

Аннотационный отчет

о научно-исследовательской работе

Молекулярно-динамическое моделирование диффузии в гамма-уране: сравнение межатомных потенциалов и методов расчета энергетических барьеров.

Работу выполнил: _____ Фиданян К.С.
стажер-исследователь лаб. 1.2.2.3
НИЦ1 ОИВТ РАН

Научный руководитель: _____ Стегайлов В.В.
д.ф.-м.н., руководитель отдела 1.2.2

За предыдущий год освоено и подготовлено необходимое программное обеспечение для анализа движения точечных дефектов в кристалле, выделения полезной информации из теплового шума. Получены базовые знания по теории функционала плотности (DFT) и наиболее распространённым пакетам для квантового моделирования – VASP и Abinit. Это позволит в ближайшее время перейти от классических расчетов к квантовым, увеличить точность предсказания свойств материала.

Проведён расчёт величины барьеров миграции одиночной вакансии в решётке гамма-урана по её среднеквадратичному смещению при различных температурах. Исследована модель случайных блужданий с непрерывным временем (CTRW), и на её основе сравнён вклад в общую диффузию вакансий отдельных механизмов – перескоков вакансии по трём основным кристаллографическим направлениям (рис. 1).

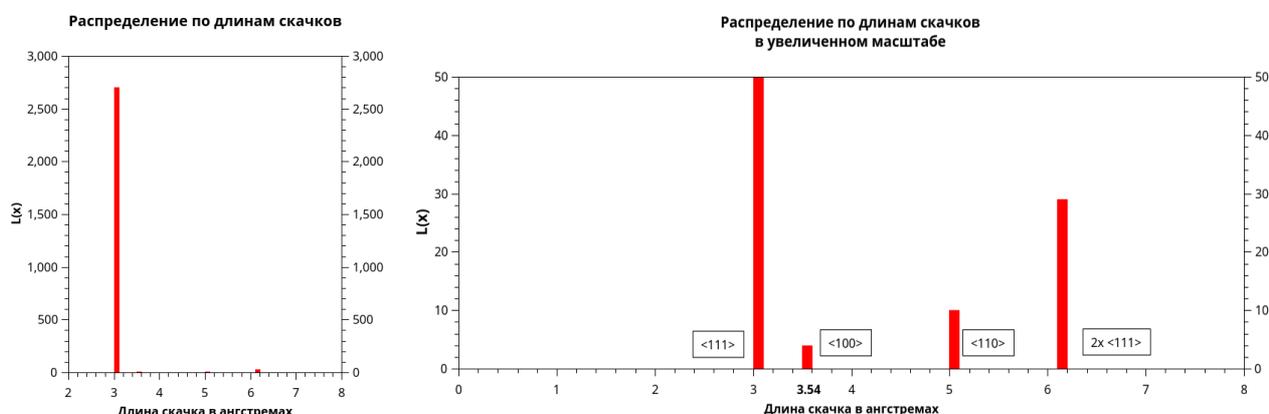


Рисунок 1. Сравнение вклада различных механизмов перескока одиночной вакансии в движение дефекта.

Проведены пробные расчёты барьеров диффузии методом метадинамики при различных температурах, выяснены особенности работы метадинамики на кристаллических системах. Были проведены оценки эффективности и точности метода, освоен теоретический материал. Сейчас эта работа продолжается, планируется завершить её к зиме.

Показано, что величина барьера диффузии вакансии может меняться в зависимости от температуры, однако этот вопрос требует серьёзной проработки, пока нельзя говорить об объяснении феномена.

В процессе расчётов стало ясно, что результат ощутимо зависит от выбранного межатомного потенциала. В частности, между потенциалами могут незначительно изменяться параметры решётки, что, однако, сильно сказывается на давлении в системе и может приводить к серьёзным ошибкам. Чтобы избежать ошибок, предпочтительно жертвовать точным значением постоянной решётки в пользу правильного давления.

Наиболее распространённые сейчас потенциалы для описания металлов являются эмпирическими, т. е. из общих соображений выбирается аналитическая форма потенциала, а значения параметров подбираются так, чтобы давать наилучшее соответствие с первопринципными расчетами на некотором наборе эталонных систем. Преимущество их по сравнению с квантовыми моделями в быстродействии. Так, проведённые расчёты среднеквадратичного отклонения вакансии были бы невозможны с квантовой точностью из-за непомерных вычислительных затрат.

В целом можно сказать, что за этот год не был получен законченный результат, однако наработан материал, свидетельствующий о том, что характер диффузии дефектов в γ -уране меняется при переходе к высокотемпературному диапазону. Результаты этого этапа будут обобщены и представлены в ближайшие месяцы.

Публикации:

Фиданян К.С., тезисы доклада «Барьеры миграции дефектов в γ -уране: сравнение межатомных потенциалов» на 57-й Научной конференции МФТИ;

Фиданян К.С., Стегайлов В.В., тезисы доклада «Диффузия вакансий в γ -уране и особенности зависимости её скорости от температуры» приняты на 58-ю Научную конференцию МФТИ.

Выступления:

Выступление на Научной конференции МФТИ-57 с докладом «Барьеры миграции дефектов в γ -уране: сравнение межатомных потенциалов».