

М.С. Кондря, О. Р. Гохман

Ізохронний відпал електронно-опроміненого вольфраму, моделювання за методом кластерної динаміки: 1D та 3D модель дифузії міжвузельного атому

Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського, вул. Старопортофранківська, 26,
м. Одеса, 65020, Україна, mariana.kondrea@gmail.com, alexander.gokhman@gmail.com

Еволюція мікроструктури вольфраму під впливом електронного опромінення та пост-опроміненого відпалу була змодельована з використанням мультимасштабного підходу, який базується на використанні методу кластерної динаміки. Розглядається кінетика кластерів вакансії, міжвузельних атомів та атомів вуглецю. Проводиться моделювання формування дефектної структури вольфраму без вуглецю і вольфраму з вуглецем під дією пост-опроміненого ізохронного відпалу на його I і II стадіях. Вакансійні кластери з розміром до чотирьох вакансій, міжвузельні атоми та атоми вуглецю розглядаються як рухомі об'єкти. Вибір у дослідженні значень коефіцієнтів дифузії, енергії формування дефектів, енергії їх зв'язків ґрунтується на експериментальних даних або результатах розрахунків ab-initio. Деякі параметри додатково коректуються з метою досягнення кращої згоди даних моделювання та даних вимірювання електричного опору при ізохронному відпалі. Розглядаються моделі з припущенням про різну вимірність дифузії міжвузельного атому. Показано перевагу моделі з припущенням про 1D дифузію міжвузельного атому.

Ключові слова: кластерна динаміка, електронне опромінення, ізохронний відпал, розмірність дифузії міжвузельного атому.

Стаття поступила до редакції 18.01.2018; прийнята до друку 05.03.2018.

Особлива увага при цьому приділяється дослідженню впливу вуглецю.

Вступ

Вольфрам є одним з матеріалів, призначених для виготовлення важливих компонентів термоядерних реакторів із-за його високої температури плавлення та високого питомого опору. У багатьох дослідженнях вивчалися процеси відновлення ушкодженого вольфраму за рахунок ізохронного відпалу. Залишковий електричний опір використовується, зазвичай, для ідентифікації температур і енергій активації різних стадій відпалу. У цій роботі ми використаємо доступну інформацію з експерименту та чисельного моделювання щоб з'ясувати розмірність дифузії міжвузельного атому у вольфрамі. Наступний прогрес може бути досягнутий за допомогою кластерної динаміки (КД) або об'єктного кінетичного моделювання методом Монте-Карло. У нашому дослідженні КД застосовується для симуляції кінетики точкових дефектів у відпаленому пост-опроміненому вольфрамі після електронного опромінення.

I. Розрахункова модель та її параметризація

Запропонована модель середнього поля для дослідження електронно-опроміненого та пост-опроміненого відпалу чистого вольфраму та вольфраму з вуглецем. Оскільки відстань між точковими дефектами, як очікується, буде набагато більшим, ніж розмір релаксаційного об'єму точкових дефектів, корельована рекомбінація не розглядається в нашій моделі. Окрім вакансії, поодинокі власні міжвузельні атоми, а також вакансійні кластери (VC) з розміром до чотирьох розглядаються в якості рухомих об'єктів [1]. За даними електронної мікроскопії [2] та кінетичного моделювання методом Монте-Карло [2,3], міжвузельні атоми у вольфрамі здійснюють 1D-міграцію, тоді як вільні вакансії та VC здійснюють 3D-міграцію. Для

Таблиця 1

Параметри вольфраму, який легований вуглецем

Параметр	Символ	Значення	Посилання
Параметр решітки	a_0	3,1652 °А	[5]
Густина дислокації	r_d	10^{12} m^{-2}	[6]
Розмір зерна	d	50µm	[5]
Вектор Бюргерсу	b	2,74 °А	[5]
Коефіцієнт захвату вакансії (міжвузельного атому дислокаційною мережею)	$Z_v (Z_i)$	1(1.2)	[4]
Радіус рекомбінації для vacancy-SIA, carbon-SIA, вуглецева вакансія (вакансія-вуглець) -вакансія, (вакансія - вуглець) – вуглець	r_{rec}	4,65°А	[4,7]
Передекспоненційний фактор міжвузельного атому, вакансії, V_2, V_3, V_4	$D_{i0}, D_{v0}, D_{2v0}, D_{3v0}, D_{4v0}$	$2*10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$	Припускається
Енергія міграції вакансії	E_{mv}	1,5eV	[8]
Енергія міграції V_2	E_{m2v}	1,6eV	Припускається
Енергія міграції V_3	E_{m3v}	1,7eV	Припускається
Енергія міграції V_4	E_{m4v}	1,8eV	Припускається
Енергія міграції міжвузельного атому	E_{mi}	0,013eV	[9]
Енергія формування міжвузельного атому	E_{fi}	9,466eV	[7]
Передекспоненційний фактор вуглецю	D_{C0}	$2*10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$	[10-14]
Енергія міграції вуглецю у вольфрамі	E_{cm}	1,7eV	[10-14]
Питома поверхнева енергія	γ	2,275 Дж/м ²	За оцінкою
Енергія зв'язку міжвузельних атомів	E_{bi}	2,0 eV	Припускається
Енергія зв'язку міжвузельного атому-вуглецю	E_{bic}	1,15eV	Припускається
Енергія зв'язку міжвузельного атому-вакансії	E_{bvc}	2,3eV	Припускається
Енергія зв'язку комплексу (вакансія-вуглець) –вакансія	E_{bvcv}	2,3eV	Припускається
Енергія зв'язку комплексу (вакансія-вуглець) –вуглець	E_{bvcv}	2,3eV	Припускається

визначення ефекту розмірності дифузії міжвузельного атому модель КД для ОЦК залізу з домішками [4] модифікується до вольфраму, легovanого вуглецем. Основний набір параметрів, які використовуються у нашому дослідженні, наведено в таблиці 1.

Для порівняння наведемо деякі розрахункові літературні дані: $E_{bi} = 2,12\text{eV}$ [16]; $E_{bvc} = 1,93\text{ eV}$ [14]; $E_{bvc} = 2,0\text{eV}$ [16]; $E_{bvc} = 2,39\text{ eV}$ [17], $E_{bic} = 0,62\text{ eV}$ [16], $E_{bic} = 0,82\text{eV}$ [18].

Значення питомої поверхневої енергії, γ , приймається 3,119 Дж/м², що знаходиться між розрахованими значеннями [15]: $\gamma = 2,275\text{ Дж/м}^2$ для

кристалграфічної площини (100) та 3,221 Дж/м² для кристалграфічної площини (110). Для того, щоб отримати найкращу згоду між даними моделювання та експериментальними даними [21], енергія міграції міжвузельного атому розглядається як параметр підгонки у нашому дослідженні.

II. Майстер- рівняння моделювання методом КД

Майстер- рівняння як для електронного опромінення і пост-опроміненового відпалу

вольфраму має вигляд системи звичайних диференціальних рівнянь для концентрацій вакансій,

міжвузлій і вуглець - точкових дефектних комплексів:

$$\begin{aligned} \frac{dC_{1v(i)}}{dt} = & G_{dpa} - \frac{4p r_{rec} (D_v + D_i) C_{1v} C_{1i}}{\Omega_w} - \frac{4p r_{rec} (D_c + D_i) C_c C_{1v(i)}}{\Omega_w} \\ & - r_d Z_v \left(1 + \frac{6 (r_d Z_v)^{-0.5}}{d} \right) D_{v(i)} (C_{1v(i)} - C_{1v(i)}^e) - 4 b_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} + 4 a_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} b_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv} \\ & + \sum_{n=3} a_{mv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + b_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} b_{ni(v)}^{v(i)} C_{ni(v)} \\ & - \frac{4p r_{rec} (D_c + D_{v(i)})}{\Omega_w} \cdot \left(C_c C_{1v(i)} - (C_c + C_{v(i)}) \exp \left(- \frac{E_{bcv(i)}}{k_B T} \right) \right) - \\ & k_v \cdot \frac{4p r_{rec} D_v C_{1v} C_{vc}}{\Omega_w} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bcv}}{k_B T} \right) \right) \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{dC_{2v(i)}}{dt} = 2b_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v} - 2a_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - b_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} + a_{3v(i)}^{v(i)} C_{3v} - b_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v} + b_{3v(i)}^{i(v)} C_{3v(i)} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{nv(i)}}{dt} = & b_{(n-1)v(i)}^{v(i)} C_{(n-1)v(i)} + (b_{(n+1)v(i)}^{i(v)} + a_{(n+1)v(i)}^{v(i)}) C_{(n+1)v(i)} \\ & - (b_{nv(i)}^{v(i)} + b_{nv(i)}^{i(v)} + a_{nv(i)}^{v(i)}) C_{nv(i)} \quad \text{for } n > 2 \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{dC_{vcc}}{dt} = \frac{4p r_{rec} D_c}{\Omega_w} \cdot C_c \cdot C_{vc} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bcc}}{k_B T} \right) \right) \quad (4)$$

$$\frac{dC_{vcv}}{dt} = \frac{4p r_{rec} D_v}{\Omega_w} \cdot C_v \cdot C_{vc} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bcv}}{k_B T} \right) \right) \quad (5)$$

$$\frac{4p r_{rec} (D_c + D_{v(i)})}{\Omega_w} \cdot \left(C_c C_{1v(i)} - (C_c + C_{v(i)}) \exp \left(- \frac{E_{bcv(i)}}{k_B T} \right) \right) -$$

$$\frac{dC_{vc}}{dt} = \frac{4p r_{rec} D_v C_{1v} C_{vc}}{\Omega_w} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bcv}}{k_B T} \right) \right) \quad (6)$$

$$\frac{4p r_{rec} (D_c + D_i)}{\Omega_w} \cdot \left(C_c C_i - (C_c + C_i) \exp \left(- \frac{E_{bic}}{k_B T} \right) \right) -$$

$$\frac{dC_{ic}}{dt} = \frac{4p r_{rec} D_c}{\Omega_w} \cdot C_c \cdot C_{vc} \left(1 - \exp \left(- \frac{E_{bcc}}{k_B T} \right) \right) \quad (7)$$

$$\frac{dC_{ic}}{dt} = b_{ic} C_i - a_{ic} C_{ic} \quad (8)$$

Тут G_{dpa} дорівнює відношенню дози опромінення (в дра) до часу опромінення для випадку опромінення електронів і нуля для випадку пост-опроміненого відпалу, $D_v(D_i) = D_{v(i)0} \cdot \exp \left(- \frac{E_{mv(i)}}{k_B T} \right)$ - коефіцієнт дифузії вільної вакансії (міжвузельного атому), $\Omega_w = \frac{a_0^3}{2}$ - атомний об'єм вольфраму, $C_{1v(i)}$ - концентрація вільних вакансій (міжвузельних

атомів), $C_{1v(i)e}$ - термічна рівноважна концентрація вакансій (міжвузельних атомів), C_{mv} - концентрація VC, які містить n вакансій, C_{ni} - концентрація кластерів міжвузлій (SIAC), що містять n міжвузельних атомів, C_{vc} та C_{ic} - концентрація пар: вакансія-вуглець та міжвузельний атом-вуглець, C_{vcc} та C_{vcv} - концентрація комплексів: (вакансія-вуглець)-вуглець та (вакансія-вуглець)-вакансія; $b_{nv(i)}^{v(i)}$ і $(a_{mv(i)}^{v(i)})$ - коефіцієнти абсорбції і коефіцієнт емісії V_1, V_2, V_3, V_4 (міжвузельного атому) з VC (SIAC), які

розраховуються аналогічно [3] та [4] для припущення щодо 1D та 3D дифузії міжвузельного атому.

1D модель:

$$b_{nv}^v = \frac{4p(r_{nv} + r_{kv})D_v C_{1v}}{\Omega} \quad (9)$$

- коефіцієнт абсорбції вакансії кластерами V_2, V_3, V_4 та VC;

$$b_{nv}^i = \frac{2D_i C_{1i} (p(r_{nv} + r_{li}))^2 C_{nv}}{\Omega} \quad (10)$$

- коефіцієнт абсорбції міжвузельних атомів кластерами VC;

$$b_{ni}^v = \frac{2p(r_{ni} + r_{1v})D_v C_{1v}}{\Omega} \quad (11)$$

- коефіцієнт абсорбції вакансії кластерами V_2, V_3, V_4 та SIAC;

$$b_{ni}^i = \frac{2D_i C_{1i} (p(r_{ni} + r_{li}))^2 C_{ni}}{\Omega} \quad (12)$$

- коефіцієнт абсорбції міжвузельних атомів SIAC;

$$b_{ic} = \frac{2(p(r_i + r_c))^2 (D_i + D_c) C_c}{\Omega} \quad (13)$$

Тут $r_{nv(i)}$ - радіус VC (SIAC) розміром n , r_c - радіус атома вуглецю.

3D model:

$$b_{nv(i)}^{v(i)} = \frac{4p(r_{nv} + r_{kv(i)})D_{v(i)} C_{1v(i)}}{\Omega} \quad (14)$$

- коефіцієнт абсорбції вакансії, V_2, V_3, V_4 (SIA) та VC;

$$b_{nv(i)}^{v(i)} = \frac{2p(r_{ni} + r_{kv(i)})D_{v(i)} C_{1v(i)}}{\Omega} \quad (15)$$

- коефіцієнт приседнання вакансії, кластерами V_2, V_3, V_4 (міжвузельного атому) та SIAC;

$$b_{ic} = \frac{4p(r_i + r_c)(D_i + D_c) C_c}{\Omega} \quad (16)$$

$$a_{mv(i)}^{v(i)} = b_{m-1v(i)}^{v(i)} \exp\left(-\frac{E_b}{k_B T}\right) \quad (17)$$

- емісія з кластеру.

Система рівнянь (1-17) описує:

- (1) генерацію вакансії та міжвузельного атому;
- (2) рекомбінацію вакансії – міжвузельного атому;
- (3) абсорбцію вакансії (міжвузельного атому) мережею дислокацій;
- (4) абсорбцію вакансії (міжвузельного атому) вуглецем;
- (5) абсорбцію вакансії (міжвузельного атому) VC та SIAC;
- (6) емісію вакансії та міжвузельного атому з VC та SIAC, відповідно;
- (7) абсорбцію (емісію) вакансійного кластеру з двома, трьома та чотирма вакансіями з VC;
- (8) абсорбцію (емісію) вуглецю або вакансії з вакансії-вуглецевого комплексу.

III. Моделювання методом КД

Оскільки еволюція системи точкових дефектів у пост-опроміненому відпаленому вольфрамі є сукупністю кінетичних процесів з різними характеристичними часами, інтегрування системи рівнянь (1-17) є типовою проблемою розв'язання системи жорстких звичайних диференціальних рівнянь. Жорстке рівняння - це диференціальне рівняння, для якого класичні чисельні методи чисельно нестійкі, якщо тільки розмір кроку не є надзвичайно малим. Комп'ютерний код було взято з пакету підпрограм FORTRAN (LSODE), де використовується розв'язувач Livermore для звичайних диференціальних рівнянь [19] на основі методу зворотного диференціювання [20]. Відповідно до [21], доза опромінення електронів, час опромінювання та температура опромінення приймаються 0,0001 дпа, 43200 секунд та 5 K; температурний крок ізохронного відпалу - 5 K, час відпалу на кожній стадії - 300 секунд при температурі відпалу до 450 K та 600 секунд при температурі відпалу вище 450 K. Початкова концентрації вільних атомів вуглецю у вольфрамі була взята 100 арпм. Для порівняння результатів КД з експериментальними даними [21] було використано співвідношення [21,22]:

$$100\% \cdot \frac{(r - r_0)/r_0}{\ln T - \ln T_0} = 100\% \cdot \frac{(n - n_0)/n_0}{\ln T - \ln T_0} \quad (18)$$

Тут r і r_0 - питомий електричний опір для заданої температури T та залишковий опір відповідно; n і n_0 - загальна кількість пар Френкеля при температурах T та T_0 .

Модель, яка передбачає 1D міграцію міжвузельного атому.

Було виявлено, що електронне опромінення 0,0001 дпа протягом 43200 секунд при температурі 5 K призводить до утворення пар Френкеля з концентрацією близько 100 арпм у чистому вольфрамі та вольфрамі, легovanому вуглецем. Значення E_{mi} 0,125eV забезпечувало найкращу згоду моделювання КД та експериментальних даних [21]. Розраховані температурні залежності концентрації вільних міжвузлей, вільних вакансій, вільних атомів вуглецю, VC, SIAC, комплексів вакансія-вуглець і (вакансія-вуглець)-вакансія у пост-опроміненому відпаленому вольфрамі представлені на рис. (1-4). Концентрація міжвузельних атомів зменшується з 100 арпм до нуля завдяки відпалу в діапазоні температур (55; 105) K (рис.1). Концентрація вільних вакансій (C_{v1}) та вільних атомів вуглецю (C_c) становить приблизно 100 арпм в діапазоні температур (5; 450) K. Підвищення температури відпалу в діапазоні (450; 500) K призводить до незначного зменшення концентрації C_{v1} та C_c (рис. 2). VC та комплекси вакансія-вуглець та (вакансія-вуглець)-вакансія починають формуватися в зазначеному температурному діапазоні (рис. 3).

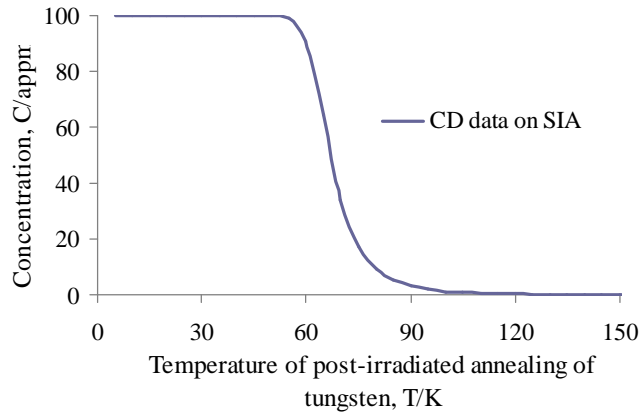


Рис. 1. Температурна залежність концентрації вільних міжзельних атомів у пост-опроміненному відпаленому вольфрамі за результатами КД для моделі з 1D дифузією міжзельного атому.

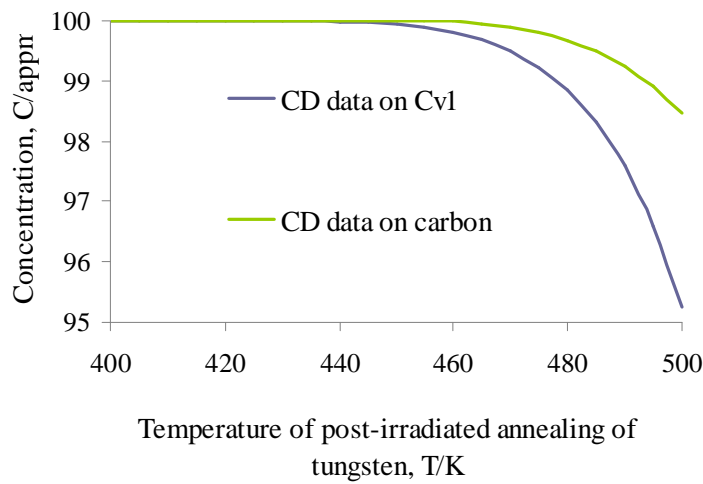


Рис. 2. Температурна залежність концентрації вільних вакансій та вільних атомів вуглецю атому у пост-опроміненному відпаленому вольфрамі за результатами КД для моделі з 1D дифузією міжзельного атому.

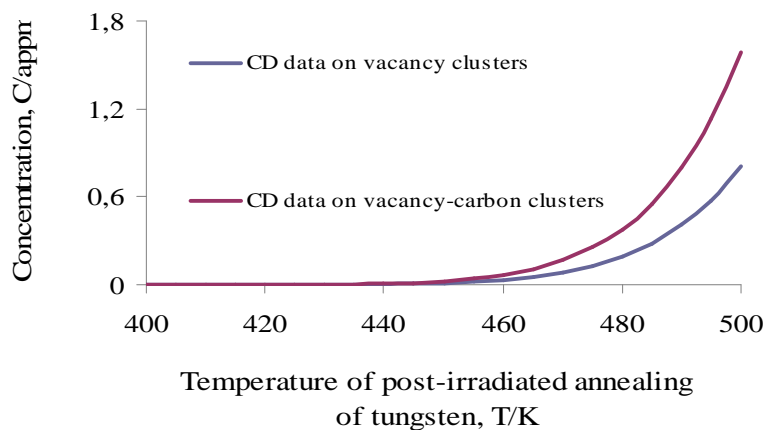


Рис. 3. Температурна залежність концентрації VC (C_{vc}) та вакансія-вуглець пар (C_{vc}) у пост-опроміненному відпаленому вольфрамі за результатами КД для моделі з 1D дифузією міжзельного атому.

Диференціальні криві відновлення ізохронної резистивності як для чистого вольфраму, так і вольфраму, який леговано вуглецьом, представлені на рис.5. Спостерігається повне узгодження розрахункового та експериментального положення та

амплітуди відновлення піку в діапазоні температур від 5 до 100 K (етап I). Певна згода експериментального та розрахункового спектру відновлення опору спостерігається наприкінці II стадії пост-опроміненого відпалу (100; 500) K.

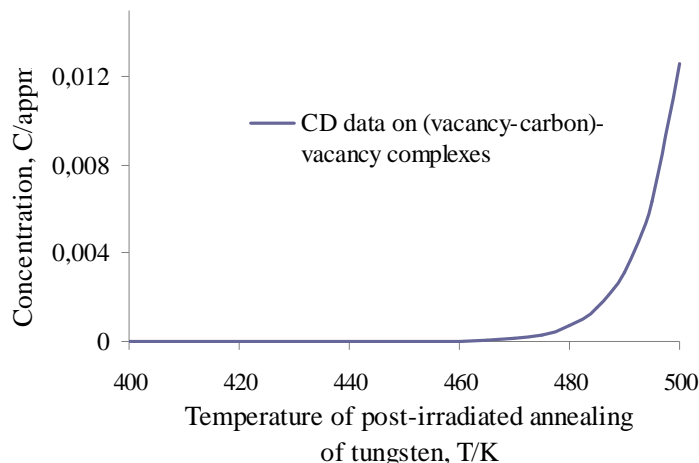


Рис. 4. Температурна залежність концентрації (вакансії-вуглецю) - вакансійних комплексів у пост-опроміненні відпаленому вольфрамі за результатами КД для моделі з 1D дифузією міжвузельного атому.

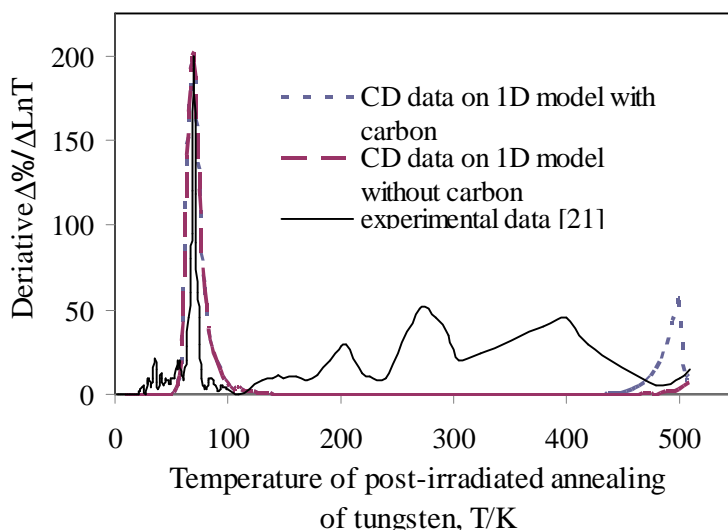


Рис. 5. Диференціальні криві відновлення ізохронної резистивності як для чистого вольфраму, так і вольфраму, який леговано вуглецьом за результатами КД для моделі з 1D дифузією міжвузельного атому.

Модель, яка передбачає 3D міграцію міжвузельного атому.

Як і для моделі 1D дифузії міжвузельного атому, було встановлено, що електронне опромінення з дозою 0,0001 дпа протягом 43200 секунд при температурі 5 K призводить до утворення пар Френкеля з концентрацією близько 100 аppm як у чистому вольфрамі, так і в вольфрамі, легованим вуглецем. Значення E_{mi} 0,163eV забезпечило задовільний збіг експериментального [21] та модельного першого піку відновлення. На рис. (6,7) наведені температурні залежності концентрації вільних вакансій, вільних міжвузельних атомів, VC та SIAC, а також вільних атомів вуглецю та пар міжвузельний атом– вуглець у пост-опроміненому вольфрамі, який леговано вуглецем.

Для температурного інтервалу ізохронного відпалення від 4,2 до 100 K (етап I пост-опроміненого відпалу вольфраму[21])

спостерігається:

1) зменшення концентрації вільних вакансій до значення близько 29 аppm (57 аppm) для вольфраму (вольфраму з вуглецем) та вільних міжвузельних атомів до нуля у вольфрамі (вольфрамі з вуглецем), утворення кластерів SIAC з концентрацією 21 аppm (10,6 аppm) у вольфрамі (вольфрамі з вуглецем), відсутність VC у вольфрамі (вольфрамі з вуглецем) в інтервалі температур від 55 до 100 K;

2) утворення комплексів вуглецю з концентрацією близько 43 аppm і зменшення вільних атомів вуглецю до значення 57 аppm у вольфрамі з вуглецем наприкінці першої стадії;

3) відсутність утворення комплексів вакансія-вуглець, (вакансія-вуглець) - вакансія та (вакансія-вуглець) - вуглець.

Для температурного інтервалу ізохронного відпалу від 100 до 500 K (етап II пост-опроміненневого відпалу вольфраму [21])

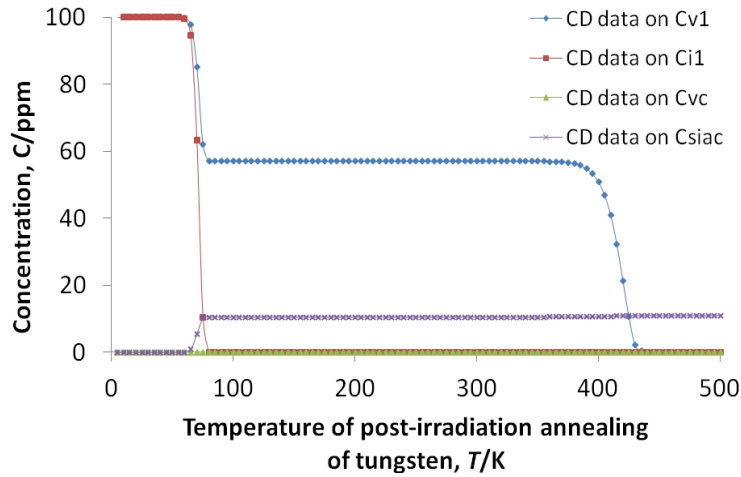


Рис. 6. Температурна залежність концентрації вільних вакансій (C_{v1}), вільних міжвузельних атомів (C_{i1}), VC (C_{vc}) і кластерів міжвузельних атомів (C_{siac}) у пост- опроміненному відпаленому вольфрамі, легованого до 100 аppm відповідно до моделі з 3D дифузією міжвузельних атомів.

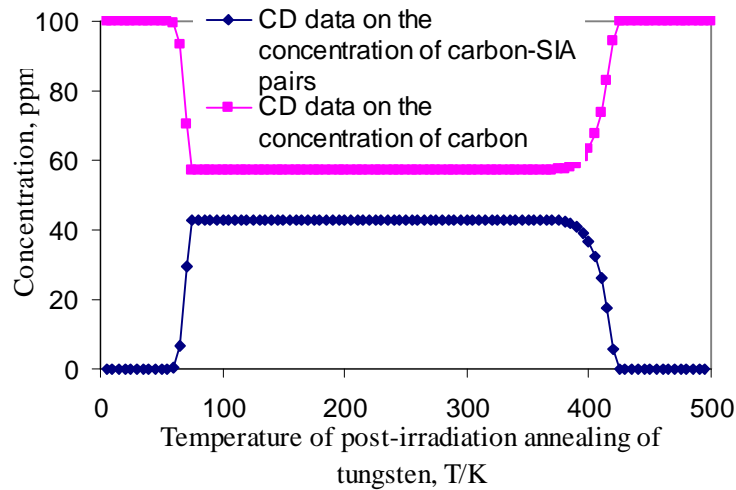


Рис. 7. Температурна залежність концентрації пари міжвузельний атом-вуглець та вуглецю у пост-опроміненному відпаленому вольфрамі, легованого вуглецем до 100 аppm. відповідно до моделі з 3D дифузією міжвузельного атому.

спостерігається:

1) зменшення концентрації вільних вакансій до нуля, відсутність суттєвих змін концентрації вільних міжвузельних атомів, утворення комплексу (вуглець-вакансія) - вуглець в діапазоні температур від 360 до 500 K;

2) зменшення концентрації пари (міжвузельний атом – атом вуглецю) до нуля, збільшення концентрації атомів вуглецю до 100 аppm у вольфрамі з вуглецем в діапазоні температур від 360 до 500 K;

3) незначна зміна концентрації точкових дефектів у чистому вольфрамі;

4) незначна концентрація пари вакансія-вуглець та комплексів (вакансія-вуглець) - вакансія і (вакансія-вуглець) –вуглець.

Диференціальні криві відновлення ізохронної резистивності як для чистого вольфраму, так і вольфраму, який леговано вуглецем, представлені на рис.8.

Модель, яка передбачає 3D дифузію міжвузельних атомів, відтворює при симуляціях методом КД, положення піку експериментального відновлення на етапі I близько 70 K для вольфраму та вольфраму, легованого вуглецем, але розрахована амплітуда піку (близько 500) більше, ніж експериментальна (близько 200). Більш того, в експерименті [21] не спостерігаються розрахункові піки відновлення наприкінці II етапу.

IV. Обговорення

Положення першого експериментального піка відновлення диференціального ізохронного опіру вольфраму [21] задовільно відтворюється моделюванням методом КД за обома моделями з 1D та 3D дифузією міжвузельного атому. 1D модель дифузії забезпечує повну згоду розрахункової та експериментально вимірюваної амплітуди першого

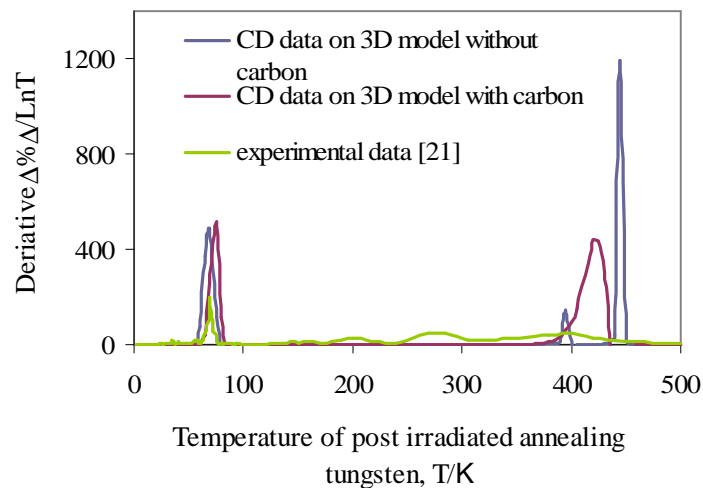


Рис. 8. Температурна задежність похідної даних відновлення опору для пост-опроміненого відпалу вольфраму та вольфраму, легованого вуглецем до 100 артм за результатами КД для моделі з 3D дифузією міжвузельного атому.

піку відновлення. 3D модель дифузії переоцінює амплітуду цього піку у два рази порівняно з експериментальним значенням. Додавання вуглецю до 100 артм не впливає на розрахункове положення та амплітуду першого піку відновлення. Подібний ефект було отримано методом Монте-Карло у [22], де досліджувалася вплив міді на спектр відновлення опромінюваних електронами сплавів Fe-Cu.

Для 1D моделі дифузії міжвузельного атому найкраща згода між результатами КД та експериментальними даними [21] досягається при значенні $E_{mi} = 0,125$ еВ, яке менше ніж $E_{mi} = 0,163$ еВ для 3D моделі дифузії, але далеко від $E_{mi} = 0,013$ еВ, яке отримано у розрахунках [9]. Отже, значення $E_{mi} = 0,125$ еВ можна вважати ефективним. Причиною розбіжності цього значення та даними [9] може бути використання моделі середнього поля при симуляціях методом КД тоді як 1D-міграція міжвузельних атомів є суттєво просторово корельованим процесом [2].

Симуляція методом КД призводить до сильного піку спектру відновлення в кінці II етапу для моделі з 3D дифузією міжвузельного атому, але цей пік не спостерігається в експерименті [21]. Навпаки, у [21] знайдено декілька невеликих піків відновлення на II етапі. Така залежність не є типовою для відновлення опромінених матеріалів, де на кожній стадії відновлення знаходиться лише один пік (див.,

наприклад, [23]). Симуляція методом КД для моделі, яка передбачає 1D дифузію міжвузельного атому, призводить до деякого збігу експерименту [21] і розрахованого спектру відновлення наприкінці другого етапу. Можна погодитися з вказівкою [21] про необхідність додаткового, більш ретельного вимірювання опору на II етапу відновлення. Також доцільним, з нашої точки зору, будуть додаткові дослідження II етапу відновлення методом спектроскопії аннігіляції позитронів.

Висновок

Порівняння результатів симуляції методом КД для моделей з 1D дифузією та 3D дифузією міжвузельного атому з експериментальними даними про ізохронний відпал вольфраму, який опромінено електронами [21], підтверджує результати моделювання методом функціональної теорії щільності [7], експериментального дослідження методом просвічуючої мікроскопії [2] та методом Монте-Карло [2,3] щодо 1D дифузії міжвузельних атомів у вольфрамі.

Кондря М. С. - аспірант кафедри фізики;
Гохман О.Р. - доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики, завідувач кафедри фізики.

- [1] [1] C. C. Fu, J. Dalla Torre, F. Willaime, J.L. Bocquet and A. Barbu, *Nature Materials* (4), 68 (2005).
- [2] T. Amino, K. Arakawa & H. Mori, , *Scientific Reports* | 6:26099 | DOI: 10.1038/srep26099 (2016).
- [3] N. Castin, A. Bakaev, G. Bonny, A. E. Sand, L. Malerba, D. Terentyev, *Journal of nuclear materials* (1), 15 (2018).
- [4] A. Gokhman, S. Pecko and V. Slugeň, *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology* (170), 745 (2015).
- [5] J. Fikar and R. Schaublin. *Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B* (267), 32.18 (2009).
- [6] G. E. Dieter. *Mechanical Metallurgy*. McGraw-Hill Book Company, London, symmetric edition (1988).
- [7] Y. G. Li, W. H. Zhou, R. H. Ning, L. F. Huang, Z. Zeng1, X. Ju, *Commun. Comput. Phys.* (11), 1547 (2012).
- [8] A. Satta, F. Willaime, and Stefano de Gironcoli, *Phys. Rev. (B 57)*, 11184 (1998).
- [9] P. M. Derlet, D. Nguyen-Manh, and S. L. Dudarev, *Phys. Rev. (B 76)*, 054107 (2007).

- [10] Withop, Arthur, PhD Thesis, The diffusion of carbon into tungsten, The University of Arizona, (1966).
- [11] L.N. Aleksandrov, Zavodskaya Laboratorly (25), 925 (1960).
- [12] Becker, J. A., E. I. Becker, and Re. G. Brandes, J. Appl. Phys. (32), 411 (1961).
- [13] C. P. Bushmer, P. H., Journal of Material Science (6), 981 (1971).
- [14] Yue-Lin Liu, Hong-Bo Zhou, Shuo Jin, Ying Zhang and Guang-Hong Lu, J. Phys.: Condens. Matter (22), 445504 (2010).
- [15] W.R. Tyson, W.A. Miller, Surface Science (62), 267 (1977).
- [16] C.S. Becquart, C. Domain, U. Sarkar, and et al., J. Nucl. Mater., (403), 75 (2010).
- [17] D. Nguyen-Manh, Advanced Materials Research (59), 253 (2009).
- [18] Xiang-Shan Kong, Xuebang Wua, Yu-Wei You, C.S. Liu, Q.F. Fang, Jun-Ling Chen, G.-N. Luo, Acta Materialia (66), 172 (2014).
- [19] LSODA is part of the ODEPACK provided by Alan C. Hindmarsh 1984 on the CASC server of the Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551, USA.
- [20] Gear,,: Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1971.
- [21] H.H. Neely, D.W. Keeper and A. Sosin, Phys. stat. sol. (28), 675 (1968)

M. Kondria, A. Gokhman

Isochronal Annealing of Electron-Irradiated Tungsten Modelled by CD Method: 1D and 3D Model of SIA Diffusivity

*Department of Physics, South Ukrainian National Pedagogical University, Odesa-65020, Ukraine,
marianna.kondrea@gmail.com, alexander.gokhman@gmail.com*

The evolution of the microstructure of tungsten under electron irradiation and post-irradiation annealing has been modelled using a multiscale approach based on Cluster Dynamics simulations. In these simulations, both self-interstitials atoms (SIA) and vacancies, carbon atoms isolated or in clusters, are considered. Isochronal annealing has been simulated in carbon free tungsten and tungsten with carbon, focusing on the recovery stages I and II. The carbon atom, single SIA, single vacancy and vacancy clusters with sizes up to four are treated as the mobile pieces. Their diffusivities as well as the energy formation and binding energies are based on the experimental data and ab initio predictions and some of these parameters have been slightly adjusted, without modifying the interaction character, on isochronal annealing experimental data. The both models with assumption on 1D as well as 3D dimensionality of diffusivity of SIA are treated. The advantage of the model with 1D diffusivity of SIA is found.

Keywords: cluster dynamics, electron irradiation, isochronal annealing, dimensional of SIA diffusivity.