

**Диффузия вакансий в  $\gamma$ -уране  
и особенности зависимости её скорости от температуры**

*К.С. Фиданян, В.В. Стегайлов*

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Объединенный институт высоких температур РАН

Перемещение дефектов в кристаллической решетке урана представляет интерес с точки зрения радиационного материаловедения, поскольку изменение механических свойств материалов связано с накоплением в решетке дефектов.

Классической моделью температурной зависимости коэффициента диффузии  $D$  является уравнение Аррениуса:  $D = D_0 \cdot \exp[-E_a / k_b T]$ , где  $E_a$  – энергетический барьер скачка,  $D_0$  – предэкспоненциальный фактор,  $k_b$  — константа Больцмана<sup>[1]</sup>. Однако в последнее время появляется всё больше свидетельств того, что для описания дефектов закон Аррениуса имеет ограниченную область применимости. При высоких температурах ангармоничность межатомных взаимодействий в кристалле вносит существенный вклад в энергию образования и энергию миграции дефектов<sup>[2]</sup>. В литературе также обсуждается влияние температуры на объем образования вакансий и вклад этого фактора в их подвижность<sup>[3]</sup>.

В работе показано, что молекулярно-динамическое моделирование движения дефектов обнаруживает для ОЦК-урана отклонение от аррениусовского закона. Обсуждается зависимость энергии миграции от температуры, методы оценки предэкспоненциального фактора, а также корректность экстраполяции этих величин из низкотемпературного диапазона на высокие температуры.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-08-01428а.

**Литература:**

1. Vineyard G.H., Frequency factors and isotope effects in solid state rate processes. — J. Phys. Chem. Solid, Vol.3, 1957. pp.121-127.
2. Glensk A., Grabowski B. et al., Breakdown of the Arrhenius Law in Describing Vacancy Formation Energies: The Importance of Local Anharmonicity Revealed by Ab initio Thermodynamics. — Phys. Rev. X 4, 011018, 2014.
3. Valikova I.V., Nazarov A., Simulation of the features determining strain influence on diffusion fluxes in FCC and BCC metals. — In proc. conference “Thermodynamics and Transport Kinetics of Nanostructured Materials”, 2009, pp. 128-129.