

О. Р. Гохман

доктор фіз.-мат. наук, професор,
завідувач кафедри фізики, Південноукраїнський національний педагогічний університет імені
К. Д. Ушинського, Одеса, Україна,
alexander.gokhman@gmail.com

М. С. Кондря

аспірант кафедри фізики, Південноукраїнський національний педагогічний університет
імені К. Д. Ушинського, Одеса, Україна,
marianna.kondrea@gmail.com

ORCID: 0000-0001-7508-2563

Т. С. Совкова

кандидат фіз.-мат. наук, доцент,
доцент кафедри фізики, Південноукраїнський національний університет
імені К. Д. Ушинського, Одеса, Україна,
sovkovatatjana@rambler.ru

УДК 621.78-978.004.94

PACS 02.05.12.31.36.37

DOI: 10.31651/2076-5851-2018-1-12-20

ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДОМ КЛАСТЕРНОЇ ДИНАМІКИ ВПЛИВУ ЗМІНИ ТЕМПЕРАТУРИ НА НЕЙТРОННУ КРИХКІСТЬ α -ЗАЛІЗА

Метод кластерної динаміки використовується для моделювання впливу температури на зростання межі текучості, яке зумовлено нейтронним опромінюванням. Показана необхідність врахування зміни температури при використанні даних про нейтронну крихкість зразків-свідків для оцінки механічних властивостей корпусу атомного реактору при робочій температурі.

Ключові слова: нейтронна крихкість, кластерна динаміка, зміна температури, α -залізо.

1. Вступ

Нейтрони, які у великій кількості з'являються в атомному реакторі в процесі реакції поділу ядер урану або плутонію, спричиняють так звану «хворобу Вігнера», тобто явище нейтронної крихкості. Протягом каскадної стадії, яка триває від 10^{-15} до 10^{-12} секунд, швидкий нейтрон з енергією більшою, ніж 1 МеВ, вибиває атоми з вузлів кристалічної решітки матеріалу корпусу реактору. За цей час температура встигає зрости до температури плавлення, а потім зменшитися до робочої температури реактора ($250-300^{\circ}\text{C}$). При цьому створюються чисельні пари Френкеля (вакансії та міжвузельні атоми), які частково рекомбінують, а частково формують кластери точкових дефектів – вакансійні кластери (vacancy clusters, VC) та кластери міжвузельних атомів (self-interstitial atoms clusters, SIAC). Після завершення каскадної стадії протягом нормативного терміну експлуатації атомного реактору тривають дифузійні процеси: кластері точкових дефектів проходять нуклеаційну (флуктаційну) стадію, на протязі якої деякі з них розпадаються, а деякі продовжують зростати, доки їх розмір не досягає критичного, і вони вступають до стадії детерміністського зростання, на якій вже не розпадаються, а тільки зростають, але не досягають стадії Оствальда (стадії зрілості) згідно [1]; концентрація поодиноких точкових дефектів зростає завдяки новим нейтронним каскадам, розпаду кластеру точкових дефектів та зменшується внаслідок їх адсорбції сіткою дислокацій, границями зерен, кластерами точкових дефектів та кластерами або преципітатами (наносполуками), до складу яких входять як атоми матеріалу реактору так і вакансії або міжвузельні атоми [2]; різко зростає коефіцієнт дифузії легуючих елементів завдяки вакансійному механізму дифузії, що

призводить до появи вказаних метастабільних наносполук з коротким або довгим часом життя.

Кластери точкових дефектів та наносполуки є стопорами руху дислокацій, що і є причиною явища нейтронної крихкості, яке може бути кількісно описано зростанням межі текучості $\Delta\sigma$. Значення $\Delta\sigma$ може бути визначено згідно до моделі [3], якщо відомі середній розмір d , чисельна щільність N_d , та склад кластерів і наносполук, які виникли під впливом нейтронного опромінення корпусу реактору. В останні декілька десятиріч актуальною задачею реакторного матеріалознавства є моніторинг механічних властивостей та подовження життєвого ресурсу атомних реакторів до 60 років.

Для її рішення започатковано декілька підходів, зокрема, дослідження зразків-свідків, які встановлюються в обраних місцях корпусу реактору, де знаходяться біля року, а потім виймаються з реактору під час його регламентних зупинок та досліджуються низкою експериментальних методів, а саме: методом малокутового розсіювання рентгенівських променів та нейтронів (small-angle X-ray scattering, SAXS, та small-angle neutron scattering, SANS), методом позитронно аннігіляційної спектроскопії (positron annihilation spectroscopy, PAS), методом просвічуючою електронної мікроскопії (transmission electron microscopy, TEM), методом атомного зондування (atom probe field image microscopy, APFIM) та іншими [4]. У іншому підході опромінювання матеріалу здійснюється у науково-дослідному реакторі на протязі короткого часу, наприклад декілька тижнів, до дози (~ 0.2 dpa), яку промисловий реактор отримує за весь час його експлуатації (~ 40 років). Це здійснюється за рахунок збільшення флаксу в десятки та сотні тисяч разів [5]. До цього часу не з'ясована повною мірою коректність використання вказаних підходів до задачі моніторингу та прогнозування життєвого ресурсу промислових реакторів з оглядом на різницю флаксів та зміни температури при виході реактору на робочий режим та виходу з нього [6]. У роботі [7] методом кластерної динаміки вивчався флакс ефект для еволюції кластерів та зростання $\Delta\sigma$ у комерційно чистому α -залізі (вміст вуглецю менший, ніж 30 ppm), яке опромінювалось нейтронами. У даному дослідженні методом кластерної динаміки вивчається вплив зміни температури на середній розмір, чисельну щільність та зростання $\Delta\sigma$ опромінюваного α -заліза [7].

2. Майстер-рівняння та алгоритм реалізації методу кластерної динаміки для α -заліза, опроміненого нейтронами

Метод кластерної динаміки (cluster dynamics, CD) був запропонований у 30-х роках минулого століття Бокером при дослідженні фазових перетворень води. З 1997 року CD плідно використовується у задачах моделювання процесів формування та еволюції кластерів і преципітатів в металах та сплавах під дією опромінювання електронами, іонами та нейтронами [8-9]. CD може бути успішно застосована до дослідження процесів у реакторних сталях за умовою малих розмірів кластерів порівняно з середньою відстанню між ними. Майстер-рівняння CD може бути записано у вигляді наступної жорсткої системи диференціальних рівнянь для випадку нейтронного опромінення:

$$\frac{dC_{1v(i)}}{dt} = \eta G_{dpa} (1 - f_{vcl(iel)}) - \frac{4\pi r_{rec} (D_v + D_i) C_{1v} C_{li}}{\Omega_{Fe}} - \rho Z_{v(i)} \left(1 + \frac{6(\rho Z_{v(i)})^{-0.5}}{d} \right) D_{v(i)} (C_{1v(i)} - C_{1v(i)}^e) \quad (1)$$

$$- 4\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} + 4\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \sum_{n=3} \alpha_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{ni(v)}^{v(i)} C_{ni(v)}$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{2v(i)}}{dt} &= G_{2V(I)} + 2\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} - 2\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \beta_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} \\ &+ \alpha_{3v(i)}^{v(i)} C_{3v(i)} - \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} + \beta_{3v(i)}^{i(v)} C_{3v(i)} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{nv(i)}}{dt} &= G_{nV(I)} + \beta_{(n-1)v(i)}^{v(i)} C_{(n-1)v(i)} + (\beta_{(n+1)v(i)}^{i(v)} + \alpha_{(n+1)v(i)}^{v(i)}) C_{(n+1)v(i)} \\ &- (\beta_{nv(i)}^{v(i)} + \beta_{nv(i)}^{i(v)} + \alpha_{nv(i)}^{v(i)}) C_{nv(i)} \quad \text{for } n > 2, \end{aligned} \quad (3)$$

де G_{dpa} – генерація за одну секунду поодиноких точкових дефектів, $G_{nv(l)}$ – генерація за одну секунду кластерів вакансій (міжвузельних атомів), які містять n мономерів, η – коефіцієнт ефективності, тобто відношення кількості мономерів точкових дефектів в кінці каскадної стадії до загальної кількості цих дефектів, створених на початку цієї стадії, f_{vcl} (f_{icl}) – відношення кількості поодиноких вакансій (міжвузельних атомів), які утворюють вакансійні кластери (кластери міжвузельних атомів), до загальної кількості вакансій (міжвузельних атомів) наприкінці каскадного етапу, ρ_d – щільність дислокації, d – середній розмір зерен, Ω_{Fe} – атомний об'єм заліза, $C_{lv(i)}^e$ – рівноважна термічна концентрація вакансій (міжвузельних атомів), $D_{v(i)}$ – коефіцієнт дифузії вакансій (міжвузельних атомів), обчислений за формулою (4):

$$D_{v(i)} = D_{v(i)0} \exp\left(-\frac{E_{mv(i)}}{k_B T}\right), \quad (4)$$

де k_B – константа Больцмана, D_{i0} , D_{v0} – передекспоненційний фактор поодинокі вакансії (міжвузельного атому), E_{mv} (E_{mi}) – енергія міграції вакансії (міжвузельного атому), $\beta_{ni}^{v(i)}$ – коефіцієнт приєднання точкових дефектів плоскими кластерами міжвузельних атомів з радіусом r_{ni} , який визначається за формулою (5):

$$\beta_{ni}^{v(i)} = \frac{2\pi r_{ni} D_{v(i)} C_{lv(i)}}{\Omega_{Fe}} \cdot Z_n^{v(i)}, \quad (5)$$

де $Z_n^{v(i)}$ – поправочний коефіцієнт, який визначає захоплення вакансій (міжвузельних атомів) кластера міжвузлів, визначається за формулою (6):

$$Z_n^{v(i)} = Z_{v(i)} + \left[\left(\frac{b}{8\pi a} \right)^{0.5} \cdot z_{fv(i)} - Z_{v(i)} \right] / n^{0.35}, \quad (6)$$

де a – параметр ОЦК решітки заліза; $z_{fv(i)} = 35$ (42) – для вакансій (міжвузельних атомів), ефективність захоплення вакансій (міжвузельних атомів) дислокаційною сіткою; $\beta_{nv}^{v(i)}$ – коефіцієнт приєднання точкових дефектів сферичним кластером вакансій з радіусом R_{nv} , обчислений згідно до наближенням дифузійного режиму за формулою (7) :

$$\beta_{nv}^{v(i)} = \frac{4\pi R_{nv} D_{v(i)} C_{lv(i)}}{\Omega_{Fe}}. \quad (7)$$

$\alpha_{nv}^{v(i)}$ – коефіцієнт емісії однієї вакансії (міжвузельного атому) з кластера вакансій (міжвузельних атомів), обчислений згідно до принципу детальної рівноваги через змінення вільної енергії $\Delta G_v(n)$ для вакансій та енергію зв'язку кластера міжвузельних атомів E_{bni} :

$$\alpha_{nv}^v = \beta_{(n-1)v}^v \cdot \exp\left(\frac{\Delta G_v(n) - \Delta G_v(n-1)}{k_B T}\right), \quad (8)$$

$$\Delta G_v(n) = -n\Delta\mu + 4\pi R_{nv}^2 \gamma, \quad (9)$$

де $\Delta\mu$ – різниця хімічного потенціалу вакансії у вакансійному кластері і матриці матеріалу, γ – питома поверхнева енергія вакансійного кластера в чистому залізі:

$$\alpha_{ni}^i = \frac{\beta_{(n-1)i}^i}{C_{li}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{bni}}{k_B T}\right), \quad (10)$$

де E_{bni} вчислюється за формулою (11):

$$E_{bni} = E_{fi} + \frac{E_{b2i} - E_{fi}}{2^{\frac{2}{3}} - 1} \left[n^{\frac{2}{3}} - (n-1)^{\frac{2}{3}} \right], \quad (11)$$

де E_{fi} – енергія формування вакансії (міжвузельного атому), E_{b2i} – енергія зв'язку димера вакансій (міжвузельних атомів).

Система рівнянь (1-11) являє собою систему жорстких звичайних диференціальних рівнянь, розв'язання якої стандартними чисельними методами призводить до нестійкого рішення. Для аналізу цих систем необхідно застосовувати спеціальні чисельні алгоритми, які засновані на використанні адаптивного кроку інтегрування [10,11]:

(1) чисельний код інтегрування D02EJF на мові програмування Фортран, створений згідно [10,11] для розв'язання жорсткої системи звичайних диференціальних рівнянь. Код D02EJF входить до пакету комерційних програм «Numerical Analytical Group (NAG)» [12];

(2) код Linear Solver of Ordinary Differential Equations (*LSODE*), який був створений у 1984 році у Ліверморській лабораторії (США) [13], є у вільному доступі.

Порівняння комп'ютерних кодів здійснювалось на кластері обчислювальних машин дослідницького ядерного центру Гельмгольц Дрезден-Розендорф (Німеччина). Обома кодами проводилось інтегрування відомої задачі Робертсона [14], а саме інтегрувалась система жорстких диференціальних рівнянь для типової моделі хімічної кінетики системи з різними характерними часами реакцій:

$$\begin{aligned}y_1' &= -0.04 y_1 + 10^4 y_2 y_3 \\y_2' &= 0.04 y_1 - 10^4 y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2 \\y_3' &= 3 \cdot 10^7 y_2^2\end{aligned}$$

за початковими умовами: $y_1(0) = 1$; $y_2(0) = 1$; $y_3(0) = 1$.

Одержано задовільне узгодження результатів інтегрування (табл.1, 2). Виходячи з цього, та з урахуванням вільного доступу, код *LSODE* був обраний для дослідження впливу зміни температури на середній розмір, чисельну щільність кластерів вакансій та міжвузельних атомів, а також на підвищення межі текучості, зумовлене нейтронним опромінюванням.

Таблиця 1

Результати інтегрування задачі Робертсона кодом D02EJF NAG [13].

Table 1

Results of integration of Robertson' problem by code D02EJF NAG [13].

Час	$y_1(t)$	$y_2(t)$	$y_3(t)$
at t = 4.0000e-01	y = 9.851712e-01	3.386380e-05	1.479493e-02
at t = 4.0000e+00	y = 9.055333e-01	2.240655e-05	9.444430e-02
at t = 4.0000e+01	y = 7.158403e-01	9.186334e-06	2.841505e-01
at t = 4.0000e+02	y = 4.505250e-01	3.222964e-06	5.494717e-01
at t = 4.0000e+03	y = 1.831975e-01	8.941774e-07	8.168016e-01
at t = 4.0000e+04	y = 3.898730e-02	1.621940e-07	9.610125e-01
at t = 4.0000e+05	y = 4.936363e-03	1.984221e-08	9.950636e-01
at t = 4.0000e+06	y = 5.161831e-04	2.065786e-09	9.994838e-01
at t = 4.0000e+07	y = 5.179817e-05	2.072032e-10	9.999482e-01
at t = 4.0000e+08	y = 5.283401e-06	2.113371e-11	9.999947e-01
at t = 4.0000e+09	y = 4.659031e-07	1.863613e-12	9.999995e-01
at t = 4.0000e+10	y = 1.404280e-08	5.617126e-14	1.000000e+00

Результати інтегрування задачі Робертсона кодом *LSODE* [14]

Table 2

Results of integration of Robertson' problem by code *LSODE* [14]

Час	$y_1(t)$	$y_2(t)$	$y_3(t)$
at t = 4.0000e-01	y = 0.985172e+00	0.338640e-04	0.147937e-01
at t = 4.0000e+00	y = 0.905519e+00	0.224048e-04	0.944590e-01
at t = 4.0000e+01	y = 0.715826e+00	0.918549e-05	0.284165e+00
at t = 4.0000e+02	y = 0.450518e+00	0.322289e-05	0.549479e+00
at t = 4.0000e+03	y = 0.183201e+00	0.894231e-05	0.816798e+00
at t = 4.0000e+04	y = 0.389852e-01	0.162185e-06	0.961015e+00
at t = 4.0000e+05	y = 0.493951e-02	0.198549e-07	0.985060e+00
at t = 4.0000e+06	y = 0.517801e-03	0.207266e-08	0.999482e+00
at t = 4.0000e+07	y = 0.525034e-04	0.210025e-09	0.999947e+00
at t = 4.0000e+08	y = 0.581277e-05	0.232512e-10	0.999994e+00
at t = 4.0000e+09	y = 0.471199e-06	0.188479e-11	0.100000e+01
at t = 4.0000e+10	y = -0.279994e-08	-0.111976e-11	0.100000e+01

Експериментальні дані для нашого дослідження були взяті в [1], де досліджувалось комерційне чисте α -залізо, яке опромінювалось нейтронами з енергією більше ніж 1 MeV при температурі 300 °C зі флаксом $1,39 \times 10^{-7}$ дпа/с протягом 15 діб. Результати просвічуючої електронної мікроскопії вказали на формування в опроміненому залізі кластерів міжвузельних атомів зі середнім діаметром 10 нм та чисельною щільністю $4 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$, а позитронно-електронної анігільційної спектроскопії – на формування вакансійних кластерів, які містять 10 вакансій. У нашому дослідженні методом кластерної динаміки визначалось, як змінюються середній розмір і чисельна щільність VC та SIAC для умов опромінювання [1], якщо температура реактора зменшиться до 123 °C після 0,46, 0,96, 2,31, 6,94, 11,6, 12,2, 12,7 13,3 13,9, 14,5, 14,6, 14,8 та 15 діб опромінювання при температурі 300 °C. Параметри матеріалу, які використовувались у розрахунках, наведені у таблиці 3.

Таблиця 3

Матеріальні параметри для чистого заліза.

Table 3

Material parameters of pure iron.

Енергія формування вакансії, E_{fv}	1,60 eV	[16]
Енергія зв'язку кластеру з двох вакансій, E_{b2v}	0,20 eV	[16]
Енергія міграції вакансії, E_{mv}	1,30 eV	[16]
Передекспоненційний коефіцієнт дифузії поодиноких вакансій, D_{v0}	$0,1 \times 10^{-3} \text{ м}^2/\text{с}$	[16]
Енергія формування міжвузельного атому, E_{fi}	4,3 eV	[16]
Енергія зв'язку кластеру з двох міжвузельних атомів, E_{b2i}	0,80 eV	[16]
Енергія міграції міжвузельного атому, E_{mi}	0,30 eV	[16]
Передекспоненційний коефіцієнт дифузії міжвузельного атому, D_{i0}	$4,0 \times 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$	[16]
Радіус рекомбінації, r_{rec}	0,65 нм	[16]
Коефіцієнт захвату вакансії дислокаційною сіткою, z_v	1,0	[16]
Коефіцієнт захвату міжвузельного атому дислокаційною сіткою, z_i	1,2	[16]
Вектор Бюргерса, b	0,2 нм	[16]
Щільність дислокації, ρ_d	$0,7 \times 10^{14} \text{ м}^{-2}$	[17]
Середній розмір зерна, d	$2,5 \times 10^{-4} \text{ м}^2$	[17]

Результати розрахунків методом кластерної динаміки представлені на Рис. (1-2).

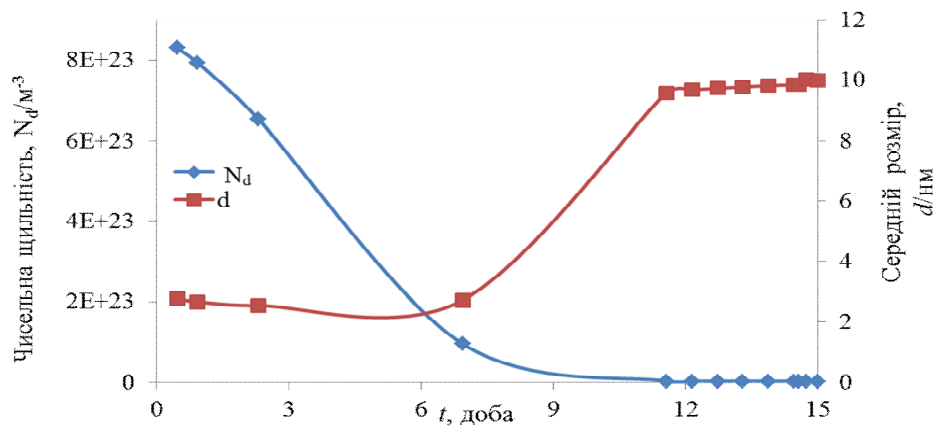


Рис. 1. Зміна чисельної щільності та середнього розміру SIAC в α – залізі у залежності від часу, коли температура реактора була зменшена від 300 $^{\circ}\text{C}$ до 123 $^{\circ}\text{C}$.

Fig.1. Change of number density and mean size of SIAC in α – iron depends on time when reactor temperature is decreased from 300 $^{\circ}\text{C}$ to 123 $^{\circ}\text{C}$.

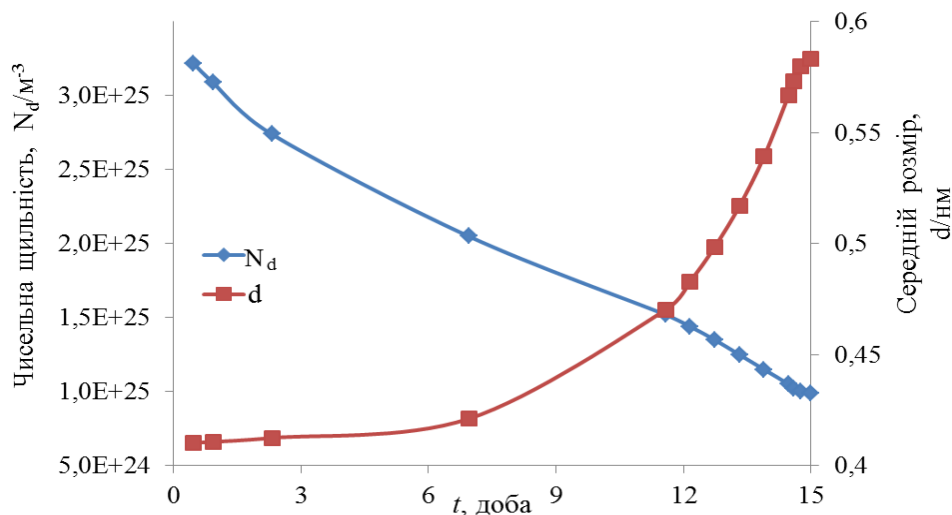


Рис. 2. Зміна чисельної щільності та середнього розміру VC α – заліза у залежності від часу, коли температура реактора була зменшена від 300 $^{\circ}\text{C}$ до 123 $^{\circ}\text{C}$.

Fig.2. Change of number density and mean size of VC in α – iron depends on time when reactor temperature is decreased from 300 $^{\circ}\text{C}$ to 123 $^{\circ}\text{C}$.

Вкладом VC у зростання межі текучості α -заліза $\Delta\sigma$ можна нехтувати у нашому дослідженні відповідно до [3], оскільки середній розмір VC менший, ніж 0,6 нм (Рис. 2). Отже величина $\Delta\sigma$ розраховувалась із параметрів SIAC за співвідношенням (12) із [3]:

$$\Delta\sigma = \alpha M G b \sqrt{N_d d} \quad (12)$$

де коефіцієнт $\alpha = 0,3$ для SIAC; Тейлор фактор $M = 3,06$; модуль зсуву $G = 84$ ГПа; вектор Бюргерса $b = 0,2$ нм.

Значення $\Delta\sigma$ α -заліза в залежності від часу, коли температура реактора була зменшена від 300 $^{\circ}\text{C}$ до 123 $^{\circ}\text{C}$, наведені на Рис. 3.

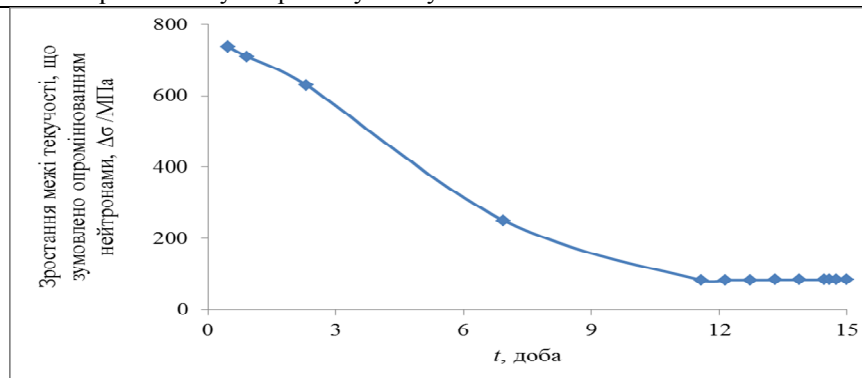


Рис. 3. Зміна межі текучості α – заліза, що зумовлена опромінюванням нейтронами, у залежності від часу, коли температура реактора була зменшена від 300°C до 123°C .

Fig.3. Change of yield stress of α – iron caused by neutron irradiation depends on time when reactor temperature is decreased from 300°C to 123°C .

3. Висновки

Зменшення величини $\Delta\sigma$, яка є кількісною характеристикою явища нейтронної крихкості, приблизно на порядок при зниженні температури реактору з 300°C до 123°C вказує на необхідність внесення поправки при використанні експериментальних даних про нейтронну крихкість зразків-свідків для оцінки крихкості корпусу атомного реактору при його робочій температурі.

Список використаної літератури:

1. Gokhman A. Cluster dynamics simulation of point defect clusters in neutron irradiated pure iron / A. Gokhman, F. Bergner // Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology. – 2010. – Vol. 165. – P. 216-226.
2. Shu S. Precipitation in Fe-Cu and Fe-Cu- Mn model alloys under irradiation: Dose rate effects / S. Shu, N. Almirall, P. Wells, T. Yamamoto, G. Odette, D. Morgan // Acta Materialia. – 2018. – Vol. 157. – P. 72-82.
3. Bergner F. Contributions of Cu-rich clusters, dislocation loops and nanovoids to the irradiation-induced hardening of Cu-bearing low-Ni reactor pressure vessel steels / F. Bergner, F. Gillemot, M. Hernández-Mayoral, M. Serrano, G. Török, A. Ulbricht, E. Altstadt // Journal of Nuclear Materials. – 2015. – Vol. 461. – P. 37-44.
4. Meslin E. Characterization of neutron-irradiated ferritic model alloys and RPV steel from combined APT, SANS, TEM and PAS analyses / E. Meslin, M. Lambrecht, M. Hernandez-Mayoral, F. Bergner // Journal of Nuclear Materials. – 2010. – Vol. 406. – P. 73-83.
5. Jumel S. Simulation of irradiated effects in light water reactor vessel steels – experimental validation of RPV-1 / S. Jumel, J. Van Duysen // Journal of Nuclear Materials. – 2007. – Vol. 366. – P. 256-265.
6. Altstadt E. Small-angle neutron scattering investigation of as-irradiated, annealed and reirradiated reactor pressure vessel weld material of decommissioned reactor / E. Altstadt, F. Bergner, H. Viehrig, U. Keyderling // Journal of Nuclear Materials. – 2011. – Vol. 416. – P. 111-116.
7. Kondria M. Cluster dynamics simulation of the flux effect for neutron irradiated pure iron / M. Kondria, A. Gokhman, *in print*
8. Becker J. Reactions of Oxygen with Pure Tungsten and Tungsten Containing Carbon / J. Becker, E. Becker, Re. Brandes // J. Appl. Phys. – 1961. – Vol. 32. – P. 411-423.
9. Odette G. R. Modeling Irradiation Embrittlement in Reactor Pressure Vessel Steels. / G. R. Odette // Neutron irradiation effects in reactor pressure vessel steels and weldments. In: Davies, M.(Ed.), Vienna. – 1998. – P. 438-530.
10. Hindmarsh A. C. ODEPACK. A Systematized Collection of ODE Solvers / A. C. Hindmarsh // Scientific Computing, R. S. Stepleman et al. (eds.), North-Holland, Amsterdam. – 1983. – Vol. 1 (of IMACS Transactions on Scientific Computation). – P. 55-64.

11. Petzold L. R. Automatic selection of methods for solving stiff and nonstiff systems of ordinary differential equations / L. R. Petzold // *Siam J. Sci. Stat. Comput.* – 1983. – Vol. 4. – P. 136-148.
12. The NAG Fortran Library www.nag.co.uk <https://www.nag.co.uk/nag-fortran-library>
13. 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.
14. Амосов А. А. Вычислительные методы для инженеров / А. А. Амосов, Н. В. Копченова, Ю. А. Дубинский. – М.: Высшая школа, 1994. – 544 с.
15. Hardouin Duparc A. Microstructure modelling of ferritic alloys under high flux 1MeV electron irradiations / A. Hardouin Duparc, C. Moingeon, N. Smetaninsky-de-Grande, A. Barbu // *Journal of Nuclear Materials.* – 2002. – 302. – P. 143–155.
16. Bergner F. In Combined TEM, PAS and SANS Investigations of Neutron Irradiated Pure Iron / F. Bergner, A. Almazouzi, M. Hernandez-Mayoral, M. Lambrecht, A. Ulbricht // *Workshop Proceedings Karlsruhe Germany, June 4–6, 2007.* – Nuclear Energy Agency. – 2008. – № 260. – OECD. – P. 283–290.

References:

1. Gokhman A., Bergner F. (2010). Cluster dynamics simulation of point defect clusters in neutron irradiated pure iron. *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*, 165, 216–226.
2. Shu S., Almirall N., Wells P., Yamamoto T., Odette G., Morgan D. (2018). Precipitation in Fe-Cu and Fe-Cu- Mn model alloys under irradiation: Dose rate effects. *Acta Materialia*, 157, 72-82.
3. Bergner F., Gillemot F., Hernández-Mayoral M., Serrano M., Török G., Ulbricht A., Altstadt E. (2015.) Contributions of Cu-rich clusters, dislocation loops and nanovoids to the irradiation-induced hardening of Cu-bearing low-Ni reactor pressure vessel steels, *Journal of Nuclear Materials*, 461, 37–44.
4. Meslin E., Lambrecht M, Hernandez-Mayoral M, Bergner F. (2010). Characterization of neutron-irradiated ferritic model alloys and RPV steel from combined APT, SANS, TEM and PAS analyses, *Journal of Nuclear Materials*, 406, 73-83.
5. Jumel S., Duysen Van J. (2007), Simulation of irradiated effects in light water reactor vessel steels – experimental validation of RPV-1, *Journal of Nuclear Materials*, 366, 256-265
6. Ulbricht A., Altstadt E., Bergner F., Viehrig H., Keyderling U. (2011). Small-angle neutron scattering investigation of as-irradiated, annealed and reirradiated reactor pressure vessel weld material of decommissioned reactor, *Journal of Nuclear Materials*, 416, 111-116.
7. Kondria M., Gokhman A. Cluster dynamics simulation of the flux effect for neutron irradiated pure iron, *in print*
8. Becker J., Becker E., Brandes Re. (1961). Reactions of Oxygen with Pure Tungsten and Tungsten Containing Carbon, *J. Appl. Phys.*, 32, 411-423.
9. Odette G. R. (1998). Neutron irradiation effects in re pressure vessel steels and weldments. In: *Davies, M.(Ed.), Modeling Irradiation Embrittlement in Reactor Pressure Vessel Steels. Vienna*, 438-530.
10. Hindmarsh A. C. (1983) ODEPACK. A Systematized Collection of ODE Solvers. *Scientific Computing, R. S. Stepleman et al. (eds.), North-Holland, Amsterdam, Vol. 1 (of IMACS Transactions on Scientific Computation)*, 55-64.
11. Petzold L. R. (1983). Automatic selection of methods for solving stiff and nonstiff systems of ordinary differential equations. *Siam J. Sci. Stat. Comput*, Vol. 4, P. 136-148.
12. The NAG Fortran Library www.nag.co.uk <https://www.nag.co.uk/nag-fortran-library>
13. 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.
14. Amosov A. A., Kopchenova N. V., Dubinsky Yu. A. (1994). Computational methods for engineers, *M.: Higher School*, 544 p.
15. Hardouin Duparc A., Moingeon C., Smetaninsky-de-Grande N., Barbu A. (2002). Microstructure modelling of ferritic alloys under high flux 1MeV electron irradiations, *Journal of Nuclear Materials*, 302, 143–155.

16. Bergner F., Almazouzi A., Hernandez-Mayoral M., Lambrecht M., Ulbricht A. (2008) In Combined TEM, PAS and SANS Investigations of Neutron Irradiated Pure Iron *Workshop Proceedings Karlsruhe, Germany, 2007, June 4–6, Nuclear Energy Agency, 260, OECD, 283–290.*

O. R. Gokhman

doctor of physical and mathematical sciences, professor,
Head of the Department of Physics, South Ukrainian National Pedagogical University
named after K. D. Ushinsky, Odessa, Ukraine,
alexander.gokhman@gmail.com

M. S. Kondria

Post-graduate student of the Department of Physics,
South Ukrainian National Pedagogical University
named after K. D. Ushinsky, Odessa, Ukraine,
marianna.kondrea@gmail.com

T. S. Sovkova

candidate of physical and mathematical sciences, associate professor,
Associate Professor of the Department of Physics, South Ukrainian National Pedagogical University
named after K. D. Ushinsky, Odessa, Ukraine,
sovkovatatjana@rambler.ru

**CLUSTER DYNAMICS STUDY OF EFFECT ON THE TEMPERATURE CHANGE ON
THE NEUTRON EMBRITTLEMENT OF α -IRON**

Summary. *The actual issue of using data of neutron embrittlement of reactor materials received under the study of witness-samples, installed at selected points of the atomic reactor, to the assessment of the actual neutron embrittlement of the reactor is considered. Significant difference in the mechanical properties, including neutron embrittlement, of the predicted values based on the results of examination of witness-samples and the results of examinations of the reactor pressure vessel of the nuclear power plant Graisdorf (Germany) after its closure in 1990, was found experimentally in 2010-2013 years. Here, the mechanical properties have been measured and the small-angle neutron scattering method has been used to determine the size and density of nano-defects with a size of up to 3 nm, namely clusters of point defects (vacancy clusters and clusters of interstitial atoms), copper precipitates, and clusters composed of point defects and alloying elements of the reactor pressure vessel steel. In the proposed study, one of the possible causes of the mentioned discrepancy is considered, namely, the difference in the surveillance temperature of the reactor (300 °C) and the temperature of the witness-sample (123 °C), which is irradiated for about one year in the reactor, and then extracted from it during routine shutdowns, for example, when replacing nuclear fuel. In order to simplify, we study the effect of temperature change not on reactor steel, but on commercial pure α -iron (carbon content is less than 30 ppm). The distribution functions of vacancy clusters and clusters of self-interstitial atoms respect to the number of monomers have been calculated by means of cluster dynamics calibrated by experimental data of small-angle neutron scattering, transmission electron microscopy and positron annihilation spectroscopy of commercially pure α -iron neutron irradiated in the research reactor BR-2 (Belgium, Mol). The mean cluster size and the number density of clusters are used to estimate the increase of the yield strength of $\Delta\sigma$ of α -iron due a neutron irradiation. This value is usually interpreted as a quantitative characteristic of neutron embrittlement. It is shown that the contribution of vacancy clusters to the value of $\Delta\sigma$ of the studied α -iron can be neglected while the contribution from clusters of self-interstitial atoms decreases with increasing time during which the temperature of the reactor was reduced.*

Keywords: neutron brittleness, cluster dynamics, temperature change, α -phase.

Одержано редакцією 17.12.2018
Прийнято до друку 30.12.2018