

## INTERACTIONS OF RADIATION AND PARTICLES WITH CONDENSED MATTER

PACS numbers: 07.05.Tr, 61.72.Cc, 61.72.Ji, 61.80.Az, 61.80.Hg, 61.82.Bg

### Вплив зміни температури на початку та наприкінці опромінення в науково-дослідному реакторі на нейтронну крихкість $\alpha$ -заліза

О. Р. Гохман, М. С. Кондря, О. Х. Тадеуш

*Південноукраїнський національний педагогічний  
університет імені К. Д. Ушинського,  
вул. Старопортофранківська, 26,  
65020 Одеса, Україна*

Метод кластерної динаміки (cluster dynamics, CD) використовується для моделювання впливу зміни температури корпусу на еволюцію кластерів точкових дефектів та нейтронну крихкість  $\alpha$ -заліза в науково-дослідному атомному реакторі. Знайдено час опромінення, коли якісно змінюється середній розмір, і чисельну щільність кластерів міжвузлових атомів та вакансійних кластерів в опроміненому  $\alpha$ -залізі за припущення щодо постійної температури реактора та за реальної зміни температури, яка має місце при запуску та при виході реактора з робочого режиму. Оцінено вплив зазначеної зміни температури на величину зростання границі плинності  $\alpha$ -заліза, яке спричинене нейтронним опроміненням.

**Ключові слова:** кластерна динаміка, зміна температури, нейтронна крихкість,  $\alpha$ -залізо.

Метод кластерной динамики (cluster dynamics, CD) используется для моделирования влияния изменения температуры корпуса реактора высокого внутреннего давления на временную эволюцию кластеров точечных дефектов и обусловленное облучением нейтронное охрупчивание  $\alpha$ -железа.

Corresponding author: Olga Kharlampiivna Tadeush  
E-mail: [olga2445@ukr.net](mailto:olga2445@ukr.net)

*South Ukrainian National Pedagogical University Named after K. D. Ushynsky,  
26 Staroportofrankivs'ka Str., 65020 Odesa, Ukraine*

Citation: O. R. Gokhman, M. S. Kondria, and O. Kh. Tadeush, The Temperature Change Effect at the Start and at the End of Irradiation in a Research Reactor on the Neutron Embrittlement of  $\alpha$ -Iron, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 6: 717–732 (2019), DOI: [10.15407/mfint.41.06.0717](https://doi.org/10.15407/mfint.41.06.0717).

за в атомном реакторе БР-2 (Мол, Бельгия). Для двух температурных режимов были найдены времена облучения, которые обеспечивали качественное изменение среднего размера и численной плотности кластеров междоузлий (self-interstitial atom clusters, SIAC) и вакансионных кластеров (vacancy clusters, VC). Для первого режима была выбрана температура 573 К в течение всего времени облучения. Температура возростала от комнатной (288 К) до 573 К в начале работы реактора (381 час), затем не менялась в течение приблизительно 14 дней и, наконец, уменьшалась до 373 К для второго температурного режима. Условия нейтронного облучения предполагались одними и теми же для обоих температурных режимов, а именно, предполагались заданными нейтронный поток, приводящий к образованию около  $1,39 \cdot 10^{-7}$  вакансий/(атом·с) ( $E > 1$  МэВ), и время облучения, равное 15 суткам. Мастер уравнение CD записывалось в виде жёсткой системы дифференциальных уравнений. Для того чтобы избежать проблемы неустойчивости решения необходимо использовать специальный численный метод. С этой целью использовался соответствующий код для интегрирования мастер уравнения под названием Linear Solver of Ordinary Differential Equations (LSODE), созданный в 1984 году в лаборатории Ливермор (США). Экспериментальные данные электронной просвечивающей микроскопии и позитронной аннигиляционной спектроскопии использовались для калибровки модели CD. Значения доз облучения, которые обеспечивали переход от нуклеационной стадии к стадии детерминистского роста для кластеров междоузельных атомов и вакансионных кластеров, найдены как в приближении постоянной температуры, так и для реального изменения температуры корпуса высокого внутреннего давления атомного реактора БР-2. Проведена оценка выработанного облучением повышения предела текучести для обоих рассмотренных температурных режимов на основе значений среднего размера и численной плотности SIAC и VC.

**Ключевые слова:** кластерная динамика, изменение температуры, нейтронная хрупкость,  $\alpha$ -железо.

The method of cluster dynamics (CD) is used to simulate the effect of the change in temperature of reactor pressure vessel on the time evolution of point defect clusters and the induced neutron embrittlement of  $\alpha$ -iron in a research nuclear reactor BR-2 (Mol, Belgium). For the two temperature regimes, the irradiation times, which provides the qualitatively change of the mean size and number density of self-interstitial atom clusters (SIAC) and vacancy clusters (VC), are found. Temperature is chosen of 573 K during all irradiation time at the first regime. Temperature is grown from the room one (288 K) to the value of 573 K during the start of nuclear reactor operation mode with time length about 381 hours; thereafter it does not change during next  $\cong$  14 days; then, at the second regime, the temperature decrease to the value of about 373 K. The neutron irradiation conditions are considered as the same for both temperature regimes, *i.e.* the neutron flux is of  $1.39 \cdot 10^{-7}$  dpa/s ( $E > 1$  MeV) during 15 days. Master equation of CD is written as the system of stiff ordinary differential equations. The special numerical algorithm are applied in order avoid the problem of unstable solution. For this aim, the integration of master equation is carried out by the corresponding

Code Linear Solver of Ordinary Differential Equations (LSODE) created in Livermore Lab (USA) in 1984. The transmission electron microscopy (TEM) and positron annihilation spectroscopy (PAS) experimental data are used for the calibration of CD model. The values of irradiation doses, which provide transition from the nucleation stage to the growth stage, are found for SIAC and VC on the assumption of both the constant temperature and the real change of the reactor pressure vessel temperature in the nuclear reactor BR-2. Based on the values of mean size and number density of SIAC and VC, the irradiation induced increasing of yield stress is estimated for both considered temperature regimes.

**Key words:** cluster dynamics, change of temperature, neutron embrittlement,  $\alpha$ -iron.

*(Отримано 29 січня 2019 р.; остаточн. варіант — 18 квітня 2019 р.)*

## 1. ВСТУП

В останні декілька десятиліть актуальною задачею реакторного матеріалознавства є моніторинг механічних властивостей та продовження життєвого ресурсу корпусу атомних реакторів до 60 років. Для її рішення започатковано декілька підходів, зокрема, дослідження матеріалу корпусу реактора після виведення його з експлуатації [1, 2]; використання іонного модельного опромінювання [3, 4]; дослідження зразків-свідків, які встановлюються в обраних місцях корпусу реактора на час кампанії безперервного опромінювання (~ 1 рік) [5, 6] та опромінення в науково-дослідних реакторах, де типова доза для промислового реактора ~0,2 dpa (displacement per atom — зміщення на атом) за весь час його експлуатації ~40 років, отримується за декілька тижнів завдяки відповідному збільшенню нейтронного потоку (flux) в десятки та сотні тисяч разів [7, 8]. Результати експериментальних досліджень опромінених зразків у [1–8] методом малокутового розсіювання рентгенівських променів та нейтронів (small-angle X-ray scattering—SAXS та small-angle neutron scattering—SANS), методом позитронно-анігіляційної спектроскопії (positron annihilation spectroscopy—PAS), методом просвічувальної електронної мікроскопії (transmission electron microscopy—TEM) та методом атомного зондування (atom probe field image microscopy—APFIM) [9] дозволяють калібрувати метод молекулярної динаміки, метод Монте-Карло та метод кластерної динаміки, які використовуються для визначення механізмів формування, еволюції дефектної структури та прогнозування нейтронної крихкості корпусу реактора [10–12]. Але дотепер не з'ясовано повною мірою коректність використання вказаних підходів з оглядом на різницю нейтронних потоків та зміну температури при виході реактора до робочого режиму та виходу з нього [13]. У роботі [14] методом кластерної динаміки (cluster

dynamics—CD) вивчався flux-ефект для оцінки зростання границі плинності  $\Delta\sigma$  у комерційно чистому  $\alpha$ -залізі (вміст вуглецю менший за 30 ppm), яке опромінювалося у науково-дослідному реакторі БР-2 (м. Мол, Бельгія) [15]. У даному дослідженні CD методом буде досліджуватися вплив зміни температури на початку та наприкінці опромінювання у реакторі на середній розмір, чисельну щільність кластерів та зростання величини  $\Delta\sigma$  опромінюваного  $\alpha$ -заліза.

## 2. МАЙСТЕР-РІВНЯННЯ ТА АЛГОРИТМ РЕАЛІЗАЦІЇ МЕТОДУ КЛАСТЕРНОЇ ДИНАМІКИ ДЛЯ $\alpha$ -ЗАЛІЗА, ОПРОМІНЕНОГО НЕЙТРОНАМИ

Метод CD був запропонований у 30-х роках минулого століття Боекером при дослідженні фазових перетворень води [16]. В останні 40 років він застосовується у фізичній кінетиці для вивчення процесів зростання та зменшення концентрації кластерів ( $C_n$ ) за рахунок достатньо повільного (дифузійного) обміну мономерами або невеликими кластерами між кластерами системи. У випадку замкненої системи та мобільності тільки мономерів системи, майстер-рівняння CD може бути записано в такому вигляді:

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

де  $n > 2$ ,  $\beta_n$  — коефіцієнт приєднання мономеру до кластеру, який складається з  $n$  мономерів,  $\alpha_n$  — коефіцієнт емісії мономеру з такого кластеру, а концентрація вільних мономерів  $C_1$  визначається за законом збереження повної кількості мономерів (як вільних, так і тих, що входять до складу кластерів).

У роботах [17, 18] було показано, що застосування рівняння (1) є коректним тільки до системи кластерів, у якій відстань між кластерами набагато перевищує їх розміри. Згідно з експериментальними даними [19, 20], в опромінених сплавах заліза вказана умова виконується для кластерів вакансій (vacancy clusters, VC) та кластерів міжвузлових атомів (self-interstitial atoms, SIAC). Рівняння (1) має бути додатково модифіковано для опромінених матеріалів, оскільки система кластерів у цьому випадку вже не є замкненою, тому що електрони, іони та нейтрони утворюють численні пари Френкеля (вакансія разом з міжвузловим атомом), які частково залишаються вільними, частково рекомбінують та частково утворюють кластери ще на каскадній стадії ( $10^{-15}$ – $10^{-12}$  с) при іонному або нейтронному опроміненні. Їх кількість в одиницю часу  $G_{nv(i)}$  аналізується у [21]. Також необхідно взяти до уваги поглинання поодиноких вакансій та міжвузлових атомів сіткою дислокацій та поверхнею зерен, розпад та приєднання цих точкових дефектів до клас-

терів, а також рекомбінацію пар Френкеля вже на дифузійній стадії. Відповідне майстер-рівняння СД для  $\alpha$ -залізу, опроміненого нейтронами, записується у вигляді системи диференціальних рівнянь:

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

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

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

де  $\eta$  — коефіцієнт ефективності, тобто відношення кількості мономерів точкових дефектів наприкінці каскадної стадії до загальної кількості цих дефектів, створених на початку цієї стадії,  $f_{vcl}$  ( $f_{icl}$ ) — відношення кількості поодиноких вакансій (міжвузлових атомів), які утворюють вакансійні кластери (кластери міжвузлових атомів), до загальної кількості вакансій (міжвузлових атомів) наприкінці каскадного етапу,  $\rho_d$  — густина дислокацій,  $d$  — середній розмір зерен,  $\Omega_{Fe}$  — атомний об'єм заліза,  $C_{1v(i)}^e$  — рівноважна термічна концентрація вакансій (міжвузлових атомів). Тут введено  $D_{v(i)}$  — коефіцієнт дифузії вакансій (міжвузлових атомів), обчислений за формулою

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

де  $k_B$  — константа Больцмана,  $D_{v0}$  ( $D_{i0}$ ) — передекспоненційний фактор поодинокій вакансії (міжвузлового атому),  $E_{mv}$  ( $E_{mi}$ ) — енергія міграції вакансії (міжвузлового атому), а також  $\beta_{ni}^{v(i)}$  — коефіцієнт приєднання точкових дефектів плоским кластером міжвузлових атомів з радіусом  $r_{ni}$ , який визначається за формулою

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

Поправочний коефіцієнт  $Z_n^{v(i)}$ , який визначає захоплення вакансій

(міжвузлових атомів) кластера міжвузловин, визначається за формулою

$$Z_{ni}^{v(i)} = Z_{v(i)} + \left[ \left( \frac{b}{8\pi a} \right)^{0,5} z_{fv(i)} - Z_{v(i)} \right] / n^{0,35}, \quad (7)$$

де  $a$  — параметр ОЦК-ґратки заліза,  $z_{fv(i)} = 35$  (42) — ефективність захоплення вакансій (міжвузлових атомів) дислокаційною сіткою для вакансій (міжвузлових атомів). Коефіцієнт  $\beta_{nv}^{v(i)}$  приєднання точкових дефектів сферичним кластером вакансій з радіусом  $R_{nv}$  обчислюється згідно до наближення дифузійного режиму за формулою

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

де  $\alpha_{nv}^{v(i)}$  — коефіцієнт емісії однієї вакансії (міжвузлового атому) з кластера вакансій (міжвузлових атомів), обчислений згідно з принципом детальної рівноваги через зміну вільної енергії  $\Delta G_v(n)$  для вакансій та через енергію зв'язку кластера міжвузлових атомів  $E_{bni}$ :

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

$$\Delta G_v(n) = -n\Delta\mu + 4\pi R_{nv}^2 \gamma, \quad (10)$$

де  $\Delta\mu$  — різниця хімічного потенціалу вакансії у вакансійному кластері та у матриці матеріалу,  $\gamma$  — питома поверхнева енергія вакансійного кластера в чистому залізі;

$$\alpha_{ni}^i = \frac{\beta_{(n-1)i}^i \exp \left( -\frac{E_{bni}}{k_B T} \right)}{C_{1i}}, \quad (11)$$

де  $E_{bni}$  обчислюється за формулою

$$E_{bni} = E_{fi} + \frac{E_{b2i} - E_{fi}}{2^{\frac{2}{3}} - 1} \left[ n^{\frac{2}{3}} - (n-1)^{\frac{2}{3}} \right], \quad (12)$$

тут  $E_{fi}$  — енергія формування вакансії (міжвузлового атома),  $E_{b2i}$  — енергія зв'язку димера вакансій (міжвузлових атомів).

Система рівнянь (2)–(12) є жорсткою системою звичайних диференціальних рівнянь, розв'язання якої стандартними чисельними методами призводить до нестійкого рішення. Для інтегрування систем такого типу необхідно застосовувати спеціальні чисельні алгоритми. Був використаний код Linear Solver of Ordinary Differential

Equations (LSODE), створений у 1984 році у Ліверморській лабораторії (США) [23].

Експериментальні дані для калібрування CD були взяті з [15, 24], де досліджувалося комерційне чисте  $\alpha$ -залізо, яке опромінювалося за температури 573 К нейтронами з енергією більшою за 1 МеВ з їх потоком, що призводив до утворення  $1,39 \cdot 10^{-7}$  дефектів/(атом·с) протягом 15 діб. Результати ТЕМ вказали на формування в опроміненному залізі кластерів міжвузлових атомів з середнім діаметром 10 нм та чисельною щільністю  $4 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$ , а PAS — на формування вакансійних кластерів, які містять біля 10 вакансій. Параметри матеріалу, які використовувалися у розрахунках [24], наведено в табл. 1.

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

При запуску атомного реактора температура його корпусу зростає від кімнатної (~288 К) до робочої (~573 К), а при його зупинці знижується до ~373 К досить повільно (рис. 1) для того, щоб уникнути появи термічних напружень, які можуть призвести до руйнування корпусу [25].

Для промислового атомного реактора, який експлуатується по-

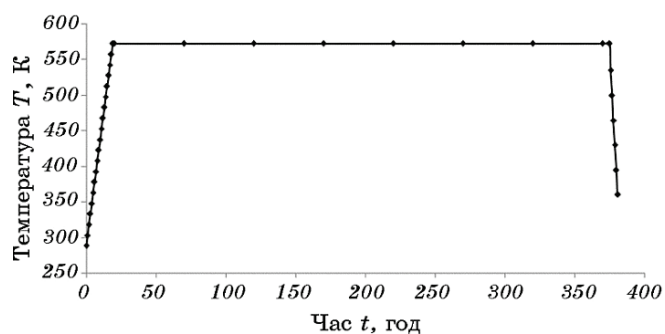
**ТАБЛИЦЯ 1.** Матеріальні параметри для чистого заліза.

**TABLE 1.** Material parameters of pure iron.

Енергія формування вакансії, $E_{fv}$	1,60 eВ
Енергія зв'язку кластеру з двох вакансій, $E_{b2v}$	0,20 eВ
Енергія міграції вакансії, $E_{mv}$	1,30 eВ
Передекспоненційний фактор коефіцієнту дифузії поодиноких вакансій, $D_{v0}$	$0,1 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2/\text{с}$
Енергія формування міжвузлового атому, $E_{fi}$	4,3 eВ
Енергія зв'язку кластеру з двох міжвузлових атомів, $E_{b2i}$	0,80 eВ
Енергія міграції міжвузлового атому, $E_{mi}$	0,30 eВ
Передекспоненційний фактор міжвузлового атому, $D_{i0}$	$4,0 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$
Радіус рекомбінації, $r_{rec}$	0,65 нм
Коефіцієнт захвату вакансії дислокаційною сіткою, $z_v$	1,0
Коефіцієнт захвату міжвузлового атому дислокаційною сіткою, $z_i$	1,2
Вектор Бюргерса, $b$	0,2 нм
Густина дислокацій, $\rho_d$	$0,7 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$
Середній розмір зерна, $d$	$2,5 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2$

над 400 тисяч годин, зазначена зміна температури не повинна суттєво впливати на механічні властивості корпусу, але для науково-дослідного реактора, де опромінювання триває декілька сотень годин, ефект, що обговорюється, заслуговує на увагу. На рисунках 2–7 представлено результати CD щодо залежності від часу опромінювання концентрації поодиноких міжвузлових атомів, поодиноких вакансій, середнього розміру та чисельної щільності VC і SIAC з урахуванням та без урахування зміни температури реактора.

Згідно з рисунком 2, чисельна щільність SIAC,  $N_{SIAC}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора, швидко зростає за 16 годин опромінення до  $1,86 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$ , а надалі дуже повільно збільшується до  $2,96 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$  впродовж подальшого опромінення в реакторі;  $N_{SIAC}$ , яка знайдена з урахуванням зміни температури реактора за рис. 1, майже для всього часу опромінення на два порядки перевищує  $N_{SIAC}$ , що розрахована за припущення щодо постійної температури, та мало змінюється з часом опромінення після 52 годин. З точки зору загальних понять фізичної кінетики [26], можна стверджувати, що ансамбль кластерів SIAC у корпусі реактора переходить з нуклеаційної стадії до стадії детерміністського зростання після опромінювання протягом 16 та 52 годин за припущення щодо постійної температури реактора та її зміни за рис. 1 відповідно. Згідно з рисунком 3, середній розмір SIAC,  $D_{SIAC}$ , який розраховано за припущення щодо постійної температури реактора, монотонно зростає під час опромінення з 2,3 до 9,7 нм;  $D_{SIAC}$ , який знайдений з урахуванням зміни температури реактора за рис. 1, зростає дуже повільно з 2 до 3,1 нм при опроміненні протягом 52 годин, а надалі швидше зростає до 6 нм впродовж подальшого опромінення у реакторі. Зазначена різниця залежності від часу



**Рис. 1.** Зміна температури корпусу атомного реактора БР-2 [15] впродовж опромінення.

**Fig. 1.** Change of temperature of pressure vessel of nuclear reactor BR-2 during irradiation [15].



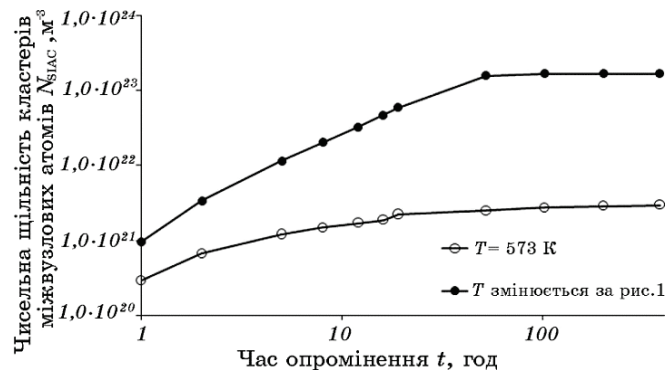
опромінення чисельної щільності та середнього розміру SIAC для постійної та змінної за рис. 1 температури реактора може бути пояснена відповідною зміною коефіцієнта дифузії та коефіцієнта емісії міжвузлових атомів з температурою (рівняння (5), (9)) та відповідає знайденій залежності концентрації поодиноких міжвузлових атомів,  $C_{1v}$ , від часу опромінення (рис. 4).

На рисунку 5 зображено залежність від часу опромінення поодиноких вакансій,  $C_{1v}$ . При опроміненні впродовж 52 годин спостерігається максимум  $C_{1v}$  для розрахунків за припущення щодо постійної температури реактора та при опроміненні впродовж 12 годин — для розрахунків за припущення щодо зміни температури реактора за рис. 1. Формування такого максимуму може бути спричинено конкуренцією наступних процесів при опромінюванні:

- зростання  $C_{1v}$  за рахунок безперервного процесу виробництва пар Френкеля та її зменшення за рахунок процесу рекомбінації (з часом процес рекомбінації стає не суттєвим внаслідок різкого падіння концентрації поодиноких міжвузлових атомів (рис. 4), а також емісії з VC);

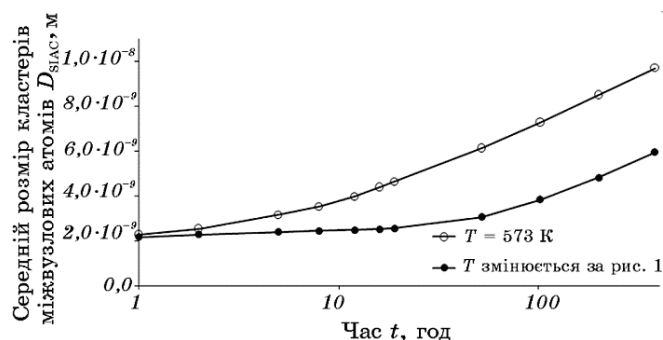
- поглинання поодиноких вакансій дислокаційною сіткою та поверхнею зерен матеріалу, часова інтенсивність якого залежить тільки від коефіцієнту дифузії і  $C_{1v}$  та їх поглинання VC та SIAC, часова інтенсивність якого залежить додатково від розміру та концентрації кластерів точкових дефектів. Зазначимо, що аналогічний максимум часової залежності  $C_{1v}$  був знайдений у роботі [27].

Згідно з рисунком 6, чисельна щільність VC,  $N_{VC}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора, монотонно зростає до  $7,63 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3}$  впродовж опромінення у реакторі;  $N_{VC}$ , яка



**Рис. 2.** Залежність від часу опромінення чисельної щільності SIAC,  $N_{SIAC}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури за рис. 1.

**Fig. 2.** Dependence of number density of SIAC,  $N_{SIAC}$ , calculated according to the assumption of the constant temperature and with taking into account the temperature change according to Fig. 1 on the irradiation time.

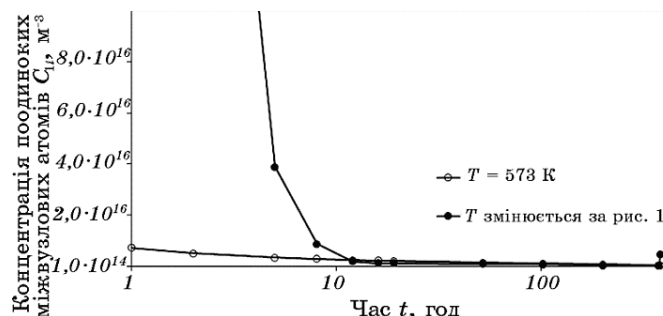


**Рис. 3.** Залежність від часу опромінення середнього розміру SIAC,  $D_{\text{SIAC}}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури за рис. 1.

**Fig. 3.** Dependence of mean size of SIAC,  $D_{\text{SIAC}}$ , calculated according to the assumption of the constant temperature and with taking into account the temperature change according to Fig. 1 on the irradiation time.

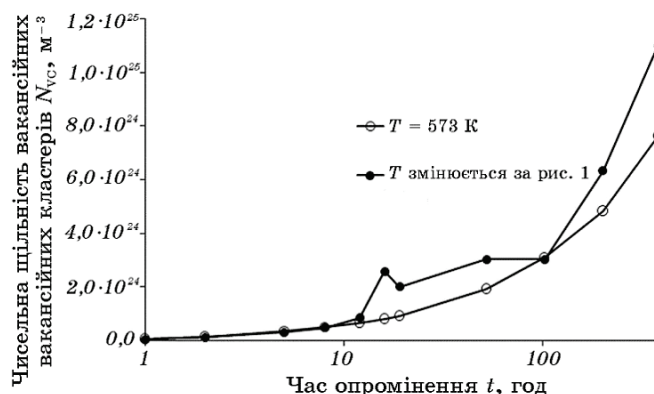
знайдена з урахуванням зміни температури реактора за рис. 1, досягає локального максимуму при часі опромінення у 16 годин, практично не змінюється на часовому проміжку опромінення до 102 годин, та монотонно зростає до  $1,1 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$  при подальшому опроміненні. Стадія детерміністського зростання для ансамблю VC не спостерігається (часова залежність  $N_{\text{VC}}$  не стає насиченою при опроміненні).

Згідно з рисунком 7, середній розмір VC,  $D_{\text{VC}}$ , який розраховано за припущення щодо постійної температури реактора, монотонно зростає під час опромінення від 0,42 до 0,69 нм;  $D_{\text{VC}}$ , який знайдено



**Рис. 4.** Залежність від часу опромінення концентрації поодиноких міжвузлових атомів,  $C_{1i}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури за рис. 1.

**Fig. 4.** Dependence of concentration of the single SIAC,  $C_{1i}$ , calculated according to the assumption of the constant temperature and with taking into account the temperature change according to Fig. 1 on the irradiation time.

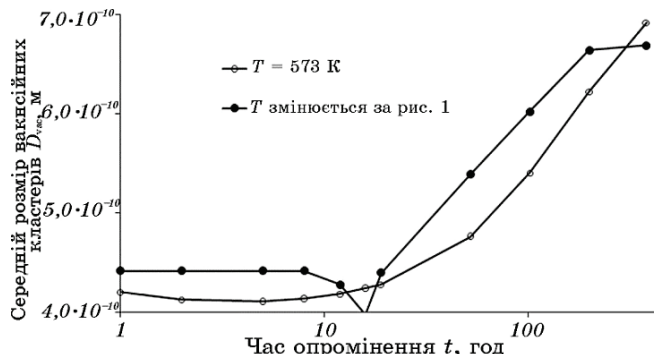


**Рис. 5.** Залежність від часу опромінення концентрації поодиноких вакансій,  $C_{1v}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури за рис. 1.

**Fig. 5.** Dependence of concentration of the single vacancies,  $C_{1v}$ , calculated according to the assumption of the constant temperature and with taking into account the temperature change according to Fig. 1 on the irradiation time.

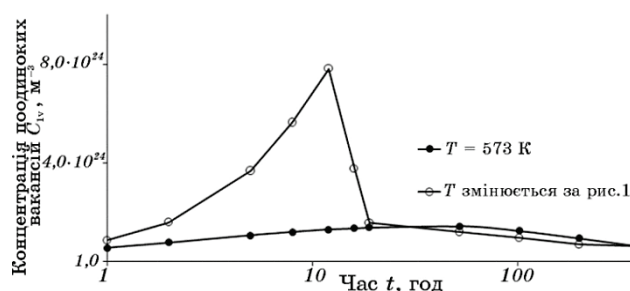
за припущення щодо зміни температури за рис. 1, досягає мінімального значення при такому ж часі опромінення (16 годин), при якому  $N_{vc}$ , має локальний максимум.

Маючи часову залежність середнього розміру та чисельної щільності кластерів точкових дефектів в опроміненому  $\alpha$ -залізі за припущення щодо постійної температури реактора та її зміни за рис. 1,



**Рис. 6.** Залежність від часу опромінення чисельної щільності VC,  $N_{vc}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури за рис. 1.

**Fig. 6.** Dependence of number density of VC,  $N_{vc}$ , calculated according to the assumption of the constant temperature and with taking into account the temperature change according to Fig. 1 on the irradiation time.

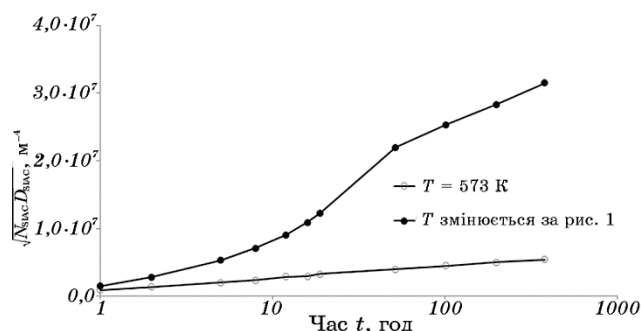


**Рис. 7.** Залежність від часу опромінення середнього розміру ВС,  $D_{VC}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури за рис. 1.

**Fig. 7.** Dependence of mean size of VC,  $D_{VC}$ , calculated according to the assumption of the constant temperature and with taking into account the temperature change according to Fig. 1 on the irradiation time.

можливо розглянути відповідну залежність зміни границі плинності  $\alpha$ -заліза,  $\Delta\sigma$ , що зазвичай розглядається як характеристика нейтронної крихкості. Внеском ВС у величину  $\Delta\sigma$  можна знехтувати в нашому дослідженні відповідно до [28], оскільки середній розмір ВС менший, ніж 1 нм (рис. 6). Внесок SIAS до  $\Delta\sigma$  є пропорційним величині  $(N_{SIAC} D_{SIAC})^{1/2}$  [29].

Згідно з рисунком 8, вказана величина для  $\alpha$ -заліза лінійно зростає з часом опромінення за припущення щодо постійної температури корпусу реактора, що узгоджується з даними [30] про вплив точ-



**Рис. 8.** Залежність від часу опромінення міри нейтронної крихкості  $(N_{SIAC} D_{SIAC})^{1/2}$ , яка розрахована за припущення щодо постійної температури реактора та з урахуванням зміни температури за рис. 1.

**Fig. 8.** Dependence on the value of  $(N_{SIAC} D_{SIAC})^{1/2}$  as an estimation of neutron embrittlement, calculated according to the assumption of the constant temperature and with taking into account the temperature change according to Fig. 1 on the irradiation time.

кових дефектів на нейтронну крихкість корпусу, та складним чином змінюється за припущення щодо зміни температури за рис. 1. При цьому характер зазначеної залежності змінюється саме при опроміненні впродовж 19 годин, коли температура корпусу реактора досягає робочої температури  $\sim 3573$  К. Також слід вказати, що відмінність у значеннях величини  $(N_{\text{SIAC}} D_{\text{SIAC}})^{1/2}$  зростає з часом опромінення.

#### 4. ВИСНОВКИ

Моделювання методом кластерної динаміки впливу зміни температури науково-дослідного реактора БР-2 [15] на властивості точкових дефектів та нейтронної крихкості  $\alpha$ -залізі, яке в ньому опромінюється, дозволяє зробити наступні висновки.

1. Ансамбль кластерів міжвузлових атомів переходить з нуклеаційної до детерміністської стадії за час 16 та 52 години за припущень щодо постійної температури корпусу реактора та щодо її зміни за рис. 1 відповідно.
2. Ансамбль вакансійних кластерів не досягає детерміністської стадії для обох припущень щодо постійної та змінної температури.
3. Для обох припущень щодо часової залежності температури реактора спостерігається немонотонна залежність концентрації поодиноких вакансій від часу опромінення.
4. Зростання границі плинності  $\alpha$ -заліза внаслідок опромінення відбувається пропорційно часу опромінення за припущення щодо постійної температури реактора та більш складним чином за припущення щодо зміни температури за рис. 1.
5. Відмінність в значеннях показника нейтронної крихкості, які знайдено за припущень щодо постійної та змінної температури, зростає з часом опромінення.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. A. Ulbricht, E. Altstadt, F. Bergner, H. Viehrig, and U. Keyderling, *J. Nucl. Mater.*, **416**: 111 (2011).
2. H. Viehrig, E. Altstadt, and M. Houska, *IAEA Technical Meeting on 'Degradation of Primary System Components of Water Cooled Nuclear Power Plants: Current Issues and Future Challenges' (November 5–8, 2013, Vienna)*.
3. G. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys* (Springer: 2007).
4. C. Heintze, F. Bergner, S. Akhmadaliev, and E. Altstadt, *J. Nucl. Mater.*, **472**: 196 (2016).
5. А. Гриценко, В. Демехин, В. Илькович, В. Буканов, Е. Васильева, *Ядерна та радіаційна безпека*, **50**: 29 (2011).
6. В. Ількович, В. Дем'яохін, В. Буканов, *XIX Щорічна наукова конференція*

- Інституту ядерних досліджень НАН України (24–27 січня 2012, Київ)*  
(Київ: Ін-т ядерних досліджень НАН України: 2012), с. 87.
7. G. Odette, T. Yamamoto, and D. Klingensmith, *Philos. Mag.*, **85**: 779 (2005).
  8. S. Shu, N. Almirall, P. Wells, T. Yamamoto, G. Odette, and D. Morgan, *Acta Mater.*, **157**: 72 (2018).
  9. E. Meslin, M. Lambrecht, M. Hernandez-Mayoral, and F. Bergner, *J. Nucl. Mater.*, **406**: 73 (2010).
  10. C. Becquart, A. Souidi, C. Domain, M. Hou, L. Malerba, and R. Stoller, *J. Nucl. Mater.*, **351**: 196 (2006).
  11. N. Castin, M. Pascuet, and L. Malerba, *J. Nucl. Mater.*, **429**: 315 (2012).
  12. E. Meslin, A. Barbu, L. Boulanger, B. Radiguet, P. Pareige, K. Arakawa, and C. Fu, *J. Nucl. Mater.*, **382**: 190 (2008).
  13. A. Wagner, F. Bergner, R. Chaouadi, H. Hein, M. Hernandez-Mayoural, M. Serrano, A. Ulbricht, and E. Altstadt, *Acta Mater.*, **104**: 131 (2016).
  14. M. Kondria and A. Gokhman, *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*, **174**, Iss. 1–2 (2019).
  15. F. Bergner, A. Almazouzi, M. Hernandez-Mayoural, M. Lambrecht, and A. Ulbricht, *Workshop Proceedings of Structural Materials for Innovative Nuclear Systems (SMINS) (Karlsruhe, Germany, June 4–6, 2007)* (Nuclear Energy Agency: 2008), p. 283.
  16. R. Becker and W. Doering, *Ann. Phys. Lpz.*, **24**: 719 (1935).
  17. J. Lepinoux, *Acta Mater.*, **57**: 1086 (2009).
  18. J. Lepinoux, *Philos. Mag.*, **90**: 3261 (2010).
  19. A. Gokhman and J. Boehmert, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **158**: 499 (2003).
  20. A. Gokhman, J. Boehmert, and A. Ulbricht, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **158**: 383 (2003).
  21. K. Nordlund, S. Zinkle, A. Sand et al., *Nature Communications*, March (2018).
  22. А. Амосов, Н. В. Копченлова, Ю. А. Дубинский, *Вычислительные методы для инженеров* (Москва: Высшая школа: 1994).
  23. *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).
  24. A. Gokhman and F. Bergner, *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*, **165**: 216 (2010).
  25. В. Скалозубов, Т. Габляя, И. Козлов, Е. Лещетная, *Атомная энергетика*, **15**: 43 (2014).
  26. Е. Лифшиц, Л. Питаевский, *Физическая кинетика* (Москва: Наука: 1979).
  27. F. Christien and A. Barbu, *J. Nucl. Mater.*, **324**: 90 (2004).
  28. F. Bergner, F. Gillemot, M. Hernández-Mayora, M. Serrano, G. Török, A. Ulbricht, and E. Altstadt, *J. Nucl. Mater.*, **461**: 37 (2015).
  29. X. Hu, X. Donghua, B. Sang, and B. Wirth, *Modelling and Simulation in Mater. Sci. Eng.*, **22**: 065002 (2014).
  30. A. Zeman, L. Debarberis, L. Kupca, B. Acosta, M. Kutka, and J. Degmova, *J. Nucl. Mater.*, **360**: 272 (2007).

## REFERENCES

1. A. Ulbricht, E. Altstadt, F. Bergner, H. Viehrig, and U. Keyderling, *J. Nucl.*

- Mater.*, **416**: 111 (2011).
2. H. Viehrig, E. Altstadt, and M. Houska, *IAEA Technical Meeting on 'Degradation of Primary System Components of Water Cooled Nuclear Power Plants: Current Issues and Future Challenges' (November 5–8, 2013, Vienna)*.
  3. G. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys* (Springer: 2007).
  4. C. Heintze, F. Bergner, S. Akhmedaliev, and E. Altstadt, *J. Nucl. Mater.*, **472**: 196 (2016).
  5. A. Gritsenko, V. Demekhin, V. Ilkovich, V. Bukanov, and E. Vasilieva, *Yaderna ta Radiatsiyana Bezpeka*, **50**: 29 (2011) (in Russian).
  6. V. Ilkovich, V. Demekhin, and V. Bukanov, *XIX Shchorichna Naukova Konferentsiya Instytutu Yadernykh Doslidzhen N.A.S. of Ukraine (24–27 January 2012, Kyiv)* (Kyiv: Istitut Yadernykh Doslidzhen, N.A.S. of Ukraine: 2012), c. 87 (in Ukrainian).
  7. G. Odette, T. Yamamoto, and D. Klingensmith, *Philos. Mag.*, **85**: 779 (2005).
  8. S. Shu, N. Almirall, P. Wells, T. Yamamoto, G. Odette, and D. Morgan, *Acta Mater.*, **157**: 72 (2018).
  9. E. Meslin, M. Lambrecht, M. Hernandez-Mayoral, and F. Bergner, *J. Nucl. Mater.*, **406**: 73 (2010).
  10. C. Becquart, A. Souidi, C. Domain, M. Hou, L. Malerba, and R. Stoller, *J. Nucl. Mater.*, **351**: 196 (2006).
  11. N. Castin, M. Pascuet, and L. Malerba, *J. Nucl. Mater.*, **429**: 315 (2012).
  12. E. Meslin, A. Barbu, L. Boulanger, B. Radigue, P. Pareige, K. Arakawa, and C. Fu, *J. Nucl. Mater.*, **382**: 190 (2008).
  13. A. Wagner, F. Bergner, R. Chaouadi, H. Hein, M. Hernandez-Mayoural, M. Serrano, A. Ulbricht, and E. Altstadt, *Acta Mater.*, **104**: 131 (2016).
  14. M. Kondria and A. Gokhman, *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*, **174**, Iss. 1–2 (2019).
  15. F. Bergner, A. Almazouzi, M. Hernandez-Mayoural, M. Lambrecht, and A. Ulbricht, *Workshop Proceedings of Structural Materials for Innovative Nuclear Systems (SMINS) (Karlsruhe, Germany, June 4–6, 2007)* (Nuclear Energy Agency: 2008), p. 283.
  16. R. Becker and W. Doering, *Ann. Phys. Lpz.*, **24**: 719 (1935).
  17. J. Lepinoux, *Acta Mater.*, **57**: 1086 (2009).
  18. J. Lepinoux, *Philos. Mag.*, **90**: 3261 (2010).
  19. A. Gokhman and J. Boehmert, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **158**: 499 (2003).
  20. A. Gokhman, J. Boehmert, and A. Ulbricht, *Radiation Effects and Defects in Solids*, **158**: 383 (2003).
  21. K. Nordlund, S. Zinkle, A. Sand et al., *Nature Communications*, March (2018).
  22. A. Amosov, N. V. Kopchenova, and Yu. A. Dubinskii, *Vychislitelnye Metody dlya Inzhenerov* (Moscow: Vysshaya Shkola: 1994) (in Russian).
  23. *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).
  24. A. Gokhman and F. Bergner, *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*, **165**: 216 (2010).
  25. V. Skalozubov, T. Gablaya, I. Kozlov, and E. Leschetnaya, *Atomnaya Energetika*, **15**: 43 (2014) (in Russian).

26. E. Lifshits and L. Pitaevskii, *Fizicheskaya Kinetika* (Moscow: Nauka: 1979).
27. F. Christien and A. Barbu, *J. Nucl. Mater.*, **324**: 90 (2004).
28. F. Bergner, F. Gillemot, M. Hernández-Mayora, M. Serrano, G. Török, A. Ulbricht, and E. Altstadt, *J. Nucl. Mater.*, **461**: 37 (2015).
29. X. Hu, X. Donghua, B. Sang, and B. Wirth, *Modelling and Simulation in Mater. Sci. Eng.*, **22**: 065002 (2014).
30. A. Zeman, L. Debarberis, L. Kupca, B. Acosta, M. Kutka, and J. Degmova, *J. Nucl. Mater.*, **360**: 272 (2007).