



Dedicated to the memory of Ulian Gaiikovich Pirumov

**PROCEEDINGS
OF THE XIX INTERNATIONAL CONFERENCE
ON COMPUTATIONAL MECHANICS
AND MODERN APPLIED SOFTWARE SYSTEMS**



CMMASS'2015

**24–31 May, 2015
Alushta, Crimea**



преимущественно вдоль плоскости сопряжения, полученных после прохождения вращающегося инструмента. Использование инструмента конической формы с теми же параметрами нагружения V и ω как и для цилиндрического инструмента, а также наложением осциллирующего воздействия приводит к увеличению числа возникающих дефектов структуры.

1. *Mishra R. S., Mahoney M. W.* Friction stir welding and processing. — ASM International, 2007. — 352 p.
2. *Mishin Y., Mehl M. J., Papaconstantopoulos D. A., Voter A. F., Kress J. D.* Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev. B. — 2001. — V. 63. — P. 224106.

ВЛИЯНИЕ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ НА ЗАРОЖДЕНИЕ И ПОДВИЖНОСТЬ КРАЕВЫХ ДИСЛОКАЦИЙ*

А. В. Корчуганов¹, К. П. Зольников^{1,2}, Д. С. Крыжевич^{1,2}, В. М. Чернов³

¹ИФПМ СО РАН, Томск, Россия; ²ТГУ, Томск, Россия;
³АО «ВНИИНМ» им. акад. А. А. Бочвара, Москва, Россия

Изучение механического отклика металлов, подверженных радиационному воздействию является важной задачей современного материаловедения. В данной работе на основе компьютерного моделирования изучались особенности зарождения и развития пластической деформации в кристаллитах железа, ванадия и меди при радиационном облучении. Расчеты проводились в рамках метода молекулярной динамики. Первичные радиационные повреждения моделировались каскадами атомных смещений с энергией первично-выбитого атома до 50 кэВ. Исследуемые образцы перед генерацией в них каскадов атомных смещений упруго деформировались таким образом, чтобы их объем сохранялся. Для этого вдоль одной из осей образец растягивался, а вдоль двух других — сжимался.

Показано, что, начиная с некоторой пороговой энергии первично-выбитого атома $E_{\text{ПВА}}^{\text{пор}}$, генерация каскада атомных смещений в упруго-деформированных кристаллитах может приводить не только к генерации точечных дефектов, но и вызывать масштабные структурные перестройки, связанные с пластической деформацией образцов. Обнаружено, что в железе и ванадии эти перестройки являются результатом генерации в радиационно-поврежденной зоне двойникующих дислокаций, а в меди — дефектов упаковки, окруженных петлями частичных дислокаций. Аналогичные структурные перестройки происходят в этих образцах при механическом нагружении. Исследовано влияние температуры образцов на пороговую величину энергии первично-выбитого атома $E_{\text{ПВА}}^{\text{пор}}$. Расчеты показали, что повышение температуры от 100 до 600 К приводит к увеличению $E_{\text{ПВА}}^{\text{пор}}$. Это может быть связано с усилением интенсивности рассеяния кинетической энергии каскада на тепловых колебаниях с ростом температуры.

В работе изучено влияние радиационного облучения на подвижность краевых дислокаций в железе. Для этого в моделируемом кристаллите, содержавшем краевую дислокацию $a/2\langle 111 \rangle\{110\}$, генерировался каскад атомных смещений. Обнаружено, что воздействие каскада атомных смещений на дислокацию приводит к ее климбу в плоскости, перпендикулярной направлению скольжения. Этот про-

* Работа выполнена в рамках договора с ВНИИНМ имени академика А. А. Бочвара.

цесс связан с осаждением точечных дефектов, сформированных каскадом атомных смещений, на дислокации. Расчеты показали, что дислокация поглощает больше межузельных атомов, чем вакансий, таким образом, в ее движении преобладающим является отрицательный климб.

ПОСТРОЕНИЕ ШИРОКОДИАПАЗОННЫХ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ ГЛАДКОГО СОПРЯЖЕНИЯ МОДЕЛЕЙ САХА И ТОМАСА–ФЕРМИ*

В. В. Кузенов, С. В. Рыжков, В. В. Шумаев

МГТУ им. Н. Э. Баумана, Москва, Россия

Для расчета теплофизических процессов установок магнитно-инерциального синтеза [1], компактного мощного источника термоядерных нейтронов, а также экспериментальных прототипов перспективных систем и технологических устройств на основе термоядерной плазмы в магнитном поле необходимо разработать математическую модель взаимодействия мощного излучения с плазмой в условиях замагниченности мишени. Такая модель включает в себя расчет уравнений состояний вещества, электромагнитные процессы, протекающие в термоядерной плазме и области, ее окружающей, перенос широкополосного и лазерного излучения, расчет термодинамических и транспортных свойств плазмы, состоящей из смеси веществ, в широком диапазоне температур и плотностей [2–5]. Этот диапазон охватывает температуры от нескольких тысяч до ста миллионов К, плотности от характерных для газов до 100 плотностей твердого тела.

На сегодняшний день, ни одна из моделей для расчета уравнений состояния не имеет такого широкого диапазона применимости [6–8]. Такую проблему решают методом «лоскутного одеяла» — сшивки нескольких моделей. Достаточно разумным представляется следующий вариант: использовать квантово-статистическую модель Томаса–Ферми [8–11] (сравнительно простую, но достаточно точную для практики) при температурах $T > 10^5$ К, плотностях порядка плотности твердого тела и выше, а при более низких температурах и плотностях применять модель ионизационного равновесия (модель Саха) [6, 7].

В работе описана методика вычисления степени ионизации и термодинамических свойств (давление, удельная внутренняя энергия и энтропия) смеси веществ на основе численного решения уравнений Саха–Эккерта (модель Саха) и Пуассона–Томаса–Ферми (модель Томаса–Ферми). В координатах «температура–плотность» указана область сшивки результатов расчета по данным моделям, а также выявлен критерий использования каждой модели.

1. *Рыжков С. В.* Современное состояние, проблемы и перспективы термоядерных установок на основе магнитно-инерционного удержания горячей плазмы // Известия РАН. Серия Физическая. — 2014. — Т. 78, №5. — С. 647–653.
2. *Кузенов В. В., Рыжков С. В.* Математическая модель взаимодействия лазерных пучков высокой энергии импульса с плазменной мишенью, находящейся в затравочном магнитном поле // Препринт ИПМех РАН. М.: Институт Проблем Механики им. А. Ю. Ишлинского РАН, 2010. №942. — 57 с.

*Результаты исследования были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России №13.79.2014/К.