

ДЕРЖАВНИЙ ЗАКЛАД «ПІВДЕННОУКРАЇНСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ  
ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
імені К. Д. УШИНСЬКОГО»

Кафедра прикладної математики та інформатики

**МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ щодо ВКЛЮЧЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ  
ДОСЛІДЖЕННЯ «МУЛЬТИМАСШТАБНЕ МОДЕЛЮВАННЯ  
ПРОЦЕСІВ ТЕРМОМЕХАНІЧНОЇ ОБРОБКИ та ОПРОМІНЮВАННЯ  
АКТУАЛЬНИХ МЕТАЛІВ і СПЛАВІВ» до ПРОГРАМИ НАВЧАЛЬНОЇ  
ДИСЦИПЛІНИ «ЗАГАЛЬНА ФІЗИКА»**

для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти  
спеціальності 014 Середня освіта (Фізика)

**ОДЕСА 2024**

**УДК: 378.147:536**

Рекомендовано до друку вченою радою  
Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний  
університет імені К. Д. Ушинського»  
протокол від «25» квітня 2024 року № 14

### **РЕЦЕНЗЕНТИ:**

**Писаренко О. М.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент, завідувач кафедри фізики Одеської державної академії будівництва та архітектури

**Совкова Т. С.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін Державного закладу Південноукраїнського національного педагогічного університету імені К. Д. Ушинського

### **Укладач:**

**Гохман О. Р.** – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри прикладної математики та інформатики Державного закладу Південноукраїнського національного педагогічного університету імені К. Д. Ушинського

Методичні рекомендації щодо включення результатів дослідження «Мультимасштабне моделювання процесів термомеханічної обробки та опромінювання актуальних металів і сплавів» до програми навчальної дисципліни «Загальна фізика» / укладач О. Р. Гохман – Одеса, Університет Ушинського, 2024. 59 с.

*Методичні рекомендації щодо включення результатів дослідження «Мультимасштабне моделювання процесів термомеханічної обробки та опромінювання актуальних металів і сплавів» до програми навчальної дисципліни «Загальна фізика» здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти містять перелік тем, при викладанні яких доцільно використання результатів вказаного дослідження. Створено відповідно до рішення вченої ради університету Ушинського від 26 жовтня 2023 року (Протокол №4). Рекомендовано для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти спеціальності 014 Середня освіта (Фізика) з метою закріплення, поглиблення й узагальнення знань, одержаних під час навчання.*

## Зміст

Вступ	4с.
Розділ I. Механічні властивості твердих тіл	6с.
1.1.Орієнтаційна залежність модуля Юнга	6с.
1.2.Орієнтаційна залежність параметр пошкоджуваності	9с.
1.3.Орієнтаційна залежність межі міцності, межі плинності та відносного подовження.	12с.
1.4. Модулі пружності монокристалів	16с.
Розділ II. Дифракція рентгенівських променів.	17с.
2.1.Дослідження кристалографічної текстури матеріалів з гексагональною симетрією	17с.
2.2.Дослідження кристалографічної текстури матеріалів з кубічною симетрією	26с.
Розділ III. Ядерні реакції, ядерні реактори, проблеми	30с.
3.1.Касади зміщення	30с.
3.2. Моделювання опромінення методом кластерної динаміки	31с.
3.3. Майстер-рівняння кластерної динаміки	37с.
3.4. Моделювання методом кластерної динаміки ефекту флаксу	44с.
3.5.Майстер-рівняння кластерної динаміки моделювання відпалу	49с.
Висновки	51с.
Список використаних джерел	53с.

## Вступ

При викладанні багатьох дисциплін у вищих учбових закладів як України, так і світа зазраз має місце проблема імплентування в них результати сучасних досліджень у зв'язку з бурхливим розвітком науки і техніки в наш час. Це також актуально для викладання навчальної дисципліни «Загальна фізика» здобувачам першого (бакалаврського) рівня вищої освіти. Доцільним способом розв'язання вказаної проблеми є використання здобутків науковців, які займаються фізичними дослідженнями актуальних матеріалів, конструкцій та приладів. Ось чому очікується позитивний результат від методичних рекомендацій щодо включення результатів дослідження «Мультимасштабне моделювання процесів термомеханічної обробки та опромінення актуальних металів та сплавів», яке виконувалось у кафедрі фізики та кафедрою прикладної математики та інформатики Університету Ушинського з 2019 по 2023 роки. За результатами досліджень було опубліковано 62 наукових праці, із яких 1 монографія, 2 навчальні посібники, 20 міжнародних статей у періодичних виданнях з високим імпаکت - фактором (Scopus -16 статей, Web of Science – 4 статті) та 14 статей у фахових періодичних виданнях, 5 методичних рекомендацій, 28 тез міжнародних конференцій та 6 тез всеукраїнських конференцій. Були розв'язані такі завдання:

1. Доведено можливість використання даних, отриманих при іонному опромінні або у науково-дослідних атомних реакторах до прогнозування кінетики процесів у комерційних атомних реакторів.
2. Виявлено, що відпал є найефективнішим засобом зменшення індукованого опроміненням підвищення межі плинності корпусів атомних реакторів та визначені його параметри, а саме температура та час відпалу.
3. Знайдено закономірності формування текстури та змін параметрів пошкоджуваності титанових листів після їх випрямлення за допомогою знакозмінного вигину.

4. Встановлено, що раціональне використання кристалографічної текстури жароміцного суперсплаву Inconel 718 у процесі виготовлення деталей методом селективного лазерного плавлення у відповідних напрямках при 3D-друку, дозволить отримувати деталі з оптимальним комплексом властивостей.

5. Встановлено, що між параметрами текстури Кернса, з одного боку, та модулями пружності, параметрами пошкоджуваності, границею міцності, умовною границею плинності та відносним подовженням сплаву ZE10 з іншого боку, існують сильні кореляційні зв'язки.

6. Показано, що зміни параметрів пошкоджуваності, пружних та механічних властивостей листів сплаву Mg-5%Li зумовлені в основному кристалографічною текстурою.

Зазначені результати можуть бути використані при викладанні наступних розділів загальної фізики:

Механіка, Оптика та Атомна і ядерна фізика.

Запропоновані методичні рекомендації містять здобутки вчених Університету Ушинського, які доцільно використовувати при викладанні вказаних розділів загальної фізики.

## Розділ I. Механічні властивості твердих тіл

### 1.1. Орієнтаційна залежність модуля Юнга

Експериментальні значення модуля пружності  $E_{exp}$ , виміряні через кожні  $15^\circ$  в площині вальцювання листів досліджуваного сплаву, представлені в табл. 1.1. та 1.2. З табл. 1.1 видно, що має місце анізотропія модуля пружності. Величину анізотропії певної функції  $F$  можемо оцінити коефіцієнтом анізотропії  $\eta$  за співвідношенням

$$\eta = [(F_{max} - F_{min}) / F_{min}] \cdot 100\% \quad (1.1)$$

Коефіцієнт анізотропії модуля пружності вихідного листа сплаву ZE10 склав 7,4 %. Після знакозмінного вигину величина  $\eta$  склала 7% після 0,5 і 1,0 циклів, та 5,9 та 5,4 %, відповідно після 3,0 та 5,0 циклів ЗВ, відповідно. Отже, знакозмінний вигин сприяє зменшенню анізотропії модуля пружності сплаву ZE10.

Аналіз показав, що існує сильна кореляція між усередненим за напрямком значенням модуля пружності  $E_{cp}$  та кількістю  $n$  циклів ЗВ. Відповідне рівняння регресії та коефіцієнт  $R^2$  надійності апроксимації мають вигляд:

$$E_{cp} = 0,05n^2 - 0,38n + 43,96; R^2 = 0,95 \quad (1.2)$$

Таблиця 1.1

Експериментальний модуль пружності  $E_{exp}$  після  
знакозмінного вигину листів сплаву ZE10

Кут з НВ, град.	Модуль пружності $E_{exp}$ , ГПа				
	Число циклів знакозмінного вигину, $n$				
	0	0.5	1.0	3.0	5.0
0	46,3	46,0	45,8	45,0	44,8
15	44,3	44,0	43,8	43,5	43,7
30	43,5	43,1	43,0	43,1	42,8
45	43,1	43,0	42,8	42,7	42,5
60	43,3	43,2	43,0	42,5	42,5
75	43,6	43,5	43,1	43,0	42,8
90	43,9	43,8	43,0	43,3	43,3
$E_{cp}$	44,0	43,8	43,5	43,3	43,2

Оцінимо величину модуля пружності досліджуваного металу у трьох напрямках листів: напрям вальцювання (НВ), поперечний напрям (ПН) та

нормальний напрям до площині листа (НН). Для цього використовуємо параметри текстури Кернса та пружні константи монокристалу досліджуваного сплаву. Раніше у роботі [1] було знайдено значення пружної сталої  $S_{11}$  та комбінації пружних констант

$$a = S_{13} - S_{11} + 0,5 S_{44} \quad (1.3)$$

$$b = S_{11} + S_{33} - 2 S_{13} - S_{44} \quad (1.4)$$

Згідно до [1],

$$\begin{aligned} S_{11} &= 2,287 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}; \\ a &= -0,100 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}; \quad b = 0,128 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1} \end{aligned} \quad (1.5)$$

Нескладні перетворення співвідношень (1.3) - (1.5) дозволило обчислити пружну сталу  $S_{33} = 2,22 \cdot 10^{-11} \text{ Pa}^{-1}$ . У роботі [2] отримано співвідношення, що дозволяє виразити модуль Юнга через індекси Міллера, відношення  $c/a$  та пружні стали гексагонального монокристалу:

$$E_{hkl} = \frac{\left[ h^2 + \frac{(h+2k)^2}{3} + \left(\frac{a}{c}\right)^2 \right]^2}{\left[ S_{11} \left( h^2 + \frac{(h+2k)^2}{3} \right)^2 + S_{33} \left(\frac{a}{c}\right)^4 + (S_{44} + 2S_{33}) \left( h^2 + \frac{(h+2k)^2}{3} \right) \left(\frac{a}{c}\right)^2 \right]} \quad (1.6)$$

В результаті підстановки відповідних величин у співвідношення (1.6) отримуємо, що

$$E(001) = E_c = \frac{1}{S_{33}} = 45,147 \text{ GPa}, \quad (1.7)$$

$$E(100) = E_a = \frac{1}{S_{11}} = 43,730 \text{ GPa}. \quad (1.8)$$

Тепер оцінимо величину модуля пружності листів досліджуваного сплаву в трьох напрямках листа  $E_{НН}$ ,  $E_{НВ}$  та  $E_{ПН}$ , використовуючи значення модуля пружності монокристалу вздовж і впоперек гексагональної осі сплаву ZE10 (1.3) і (1.4), а також відповідні параметри текстури Кернса. Результати розрахунків представлені у табл. 1.2.

Таблиця 1.2

Експериментальні та розрахункові модулі пружності після знакозмінного вигину листів сплаву ZE10

Число циклів ЗВ, n	$E_{\text{НВ}}^{\text{exp}}$ , ГПа	$E_{\text{НВ}}^{\text{calc}}$ , ГПа	$\Delta E/E_{\text{exp}}$ , %	$E_{\text{ПН}}^{\text{exp}}$ , ГПа	$E_{\text{ПН}}^{\text{calc}}$ , ГПа	$\Delta E/E_{\text{exp}}$ , %	$E_{\text{НН}}^{\text{calc}} E_{\text{ND}}^{\text{calc}}$ , ГПа
0	46,3	43,9	5,2	43,9	44,4	-1,1	44,2
0.5	46,0	44,0	4,3	43,8	44,4	-1,4	44,2
1.0	45,8	44,0	3,9	43,5	44,0	-1,1	44,2
3.0	45,0	44,1	2,0	43,3	44,4	-2,5	44,2
5.0	44,8	44,0	1,8	43,3	44,5	-2,8	44,2

Експериментальні значення модуля пружності для зручності порівняння також наведені в табл. 1.2. Видно, що максимальне відхилення розрахункових та експериментальних значень модуля пружності становило 5,2 %.

Експериментально виміряти модуль пружності у напрямку нормалі до площини вальцювання не вдалося через малу товщину листа (1 мм). Знайдена раніше у роботі [1] оцінювальна величина у вихідному листі сплаву ZE10 (до початку ЗВ) становила 43,8 ГПа.

Значення  $E_{\text{НН}}$ , отримане в даній роботі (табл. 1.2), відхиляється від вищевказаної величини на 0,9 %.

Проаналізуємо зміни модуля пружності (табл. 1.2) у зв'язку з кристалографічної текстурою, представленій з допомогою коефіцієнтів текстури Кернса (табл. 1.3). Аналіз показує, що між величинами модуля пружності, з одного боку, та вищезгаданими коефіцієнтами текстури Кернса, з іншого боку, простежуються сильний кореляційний зв'язок. Відповідні рівняння регресії та коефіцієнти надійності апроксимації представлені співвідношеннями

$$E_{\text{НВ}}^{\text{exp}} = -1514,6f_{\text{НВ}}^2 + 563,9f_{\text{НВ}} - 6,0; R^2 = 0,99 \quad (1.9)$$

$$E_{\text{ПН}}^{\text{exp}} = -846,2f_{\text{ПН}}^2 + 841,4f_{\text{НВ}} - 165,1; R^2 = 0,90 \quad (1.10)$$



Для опису макроскопічної поведінки матеріалу при деформації виявилася перспективною концепція накопичення пошкоджень у механіці суцільних середовищ. Для характеристики накопичення пошкоджень використовується так званий параметр пошкоджуваності  $\omega$ , який був запропонований у [3-5], [6-8].

Таблиця 1.3.

Параметри текстури Кернса сплаву магнію ZE10 у вихідному стані та після різного числа циклів ЗВ

Число циклів, n	Параметри текстури Кернса				
	$f_{\text{HH}}^{(1)}$	$f_{\text{HH}}^{(2)}$	$f_{\text{HH}}^{(\text{cp})}$	$f_{\text{HV}}$	$f_{\text{ПН}}$
0	0.340	0.340	0.340	0.176	0.484
0.5	0.322	0.324	0.323	0.203	0.474
1.0	0.322	0.318	0.320	0.208	0.472
3.0	0.326	0.306	0.316	0.217	0.467
5.0	0.323	0.315	0.319	0.153	0.528

## 1.2. Орієнтаційна залежність параметр пошкоджуваності

Параметр пошкоджуваності  $0 \leq \omega \leq 1$  є мірою змін мікроскопічних змін у структурі матеріалу внаслідок виникнення та накопичення мікродефектів під дією робочих навантажень. Параметр пошкоджуваності інтерпретується як відносне зменшення ефективної несучої площі поперечного перерізу металу через накопичені пошкодження. Поступове зменшення ефективної площі поперечного перетину через пошкодження викликає деградацію матеріалу і характеризується параметром пошкоджуваності

$$\omega = (S - S_0)/S_0 \quad (1.11)$$

де  $S_0$  і  $S$  – початкова площа поперечного перерізу зразка і поточна площа ушкодженого зразка, відповідно;  $(S_0 - S)$  - площа, зайнята мікропорожнечами та мікротріщинами.

При такій трактовці  $\omega$  можна визначити за зміною модуля Юнга. Якщо прийняти гіпотезу еквівалентної деформації [8], то параметр пошкоджуваності  $\omega_1$  може бути знайдений за співвідношенням

$$\omega_1 = 1 - \frac{E}{E_0}, \quad (1.12)$$

де  $E_0$  і  $E$  модуль пружності неушкодженого зразка й поточний модуль, відповідно.

За моделлю еквівалентної пружної енергії [7] параметр пошкоджуваності  $\omega_2$  є тензором четвертого рангу

$$\omega_2 = 1 - \left(\frac{E}{E_0}\right)^{1/2} \quad (1.13)$$

Лише один компонент тензора в (1.13) відрізняється від нуля при одновісному розтягу [7] за зміною модуля пружності зразка ортотропної симетрії, оскільки, як показав Л. Качанов шляхом мікромеханічного аналізу [5], будь яка пружна анізотропія є ортотропною навіть у присутності великої кількості пошкоджень, які взаємодіють між собою. Параметр пошкоджуваності, знайдений моделлю еквівалентної деформації Леметра [6], дає більш високі значення параметра пошкодження в порівнянні з моделями, заснованими на моделі еквівалентної пружної енергії [7, 8] і які дають дуже схожі числові значення, як це було показано експериментально [9]. Тому оцінка параметра пошкоджуваності  $\omega_2$  за співвідношенням (1.12) є кращою в порівнянні з (1.11) при аналізі анізотропії пошкоджуваності листового матеріалу [9].

Кристалографічна текстура, яка формується в процесі пластичної деформації, також має істотний вплив на накопичення структурних дефектів і, відповідно, пошкоджень [10].

Слід зазначити, що величина параметра пошкоджуваності зразка, визначені в різний спосіб, часто розрізняється [9].

Значення параметрів пошкоджуваності  $\omega_1$  і  $\omega_2$ , визначені за співвідношеннями (1.11) і (1.12) і даними табл. 1.2. Результати представлені в табл. 1.4 і 1.5.

Таблиця 1.4

Параметри пошкоджуваності  $\omega_1$  після знакозмінного вигину листів сплаву ZE10

Кут з НВ, град.	$\omega_1 = 1 - E/E_0, \%$				
	Кількість циклів знакозмінного вигину, $n$				
	0	0,5	1,0	3,0	5,0
0	0	0,65	1,08	2,81	3,24
15		0,68	1,13	1,81	1,35
30		0,92	0,69	0,92	1,61
45		0,23	0,46	0,93	1,39
60		0,23	1,39	1,85	1,85
75		0,23	1,15	1,38	1,83
90		0,23	2,05	1,37	1,37
$\omega_1^{cp}$		0	0,45	1,14	1,59

Таблиця 1.5

Параметри пошкоджуваності  $\omega_2$  після знакозмінного вигину листів сплаву ZE10

Кут з НВ, град.	$\omega_2 = 1 - (E/E_0)^{1/2}, \%$				
	Кількість циклів знакозмінного вигину, $n$				
	0	0,5	1,0	3,0	5,0
0	0	0,32	0,54	1,41	3,24
15		0,34	0,57	0,91	1,35
30		0,46	0,35	0,58	1,61
45		0,12	0,23	0,58	1,39
60		0,12	0,70	0,93	1,85
75		0,11	0,58	0,46	1,83
90		0,11	1,03	0,69	1,37
$\omega_2^{cp}$		0	0,23	0,57	0,80

З табл. 1.5 видно, що зі збільшенням числа циклів ЗВ величина параметрів пошкоджуваності збільшується. При цьому має місце анізотропія параметрів пошкоджуваності. Максимальне значення коефіцієнтів анізотропії, визначених за співвідношенням (1.2), спостерігаються після 0,5 циклу ЗВ

(303,7 % та 304,3 % для  $\omega_1$  і  $\omega_2$ , відповідно). Зі збільшенням кількості циклів ЗВ анізотропія зменшується. Мінімальна анізотропія параметрів пошкоджуваності (132,7 % та 133,8 % для  $\omega_1$  і  $\omega_2$ , відповідно) спостерігається після 5 циклів ЗВ. Це може свідчити про те, що пошкодження розміщуються за об'ємом зразків рівномірно та мають кулеподібну форму, тобто пошкодження є, скоріше, мікропорожнечі, а не мікротріщини.

Величини параметрів пошкоджуваності, усереднені за всіма напрямками листів,  $\omega_1^{\text{cp}}$  та  $\omega_2^{\text{cp}}$ , збільшується зі збільшенням кількості циклів ЗВ (табл. 1.4, 1.5). Аналіз показав, що має місце значущі кореляційні зв'язки між усередненими за напрямками листів досліджуваного сплаву значеннями параметрів пошкоджуваності  $\omega_1^{\text{cp}}$  та  $\omega_2^{\text{cp}}$ , з одного боку, й числом  $n$  циклів ЗВ, з іншого боку (табл. 1.5, 1.6). Відповідні рівняння регресії і коефіцієнти надійності апроксимації  $R^2$  мають вид:

$$\omega_1^{\text{cp}} = -0,11n^2 + 0,87n - 0,10; R^2 = 0,95 \quad (1.14)$$

$$\omega_2^{\text{cp}} = -0,06n^2 + 0,44n - 0,05; R^2 = 0,95 \quad (1.15)$$

Це свідчить про те, що основною причиною накопичення пошкоджень є знакозмінний вигин.

### **1.3. Орієнтаційна залежність межі міцності, межі плинності та відносного подовження.**

Експериментальні величини межі міцності  $\sigma_B$ , умовної межі плинності  $\sigma_{0,2}$  та відносного подовження  $\varepsilon = \Delta l/l$  для різних напрямків вихідного листа та листів після різної кількості циклів ЗВ досліджуваного сплаву представлено у табл. 1.6-1.8.

Таблиця 1.6

Межа міцності  $\sigma_B$  після знакозмінного вигину листів сплаву ZE10

Кут з НВ, град.	Межа міцності $\sigma_B$ , МПа				
	Число циклів ЗВ, n				
	0	0.5	1.0	3.0	5.0
0	246.0	250.0	252.0	256.0	250.0
45	231.0	219.0	219.0	221.0	229.0
90	216.0	221.0	225.0	234.0	214.0
$\sigma_B^{cp}$	232,2	230,0	232,0	237,0	234,0

Таблиця 1.7

Межа плинності  $\sigma_{0,2}$  після знакозмінного вигину листів сплаву ZE10

Кут з НВ, град.	Межа плинності $\sigma_{0,2}$ , МПа				
	Число циклів ЗВ, n				
	0	0.5	1.0	3.0	5.0
0	174.0	174.0	102.0	89.0	173.0
45	132.0	99.0	88.0	100.0	89.0
90	91.0	88.0	89.0	91.0	96.0
$\sigma_{0,2}^{cp}$	132,5	120,3	93,0	95,0	98,0

Таблиця 1.8

Відносне подовження  $\varepsilon = \Delta l/l$  після знакозмінного вигину листів сплаву ZE10

Кут з НВ, град.	Відносне подовження $\varepsilon = \Delta l/l$ , %				
	Число циклів ЗВ, n				
	0	0.5	1.0	3.0	5.0
0	23.1	21.0	20.5	19.1	28.3
45	28.0	36.1	19.1	35.6	25.0
90	33.4	32.6	33.0	31.0	34.3
$\varepsilon_{cp}$	28,3	29,0	25,3	24,9	26,0

Спостерігається анізотропія межі міцності, умовної межі плинності та відносного подовження як у вихідних листах досліджуваного сплаву, так і в листах сплаву після знакозмінного вигину (табл. 1.6-1.8). Так для межі міцності (табл. 1.7) максимальне значення коефіцієнту анізотропії  $\eta$ , розрахований за співвідношенням (2.2), спостерігається у вихідному листі (13,9 %). Зі збільшенням кількості циклів ЗВ величина  $\eta$  зменшується,

досягаючи мінімального значення 9,4 % після 3 циклів ЗВ. Після 5 циклів ЗВ коефіцієнт анізотропії трохи збільшився до 12,1 %.

Усереднена за всіма напрямками листа величина межі міцності росте від 231,2 МПа (у вихідному листі) до максимального значення 237,0 МПа (в листі після 3 циклів ЗВ), а після 5 циклів ЗВ декілька зменшується до 234 МПа (табл. 1.7).

Умовна межа плинності вихідного листа досліджуваного сплаву характеризується значної анізотропією (90%). У процесі знакозмінного вигину зі збільшенням кількості циклів анізотропія умовної межі плинності суттєво зменшується до мінімального значення 12,4 % після 3 циклів ЗВ. Після 5 циклів ЗВ коефіцієнт анізотропії знов збільшився до 29,2 %. Величина умовної межі плинності, усереднена за всіма напрямками листів, зменшилася від 120 МПа у вихідному листі до 98 МПа зі збільшенням кількості циклів ЗВ від 0 до 5 (табл. 1.8).

Коефіцієнт анізотропії відносного подовження  $\varepsilon = \Delta l/l$  досліджуваного сплаву, визначений за співвідношенням (3.3) зростає від 42,7 % у вихідному листі до своєї максимальної величини 90,5 % після 1 циклу ЗВ (71,9 %). Зі збільшенням кількості циклів ЗВ величина  $\varepsilon = \Delta l/l$  зменшується до свого мінімуму 20,8 % після 5 циклів ЗВ. Величина  $\varepsilon = \Delta l/l$ , усереднена за всіма напрямками листів, має максимальне значення 29,0 % після 0,5 циклу знакозмінного вигину, досягаючи мінімального значення 24,9 % після 3 циклів ЗВ, а після 5 циклів ЗВ декілька збільшується до 26,0 % (табл. 1.9).

Аналіз показав, що між механічними характеристиками, з одного боку, та вищезгаданими коефіцієнтами текстури Кернса, з іншого боку, простежуються сильні кореляційні зв'язки. Відповідні рівняння регресії та коефіцієнти надійності апроксимації представлені співвідношеннями (1.16) - (1.21):

$$\sigma_{B(HP)}^{exp} = 4640,5f_{HP}^2 - 1584,7f_{HP} + 381,0; R^2 = 0,99 \quad (1.16)$$

$$\sigma_{B(PH)}^{exp} = 17176,0f_{PH}^2 - 17387,0f_{PH} + 4606,3; R^2 = 0,94 \quad (1.17)$$

$$\sigma_{0,2(\text{НП})}^{\text{exp}} = -48102,0f_{\text{НВ}}^2 + 16566,0f_{\text{НВ}} - 1239,5; R^2 = 0,76 \quad (1.18)$$

$$\sigma_{0,2(\text{ПН})}^{\text{exp}} = 2047,1f_{\text{ПН}}^2 + 1932,7f_{\text{ПН}} + 545,8; R^2 = 0,84 \quad (1.19)$$

$$\varepsilon_{(\text{НВ})}^{\text{exp}} = 1437,3f_{\text{НВ}}^2 - 664,0f_{\text{НВ}} + 96,0; R^2 = 0,98 \quad (1.20)$$

$$\varepsilon_{(\text{ПН})}^{\text{exp}} = -1916,6f_{\text{ПН}}^2 + 1952,8f_{\text{ПН}} - 462,5; R^2 = 0,84 \quad (1.21)$$

Значення модуля пружності листів досліджуваного сплаву магнію, виміряні і розраховані в НН, НП і ПН за співвідношеннями типу (2.3), приведено в табл. 1.9. При розрахунках використовували значення констант пружності монокристалу сплаву Mg – 5 % (мас.) Li  $S_{33} = 1.77 \cdot 10^{-11} \text{Pa}^{-11}$  та  $S_{11} = 2.41 \cdot 10^{-11} \text{Pa}^{-11}$  визначених раніше у [11]. Так як  $\frac{1}{S_{33}} = E_{0001} = E_c$ , та  $\frac{1}{S_{11}} = E_{10\bar{1}0} = E_a$ , то маємо значення модуля пружності монокристала досліджуваного сплаву уздовж гексагональної осі  $c$  та уздовж осі  $a$ , відповідно

$$E_c = 56,5 \text{ ГПа}, \quad (1.22)$$

$$E_a = 41,5 \text{ ГПа}. \quad (1.23)$$

Таблиця 1.9

Розрахункові та експериментальні значення модуля пружності  
листів сплаву Mg – 5 % (мас.) Li

	Число циклів, n	$E_{\text{НН}}^{\text{розрах.}}$ , ГПа	$E_{\text{НН}}^{\text{експ.}}$ , ГПа	$E_{\text{НН}}^{\text{розрах.}}$ , ГПа	$E_{\text{НВ}}^{\text{експ.}}$ , ГПа	$\frac{\Delta E}{E}$ , %	$E_{\text{НН}}^{\text{розрах.}}$ , ГПа	$E_{\text{ПН}}^{\text{експ.}}$ , ГПа	$\frac{\Delta E}{E}$ , %
Після екструзії	-	45,1	-	43,2	40,6	6,4	51,2	47,4	8,0
Після знако- змінного вигину	0	47,4	-	47,4	50,3	5,8	47,9	52,9	9,6
	0.5	47,8	-	44,9	48,2	6,9	46,8	49,6	5,6
	1.0	47,5	-	44,2	46,8	6,3	47,4	51,9	8,7
	3.0	47,6	-	44,3	44,2	0,3	47,6	46,2	3,0
	5.0	47,7	-	43,7	46,2	5,5	48,1	47,6	1,1

З табл. 1.9 видно, що розрахункові значення модуля пружності листів досліджуваного сплаву магнію, отримані з використанням відповідних вищезазначених даних його монокристалу, відрізняються від експериментальних величин не більше ніж на 10 %.

#### 1.4. Модулі пружності монокристалів

Тепер спробуємо вирішити зворотну задачу та розрахуємо модуль пружності монокристалу сплаву Mg – 5 % (мас) Li за даними модуля пружності листів сплаву, визначеними експериментально в напрямку вальцювання та поперечному напрямку (табл. 1.9). Розрахунки показали, що усереднені значення модулів пружності монокристала ( $E_c^{\text{розрах}}$ ,  $E_a^{\text{розрах}}$ ) мають такі значення:

$$E_c^{\text{розрах}} = 53,8 \text{ ГПа}, \quad (1.24)$$

$$E_a^{\text{розрах}} = 44,6 \text{ ГПа}. \quad (1.25)$$

Розрахункові величини (1.24) і (1.25) відрізняються від відповідних значень (2.23) і (2.24) на 4,8 % і 7,5 %, відповідно.

Розрахунки для меж міцності зразків, вирізаних у НВ та ПН, аналогічні проведеним вище для модуля пружності, показали, що усереднені значення меж міцності монокристала дослідженого сплаву магнію вздовж його осей  $c$  ( $\sigma_{\text{В розрах.}}^c$ ) та  $a$  ( $\sigma_{\text{В розрах.}}^a$ ) мають такі значення:

$$\sigma_{\text{В розрах.}}^c = 184 \text{ МПа}, \quad (1.26)$$

$$\sigma_{\text{В розрах.}}^a = 178 \text{ МПа}. \quad (1.27)$$

Усереднені значення меж плинності монокристала дослідженого сплаву магнію вздовж його осей  $c$  ( $\sigma_{0.2 \text{ розрах.}}^c$ ) та  $a$  ( $\sigma_{0.2 \text{ розрах.}}^a$ ) мають такі значення:

$$\sigma_{0.2 \text{ розрах.}}^c = 122 \text{ МПа}, \quad (1.28)$$

$$\sigma_{0.2 \text{ розрах.}}^a = 118 \text{ МПа}. \quad (1.29)$$



## Розділ II. Дифракція рентгенівських променів.

### 2.1. Дослідження кристалографічної текстури матеріалів з гексагональною симетрією

Кристалографічну текстуру вивчали рентгенівським методом [12,13] з побудовою обернених полюсних фігур (ОПФ) напрямку нормалі (НН) та напрямку вальцювання (НВ) у звичайній геометрії з фокусуванням за Бреггом-Брентано (рис. 2.1) [14]/

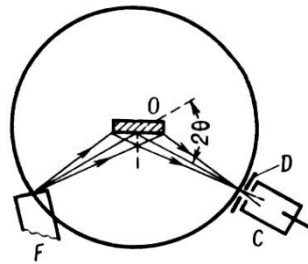


Рис. 2.1. Схема зйомки текстури за Бреггом – Брентано. *F* – фокус рентгенівської трубки; *O* – плоский зразок; *D* – щілина лічильника; *C* – лічильник;  $2\theta$  – кут відбиття

Зразки без текстури виготовили з дрібної рекристалізованої тирси досліджуваних металів. Для зйомки ОПФ НВ тонких листів зразки набирали у вигляді пакета наклеєних один на одного смужок шириною 3 мм, вирізаних з листів (набірні зразки). Для запобігання небажаного впливу на текстуру зразків поверхневий спотворений шару товщиною 0,1 мм знищували за допомогою хімічного полірування. Полюсні фігури деформованих знакозмінним вигином зразків знімали з двох сторін після відповідного числа циклів.

Для побудови відповідних ОПФ використали результати рентгенівської  $\theta$  -  $2\theta$  дифракції досліджуваних сплавів та відповідних еталонів у фільтрованому  $K_{\alpha}Mo$  випромінюванні на дифрактометрі ДРОН-3м в однакових геометричних умовах зйомки. Як полюсну щільність використовували відносини інтегральних інтенсивностей ліній досліджуваних зразків до інтенсивностей відповідних ліній дифракції еталона. При побудові ОПФ використовували нормування за Моррісом [15].

Внесок у загальні властивості полікристалу в якомусь фіксованому напрямку кристалів визначається орієнтацією нормалі до ізотропної площини, що віднесена до системи координат зразка. Для гексагонального кристала це вісь  $c$ , яка, як відомо, за допомогою індексів Браве-Міллера позначається як  $[0001]$ . Обертання кристалів навколо цієї осі на анізотропію властивостей не впливає. Вісь, яка перпендикулярна до осі  $[0001]$ , позначається через  $a$ .

Для одиночних гексагональних кристалів внесок в об'ємну властивість залежить від кута між заданим напрямком і напрямом кристала  $[0001]$  відповідно до наступного рівняння [16]:

$$P(\varphi)_{ref} = P_c \cos^2 \varphi + P_a (1 - \cos^2 \varphi), \quad (2.1)$$

де  $P(\varphi)_{ref}$  - властивість в обраному напрямку,  $P_a$  і  $P_c$  - властивість монокристала в напрямку, перпендикулярному і паралельному до напрямку  $[0001]$ , відповідно,  $\varphi$  - кут між обраним напрямом і  $[0001]$ . Таким чином, якщо об'ємна частка  $V_i$  кристалів, орієнтованих своїм напрямком  $[0001]$  під кутом нахилу  $\varphi_i$  до обраного напрямку, відома з рентгенівських даних, рівняння (2.1) дає їхній внесок у загальну властивість зразка. Підсумовування від  $\varphi_i = 0$  до  $\varphi_i = \frac{\pi}{2}$  дає об'ємну властивість у обраному напрямку відповідно до рівняння:

$$P(\varphi_i)_{ref} = P_c \sum_i V_i \cos^2 \varphi_i + P_a \sum_i V_i (1 - \cos^2 \varphi_i) \quad (2.2)$$

Підсумок  $\sum_i V_i = 1$ . Вираз  $\sum_i V_i \cos^2 \varphi_i = f_j$  називається текстурним параметром Кернса [17]. З урахуванням цього, то можна записати:

$$P(\varphi_i)_{ref} = f_j P_c + (1 - f_j) P_a. \quad (2.3)$$

Текстурний параметр Кернса для даного напрямку полікристалічного зразка можна визначити з обернених полюсних фігур трьох головних напрямків листового матеріалу (напрямку нормалі до площини листа (ОПФ НН), напрямку вальцювання (ОПФ НВ) та поперечного напрямку листа (ОПФ ПН)), відповідно,  $f_{НН}$ ,  $f_{НВ}$ ,  $f_{ПН}$ .

Тензорні властивості (наприклад, механічні напруження, або модулі пружності) можуть бути знайдені за співвідношенням (2.4), як показав Кернс [17]. При цьому, сума параметрів  $f_j$  в трьох головних напрямках листового

матеріалу з гексагональною ґраткою має бути рівною одиниці. Якщо ж значенні параметрів  $f_j$  дорівнює  $1/3$  в кожному з головних напрямків листа, то це свідчить про ізотропію властивостей. Отже, знаючи два з трьох параметрів Кернса (наприклад, якщо ми визначили  $f_{\text{НН}}$  та  $f_{\text{НВ}}$ ), то третій параметр  $f_{\text{ПН}}$  може бути знайдений з рівняння:

$$f_{\text{НН}} + f_{\text{НВ}} + f_{\text{ПН}} = 1. \quad (2.4)$$

Визначення параметрів текстури Кернса з оберненої полюсній фігури може бути пояснене, якщо відзначити взаємозв'язок між двома типами полюсних фігур. Це схематично показано на рис. 2.2. Всі кристали, орієнтовані в смузі  $\Delta\varphi$  оберненої полюсної фігури, повинні мати полюси  $\langle 0001 \rangle$ , нахилені на  $\varphi$  градусів від нормалі до поверхні зразка.

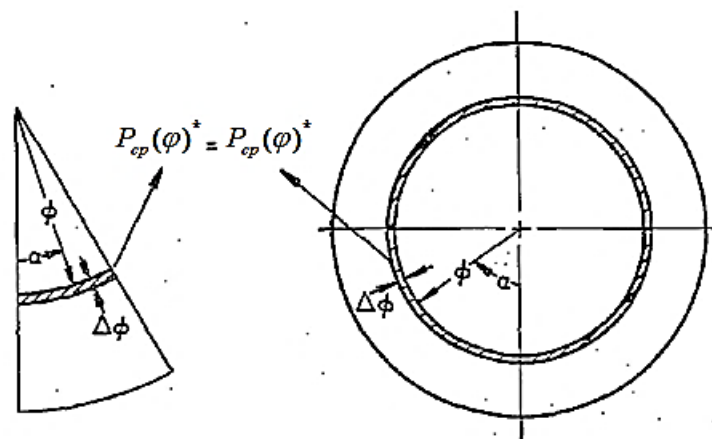


Рис. 2.2. Співвідношення середніх інтенсивностей на ОПФ та ППФ (0001):  $P_{cp}(\varphi)^*$  відноситься до  $P_{cp}(\varphi)^*$  на рівні  $\alpha$ , що відповідає  $360^\circ$  на ППФ (0001) і  $30^\circ$  на ОПФ

Отже, усі полюси  $\langle 0001 \rangle$  повинні лежати у відповідній смузі  $\Delta\varphi$  прямої полюсної фігури. Залежності полюсної щільності на ОПФ  $P_{\varphi i}$  від  $\varphi$  може бути побудовані шляхом визначення густини орієнтації в кожній із серій смуг  $\Delta\varphi$  між  $0$  і  $90$  градусами  $\varphi$  на оберненій полюсній фігурі [1742].

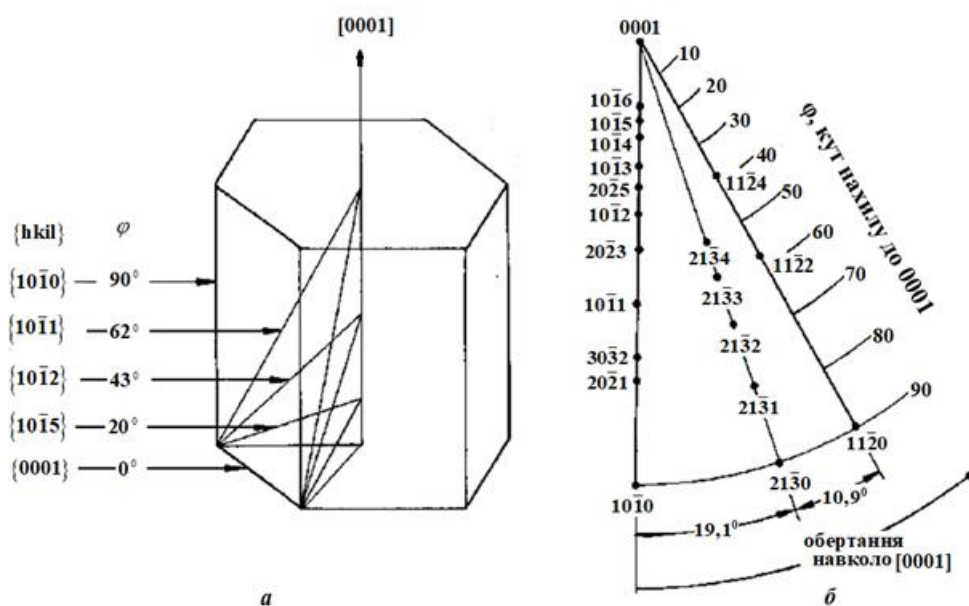


Рис. 2.3. Нахил між  $\{0001\}$  та  $\{hk\bar{l}\ell\}$  (а); стандартна проекція для  $\alpha$ -Zr,  $c/a = 1,59$  (б) [1742]

Однак, як показано на рис. 2.3, площини дифракції розташовуються вздовж ліній тільки в трьох положеннях:  $0^\circ$  ( $10\bar{1}\ell$ ),  $19,1^\circ$  ( $21\bar{3}\ell$ ) і  $30^\circ$  ( $11\bar{2}\ell$ ). Крім того, немає дифракційних площин між значеннями  $\varphi$  0 і  $58,3^\circ$  вздовж ( $21\bar{3}\ell$ ) лінії та між 0 і  $38,5^\circ$  ( $11\bar{2}\ell$ ) лінії. Таким чином, значення середньої густини орієнтації в кожній  $\Delta\varphi$  смузї може бути лише наближеним. Якщо припустити, що інтенсивність змінюється лінійно з  $\alpha$  в інтервалі  $19,1^\circ$  між ( $10\bar{1}\ell$ ) і ( $21\bar{3}\ell$ ) та в інтервалі  $10,9^\circ$  між ( $21\bar{3}\ell$ ) і ( $11\bar{2}\ell$ ), то середня полюсна щільність при кутах  $\varphi$  вище  $58,3^\circ$  може бути представлена як:

$$P_{\text{ср}\varphi} = \frac{1}{30} \left[ 19,1 \left( \frac{P_1 + P_2}{2} \right) + 10,9 \left( \frac{P_2 + P_3}{2} \right) \right], \quad (2.5)$$

де  $P_1$ ,  $P_2$  та  $P_3$  є інтенсивності кривих ( $10\bar{1}\ell$ ), ( $21\bar{3}\ell$ ) та ( $11\bar{2}\ell$ ), відповідно при фіксованому куті  $\varphi$ . При кутах  $\varphi$  від  $38,5$  до  $50,6$  градусів використовується просте середнє значення кривих ( $10\bar{1}\ell$ ) та ( $11\bar{2}\ell$ ). Нижче  $38,5$  градусів визначена лише крива ( $10\bar{1}\ell$ ). Тому необхідно припустити, що вона є середнім значенням у цьому регіоні. Це припущення справедливе для гексагональних

металів, для яких відношення  $c/a \leq 1,33$  (наприклад, сплави Mg, Ti), досліджених у даній роботі, оскільки криві інтенсивності трьох вищезазначених сімейств, сходяться в області малих кутів  $\varphi$  нахилу до осі гексагональної призми. Для гексагональних металів та сплавів з  $c/a \geq 1,63$  (наприклад, Zn та його сплави), коли це неправильне припущення, то помилка в розрахунках властивостей невелика, як показано у [17].

Наведена полюсна щільність  $P_i$  пропорційна відношенню інтенсивності  $i$ -тої дифракційної лінії у текстурованому зразку  $I_i$  до інтенсивності відповідної лінії  $I_R$  зразку без текстури:

$$P_i = K \frac{I_i}{I_R}, \quad (2.6)$$

де нормуючий множник  $K$  за Моррисом [15] визначається за формулою

$$K = \frac{1}{\sum_{\Delta} A_i \cdot (I_i/I_R)}, \quad (2.7)$$

де  $\sum_{\Delta} A_i = 1$ . Значення коефіцієнтів  $A_i$  приведено у [18]. Отже полюсна щільність визначається як

$$P_i = \frac{I_i}{\sum_{\Delta} A_i \cdot (I_i/I_R)}. \quad (2.8)$$

Отже, коефіцієнти текстури Кернса [17]  $f_j$  (індекс  $j$  означає відповідний напрямок у зразку НН, НВ або ПН) є параметрами, що показують ступінь збігу  $c$  - осей гексагональних зерен із заданим геометричним напрямком у полікристалі. Ці параметри можна визначити з ОПФ за співвідношенням

$$f_j = \langle \cos^2 \alpha_i \rangle_j = \sum_i A_i P_{ji} \cos^2 \alpha_i, \quad (2.9)$$

де  $P_i = \frac{I_i}{\sum_{\Delta} A_i \cdot (I_i/I_R)}$ ;  $I_i/I_R$  – відношення інтегральної інтенсивності  $i$ -того рефлексу на  $j$ -тій ОПФ до відповідного значення інтенсивності рефлексу зразка без текстури  $I_R$ ;  $A_i$  – статистичні ваги  $i$ -тих рефлексів ( $\sum_{\Delta} A_i = 1$ ) [15]. Множники  $A_i$  показують, яка частка площі поверхні стереографічного трикутника навколо нормалі належить  $i$ -тому рефлексу відповідної ОПФ [17];  $\alpha_i$  означає, на якій кут відхиляється від гексагональної осі  $c$   $i$ -тий кристалографічний напрямок для  $j$ -того напрямку в зразку.

Об'ємний внесок у властивість кристалів, осі яких нахилені над кут  $\varphi$  до

визначеного напрямку, якщо врахувати, що внесок зерен полікристалу у об'ємну властивість відповідно до їх об'ємної частці,  $V_i$ , можна знайти, як це описано в вище, за співвідношенням [18].

Експериментальні ОПФ досліджуваного сплаву ZE10 представлені на рис. 2.4.

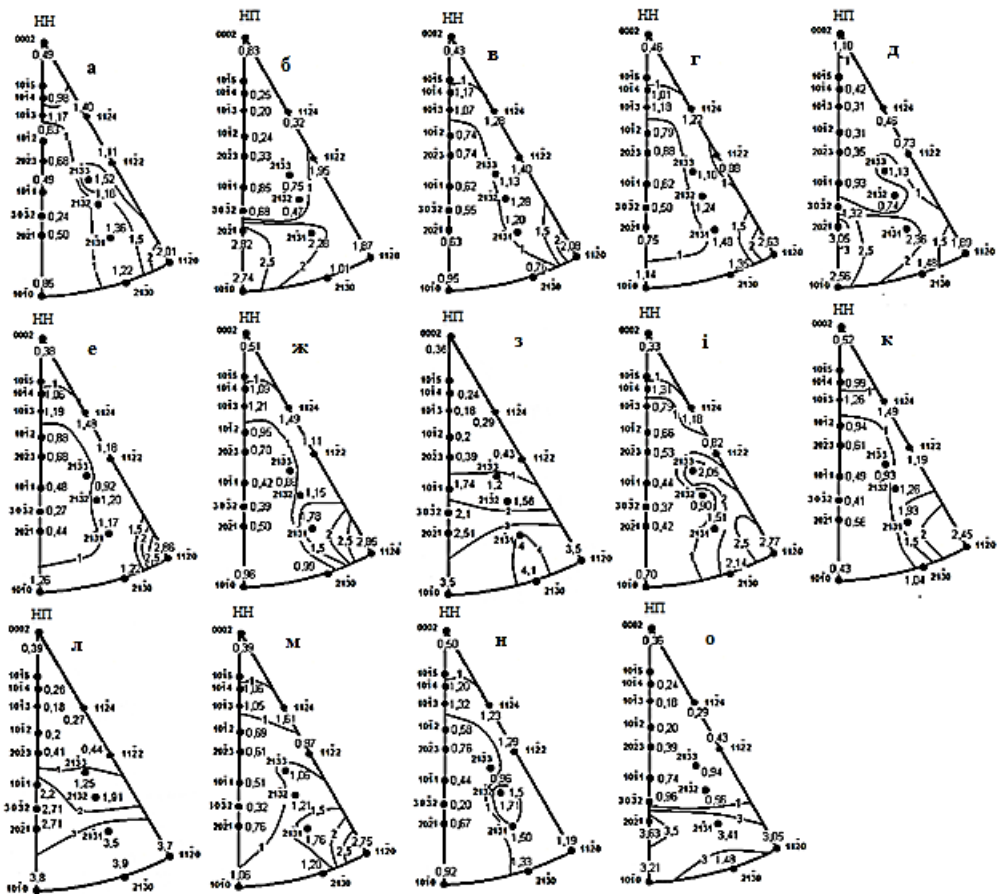


Рис. 2.4. Експериментальні ОПФ сплаву ZE10: (а, б) – вихідний лист; (в – д) – вигин 0,5 циклу; (е – з) – вигин 1 цикл; (і - л) - вигин 3 цикли; (м- о) - вигин 5 циклів; (г, ж, і, н) – розтягнута сторона листів; (в, д, з, м) - стислий бік листів

Текстура вихідного зразка сплаву ZE10 (рис. 2.4, а, б) характеризується широким переважним розсіюванням нормалей до площини базису в ПН. Максимальний кут відхилення становив  $90^\circ$ . Проміжні максимуми відхилення гексагональної призми від ПН спостерігаються як у бік ПН на  $40^\circ$ , так і у бік НВ на  $40^\circ$ , на відміну від текстури, яка зазвичай формується у Mg, Ti та Zr.

Залежно кількості циклів ЗВ спостерігаються зміни у характері розсіювання текстури (рис. 2.4, в - н). Змінюються також значення полюсної

щільності на ОПФ. Спостерігаються зміни у розподілі полюсної щільності на різних стадіях ЗВ. Це свідчать про протіканні деформаційних процесів ковзання і двійникування [19].

При аналізі полюсної густини на ОПФ протилежних сторін листів після різного числа циклів ЗВ були виявлені деякі відмінності (рис. 2.4, с, d; f, g; i, j; l, m). Виявлені відмінності у розподілі полюсної щільності на ОПФ НН протилежних сторін листів після різної кількості циклів ЗВ відображаються на величині параметрів текстури Кернса, розрахованих з ОПФ НН протилежних сторін листів після ЗВ. Зазначені відмінності пов'язані з тим, що на опуклій стороні листів поверхневі шари зразка відчувають розтягувальну деформацію, а шари на протилежному боці листів - деформацію стиску, і навпаки, при вигині у протилежний бік. Подібні розбіжності були виявлені раніше в роботі [2045] при дослідженні характеристик кристалографічної текстури смуг сплаву Zr-2,5% Nb, які були відрізані від трубки і потім випрямлені. [2045].

Текстурні параметри Кернса були визначені нами з ОПФ на рис. 2.4. Значення  $A_i$  значення були взяті з [18]. Для розрахунку значення кутів за відомими формулами [21] потрібно знати відношення параметрів кристалічних ґрат досліджуваного сплаву. За даними для сплаву магнію ZE10 = 1,622. Аналогічний результат отримали також автори [22].

Обернені полюсні фігури сплаву Mg-5 % (мас.) Li представлені на рис. 2.5. Текстура листів досліджуваного сплаву після обробки № 1\* характеризується наявністю відносно слабкого базисного компонента (полюсна щільність 1,14 на рис. 2.5, а) та дуже сильним компонентом ( $10\bar{1}0$ ) (полюсна щільність 6,64 на рис. 2.5, а). При цьому на ОПФ НВ (рис. 2.5, б) спостерігається два сильних максимуму полюсної щільності поблизу полюса  $\langle 10\bar{1}0 \rangle$  величиною 5,45 та  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  величиною 6,34. Текстура може бути описана комбінацією слабкого базисного центрального типу та відхиленого на  $90^\circ$  у ПН базисного типу. При цьому з НВ такого листа збігаються, в основному (з розсіюванням), кристалографічні напрямки  $\langle 10\bar{1}0 \rangle$  та  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ .

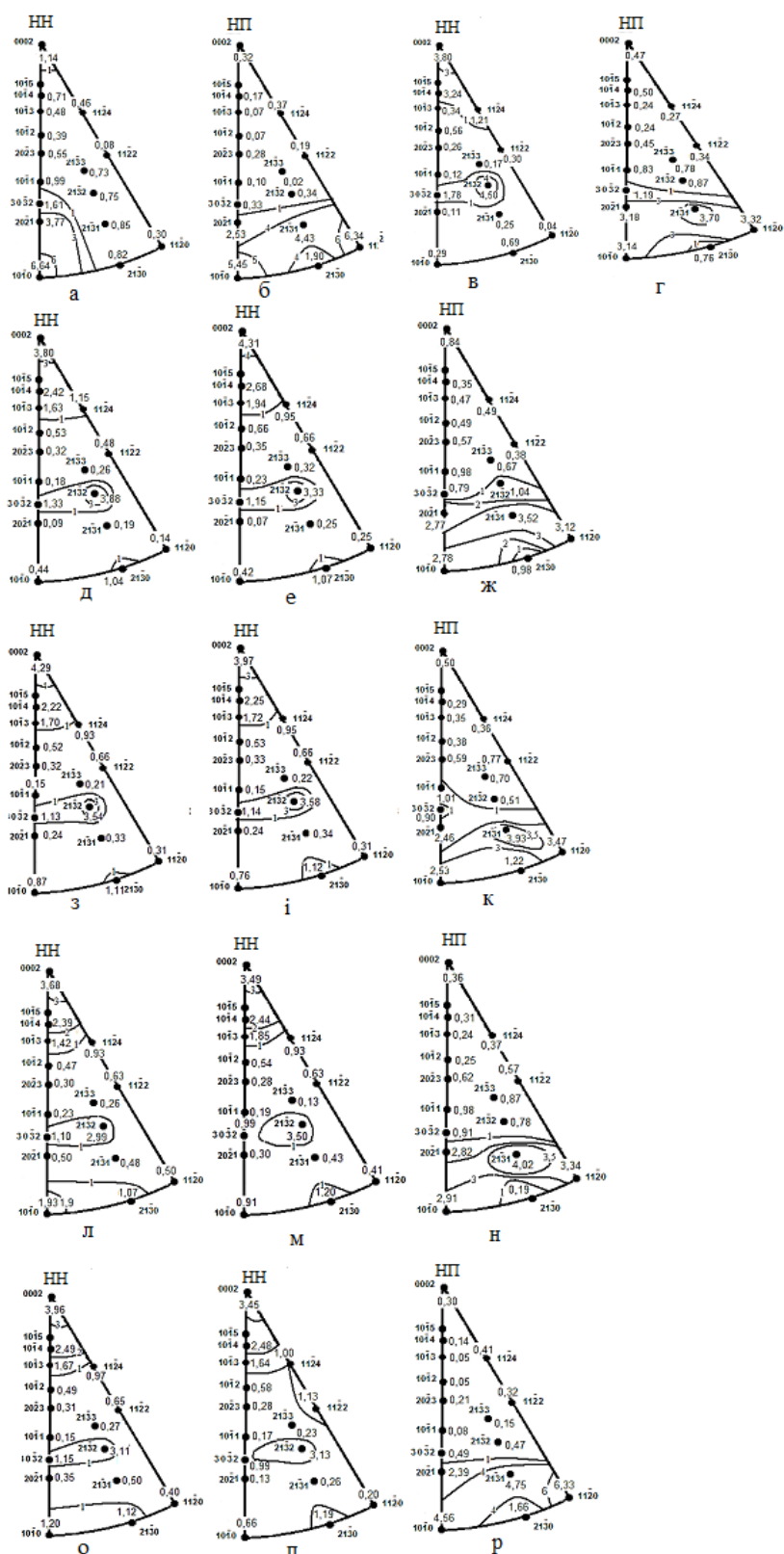
На рис. 2.5 (в, г) представлено ОПФ НН та ОПФ НВ досліджуваного

сплаву після обробки № 2\*\*.

\* Обробка №1 – вихідні листи були отримані обробкою [23], яка полягала в екструзії злитків при температурі 350°C, після чого була отримана плита товщиною 6 мм та шириною 60 мм. Потім сляб послідовно вальцювали в поздовжньому напрямку до товщини 4,5 мм за 2 проходи в поєднанні з нагріванням до 350°C після кожного проходу. Подальше вальцювання до товщини 2 мм відбувалося у поперечному напрямку у поєднанні з нагріванням до 350°C після кожного проходу. Ступінь деформації кожного проходу становила приблизно 10 %. Починаючи з товщини 2 мм, напрямок вальцювання змінювався на 90° після кожного проходу зі ступенем деформації приблизно 10% у поєднанні з нагріванням до 350° С, таким чином отримували листи товщиною 1 мм (вихідні листи).

\*\* Обробка №2 – отримані після обробки №1 листи піддавали подальшому знакозмінному вигину на 0,5; 1,0; 3,0 і 5,0 циклів.





2.5. Експериментальні обернені полюсні фігури сплаву Mg-5 % (мас.) Li: (а, б) – після обробки №1; (в, г) – після обробки № 2; після знакозмінного вигину на: 0,5 - (д – ж); 1 - (з - к); 3 - (л - н); 5 - (о - р) циклів; (д, і, м, п) - розтягнута сторона листів; (е, з, л, о) - стиснута сторона листів  
Видно, що гексагональна вісь призми відхилена від НН до площини прокатки приблизно на  $0-15^\circ$  і  $70^\circ$  у бік ПН (рис. 2.5, в, д, е, з, і). Текстура

складається з комбінації базисного компонента з розсіянням до  $15^\circ$  у бік ПН та відносно сильного компонента ( $21\bar{3}2$ ). У чистому магнії при тих самих умовах формується текстура базисного центрального типу.

Легування магнії літієм сприяє зміні співвідношення механізмів деформації, що впливає на текстуру. Легування магнії літієм сприяє зменшенню відношення осей  $c/a$  і цим активує небазисні механізми ковзання, зокрема, призматичного ковзання дислокацій особливо при підвищених температурах [24]. Формуванню компонентів текстури відхиленого в ПН базисного типу, ймовірно, сприяє активізація призматичного ковзання, а також дублювання (рис. 2.5).

Вищезазначені невідповідності в розподілі полюсної щільності на ОПФ НН протилежних сторін листів досліджуваного сплаву Mg-5 % (мас) Li після різної кількості циклів ЗВ, спостерігаються у величинах відповідних параметрів текстури Кернса. Для урахування зазначених невідповідностей ми визначили усереднені по обидва боки листів текстурні параметри Кернса  $f_{\text{НН}}^{(\text{cp})}$  для подальшого аналізу властивостей листів після відповідного числа циклів ЗВ.

## 2.2. Дослідження кристалографічної текстури матеріалів з кубічною симетрією

ОПФ зразків сплаву Inconel 718 після 3D друку та різної пост-друкарської обробки (табл. 2.6) представлені на рис. 2.6. Загальним для всіх представлених ОПФ є те, що максимальні значення полюсної щільності спостерігаються в полюсах  $\langle 533 \rangle$  (відстань від  $\langle 111 \rangle$  на  $\approx 14^\circ$ ) і  $\langle 100 \rangle$ .

Таблиця 2.6

Технології отримання досліджуваних зразків

№ п/п	Позначення	Технологія отримання Порошку	Напрямок побудови	Технологія пост-друкарської обробки
1	КГ1	PREP	горизонтальне	–
2	КВ1	PREP	вертикальне	–
3	КГ6	PREP	горизонтальне	ТО

4	KB6	PREP	вертикальне	ТО
5	КГ4	PREP	горизонтальне	ГП + ТО
6	KB4	PREP	вертикальне	ГП + ТО
7	Г6	VIGA	горизонтальне	ТО
8	B6	VIGA	вертикальне	ТО
9	Г3	VIGA	горизонтальне	ГП + ТО
10	B3	VIGA	вертикальне	ГП + ТО

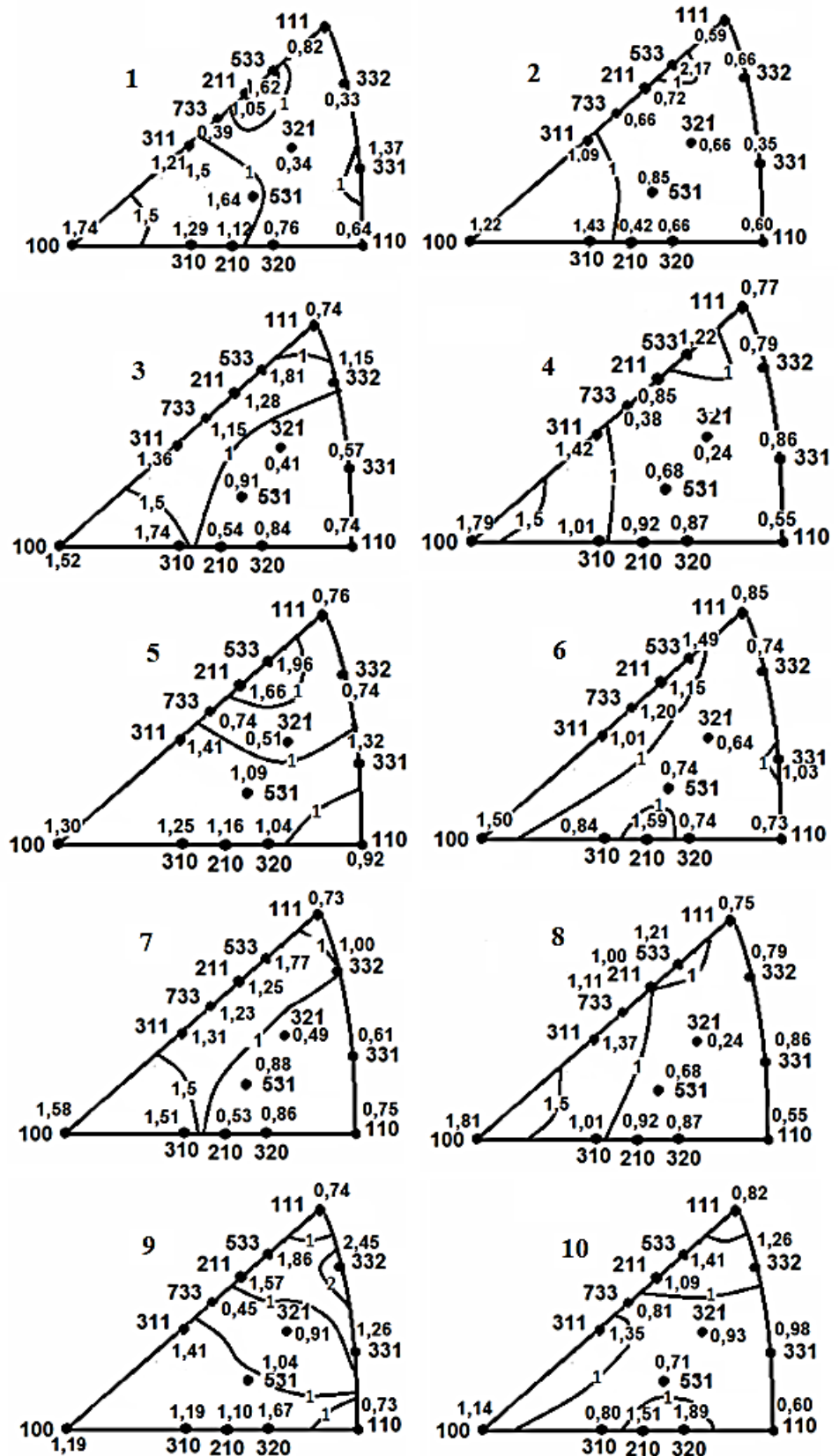


Рис. 2.6. Обернені полюсні фігури зразків сплаву Inconel 718 після 3D-друку та пост-друкарської обробки. Нумерація ОПФ відповідає табл. 2.6

Розмір максимумів і характер розсіювання залежить від напрямку

побудови і методу після друкованої обробки (табл. 2.6). Так, полюсна щільність на ОПФ в полюсі  $\langle 533 \rangle$  варіюється від максимуму 2,17 у зразку №2, вирощеному  $Z$  напрямку без подальшої термообробки, до мінімуму 1,21 у зразку № 8, вирощеному також в  $Z$  напрямку, але після ТО.

Механізми формування кристалографічної текстури в ГЦК металах та сплавах після різних видів деформації та подальшого відпалу досить добре відомі [2351]. Формування кристалографічної текстури у процесі 3D друку вивчено значно менше, як згадувалося вище.

Формування текстурного компонента  $\langle 100 \rangle$ , ймовірно, обумовлено тим, що найшвидше ростуть стовпчасті кристали, у яких орієнтація утворює мінімальний кут з напрямком найбільшого відведення тепла. У сплавах з ГЦК ґратами (до яких відноситься і сплав Inconel 718) орієнтації  $[111]$  відхилені від кристалографічного напрямку  $[001]$  на  $54,5^\circ$ . Внаслідок цього після селективного лазерного плавлення в процесі 3D друку кристалізація зерен з орієнтаціями  $[111]$  може придушуватись будь-якими сусідніми зернами інших орієнтацій [24-26]. З цієї причини, ймовірно, на ОПФ полюсна щільність  $\langle 111 \rangle$  низька, а полюсні щільності  $\langle 533 \rangle$  та  $\langle 100 \rangle$  відносно великі (рис. 2.6).

## Розділ III. Ядерні реакції, ядерні реактори, проблеми.

### 3.1. Касади зміщення

Нейтрони і важкі іони створюють каскади зміщення, що генеруються високоенергетичними атомами первинної віддачі з енергією до декількох десятків, або навіть сотень кеВ. Відповідна сумарна доза в одиницях  $dpa$  задається формулою [27]:

$$dpa = \phi t \langle \sigma_{dpa} \rangle = \phi t \int \phi_s(E) \sigma_s(E, T_c) N_c(T_c) dE \quad (3.1)$$

Тут  $\langle \sigma_{dpa} \rangle$  – спектрально-усереднений переріз  $dpa$ ,  $\phi_s(E)$  - нормований спектр потоку нейтронів,  $E_d$  – енергія зсуву, а  $\sigma_s(E, T_c)$  – перетин для нейтронів з енергією  $E$  для отримання первинних відвалів з температурою  $T_c$ . Дози для іонного опромінення часто обчислюють також як функцію глибини вздовж шляху вхідних іонів, оскільки дози суттєво змінюються в межах діапазону проникнення іонів. Дослідження в [28] було виконано на  $\alpha$ -залізі. Тонкі фольги опромінювали у прискорювачі Ван де Граафа ARTHUR SRMP/CEA при трьох температурах (200, 300 і 400 °C) іонами криптона з енергією 1,5 МеВ. При цій енергії прогнозована середня довжина пробігу іонів становила близько 350 нм. Оскільки товщина області, де проводилася спостереження методом TEM, становила близько 100 нм, проводилась імплантація малої кількості іонів. Більшість з них пройшли через фольгу та утворили пошкодження, які виявились досить однорідними (рис. 3.1). З метою узгодження з попереднім калібруванням моделі [29,30], проведеної за допомогою електронного опромінення 1 МеВ, для отримання такої ж швидкості пошкодження був обраний іонний потік  $1,1 \times 10^{11}$  іонів  $\text{см}^{-2}/\text{с}$ , розрахований в рамках спрощеного методу NRT (Norgett, Robinson, Torrens) [27] за допомогою коду Stopping and Range of Ions in Matter (SRIM) [31]. При цих умовах швидкість імплантації є дуже низькою ( $1,7 \times 10^{-7}$  іонів/с). Дози опромінення були вибрані таким чином, щоб отримати пошкодження, які можуть бути досліджені методом TEM – мінімальний розмір кластерів точкових дефектів, які спостерігають методом TEM у  $\alpha$ -залізі, становить 2 нм. Опромінення здійснювалось при 200 °C до 1,2

dpaNRT, 300 °C до 0,48 dpaNRT та 400 °C до 0,2 та 0,5 dpaNRT.

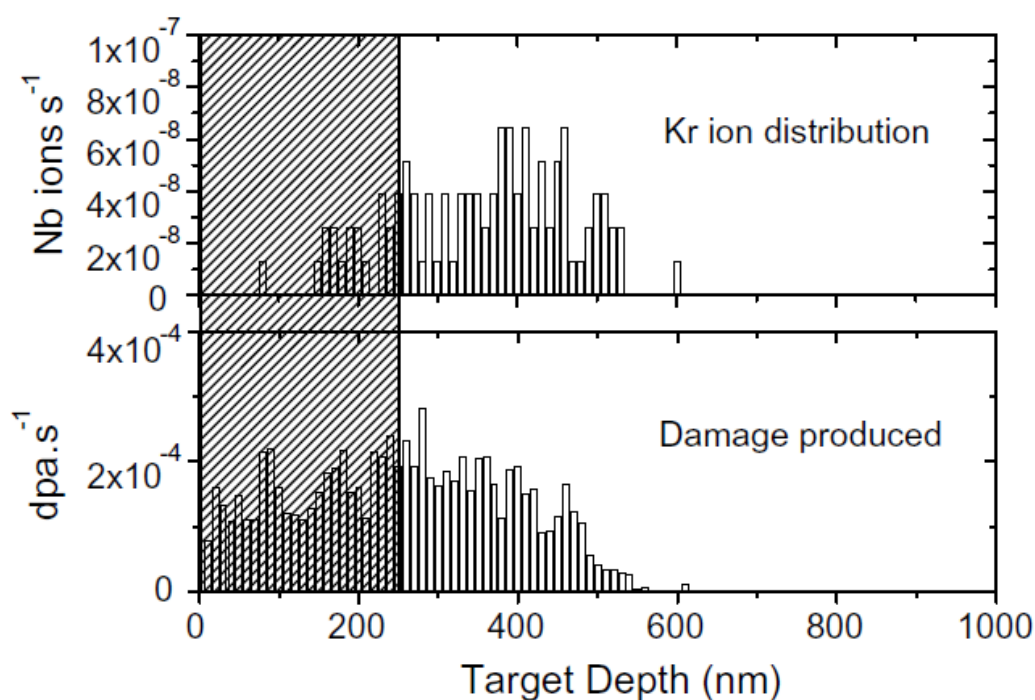


Рис. 3.1. Пошкодження, які спричинені опроміненням іонами *Kr* з енергією 1,5 MeV в залізній мішені відповідно до розрахунку SRIM; при цьому у [28] був обраний енергетичний поріг 40 eV зміщення атомів заліза; кількість імплантованих іонів в секунду та потужність дози для кожній товщині розраховували, використовуюючи іонний потік  $1,1 \times 10^{11}$  іонів  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$

Завдяки спостереженням TEM на електронному мікроскопі Philips CM20 були визначено чисельну щільність, розподіл за розміром та тип дислокаційних петель у зразках, що були опромінені.

### 3.2. Моделювання опромінення методом кластерної динаміки.

При проведенні процедури калібрування моделі кластерної динаміки (КД) у [29] використовувалось припущення про те, що тільки поодинокі вакансії та міжвузельні атоми є мобільними, а енергетичні параметри були визначені з порівняння результатів кластерної динаміки з експериментами. В моделі [28] було внесено зміни для урахування як мобільності кластерів, так і їх присутності відразу після каскадної стадії. Енергетичні параметри (таблиця 3.1) підбирались з використанням даних експерименту та результатів розрахунків *ab initio*, проведених в [32-34] для  $\alpha$ -заліза. Були використані дані щодо розподілу міжвузельних петель за розміром та їх чисельної щільності у

зразках після іонного опромінення при температурі 400 °C і дози 0,2 dpaNRT. Передбачалось, що потужність поглинання точкових дефектів границями зерен незначна у порівнянні з їх поглинанням поверхнею зразка. Використовувалися параметри  $\alpha$ -заліза, яке не містить вуглець. Однак у [28] під час опромінення могла відбуватися імплантація вуглеця в іонному прискорювачі, що раніше спостерігалось на томографічних голках при атомному зондуванні [35].

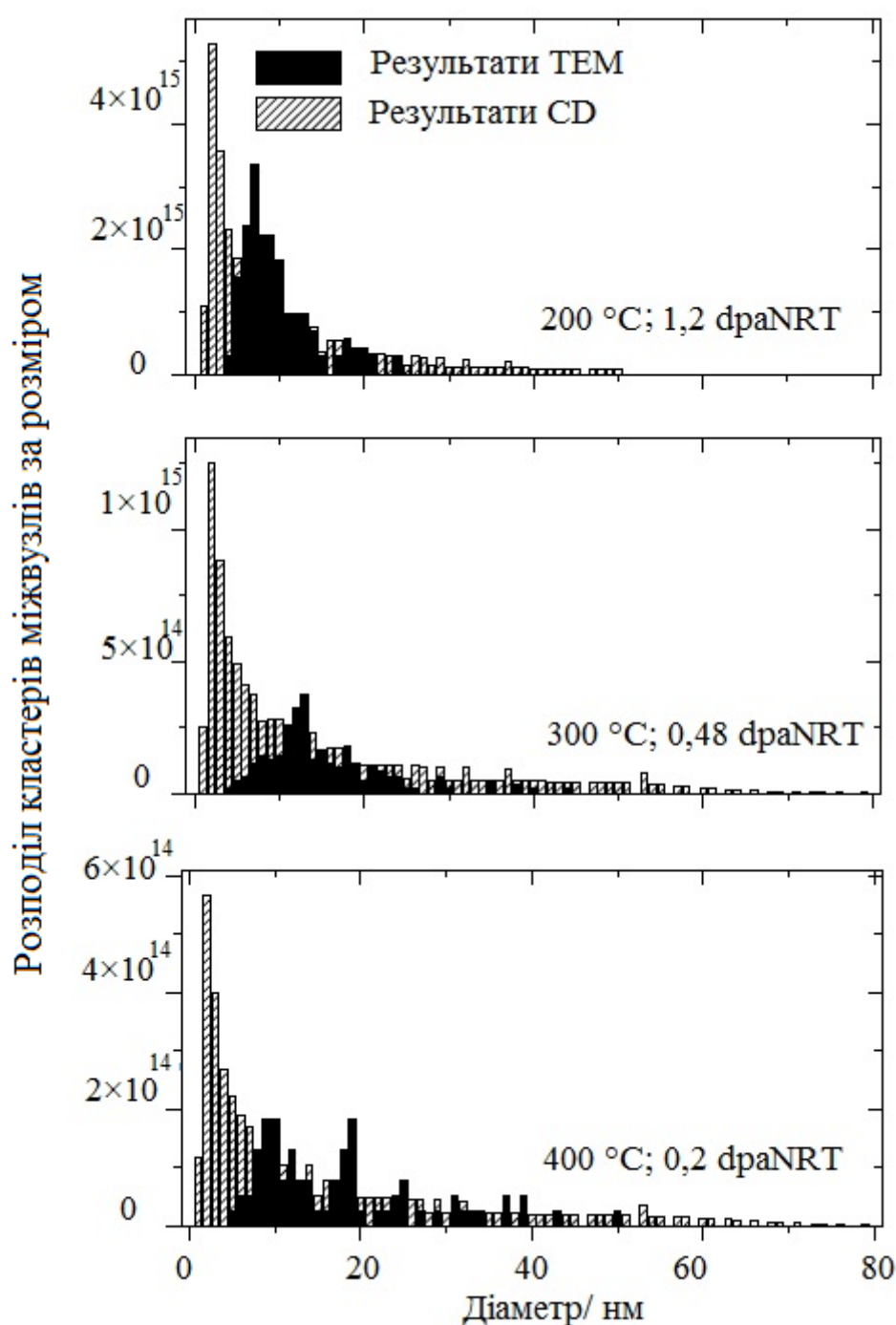


Рис. 3.2. Порівняння між розподілом видимих петель, що визначаються TEM,



і обчислених методом кластерної динаміки.

Таблиця 3.1

Параметри  $\alpha$ -заліза, що використовувались в [36] для моделювання методом кластерної динаміки

Параметри	Значення параметрів
Пре-фактор: $D_{0i}$ : $D_{0v}$	$8,2 \times 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$
$E^m$ : I, I <sub>2</sub> , I <sub>3</sub> , I <sub>n&gt;3</sub>	0,34; 0,42; 0,43 eВ, $\infty$
$E^m$ : V, V <sub>2</sub> , V <sub>3</sub> , V <sub>4</sub> , V <sub>n&gt;4</sub>	0,67; 0,62; 0,35; 0,48 eВ, $\infty$
$E^f$ : I, V	3,64; 2,2 eВ
$E^B$ : I-I, I <sub>2</sub> -I, I <sub>3</sub> -I	0,83; 0,92; 1,64 eВ
$E^B$ : V-V, V <sub>2</sub> -I, V <sub>3</sub> -I, V <sub>4</sub> -V	0,3; 0,37; 0,62, 0,73 eВ
$Z_I^d, Z_V^d$	1,1; 1
Товщина плівки TEM	120 нм
Розмір зерен	200 $\mu\text{м}$
Радіус рекомбінації	0,65 нм
Щільність дислокації	$10^8 \text{ см}^{-2}$
$D_{\min}$ (петля або порожнина)	2 нм
$\eta$	0,3

Слід зазначити, що у попередніх розрахунках *ab-initio* [32-34] вже враховано взаємодію вакансій з домішками, саме, з атомами вуглецю або азоту [36]. Вакансії можуть бути захоплені атомами вуглецю та створити вакансійно-вуглецеві комплекси у  $\alpha$ -залізі у досліджуваному в [29] діапазоні температур. Припущення про відсутність мобільності зазначених комплексів приводить до зниження ефективної мобільності вакансій у залізі, що містить вуглець, в порівнянні з чистим залізом. Слід зазначити, що такі комплекси експериментально спостерігалися в  $\alpha$ -залізі різної чистоти після експериментів HVEM [37]. Для того щоб брати до уваги наявність вуглецю, ефективний коефіцієнт дифузії вакансій підбирали із порівняння результатів кластерної динаміки з даними експерименту TEM. Вважаючи, що пре-фактор коефіцієнта дифузії вакансій дорівнює  $8,2 \times 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с}$ , в роботі [28] знайдено

ефективну енергію міграції вакансії рівній 0,83 еВ, що практично збігається з даними [38]:  $0,83 \pm 0,08$  еВ.

Крім того, для визначення  $G_j$  в [28] вводиться набір додаткових параметрів ( $f_n^\theta$ ). Кожен з них визначається як  $f_n^\theta = G_n^\theta nV / G$ , де  $\theta$  – позначає міжвузельний атом або вакансію,  $G_n^\theta$  – чисельна щільність кластерів, які містять  $n$  точкових дефектів типу  $\theta$ ,  $G$  – швидкість генерації дефектів, який дорівнює  $G = \eta G_{NRT}$ ; де  $G_{NRT}$  – швидкість генерації дефектів, яка розрахована в рамках підходу NRT [281]  $\eta$  – частка кластерів точкових дефектів, що залишилися після взаємної рекомбінації SIA – вакансія, розрахованої за методом молекулярної динаміки [39] у порівнянні з підходом NRT.

На першому етапі були проведені розрахунки методом кластерної динаміки у припущенні, що на каскадній стадії створювалися тільки ізольовані пари Френкеля. У цьому випадку  $f_1^i$  та  $f_1^v$  дорівнюють одиниці. Отримана чисельна щільність кластерів точкових дефектів дорівнює  $1,2 \times 10^9$  см<sup>-3</sup>, що є на кілька порядків нижче експериментального значення  $(2 \pm 0,5) \times 10^{15}$  см<sup>-3</sup> (табл. 3.2). У роботі [282] було використано результати дослідження каскадної стадії методом молекулярної динаміки (рис. 3.3).

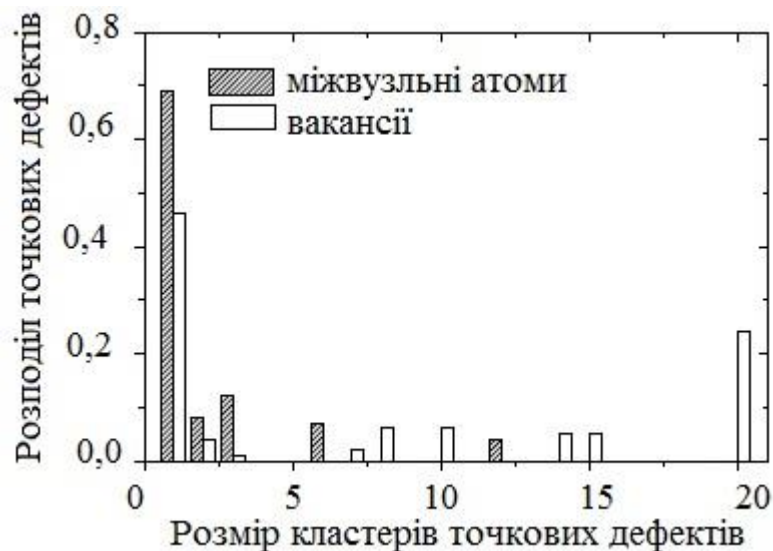


Рис. 3.3. Розподіл точкових дефектів, ізольованих і формуючих кластерів, що використовуються для імітації найбільш вірогідного каскаду.

Оскільки результати моделювання дуже чутливі до температури, в роботі

[282] метод кластерної динаміки застосовано до двох температур: 200 °C і 300 °C. Знайдено, що згода з експериментом є задовільною (рис. 3.3). Частка кластерів малих точкових дефектів, отриманих моделюванням, не була чітко видна у ТЕМ досліджень, можливо через незначний шар оксиду на поверхні зразків.

Таблиця 3.2

Параметри, що використовуються для моделювання кластерної динаміки  $\alpha$ -заліза

$T, ^\circ\text{C}$	Доза		$\Delta L$ чисельна щільність дислокаційних петель	Середній розмір, $D$
	(іон/см <sup>2</sup> )	(dpaNRT)	(см <sup>-3</sup> )	(нм)
200	$8,7 \cdot 10^{14}$	1,2	$>10^{16}$	$10 \pm 4$
300	$3,5 \cdot 10^{14}$	0,48	$3 \pm 1 \cdot 10^{15}$	$15 \pm 7$
400	$1,4 \cdot 10^{14}$	0,20	$2 \pm 0,5 \cdot 10^{15}$	$18 \pm 9$

Таблиця 3.3

Оцінка коефіцієнтів  $f_4^I, f_8^V$  та ефективної енергії міграції вакансій для опромінення іонами криптону та нейтронами

	Іон Kr	$f_4^I = 1,10^{-4}, f_8^V = 0,05$
	Нейтрон	$f_4^I = 3,10^{-4}, f_8^V = 0,5$
$E_{eff}^m$ (eV)	Іон Kr та нейтрон	0,83 eV

Для нейтронного опромінення використовували результати ТЕМ експерименту, проведеного в рамках європейського проекту PERFECT [40], який виконувався протягом 2004 - 2008 років, на тому ж матеріалі, що використовувався для наведеного вище калібрування. На відміну від іонного опромінення, нейтронне опромінення було проведено на об'ємному матеріалі. У цьому випадку потужність поглинання точкових дефектів поверхнею є незначною у порівнянні з потужністю їх поглинання границею зерен. Зразки опромінювали при потоці  $9,5 \times 10^{13} n_E > 1 \text{ MeV cm}^{-2}/\text{с}$ , що відповідає швидкості пошкодження  $1,3 \times 10^{-7} \text{ dpaNRT}/\text{с}$  і дозах від 0,025 до 0,2 dpaNRT при температурі 300 °C. Підгонка параметрів проводилася з порівняння результатів кластерної динаміки з розподілом міжвузельних дислокаційних петель, який наведено на рис. 4.4.

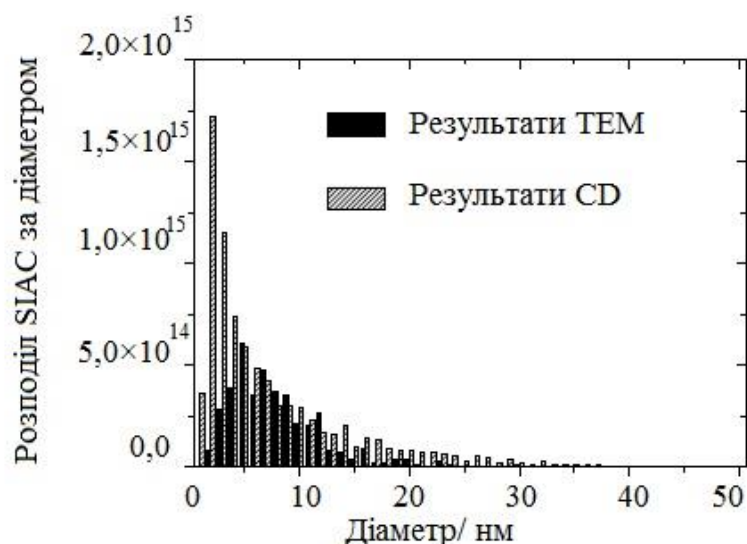


Рис. 4.4. Корегування моделі КД з результатів ТЕМ, отримані для  $\alpha$ -заліза після його нейтронного опромінення до 0,2 dpaNRT [40].

Зазначені параметри представлені у таблиці 3.4, з якої слідує, що 80% вакансій утворюють кластери. Крім того, відмітимо, що частка точкових дефектів які утворюють кластери на каскадній стадії вище у випадку нейтронного опромінення у порівняння з опромінюванням іонами Kr. Каскади стають більш ефективними, що означає, що середня енергія первинно вибитих атомів РКА (primary knocked on atom, РКА) зміщується у сторону вищих енергій, як це показано на рис. 3.5.

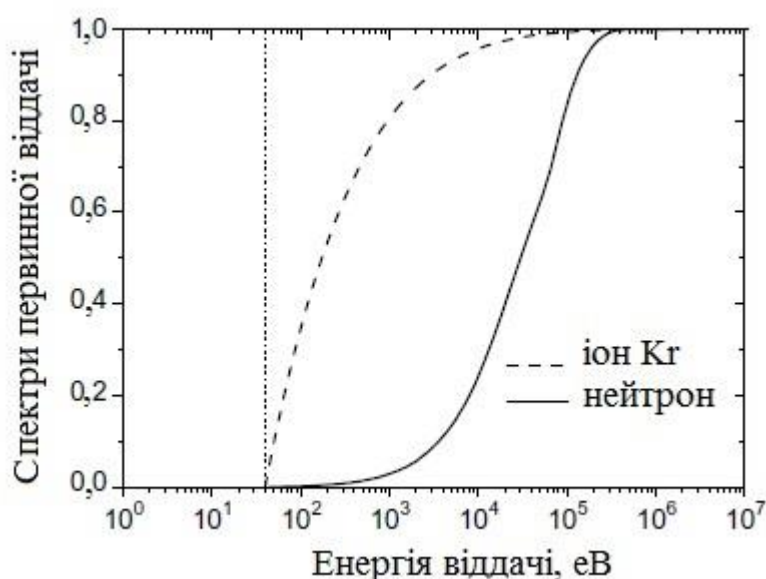


Рис. 3.5. Нормалізовані спектри первинної віддачі, що генеруються іонами Kr 1,5 MeV, та спектром нейтронів, що розглядається в даному дослідженні. Вони були розраховані за допомогою програмного забезпечення DART [41].

Для того щоб перевірити правильність калібрування, в роботі [28] використовували результати експериментального дослідження [41], в якому зразки заліза опромінювалися при температурі 70°C нейтронами при зростанні дози від  $1 \times 10^{-4}$  до 0,72 dpaNRT і при флаксі  $6 \times 10^{-7}$  dpaNRT/с. Кластери точкових дефектів, що утворилися під час опромінення, досліджувались методами PAS і TEM.

### 3.3. Майстер-рівняння кластерної динаміки

Майстер-рівняння КД записується у вигляді наступної жорсткої системи диференціальних рівнянь [42] для випадку нейтронного опромінення:

$$\frac{dC_{1v(i)}}{dt} = \eta G_{dpa} (1 - f_{vcl(icl)}) - \frac{4\pi r_{rec} (D_v + D_i) C_{1v} C_{li}}{\Omega_{Fe}} - \rho_d Z_{v(i)} \left( 1 + \frac{6(\rho Z_{v(i)})^{-0.5}}{d} \right) D_{v(i)} (C_{1v(i)} - C_{1v(i)}^e) - 4\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} + 4\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \sum_{n=3} \alpha_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{ni(v)}^{v(i)} C_{ni(v)} \quad (3.2)$$

$$\frac{dC_{2v(i)}}{dt} = G_{2v(i)} + 2\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} - 2\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \beta_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} + \alpha_{3v(i)}^{v(i)} C_{3v(i)} - \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} + \beta_{3v(i)}^{i(v)} C_{3v(i)} \quad (3.3)$$

$$\frac{dC_{nv(i)}}{dt} = G_{nv(i)} + \beta_{(n-1)v(i)}^{v(i)} C_{(n-1)v(i)} + (\beta_{(n+1)v(i)}^{i(v)} + \alpha_{(n+1)v(i)}^{v(i)}) C_{(n+1)v(i)} - (\beta_{nv(i)}^{v(i)} + \beta_{nv(i)}^{i(v)} + \alpha_{nv(i)}^{v(i)}) C_{nv(i)} \quad \text{for } n > 2, \quad (3.4)$$

де  $\eta$  – 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 VC (SIAC), до загальної кількості вакансій (міжвузельних атомів) наприкінці каскадного етапу,  $\rho_d$  – чисельна щільність дислокації,  $d$  – середній розмір зерен,  $C_{1v(i)}^e$  – рівноважна термічна концентрація вакансій (міжвузельних атомів),  $D_{v(i)}$  – обчислюється за формулою (3.2):

$$D_{v(i)} = D_{v(i)0} \exp\left(-\frac{E_{mv(i)}}{k_B T}\right), \quad (3.5)$$

де  $\beta_{ni}^{v(i)}$  – коефіцієнт приєднання точкових дефектів плоскими кластерами міжвузельних атомів з радіусом  $r_n$ , який визначається за формулою (3.6):

$$\beta_{ni}^{v(i)} = \frac{2\pi r_{ni} D_{v(i)} C_{1v(i)} Z_n^{v(i)}}{\Omega_{Fe}} \quad (3.6)$$

де  $Z_{ni}^{v(i)}$  – поправочний коефіцієнт, який визначає захоплення вакансій (міжвузельних атомів) кластера міжвузлів),  $\beta_{nv}^{v(i)}$  – коефіцієнт приєднання точкових дефектів сферичним кластером вакансій з радіусом  $R_{nv}$ , обчислений згідно до наближенням дифузійного режиму за формулою (3.7):

$$\beta_{nv}^{v(i)} = \frac{4\pi R_{nv} D_{v(i)} C_{1v(i)}}{\Omega_{Fe}} \quad (3.7)$$

$\alpha_{nv(i)}^{v(i)}$  – 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  $E_{bni}$  :

$$\alpha_{nv}^v = \beta_{(n-1)v}^v \cdot \exp\left(\frac{\Delta G_v(n) - \Delta G_v(n-1)}{k_B T}\right) \quad (3.8)$$

$$\alpha_{ni}^i = \frac{\beta_{(n-1)i}^i}{C_{1i}} \cdot \exp\left(-\frac{E_{bni}}{k_B T}\right) \quad (3.9)$$

де  $E_{bni}$  розраховується з [43,44]);  $E_{fi}$  – енергія формування вакансії (міжвузельного атому),  $E_{b2i}$  – енергія зв'язку димера вакансій (міжвузельних атомів).

Розв'язувач LSODA був використаний у [45] для безпосередньої інтеграції майстер-рівняння для дослідження системи точкових дефектів, що містить поодинокі вакансії, сферичні VC розміром від 2 до 2000 вакансій, поодинокі SIA і планарні SIAC з розміром від 2 до 4000 SIA.

Параметри матеріалу та  $G_{nv(i)}$  варіювалися для того, щоб досягти максимальної відповідності результатів моделювання до експериментальних даних TEM, SANS і PAS [46], враховуючи експериментальні обмеженості цих методів для феромагнітного заліза.

Таблиця 3.4

## Матеріальні параметри для чистого заліза

Енергія формування вакансії, $E_{fv}$	1,60 еВ	[3]
Енергія зв'язку кластеру з двох вакансій, $E_{b2v}$	0,20 еВ	[3]
Енергія міграції вакансії, $E_{mv}$	1,30 еВ	[3]
Пре-фактор коефіцієнта дифузії поодиноких вакансій, $D_{v0}$	$0,1 \times 10^{-3} \text{ м}^2/\text{с}$	[3]
Енергія формування міжвузельного атому, $E_{fi}$	4,3 еВ	[3]
Енергія зв'язку кластеру з двох міжвузельних атомів, $E_{b2i}$	0,80 еВ	[3]
Енергія міграції міжвузельного атому, $E_{mi}$	0,30 еВ	[3]
Пре-фактор коефіцієнта дифузії міжвузельного атому, $D_{i0}$	$4,0 \times 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$	[3]
Радіус рекомбінації, $r_{rec}$	0,65 нм	[3]
Коефіцієнт захвату вакансії дислокаційною сіткою, $z_v$	1,0	[3]
Коефіцієнт захвату міжвузельного атому дислокаційною сіткою, $z_i$	1,2	[3]
Вектор Бюргерса, $b$	0,2 нм	[3]
Чисельна щільність дислокації, $\rho_d$	$0,7 \times 10^{14} \text{ м}^{-2}$	[47]
Середній розмір зерна, $d$	$2,5 \times 10^{-4} \text{ м}^2$	[47]

Таблиця 2.5

Розподіл VC і SAIC за кількістю  $n$  мономерів в кінці каскадної стадії відповідно до (4) із врахуванням різниці між значеннями  $G_{дра}$  в (3.4) і в [21]

$N$	VC $10^{-9} G_{n,v} \text{ dpa/s}$	SAIC $10^{-9} G_{n,i} \text{ dpa/s}$
1	34,3	32
2	0,048	3,5
3	0,048	0,13
4	0,046	0,086
5	0,046	0,049
6	0	0,035
7	4,2	0,026
8	3,3	0

>9	0	0
----	---	---

По-перше, параметри матеріалу чистого заліза брались з результатів моделювання *ab-initio* [45] та експерименту [46] (таблиця 1.5).  $G_{nv}$  (1) використовується такі самі як у (6), враховуючи різницю між значеннями  $G_{дра}$  у [42] і в дослідженні [45] (таблиця 1.5). Коефіцієнт ефективності,  $\eta$ , приймається рівним 0,3 згідно з [47].

Багаточисленні варіації параметрів матеріалу не дозволили досягнути задовільного узгодження розрахованих параметрів SIAC з експериментально знайденим розміром, якщо використовуються дані щодо  $G_j$  з таблиці 1.6. Використання вихідних членів,  $G_{n,v}$  і  $G_{n,i}$ , представлених рівняннями (3.10) і (3.11), виявилось більш успішним:

$$G_{2,v} = G_{6,v} = \frac{\eta f_{vcl} G_{дра}}{8}, \quad G_{n,v} = 0 \quad (n \neq 2, 6) \quad (3.10)$$

$$G_{2,i} = G_{4,i} = \frac{\eta f_{icl} G_{дра}}{6}, \quad G_{n,i} = 0 \quad (n \neq 2, 4) \quad (3.11)$$

Для фіксованих  $G_{nv(i)}$  а рівняннями (3.10) і (3.11) було досліджено вплив зміни вхідних параметрів для моделювання методом КД. Було встановлено у [48], що:

1. Збільшення пре-фактору коефіцієнта дифузії  $D_{i0}$ , а також формування енергії  $E_{if}$  призводить до різкого збільшення  $2R_i$  та зменшення  $N_i$ ;
2. Зменшення пре-фактору коефіцієнта дифузії  $D_{v0}$  забезпечує зменшення значення об'ємної частки вакансійних кластерів  $C_v$ ;
3. Зменшення параметра  $f_{vcl}$  призводить до збільшення  $2R_i$  та  $N_i$ ;
4. Збільшення параметра  $f_{icl}$  призводить до повільного зменшення  $2R_i$  і збільшення  $N_i$ ;
5. Вплив зміни  $\gamma$  ( $E_{b2v}$ ) на розподіл VC, а також SIAC є немонотонним;
6. Зміна радіуса рекомбінації, а також чисельної щільності дислокацій має слабкий вплив на результати метода КД. Останнє свідчить про значну роль VC і SIAC як поглиначів вакансій і міжвузельних атомів у порівнянні з процесами



рекомбінації та захвату точкових дефектів сіткою дислокацій.

Крім того, проводились варіації виразів  $G_{nV(t)}$  у рівняннях (3.10) і (3.11). Було встановлено, що зазначені зміни не суттєво впливають на наведені вище результати моделювання КД. Відтворення експериментальної еволюції VC та SIAC при опроміненні нейтронами чистого заліза [4823] досягається при  $G_{n,v}$  та  $G_{n,i}$  за рівняннями (3.10) і (3.11); параметри матеріалу  $E_{fv}$ ,  $D_{i0}$ ,  $E_{mv}$  ( $E_{mi}$ ),  $E_{b2i}$ ,  $r_{rec}$ ,  $z_{v(i)}$ ,  $\rho_d$ ,  $b$ , та  $d$ , взятих з таблиці 3.5, та  $\eta = 0,3$ ,  $D_{v0} = 2,10 \times 10^8 \text{ m}^2/\text{s}$ ,  $E_{fi} = 3,05 \text{ eV}$ ,  $E_{b2v} = 0,608 \text{ eV}$  ( $\gamma = 1,2 \text{ Дж/м}^2$ ),  $f_{vc1} = 0,07$ ,  $f_{icl} = 0,2$ .

Відповідні результати представлені на рис. 3.6-3.9. Нерегулярна поведінка розподілу VC для радіусу кластера близько 0,27 нм на рис. 3.12 відповідає ефекту піків розподілу  $G_{n,v}$  (рівняння (3.9)).

Розподіл статистичних частот SIAC за діаметром  $F_i$  ( $D_n$ ) ( $D_n$  є діаметр SIAC розміру  $n$ ) визначається з розподілу чисельної щільності,  $C_i(n)$ , відповідно до рівняння (3.12):

$$F_i(D_n) = C_i(n) \cdot \frac{d(n)}{d(D_n)} = \frac{2\sqrt{n}}{D_1} C_i(n) \quad (3.12)$$

де  $D_1$  – розмір SIA.

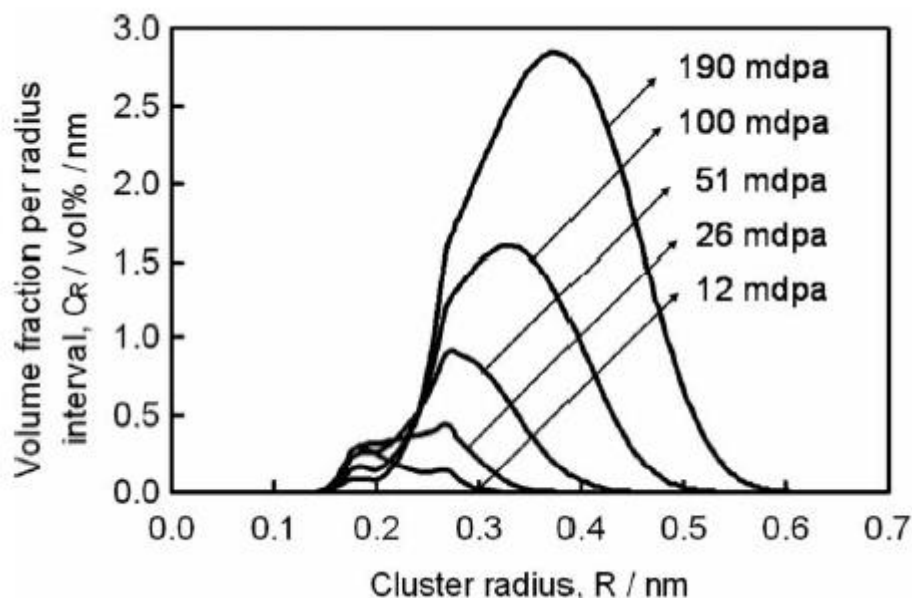


Рис. 3.6. Розподіл розмірів VC, отриманих розрахунками КД для чистого заліза, опроміненого нейтронним випромінюванням на режимі [46]

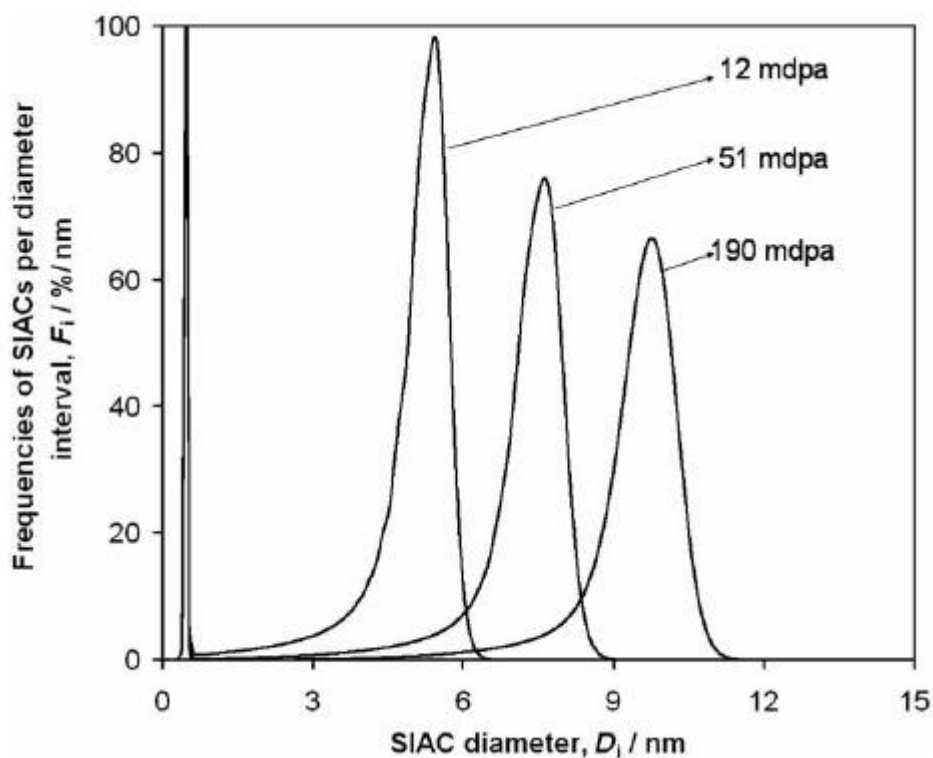


Рис. 3.7. Частоти SIAC, отримані методом КД для чистого заліза, опроміненого нейтронним випромінюванням на режимі [47]

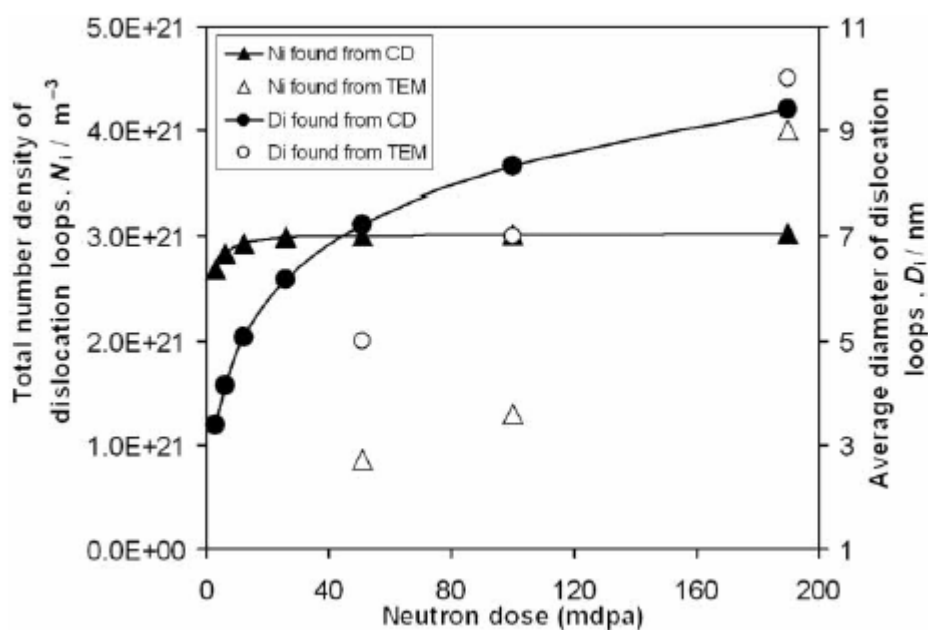


Рис. 3.8. Залежність чисельної щільності ( $N_i$ ) та середнього діаметру ( $D_i$ ) SIAC від дози для чистого заліза, опроміненого нейтронами за режимом [47]

Розраховані статистичні частоти мають додатковий пік для малих дислокаційних петель при розмірі менше 2 нм (рис. 3.9). Даний пік не може бути виявлений з дослідження TEM] через експериментальне обмеження TEM

у випадку феромагнітного заліза. Залежність розрахованого діаметру SIAC від дози опромінювання приблизно відтворює її експериментальну поведінку. Як експериментальна, так і розрахункова чисельна щільності дислокаційних петель  $N_i$ , в опроміненому  $\alpha$ -залізі виявляють нелінійну залежність від дози нейтронів. Значення  $N_i$  збільшується різко при низьких рівнях нейтронної експозиції до 0,025 дпа. Це поведінка є типовою для нуклеаційної стадії еволюції кластерів. При збільшенні експозиції нейтронів  $N_i$  проявляє поведінку типу насичення, що є характерним для детерміністської стадії еволюції кластерів. Такий ж самий ефект насичення  $N_i$  було знайдено методом кінетичного моделювання Монте-Карло [49] для чистого заліза, опроміненого нейтронами за умови врахування присутності VC [47,49]. Концентрація поодиноких вакансій,  $C_{1v}$ , зростає до  $5 \times 10^{-13}$  атомів<sup>-1</sup> при збільшенні дози нейтронного опромінення до  $3 \times 10^{-11}$  дпа, змінюється дуже слабо при опромінюванні від  $3 \times 10^{-11}$  до  $10^{-7}$  дпа, а надалі зменшується до  $5 \times 10^{-16}$  атомів<sup>-1</sup> при дозі опромінення 0,19 дпа. Відповідна залежність критичного розміру VC,  $n_{cr_v}$ , від дози опромінення є немонотонною. Концентрація поодиноких міжвузельних атомів,  $C_{Li}$ , зростає до  $4 \times 10^{-14}$  атомів<sup>-1</sup> при збільшенні дози опромінення до  $3 \times 10^{-11}$  дпа, а потім не змінюється. Відповідні критичні розміри SIAC ( $n_{cr}$ ) становлять близько трьох для дози опромінення менше ніж  $3 \times 10^{-17}$  дпа і близько двох – для подальшого збільшення дози опромінення.

### 3.4. Моделювання методом кластерної динаміки ефекту флаксу

У нашому дослідженні [50] майстер-рівняння КД та параметри матеріалу чистого заліза (таблиця 3.9) для моделювання КД взяті з [51], де експериментальні результати TEM, SANS та PAS були застосовані для калібрування моделі КД.

Таблиця 3.9

#### Матеріальні параметри $\alpha$ -заліза

Енергія формування вакансії, $E_{fv}$	1.60 eV	[16,46]
Енергія зв'язку кластеру з двох вакансій, $E_{b2v}$	0.608 eV	[46]
Енергія міграції вакансії, $E_{mv}$	1.30 eV	[16,46]
Пре-фактор коефіцієнту дифузії поодиноких вакансій, $D_{vo}$	$2.0 \times 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$	[16,46]
Енергія формування міжвузельного атому, $E_{fi}$	3.05 eV	[46]
Енергія зв'язку кластеру з двох міжвузельних атомів, $E_{b2i}$	0.8 eV	[16,46]
Енергія міграції міжвузельного атому, $E_{mi}$	0.30 eV	[16,46]
Пре-фактор міжвузельного атому, $D_{io}$	$4.0 \times 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$	[16,46]
Радіус рекомбінації $r_{rec}$	0.65 нм	[16,46]
Коефіцієнт захвату вакансії дислокаційною сіткою, $z_v$	1.0	[16,46]
Коефіцієнт захвату міжвузельного атому дислокаційною сіткою,	1.2	[16,46]
Вектор Бюргерса, $b$	0.2 нм	[16,46]
Чисельна щільність дислокації, $\rho_d$	$0.7 \times 10^{14} \text{ м}^{-2}$	[46]
Середній розмір зерна, $d$	$2.5 \times 10^{-4} \text{ м}$	[46]
Параметр решітки заліза, $a$	0.2866 нм	[16,46]

Середній радіус і чисельну щільність VC ( $R_{vc}$ ) і ( $N_{vc}$ ), а також середній діаметр і чисельну щільність SIAC ( $D_{SIAC}$ ) та ( $N_{SIAC}$ ) (рис. 3.10-3.13) визначали за функціями розподілу розмірів VC та SIAC в моделюванні методом КД .

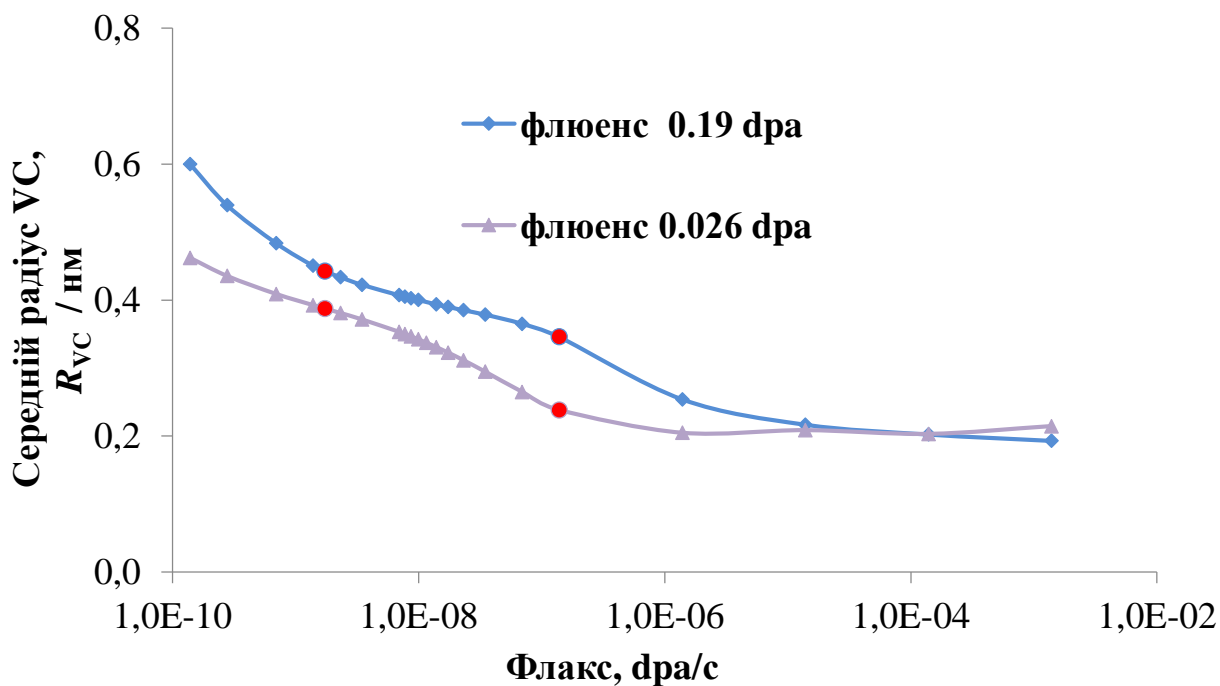


Рис. 3.10. Залежність середнього радіусу VC ( $R_{VC}$ ) від фляксу для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичні фляксу)

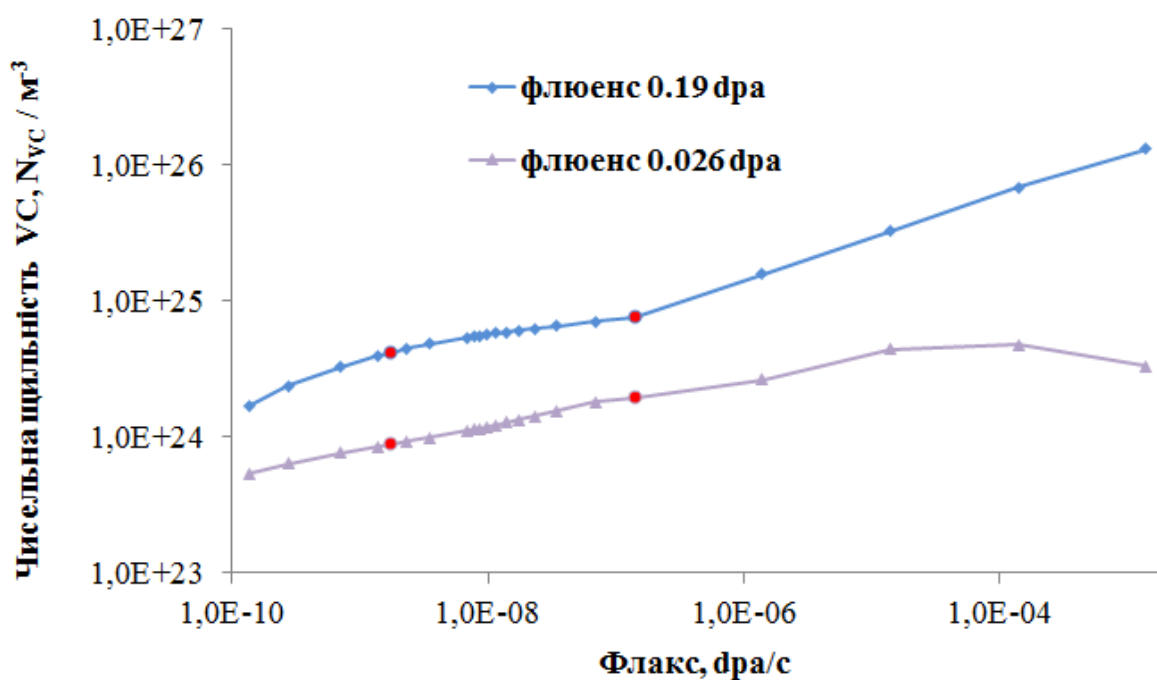


Рис.3.11. Залежність чисельної щільності VC ( $N_{VC}$ ) від фляксу для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичні фляксу).

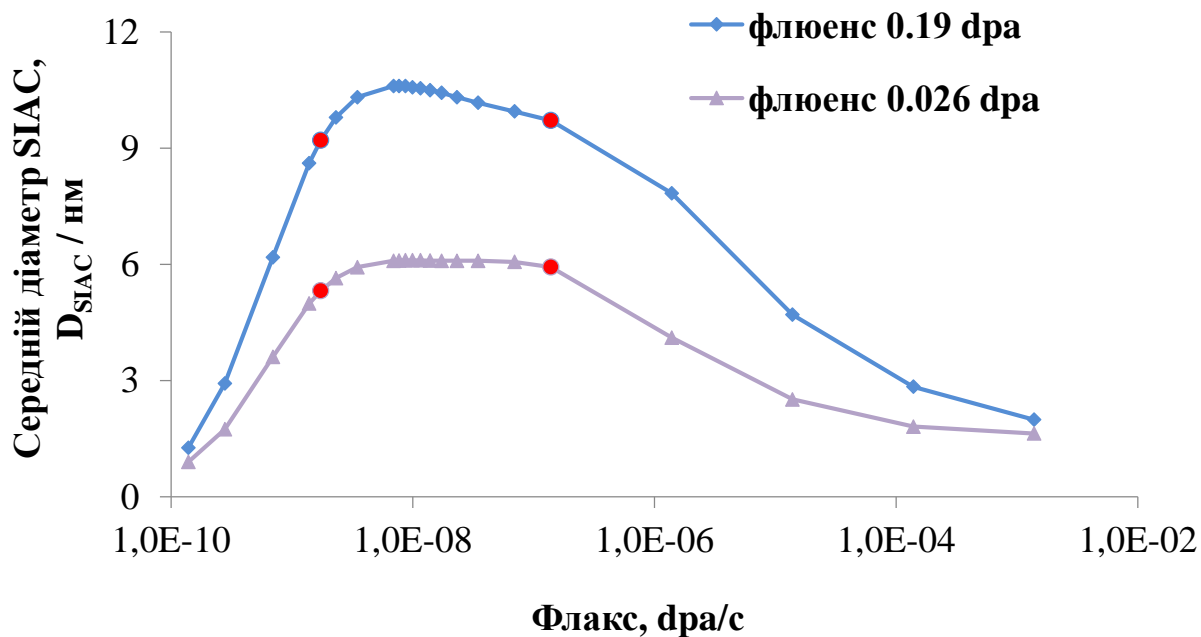


Рис. 3.12. Залежність середнього діаметра SIAC ( $D_{SIAC}$ ) від фляксу для двох значень флюенсу (червоні точки відзначають критичні фляксу)

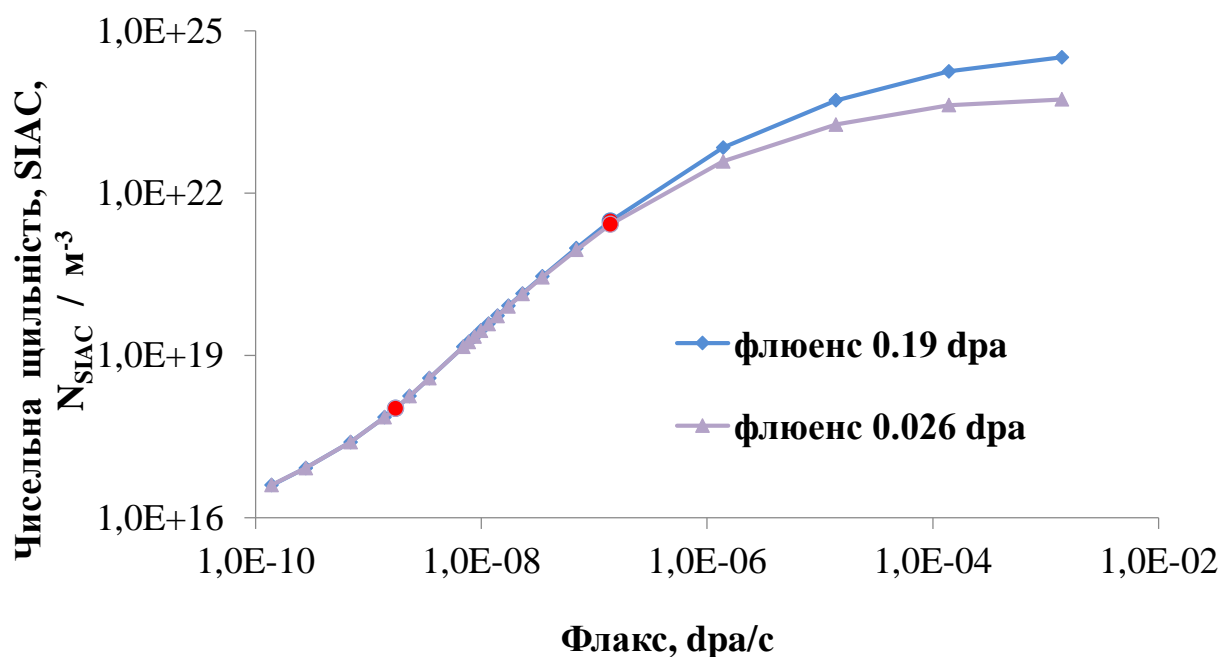


Рис. 3.13. Залежність чисельної щільності SIAC ( $N_{SIAC}$ ) від фляксу для двох значень флюенсу (червоні точки відзначають критичні фляксу)

В діапазоні  $(1,39 \times 10^{-10}; 1,39 \times 10^{-3})$  дпа/с ( $9 \times 10^{14}; 9 \times 10^{21}$ ) н/м<sup>2</sup>/с для флюенсу 0,19 дпа ( $1,3 \times 10^{20}$  н/м<sup>2</sup>,  $E > 1$  МеВ) і при температурі опромінення 300 °С було виявлено збільшення  $N_{SIAC}$  і зменшення  $R_{vc}$  внаслідок збільшення фляксу, аналогічного [52-58]. На відміну від [52-58], де був знайдений лише

один критичний параметр флаксу  $\varphi_t$ , у нашому дослідженні знайдено дві критичні значення флаксів  $\varphi_{t1} = 6,95 \times 10^{-9}$  дпа/с та  $\varphi_{t2} = 1,70 \times 10^{-7}$  дпа/с (червоні кола рис. 2.5 – 2.7) [51]. Вони відповідають трьом різним режимам: перший режим, де спостерігаються увігнуті частини  $R_{VC}$  і майже лінійні ділянки залежностей потоку  $N_{vc}$  і  $N_{SIAC}$ ; другий проміжний режим, де залежність потоку слабка; і третій режим, де залежність від флаксу  $N_{vc}$  близька до лінійної, і спостерігаються опуклі частини потоку залежностей  $N_{SIAC}$  (рис. 3.5, 3.6, 3.8) [51]. Залежність  $D_{SIAC}$  від флаксу виявилася немонотонною. Вона також складається з трьох режимів з тими ж критичними значеннями флаксів  $\varphi_{t1} = 6,95 \times 10^{-9}$  дпа/с і  $\varphi_{t2} = 1,70 \times 10^{-7}$  дпа/с (рис. 3.7). Більш того, при першому і третьому режимах спостерігаються близькі значення  $D_{SIAC}$ . Це вказує на доцільність розробки майбутніх експериментів для того, щоб виміряти  $D_{SIAC}$  при низькому потоці ( $\sim 10^{-9}$  дпа/с) і при високому флаксі ( $\sim 10^{-3}$  дпа/с), щоб перевірити знайдений результат моделювання. Також знову спостерігаються два режими ефекту флаксу для концентрації поодиноких вакансій ( $C_{1v}$ ) та поодиноких міжвузельних атомів ( $C_{1i}$ ) з критичним значенням  $\varphi_{t2} = 1,70 \times 10^{-7}$  дпа/с (рис. 3.14, 3.15) [51].

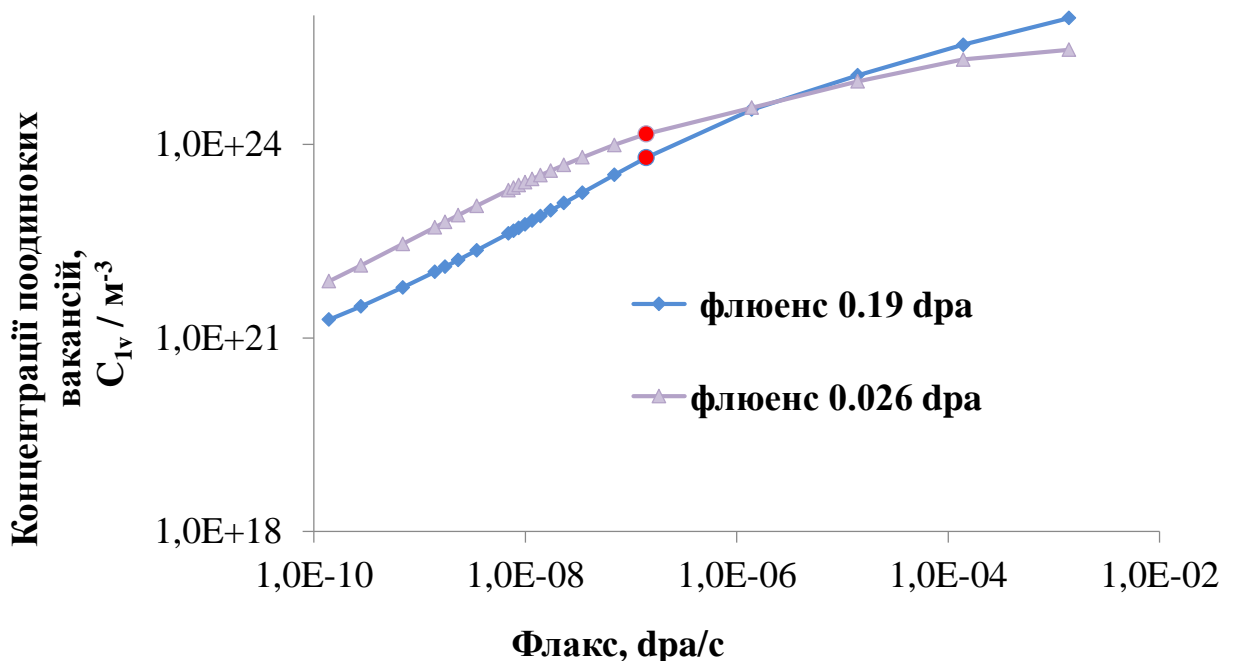


Рис. 3.14. Залежність концентрації поодиноких вакансій ( $C_{1i}$ ) від флаксу для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичний флакс)

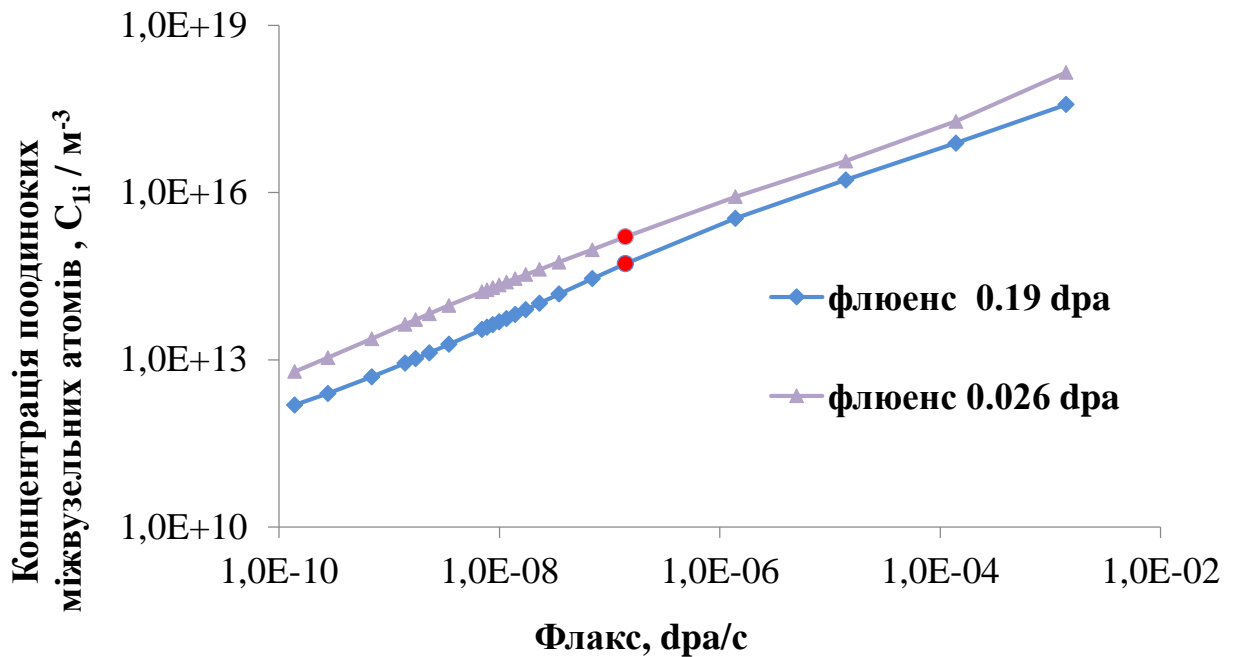


Рис. 3.15. Залежність концентрації поодиноких міжвузельних атомів ( $C_{1i}$ ) від фляксу для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичний флякс)

Ідентичні критичні значення залежності розміру і чисельної щільності VC і SIAC від фляксу можна пояснити взаємозв'язком між положенням піку розподілу кластерів після каскадної стадії та критичних розмірів ( $n_{cr}$ ) VC і SIAC, знайдених у [48]: якщо  $n_{cr}$  перевищує пік положення вказаний пік, то можливе зникнення кластерів після каскадної стадії; навпаки, кластери можуть рости.

Додатково вивчено вплив флюенсу на залежності від фляксу для VC та SIAC. Для цього знову залежність фляксу розглядається в діапазоні  $(1,39 \times 10^{-10}; 1,39 \times 10^{-3})$  дпа/с ( $9 \times 10^{14}; 9 \times 10^{21}$ ) н/м<sup>2</sup>/с для флюенсу 0,026 дпа ( $1,7 \times 10^{19}$  н/м<sup>2</sup>,  $E > 1$  MeV) для температури 300 °С. Знайдено збільшення  $C_{v1}$  та  $C_{i1}$  через зменшення флюенсу (рис. 3.9, 3.10), за винятком області високих фляксів. Відповідно, спостерігалось зменшення  $R_{VC}$ ,  $N_{VC}$ ,  $D_{SIAC}$  та індукованого опромінення уповільнення через зменшення флюенсу (рис. 3.5, 3.6, 3.10). Встановлено, що критичні значення залежностей фляксу ( $6,95 \times 10^{-9}$  дпа/с та  $1,70 \times 10^{-7}$  дпа/с) однакові для флюенсів 0,026 та 0,19 дпа.



### 3.5. Майстер-рівняння кластерної динаміки моделювання відпалу

Головне рівняння КД для випадку відпалу:

$$\frac{dC_{1v(i)}}{dt} = - \frac{4\pi r_{rec}(D_v + D_i)C_{1v}C_{1i}}{\Omega_{Fe}} - \rho_d Z_{v(i)} \left( 1 + \frac{6(\rho_d Z_{v(i)})^{-0,5}}{d} \right) D_{v(i)} (C_{1v(i)} - C_{1v(i)}^e) - 4\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} + 4\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \sum_{n=3} \alpha_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{ni(v)}^{v(i)} C_{ni(v)} \quad (14)$$

$$\frac{dC_{2v(i)}}{dt} = 2\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} - 2\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \beta_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} + \alpha_{3v(i)}^{v(i)} C_{3v(i)} - \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} + \beta_{3v(i)}^{i(v)} C_{3v(i)} \quad (3.13)$$

Розрахункові залежності загальної щільності SIAC (VC) від температури відпалу при фіксованому часі відпалу наведені на рисунках (3.16,3.17), середньої кількості SIA (вакансій) – на рисунках (3.18,3.19).

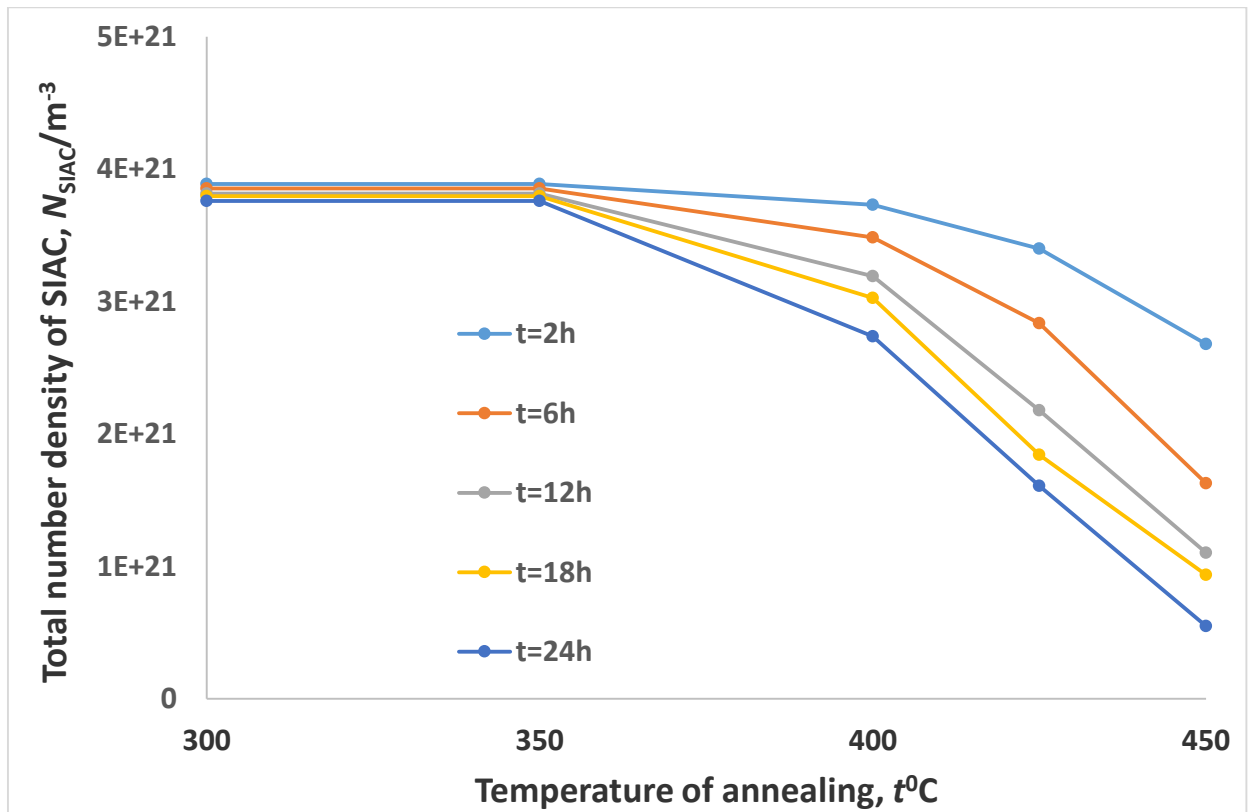


Рис. 3.16. Розрахункові залежності сумарної концентрації SIAC,  $N_{SIAC}$ , від температури для фіксованих часів відпалу, зелене коло вказує на  $N_{SIAC}$  перед відпалом (після нейтронного опромінення з експозицією 0,10 dra)

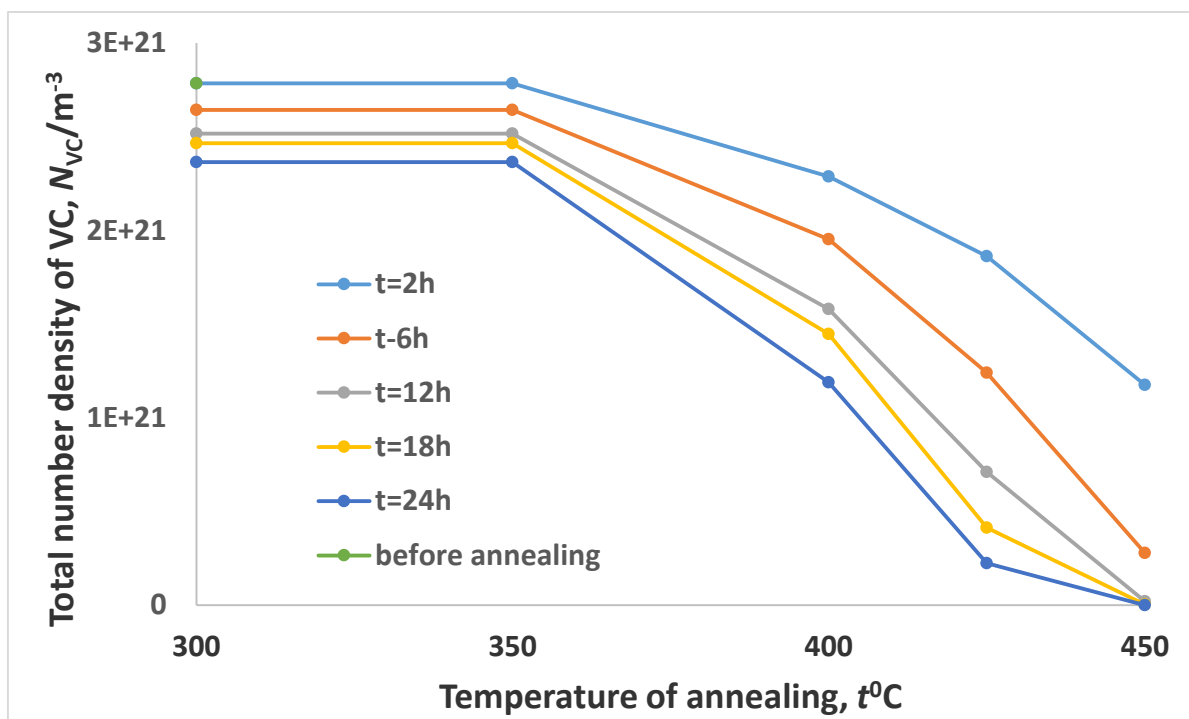


Рис. 3.17. Розрахункові залежності сумарної концентрації VC,  $N_{VC}$ , від температури для фіксованих часів відпалу, зелене коло вказує на  $N_{VC}$  перед відпалом (після нейтронного опромінення з експозицією 0,10 dpa)

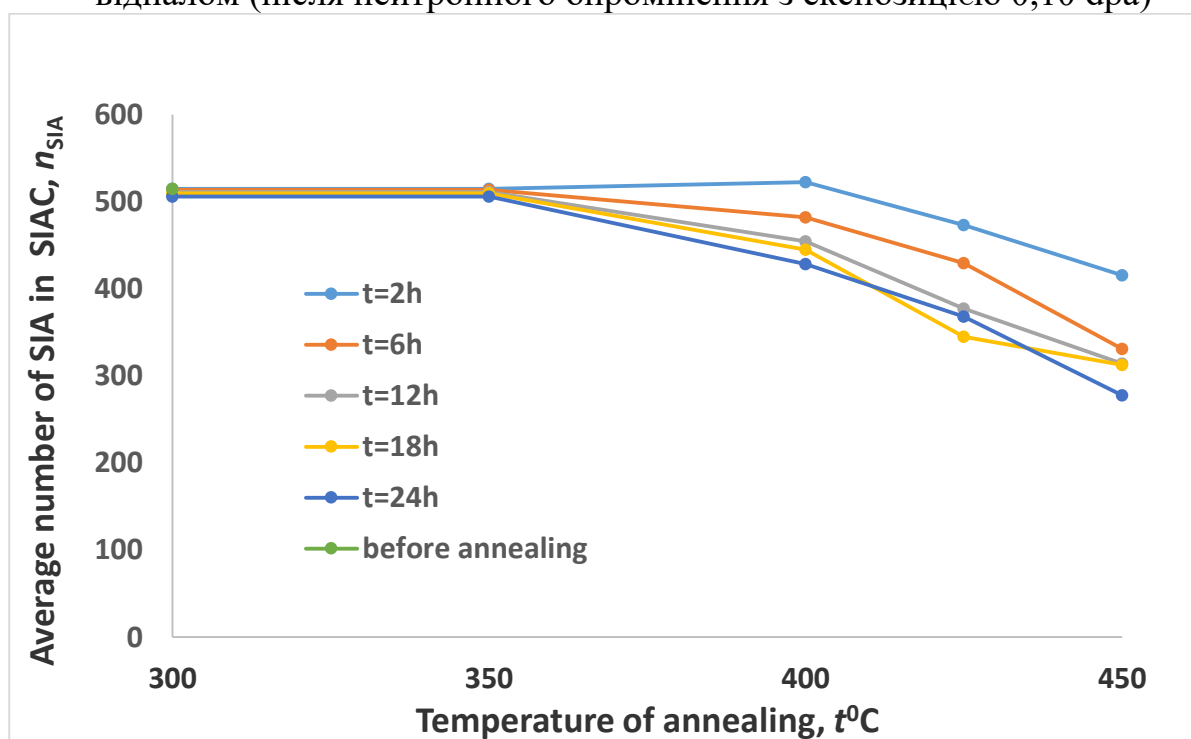


Рис. 3.18. Розрахункова залежність середньої кількості SIA в SIAC,  $n_{SIA}$ , від температури за фіксованим часом відпалу

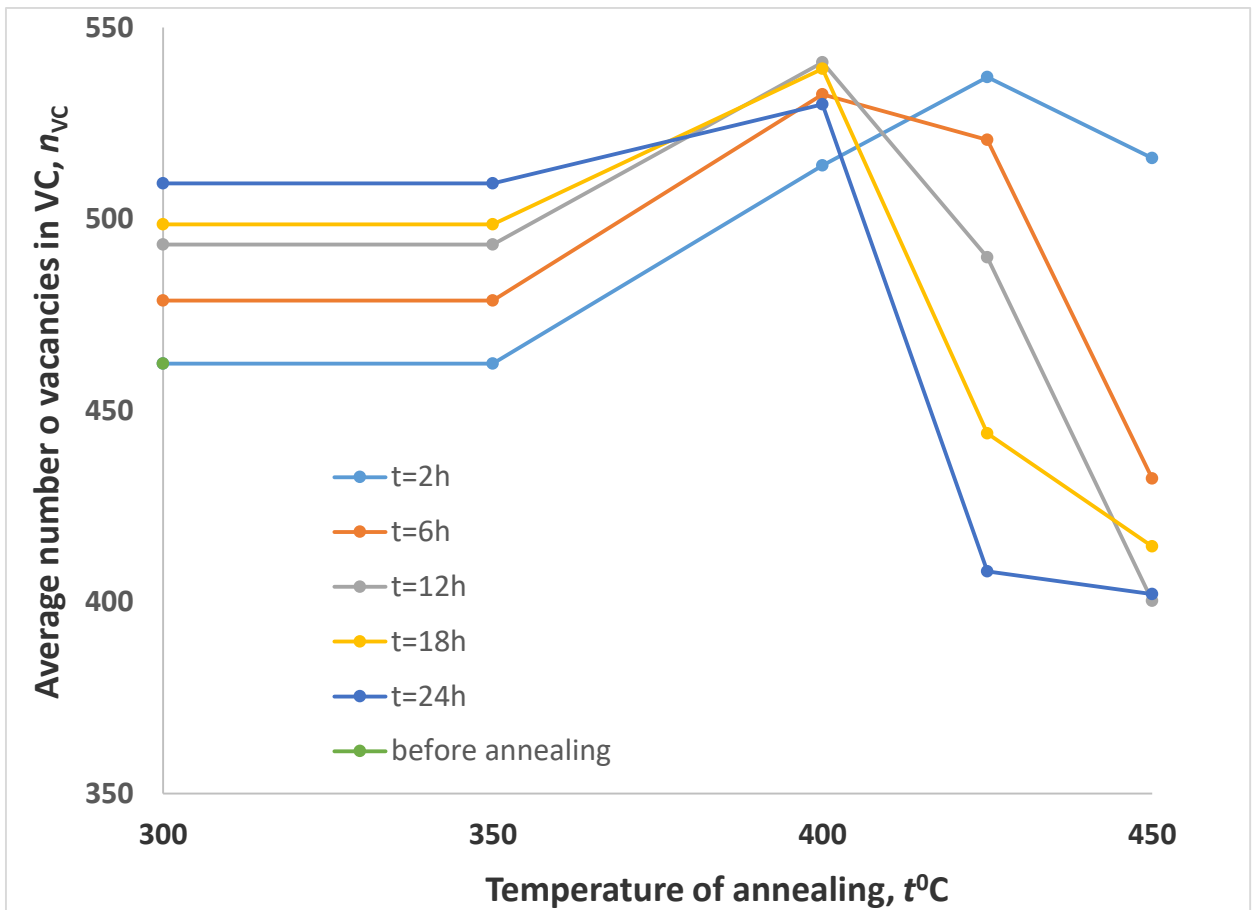


Рис. 3.19. Розрахункова залежність середньої кількості вакансій в VC,  $n_{VC}$ , від температури за фіксованим часом відпалу

### Висновки

1. Модифікований метод інтегрування диференціальних рівнянь за кодом LSODE забезпечує надійність дослідження кінетики дефектів в опромінених реакторних матеріалах.

2. Знайдено залежність від флаксу середнього розміру і чисельної щільності VC та SIAC у чистому залізі, яке опромінено нейтронами, має три режими, які позначені двома критичними значеннями флаксу  $6,9 \times 10^{-9}$  дпа/с і  $1,70 \times 10^{-7}$  дпа/с для обох флюенсів: 0,026 дпа та 0,19 дпа. Уперше встановлено, що при малих и великих флаксах спостерігається близькі значення  $D_{SIAC}$ , що може бути обґрунтуванням використання даних, отриманих при іонному опроміненні або у науково-дослідних атомних реакторах до прогнозування кінетики процесів у комерційних атомних реакторів.

3. Знайдена залежність індукованого опроміненням зміцнення від флаксу

має два режими з критичним значенням  $1,70 \times 10^{-7}$  дпа/с ( $1,10 \times 10^{14}$  н/м<sup>2</sup>/с).

4. Показано, що ідентичні критичні значення залежностей потоку величини і чисельної щільності VC та SIAC можна пояснити взаємозв'язком між положенням піку розподілу точкових кластерів після каскадної стадії і критичними розмірами VC і SIAC.

5. Знайдено засіб використання результату КД про індуковане опроміненням збільшення межі текучості для оцінки зміни механічної стабільності реакторних матеріалів у рамках фізико-механічної моделі міжзеренного руйнування, яке спричинено еволюцією пор.

### Список використаних джерел

1. Kachanov L.M. Rupture Time Under Creep Conditions. *International Journal of Fracture*. 1999. Vol. 97. P. 11–18. URL: <https://doi.org/10.1023/A:1018671022008>
2. Rabotnov Ju.N. Creep Problems in Structural Members. North -Holland Publishing Company, Amsterdam and John Wiley & Sons, Inc., New York, 1969. 822 p. URL: [https://books.google.com.ua/books/about/Creep\\_Problems\\_in\\_Structural\\_Members.html?id=WKQmzQEACAAJ&redir\\_esc=y](https://books.google.com.ua/books/about/Creep_Problems_in_Structural_Members.html?id=WKQmzQEACAAJ&redir_esc=y)
3. Murakami S. Continuum damage mechanics: A continuum mechanics approach to the analysis of damage and fracture. Dordrecht, Heidelberg, London, New York: Springer Sciences + Business Media, 2012. 395 p. – URL: <http://www.gbv.de/dms/tib-ub-hannover/717052052.pdf>, No. 17. P. 7020-7024. URL: <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2007.01.045>
4. Lemaitre J., Desmorat R. Anisotropic damage law of evolution. *Eur. J. Mech. A /Solids/*. 2000. Vol. 19. №2, P. 187-208. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0997753800001613>
5. Hansen N. R. Schreyer H. L. A thermodynamically consistent framework for theories of elastoplasticity coupled with damage. *Int. J. Solid. Structures*. 1994. Vol. 31. №. 3, P. 359-389. URL: [https://doi.org/10.1016/0020-7683\(94\)90112-0](https://doi.org/10.1016/0020-7683(94)90112-0)
6. Chow C.L., Wang J. An anisotropic theory of elasticity for continuum damage mechanics. *International Journal of Fracture*. 1987. Vol. 33. №1, P. 3-16. URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/BF00034895>
7. Bobyr M., Khalimon O., Bondarets O. Phenomenological damage models of anisotropic structural materials. *Journal of Mechanical Engineering NTUU «Kyiv Polytechnic Institute»*. 2013. № 67, P. 5-13. URL: [http://nbuv.gov.ua/UJRN/VKPI\\_mash\\_2013\\_67\\_3](http://nbuv.gov.ua/UJRN/VKPI_mash_2013_67_3)
8. Usov V.V., Shkatulyak N.M. Fractal nature of the dislocation structure of low-alloyed steel after controlled rolling. *Russian Physics Journal*. 2004. Vol. 47. №11, P. 1139-1146. URL: <https://link.springer.com/article/10.1007/s11182-005->

0044-y

9. Shkatulyak N.M., Usov V.V., Smirnova S.V. Single crystal magnesium lithium alloy elastic constants. *International Journal of Advances in Materials Science and Engineering (IJAMSE)*. 2015.Vol. 4. №.4, P.1-11. URL: <https://issuu.com/ijamsejournal/docs/4415ijamse01/1>

10.Jung, J.-G.; Jung, M.; Lee, S.-M.; Shin, E.; Shin, H.-C.; Lee, Y.-K. Cu precipitation kinetics during martensite tempering in a medium C steel. *J. Alloys Compd.* 2013. Vol. 553. P.299–307. doi:10.1016/j.jallcom.2012.11.108.

11.Jung, J.-G.; Jung, M.; Kang, S.; Lee, Y.-K. Precipitation behaviors of carbides and Cu during continuous heating for tempering in Cu-bearing medium C martensitic steel. *J. Mater. Sci.* 2014. Vol.49. P. 2204–2212, doi:10.1007/s10853-013-7914-4.

12. 33.Ngayam-Happy R., Olsson P., Becquart C.S., Domain C. Isochronal annealing of electron-irradiated dilute Fe alloys modelled by an ab initio based AKMC method: Influence of solute–interstitial cluster properties. *Journal of Nuclear Materials.* 2010. Vol. 407. P. 16–28.

13.Gokhman A., Pecko S. and Slugeň V. Simulation of nanostructure evolution under helium implantation in Fe-(2.5-12.5)at% Cr alloys at temperature of 343K. *Radiation Effects and Defects in Solids.* 2015. Vol. 170. P . 745-757.

14. Boas W., Mackenzie J.K. Anisotropy in metals. *Progress in Metal Physics.* 1950. Vol. 2. P. 90-120. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0502820550900062>

15. Kearns J.J. Thermal expansion and preferred orientation in zircaloy. URL: <https://ntrl.ntis.gov/NTRL/dashboard/searchResults/titleDetail/WAPDTM472.xhtml>

16. Vishnyakov Ya.D et al. The theory of texture formation in metals and alloys. M.: Science, 1979. 343 c. URL: <https://lib-bkm.ru/15173>

17.Shkatulyak N.M., Usov V.V., Volchok N.A. et al. Effect of Reverse Bending on Texture, Structure, and Mechanical Properties of Sheets of Magnesium Alloys with Zinc and Zirconium. *Physics of Metals and Metallography.* 2014. Vol.

115. № 6, P. 609–616. URL:  
<https://link.springer.com/article/10.1134/S0031918X1406012X>

18. Grytsyna V., Malykhin D., Yurkova T. et al.. On Structural Aspects of Texture Changes During Rolling of Zr-2.5%Nb Alloy. *East Eur. J. Phys.* 2019. Vol. 3, 38-44. URL: <https://doi.org/10.26565/2312-4334-2019-3-05>

19. Tannous C. Crystal structure, X-ray diffraction and Oblique geometry: Volumes, distances and angles. *European Journal of Physics.* 2019. hal-02268849v2. URL: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02268849v2/document>

20. Tannous C. Crystal structure, X-ray diffraction and Oblique geometry: Volumes, distances and angles. *European Journal of Physics.* 2019. hal-02268849v2. URL: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02268849v2/document>

21. Liu, Y., Li, W., & Li, Y. Microstructure and mechanical properties of ZE10 magnesium alloy prepared by equal channel angular pressing. *International Journal of Minerals, Metallurgy and Material.* 2009. Vol. 16, № 5, P. 559-563. URL: [https://doi.org/10.1016/S1674-4799\(09\)60096-0](https://doi.org/10.1016/S1674-4799(09)60096-0)

22. Брюханов А.А., Волчок Н.А., Совкова Т.С. Текстура и анизотропия модуля Юнга холоднокатаных листов титанового сплава ПТЗ-В. *Физика и техника высоких давлений.* 2010. №1. С. 123-132. URL: <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/69270>

23. Toloraya V.N., Kablov E.N., and Svetlov I.L. Growth texture due to directed crystallization of high-temperature nickel alloys. *Metal Science and Heat Treatment.* 2006. Vol. 48. № 7-8. P. 352-359. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11041-006-0098-7> G.

24. Gorelik S.S., Rastorguev L.N., and Skakov Yu.A. *Roentgenography and Electron-Optical Analysis.* M.: Metallurgia, 1981. 370 p. URL: <https://dokumen.tips/download/link/-5572124c497959fc0b9064de.html>

25. Kresse, J. Furthmuller, Efficiency of ab initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Comput. Mater. Sci.* 1996. №6, P. 615–650 [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0).

26. J. Neugebauer, M. Scheffler, Adsorbate-substrate and adsorbate-adsorbate

interactions of Na and K adlayers on Al (111). *Phys. Rev. B.* 1992. №24, P.16067.  
[https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0). S.

27. Norgett M.J., Robinson M.T., Torrens. I.M. A proposed method of calculating displacement dose rates. *Nucl. Eng. Des.* 1975. Vol. 33. P. 50-54.

28. Meslin E., Barbu A., Boulanger L., Radiguet B., Pareige P., Arakawa K., Fu C.C. Cluster-dynamics modelling of defects in  $\alpha$ -iron under cascade damage conditions. *J. Nucl. Mater.* 2008. Vol. 382. P.190-196.

29. Hardouin Duparc A., Moingeon C., Smetniansky-de-Grande N., Barbu A. Microstructure modelling of ferritic alloys under high flux 1 MeV electron irradiations. *J. Nucl. Mater.* 2002. Vol. 302. P. 143–155.

30. Puls M., Woo C., Norgett M. Shell-model calculations of interaction energies between point defects and dislocations in ionic crystals. *Philosophical Magazine.* 1977. Vol. 36 № 6. P. 1457-1472.

31. Fu C.C., Willaime F., Ordejón P. Stability and mobility of mono- and di-interstitials in  $\alpha$ -Fe. *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. P. 175503.

32. Willaime F., Fu C.C., Marinica M.C., Torre J.D. Stability and mobility of self-interstitials and small interstitial clusters in  $\alpha$ -iron: Ab initio and empirical potential calculations, *Nucl. Instrum. and Meth.* 2005. Vol. 228. P. 92-99.

33. Fu C.C., Torre J.D., Willaime F., Bocquet J.-L., Barbu A. Multiscale modelling of defect kinetics in irradiated iron. *Nat. Mater.* 2005. Vol. 4. P. 68-71.

34. Ziegler J. F. SRIM-2003 // *Nucl. Instr. and Meth. B.* 2004. Vol. 219/220. P. 1027–1036.

35. B. Radiguet, PhD thesis, Rouen University, 2004.

36. Kondria M., Gokhman A. Cluster dynamics simulation of the flux effect for neutron

irradiated pure iron. *Radiation Effects and Defects in Solids.* 2019. Vol. 174. P. 56-65.

37. Domain C., Becquart C.S. Ab initio study of foreign interstitial atom (C, N) interactions with intrinsic point defects in  $\alpha$ -Fe *J. Phys. Rev.* 2004. Vol. 69. P.144112.11.A. Duong-Hardouin Duparc, PhD thesis, Paris XI-Orsay University,



1997.

38. Ortiz C.J., Caturla M.J., Fu C.C., Willaime F., He diffusion in irradiated  $\alpha$ -Fe: An ab-initio-based rate theory model. *Phys. Rev.* 2007. Vol. 75 № 10. P. 100-102.

39. Bacon D.J., Calder A.F., Gao F. Defect production due to displacement cascades in metals as revealed by computer simulation. *J. Nucl. Mater.* 1997. Vol. 251. P. 1-12.

40. Mayoral M.H, Briceño D.G. PERFECT Project, Advance Report, Deliverable P26. Task II-3-2; Interreg Europe: Lille, France, 2008.

41. Eldrup M., Singh B.N., Zinkle S.J., Byun T.S., Farrell K. Dose dependence of defect accumulation in neutron irradiated copper and iron. *J. Nucl. Mater.* 2002. Vol. 307–311. P. 912-917.

42. Ovcharenko, A.M., Golubov, S.I., Woo, C.H., Huang H., GMIC++: Grouping method in C++: an efficient method to solve large number of master equations comp. *Phys. Commun.* 2003. Vol. 152. P. 208–226.

43. Jourdan T., Bencteux G., Adjanor G. Efficient simulation of kinetics of radiation induced defects: A cluster dynamics approach. *Journal of Nuclear Materials.* 2014. Vol. 444. P. 298–313.

44. Soneda N., Diaz de la Rubia T. Defect production, annealing kinetics and damage evolution in  $\alpha$ -Fe: An atomic-scale computer simulation. *Philos. Mag.* 1998. Vol. 78 № 5, P. 995-1019

45. Johnson R.A., Interstitials and Vacancies in  $\alpha$  iron. *Phys. Rev.* 1964. Vol. 134 № A1329, P. 423-427.

46. Bergner, F., Almazouzi A., Hernandez-Mayoral M., Lambrecht, M., Ulbricht, A. In combined TEM, PAS and SANS investigations of neutron irradiated pure iron. Nuclear Energy Agency. 2008. Vol. 260. P. 283–290.

47. Konobeev, Yu.V., Dvoriashin A.M., Porollo S.I. Swelling and microstructure of pure Fe and Fe–Cr alloys after neutron irradiation to  $\sim 26$  dpa at 400 °C. *J. Nucl. Mater.* 2006. Vol. 355. P. 124–130.

48. Gokhman A., Bergner F. Cluster dynamics simulation of point defect

clusters in neutron irradiated pure iron. *Radiat. Eff. and Def. in Solids*. 2010. Vol. 165. P. 216-226.

49. Singh, B.N., Eldrup, M., Golubov, S.I., Edwards, D.J., Jung, P. Final report on neutron irradiation at low temperature to investigate plastic stability and at high temperature to study cavitation. RIS0-R-1496. 2005. P. 38-41.

50. Gokhman O., Kondria M. Cluster dynamics of the first kind phase transition in aged and irradiated materials. / «The ninth International Conference on Material Technologies and MMT-2016» Ariel, Israel, July 25–29 2016. P. 3:42-3:51.

51. Kondria M., Gokhman A. Cluster dynamics simulation of the flux effect for neutron irradiated pure iron. *Radiation Effects and Defects in Solids*. 2019. Vol. 174. P. 56-65.

52. Odette G. R., Lucas G. E. Recent progress in understanding reactor pressure vessel steel embrittlement. *Radiat. Eff. Defects Solids*. 1998. Vol. 144. P. 189–231.

53. Bergner F., Ulbricht A., Hein H., Kammel M. Flux dependence of cluster formation in neutron-irradiated weld material. *Journal of Physics Condensed Matter*. 2008. Vol 20. P. 104262-104268.

54. Konobayashi S., Kikuchi H., Takahashi S., Kamada Y., Ara K., Yamamoto T., Klingensmith D., Odette G.R. Neutron irradiation effects on magnetic minor hysteresis loops in nuclear reactor pressure vessel steels. *Philosophical Magazine*. 2008. Vol. 88. P. 1791-1800.

55. Hernandez-Mayoral M. Effect of neutron flux on neutron-induced microstructure of RPV materials. EU-FP7, project LONGLIFE, Deliverable. D 3.4. 2013.

56. Jansson V., Malerba L. OKMC simulations of Fe-C systems under irradiation: Sensitivity studies. *J. Nucl. Mater*. 2014. Vol. 452. P. 118-124.

57. A. Wagner, F. Bergner, R. Chaouadi, H. Hein, M. Hernandez-Mayoural, M. Serrano, A. Ulbricht, E. Altstadt, Effect of neutron flux on the characteristics of irradiation-induced nanofeatures and hardening in pressure vessel steels, *Acta Materialia*. 2016. Vol. 104. P. 131-142.

58. Amino T. Detection of one-dimensional migration of single self-interstitial

atoms in tungsten using high-voltage electron microscopy. *Scientific Reports*. 2016. Vol. 6. P. 1-10.