

ФІЗИКА МАТЕРІАЛІВ

ORCID: 0000-0003-4689-1251

О. Р. Гохман

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

ORCID: 0000-0002-4304-8704

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: 10.31651/2076-5851-2019-1-3-8

ОЦІНКА ЕВОЛЮЦІЇ ПОР У α -ЗАЛІЗІ ПІД НЕЙТРОННИМ ОПРОМІНЕННЯМ

Результати моделювання кінетики кластерів точкових дефектів методом кластерної динаміки використовуються для оцінки еволюції пор у залізі під нейтронним опроміненням. В рамках моделі міжзеренного руйнування оцінено вплив зміни температури на механічну стабільність заліза, яке опромінено в науково-дослідному реакторі БР-2.

Ключові слова: нейтронне опромінення, еволюція пор, кластерна динаміка, зміна температури, α -залізо.

1. Вступ

Зміна механічних властивостей корпусу реактора атомних станцій відбувається внаслідок низки фізичних процесів на нано-, мікро-, мезо- та макрорівнях як у часі, так і просторі. Метод молекулярної динаміки, метод Монте-Карло та квантовомеханічний метод (*ab-initio* метод) застосовуються для дослідження каскадної стадії взаємодії опромінення (електронів, нейтронів та іонів) з реакторними матеріалами, яка триває від 10^{-15} до 10^{-12} секунд в області розміром до 10 нм. Метод кластерної динаміки дозволяє вивчати довготривалу кінетику кластерів точкових дефектів (вакансій та міжвузлей), а також кластерів та преципітатів, до складу яких входять точкові дефекти та легуючі елементи реакторних сплавів. За такими результатами розрахунків кластерної динаміки як концентрація, середній розмір та чисельна щільність кластерів та преципітатів можливо розрахувати зміну межі текучості, зумовлену опроміненням. Але дотепер

актуальною задачею реакторного матеріалознавства є врахування впливу опромінення на фізичний механізм їх пластичної деформації та руйнування. Представлена стаття присвячена одному з аспектів руйнування опромінених матеріалів, який базується на врахуванні виникнення та еволюції пор при навантаженні.

2. Оцінка еволюції пор

У [1] запропонована фізико-механічна модель міжзеренного руйнування, яке спричинено еволюцією пор, для оцінки механічної стабільності реакторних сталей. Критерій мікропластичного колапса (критерій міжзеренного руйнування) у [1] записується у вигляді:

$$\frac{dF_{eq}}{dk_p} = (1 - S_\Sigma) \frac{d\sigma_{eq}}{dk_p} - \sigma_{eq} \frac{dS_\Sigma}{dk_p}, \quad (1)$$

де F_{eq} – інтенсивність напруги $F_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} S_{ij} S_{ij}}$; $S_{ij} = F_{ij} - F_m \delta_{ij}$, $F_m = F_{ii} / 3$, S_Σ – відносна площа пор, тобто площа пор, віднесена до одиниці площі деформованої грані зерна, σ_{eq} – інтенсивність ефективних напружень $\sigma_{eq} = \frac{F_{eq}}{1 - S_\Sigma}$, k_p – інтенсивність приросту пластичної деформації $k_p = \int d\varepsilon_{eq}^p$, $d\varepsilon_{eq}^p = d\varepsilon_{ii}^p / 3$.

Величина відносної площі S_Σ пор знаходиться з рівняння (2):

$$S_\Sigma = \frac{S_{gb} d_g^2}{(d_g^3 + V_{gb} d_g^2)^{2/3}} = \frac{S_{gb}}{\left[1 + \frac{V_{gb}}{d_g}\right]^{2/3}} = C_S S_{gb}, \quad (2)$$

де площа пор та об'єм на одиницю площі (S_{gb} та V_{gb}) визначаються формулами (3) та (4), відповідно:

$$S_{gb} = \pi \sum_{j=1}^M (R_j^M)^2 \rho_j \quad (3)$$

$$V_{gb} = \frac{4}{3} \pi h(\psi) \sum_{j=1}^M (R_j^M)^3 \rho_j \quad (4)$$

Тут R_j^M – радіус пори j -го типу, тобто пори, яка зародилася на j -му часовому інтервалі навантаження, d_g – розмір зерна полікристала, ξ_{eq}^{sr} – швидкість непружної деформації; $\rho_j = \alpha_{Fj} (\xi_{eq}^{sr})_j \Delta t_j$ – кількість пор на одиницю площі, що народились на j -му етапі навантаження за час Δt_j ; $h(\psi) = (1 / (1 + \cos \psi) - 0,5 \cos \psi) \sin \psi$, ψ – кут між дотичної до поверхні пори та площиною границі зерна, на якій розміщена пора; α_{Fj} – швидкість народження пор при нейтронному опроміненні, яка визначається за рівнянням (5):

$$\alpha_{Fj} = \alpha_{int} \left((\sigma_o + \Delta \sigma) / \sigma_o \right)^m, \quad (5)$$

де α_{int} – швидкість народження пор в відсутності нейтронного опромінення, $\sigma_o = 200$ МПа – межа текучості для комерційно чистого α -заліза [2], m – константа матеріала, $\Delta \sigma$ – зміна межі текучості, що зумовлено нейтронним опромінюванням.

Часова залежність $\Delta\sigma$ для режиму опромінення [3,4] в науково-дослідному реакторі БР-2 (м. Мол, Бельгія) визначалась з результатів кластерної динаміки щодо еволюції середнього розміру та чисельної щільності кластерів у [5] та підходу [6] для постійної температури 300°C корпусу реактора та її зменшення від 300°C до 123°C (Рис.1). Еволюція розміра пори R розраховується з рівняння (6):

$$R_j^M = R_j^{M-1} + f_1\left(\frac{\Lambda_q}{R_j^{M-1}}, q_m\right) R_j^{M-1} (\xi_{eq})_j \Delta t_j \quad (6)$$

Тут $M > 1, R_j^1 = R_0$

$$f_1\left(\frac{\Lambda_q}{R}, q_m\right) = \frac{1}{h(\psi)} \left\{ \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\Lambda_q}{R}\right)^3 f\left(\frac{\Lambda_q}{R}\right) - \frac{3}{4} \right] + 0,3(q_m)^r \exp(1,5q_m) \right\} \quad (7)$$

$$f\left(\frac{\Lambda}{R}\right) = \left[\ln \frac{R+\Lambda}{R} + \left(\frac{R}{R+\Lambda}\right)^2 \left(1 - \frac{1}{4} \left(\frac{R}{R+\Lambda}\right)^2\right) - \frac{3}{4} \right]^{-1}; \quad \Lambda = \left(\frac{D_\Lambda \sigma}{\xi^{cp}}\right)^{1/3}; \quad D_\Lambda = \frac{\Omega D_b \delta_b}{kT_a}$$

Тут Λ – параметр дифузійного шляху, що визначає розмір зони, зростання якої обумовлено дифузією вакансій [7], Ω – атомний об'єм, δ_b – дифузійна товщина границі зерна, D_b – коефіцієнт зернограничної дифузії, T_a – абсолютна температура.

Еволюція відносної площини пор у α -залізі під навантаженням і опроміненням в науково-дослідному реакторі БР-2 за режимом [3,4] при зменшенні його температури від 300°C до 123°C у порівнянні з постійної температури реактора ($T=300^\circ\text{C}$) для значень параметрів: $D_v=7,36 \times 10^{-20}$ м²/с; $d_g = 2,5 \times 10^{-4}$ м; ; $\Omega = \Omega_{\text{Fe bcc}} = 1,779 \times 10^{-29}$ м³; $q_m=1$; $\sigma = 2 \times 10^7$ Па; $\delta_b = 2,5 \times 10^{-6}$ м; $a_{\text{int}} = 10^6$ с⁻¹ м⁻²; $\xi_{\text{cr}} = 10^{-5}$; $\psi = 90^\circ$; $R_j^1 = R_0 = 5 \times 10^{-10}$ м; $m = 2$ наведена на рис. 2.

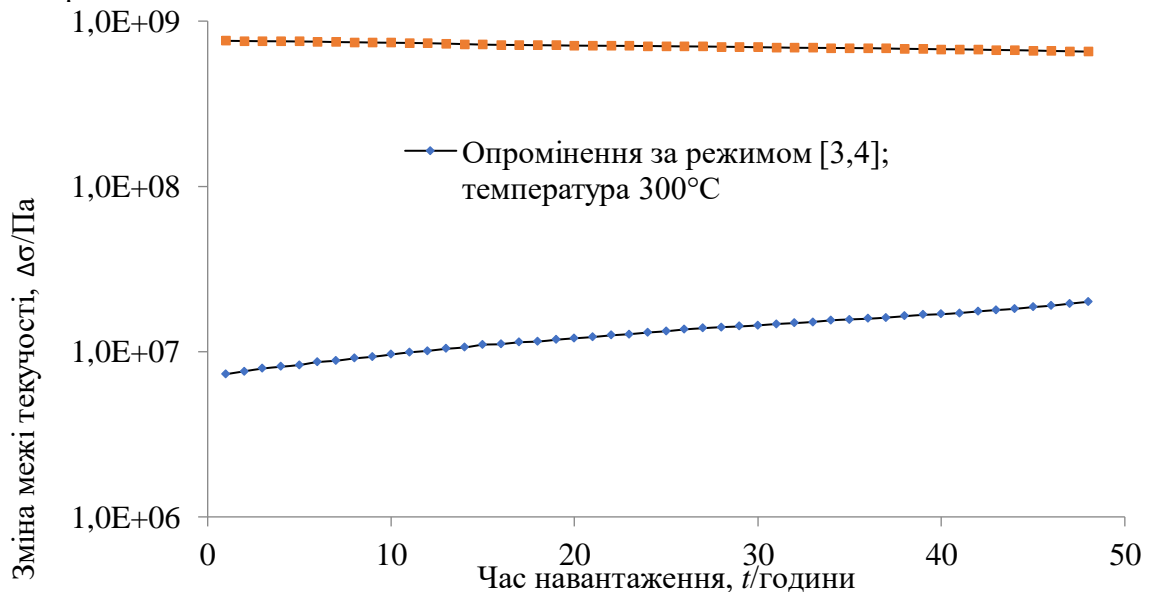


Рис. 1. Розрахована методом кластерної динаміки зміна межі текучості α -заліза, що зумовлена опромінюванням нейтронами у залежності від часу, коли температура науково-дослідного реактора БР-2 була зменшена від 300°C до 123°C за режимом у порівнянні з випадком постійної температури 300°C.

Fig. 1. Calculated by the method of cluster dynamics change in yield strength of α -iron, which is caused by neutron irradiation, depending on the time when the temperature of the research reactor BR-2 was reduced from 300°C to 123°C in comparison with the case of a constant temperature of 300°C.

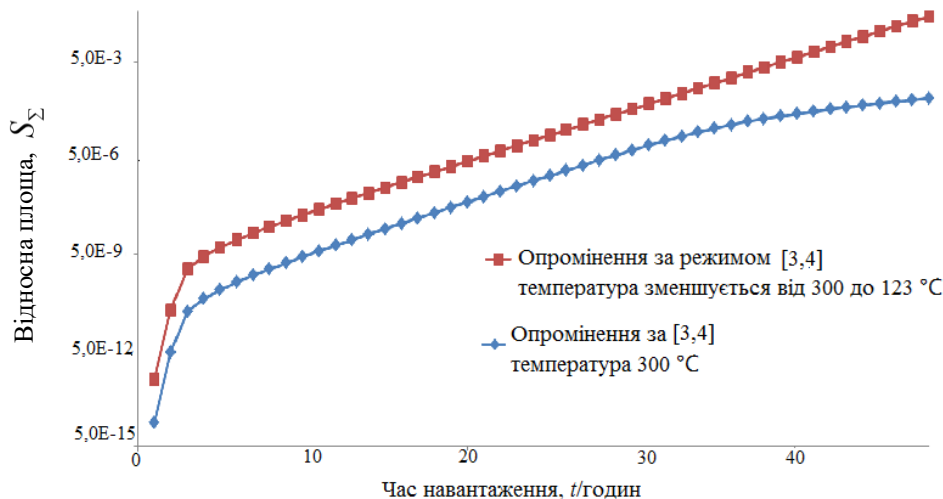


Рис.2. Еволюція у часі відносної площі пор, S_{Σ} у α -залізі під навантаженням, що опромінено за режимом [3,4] в науково-дослідному реакторі БР-2 при температурі 300°C та при зменшенні температури від 300 до 123°C.

Fig.2. Evolution in time of relative pore area, S_{Σ} in iron under load, irradiated under the regime [3,4] in the research reactor BR-2 at a temperature of 300°C and at a temperature decrease from 300 to 123°C.

Отож відносна площа пор у залізі при внутрішньому тиску 20 МПа, яке має місце в атомних реакторах водо-водяного типу, та опроміненні з нейтронним флаксом $1,39 \times 10^{-7}$ dpa/c (9×10^{17} н/м²/с, $E > 1$ MeV) [3,4] зростає за дві доби до 0,0004 та 0,14 при постійній температурі реактора 300°C та при зменшенні температури від 300 до 123°C, відповідно. Отож матеріал реактора при зменшенні його температури стає більш механічно нестабільним ніж у випадку постійної температури реактора.

3. Висновки

Зменшення температури корпусу науково-дослідного реактора БР-2 (м. Мол, Бельгія) від 300 до 123°C при опроміненні з нейтронним флаксом $1,39 \times 10^{-7}$ dpa/c (9×10^{17} н/м²/с, $E > 1$ MeV) призводить до зростання відносної площі пор у α -залізі (втрати механічної стабільності) у порівнянні з випадком експлуатації вказаного реактора при постійній температурі 300°C.

Список використаної літератури:

1. Марголин Б. З. Моделирование разрушения материалов при длительном статическом нагружении в условиях ползучести и нейтронного облучения. Сообщение 2. Прогнозирование длительной прочности аустенитных материалов / Б. З. Марголин, А. Г. Гуленко, И. П. Курсевич, А. А. Бучатский // Проблемы прочности. – 2006. – № 5. – С. 5-15. – Режим доступу: <http://dspace.nbu.gov.ua/handle/123456789/47871>
2. Lucon E. Tensile properties of commercially pure, high-purity and ultra-high-purity iron: Results of an international round-robin / Lucon E., Lucon E., Abiko K., Lambrecht M., Rehmer B. – US Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, 2015. – 36 P. <http://dx.doi.org/10.6028/NIST.TN.1879>
3. 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, №3, – P. 216–226. . – Режим доступу: <https://doi.org/10.1080/10420151003631928>

4. Kondria M. Cluster dynamics simulation of the flux effect for neutron irradiated pure iron / M. Kondria, A. Gokhman // *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*. – 2019. – Vol. 174, № 1-2. – P. 56-65. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1080/10420150.2019.1577849>
5. Гохман О. Р. Дослідження методом кластерної динаміки впливу зміни температури на нейтронну крихкість α -заліза / О. Р. Гохман, М. С. Кондря, Т. С. Совкова // *Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки»*. – 2018. – №1, С. 12-20. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2018-1-12-20>
6. 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. – № 461. – P. 37–44. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2015.02.031>
7. Speight M. V. Vacancy potential and void growth on grain boundaries / M. V. Speight, W. Beere // *Metal Sci.* – 1975. – Vol. 9, №4. – P. 180-191. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1179/030634575790445161>

References:

1. Margolin B. S., Gulenko A. G., Kursevich I. P., Buchatskiy A. A. (2006). Modelirovanie razrusheniya materialov pri dlitelnom staticheskom nagruzhении v usloviyah polzuchest i neytronnogo oblucheniya. Soobsh. 1. Fiziko-mekhanicheskaya model. *Probl. prochnosti*, 3, 5-22 Retrieved from <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/47871>
2. Lucon E., Lucon E., Abiko K., Lambrecht M., Rehmer B. (2015). Tensile properties of commercially pure, high-purity and ultra-high-purity iron: Results of an international round-robin. *US Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology*. Retrieved from <http://dx.doi.org/10.6028/NIST.TN.1879>
3. 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(3), 216–226. Retrieved from <https://doi.org/10.1080/10420151003631928>
4. Kondria M., Gokhman A. (2019). Cluster dynamics simulation of the flux effect for neutron irradiated pure iron. *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*, 174(1-2), 56-65. Retrieved from <https://doi.org/10.1080/10420150.2019.1577849>
5. Gohman O. R., Kondrya M. S., Sovkova T. S. (2018). Doslidzhennya metodom klasterної dynamiki vplivu zmini temperaturi na neytronnу krihkist' α -zaliza, *Visnyk Cherkaskoho Universytetu. Seriya «Fizyko-Matematychni Nauky» (Bulletin of Cherkasy University. Series "Physics and Mathematics")*, 1, 12-20. Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2018-1-12-20>
6. 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. Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2015.02.031>
7. Speight M. V. Beere W. (1975). Vacancy potential and void growth on grain boundaries. *Metal Sci.*, 9(4), 180-191. Retrieved from <https://doi.org/10.1179/030634575790445161>

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

**ESTIMATION OF THE EVOLUTION OF PORES IN α - IRON UNDER
NEUTRON IRRADIATION**

Summary. *Changes in the mechanical properties of the reactor body of nuclear power plants are due to a number of physical processes at nano-, micro-, meso- and macro-levels both in time and space. The molecular dynamics method, the Monte Carlo method and the quantum mechanical method (ab-initio method) are used to study the cascade stage of interaction of irradiation (electrons, neutrons and ions) with reactor materials, which lasts from 10-15 to 10-12 seconds in the size range up to 10 nm. The cluster dynamics method allows to study the long-term kinetics of point defect clusters (vacancies and internodes), as well as clusters and precipitates, which include point defects and alloying elements of reactor alloys. Based on the results of cluster dynamics such as concentration, average size, and numerical density of clusters and precipitates, it is possible to calculate the change in yield stress caused by irradiation. But so far, the urgent task of reactor materials science is to take into account the effects of irradiation on the physical mechanism of their plastic deformation and destruction. This article is devoted to one of the aspects of destruction of irradiated materials, which is based on taking into account the origin and evolution of pores during loading. A physical and mechanical model of intergranular fracture, which is caused by the evolution of pores, is proposed to evaluate the mechanical stability of reactor steels. The time dependence of the increase of the yield strength for the irradiation regime in the BR-2 research reactor (Mol, Belgium) was determined from the results of cluster dynamics for the evolution of the average size and numerical density of clusters for a constant temperature of 300 °C of the reactor vessel and its decrease from 300 °C to 123 °C. The evolution of the pore size and the magnitude of the relative plane of pores are calculated from the kinetic equations.*

Keywords: neutron irradiation, pore evolution, cluster dynamics, temperature change, α -iron.

Одержано редакцією 18.07.2019

Прийнято до друку 23.09.2019