

**Метадинамика для определения константы диффузии вакансий:
случай ОЦК-урана**

К.С. Фиданян, В.В. Стегайлов

Московский физико-технический институт (государственный университет)

Объединенный институт высоких температур РАН

Диффузия дефектов в кристаллической решетке урана представляет интерес с точки зрения радиационного материаловедения, поскольку она является важным фактором в подвижности дислокаций, оказывает влияние на набухание материала и другие свойства.

Классической моделью температурной зависимости константы скорости Γ для активационных процессов в твёрдом теле является уравнение Вайнъярда^[1]

$$\Gamma = \left(\frac{\prod_{j=1}^{3N} \tilde{v}_j}{\prod_{j=1}^{3N-1} \tilde{v}_j'} \right) \exp\left(\frac{-\Delta U}{k_B T}\right), \quad (1)$$

где $\tilde{v}_j, \tilde{v}_j'$ — нормальные моды кристалла в точке минимума потенциала и в седловой точке процесса соответственно, ΔU — потенциальный барьер процесса, k_B — константа Больцмана. Однако молекулярно-динамическое моделирование показывает отклонение диффузии вакансий от этой зависимости.

В работе предложена модель с зависимостью энергии активации диффузии вакансий от температуры, проведён расчёт этой зависимости методом метадинамики^[2] и показана ее существенная нелинейность. Обсуждаются особенности метода метадинамики, зависимость результата от выбора коллективных переменных, а также методы оценки предэкспоненциального фактора.

Исследование выполнено в ОИВТ РАН в рамках работ по контракту с корпорацией Росатом № Н.4х.44.9Б.16.1013.

Литература:

1. Vineyard G.H., Frequency factors and isotope effects in solid state rate processes. — J. Phys. Chem. Solid, Vol.3, pp.121-127, 1957.
2. Laio A., Gervasio F. L., Metadynamics: a method to simulate rare events and reconstruct the free energy in biophysics, chemistry and material science — Reports on Progress in Physics **71** 126601, 2008.