

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

**Державний заклад
«Південноукраїнський національний педагогічний
університет імені К.Д. Ушинського»**

КОНДРЯ МАРІАННА СЕРГІЇВНА

УДК 531.3-047.58:621.039.51(043.5)

**МУЛЬТИМАСШТАБНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КІНЕТИКИ ТОЧКОВИХ
ДЕФЕКТІВ В РЕАКТОРНИХ МЕТАЛАХ**

01.04.07- фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня

кандидата фізико-математичних наук

Одеса–2020

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано на кафедрі фізики Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» Міністерства освіти і науки України

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Гохман Олександр Рафаїлович,
Державний заклад «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К.Д. Ушинського»,
завідувач кафедри фізики

Офіційні опоненти:

- **Литовченка Петра Григоровича,** доктора фізико-математичних наук, професора, головного наукового співробітника відділу радіаційної фізики Інституту ядерних досліджень НАН України;
Тюріна Олександра Валентиновича, доктора фізико-математичних наук, професора, завідувача кафедри економічної кібернетики та інформаційних технологій Одеського національного університету імені І. І. Мечникова.

Захист відбудеться «6» травня 2020 року о 14⁰⁰ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради К 41.053.07 при Державному закладі «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» за адресою: 65000, м. Одеса, вул. Старопортофранківська, 71. Аудитория 224.

Із дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» за адресою: 65020, м. Одеса, вул. Старопортофранківська, 36.

Автореферат розіслано «5» квітня 2020 року.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради

О. Х. Тадеуш

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність дослідження. Для складних багатокомпонентних фізичних систем, найбільш вдалим можливо вважати мультимасштабний підхід. Дослідження фізичних механізмів процесів, що мають місце в конструкційних реакторних матеріалах під опроміненням, доцільно виконувати в межах саме зазначеного підходу. Для корпусів реакторів високого тиску атомних станцій необхідно послідовно розглядати:

1. Каскадну стадію опромінення, що триває 10^{-15} - 10^{-12} секунд в об'ємі із характерним розміром до 10 нм;

2. Дифузійну стадію еволюції кластерів та преципітатів, що, або виникають на каскадній стадії, або утворюються після неї та проходять стадію нуклеації, детерміністського зростання та стадію зрілості (Оствальда) протягом усього часу експлуатації за повним об'ємом корпусу реактора;

3. Стадію взаємодії дислокацій з наноперешкодами (кластерами та преципітатами), що спричинено опроміненням.

Результатом останньої стадії є змінення механічних властивостей корпусу реактора, що може призводити до таких негативних наслідків як нейтронна крихкість, яку необхідно враховувати в процесі експлуатації реакторів протягом їх нормативного терміну (40 років) та особливо в процесі збільшення їх терміну експлуатації до 60 років.

Процеси на каскадній стадії досліджуються методом молекулярної динаміки, методом Монте Карло та методом *ab-initio*, що дозволяє отримати дані щодо розподілу кластерів наприкінці каскадної стадії (на початку дифузійної стадії). Використання зазначених методів для дослідження дифузійної стадії є недоцільним і наразі потребує часу для комп'ютерного моделювання, який неможливо забезпечити на існуючому рівні розвитку комп'ютерної техніки. Метод кластерної динаміки, що започатковано у 20-30 роки минулого століття, є найбільш доречним методом мультимасштабного моделювання дифузійної стадії еволюції кластерів та преципітатів у реакторних матеріалах. Поширення практики його використання дещо уповільнюється за рахунок наступних чинників:

1. Система звичайних диференціальних рівнянь, що описують кінетику кластерів та преципітатів в опроміненому матеріалі, є жорсткою системою звичайних диференціальних рівнянь. Інтегрування такої системи традиційними чисельними методами типу Рунге-Кутта може призводити до чисельної нестабільності рішення і внаслідок цього до невірних фізичних результатів.

2. Існують проблеми вибору експериментальних методів для визначення входних параметрів методу кластерної динаміки: енергії формування, енергії міграції, коефіцієнта дифузії дефектів та інших характеристик дефектної структури для моделювання кінетики процесів у реакторних матеріалах під опроміненням.

Саме розгляд зазначених питань висвітлено в першому розділі дисертації, де проаналізовано приклади застосування кластерної динаміки щодо дослідження конструкційних реакторних матеріалів та обґрунтовано

вибір методу інтегрування майстер-рівняння для комерційно чистого α -заліза та його сплавів. Також наведено рекомендації щодо використання даних того чи іншого експериментального методу дослідження (методу малокутового розсіювання рентгенівських променів або нейтронів, методу позитронно-аннігіляційної спектроскопії, методу просвічуючої електронної мікроскопії та методу атомного зондування) для здійснення процедури підгонки параметрів моделі кластерної динаміки.

У наступних розділах дисертації представлено використання методу кластерної динаміки щодо дослідження актуальних проблем фізики опромінених реакторних металів. Так, у другому розділі розглядається проблема урахування впливу зміни потужності опромінення (флаксу) в моделюванні довготривалих процесів (до 40-60 років) у діючих реакторах атомних станцій за даними відносно короткотривалих експериментів (від часу до року), що проводяться в науково-дослідних атомних реакторах на зразках-свідках, що розташовуються в заданих місцях реактора, а також у процесі іонного опромінення, коли малий флакс та великий час опромінення у діючому промисловому реакторі змінюються на великий флакс та короткий час опромінення за умови тієї ж дози опромінення (флюенса). У третьому розділі дисертації розглядаються проблема врахування зміни температури реактора на еволюцію кластерів та відповідну зміну механічних властивостей корпусу реактора. Також у цьому розділі досліджується дія опромінення на процес пластичної деформації та руйнування реакторних металів під навантаженням. У четвертому розділі дисертації розглядається проблема врахування впливу вуглецю на кінетику кластерів точкових дефектів, а також досліджується питання щодо розмірності руху міжвузлів у вольфрамі, що опромінюється.

- **Зв'язок роботи з науковими програмами:** дисертація є частиною досліджень, що виконуються на кафедрі фізики державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет ім. К. Д. Ушинського» за темами:

- Мультимасштабне моделювання процесу пластичної деформації текстурованих полікристалів (державний реєстраційний номер №0114U000006).

- Мультимасштабне моделювання процесів термомеханічної обробки та опромінювання актуальних металів і сплавів (державний реєстраційний номер №0114U000002).

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є встановлення фізичних механізмів процесів, що відбуваються в конструкційних реакторних матеріалах у процесі опромінюванні, на прикладі α -заліза та вольфраму.

Для реалізації мети було поставлено та розглянуто низку завдань:

1. Проаналізувати фізичні принципи кластерної динаміки та вибір методу інтегрування системи жорстких звичайних диференціальних рівнянь, що описують формування і кінетику дефектів у конструкційних реакторних матеріалах у процесі опромінювання.

2. Змодельовати методом кластерної динаміки вплив зміни потужності опромінення (флаксу) на формування і кінетику вакансійних кластерів та кластерів міжвузлів у реакторних металах за умови незмінної дози опромінення (флюенсу).

3. Дослідити методом кластерної динаміки вплив зміни температури на дефектну структуру та еволюцію механічних властивостей конструкційних реакторних металів під навантаженням.

4. Відстежити методом кластерної динаміки вплив вуглецю на кінетику кластерів точкових дефектів та з'ясувати розмірності міграції міжвузлів у вольфрамі, що опромінюється.

Об'єктом дослідження є актуальні матеріали сучасного радіаційного матеріалознавства.

Предметом дослідження є кінетика точкових дефектів у α -залізі та вольфрамі під опроміненням.

Методи дослідження: мультимасштабне моделювання дефектної структури конструкційних металів радіаційного матеріалознавства, модифікований метод кластерної динаміки, фенеоменологічний метод визначення зміни межі текучості металів, індукованої опроміненням, метод оцінки впливу нейтронного опромінення на еволюцію пор у α -залізі за підходом Б. З. Марголіна до проблеми міжзеренного руйнування.

Наукова новизна одержаних результатів полягає у тому, що:

1. Модифіковано комп'ютерний код, який дозволяє проводити моделювання кінетики поодиноких вакансій та міжвузлів, вакансійних кластерів та кластерів міжвузлів з урахуванням різниці їх характерних часів у конструкційних реакторних матеріалах під електронним, іонним та нейтронним опромінюваннями.

2. Знайдено три режими залежності від флаксу середнього розміру і чисельної щільності вакансійних кластерів та кластерів міжвузлів у чистому залізі, які відповідають двом критичним значенням 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. У першому і третьому згаданих режимах спостерігаються близькі значення середнього розміру кластерів міжвузлів D_{SIAC} , що дозволяє використовувати дані, які отримано на науково-дослідному реакторі або при іонному опроміненні, для прогнозування значення D_{SIAC} у промисловому ядерному реакторі за умови одного і того ж флюенсу.

3. Визначено, що залежність індукованого опроміненням зміцнення від флаксу для чистого α -заліза, має два режими з критичним значенням $1,70 \times 10^{-7}$ дпа/с ($1,10 \times 10^{14}$ н/м²/с). Досягнуто відповідності даних моделювання до експериментально знайденого збільшення межі текучості заліза при флюенсах нейтронного опромінення 0,026 і 0,19 дпа.

4. Показано можливість використання результату кластерної динаміки щодо збільшення межі текучості, індукованого опроміненням, до оцінки зміни механічної стабільності конструкційних реакторних матеріалів у межах фізико-механічної моделі міжзеренного руйнування, яке спричинено еволюцією пор, за підходом Б. З. Марголіна.

5. Зроблено висновок щодо 1D розмірності дифузії міжвузельних атомів у вольфрамі, що опромінено електронами, із порівняння експериментальних даних про ізохронний відпал вольфраму з результатами моделювання методом кластерної динаміки для моделей з 1D дифузією та 3D дифузією міжвузельних атомів.

Науково-практичне значення одержаних результатів:

1. Модифікований метод кластерної динаміки може бути застосовано для дослідження кінетики точкових дефектів та їх кластерів у чистих металах у процесі їх електронного, іонного та нейтронного опромінення, а також для визначення відповідного внеску до зміни механічних властивостей сплавів зазначених металів.

2. Результати щодо впливу флаксу на кінетику вакансійних кластерів та кластерів міжвузлів можуть бути використані у процесі прогнозування кінетики процесів у реакторних матеріалах протягом штатного та поширеного часу їх експлуатації (до 40-60 років) на основі даних короткотривалого іонного опромінення та опромінення нейтронами у науково-дослідних атомних реакторах.

3. Результати моделювання методом кластерної динаміки щодо зміни механічних властивостей опромінених реакторних матеріалів внаслідок зміни температури можуть бути використані для оцінки зміни механічних властивостей корпусу реактора під час нештатних ситуацій, що спричинено зміною температури теплоносія.

4. Результати моделювання методом кластерної динаміки кінетики точкових дефектів у вольфрамі щодо впливу вуглецю та розмірності міграції міжвузельних атомів можуть бути враховані у процесі дослідження зміни механічних властивостей вольфраму та його сплавів під опромінюванням.

Обґрунтованість і достовірність наукових результатів підтверджується надійністю комп'ютерного коду, що реалізує метод кластерної динаміки для інтегрування систем жорстких звичайних диференціальних рівнянь, що було встановлено за результатами його тестування на задачі Робертсона, порівнянням з результатами комп'ютерного коду D02EJF, який входить до бібліотеки програм Numerical Analytical Group (NAG), порівнянням результатів моделювання з експериментальними даними; відповідністю загальноприйнятим уявленням фізики радіаційних металів.

Особистий внесок здобувача полягає в тому, що:

1. Модифіковано код LSODE, що реалізує інтегрування системи жорстких звичайних диференціальних рівнянь кластерної динаміки.

2. Знайдено значення матеріальних параметрів моделі кластерної динаміки для α -заліза та вольфраму за наслідками порівняння результатів моделювання із даними експериментальних досліджень.

3. Проведено моделювання впливу флаксу на кінетику кластерів точкових дефектів у α -залізі, що опромінюється нейтронами.

4. Проведено розрахунок еволюції відносної площі пор у α -залізі, що опромінюється нейтронами під навантаженням.

Апробація результатів дисертації. Основні результати досліджень, що викладено в дисертаційній роботі, доповідались й обговорювались на наукових конференціях:

- The ninth International conference on Material Technologies and MMT-2016. Ariel University, Ariel, July 25 – August 03, 2016.
- International conference on Differential equations, Mathematical physics and application, Cherkasy, Ukraine, October 17-19, 2017.
- International Conference of Students and Young Scientists on Theoretical and Experimental Physics, HEUREKA Lviv, Ukraine, May 16-18, 2017.
- I Всеукраїнська науково-практична конференція здобувачів вищої освіти і молодих вчених «Фізичні процеси в енергетиці, екології та будівництві, Одеса», 17-18 квітня 2018.
- II Всеукраїнська науково-практична конференція здобувачів вищої освіти і молодих вчених фізичні процеси в енергетиці, екології та будівництві, Одеса, Україна, 11-12 квітня, 2019.
- International Conference of Students and Young Researchers in Theoretical and Experimental Physics “HEUREKA-2019, Lviv, Ukraine, May 14-16, 2019.

Публікації. Усього за темою дисертації опубліковано 15 друкованих праць, у тому числі 1 - у зарубіжному періодичному виданні, що індексується базою даних Scopus та 6 статей у періодичних виданнях, рекомендованих МОН України для публікації матеріалів дисертацій на здобуття вчених ступенів по фізико-математичним наукам, з них - 2 статті у виданнях, що індексуються базою даних Scopus. Решта публікацій - тези та матеріали республіканських та міжнародних науково-технічних конференцій.

Структура та обсяг дисертації. Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел, що складається із 215 найменувань. Повний обсяг роботи становить 151 сторінки друкованого тексту, що містить 15 таблиць та 59 рисунків.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано тематику досліджень, визначено об'єкт та предмет дослідження, обрано методи дослідження. Сформульовано мету і завдання, наукову новизну, окреслено практичне значення отриманих результатів. Наведено дані про результати досліджень, вказано на особистий внесок автора у визначенні результатів, винесених на захист. Представлено структуру дисертації.

У **першому розділі** проаналізовано фізичні принципи методу кластерної динаміки (КД), наводяться приклади застосування КД до опромінюваного α -заліза і його сплавів, обґрунтовано засіб реалізації КД у представленій дисертації. Особливу увагу приділено визначенню параметрів КД моделей з експерименту.

Метод кластерної динаміки було запропоновано у 30-х роках минулого століття Бокером [1] у процесі дослідження фазових перетворень води

(випаровування та конденсації). Майстер-рівняння КД для замкненої системи кластерів, у якій мобільними є тільки мономери, було записано у вигляді:

$$\frac{dC_n}{dt} = \beta_{n-1}C_{n-1} + \alpha_{n+1}C_{n+1} - (\beta_n + \alpha_n)C_n \quad (1)$$

Тут C_n – концентрація кластерів, що містять n мономерів; α_n (β_n) – коефіцієнт емісії (приєднання) мономеру з (до) кластеру розміром n (розміром кластеру тут і надалі буде вважатися як розмір кластеру в одиницях довжини, так і кількість його мономерів n) в одиницю часу. Перший та другий члени у правій частині майстер-рівняння (1) відповідають збільшенню кількості кластерів розміром n в одиницю часу за рахунок приєднання мономеру до кластера розміром $(n-1)$ та емісії мономеру з кластеру розміру $(n+1)$ відповідно, а третій член – зменшенню кількості кластерів розміром n в одиницю часу за рахунок приєднання та емісії мономерів з кластеру розміром n . Особливості будь-якої фізичної системи у методі КД задаються коефіцієнтами приєднання та емісії, а також додатково – функціями зовнішніх джерел та стоків мономерів у випадку незамкненої системи кластерів. Якщо розміром кластерів не можна нехтувати порівняно з відстанню між ними, то метод КД має бути модифіковано за підходом [2] для врахування так званого фрустраційного ефекту.

З 1997 року метод КД плідно використовується у задачах моделювання процесів формування та еволюції дефектної структури в металах та сплавах під дією опромінювання електронами, іонами та нейтронами [3], де кластери точкових дефектів та преципітати мають малі розміри порівняно з середньою відстанню між ними.

Актуальними завданнями використання методу кластерної динаміки для дослідження реакторних матеріалів дотепер є:

1. Визначення таких параметрів моделі як енергії формування та міграції структурних дефектів, питомої поверхневої енергії на межі між кластером та матрицею.
2. Вибір засобу розрахунку коефіцієнтів приєднання та емісії поодиноких мономерів та їх груп із кластеру.
3. Знаходження кількості дефектів та їх розподілу за розміром на каскадній стадії опромінення.
4. Розробка ефективного методу інтегрування майстер-рівняння кластерної динаміки.

Майстер-рівняння КД для випадку нейтронного опромінення записується у вигляді наступної жорсткої системи диференціальних рівнянь [4,5]:

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

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

$$\frac{dC_{nv(i)}}{dt} = G_{nV(I)} + \beta_{(n-1)v(i)}^{v(i)} C_{(n-1)v(i)} + (\beta_{(n+1)v(i)}^{i(v)} + \alpha_{(n+1)v(i)}^{v(i)}) C_{(n+1)v(i)} - (\beta_{nv(i)}^{v(i)} + \beta_{nv(i)}^{i(v)} + \alpha_{nv(i)}^{v(i)}) C_{nv(i)} \quad \text{for } n > 2, \quad (4)$$

де η - коефіцієнт ефективності, тобто відношення кількості мономерів точкових дефектів в кінці каскадної стадії до загальної кількості цих дефектів, створених на початку цієї стадії, f_{vcl} (f_{icl}) – відношення кількості поодиноких вакансій (міжвузельних атомів), які утворюють VC (SIAC), до загальної кількості вакансій (міжвузельних атомів) наприкінці каскадного етапу, ρ_d – щільність дислокації, d – середній розмір зерен, $C_{1v(i)}^e$ – рівноважна термічна концентрація вакансій (міжвузельних атомів), $D_{v(i)}$ – коефіцієнт дифузії, що обчислюється за формулою (5):

$$D_{v(i)} = D_{v(i)0} \exp\left(-\frac{E_{mv(i)}}{k_B T}\right), \quad (5)$$

де $\beta_{ni}^{v(i)}$ – коефіцієнт приєднання точкових дефектів двомірними кластерами міжвузельних атомів з радіусом r_{ni} , який визначається за формулою (6):

$$\beta_{ni}^{v(i)} = \frac{2\pi r_{ni} D_{v(i)} C_{1v(i)} Z_n^{v(i)}}{\Omega_{Fe}} \quad (6)$$

де $Z_n^{v(i)}$ – поправочний коефіцієнт, що визначає захоплення вакансій (міжвузельних атомів) кластера міжвузлів, визначається за формулою (7):

$$Z_{n\theta}^{\theta'} = Z_{\theta'}^d + \left[\left(\frac{b}{8\pi a} \right)^{1/2} z_{\theta'} - Z_{\theta'}^d \right] / n^{\gamma_{\theta'}/2} \quad (7)$$

$\beta_{nv}^{v(i)}$ – коефіцієнт приєднання точкових дефектів сферичним кластером вакансій з радіусом R_{nv} , обчислений згідно до наближення дифузійного контрольованого режиму за формулою (8):

$$\beta_{nv}^{v(i)} = \frac{4\pi R_{nv} D_{v(i)} C_{1v(i)}}{\Omega_{Fe}} \quad (8)$$

$\alpha_{nv(i)}^{v(i)}$ – 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 (енергії зв'язку кластера міжвузельних атомів E_{bni}):

$$\alpha_{nv}^v = \beta_{(n-1)v}^v \cdot \exp\left(\frac{\Delta G_v(n) - \Delta G_v(n-1)}{k_B T}\right) \quad (9)$$

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

де E_{bni} розраховується з [3,6] за формулою (11):

$$E_{n\theta}^B = E_{\theta}^f + \frac{E_{2\theta}^B - E_{\theta}^f}{2^{\sigma} - 1} [n^{\sigma} - (n-1)^{\sigma}] \quad (11)$$

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

Для виконання досліджень методом КД у дисертації було вибрано безкоштовний комп'ютерний код LSODE (Livermore Solver for Ordinary Differential Equations, Лівермор вирішувач для звичайних диференціальних рівнянь), який був створений у 80-х роках ХХ століття для розв'язання спеціальних задач кінетики багатокомпонентних систем у лабораторії Лівермор (США). Можливість заміни комп'ютерного коду D02EJF (бібліотека наукових комп'ютерних програм з Фортрану - Numerical Analytical Group (NAG)) на код LSODE було продемонстровано на прикладі інтегрування відомої задачі Робертсона [7], де розглядається система жорстких диференціальних рівнянь для типової моделі хімічної кінетики системи з різними характерними часами реакцій. Було встановлено, що код D02EJF NAG [8] має деяку перевагу у швидкодії перед кодом LSODE [9], що не є суттєвим для моделювання методом КД у нашому дисертаційному дослідженні. Отож, результатом порівняльного аналізу кодів [8] та [9] є висновок щодо можливості використання безкоштовного коду LSODE для дослідження задач кінетики систем, що описуються системою жорстких звичайних диференціальних рівнянь.

У **другому розділі** досліджено проблему, що виникла на початку розвитку радіаційного матеріалознавства та є актуальною дотепер: вплив опромінення на структуру та властивості матеріалу залежить тільки від дози (флюенсу опромінення, ψ) або додатково і від потужності опромінення (флаксу, ϕ)? Зазначена проблема має не тільки теоретичне, але і прикладне значення у зв'язку з тим, що багаточисленні дослідження стабільного функціонування у часі як фізичних приладів (наприклад, напівпровідникових сенсорів у космічному просторі), так і технічних конструкцій (корпусів атомних станцій та оболонок тепловиділяючих елементів в атомному реакторі), використовуються для довгострокових прогнозів на основі короточасних випробувань, коли флакс збільшується в тисячі та мільйони разів для досягнень відповідного флюенсу. У нашому дослідженні [10] майстер-рівняння КД та параметри матеріалу чистого заліза для моделювання КД взято з [11], де експериментальні результати ТЕМ [12], SANS [12,13] та PAS, [14,15] було застосовано для калібрування моделі КД. 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. 1-4) визначено за функціями розподілу розмірів VC та SIAC за результатами КД.

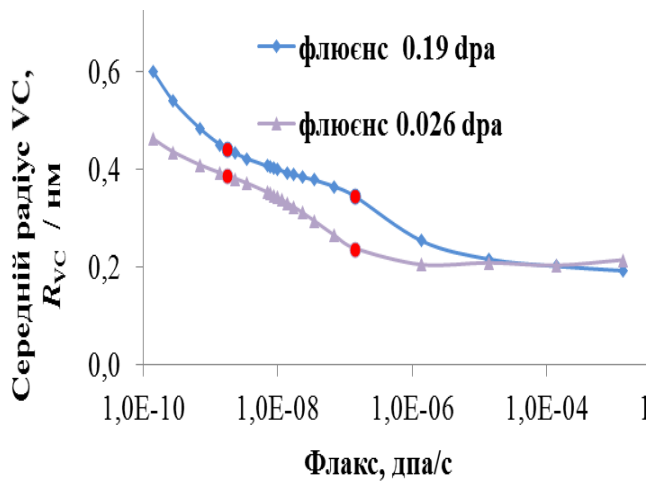


Рис. 1. Залежність середнього радіуса VC (R_{VC}) від флаксу для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичні флаксу).

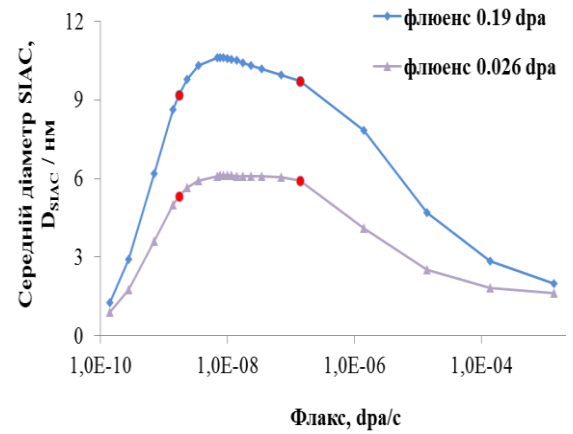


Рис. 2. Залежність середнього діаметра SIAC (D_{SIAC}) від флаксу для двох значень флюенсу (червоні точки відзначають критичні флаксу).

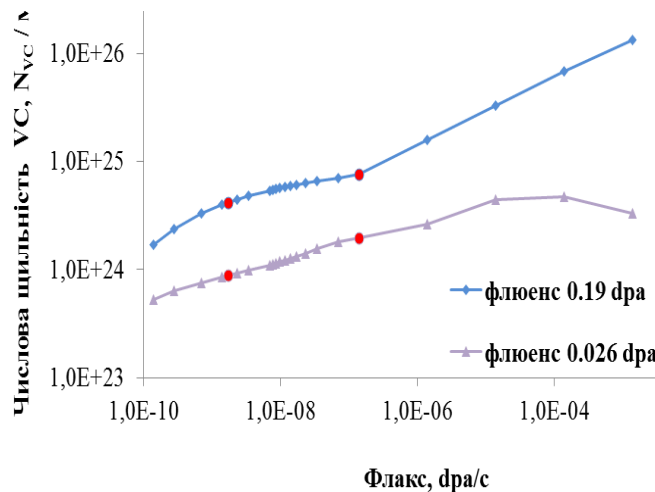


Рис. 3. Залежність чисельної щільності VC (N_{VC}) від флаксу для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичні флаксу).

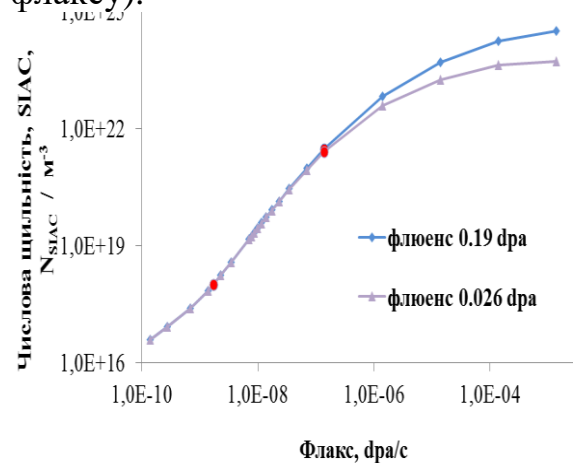


Рис. 4. Залежність чисельної щільності SIAC (N_{SIAC}) від флаксу для двох значень флюенсу (червоні точки відзначають критичні флаксу).

Згідно з [16], у нашому дослідженні індуковане опроміненням зміцнення оцінюється величинами $(N_{VC} \times R_{VC})^{0.5}$ і $(N_{SIAC} \times D_{SIAC})^{0.5}$ для VC і SIAC відповідно. Як для VC, так і для SIAC залежність зміцнення не має трьох режимів, а характеризується двома режимами з критичним значенням $\phi_{t2} = 1,70 \times 10^{-7}$ дпа/с ($1,1 \times 10^{14}$ н/м²/с) (рис. 5, 6).

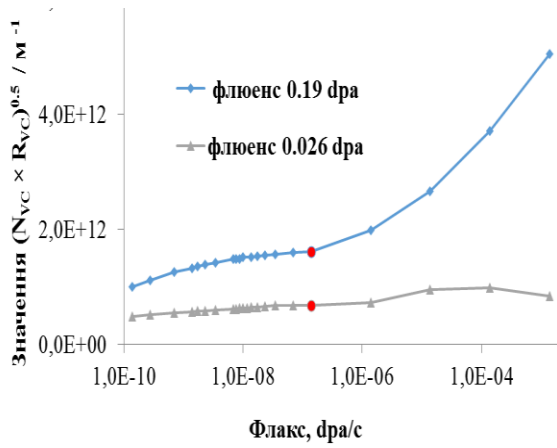


Рис. 5. Залежність значення $(N_{vc} \times R_{vc})^{0.5}$, що визначає індуковане опромінення ущільнення внаслідок утворення VC для двох значень флюенсу (червоні точки відзначають критичний флюкс).

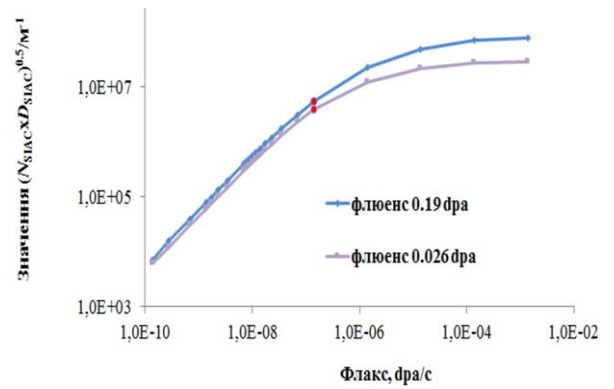


Рис. 6. Залежність від флюксу величини $(N_{SIAC} \times D_{SIAC})^{0.5}$, що визначає індуковане опромінення утворення за рахунок формування SIAC для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичний флюкс).

Спостерігаються два режими ефекту флюксу для концентрації поодиноких вакансій (C_{1v}) та поодиноких міжвузельних атомів (C_{1i}) з критичним значенням $\varphi_{t2} = 1,70 \times 10^{-7}$ dra/c (рис. 7, 8).

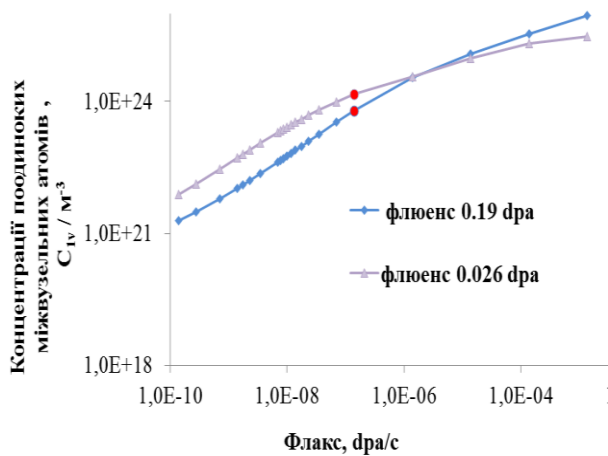


Рис. 7. Залежність концентрації поодиноких вакансій (C_{1i}) від флюксу для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичний флюкс).

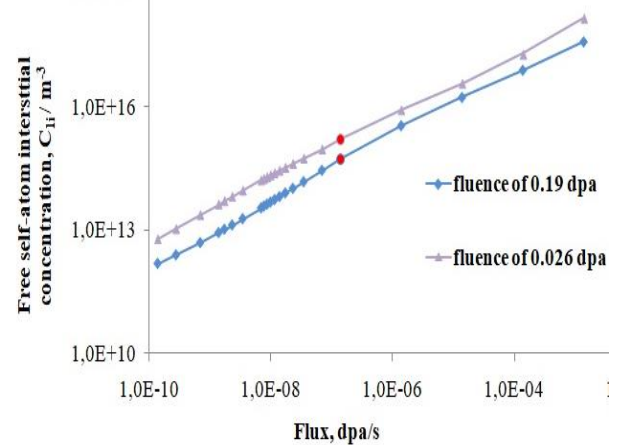


Рис. 8. Залежність концентрації поодиноких міжвузельних атомів (C_{1i}) від флюксу для двох значень флюенсу (червоні точки позначають критичний флюкс).

Знайдено три режими залежності від флюксу середнього розміру і чисельної щільності вакансійних кластерів та кластерів міжвузлів у α -залізі, які відповідають двом критичним значенням флюксу $6,9 \times 10^{-9}$ dra/c і $1,70 \times 10^{-7}$ dra/c для обох флюенсів 0,026 dra та 0,19 dra. У першому і третьому згаданих режимах, спостерігаються близькі значення середнього розміру кластерів міжвузлів D_{SIAC} , що дозволяє використовувати дані, що отримано

на науково-дослідному реакторі або в процесі іонного опромінення для прогнозування значення D_{SIAC} у промисловому ядерному реакторі за умовою одного і того ж флюенсу.

У **третьому розділі** методом КД досліджено вплив зміни температури на структуру та механічні властивості корпусу атомного реактора. Визначалось як змінюються середній розмір і чисельна щільність VC та SIAC для умов опромінювання [17,18], якщо температура реактора БР2 (м. Мол, Бельгія) зменшиться до 123 °С після 0,46, 0,96, 2,31, 6,94, 11,6, 12,2, 12,7 13,3 13,9, 14,5, 14,6, 14,8 та 15 діб опромінення при температурі 300 °С. Результати розрахунків представлено на рис. (9, 10).

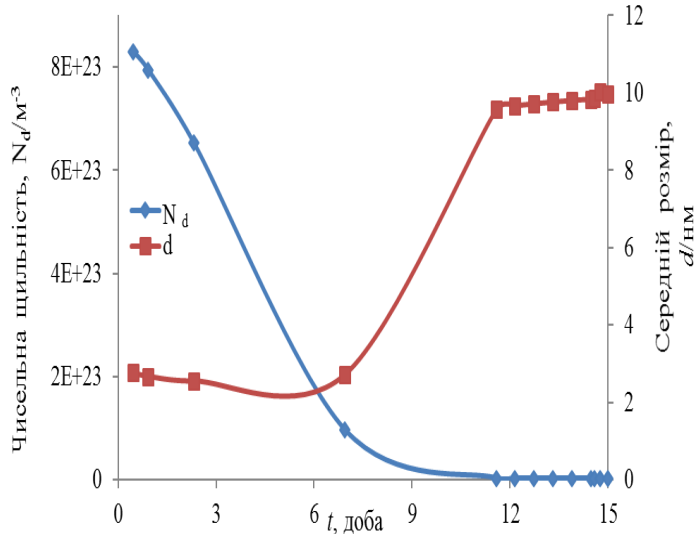


Рис. 9. Зміна чисельної щільності, N_d , та середнього розміру, d , SIAC в α – залізі у залежності від часу для нейтронного флаксу [19,20], коли температуру реактора було зменшено від 300 °С до 123 °С.

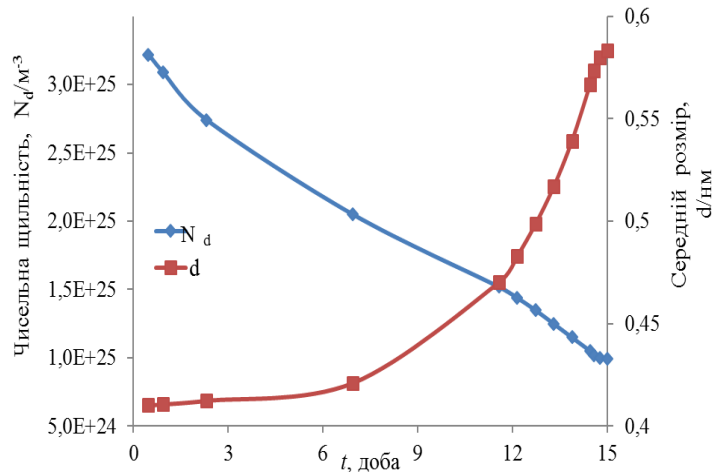


Рис. 10. Зміна чисельної щільності, N_d , та середнього розміру, d , VC в α – залізі залежно від часу для нейтронного флаксу [17,18], коли температуру реактора було зменшено від 300 °С до 123 °С.

Значення $\Delta\sigma$ для α -заліза в залежності від часу опромінення, коли температура реактора було зменшено від 300 °С до 123 °С, наведено на рис. 11.

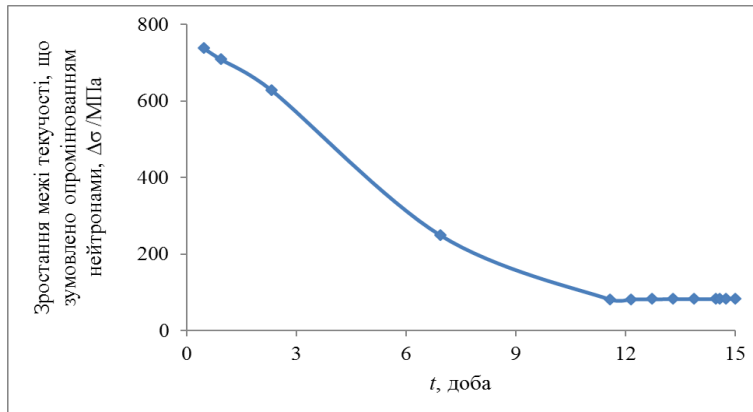


Рис. 11. Зміна межі текучості α – заліза, що зумовлено опромінюванням нейтронами з флаксом [17,18], у залежності від часу, коли температуру реактора було зменшено від 300°C до 123°C .

У процесі запуску атомного реактора температура його корпусу зростає від кімнатної ($\sim 288\text{ K}$) до робочої ($\sim 573\text{ K}$), а у процесі його зупинки знижується до $\sim 373\text{ K}$ досить повільно для того, щоб уникнути появи термічних напружень, що можуть призвести до руйнування корпусу [21]. На рисунках (12-17) представлено результати КД щодо залежності від часу опромінювання концентрації поодиноких міжвузельних атомів, поодиноких вакансій, середнього розміру та чисельної щільності VC і SIAC з урахуванням та без урахування зміни температури корпусу реактора.

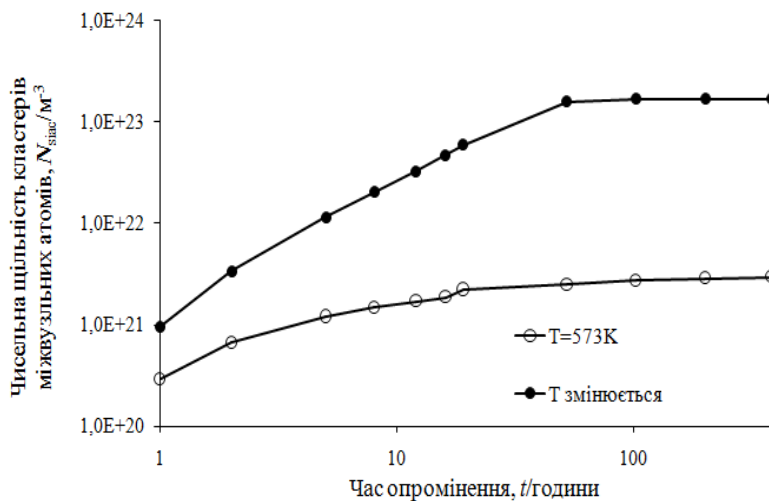


Рис. 12. Залежність від часу опромінення чисельної щільності SIAC, N_{SIAC} , яка розрахована у припущенні щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури.

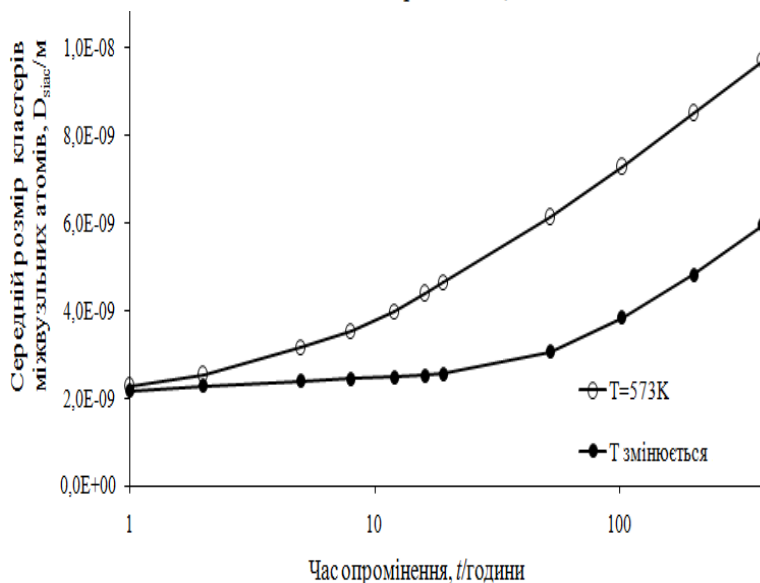


Рис. 13. Залежність від часу опромінення середнього розміру SIAC, D_{SIAC} , яка розрахована у припущенні щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури.

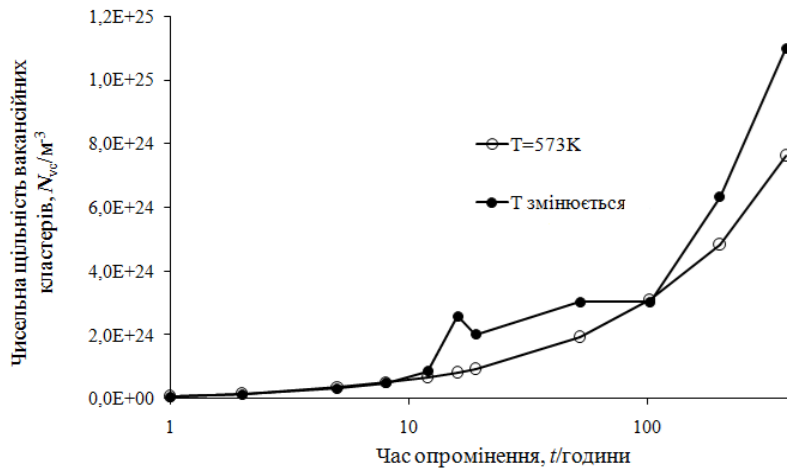


Рис. 14. Залежність від часу опромінення концентрації поодиноких міжвузельних атомів, C_{1i} , яка розрахована у припущенні до постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури.

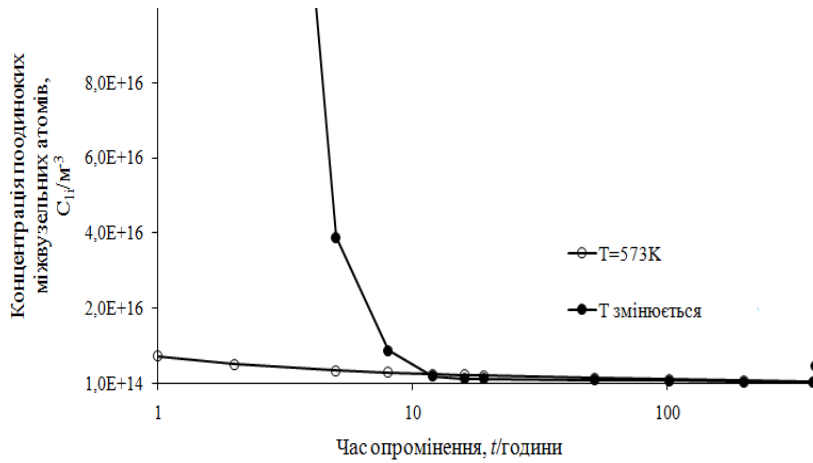


Рис. 15. Залежність від часу опромінення чисельної щільності вакансійних кластерів N_{vc} , яка розрахована у припущенні до постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури.

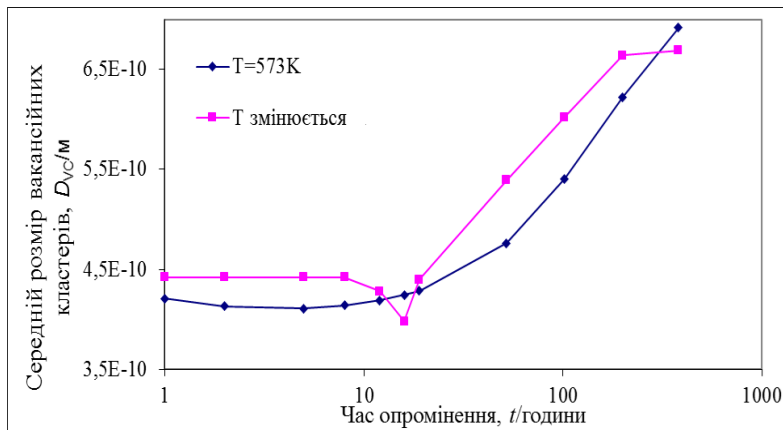


Рис. 16. Залежність від часу опромінення середнього розміру VC , D_{vc} , яка розрахована у припущенні до постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури.

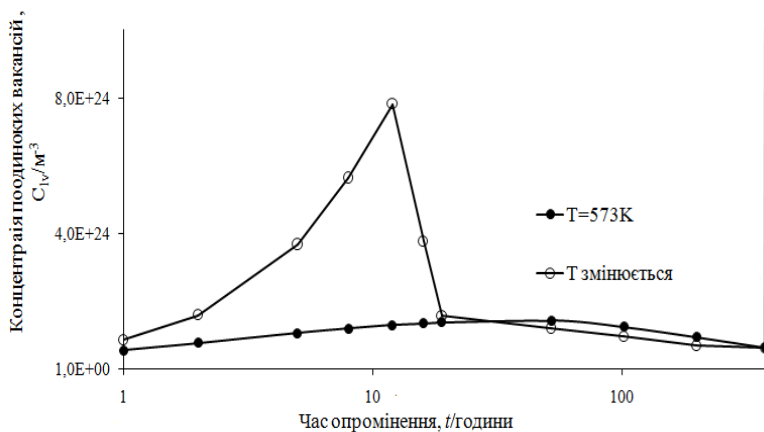


Рис. 17. Залежність від часу опромінення концентрації поодиноких вакансій, C_{1v} , яка розрахована у припущенні до постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури.

Внесок SIAS до $\Delta\sigma$ є пропорційним до $\sqrt{N_{SIAC} \times D_{SIAC}}$ [16]. Згідно з рис. 18 зазначена величина для α -заліза лінійно зростає з часом опромінення у процесі припущення постійної температури корпусу реактора, що узгоджується з даними [22] щодо впливу точкових дефектів на нейтронну крихкість корпусу, та досить складно змінюється в процесі припущення щодо зміни температури.

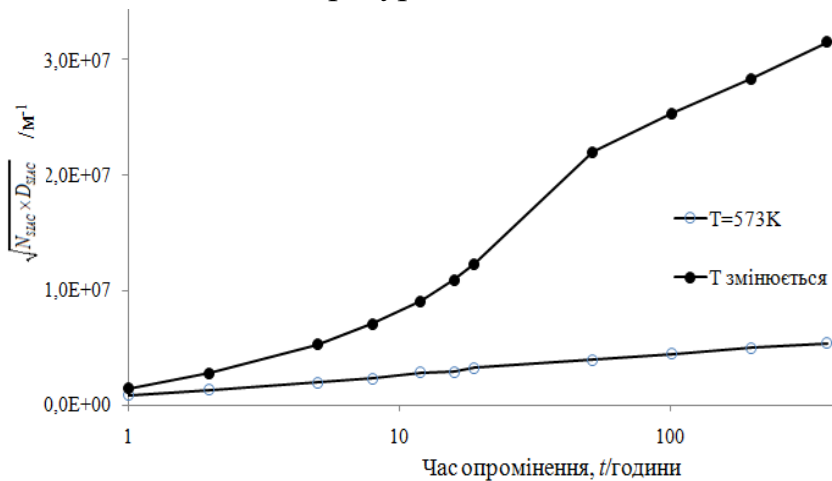


Рис. 18. Залежність від часу опромінення міри нейтронної крихкості $\sqrt{N_{SIAC} \times D_{SIAC}}$, що розраховано в припущенні до постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури.

Еволюція відносної площі пор, що розрахована за підходом Марголіна Б. З., представлена на рис. 19. У підході Марголіна передбачається, що руйнування полікристалічного матеріалу відбувається по межах зерен, з якого складається полікристал. Згідно з його підходу, дефектність матеріалу повинна характеризуватися не лінійними дефектами (дислокаціями), а тривимірними (порами), які зароджуються всередині зерна і виходять на поверхню, при цьому змінюючи свою форму зі сферичною до лінзоподібної.

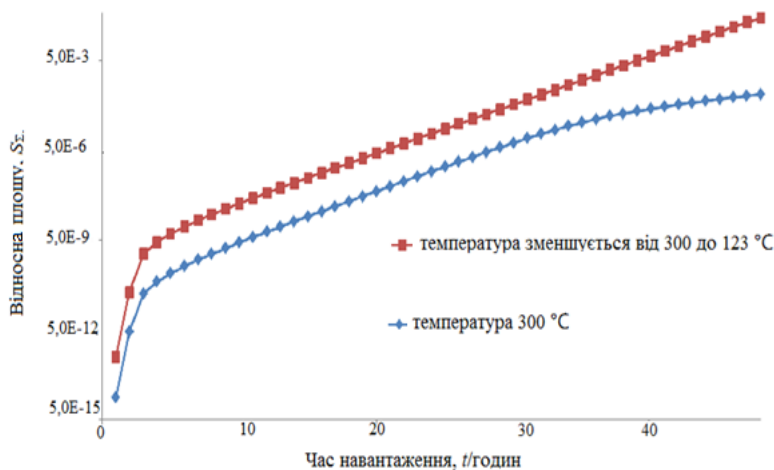


Рис. 19. Еволюція у часі відносної площі пор, $S_{\square\square\square}$ у залізі під навантаженням, що опромінено за режимом [10] при температурі 300 °C та під час зменшення температури від 300 до 123 °C.

У **четвертому розділі** розглядаються процеси відновлення ушкодженого вольфраму шляхом ізохронного відпалу. На сьогодні фізичні механізми, що регулюють відновлення пошкоджень у вольфрамі, все ще залишаються суперечливими. Залишковий електричний опір використовується для ідентифікації температур і енергій активації різних

стадій відпалу. У нашому дослідженні КД застосовується для моделювання кінетики точкових дефектів при відпалі вольфраму після електронного опромінення. Особлива увага приділяється впливу вуглецю. Майстер-рівняння як для електронного опромінення, так і для пост-опроміненого відпалу вольфраму описує:

- генерацію вакансії та міжвузельного атома;
- рекомбінацію вакансії – міжвузельного атома;
- абсорбцію вакансії (міжвузельного атому) мережею дислокацій;
- абсорбцію вакансії (міжвузельного атому) вуглецем;
- абсорбцію вакансії (міжвузельного атому) VC та SIAC;
- емісію вакансії та SIA з VC та SIAC відповідно.

Для визначення ефекту розмірності дифузії міжвузельного атому модель КД для ОЦК заліза з домішками [23] модифікується до вольфраму, легovanого вуглецем. Майстер-рівняння додатково враховує мобільність вакансійних кластерів з максимальним вмістом до чотирьох вакансій.

Розраховано температурні залежності концентрації поодиноких міжвузлів, поодиноких вакансій, поодиноких атомів вуглецю, VC, SIAC, комплексів вакансія-вуглець і (вакансія-вуглець)–вакансія у пост-опроміненому відпаленому вольфрамі представлені на рис. (20, 21). VC та комплекси вакансія-вуглець та (вакансія-вуглець)-вакансія починають формуватися в зазначеному температурному діапазоні (рис. 22).

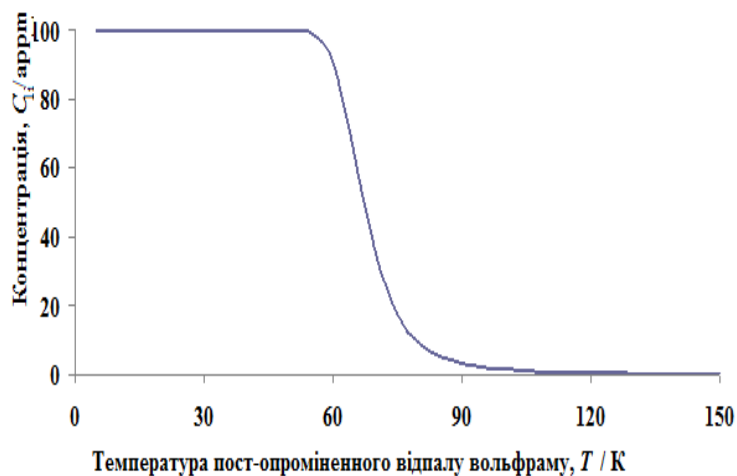


Рис. 20. Температурна залежність концентрації поодиноких міжвузельних атомів (C_{li}) у пост-опроміненому відпаленому вольфрамі за результатами КД для моделі з 1D дифузією міжвузельного атому.

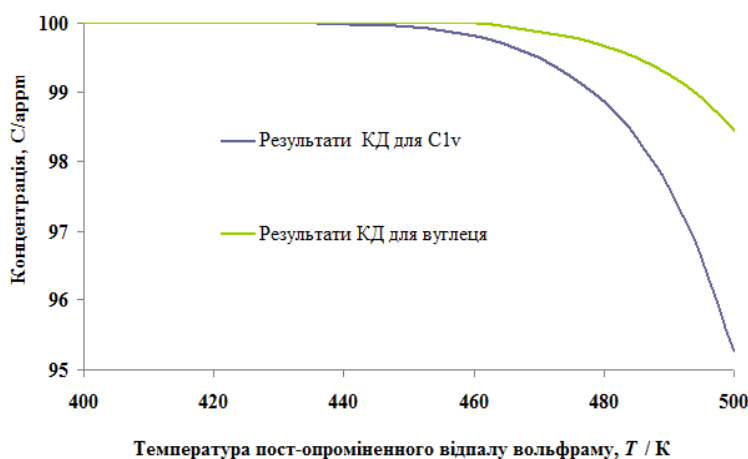


Рис. 21. Температурна залежність концентрації поодиноких вакансій (C_{1v}) та вільних атомів вуглецю (C_c) у пост-опроміненому відпаленому вольфрамі за результатами КД для моделі з 1D дифузією.

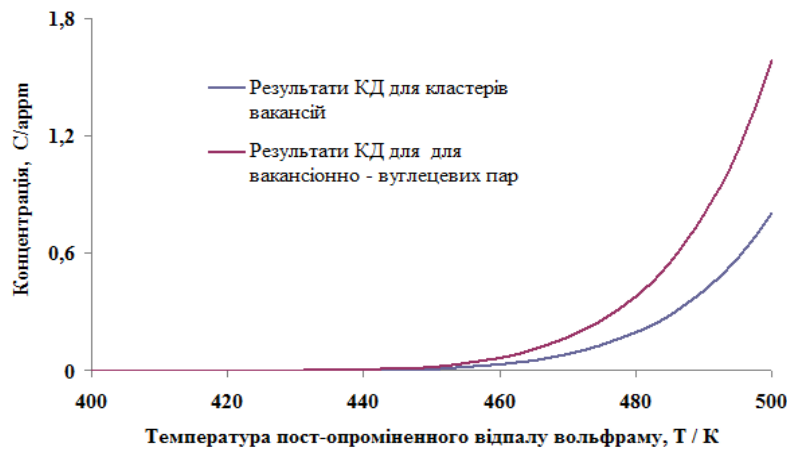


Рис. 22. Температурна залежність концентрації VC (C_{vc}) та вакансія-вуглець пар (C_{vc}) у пост-опроміненному відпаленому вольфраму за результатами КД для моделі з 1D дифузиею міжвузельного атому.

Порівняння результатів моделювання методом КД для моделей щодо 1D дифузиею та 3D дифузиею міжвузельного атому з експериментальними даними про ізохронний відпал вольфраму, який опромінено електронами, підтверджує результати моделювання методом функціональної теорії щільності, експериментального дослідження методом просвічуючої мікроскопії та методом Монте-Карло, щодо 1D дифузії міжвузельних атомів у вольфрамі (рис. 23).

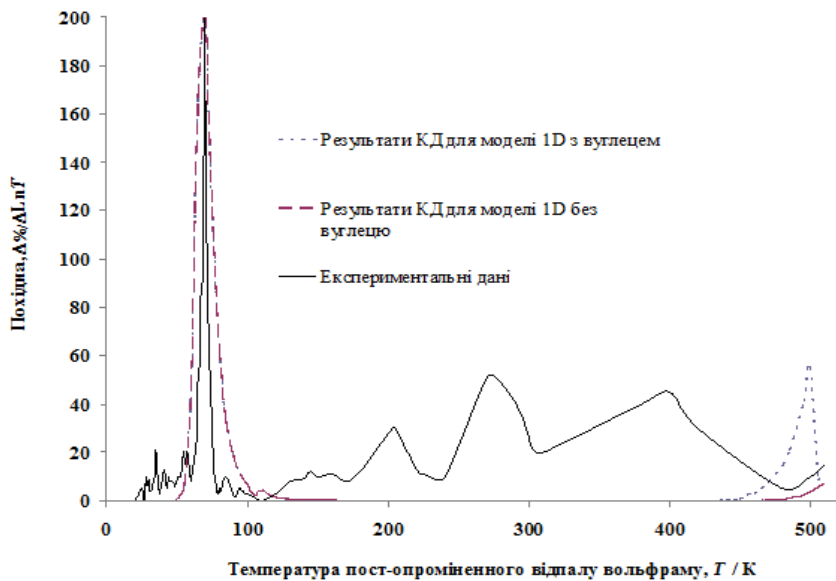


Рис. 23. Експериментальні та розрахункові диференціальні і криві відновлення ізохронної резистивності для чистого вольфраму і вольфраму, який легований вуглецем, за результатами КД для моделі з 1D дифузиею міжвузельного атому.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

У роботі розроблено нові підходи для передбачення фізичних характеристик матеріалів сучасного радіаційного матеріалознавства. Способи застосування розроблених підходів продемонстровано на прикладах α -заліза та вольфраму під дією електронного, іонного та нейтронного опромінення. Отримано наступні основні результати та висновки:

1. Модифікований метод інтегрування диференціальних рівнянь за кодом LSODE забезпечує надійність дослідження кінетики дефектів в опроміненних реакторних матеріалів.
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 $6,9 \times 10^{-9}$ dpa/c і $1,70 \times 10^{-7}$ dpa/c для обох флюенсів: 0,026 dpa та 0,19 dpa. Уперше встановлено, що при малих і великих флаксах спостерігається близькі значення D_{SIAC} , що може бути обґрунтованим використанням даних, отриманих при іонному опроміненні або у науково-дослідних атомних реакторах до прогнозування кінетики процесів у комерційних атомних реакторів.
3. Знайдено залежність індукованого опроміненням зміцнення від флаксу має два режими з критичним значенням $1,70 \times 10^{-7}$ dpa/c ($1,10 \times 10^{14}$ н/м²/с).
4. Показано, що ідентичні критичні значення залежностей потоку величини і щільності чисельності VC та SIAC можна пояснити взаємозв'язком між положенням піку розподілу точкових кластерів після каскадної стадії і критичними розмірами VC і SIAC.
5. Знайдена різниця в нейтронній крихкості, яка розрахована в припущенні постійної та змінної температури, зростає з часом опромінення
6. Врахування зміни температури реактора дозволяє при калібруванні моделі КД отримати значення енергії міграції вакансій у залізі, $E_{vm} = 0.62$ eV, яке більш відповідає ступені чистоти заліза, а саме вмісту вуглеця менше ніж 30 артм, ніж значення $E_{vm} = 1.30$ eV, при припущенні про постійну температуру протягом нейтронного опромінення.
7. Знайдено засіб використання результату КД про індуковане опромінення збільшення межі текучості для оцінки зміни механічної стабільності реакторних матеріалів у рамках фізико-механічної моделі міжзеренного руйнування, яке спричинено еволюцією пор.
8. Встановлено з порівняння результатів моделювання методом КД для моделей щодо 1D дифузіїю та 3D дифузіїю міжвузельного атому зі експериментальними даними про ізохронний відпал вольфраму, який опромінено електронами, підтверджує результати моделювання методом функціональної теорії щільності, експериментального дослідження методом просвічуючої мікроскопії та методом Монте-Карло, щодо 1D дифузії міжвузельних атомів у вольфрамі.

СПИСОК ВИКОРИСТОВАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Becker R. and Döring W. Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen. *Ann. Phys.* 1935. Vol. 416. P. 719-752.
2. Lepinoux J., Sigli C. Precipitate growth in concentrated binary alloys: A comparison between kinetic Monte Carlo simulations, cluster dynamics and the classical theory. *Philosophical Magazine*. 2013. Vol. 93. P. 3194-3215.
3. 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.
4. 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. Pol. 208–226.
5. Hirth, J.P., Pound, G.M. *Pound: Condensation and Evaporation, Nucleation und Growth Kinetics*; Band 11 der Serie “Progress in Material Science”, herausgegeben von Bruce Chalmers. *Pergamon Press*, 1963. Vol. 11. P. 190-200.
6. Soneda N., Diaz de la Rubia T. Defect production, annealing kinetics and damage evolution in α -Fe: An atomic-scale computer simulation. *Philos. Mag.* 1998. Vol. 78 № 5. P. 95-1019.
7. Амосов А.А., Копченова Н.В., Дубинский Ю.А. *Вычислительные методы для инженеров*. М.: Высшая школа. 1994. 544 с.
8. The NAG Fortran Library www.nag.co.uk <https://www.nag.co.uk/nag-fortran-library>.
9. LSODA is part of the ODEPACK provided by Alan C. Hindmarsh 1984 on the CASC server of the Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551, USA. N.N.
10. 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.
11. 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.
12. Gokhman A., Caturla M., Bergner F. Damage accumulation in pure iron and high concentrated Fe-12.5 at%Cr alloy: comparison between object kinetic Monte Carlo and cluster dynamics. *Radiation Effects and Defects in Solids*. 2014. Vol. 169. P. 185-193.
13. Bergner F., Lambrecht M., Ulbricht A., Almazouzi A. Comparative small-angle neutron scattering study of neutron-irradiated Fe, Fe-based alloys and a pressure vessel steel. *Journal of Nuclear Materials*. 2010. Vol. 399. P. 129–136.
14. Buswell J.T., English C.A., Hetherington M.G., Phythian W.J., Smith D.W., Vorall G.M. *Proceedings of the 14th International symposium on effects of irradiation in materials*, Vol. 2, Andover, MA, USA, ASTM-STP 1046, 1988, p. 127.

15. Odette G. R., Mader E. V., Lucas G. E., Phythian W. J., English C. A., 16th International symposium on the effects of radiation on materials, ASTM-STP 1175. Philadelphia, PA. American Society for Testing and Materials. 1993. 373 p.
16. Hu X., Donghua X., Sang B. T., Wirth B. Modeling of irradiation hardening of iron after low-dose and low-temperature neutron irradiation. *Modelling and Simulation in Material Science and Engineering*. 2014. Vol. 22. P. 065002-065029.
17. 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.
18. 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.
19. Konobeev, Yu.V., Dvoriashin A.M., Porollo S.I. Swelling and microstructure of pure Fe and Fe–Cr alloys after neutron irradiation to ~26 dpa at 400 °C. *J. Nucl. Mater.* 2006. Vol. 355. P. 124–130.
20. 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. *RISO-R-1496*. 2005. P. 38-41.
21. Скалозубов В., Габляя Т., Козлов И., Лещетная Е. Критеріальний метод оцінки умов виникнення термоудару на корпус реактора. *Атомная энергетика*. 2014. №15. С. 43-48.
22. Zeman A., Debarberis L., Kupca L., Acosta B., Kutka M., Degmova J. Study of radiation induced degradation of RPV steels and model alloys by positron annihilation and Moessbauer spectroscopy. *Journal of Nuclear Materials*. 2007. Vol. 360. P. 272–281.
23. 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.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ РОБІТ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. O. R. Gokhman, M. S. Kondria. Effect the temperature change of material test reactor on calibration of cluster dynamics for neutron irradiation pure iron. // *J_Nano_Electron_Phys (Scopus)*, vol. 11 № 4, 2019, p. 04025-1-04025-4.
2. О. Р. Гохман, М. С. Кондря, О. Х. Тадеуш. Вплив зміни температури на початку та наприкінці опромінення в науково-дослідному реакторі на нейтронну крихкість α -заліза. // *Металофізика та новітні технології (Scopus)*, т. 41, № 6, 2019, с. 717–732.
3. M. Kondria, A. Gokhman, Cluster dynamics simulation of the flux effect for neutron irradiated pure iron. // *Radiation effects and defects in solids: tincorporating plasma science and plasma Technology (Scopus)*, vol. 174 № 1-2, 2019, p. 56-65.
4. М. С. Кондря, О. Р. Гохман. Ізохронний відпал електронно-опроміненого вольфраму, моделювання за методом кластерної динаміки: 1D та 3D

- модель дифузії міжвузельного атому. // Фізика і хімія твердого тіла т. 19, № 1, 2018, с. 5-13.
5. О. Р. Гохман, М. С. Кондря, Т. С. Совкова. Дослідження методом кластерної динаміки впливу зміни температури на нейтронну крихкість α -заліза. // Вісник Черкаського університету, серія фізико-математичні науки №1, 2018, с. 12-20.
 6. О. Р. Гохман, М. С. Кондря, Т. С. Совкова. Оцінка еволюції пор у α -залізі під нейтронним опроміненням. // Вісник Черкаського університету, серія фізико-математичні науки №1, 2019, с. 29-36.
 7. A. Gokhman, D. Terentyev, M. Kondria. Isochronal annealing of electron-irradiated tungsten modelled by КД method: Influence of carbon on the first and second stages of recovering. // Вісник Черкаського університету, серія фізико-математичні науки №1, 2017, с. 29-37.
 8. O. Gokhman, M. Kondria. 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.
 9. O. Gokhman, M. Kondria. Optimization of X-ray study the crystallographic texture and residual stresses in polycrystalline materials. / «The ninth International Conference on Material Technologies and MMT-2016».- Ariel, Israel, July 25–29 2016. P. 3:60-3:64.
 10. O. Gokhman, D. Terentyev, M. Kondria. Investigation of the post-irradiation annealing on the defect structure of tungsten. / «International Conference on Differential equations, mathematical physics and applications».- Cherkasy, Ukraine, October 17–19 2017. P. 117–118.
 11. М. С. Кондря, О.Р. Гохман. До оцінки впливу термічного шоку на механічні властивості корпусів високого тиску реакторів атомних станцій. / «International Conference of Students and Young Researchers in Theoretical and Experimental Physics “HEUREKA-2019».- Lviv, Ukraine, May 14-16, 2019. P. 21.
 12. О. Р. Гохман, М. С. Кондря. Використання методу кластерної динаміки для моделювання кінетики процесів «лікування» реакторних сталей шляхом відпалу. «Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЕВРИКА-2017». –Львів, Україна, 16–18 травня, 2017. С. 19.
 13. A. Gokhman, V. Golovanov, M. Kondrya, O. Tadeush. Cluster dynamics study of vacancy complexes formation in tin dioxide. The Proc. of the IX International conference «Topical problems of Semiconductor Physics». – Truskavets, Ukraine, May 16 – 20, 2016. P. 36.
 14. М. С. Кондря, О.Р. Гохман. Моделювання впливу зміни температури атомного реактора БР2 (Бельгія) на його дефектну структуру. / I Всеукраїнська науково-практична конференція здобувачів вищої освіти і молодих вчених «Фізичні процеси в енергетиці, екології та будівництві». – Одеса, Україна, 17 – 18 квітня, 2018. С. 3.
 15. М. С. Кондря. Залежність дефектної структури реакторних сталей від флакса та температури. / II Всеукраїнська науково-практична конференція

здобувачів вищої освіти і молодих «Фізичні процеси в енергетиці, екології та будівництві». - Одеса, Україна, 11 – 12 квітня, 2018. С. 6.

Анотація

Кондря М. С. Мультимасштабне моделювання кінетики точкових дефектів в опроміненних реакторних металах. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Державний заклад «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського», Одеса, 2020р.

Дисертацію присвячено розробці нових підходів щодо дослідження актуальних проблем фізики твердого тіла стосовно реакторного матеріалознавства. Мультимасштабне моделювання кінетики вакансій та міжвузлей та їх кластерів проведено для α -заліза та вольфраму, які опромінені нейтронами, іонами та електронами.

Модифіковано спосіб інтегрування диференціальних рівнянь для забезпечення надійності дослідження кінетики дефектів в опроміненних реакторних матеріалах методом кластерної динаміки (КД). Найдено залежність від флаксу середнього розміру і чисельної щільності вакансійних кластерів (VC) та кластерів міжвузлів (SIAC) у чистому залізі, що опромінено нейтронами. Уперше встановлено, що при малих та великих флаксах спостерігаються близькі значення діаметру SIAC, що може бути обґрунтуванням використання даних, отриманих при іонному опроміненні або у науково-дослідних атомних реакторах до прогнозування кінетики процесів у комерційних атомних реакторах. Знайдено, що залежність індукованого опромінення зміцнення корпусу реактора від флаксу має два режими із критичним значенням $1,70 \times 10^{-7}$ дпа/с ($1,10 \times 10^{14}$ н/м²/с). Показано, що ідентичні критичні значення залежностей величини флакса 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. Урахування зміни температури реактора дозволяє при калібруванні КД моделі отримати значення енергії міграції вакансій у α -залізі, $E_{vm} = 0,62$ еВ, яке більш відповідає ступені чистоти α -заліза, а саме вмісту вуглецю менше ніж 30 артп, ніж значення $E_{vm} = 1,30$ еВ, при припущенні про постійну температуру протягом нейтронного опромінення. Знайдено засіб використання результату КД про індуковане опромінення збільшення межі текучості для оцінки зміни механічної стабільності реакторних матеріалів у межах фізико-механічної моделі міжзеренного руйнування, яке спричинено еволюцією пор. З порівняння результатів моделювання методом КД для моделей з 1D і 3D розмірностей дифузії міжвузельних атомів з експериментальними даними по ізохронному відпаду вольфраму, який був опромінений електронами, зроблено висновок про 1D розмірність дифузії міжвузельних атомів у вольфрамі, який узгоджується з результатами моделювання методом функціональної теорії щільності і методом Монте-Карло, а також з даними електронної просвічуєчої

мікроскопії. Також показана необхідність врахування впливу вуглецю на кінетику процесів в опроміненому вольфрамі.

Аннотация

Кондря М. С. Мультимасштабное моделирование кинетики точечных дефектов в облученных реакторных металлах. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. – Государственное учреждение «Южноукраинский национальный педагогический университет имени К. Д. Ушинского», Одесса, 2020р.

Диссертация посвящена разработке новых подходов к исследованию актуальных проблем физики твердого тела относительно реакторного материаловедения Мультимасштабное моделирование кинетики вакансий и междоузлий и их кластеров проведено для α -железа и вольфрама, которые облучены нейтронами, ионами и электронами. Модифицирован способ интегрирования дифференциальных уравнений для обеспечения надежности исследования кинетики дефектов в облученных реакторных материалах методом кластерной динамики (КД). Найдено зависимость от флакса среднего размера и численной плотности вакансийных кластеров (VC) и кластеров междоузлий (SIAC) в чистом железе, которые облучены нейтронами. Впервые установлено, что при малых и больших флаксах наблюдаются близкие значения диаметра SIAC, что может быть обоснованием использования данных, полученных при ионном облучении или в научно-исследовательских атомных реакторах, к прогнозированию кинетики процессов в коммерческих атомных реакторах. Найдено, что зависимость индуцированного облучением упрочнения корпусу реактора от флакса имеет два режима с критическим значением $1,70 \times 10^{-7}$ дпа/с ($1,10 \times 10^{14}$ н/м²/с). Показано, что идентичные критические значения зависимостей величины флакса и численной плотности VC и SIAC можно объяснить взаимосвязью между положением пика распределения точечных кластеров после каскадной стадии и критическими размерами VC и SIAC. Учёт изменения температуры реактора позволяет при калибровке КД модели получить значения энергии миграции вакансий в α -железе, $E_{vm} = 0,62$ эВ, которое более соответствует степени чистоты α -железа, а именно содержания углерода меньше чем 30 ат.%, чем значение $E_{vm} = 1,30$ эВ, при допущении о постоянной температуре в течение нейтронного облучения. Найдено способ использования результатов КД по увеличению предела текучести, индуцированным облучением, для оценки изменения механической стабильности реакторных материалов в пределах физико-механической модели межзерённого разрушения, которое вызвано эволюцией пор. Из сравнения результатов моделирования методом КД для моделей с 1D и 3D размерностей диффузией междоузельных атомов с экспериментальными данными по изохронному отжигу вольфрама, который был облучен электронами, сделан вывод про 1D размерность диффузии междоузельных атомов в вольфраме, который согласуется с результатами моделирования

методом функциональной теории плотности и методом Монте-Карло , а также с данными электронной просвечивающей микроскопии. Также показана необходимость учёта влияния углерода на кинетику процессов в облучённом вольфраме.

Abstract

Kondria M. S. Multiscale modeling of the kinetics of point defects in irradiated reactor metals. – Manuscript.

Thesis for the degree of candidate of physical and mathematical Sciences in the specialty 01.04.07-solid state physics. – State institution "South Ukrainian national pedagogical University named After K. D. Ushynsky", Odessa, 2020p.

The thesis is devoted to the development of new approaches to the study of actual problems of solid state physics in relation to reactor materials science. multi-scale modeling of the kinetics of vacancies and self-interstitial atoms and their clusters was carried out for α -iron and tungsten, which are irradiated by neutrons, ions and electrons. A method for integrating differential equations has been modified to ensure the reliability of studying the kinetics of defects in irradiated reactor materials using the cluster dynamics (КД) method. The dependence on the average size of the flux and the numerical density of vacancy clusters (VC) and self-interstitial clusters (SIAC) in pure iron, which are irradiated with neutrons, is found. For the first time, it was found that for small and large fluxes, similar values of SIAC diameter are observed, which may be a justification for using data obtained during ion irradiation or in research nuclear reactors to predict the kinetics of processes in commercial nuclear reactors. It was found that the dependence of radiation-induced hardening of the reactor vessel on the flux has two modes with a critical value of 1.70×10^{-7} dpa/s (1.10×10^{14} n / m²/s). It is shown that identical critical values of the dependences of the flow value and the numerical density of VC and SIAC can be explained by the relationship between the position of the peak distribution of point clusters after the cascade stage and the critical dimensions of VC and SIAC. Taking into account the change in the reactor temperature allows for the calibration of the КД model to obtain the values of the migration energy of vacancies in α -iron, $E_{vm} = 0.62$ eV, which is more consistent with the purity of α -iron, namely, the carbon content is less than 30 appm, than the value of $E_{vm} = 1.30$ eV, assuming a constant temperature during neutron irradiation. A method has been found for using the results of КД for increasing the yield strength induced by irradiation to evaluate changes in the mechanical stability of reactor materials within the physical-mechanical model of intergranular fracture caused by pore evolution. From comparing the results of КД modeling for models with 1D and 3D dimensions by diffusion of interstitial atoms with experimental data on isochronous annealing of tungsten, which was irradiated with electrons, a conclusion is made about the 1D dimension of diffusion of interstitial atoms in tungsten, which is consistent with the results of modeling by the functional density theory method and the Monte Carlo method , as well as data from electronic transmission microscopy. It is also shown that it is necessary to take into account the influence of carbon on the kinetics of processes in irradiated tungsten.