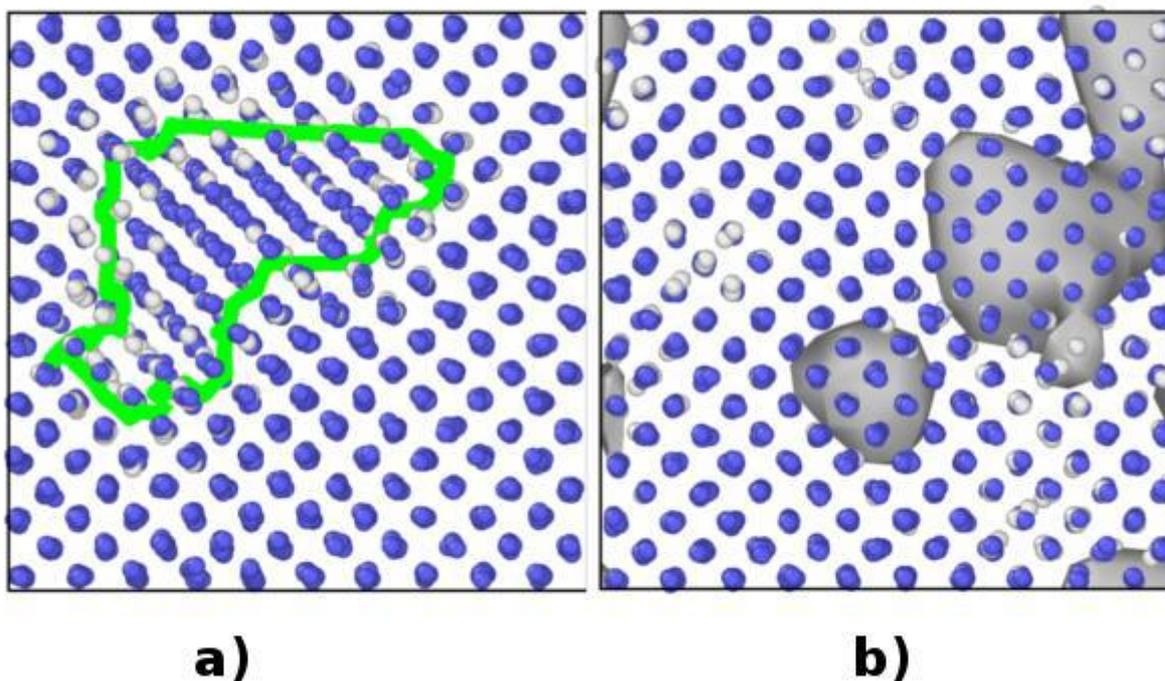


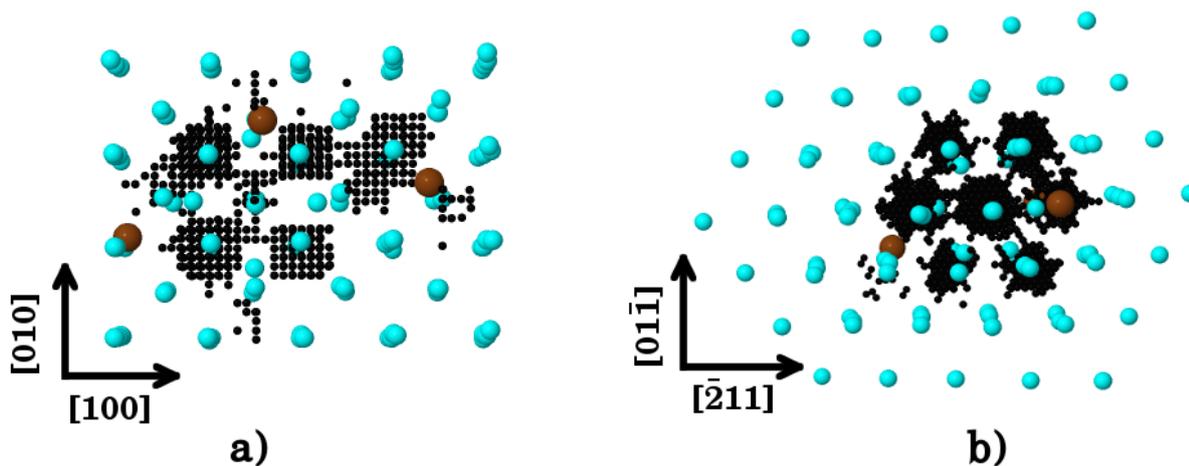
Рис.2. Зависимость количества пар Френкеля от времени моделирования при облучении энергиями 1, 10 и 20 кэВ в ванадии (серый) и сплаве V-4Ti (красный).



*Рис.3. Визуализация каскада атомных смещений на атомном уровне. Синим цветом показаны вакансии, красным – межузельные атомы. Видно, как количество дефектов сначала резко возрастает, а затем снижается до постоянного значения.*



*Рис.4. а) В чистом ванадии вакансии собираются вместе и образуют дислокационную петлю (зеленый цвет). б) В сплаве ванадий-титан образуются небольшие вакансионные комплексы (области серого цвета).*



*Рис.5. Вакансионные дефекты в сплаве ванадий-титан. Скопления черных точек – вакансии, коричневые атомы – титан, лазурные атомы – ванадий. Получившиеся дефекты включают в себя от двух до шестнадцати вакансий.*