

Научный семинар

ЦИФРОВИЗАЦИЯ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ТЕХНОЛОГИЙ

24 – 25 апреля 2019 г.

Заречный-Екатеринбург, Россия

Фундаментальные исследования сильно коррелированных систем и создание на их основе цифровой технологии прогнозирования поведения ядерно-активных материалов при облучении

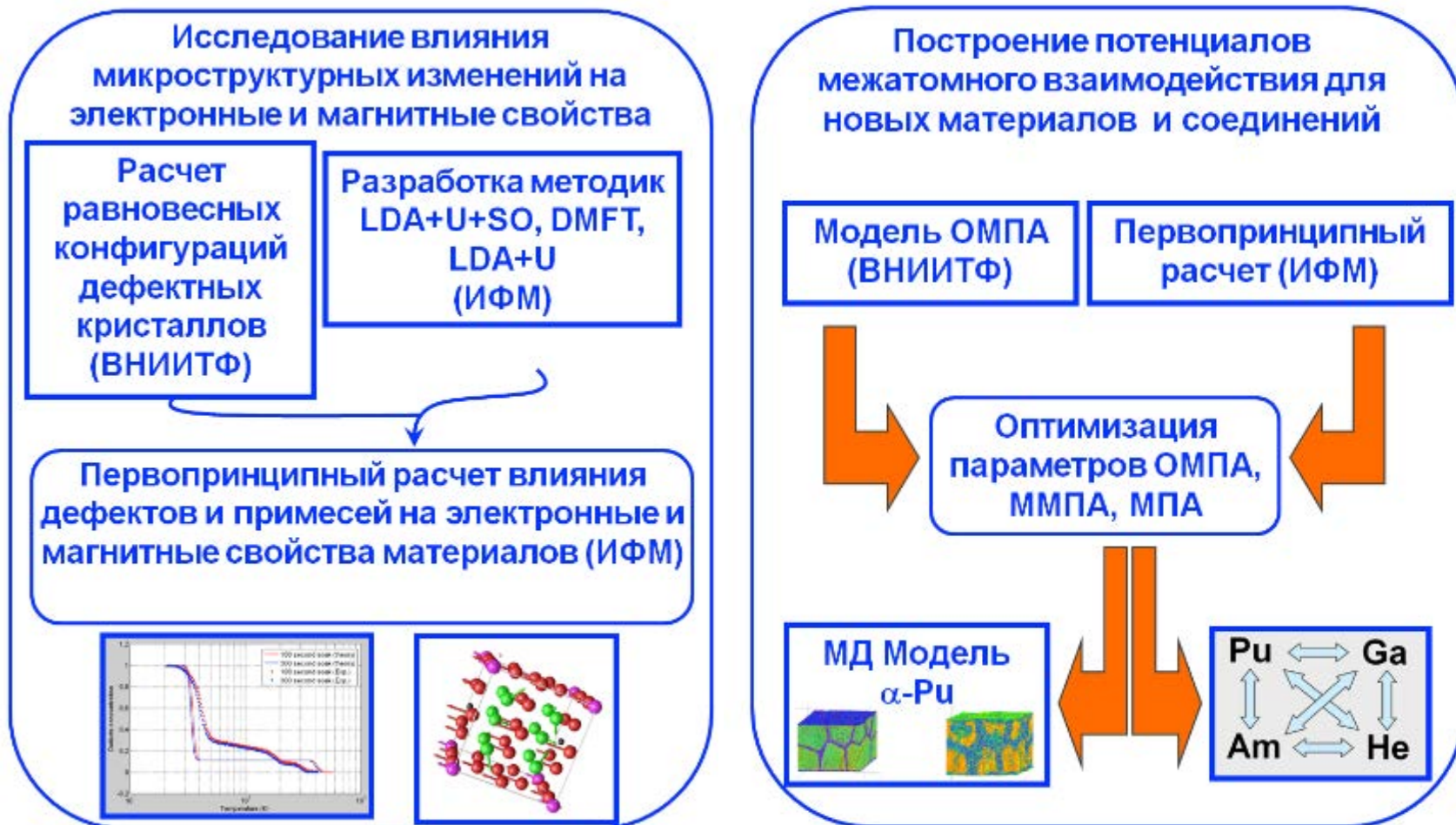
ИФМ УрО РАН (г. Екатеринбург):

Анисимов В.И., Коротин М.А., Лукоянов А.В., Оглобличев В.В., Шориков А.О.

РФЯЦ-ВНИИТФ (г. Снежинск):

Дрёмов В.В., Ионов Г.В., Караваев А.В., Самарин С.И., Сапожников Ф.А.

Разработана цифровая технология прогнозирования поведения ядерно-активных материалов при облучении на основе фундаментальных исследований сильно коррелированных материалов первопринципными квантово-механическими методами, методами молекулярной динамики и спектроскопии ядерного магнитного резонанса.



Разработка квантово-механических методов исследования свойств сильно коррелированных соединений:

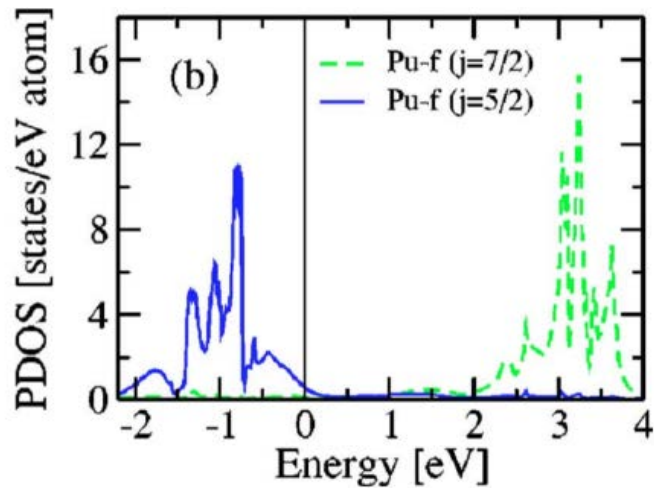
LDA+U – приближение локальной плотности с явным учетом корреляционных эффектов в рамках модели Хаббарда;

LDA+U+SO – приближение локальной плотности с явным учетом корреляционных эффектов и спин-орбитального взаимодействия;

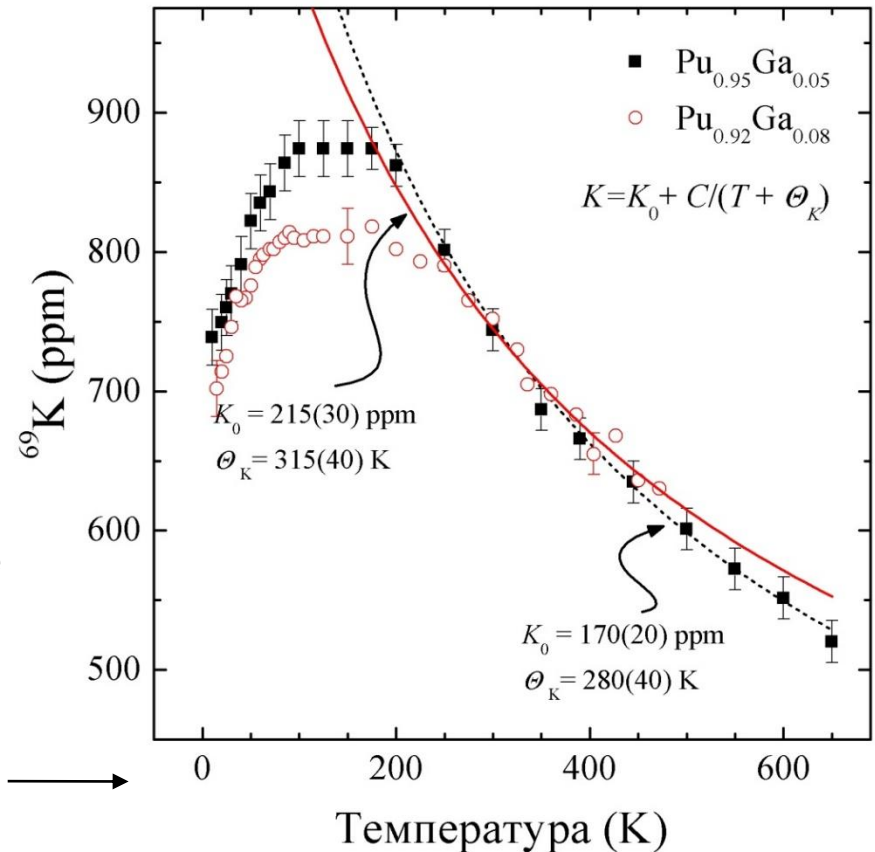
LDA+DMFT – комбинированный метод приближения локальной плотности и теории динамического среднего поля;

CPA – приближение когерентного потенциала, реализованное в рамках теорий статического и динамического среднего поля.

Теоретические и экспериментальные результаты для δ -Pu



Плотности состояний δ -Pu, рассчитанные в рамках LDA+U+SO метода.



Сдвиг линий ЯМР ^{69}Ga , ^{69}K в сплавах Pu-Ga. \longrightarrow

В расчете получено основное немагнитное состояние δ -Pu.
Результаты ЯМР подтверждают f^6 конфигурацию
и немагнитное состояние ионов плутония.

PHYSICAL REVIEW B **72**, 024458 (2005)

Magnetic state and electronic structure of the δ and α phases of metallic Pu and its compounds

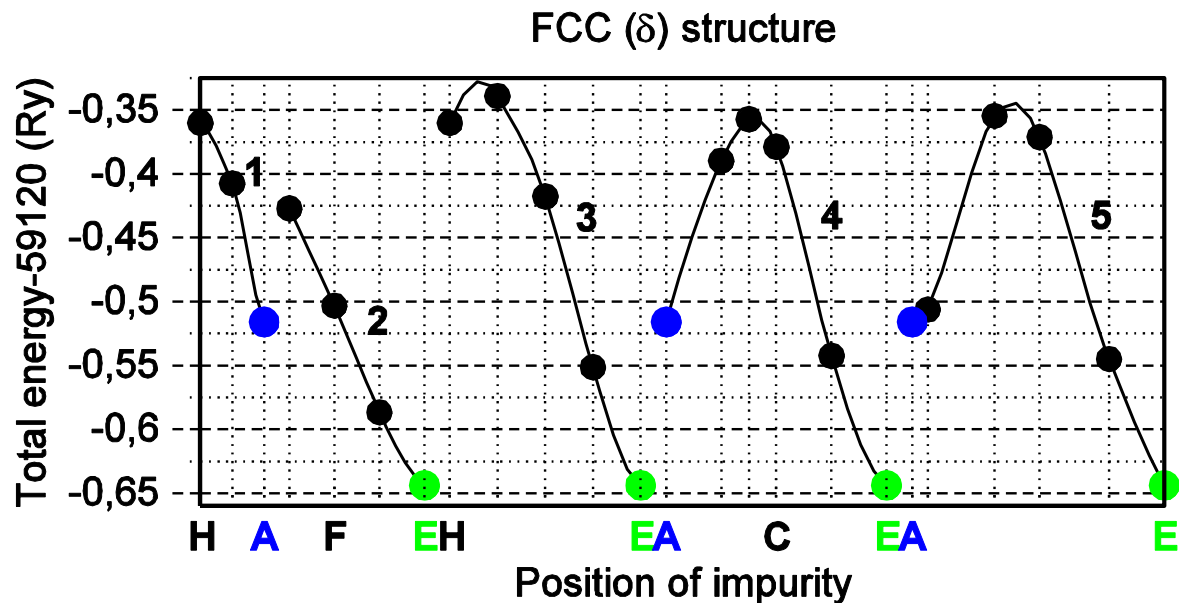
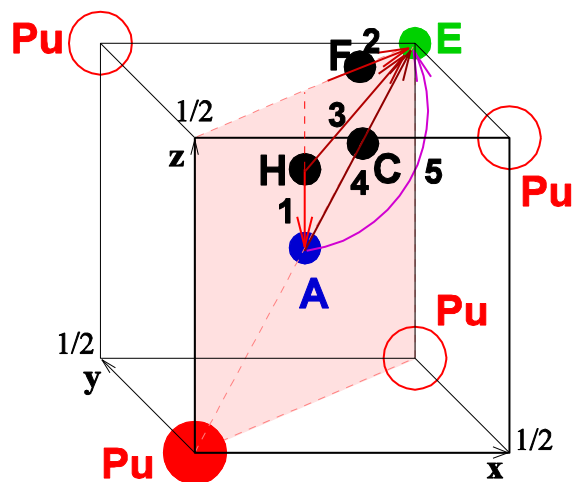
A. O. Shorikov,¹ A. V. Lukoyanov,^{1,2} M. A. Korotin,¹ and V. I. Anisimov¹

¹*Institute of Metal Physics, Russian Academy of Sciences—Ural Division, 620041 Yekaterinburg GSP-170, Russia*

²*Ural State Technical University—UPI, 620002 Yekaterinburg, Russia*

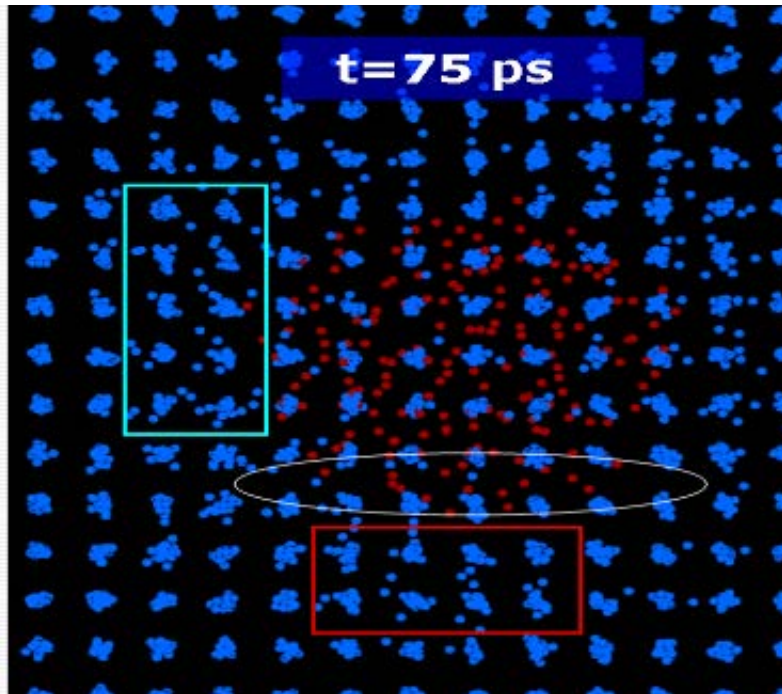
(Received 28 December 2004; revised manuscript received 18 March 2005; published 26 July 2005)

Совместные исследования ИФМ и ВНИИТФ
радиационно-состаренных материалов –
изучение деградации их свойств вследствие самооблучения
в процессе длительного хранения



Вычисленные потенциальные рельефы при диффузии примесного атома гелия (α -частицы) в различных направлениях кристаллической решётки δ -Pu, служащие исходным материалом для получения параметров межатомных потенциалов.

Совместные исследования ИФМ и ВНИИТФ – прогнозирование поведения ядерных материалов



Распространение пузырьков гелия (красный цвет) в решетке Pu (голубой цвет) за время 75 пс, смоделированное методом молекулярной динамики с потенциалами, основанными на рельефах, вычисленных в подходе функционала плотности и показанных на предыдущем слайде.

При помощи разработанной цифровой технологии получены результаты по прогнозированию процессов самооблучения материалов.

PHYSICAL REVIEW B **77**, 224306 (2008)

Atomistic simulations of helium dynamics in a plutonium lattice

Vladimir Dremov, Philipp Sapozhnikov, and Andrey Kutepov

Russian Federal Nuclear Center, Institute of Technical Physics, Snezhinsk, 456770 Chelyabinsk Region, Russia

Vladimir Anisimov, Michael Korotin, and Alexey Shorikov

Institute of Metal Physics, Yekaterinburg, Russia

Dean L. Preston and Marvin A. Zoicher*

Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico 87545, USA

(Received 24 January 2008; revised manuscript received 6 May 2008; published 30 June 2008)

Возможности разработанной цифровой технологии:

на основе результатов первопринципных методов строятся потенциалы межатомного взаимодействия, которые используются в молекулярно-динамических моделях:

- каскадов радиационных повреждений материала;
- эволюции системы первичных радиационных дефектов в материале на масштабах времени ~100 лет;
- динамики радиогенных примесей в решетке материала;
- влияния факторов старения материала на его термодинамические и механические свойства;
- влияния факторов старения материала на его статический предел текучести;
- влияния старения материала на его фазовую стабильность.

First Principles Electronic Structure Calculation and Simulation of the Evolution of Radiation Defects in Plutonium by the Density Functional Theory and the Molecular Dynamics Approach¹

V. I. Anisimov^a, V. V. Dremov^b, M. A. Korotin^a, G. N. Rykovanov^b, and V. V. Ustinov^a

^a*Institute of Metal Physics, Russian Academy of Sciences, ul. S. Kovalevskoi 18, Ekaterinburg, 620990 Russia*

^b*All-Russia Research Institute of Technical Physics, Russian Federal Nuclear Center,
Snezhinsk, Chelyabinsk Oblast, 456770 Russia*

Received April 4, 2013

Заключение

Авторским коллективом из ИФМ УрО РАН и РФЯЦ–ВНИИТФ была **создана цифровая технология** прогнозирования поведения материалов при облучении. Данная технология может быть применена к широкому кругу соединений *d*- и *f*-металлов.

Результаты работы широко применяются в теоретических и экспериментальных исследованиях свойств конструкционных и ядерно-активных материалов в условиях внешнего облучения и самооблучения при длительном хранении, проводимых в РФЯЦ–ВНИИТФ, и имеющих важное технологическое и оборонное значение.