

مطالعه رفتار الاستیکی بلور زیرکونیوم خالص تحت فشار هیدروستاتیکی در فاز های مختلف از طریق محاسبات ابتدا به ساکن

INC29-1002

محمد رضا باسعادت*، محمود پیامی شبستر، سمیرا شیخی

پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، سازمان انرژی اتمی، صندوق پستی: ۱۴۳۹۵-۸۳۶، تهران-ایران
چکیده:

در راکتورهای هسته‌ای علی‌الخصوص در آلیاژ غلاف و سایر مواد، ساختاری از آلیاژهای زیرکونیومی استفاده می‌شود. زیرکونیوم به دلیل دارا بودن نقطه ذوب بالا، سطح مقطع جذب نوترون پایین، مقاومت در برابر خوردگی مناسب در آب و خواص مکانیکی به عنوان مواد ساختاری و غلاف سوخت در راکتورهای هسته‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این مطالعه به بررسی خواص الاستیکی بلور زیرکونیوم خالص در فازهای مختلف پرداخته و تاثیر حضور فشار هیدروستاتیکی را بر روی رفتار الاستیکی آن‌ها مطالعه می‌کنیم. نتایج محاسبات برای فاز α مطابقت خوبی با محاسبات تجربی و سایر محاسبات دارد. علاوه بر این، خواص الاستیکی فازهای β و ω (که بندرت داده‌هایی در ارتباط با آن‌ها وجود دارد) تحت فشار هیدروستاتیکی مختلف محاسبه شده‌است. نشان داده شده‌است که به جز ثابت الاستیک C_{44} در فاز α و ω ، تمام ثابت‌های الاستیکی، با افزایش فشار افزایش می‌یابند. این بدین معناست که امکان لغزش‌های برشی برای ساختارهای هگزاگونال زیرکونیوم با افزایش فشار کاهش یافته و برای ساختار مکعبی (فاز β) با افزایش فشار افزایش می‌یابد.

کلیدواژه‌ها: فازهای زیرکونیوم، فشار هیدروستاتیکی، خواص الاستیکی، ناهمسانگردی، پایداری

Ab initio study of elastic behavior of pure zirconium under hydrostatic pressure at different phases

M. R. Basaadat*, M. Payami Shabestar, S. Sheykhi

Physics and accelerators Research School, Nuclear Science & Technology Research Institute (NSTRI),
Atomic Energy Organization of Iran (AEOI), P.O. Box: 14395-836, Tehran, Iran.

Abstract:

Zirconium alloys are used as fuel cladding tubes and other structural materials in nuclear reactors which have high melting point, low neutron absorption cross section, corrosion resistant and proper mechanical stability. In this study, the elastic properties of different pure zirconium phases have been studied and the effect of hydrostatic pressure on the elastic behavior has been investigated. The α -phase calculation is in good accordance with experimental data and other calculations. In addition, the elastic properties of β/ω -phases, which there are rare experimental data and calculations, have been obtained under hydrostatic pressure. It has been shown that except for C_{44} in α and ω phases, all elastic constants increase with pressure. This means that shear slips is decreased for hexagonal structures of Zirconium with pressure while it is increased for cubic (β -phase) structure.

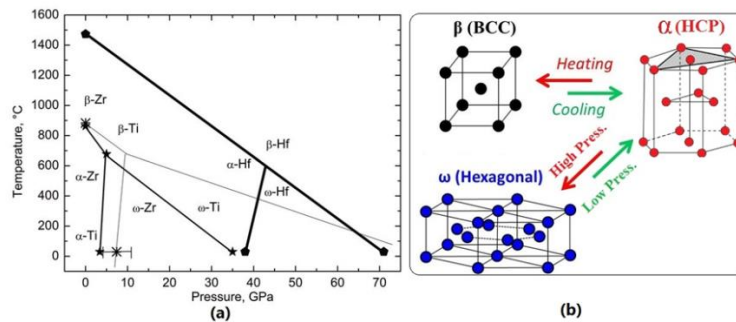
Keywords: Zirconium phases, Hydrostatic pressure, Elastic properties, Anisotropy, Stability.

۱. مقدمه:

زیرکونیوم دارای نقطه ذوب بالا، سطح مقطع جذب نوترون پایین، مقاومت در برابر خوردگی مناسب در آب و خواص مکانیکی قابل اعتماد است که موجب شده‌است به عنوان مواد ساختاری و غلاف سوخت در راکتورهای هسته‌ای مورد استفاده قرار گیرد [۱]. سه فاز برای زیرکونیوم بلوری وجود دارد: فاز با ساختار بسته شش ضلعی (HCP) در دمای کمتر از ۸۶۳ درجه سانتیگراد (α)، فاز با ساختار مکعبی مرکزی (BCC) در دمای بالاتر از ۸۶۳ درجه سانتیگراد (β) و فاز با ساختار شش ضلعی و در حضور فشار هیدرواستاتیک (ω) [۲] (شکل ۱).

مطالعات زیادی در مورد زیرکونیوم و فازهای مختلف و آلیاژهای آن‌ها وجود دارد. به عنوان مثال، تانسور سختی الاستیکی آلیاژ Zr-xNb در حضور نقیصه‌ها و اثر نقیصه‌های نقطه‌ای بر خواص مکانیکی ساختار زیرکونیوم و آلیاژ Zr-1%Nb توسط نویسندگان و همکاران با رویکردهای دینامیکی مولکولی [۳-۴] بررسی شده‌است. فیشر^۱ و همکاران مدول‌های الاستیکی تک بلور و تبدیل فاز HCP به BCC را برای فلزات واسطه گروه IV مطالعه کردند [۵]. وک^۲ و همکارانش نیز خواص مکانیکی آلیاژهای زیرکونیوم و هیدریدهای آن را محاسبه کردند [۶]. همچنین مطالعات دیگری در مورد زیرکونیوم وجود دارد [۷-۸] که بیشتر این مطالعات مربوط به فاز آلفا-زیرکونیوم است. به عبارت دیگر، مطالعات بسیار کمی در مورد فاز بتا و امگا و خواص کشسانی و مکانیکی آن وجود دارد. خواص الاستیکی را می‌توان با کنترل خواص فاز کریستالوگرافی ارتقا داد [۹]. بنابراین، خواص ماکروسکوپی مواد، به شدت به تحول ریزساختاری اتم‌ها بستگی دارد.

این مطالعه به شرح زیر است: در ابتدا، ثابت‌های شبکه و الاستیک و مدول‌های الاستیک و اندیس ناهمسانگردی زیرکونیوم محاسبه شده و نتایج با محاسبات تجربی و سایر محاسبات مبتنی بر تابعی چگالی^۳ مقایسه شده است. سپس، ثابت‌های الاستیک در فشارهای متفاوت به دست آمده‌اند و اثر فشار به دقت مورد بحث قرار گرفته است. تطابق خوبی در بخش‌هایی که داده‌های تجربی یا محاسباتی وجود دارد، دیده شد و در برخی موارد نیز، هیچ داده تجربی‌ای برای مقایسه وجود ندارد.



شکل ۱. فازهای مختلف زیرکونیوم به ازای دما و فشارهای مختلف.

۲. تئوری و جزئیات محاسباتی:

۲.۱. ثابت‌ها و مدول‌های الاستیک:

در ابتدا به محاسبه ثابت‌های الاستیک پرداخته و بر اساس نوع تقارن‌های موجود در هر کدام از فازها، از نگارش وویت و رابطه خطی بر اساس قانون هوک بین تانسور تنش و کرنش استفاده شده‌است که از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\sigma_i^\alpha = \sum_{j=1}^6 C_{ij}^\alpha \epsilon_j^\alpha \quad (1)$$

¹Fisher

²Weck

³Density Functional Theory (DFT)

که در این معادله σ ماتریس تنش، ϵ ماتریس کرنش و C ماتریس ضرایب الاستیک می‌باشد. برای ساختارهای هگزاگونال (فاز آلفا و امگا) بر اساس تقارن ۵ ثابت الاستیک مستقل ($C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}$) و برای ساختار مکعبی (فاز بتا) سه ثابت الاستیک (C_{11}, C_{12}, C_{44}) وجود دارد. همچنین برای پایداری مکانیکی ساختارها، بر اساس ثوابت الاستیکی موجود شرایط زیر باید برقرار باشد:

$$\begin{cases} C_{11} > |C_{12}|, C_{44} > 0, (C_{11} + 2C_{12})C_{33} > 2C_{13}^2 & \text{ساختار هگزاگونال} \\ C_{ii} > 0 \ (i = 1..4), C_{11} > |C_{12}|, (C_{11} + 2C_{12}) > 0 & \text{ساختار مکعبی} \end{cases} \quad (2)$$

همچنین مدول‌های حجمی، یانگ و برشی بر اساس تقریب وویت بر طبق روابط زیر بدست می‌آیند:

$$K_V = \frac{2C + 4C_{13} + C_{33}}{9}, G_V = \frac{C + 2C_{33} - 4C_{13} + 12(C_{44} + C_{66})}{30} \quad (3)$$

$$K_R = \frac{CC_{33} - 2C_{13}^2}{C + 2C_{33} - 4C_{13}}, G_R = \frac{5(CC_{33} - 2C_{13}^2)C_{44}C_{66}}{2[3K_V C_{44}C_{66} + (CC_{33} - 2C_{13}^2)(C_{44} + C_{66})]} \quad (4)$$

$$\frac{1}{E} = \frac{1}{3G} + \frac{1}{9K} \quad (5)$$

در رابطه‌های فوق K, G, E و U به ترتیب مدول حجمی، برشی، یانگ و نسبت پواسون هستند. زیروندهای V^1 و R^2 به ترتیب تقریب‌های وویت و رویس (حد بالا و پایین) کمیت‌های ذکر شده برای یک بلور چند بلوری است. بنابراین مقدار مدول‌های الاستیک ذکر شده بین حد بالا و پایین قرار خواهد گرفت و بصورت میانگین این دو کمیت به نام تقریب هیل^۳ در نظر گرفته می‌شود. همچنین در رابطه‌های ۳ و ۴، $C = C_{11} + C_{12}$ می‌باشد.

۲.۲. اندیس ناهمسانگردی:

برای محاسبه میزان ناهمسانگردی در یک ساختار از اندیس جهانی ناهمسانگردی استفاده می‌کنیم که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$A^U = 5 \left(\frac{G_V}{G_R} \right) + \left(\frac{K_V}{K_R} \right) - 6 \quad (6)$$

در رابطه ۶ مقدار بزرگتر A^U بیانگر ناهمسانگردی بیشتر ساختار می‌باشد.

۳.۲. جزئیات محاسباتی:

تمامی محاسبات انجام شده در این پژوهش با استفاده از نظریه تابعی چگالی بوده و در آن از شبه پتانسیل موج تخت (PW) موجود در بسته نرم افزاری کوانتوم اسپرسو (QE) استفاده شده است [۱۰]. همچنین در شبه پتانسیل از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) و تابعی تبادل-همبستگی پر دو-وگ^۴ استفاده شده است. ساختارها به طور کامل بهینه-سازی شده‌اند و انرژی جنبشی قطع توابع موج ۵۰، ۶۰ و ۷۰ ریدبرگ به ترتیب برای فازهای آلفا، بتا و امگا استفاده شده است. علاوه بر این، انرژی جنبشی قطع چگالی نیز ۸ برابر انرژی قطع تابع موج در نظر گرفته شده است. خواص الاستیک با استفاده از بسته نرم‌افزاری THERMO_PW [۱۱] محاسبه می‌شود. علاوه بر این، بهینه‌سازی مش‌بندی در فضای وارون و در ناحیه بریلوئن (BZ) نیز انجام شده و $23 \times 23 \times 13$ ، $30 \times 30 \times 30$ و $20 \times 20 \times 32$ نقطه مش بصورت همسانگرد در راستاهای مختلف به ترتیب برای فازهای آلفا، بتا و امگا در نظر گرفته شد. برای محاسبه ثابت‌های الاستیک، پس از بهینه‌سازی سلول و مکان‌های اتمی کرنش‌هایی به ساختار اعمال شده که دامنه تغییرات آن بین -0.0075 تا 0.0075 می‌باشد و در این حالت مکان تمامی اتم‌ها در حالت جدید بهینه‌سازی می‌شود. برای فاز آلفا

¹Voigt

²Reuss

³Hill

⁴Perdew-Wang91

تغییرات فشار هیدرواستاتیک بین ۰ تا ۱۰ گیگاپاسکال در نظر گرفته شده است. فشاری که در آن در نزدیکی دمای صفر گذار فازی $\alpha \rightarrow \beta$ رخ می‌دهد، بر اساس اطلاعات موجود در حدود ۵،۲۰ گیگاپاسکال بوده [۹] و بنابراین محدوده تغییر فشار هیدرواستاتیک برای فاز بتا ۲۱ تا ۳۰ گیگاپاسکال انتخاب شد. در نهایت، برای فاز امگا تغییر فشار هیدرواستاتیک بین ۰ تا ۲۰ گیگاپاسکال در نظر گرفته شد.

۳. نتایج و بحث:

در بخش اول به محاسبه ثوابت شبکه و الاستیک و همچنین مدول‌های الاستیک و میزان ناهمسانگردی ساختارهای زیرکونیوم می‌پردازیم و بر اساس بهینه‌سازی‌های انجام شده در ساختارهای فازهای مختلف زیرکونیوم این کمیت‌ها محاسبه شده و با نتایج حاصل از محاسبات دیگر یا داده‌های تجربی موجود در جدول ۱ لیست و مقایسه شده‌است. از جدول ۱ می‌توان ملاحظه کرد که نتایج بدست آمده در این پژوهش در تطابق خوبی با نتایج تجربی و همچنین محاسبات موجود قرار دارند. ثابت‌های الاستیک برای فاز آلفا بسیار نزدیک به نتایج تجربی بوده و در بیشترین انحراف خطایی کمتر از ۲۰٪ دارند. درباره فاز بتا، انحرافات از مقادیر تجربی دیده می‌شود که می‌تواند به دلیل این حقیقت باشد که برخلاف محاسبات انجام شده در اینجا داده‌های تجربی در دماهای بالا بدست آمده‌اند. تا جایی که می‌دانیم اندازه‌گیری از ثابت‌های الاستیک فاز امگا زیرکونیوم به صورت تجربی وجود ندارد و بنابراین اهمیت کار بر روی این فاز با توجه به کمبود اطلاعات در این فاز ضروری بنظر می‌رسد.

جدول ۱. ثابت‌های شبکه و الاستیک فازهای مختلف زیرکونیوم [بر حسب گیگا پاسکال و آنگستروم].

فاز	روش	a	c	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₃₃	C ₄₄	K	G	E	A ^U
	مطالعه حاضر	۳,۲۳۵	۵,۱۵۴	۱۴۳,۴	۶۵,۷	۶۷,۵	۱۶۵,۲	۲۵,۹	۹۴,۶	۳۴,۰	۹۱,۱	-۰,۲۸
α	DFT ^۱	۳,۲۳۶	۵,۱۶۸	۱۴۶,۷	۶۸,۵	۷۱,۰	۱۶۳,۳	۲۶,۰	۹۷,۴	۳۳,۸	۹۰,۹	-۰,۲۵
	تجربی ^۲	۳,۲۳۳	۵,۱۴۶	۱۴۳,۵	۷۲,۵	۶۵,۴	۱۶۴,۹	۳۲,۱	۹۵,۳	۳۶,۱	۹۶,۳	-۰,۱۱
	مطالعه حاضر	۳,۵۶۶		۱۴۶,۴	۱۳۳,۵			۳۶,۷	۱۳۷,۸	۱۴,۱	۴۰,۹	۴,۶
β	DFT ^۳	۳,۳۷۴		۱۶۰,۰	۱۱۶,۸			۳۷,۰	۱۳۱,۲	۲۶,۸	۷۵,۴	-۰,۳۶
	تجربی ^۴	۳,۶۲۷ ^۵		۱۰۴ ^۶	۹۳ ^۶			۳۸,۰ ^۶	۹۶,۷	۱۳,۴	۳۸,۵	۶,۱
	مطالعه حاضر	۴,۸۹۱	۳,۰۵۴	۱۷۴,۲	۷۸,۵	۵۲,۸	۲۰۵,۷	۳۳,۴	۱۰۲,۵	۴۵,۶	۱۱۹	-۰,۴۷
ω	DFT ^۸	۵,۰۵۶	۳,۱۵۰	۱۶۵,۵	۷۵,۶	۴۷,۵	۱۹۷,۸	۳۰,۶	۹۶,۷	۴۲,۸	۱۱۲	-۰,۵۶
	تجربی ^۹	۵,۰۳۹	۳,۱۵۰	-	-	-	-	-	-	-	-	-

^۱ مرجع [۲] نتایج در فشار ۲۰ گیگا پاسکال می‌باشد.

^۲ مرجع [۵] نتایج در دمای ۲۰ درجه سانتیگراد می‌باشد.

^۳ این محاسبات در دمای ۸۷۰ درجه سانتیگراد انجام شده است.

^۴ مرجع [۲].

^۵ مرجع [۱۲] نتایج در دمای ۹۱۵ درجه سانتیگراد اندازه‌گیری شده است.

^۶ مرجع [۱۳] نتایج در دمای ۹۱۵ درجه سانتیگراد اندازه‌گیری شده است.

^۷ این محاسبات در فشار صفر گیگا پاسکال می‌باشد.

^۸ مرجع [۹] نتایج در فشار صفر گیگا پاسکال می‌باشد.

^۹ مرجع [۱۴] نتایج در فشار صفر گیگا پاسکال می‌باشد.

اندیس ناهمسانگردی نیز که نشان‌دهنده میزان ناهمسانگرد بودن ساختارهاست، بجز برای فاز بتا، عددهای نزدیک به صفر را نشان می‌دهد و این نشان‌دهنده همسانگردی تقریبی بلور زیرکونیوم در ساختارهای هگزاگونال می‌باشد. شرایط پایداری (رابطه ۲) برای فازهای مختلف زیرکونیوم در محاسبات انجام شده چک شد و تمامی ساختارها از لحاظ مکانیکی پایدار هستند.

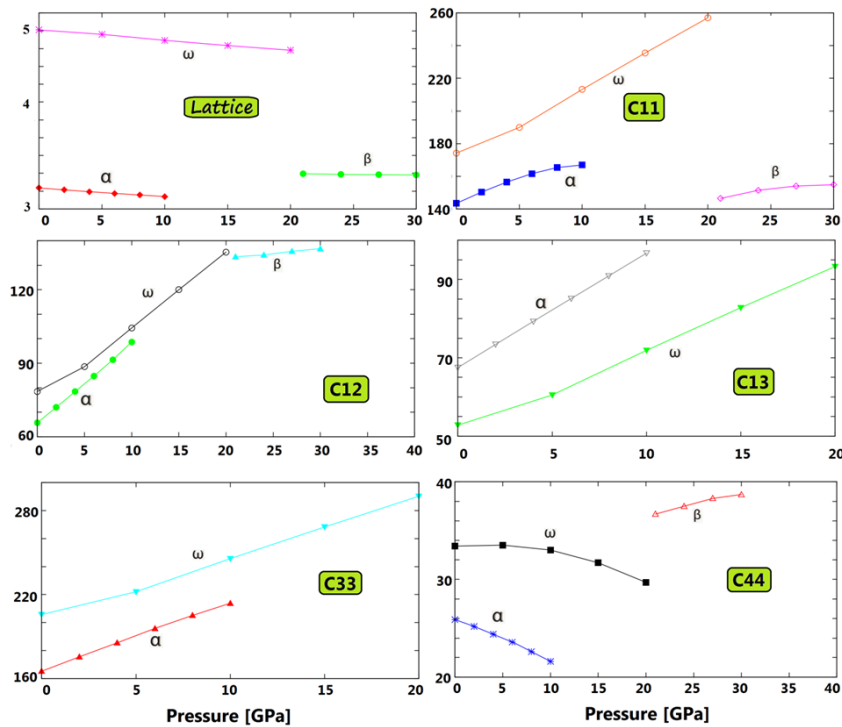
در بخش بعدی به بررسی تاثیر فشار بر ثابت‌های الاستیک می‌پردازیم. هنگامی که به ساختارهای زیرکونیومی فشار وارد می‌شود، ثابت‌های شبکه و به تبع آن ثابت‌های الاستیک می‌توانند تغییر کنند و بر اساس کاربردهایی که این فلز در صنعت دارد و در شرایط مختلف از جمله تحت فشارهای مختلف در حال کار است، بنابراین بررسی رفتار وابسته به

فشار این فلز بسیار حائز اهمیت است. رفتار وابسته به فشار ثابت‌های الاستیک فازهای مختلف زیرکونیوم در شکل ۲ نشان داده شده است.

با توجه به اینکه زمانی که فشار روی ساختار اعمال می‌شود، مقادیر تانسور تنش افزایش می‌یابند، می‌توان نتیجه گرفت که مقادیر ثابت‌های الاستیک نرمال نیز افزایش می‌یابند. در فازهای آلفا و امگا (ساختارهای هگزاگونال) افزایش فشار منجر به کاهش ثابت الاستیک برشی می‌شود و این موضوع باعث کاهش قابلیت تحرک برشی لایه‌های اتمی زیرکونیوم بر یکدیگر می‌گردد. برای فاز بتا این موضوع بر عکس است و با افزایش فشار قابلیت تحرک برشی افزایش می‌یابد. در حالت کلی رابطه ثابت الاستیک بر حسب فشار را می‌توان با بسط آن‌ها بر حسب فشار به صورت زیر بیان کرد:

$$C_{ij}(P) \approx C_{ij}(P_0) + \frac{\partial C_{ij}}{\partial P} \Delta P \quad (7)$$

در رابطه فوق $\frac{\partial C_{ij}}{\partial P}$ را مشتق فشاری ثابت الاستیک می‌نامند و این کمیت برای هر ساختاری می‌تواند بیانگر ویژگی الاستیکی ساختار بر حسب اعمال فشار باشد و نرخ افزایش یا کاهش ثابت‌های الاستیک را بر حسب فشار نشان می‌دهد. جدول ۲ این مقادیر ثابت‌های الاستیک در فشار صفر و مشتق فشاری آن‌ها لیست شده است.



شکل ۲.

جدول ۲. ثابت‌های الاستیک فازهای آلفا، بتا و امگا به صورت تابعی از فشار.

$\frac{\partial C_{44}}{\partial P}$	$\frac{\partial C_{33}}{\partial P}$	$\frac{\partial C_{13}}{\partial P}$	$\frac{\partial C_{12}}{\partial P}$	$\frac{\partial C_{11}}{\partial P}$	$C_{44}(0)$	$C_{33}(0)$	$C_{13}(0)$	$C_{12}(0)$	$C_{11}(0)$	
-۰,۴	۴,۹	۲,۹	۳,۳	۲,۴	۲۶,۰	۱۶۵,۷	۶۷,۶	۶۵,۴	۱۴۵,۳	α
۰,۲			۰,۴	۰,۹	۳۲,۰			۱۲۵,۴	۱۲۸,۰	β
-۰,۲	۴,۳	۲,۱	۲,۹	۴,۲	۳۴,۱	۲۰۳,۳	۵۱,۶	۷۶,۳	۱۷۱,۷	ω

همانطور که در جدول ۲ دیده می‌شود، افزایش نرخ مشتق فشار ثابت‌های C_{33} و C_{11} در فاز امگا بیشتر از فاز آلفا است و این کمیت برای ثابت‌های C_{13} و C_{12} در فاز امگا کمتر از آلفا می‌باشد. به همین ترتیب کاهش نرخ C_{44} نسبت به فشار برای فاز آلفا بیشتر است. تنها مقدار منفی نرخ تغییر ثابت‌های الاستیک با فشار مربوط به ثابت C_{44} در ساختارهای هگزاگونال می‌باشد. تمام مشتقات فشار ثابت‌های الاستیک برای فاز بتا کوچک و مثبت هستند که به این معناست که با افزایش (یا کاهش) فشار بر فاز بتا زیرکونیوم ثابت‌های الاستیک زیاد (یا کم) می‌شوند.

۴. بحث و نتیجه گیری:

ساختار و خواص الاستیکی فازهای مختلف زیرکونیوم در این مطالعه مورد بررسی قرار گرفت و نتایج بدست آمده تطابق خوبی را با نتایج دیگر محاسبات و نتایج تجربی نشان می‌دادند. سپس رفتار ثابت‌های شبکه و الاستیک در حضور فشار مورد بررسی قرار گرفت و ملاحظه شد که برای ساختارهای هگزاگونال افزایش فشار بر ساختار می‌تواند منجر به افزایش سختی جسم در راستاهای مختلف شود. اما برای ساختارهای هگزاگونال افزایش فشار منجر به کاهش ثابت الاستیک برشی می‌شود در حالیکه در مورد فاز بتا و ساختار مکعبی اینطور نیست.

۵. مراجع:

1. B. Cox, J. Nucl. Mater. 336, 331 (2005).
2. Q. Peng, et. al., Pressure effect on stabilities of self-interstitials in HCP- Zirconium. Scienti_c report 4 (2014).
3. M. R. Basaadat and M. Payami. Elastic stiffness tensors of Zr-xNb alloy in the presence of defects: A molecular dynamics study, International Journal of Modern Physics C 31.02 (2020) 2050028.
4. M. R. Basaadat, "The study of the properties of point defects in pure-Zr and Zr-1% Nb alloy using density-functional theory and atomic simulation." (2020): 57-64.
5. E. S. Fisher and C. J. Renken, Single-crystal elastic moduli and the hcp \rightarrow bcc transformation in Ti, Zr, and Hf. Phys. Rev. 135, (1964) A482.
6. P. F. Weck, E. Kim, V. Tikare and J. A. Mitchell, Mechanical properties of zirconium alloys and zirconium hydrides predicted from density functional perturbation theory Dalton Trans. 44, (2015) 18769.
7. D. I. Bolef, Elastic constants of single crystals of the bcc transition elements V, Nb, and Ta. J. Appl. Phys. 32 (1961) 100.
8. Y. P. Varshni, Temperature dependence of the elastic constants. Phys. Rev. B 2 (1970) 3952.
9. Y. J. Hao, et al. "Phase transition and elastic constants of zirconium from first-principles calculations." Journal of Physics: Condensed Matter 20.23(2008): 235230.
10. P. Giannozzi, et al. "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials." Journal of physics: Condensed matter 21.39 (2009): 395502.
11. A. Dal Corso. "Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation." Journal of Physics: Condensed Matter 28.7 (2016): 075401.
12. G. Kresse, and J. Furthmuller. "Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set." Physical review B 54.16 (1996): 11169.
13. S. N. Vaidya, and G. C. Kennedy. "Compressibility of 22 elemental solids to 45 KB." Journal of Physics and Chemistry of Solids 33.7-9 (1972): 1377-1389.
14. G. Steinle-Neumann, L. Stixrude, and R. E. Cohen. "First-principles elastic constants for the hcp transition metals Fe, Co, and Re at high pressure." Physical Review B 60.2 (1999): 791.