

REACTOR AND AEROSPACE METALS SCIENCE

PACS numbers: 61.72.Hh, 61.72.Lk, 61.80.-x, 62.20.D-, 62.20.F-, 83.50.-v

Моделювання радіаційного впливу на деформацію та зміну механічних властивостей бінарного стопу Zr–Nb

О. М. Щокотова, Д. О. Харченко, В. О. Харченко,
В. В. Купрієнко, С. В. Кохан

*Інститут прикладної фізики НАН України,
вул. Петропавлівська, 58,
40000 Суми, Україна*

Розглянуто вплив нейтронного опромінення на зміну механічних властивостей бінарного стопу Zr–Nb за навантажень у вигляді деформації розтягу, стиску та простого зсуву. На основі моделі фазового поля із врахуванням теорії швидкостей реакцій для визначення динаміки дефектів та із введенням пружної складової у рамках нелінійної теорії пружності проведено числове моделювання приготування зразка стопу, опромінення нейтронами підготовленого зразка та механічного навантаження зразків стопу до та після опромінення. Одержано і проаналізовано деформаційні криві, еволюцію розподілу полів пружних деформацій та зміщень. Досліджено формування та динаміку ліній проковзування, що утворюють дислокаційні диполі. Вивчено вплив температури опромінення, швидкості набору дози, а також швидкості деформації на межі міцності та пластичності. Одержано дозові залежності межі міцності у разі розтягування, стиснення та зсуву. Проаналізовано вплив опромінення та швидкості деформації на поведінку густини пружної енергії.

Ключові слова: бінарний стоп, опромінення, дефекти, деформація, механічні властивості.

The neutron irradiation influence on the mechanical properties change of the

Corresponding author: Olha Mykhaylivna Shchokotova
E-mail: shchokotova.o@gmail.com

*Institute of Applied Physics, N.A.S. of Ukraine,
58 Petropavlivska Str., 40000 Sumy, Ukraine*

Citation: O. M. Shchokotova, D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, V. V. Kupriienko, and S. V. Kokhan, Modelling of Radiation Effect on Deformation and Changes in the Mechanical Properties of Zr–Nb Binary Alloy, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **43**, No. 11: 1489–1521 (2021) (in Ukrainian), DOI: [10.15407/mfint.43.11.1489](https://doi.org/10.15407/mfint.43.11.1489).

binary Zr–Nb alloy under loads in the form of tensile deformation, compression and simple shear is considered. Based on the phase field model with taking into account reaction rate theory in order to determine the defects dynamics and with the elastic component introduction in the framework of non-linear elasticity theory, the numerical modelling of alloy sample preparation, neutron irradiation of the prepared sample and mechanical loading of alloy samples before and after irradiation is performed. Stress–strain curves, evolution of elastic deformation and displacement fields' distribution are analysed. The formation and dynamics of slips forming dislocation dipoles are studied. The influence of irradiation temperature, dose rate and strain rate on the ultimate strength and yield strength is studied. The dose dependences of the ultimate strength during tension, compression and shear are obtained. The influence of irradiation and strain rate on the elastic energy density behaviour is analysed.

Key words: binary alloy, irradiation, defects, deformation, mechanical properties.

(Отримано 16 червня 2020 р.; остаточн. варіант — 15 вересня 2021 р.)

1. ВСТУП

Як відомо, опромінення суттєво впливає на мікроструктурні зміни, стабільність та ріст преципітатів, упорядкування компонентів стопу, накопичення та просторову організацію дефектів, а також на зміну механічних властивостей матеріалів [1–8]. Зазвичай, опромінення призводить як до зміцнення матеріалу, так і водночас до зниження його пластичності, викликаючи у деяких випадках окрихчення. Останнім часом все більше уваги дослідники приділяють вивченню радіаційного впливу на реакторні матеріали, зокрема прогнозуванню зміни їхніх пластичних та міцнісних властивостей, оскільки вони є одним із основних критеріїв вибору конструкційних матеріалів ядерної енергетики.

Найбільш застосовуваними конструкційними матеріалами для ядерних реакторів є цирконієві стопи, що характеризуються високою радіаційною та корозійною стійкістю, високою температурою топлення, малим перерізом поглинання теплових нейтронів, а також високими механічними властивостями [9–12]. Одним із основних легуючих елементів для цирконієвих стопів виступає ніобій, який підвищує стабільність високотемпературних фаз та підвищує корозійну стійкість [13]. Відомо, що мікроструктурна еволюція у стопах Zr–Nb відрізняється своєю різноманітністю за різних видів зовнішнього впливу (радіаційного, термічного, механічного, під тиском) із численними метастабільними станами (α , ω , β) (див., наприклад, [12, 14–26] та посилання у них).

Дослідженню впливу опромінення на механічні властивості стопів Zr–Nb присвячено низку публікацій (див., наприклад, [27–41]).

Огляд робіт, присвячених вивченню радіаційного впливу на стоп Zr-2,5%Nb, зокрема на його пластичні та міцнісні властивості, у ядерних реакторах (включаючи важководні та легководні реактори) подано у роботі [27]. Тут представлено результати досліджень зміни механічних властивостей стопу Zr-2,5%Nb у разі нейтронного опромінення за температури 513 К [28] та 523 К [29], а також труб зі стопами у RBMK реакторах [30]. Показано, що висока густина радіаційно-індукованих дефектів, зокрема дислокаційних петель [31], призводить до зростання межі плинності та міцності стопу. Спадання межі міцності у разі підвищення температури пояснюється нижчою густиною дислокаційних петель $\langle a \rangle$ -типу за вищих значень температури [32]. У роботах [33, 34] наведено результати експериментів на розтяг стопу Zr-2,5%Nb до та після нейтронного опромінення за температур 323, 523 та 553 К. Знайдено, що опромінення призводить до зростання меж плинності та міцності стопу Zr-2,5%Nb, з іншого боку підвищення температури експерименту діє протилежним чином. У роботі [35] представлено значну кількість результатів експериментальних досліджень механічних властивостей цирконієвих стопів за різних металургійних умов (термічна обробка та ін.) та хемічного складу стопу, а також за різних умов опромінення (температури та ін.). Результати прикладання деформації розтягу уздовж двох напрямків до труб зі стопу Zr-2,5%Nb до та після *in situ* нейтронного опромінення викладено у роботі [36]. Вплив йонного та нейтронного опромінення на пластичність труб стопу Zr-2,5%Nb досліджено у роботі [37] шляхом комбінування результатів наноіндентування та числового моделювання, де навантаження прикладали в осьовому та поперечному напрямках. Результати досліджень зміни механічних властивостей у стопах Zr-Nb у разі йонного опромінення показують, що зі збільшенням вмісту ніобію від 2,5% до 5% відбувається зміцнення стопу [38]. Автори вказують на насичення густини дислокаційних петель $\langle a \rangle$ -типу за доз 1–3 з.н.а. та температур 573–723 К, а також на ріст дислокаційних петель $\langle c \rangle$ -типу до розміру 4 нм. У роботах [39, 40] наведено температурні залежності межі плинності неопроміненого та опроміненого стопу Zr-1%Nb, одержані з експериментів на механічний розтяг [39] та в результаті розвинення процедури обчислення межі плинності як функції від температури з урахуванням опромінення та відпалу радіаційних дефектів [40]. Авторами показано, що нейтронне опромінення веде до підвищення межі плинності, водночас як збільшення температури діє протилежним чином. Механічні властивості стопу Zr-1,8%Nb у разі йонного опромінення за температури 573 К та доз до 5,3 з.н.а. досліджено у роботі [41] шляхом розтягу зразків товщиною 0,18 мм. Визначено, що межа плинності зразків, опромінених дозами 3,1 з.н.а. та 5,3 з.н.а., складає відповідно 137% та 145% від її значення для неопроміненого зразка.

Незважаючи на значну кількість експериментальних досліджень радіаційного впливу на пластичні та міцнісні властивості стопів Zr–Nb, важливим є розвиток теоретичних представлень про мікроструктурну еволюцію та динаміку дефектів, які у разі опромінення призводять до змін деформаційних характеристик матеріалу. Для цього необхідним є використання мезоскопічних підходів числового моделювання поведінки фізичної системи, зокрема теорії фазового поля [42–44], що дає можливість вивчити перерозподіл компонентів стопу та еволюцію дефектів у разі опромінення, а також зміни механічних властивостей за різних типів механічного навантаження з метою встановлення повної інформації про фізичні механізми зміцнення та окрихчення. Метод фазового поля широко застосовують для дослідження процесів фазового розшарування та виділення преципітатів [45–47], структурування [48, 49], формування та росту пор [50–53]. Для опису еволюції пружних полів у разі деформацій у роботах [54–56] запропоновано поєднання методу фазового поля із теорією пружності. Для вивчення впливу опромінення на зміну механічних властивостей стопів необхідним є сумісне дослідження мікроструктурної еволюції, динаміки дефектів та деформаційних полів, як це показано у роботах [57, 58].

Відомо, що зі збільшенням швидкості деформації спостерігаються кращі механічні властивості досліджуваного матеріалу. Вивченню цього ефекту присвячено багато робіт (див., наприклад, такі [59–63]). Результати *in situ* експериментів на розтяг монокристалічних нікелевих нанодротин за швидкості деформування від 10^{-4} с⁻¹ до 10^{-2} с⁻¹ [59] показують, що вищі значення межі міцності мають місце за більшої швидкості деформації. Шляхом моделювання із застосуванням методу скінчених елементів та дискретної дислокаційної динаміки [60] показано, що збільшення швидкості зсувної деформації для монокристалічного зразка міді призводить до значного зростання його межі плинності. Пряму пропорційність швидкості деформації та межі плинності для кристалів заліза виявлено у роботі [61] із використанням методу дискретної дислокаційної динаміки. У роботі [62] шляхом моделювання методом молекулярної динаміки досліджено вплив швидкості деформації на механічні властивості вольфраму за різних форм механічного навантаження. Із використанням методу молекулярної динаміки [63] виявлено зростання межі плинності зі збільшенням швидкості простого зсуву для зразків нікелю та міді.

Дана робота присвячена дослідженню впливу опромінення на зміну механічних властивостей стопу Zr–Nb, вивченню еволюції пружних полів та дефектів за різних типів механічного навантаження. Стисло обговорюється приготування та опромінення зразків стопу (деталі див. у роботі [64]). Основну увагу приділено дослідженню механічного навантаження, за яке взято деформацію роз-

тягу, стиску та простого зсуву із постійною швидкістю. Також розглянуто вплив швидкості деформування на межі плинності та міцності стопу до та після опромінення. Із застосуванням підходу фазового поля [65, 66] разом із методом CALPHAD [67, 68] та теорією швидкостей реакцій [1, 69] розглянуто мікроструктурні перетворення у системі Zr–Nb із виділенням β -фази ніобію у разі врахування рівноважних точкових дефектів та нерівноважних вакансій, що утворюються у разі опромінення. Далі із використанням комбінації методу фазового поля з теорією пружності проведено моделювання пластичної течії початково приготованих неопроміненого та опроміненних зразків стопу Zr–Nb за різних параметрів опромінення.

2. МОДЕЛЬ ТА ОСНОВНІ ТЕОРЕТИЧНІ ПОЛОЖЕННЯ

Розглянемо бінарний стоп Zr–Nb із атомами двох сортів з відповідними концентраціями $x_\mu = N_\mu/N$, де N_μ — кількість атомів певного сорту $\mu = \{\text{Zr}, \text{Nb}\}$, N — це загальна кількість атомів усередині кубічної комірки розміром $l = \lesssim \delta_0$ (δ_0 — ширина міжфазної границі). Концентрацію вакансій позначаємо як c_v . Міжвузлові атоми не беремо до уваги через їхню низьку концентрацію порівняно із вакансіями. Загальну молярну енергію Гіббса записуємо у вигляді:

$$G = G_{\text{Zr–Nb}} + G_v, \quad (1)$$

де $G_{\text{Zr–Nb}}$ враховує властивості стопу, доданок G_v відповідальний за підсистему вакансій. Енергія Гіббса подаємо виразом:

$$G_{\text{Zr–Nb}} = G^{\text{ref}} + G^{\text{id}} + G^{\text{ex}}, \quad (2)$$

де G^{ref} — приведена енергія Гіббса, G^{id} позначає ідеальний внесок енергії Гіббса за рахунок випадкового перемішування атомів, G^{ex} задає внесок, що визначає відхилення від ідеальності. Приведена енергія Гіббса має стандартну форму $G^{\text{ref}} = \sum_\mu G_\mu^{0*} x_\mu$, де $\mu = \{\text{Zr}, \text{Nb}\}$. Тут G_μ^{0*} визначає приведені енергії G_{Zr}^{0*} та G_{Nb}^{0*} для чистих матеріалів. Ідеальна частина пов'язана із ентропійним внеском $G^{\text{id}} = RT \sum_\mu x_\mu \ln x_\mu$. Складова, що задає відхилення від ідеальності, має вигляд $G^{\text{ex}} = x_{\text{Zr}} x_{\text{Nb}} L_{\text{Zr,Nb}}$ із $L_{\mu,\mu'} = \sum_n (x_\mu - x_{\mu'})^n L_{\mu,\mu'}^n(T)$, де $L_{\mu,\mu'}^n(T)$ — коефіцієнти, які залежать від температури [67]. У подальшому розгляді можна обмежитись двома складовими $n = 0, 1$.

Аналогічно визначаємо внесок підсистеми вакансій G_v :

$$G_v = G_v^f + G_v^{\text{id}} + G_v^{\text{int}}, \quad (3)$$

де енергію формування вакансій визначають як $G_v^f = c_v \sum_{\mu} G_v^{f,\mu} x_{\mu}$; $G_v^{id} = RTc_v \ln c_v$ — відповідний ентропійний внесок; частина, що відповідає за взаємодію між вакансіями та атомами системи, описується компонентами енергії Гіббса $G_v^{int} = c_v \sum_{\mu} x_{\mu} G_{v-\mu}^{coh}$, де енергії взаємодії вакансія–атом визначаються через енергії когезії $G_{v-\mu}^{coh}$ [1].

Для опису процесів формування різних фаз необхідно використувати підхід на основі методу CALPHAD [67], у якому термодинамічні потенціали пов'язані із конкретними фазами. Оскільки у системі Zr–Nb відбувається випадіння ніобію у β -фазу, водночас як цирконій залишається у α -фазі, визначимо енергії Гіббса для α - і β -фаз окремо із використанням даних SGTE (Scientific Group Thermodata Europe) [68, 70]. Маємо:

$$\begin{aligned} G^{\alpha} &= G_{Nb}^{\alpha} x_{Nb} + G_{Zr}^{\alpha} x_{Zr} + (G_v^{Zr,f} x_{Zr} + G_v^{Nb,f} x_{Nb}) c_v + c_v [G_{v-Zr}^{coh} x_{Zr} + G_{v-Nb}^{coh} x_{Nb}] + \\ &+ x_{Nb} x_{Zr} L_{Zr,Nb}^{\alpha,0} + RT[x_{Nb} \ln x_{Nb} + x_{Zr} \ln x_{Zr} + c_v \ln c_v], \quad L_{Zr,Nb}^{\alpha,1} = 0, \\ G^{\beta} &= G_{Nb}^{\beta} x_{Nb} + G_{Zr}^{\beta} x_{Zr} + (G_v^{Zr,f} x_{Zr} + G_v^{Nb,f} x_{Nb}) c_v + c_v [G_{v-Zr}^{coh} x_{Zr} + G_{v-Nb}^{coh} x_{Nb}] + \\ &+ x_{Nb} x_{Zr} [L_{Zr,Nb}^{\beta,0} + L_{Zr,Nb}^{\beta,1} (x_{Zr} - x_{Nb})] + RT[x_{Nb} \ln x_{Nb} + x_{Zr} \ln x_{Zr} + c_v \ln c_v]. \end{aligned} \quad (4)$$

Вважаємо, що енергії формування вакансій однакові у α - та β -Nb фазах.

З метою ідентифікації преципітатів β -Nb уводимо до розгляду параметр порядку ϕ (фазове поле), який змінюється у наступний спосіб: $\phi = 0$ у α -фазі цирконію та $\phi = 1$ у β -фазі ніобію; між цими двома фазами параметр порядку змінюється плавно. Це дає можливість розрізнити дві фази. Тоді густина вільної енергії Гіббса $G(x_{Zr}, x_{Nb}, c_v, \phi)$ може бути виражена через густини α - і β -фаз G^{α} та G^{β} відповідно та фазове поле ϕ у наступному вигляді:

$$G(x_{Zr}, x_{Nb}, c_v, \phi) = G_a(x_{Zr}, x_{Nb}, c_v, \phi) + q(\phi), \quad (5)$$

$$G_a(x_{Zr}, x_{Nb}, c_v, \phi) = [1 - p(\phi)]G^{\alpha}(x_{Zr}, x_{Nb}, c_v) + p(\phi)G^{\beta}(x_{Zr}, x_{Nb}, c_v). \quad (6)$$

Тут введено апроксимаційну густину вільної енергії G_a , яка плавно змінюється між двома фазами, та двоямну потенціальну функцію $q(\phi)$. Вираз для G_a побудований таким чином, що за $\phi = 1$ апроксимаційна функція $p(\phi) = 1$, що визначає реалізацію β -фази, тобто $G_a = G^{\beta}$, та за $\phi = 0$ — $p(\phi) = 0$ у α -фазі, тобто $G_a = G^{\alpha}$. Апроксимаційні функції мають вигляд $p(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2)$, $q(\phi) = \omega_0\phi^2(1 - 2\phi + \phi^2)$ [66]. Тут ω_0 відповідає глибині ям у функції $q(\phi)$ за $\phi = 0$ та $\phi = 1$ і визначається енергією σ_0 та шириною δ_0 міжфазної границі як $\omega_0 = 3\sigma_0/\delta_0$.

Далі для дослідження структурних перетворень із випадінням ніобію у β -фазу зручно розглядати лише концентрацію ніобію $c \equiv x_{Nb}$ та концентрацію вакансій c_v . Тоді концентрацію цирконію виража-

ємо як $x_{Zr} = 1 - c - c_v$.

Вільну енергію Гіббса запишемо у загальному вигляді:

$$\mathcal{G} = \int \left[G(c, c_v, \phi) + \frac{\epsilon_c^2}{2} (\nabla c)^2 + \frac{\epsilon_v^2}{2} (\nabla c_v)^2 + \frac{\epsilon_\phi^2}{2} (\nabla \phi)^2 \right] dV, \quad (7)$$

де ϵ_c , ϵ_v та ϵ_ϕ позначають енергетичні параметри; інтегрування проводиться по всьому об'єму системи V .

Енергії Гіббса для чистих α -Nb, α -Zr, β -Nb, β -Zr та коефіцієнти взаємодії подано у табл. 1.

ТАБЛИЦЯ 1. Основні параметри, які використовують для моделювання.

TABLE 1. The main parameters used in simulations.

Параметр	Значення	Розмірність
Параметр ґратниці для Zr	$a = 3,2 \cdot 10^{-8}$; $c = 5,14 \cdot 10^{-8}$	см
Атомний об'єм	$\Omega_0 = 3,32 \cdot 10^{-23}$	см ³
Рівноважна концентрація вакансій	$c_{v0} = 0,54 e^{-G_v^{f,Zr}/k_B T}$	
Енергія формування вакансій	$G_v^{f,Zr} = 1,8$; $G_v^{f,Nb} = 2,7$	еВ
Енергія когезії	$G_{coh}^{Zr} = 6,3$; $G_{coh}^{Nb} = 7,5$	еВ
Приведена енергія Гіббса	$G_{Nb}^{\alpha} = 1480,65 + 144,48T -$ $- 26,4711T \ln T + 0,000203475T^2 -$ $- 3,50119 \cdot 10^{-7}T^3 + 93398,8/T$ $G_{Zr}^{\alpha} = -7829 - 34971/T + 125,649T -$ $- 0,00437791T^2 - 241618T \ln T$ $G_{Nb}^{\beta} = -8519,35 + 93398/T + 142,048T -$ $- 0,000203475T^2 + 3,50119 \cdot 10^{-7}T^3 -$ $- 26,4711T \ln T$ $G_{Zr}^{\beta} = -526,9 + 25233/T + 124,9457T -$ $- 0,0034008415T^2 - 9,72897347 \cdot 10^{-8}T^3 -$ $- 0,761428942 \cdot 10^{-10}T^4 - 25,607406T \ln T$	Дж/моль
Коефіцієнт взаємодії	$L_{Zr,Nb}^{\alpha,0} = 24411$ $L_{Zr,Nb}^{\beta,0} = 15911 + 3,35T$ $L_{Zr,Nb}^{\beta,1} = 3919 - 1,091T$	Дж/моль
Коефіцієнт дифузії Nb у α -фазі	$D_{Nb}^{\alpha} = 6,6 \cdot 10^{-10} e^{-15851,4/T}$	м ² /с
Коефіцієнт дифузії Nb у β -фазі	$D_{Nb}^{\beta} = 9 \cdot 10^{-9} (T/1136)^{18,1} \times$ $\times e^{-(25100+35,5(T-1136))/1,98T}$	м ² /с
Коефіцієнти дифузії вакансій	$D_v^{Nb} = e^{-0,91eB/kT}$; $D_v^{Zr} = 0,022 e^{-0,93eB/kT}$	см ² /с
Коефіцієнт дифузії міжвузлів	$D_i^{Nb} = 9,38 \cdot 10^{-4} e^{-0,08eB/kT}$ $D_i^c = 4,7 \cdot 10^{-4} e^{-0,15eB/kT}$ $D_i^a = 3,5 \cdot 10^{-4} e^{-0,06eB/kT}$	см ² /с

Продовження табл. 1.

Continuation of Table 1.

Параметр	Значення	Розмірність
Ефективність трансформації міжвузлів ($\eta > 1$)	$\eta = 4,0$	
Коефіцієнт Пуассона	$\nu = 0,34$	
Об'ємний модуль	$K^\alpha = 91,1; K^\beta = 170$	ГПа
Модуль зсуву	$\mu^\alpha = 33; \mu^\beta = 38$	ГПа
Радіус рекомбінації	$r_0 = 0,62 \cdot 10^{-7}$	см
Ефективність рекомбінації	$\epsilon_r = 0,95$	
Ефективність кластеризації міжвузлів	$\epsilon_i^s = 0,6; \epsilon_i^g = 0,2$	
Ефективність кластеризації вакансій	$\epsilon_v^s = 0,65; \epsilon_v^g = 0,05$	
Енергія дефекту упаковки	$\gamma_{SF} = 9,05 \cdot 10^{13}$	еВ/см ²
Фактор зміщення	$z_i = 1,1; z_v = 1,0$	
Енергія міжфазної границі	$\sigma_0 = 0,3$	Дж/м ²
Ширина міжфазної границі	$\delta_0 = 5$	нм
Довжина стрибка вибитого атома	$R_0 = 7,5$	нм
Густина дислокацій	$\rho_N = 10^8$	см ⁻²
Швидкість пошкодження	$\mathcal{K} = 10^{-6} - 10^{-5}$	з.н.а./с

Динаміка системи за нормальних умов визначається наступними рівняннями:

$$\partial_t c = \nabla \cdot L_c \nabla \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta c}, \quad \partial_t c_v = \nabla \cdot L_v \nabla \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta c_v}, \quad \partial_t \phi = -M_\phi \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \phi}, \quad (8)$$

де L_c , L_v та M_ϕ — кінетичні коефіцієнти та мобільність відповідно. Згідно підходу Логінової [65] кінетичний коефіцієнт L_c визначаємо через коефіцієнти самодифузії ніобію D_{Nb}^α , D_{Nb}^β у α - і β -фазах відповідно, як $L_c = c(1-c)D_{Nb}^\alpha [D_{Nb}^\beta/D_{Nb}^\alpha]^{p(\phi)}/RT$. Для дифузії вакансій кінетичний коефіцієнт обираємо у стандартному вигляді $L_v = c_v M_v$, де $M_v = D_v/RT$ визначається через коефіцієнт дифузії вакансій D_v . Мобільність для фазового поля M_ϕ задаємо у вигляді $M_\phi = D_{eff}/a^2 RT$, де $D_{eff} = D_{Nb}^\alpha [1 + (D_{Nb}^\beta/D_{Nb}^\alpha)^{1/2}]^2$, a — відстань між атомами [66].

У разі розгляду системи за умов опромінення додатково враховуємо просторово-часову еволюцію двох типів міжвузлових атомів, що генеруються опроміненням з концентраціями c_i^{Zr} та c_i^{Nb} , де повна концентрація міжвузлів $c_i = c_i^{Zr} + c_i^{Nb}$. Під час проведення відповідних досліджень будемо вважати, що дислокаційна сітка, а також вакансійні та міжвузлові дислокаційні петлі відіграють роль стоків для точкових дефектів. Для спрощення нашого опису ми припускаємо, що густина дислокаційної сітки та середній розмір зерна лишаються незмінними під час опромінення, тоді як густини вакан-

сійних та міжвузлових петель змінюються.

Із використанням стандартної теорії швидкостей реакцій описуємо динаміку концентрацій міжвузлових атомів та вакансій (c_i та c_v) рівняннями виду [1, 69]:

$$\begin{aligned}\partial_t c_i &= \mathcal{K}(1 - \varepsilon_i) - D_i \lambda_g^{-2} \mu(\rho_{i,v}) c_i - \alpha_r c_i (c_v - c_{v0}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_i, \\ \partial_t c_v &= \mathcal{K}(1 - \varepsilon_v) - D_v \lambda_g^{-2} \mu(\rho_{i,v}) c_v - \alpha_r c_i (c_v - c_{v0}) - \nabla \cdot \mathbf{J}_v.\end{aligned}\quad (9)$$

Тут перші доданки відповідають за генерацію точкових дефектів, другі доданки описують анігіляцію дефектів на відповідних стоках, треті доданки відповідають процесам їх рекомбінації. Швидкість генерації дефектів $\mathcal{K} = \mathcal{K}_{\text{NRT}}(1 - \varepsilon_r)$ вимірюється в одиницях зміщення на атом за секунду (з.н.а./с), тоді як \mathcal{K}_{NRT} — швидкість зміщень, яку розраховують відповідно до NRT стандартів [71], ε_r визначає долю дефектів, що рекомбінували у каскаді атомних зміщень. Величини $\varepsilon_{i,v} = \varepsilon_{i,v}^s + \varepsilon_{i,v}^g$ пов'язані з ефективностями $\varepsilon_{i,v}^s$ та $\varepsilon_{i,v}^g$ утворення нерухомих та рухомих кластерів дефектів відповідно.

Ефективні коефіцієнти дифузії $D_{v,i}$ набувають вигляду [72]:

$$D_i = D_i^{\text{Zr}} \chi(c, T), \quad D_v = D_v^{\text{Zr}} (1 - c) + D_v^{\text{Nb}} c, \quad (10)$$

де уведено позначення для поправочної функції:

$$\chi(c, T) = \left(1 + \eta \frac{D_i^{\text{Nb}}}{D_i^{\text{Zr}}} \frac{c}{1 - c} \right) / \left(1 + \eta \frac{c}{1 - c} \right), \quad (11)$$

що враховує ефекти трансформації міжвузлів одного типу в інший (наприклад, гантелі Nb–Nb у гантель Nb–Zr) та задається коефіцієнтами дифузії міжвузлів цирконію та ніобію (D_i^{Zr} , D_i^{Nb}) та ефективностями трансформації міжвузлів $\eta = \exp(H_{\text{Nb} \rightarrow \text{Zr}}/T)$, де $H_{\text{Nb} \rightarrow \text{Zr}}$ — енергія, одержана у разі трансформації гантелі Nb–Nb у гантель Zr–Nb. Величина $H_{\text{Nb} \rightarrow \text{Zr}}$ дорівнює енергії зв'язку змішаної гантелі [73]. У граничному випадку $\eta = 1$ приходимо до стандартної моделі [74]. Для врахування анізотропії міжвузлів у цирконієвих стопах зазвичай використовують осереднений коефіцієнт дифузії $D_i^{\text{Zr}} = (D_i^a D_i^c)^{1/3}$ визначений через коефіцієнти дифузії міжвузлів $D_i^{a,c}$ вздовж напрямків a та c [75–79].

Середню довжину вільного пробігу вакансій $\lambda_g = (\rho_N)^{-1/2}$ у рівняннях (9) визначають через густину дислокаційної сітки ρ_N . Величина $\mu(\rho_{i,v}) = 1 + \lambda_g^2 Z_I \rho_I + \lambda_g^2 Z_V \rho_v$ задає перенормовану ефективність стоків точкових дефектів, що визначена через густини міжвузлових та вакансійних петель ρ_i та ρ_v відповідно, де $Z_I > Z_V$ позначають інтенсивності відповідних петель абсорбувати точкові дефекти і є такими: $Z_I = z_i(u + \sqrt{3 + u^6 / u^2}) / 3$, $Z_V = z_v$, де $z_i = 1,1$, $z_v = 1,0$, $u = (D_i^c / D_i^a)^{1/6}$

[75, 76]. Коефіцієнт рекомбінації має стандартний вигляд $\alpha_r = 4\pi r_0 D_i / \Omega_0$, який виражається через радіус захоплення $r_0 \approx (3-5)a$, де Ω_0 — атомний об'єм, a — параметр ґратниці, J_i відповідає дифузійному потокові міжвузлових атомів.

Слід зазначити, що для моделювання впливу опромінення на матеріал передбачається, що підготовлена (відпалена) система знаходиться у стані механічної рівноваги і всі деформації, викликані невідповідністю ґратниці, компенсуються. Основні деформації будуть викликані нерівноважними точковими дефектами, що генеруються у разі опромінення. Потік вакансій запишемо у вигляді $\mathbf{J}_v = \mathbf{J}_v^{th} + \mathbf{J}_v^{int}$, що включає термодинамічну частину $\mathbf{J}_v^{th} = -L_v \nabla \delta \mathcal{G} / \delta c_v$ та частину $\mathbf{J}_v^{int} = L_v \kappa \varpi_v^2 \nabla (1 + r_0^2 (1 + \nu) / [3(1 - \nu)] \nabla^2) c_v$, яка відповідає за пружну взаємодію дефектів, де ν — коефіцієнт Пуассона, параметр $\kappa \equiv K \Omega_0$ визначають через об'ємний модуль K та атомний об'єм Ω_0 , $\varpi_v \equiv \Delta \Omega_v / \Omega_0$ визначає дилатаційний об'єм, $\Delta \Omega_v \approx -0,2 \Omega_0$ задає зміну об'єму за рахунок вакансій (див. [48, 64, 80, 81]).

З метою опису виникнення структурного безладу у разі опромінення (балістичного перемішування) відповідно до моделі, застосованої у роботах [46, 47], перепишемо динаміку концентрації c у вигляді суми $\partial_t c = (\partial_t c)^{th} + (\partial_t c)^{bal}$. Тут $(\partial_t c)^{th}$ відповідає термодинамічному потоку, що описується першим рівнянням системи (8), балістичне перемішування описується доданком $(\partial_t c)^{bal} = \Gamma (\langle c \rangle_w - c)$, де усереднення $\langle c \rangle_w \equiv \int \omega_R(\mathbf{r} - \mathbf{r}') c(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$ [47] проводять з використанням ймовірнісного розподілу атомних зміщень $\omega_R(r) = [2\pi R_0^2]^{-1} \exp(-r/R_0)$ (R_0 задає середню відстань балістичних стрибків атомів [46]). Для частоти перестрибування атомів маємо $\Gamma \approx \mathcal{K} / (1 - \epsilon_r)$.

Далі у припущенні, що час життя вільних вакансій є набагато більшим за відповідний час життя міжвузлів (відповідно до співвідношення між їхніми коефіцієнтами дифузії $D_i \gg D_v$), можна адиабатично виключити концентрацію міжвузлів як швидко змінну, поклавши $\partial_t c_i \approx 0$. Враховуючи одержані співвідношення, одержуємо модифіковану систему рівнянь для концентрацій у вигляді:

$$\begin{aligned} \partial_t c &= \nabla \cdot \tilde{L}_c \nabla \left(\frac{\delta \mathcal{G}}{\delta c} \right) + \frac{\mathcal{K}}{1 - \epsilon_r} (\langle c \rangle_w - c), \\ \partial_t c_v &= \mathcal{K}(1 - \epsilon_v) - \left[D_v \lambda_g^{-2} \mu(\rho_i, \rho_v) + \frac{\alpha_r \mathcal{K}(1 - \epsilon_i)}{D_i \lambda_g^{-2} \mu(\rho_i, \rho_v) + \alpha_r (c_v - c_{v0})} \right] (c_v - c_{v0}) + \\ &+ \nabla \cdot L_v \left(\nabla \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta c_v} - \kappa \varpi_v^2 \nabla \left[1 + \frac{r_0^2}{3} \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \nabla^2 \right] c_v \right). \end{aligned} \quad (12)$$

Слід відмітити, що кінетичний коефіцієнт \tilde{L}_c за умов опромінення залежить від параметрів опромінення та має вигляд $L_c = L_c + L_c^{irr}$, де L_c^{irr} залежить від концентрації вакансій та міжвузлів, генерованих у

каскадах атомних зміщень. Як показано у роботі [46], внесок, пов'язаний із впливом опромінення на відповідну мобільність, може бути одержаний з використанням стаціонарних значень однорідних концентрацій вакансій та міжвузлових атомів $c_{v,i}^s$ у вигляді $L_c^{irr} = \bar{c}(1 - \bar{c})(c_v^s D_v + c_i^s D_i)/RT$, розглядаючи так званий режим рекомбінації [1]. Це дозволяє одержати

$$L_c^{irr} \approx \frac{\bar{c}(1 - \bar{c})}{RT} \sqrt{\frac{\kappa \Omega_0 D_v}{4\pi r_0}} (\sqrt{1 - \varepsilon_i} + \sqrt{1 - \varepsilon_v}).$$

Тут \bar{c} визначає середню концентрацію ніобію у стопі.

Для опису динаміки густин міжвузлових та вакансійних петель $\rho_{i,v}$ будемо використовувати теорію швидкостей реакцій відповідно до моделі, запропонованої у роботі [82]. Далі приймається, що дислокаційні петлі розмазано по всій системі, а часовий масштаб їхньої еволюції істотно перевищує інші. Це означає, що для обчислення $\rho_{i,v}$ достатньо скористатись осередненими значеннями $\langle c_{v,i} \rangle$. Нами приймається також, що міжвузлові петлі є петлями $\langle a \rangle$ -типу (вакансійні петлі $\langle a \rangle$ -типу є нестійкими (див. обговорення [83, 84]) і тому тут не розглядаються). Зростання вакансійних петель $\langle c \rangle$ -типу стає можливим у разі перевищення критичної дози $\phi_c = 3$ з.н.а. [12]. Зростання петель відбувається із сформованих кластерів відповідного сорту дефектів завдяки рухомим кластерам з ефективністю їх утворення $\varepsilon_{i,v}^g$ та загального потоку дефектів до петель. У такому разі модель динаміки густини дислокацій має вигляд [82, 85]:

$$\begin{aligned} s_i^a \partial_t \rho_i &= \kappa \varepsilon_i^g - \rho_i [Z_v D_v (\langle c_v \rangle - c_{iL}) - Z_i D_i \langle c_i \rangle], \\ s_v^c \partial_t \rho_v &= \begin{cases} 0, & \phi \leq \phi_c, \\ \kappa \varepsilon_v^g - \rho_v [Z_i D_i \langle c_i \rangle - Z_v D_v (\langle c_v \rangle - c_{vL})], & \phi > \phi_c. \end{cases} \end{aligned} \quad (13)$$

Величини $c_{vL} = c_{v0} \exp([\gamma_{SF} + F_e] \Omega_0 / |\mathbf{b}| T)$, $c_{iL} = c_{v0} \exp(-[\gamma_{SF} + F_e] \Omega_0 / |\mathbf{b}| T)$ позначають концентрації рівноважних вакансій біля вакансійних та міжвузлових дислокаційних петель відповідно, де γ_{SF} — енергія дефекту пакування, пружна енергія має вигляд [69]: $F_e = \mu^a \Omega_0 \ln(r_L / |\mathbf{b}| + 1) / [4\pi(1 - \nu) |\mathbf{b}| (r_L + |\mathbf{b}|)]$, $r_L = r_{v0}/2$, $r_{v0} = (n_v \Omega_0 / \pi |\mathbf{b}|)^{1/2}$, n_v — число вакансій у разі формування петлі [85]. Масштабні параметри є такими $s_{i,v}^{a,c} = 2\sqrt{n_{i,v} \Omega_0 b_{a,c} / \pi}$, де $n_v = 30-50$, $n_i = 6-10$ [85], $b_{a,c}$ позначає компоненти значень вектора Бюргерса для $\langle a \rangle$ - та $\langle c \rangle$ -петель.

Для вивчення еволюції пружних полів у системі за наявності зовнішнього механічного навантаження вводимо до густини вільної енергії Гіббса $G(c, c_v, \phi, \mathbf{u}) = G(c, c_v, \phi) + G_{el}(\mathbf{u}, c, c_v)$ додаткову пружну складову G_{el} , яка обумовлюється невідповідністю параметрів ґратниці згідно закону Вегарда. Тут $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ — вектор пружних зміщень.

Із використанням підходу, розвинутого у роботах [54–56, 80, 86], для густини пружної енергії Гіббса маємо:

$$G_{el}(\mathbf{u}, c, c_v) = \alpha e_1 c + \kappa \omega_v^2 e_1 c_v + g_{el}(\mathbf{u}, c). \quad (14)$$

Тут перші два доданки представляють зв'язок між полем деформації, полем концентрації речовини та полем вакансій. Параметр $\alpha > 0$ задає силу зв'язку між концентрацією c та дилатаційною деформацією $\nabla \mathbf{u}$ і визначається неоднорідністю розподілу концентрації матеріалу навколо дислокацій. У другому доданку параметр $\kappa \omega_v^2$ відповідає за зв'язок дилатаційної деформації із концентрацією вакансій c_v . Третій доданок рівняння (14) відноситься до енергії пружного континууму та містить залежність пружних модулів від поля композиції. Тут використовуємо нелінійний вигляд густини пружної енергії для пружного континууму, яка є періодичною функцією локальних деформацій, що обумовлено періодичністю кристала. Отже, маємо:

$$g_{el}(\mathbf{u}, c) = \frac{1}{2} K e_1^2 + \Phi(c, e_2, e_3). \quad (15)$$

Тут перший доданок визначає пружну енергію дилатації з об'ємним модулем пружності K . Слід відмітити, що механічні навантаження призводять до локальних деформацій, пов'язаних із локальним розподілом легуючих елементів (а саме концентрацією ніобію), що призводить до локальної залежності модулів пружності від концентрації компонентів стопу. Тому у випадку моделювання механічних навантажень враховуємо залежність об'ємного модуля пружності K від поля композиції у наступний спосіб: $K(c) = K^\alpha(1 - c) + K^\beta$, де K^α та K^β визначають об'ємні модулі цирконію та ніобію відповідно. Компоненти деформації у рівнянні (15) виражаються через пружні зміщення \mathbf{u} наступним чином [55, 56, 86]:

$$e_1 = \nabla \cdot \mathbf{u} \partial_x u_x + \partial_y u_y, \quad e_2 = \partial_x u_x - \partial_y u_y, \quad e_3 = \partial_x u_y + \partial_y u_x, \quad (16)$$

де e_1 — деформація дилатації, e_2 — тетрагональна деформація, e_3 — деформація зсуву. Другий доданок у рівнянні (15) визначає пружну енергію деформації зсуву $\Phi(c, e_2, e_3)$, яка залежить від поля композиції c як:

$$\Phi(c, e_2, e_3) = \Phi^\alpha(e_2, e_3)(1 - c) + \Phi^\beta(e_2, e_3)c, \quad (17)$$

де $\Phi^\alpha(e_2, e_3)$ для гексагональної ґратниці α -Zr задають виразом [56, 86]:

$$\Phi^\alpha(e_2, e_3) = \frac{\mu^\alpha}{6\pi^2} \left[3 - \cos \pi(\sqrt{3}e_3 - e_2) - \cos \pi(\sqrt{3}e_3 + e_2) - \cos(2\pi e_2) \right] \quad (18)$$

з модулем зсуву μ^α -Zr.

Для кубічної ґратниці β -Nb використовуємо $\Phi^\beta(e_2, e_3)$ у вигляді [55, 56]:

$$\Phi^\beta(e_2, e_3) = \frac{\mu^\beta}{2\pi^2} [1 - \cos \pi(e_2 + e_3) \cos \pi(e_2 - e_3)], \quad (19)$$

де μ^β це модуль зсуву ніобію. У випадку малих деформацій ($|e_{2,3}| \ll \ll 1$) згідно лінійної теорії пружності густина пружної енергії набуває стандартного вигляду $g_{el} \cong [Ke_1^2 + \mu_0(e_2^2 + e_3^2)]/2$, де $\mu_0 = (C_{11} - C_{12})/2 = C_{44}$ виражене через звичайні пружні модулі C_{ii} у ізотропному випадку [87].

Динаміку вектора пружних зміщень \mathbf{u} визначають рівнянням [87]:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla \cdot \hat{\sigma}, \quad (20)$$

де $\mathbf{v} = \partial \mathbf{u} / \partial t$ — швидкість пружного поля; у першому доданку, що відповідає за ефект в'язкості у разі деформації, η_0 — зсувна в'язкість. Тензор пружних напружень $\hat{\sigma} = \{\sigma_{ij}\}$ задовольняє умові $\nabla \cdot \hat{\sigma} = -\delta \mathcal{G} / \delta \mathbf{u}$.

У комп'ютерній процедурі змінні простору та часу ми масштабували у одиницях l та $[D_v \lambda_g^{-2}]^{-1}$ відповідно. Часовий масштаб для пружних зміщень $\tau_0 = (\rho / \mu^\beta)^{1/2} l$. Пружну енергію масштабували у одиницях $\mu^\beta l^2$, густину пружної енергії та пружні напруження — у одиницях μ^β . Для інших параметрів приймаємо: $\alpha / \mu^\beta = 1,5$, $\kappa \tau_v^2 / \mu^\beta = 0,3$, $\eta_0 / \tau \mu^\beta = 1$, $K^\beta / \mu^\beta = 4,47$, $K^\alpha / \mu^\beta = 2,39$, $\mu^\alpha / \mu^\beta = 0,87$ [88].

3. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВОГО МОДЕЛЮВАННЯ

3.1. Підготовка зразків

Для проведення числового моделювання процесів мікроструктурних перетворень у бінарному стопі Zr-Nb будемо використовувати основні матеріальні константи, що зібрано у табл. 1. Спочатку приготуємо конфігурацію зразка бінарного стопу Zr-Nb за температури $T = 550$ К. Для цього проводимо процедуру числового моделювання на квадратній двовимірній ґратниці розміру $N \times N$ із кількістю комірок $N = 128$ та розміром комірки $l = 2,5$ нм, що складає близько половини ширини міжфазної границі. Лінійний розмір досліджуваної системи $L \approx 0,4$ мкм. Граничні умови є періодичними. Початкові умови задамо наступними: $\langle c(\mathbf{r}, t = 0) \rangle = 0,7\bar{c}$, $\langle c_v(\mathbf{r}, t = 0) \rangle = c_{v0}$, $\langle (\delta c(\mathbf{r}, t = 0))^2 \rangle = 0,01\bar{c}$, $\langle (\delta c_v(\mathbf{r}, t = 0))^2 \rangle = 0,1c_{v0}$, де $\bar{c} = 0,1$. Відповідні знімки еволюції системи наведено на рис. 1. Видно, що у системі виникають домени, збагачені β -Nb, до цього ж нерівноважні вакансії розташовуються здебільшого поблизу міжфазних границь. Де-

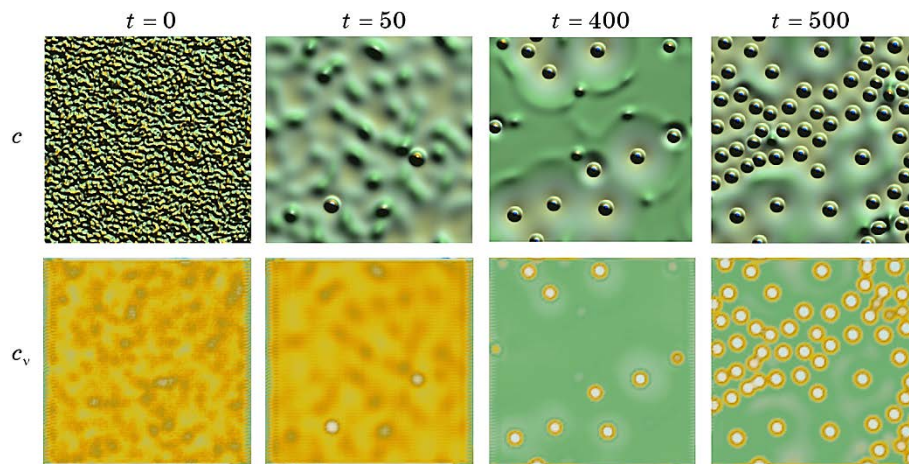


Рис. 1. Знімки концентрації β -Nb та концентрації вакансій для сплаву Zr–10% Nb за $T = 550$ К.

Fig. 1. Snapshots of β -Nb concentration and vacancy concentration for Zr–10% Nb alloy at $T = 550$ K.

тальний опис та аналіз процесу виготовлення зразків подано у роботі [64], тому далі ми опустимо відповідне обговорення.

Далі проводимо моделювання опромінення приготованого зразка за реакторних умов. За початкову систему, що піддається опроміненню, візьмемо конфігурацію, наведену на рис. 1 за $t = 500$. Одержані знімки опроміненого дозою $\phi = (\mathcal{K}\lambda_g^2/D_v)t = 8$ з.н.а. сплаву за різних умов опромінення (швидкості набору дози \mathcal{K} та температури T) подано на рис. 2. Слід відмітити, що опромінення призводить до появи додаткових включень β -фази та розмиття міжфазних границь. Бачимо, що більшість нерівноважних вакансій розташовані в околі міжфазних границь, інші розподілені по системі. Картину перерозподілу концентрацій ніобію та вакансій у разі опромінення представлено у роботі [64], де проведено детальний опис статистики та зміни розмірів преципітатів β -фази. Тому, ми опустимо відповідне обговорення, подаючи лише динаміку росту густин дислокаційних петель, зображену на рис. 3. З нього видно, що густина міжвузлових петель починає зростати за малих доз, натомість, $\langle c \rangle$ -петлі починають зростати у субкритичний спосіб у разі перевищення дози $\phi_c = 3$ з.н.а. Підвищення температури сприяє зростанню густини міжвузлових петель, густина петель вакансійного типу незначно зменшується з температурою.

Одержані результати відповідають експериментальним даним [12, 89] та узгоджуються із результатами числового моделювання методами теорії швидкостей реакцій [83, 84, 89]. Одержані зразки

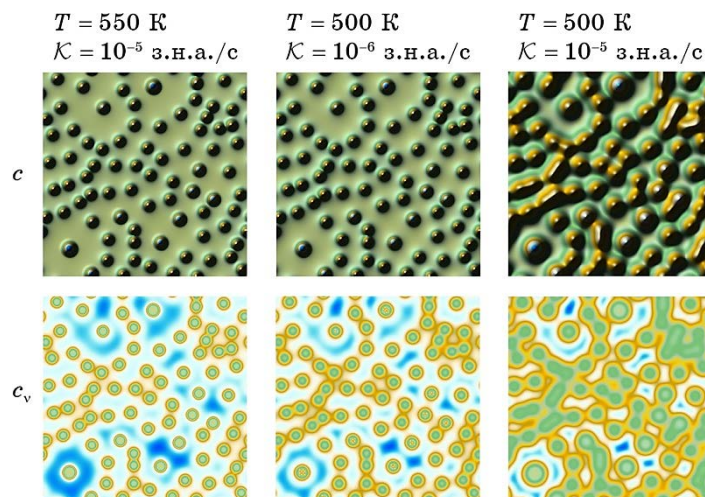


Рис. 2. Вплив опромінення на початково приготований зразок стопу Zr-10% Nb.

Fig. 2. Irradiation influence on the initially prepared sample of Zr-10% Nb alloy.

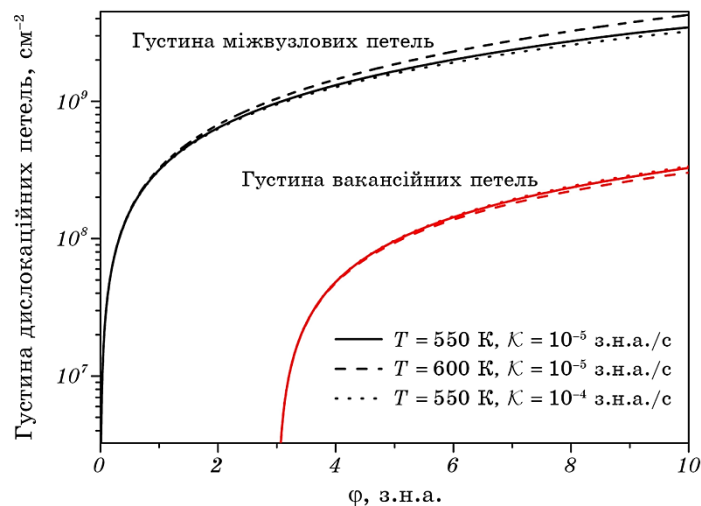


Рис. 3. Дозові залежності густини дислокаційних петель за різних температур опромінення.

Fig. 3. Dose dependencies of dislocation loop densities at different irradiation temperatures.

неопроміненого та опромінених стопів далі використовують як початкові конфігурації для моделювання механічного навантаження.

3.2. Механічні навантаження

Для моделювання пластичної деформації заздалегідь підготовлених зразків стопу чисельно розв'язуємо динамічні рівняння на пружні поля разом із дифузійними рівняннями для концентрації речовини c та концентрації вакансій c_v . Як механічне навантаження розглядаємо монотонну деформацію у формі простого зсуву, розтягу та стиску зі сталою швидкістю. У такому разі до зразка прикладають зсувну $\gamma = \dot{\gamma}t$ та одновісну $\varepsilon = \dot{\varepsilon}t$ деформації, де $\dot{\gamma} = d\gamma/dt$ та $\dot{\varepsilon} = d\varepsilon/dt$ — постійні швидкості деформації, вимірювані у одиницях τ_0^{-1} . У комп'ютерній процедурі зовнішнє навантаження визначають з граничних умов для пружних полів. А саме, для вектора пружних зміщень \mathbf{u} на нижній грані $y = 0$ задаємо граничні умови у вигляді: $u_x = u_y = 0$. На верхній грані $y = N$ визначаємо: $u_x = \gamma N$ та $u_y = 0$ у випадку прикладання до зразка зсувної деформації γ , $u_x = -u_y = -\varepsilon N/2$ та $u_x = -u_y = \varepsilon N/2$ у випадках розтягу та стиску із одновісною деформацією ε відповідно. На бокових гранях використовуємо періодичні граничні умови $\mathbf{u}(x + N, y, t) = \mathbf{u}(x, y, t)$. Початкові умови для пружних полів задаємо як $\mathbf{u} = 0$ та $\mathbf{v} = 0$.

З метою адекватної числової реалізації мікроскопічних пружних деформацій просторову дискретизацію у разі інтегрування динамічних рівнянь здійснюємо із застосуванням методу зміщеної ґратниці [86], згідно якого змінні визначаємо у різних позиціях, на відміну від випадку незміщеної ґратниці. А саме, вектори \mathbf{u} , \mathbf{v} визначаємо у вузлах ґратниці (n, m) , а деформації, тензори та концентрації — у точках $(n + 1/2, m + 1/2)$. Наприклад, для векторної компоненти A (скажімо, $A = u_x$), $\nabla_x A$ та $\nabla_y A$ у точках $(n + 1/2, m + 1/2)$ визначаємо як $[A(n + 1, m + 1) - A(n, m) + A(n + 1, m) - A(n, m + 1)]/2$ та $[A(n + 1, m + 1) - A(n, m) - A(n + 1, m) + A(n, m + 1)]/2$ відповідно із використанням A у чотирьох точках $(n + 1/2 \pm 1/2, m + 1/2 \pm 1/2)$. Аналогічно визначаємо $\nabla \cdot \tilde{\sigma}$ у точці (n, m) із використанням компонент напружень у чотирьох точках $(n \pm 1/2, m \pm 1/2)$.

Спочатку дослідимо вплив опромінення на криві напруження–деформація за різних форм механічного навантаження. На рис. 4, а подано залежності усереднених значень безрозмірних зсувних напружень $\langle \sigma_{xy} \rangle$ від зсувної компоненти тензора деформацій $\langle \epsilon_{xy} \rangle$ у випадку зсувного навантаження.

Для розтягу та стиску залежності усереднених значень різниці безрозмірних нормальних напружень $\langle \sigma_n \rangle = \sigma_{yy} - \sigma_{xx}$ від нормальної компоненти тензора деформацій $\langle \epsilon_{yy} \rangle$ наведено на рис. 4, б. Для зручності подання напруження та деформації стиску представлено додатними. Трикутниками на кривих позначено значення межі плинності σ_y , що характеризує опір матеріалу пластичній течії. Порівняння одержаних деформаційних кривих до та після опромінення показує, що у разі опромінення стопу відбувається підвищення

меж плинності σ_y та міцності σ_u , остання з яких відповідає максимальним значенням напружень на діаграмі, які матеріал може витримати до руйнування.

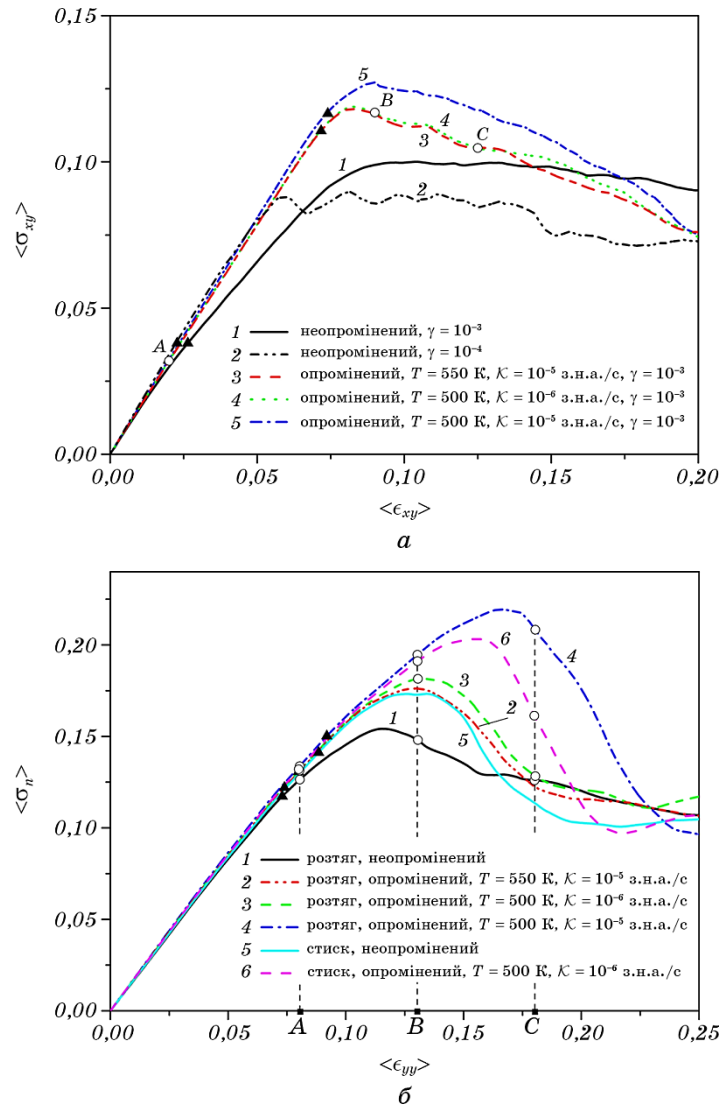


Рис. 4. Діаграми зсуву (а) та розтягу й стиску (б) для стопу Zr-10% Nb до та після опромінення за різних параметрів: температури опромінення T , швидкості набору дози \mathcal{K} й швидкості деформації $\dot{\gamma}$.

Fig. 4. The stress-strain curves for shear (a) and for tension and compression (б) of Zr-10% Nb alloy before and after irradiation at different parameters: irradiation temperature T , dose rate \mathcal{K} and strain rate $\dot{\gamma}$.

Тобто опромінення призводить до зростання опору стопу пластичній деформації та до його зміцнення. Такі результати впливу опромінення на механічні властивості узгоджуються з експериментальними даними [27–30, 33–36, 39, 41] та результатами моделювань [37, 40].

Значення меж плинності та міцності для всіх розглядуваних випадків подано у табл. 2. Аналіз наведених даних показує, що σ_y і σ_u зростають із підвищенням швидкості набору дози \mathcal{K} та спадають із підвищенням температури опромінення T . Отже, зі збільшенням \mathcal{K} відбувається зміцнення стопу Zr–10% Nb та підсилення його опору пластичній течії, а з підвищенням T навпаки, що узгоджується із результатами робіт [27–32, 34, 37, 39–41]. Слід відмітити, що за деформації стиску межі плинності та міцності приймають найвищі значення у порівнянні із випадками зсувної деформації та розтягу як для неопроміненого, так і для опромінених зразків. Найнижчі значення σ_y і σ_u спостерігаються у випадку зсуву.

Далі розглянемо вплив швидкості деформації на деформаційні криві. Порівняння кривих 1 і 2 на рис. 4, а показує, що підвищення швидкості деформування $\dot{\gamma}$ у разі зсуву неопроміненого зразка веде до зростання межі міцності.

На рисунку 5, а наведено залежності $\langle \sigma_{xy} \rangle$ від $\langle \epsilon_{xy} \rangle$ у разі зсуву опроміненого зразка за різних значень швидкості зсувної деформації $\dot{\gamma}$. Залежності $\langle \sigma_n \rangle$ від $\langle \epsilon_{yy} \rangle$ для деформації розтягу та стиску за різних значень швидкості одновісної деформації $\dot{\epsilon}$ представлено на рис. 5, б. Значення межі плинності σ_y на діаграмах позначено трикутниками. Порівняння одержаних кривих показує, що підвищення швидкості деформації призводить до збільшення меж плинності σ_y та міцності σ_u , а отже, до зростання опору опроміненого стопу Zr–10% Nb пластичній деформації та до його зміцнення. Відповідні значення σ_y і σ_u для зразка до та після опромінення наведено у табл. 2. Одержані результати по впливу швидкості деформації на межі

ТАБЛИЦЯ 2. Значення меж плинності σ_y та міцності σ_u .

TABLE 2. Values of yield strength σ_y and ultimate strength σ_u .

T, K		Неопромінений			550	500			500
$K, \text{з.н.а./с}$					10^{-5}	10^{-6}			10^{-5}
Швидкість деформації		10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-3}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-3}
σ_y	Зсув	0,038	0,038	0,038	0,110	0,082	0,083	0,110	0,117
	Розтяг	0,098	0,105	0,117	0,122	0,130	0,130	0,130	0,150
	Стиск	0,122	0,133	0,141	0,145	0,136	0,136	0,149	0,161
σ_u	Зсув	0,086	0,089	0,100	0,118	0,103	0,112	0,119	0,127
	Розтяг	0,128	0,135	0,154	0,176	0,159	0,170	0,182	0,219
	Стиск	0,157	0,164	0,173	0,194	0,190	0,194	0,203	0,227

плинності та міцності узгоджуються із результатами експериментів та числового моделювання для багатьох кристалічних матеріалів.

Зокрема, для міді, заліза, вольфраму, нікелю та ін. (див., напри-

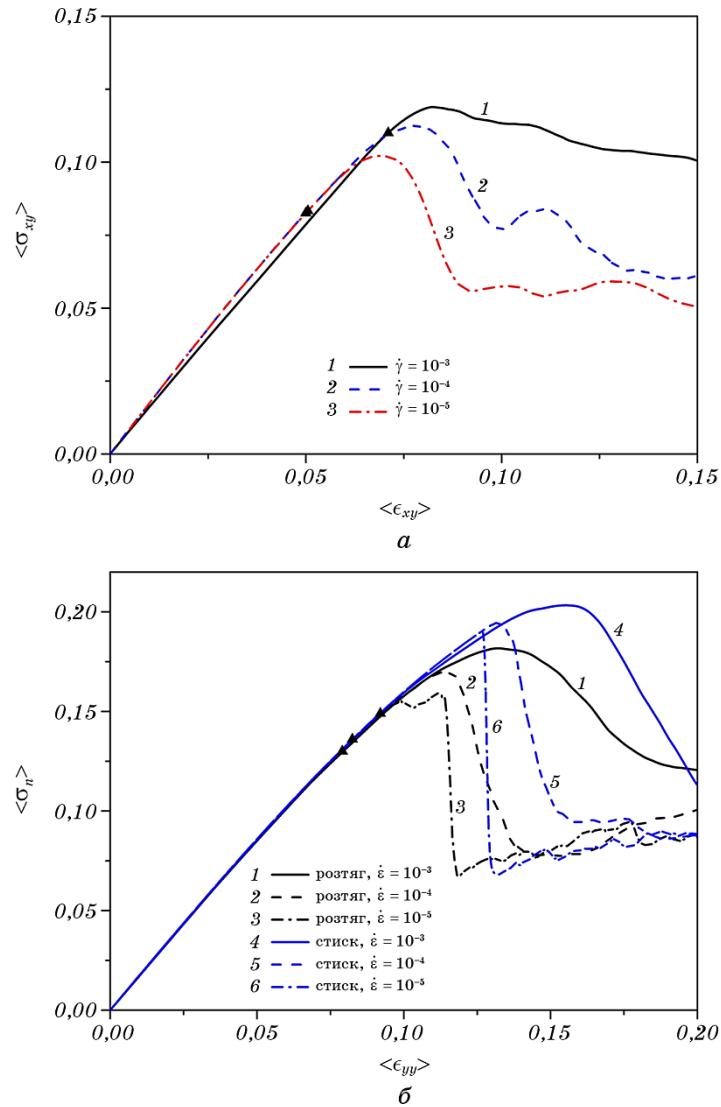


Рис. 5. Діаграми зсуву (а) та розтягу й стиску (б) за різних швидкостей деформації для сплаву Zr-10%Nb, опроміненого дозою $\varphi = 8$ з.н.а. за температури $T = 500$ К та швидкості набору дози $\mathcal{K} = 10^{-6}$ з.н.а./с.

Fig. 5. The stress-strain curves for shear (a) and for tension and compression (b) at different strain rates for Zr-10%Nb alloy irradiated at dose $\varphi = 8$ dpa, temperature $T = 500$ K and dose rate $\mathcal{K} = 10^{-6}$ dpa/s.

клад, [59–63]) встановлено зростання механічних властивостей зі збільшенням швидкості прикладеного навантаження.

Для аналізу впливу дози опромінення на міцність стопу Zr–10% Nb проведено моделювання деформації розтягу, стиску та зсуву за швидкості деформації 10^{-3} та значення дози опромінення φ до 40 з.н.а. Результати обчислень наведено на рис. 6. Одержані криві можуть бути поділені на чотири стадії [4]. На рисунку 6 ці стадії позначено для випадку деформації стиску. На початковій стадії (I) спостерігається зростання значень межі міцності σ_u , що характеризує сильне зміцнення, яке викликається кластерами вакансійного типу. Менший приріст значень σ_u на другій стадії (II) пояснюється релаксацією полів напружень поблизу вакансійних кластерів. Третя стадія (III) супроводжується насиченням мікроструктурних компонентів радіаційного зміцнення; тут межа міцності досягає своїх найвищих значень. На четвертій стадії (IV) відбувається зниження значень σ_u , що відповідає стадії крихкого руйнування.

Аналіз значень σ_u показує, що зміцнення розглядуваного зразка стопу відбувається за дози опромінення до 15 з.н.а. у випадках стиснення та зсуву, а у випадку розтягування за значень φ до 18 з.н.а.

Також відмітимо, що межа міцності набуває своїх найвищих значень $\sigma_u = 0,198; 0,190; 0,121$ у діапазонах дози опромінення $15 \text{ з.н.а.} < \varphi < 19 \text{ з.н.а.}$, $18 \text{ з.н.а.} < \varphi < 25 \text{ з.н.а.}$ та $15 \text{ з.н.а.} < \varphi < 25 \text{ з.н.а.}$ у разі стиснення, розтягування та зсуву відповідно. Одержані

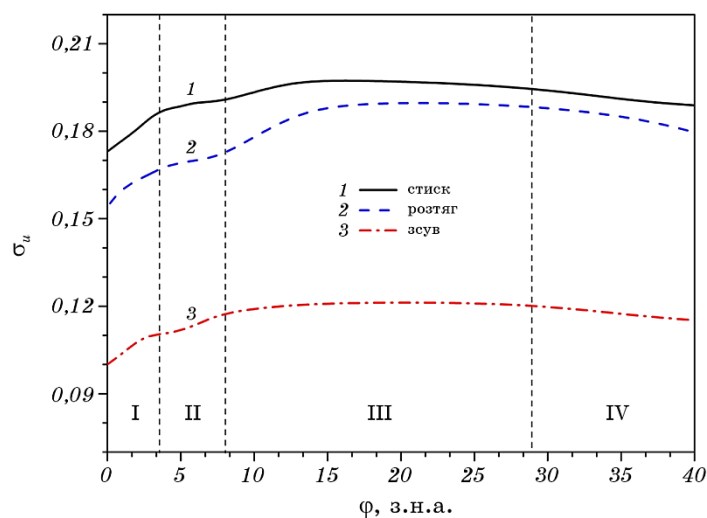


Рис. 6. Дозові залежності межі міцності σ_u для опроміненого стопу Zr–10% Nb ($T = 550 \text{ K}$, $\mathcal{K} = 10^{-5} \text{ з.н.а./с}$) за різних механічних навантажень.

Fig. 6. Dose dependencies of the ultimate strength σ_u for irradiated Zr–10% Nb alloy ($T = 550 \text{ K}$, $\mathcal{K} = 10^{-5} \text{ dpa/s}$) at different mechanical loads.

залежності межі міцності від дози опромінення узгоджуються із даними по зміцненню кристалічних матеріалів у разі опромінення, для багатьох з яких за початкових невеликих доз опромінення зазвичай спостерігається зростання значень межі міцності, з подальшим збільшенням дози опромінення значення межі міцності можуть залишатися незмінними або незначно змінюватись. Така тенденція зміни значень межі міцності у разі опромінення показана для цирконієвих стопів, стопів алюмінію, нержавійних сталей тощо (див., наприклад, [2, 7, 41, 90] та посилання у них).

Далі розглянемо еволюцію пружних полів у зразках стопу Zr–10% Nb, що деформуються зі швидкістю 10^{-3} . На рисунку 7 подано результати числового моделювання деформації розтягу, стиску та зсуву у точках A, B, C, які позначено на діаграмах розтягу та стиску (див. рис. 4, б) та діаграмі зсуву (див. рис. 4, а) відповідно. Тут стрілочками показано напрямки прикладеної деформації. Знімки відхи-

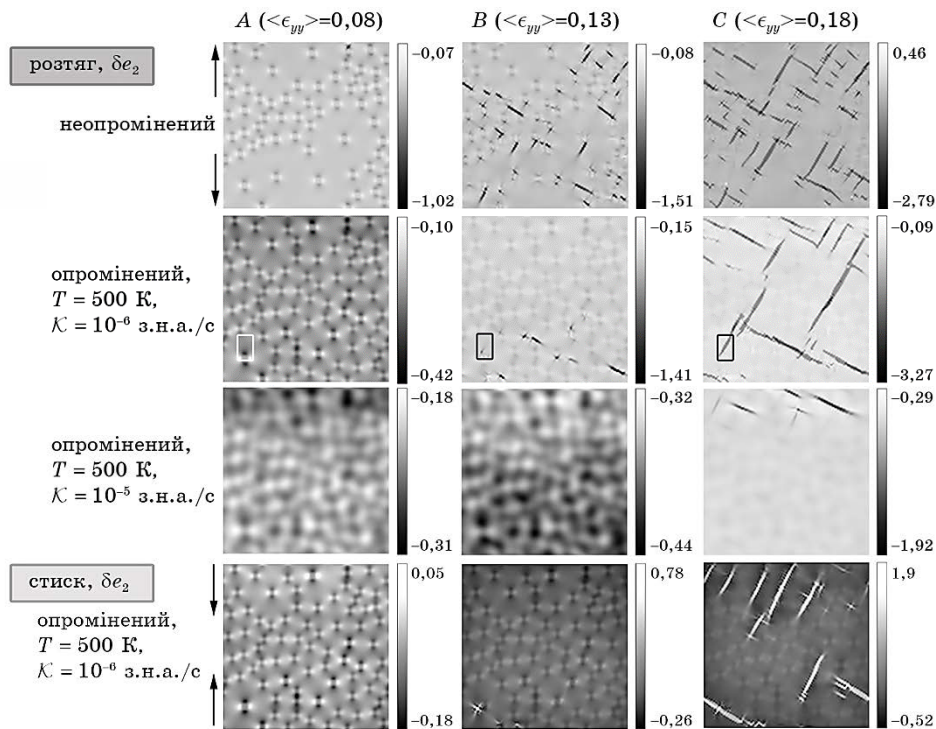
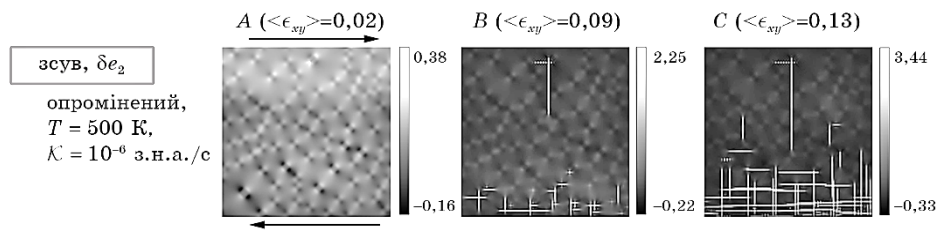


Рис. 7. Еволюція відхилення тетрагональної деформації $\delta e_2 = e_2 - \epsilon$ у разі розтягування та стиснення й відхилення зсувної деформації $\delta e_3 = e_3 - \gamma$ у разі зсуву для неопроміненого та опромінених зразків стопу Zr–10% Nb.

Fig. 7. Evolution of tetragonal strain deviation $\delta e_2 = e_2 - \epsilon$ under tension and compression, and of shear strain deviation $\delta e_3 = e_3 - \gamma$ under shear for unirradiated and previously irradiated samples of Zr–10% Nb alloy.



Продовження рис. 7.

Continuation of Fig. 7.

лення тетрагональної δe_2 та зсувної δe_3 деформації показують, що у разі механічного навантаження у зразках виникають лінії проковзування, що формуються парю крайових дислокацій із протилежними векторами Бюргерса [55, 86]. У такому разі крайові точки ліній проковзування вказують на місцезнаходження дислокаційних ядер. Як видно, у разі розтягування та стиснення лінії проковзування орієнтовані під кутом $\pm\pi/4$ до напрямку прикладеного навантаження, водночас як у разі зсувної деформації — під кутом 0 або $\pi/2$ [86]. Слід відмітити, що у разі деформації розтягу у місцях розташування ліній проковзування мають місце мінімальні значення δe_2 , а у разі деформації стиску та зсуву — максимальні значення δe_2 та δe_3 відповідно. Це пояснюється різними напрямками проковзування. Порівняння одержаних знімків δe_2 для деформації розтягу неопроміненого та опроміненого зразків показує, що опромінення та збільшення швидкості набору дози \mathcal{K} призводить до підвищення опору матеріалу пластичній деформації, оскільки формування ліній проковзування починається пізніше, тобто за вищих значень $\langle \epsilon_{yy} \rangle$.

На рисунку 8 представлено результати моделювання поведінки поля пружних зміщень у разі розтягування опроміненого зразка зі швидкістю деформування 10^{-3} . Знімки для δu демонструють розподіл відхилення пружних зміщень у позначених фрагментах на відповідних знімках для δe_2 (див. рис. 7). Тут стрілочки виходять із початкових позицій у недеформованому середовищі та закінчуються у позиціях після деформації, а кольором відображено поле концентрації s . Як видно із знімків у точках B, C, в околі сформованої лінії проковзування відбувається суттєвий перерозподіл поля вектора пружних зміщень. Стрибкоподібна поведінка у значеннях компонент вектора пружних зміщень u_x та u_y відображає розташування ліній проковзування у системі.

Проаналізуємо вплив швидкості деформації на поведінку густини пружної енергії $\langle \Phi \rangle$ у разі розтягування опроміненого зразка стопу Zr-10% Nb, еволюцію якої представлено на рис. 9, а. Тут штрихова крива відображає діаграму розтягу відповідного зразка за швидкості деформації $\dot{\epsilon} = 10^{-3}$. Порівнюючи одержані криві для

густини пружної енергії знаходимо, що найбільші значення $\langle \Phi \rangle$ приймає за найвищої швидкості деформування.

Сумісний аналіз кривої 1 та штрихової кривої показує, що за початкових значень деформації відбувається зростання пружної енергії, обумовлене формуванням та рухом дислокацій, а після досягнення межі міцності на діаграмі напруження–деформація пружна енергія спадає.

Далі розглянемо вплив опромінення на еволюцію густини пружної енергії. Порівняння поданих на рис. 9, б залежностей $\langle \Phi \rangle$ від $\langle \epsilon_{yy} \rangle$ для неопроміненого та опромінених ступів показує, що густина пружної енергії приймає нижчі значення за початкових малих деформацій для опромінених зразків. Підвищені значення $\langle \Phi \rangle$ спостерігали для опромінених зразків у порівнянні із неопроміненим у інтервалах деформацій: $0,104 < \langle \epsilon_{yy} \rangle < 0,175$ (криві 2 і 3) та $0,107 < \langle \epsilon_{yy} \rangle < 0,225$ (крива 4), які відповідають областям підвищених на-

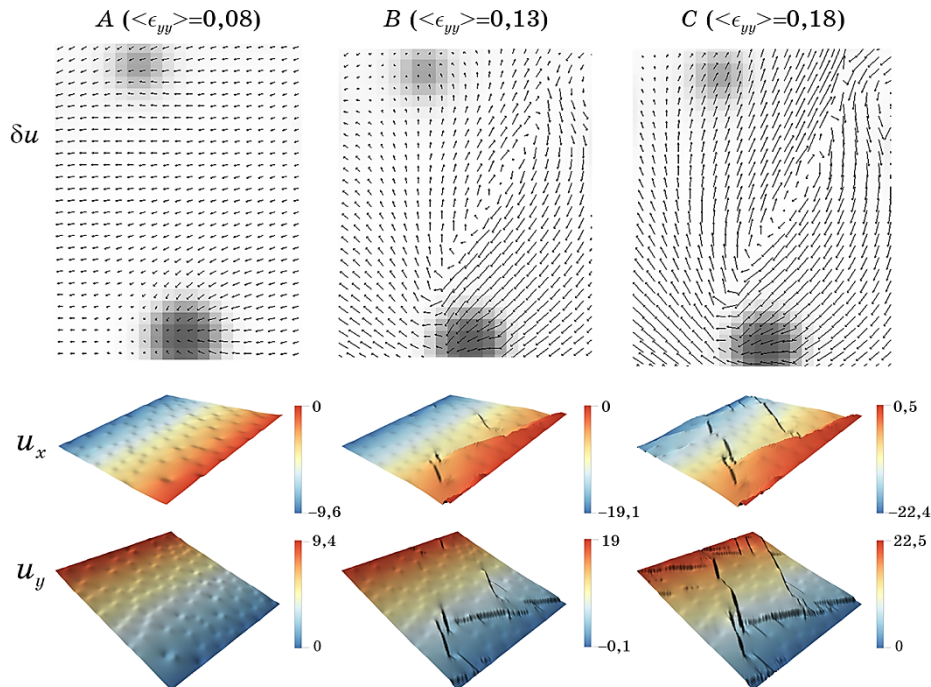


Рис. 8. Еволюція відхилення вектора пружних зміщень $\delta \mathbf{u} = \mathbf{u} + (\epsilon_x/2, -\epsilon_y/2)$ та його компонент u_x, u_y у разі деформації розтягу зразка ступу Zr-10% Nb, опроміненого дозою $\phi = 8$ з.н.а. за температури $T = 500$ К, $\dot{\kappa} = 10^{-6}$ з.н.а./с.

Fig. 8. Evolution of elastic displacement vector deviation $\delta \mathbf{u} = \mathbf{u} + (\epsilon_x/2, -\epsilon_y/2)$ and its components u_x, u_y under tensile deformation of irradiated sample of Zr-10% Nb alloy at $T = 500$ K, $\dot{\kappa} = 10^{-6}$ dpa/s, and $\phi = 8$ dpa.

пружень на деформаційних кривих (див. рис. 4, б, криві 2–4).

Слід відмітити, що найвищі значення густини пружної енергії

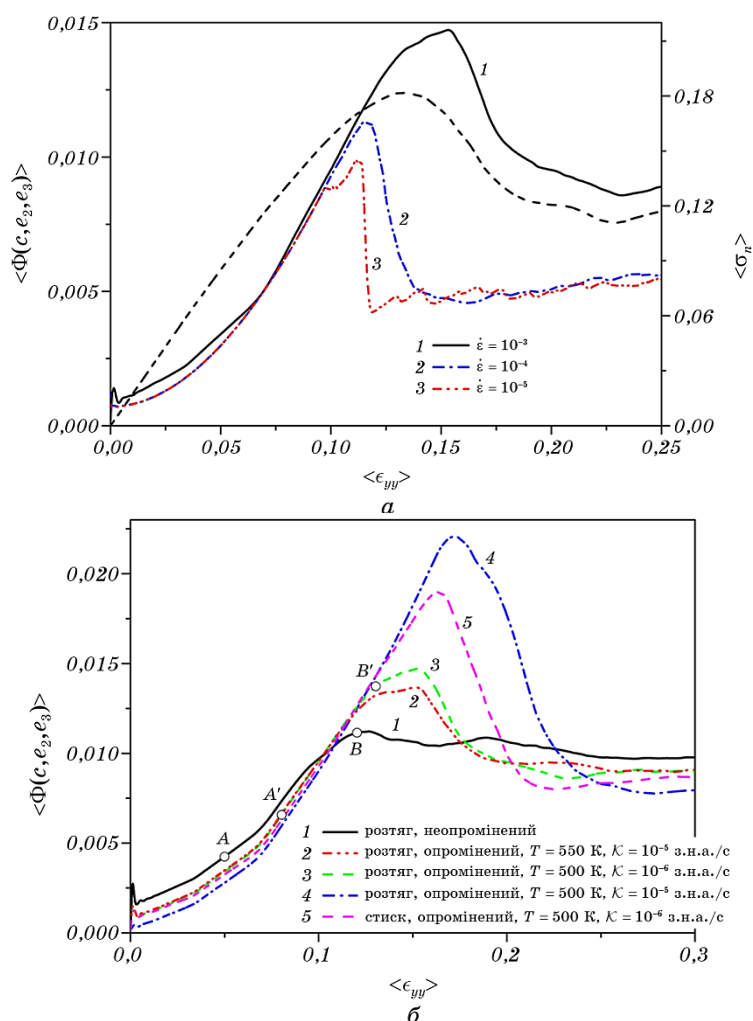


Рис. 9. Залежності густини пружної енергії $\langle \Phi(c, e_2, e_3) \rangle$ від деформації $\langle \epsilon_{yy} \rangle$ у разі розтягування опроміненого зразка ступу Zr–10% Nb за температури $T = 500$ К та $\mathcal{K} = 10^{-6}$ з.н.а./с для різних швидкостей деформації $\dot{\epsilon}$ (а) та у разі розтягування й стиснення зразків зі швидкістю $\dot{\epsilon} = 10^{-3}$ до та після опромінення дозою $\varphi = 8$ з.н.а. за різних значень параметрів T та \mathcal{K} (б).

Fig. 9. Dependencies of the elastic energy density $\langle \Phi(c, e_2, e_3) \rangle$ on deformation $\langle \epsilon_{yy} \rangle$ under tension of irradiated sample of Zr–10% Nb alloy at $T = 500$ K та $\mathcal{K} = 10^{-6}$ dpa/s at different strain rates $\dot{\epsilon}$ (a) and under tension and compression of samples at strain rate $\dot{\epsilon} = 10^{-3}$ before and after irradiation at dose $\varphi = 8$ dpa at different values of parameters T and \mathcal{K} (b).

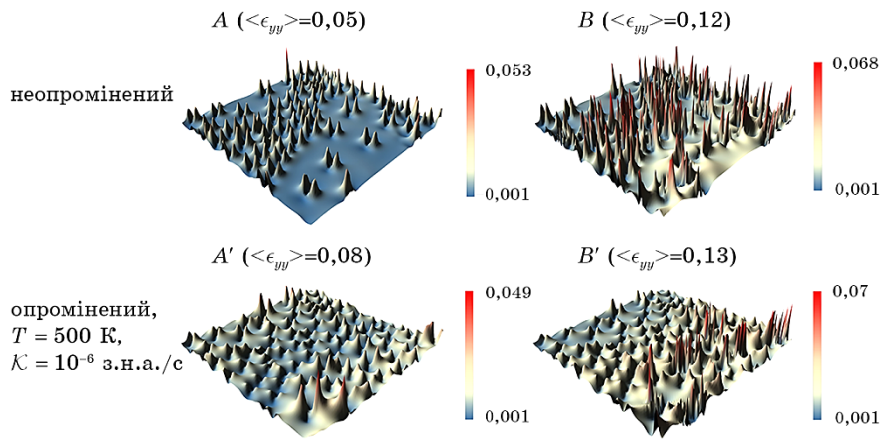


Рис. 10. Знімки густини пружної енергії Φ у точках A , B та A' , B' для кривих 1 і 3, поданих на рис. 9, б.

Fig. 10. Snapshots of the elastic energy density Φ in the points A , B , and A' , B' for lines 1, 3 shown in Fig. 9, б.

має опромінений зразок за $T = 500$ К та $K = 10^{-5}$ з.н.а./с. Порівнявши криві 3 і 5 (рис. 9, б), що відповідають розтягуванню та стисненню опроміненого зразка стопу за $T = 500$ К та $K = 10^{-6}$ з.н.а./с, бачимо, що у разі деформації стиску в інтервалі $0,120 < \langle \epsilon_{yy} \rangle < 0,203$ мають місце вищі значення $\langle \Phi \rangle$.

Розподіл поля густини пружної енергії у випадку розтягу зразка стопу до (точки A , B) та після (точки A' , B') опромінення наведено на рис. 10. Підвищені значення Φ спостерігаються поблизу міжфазних границь, а піки із максимальними значеннями вказують на розташування дислокаційних ядер. Відмітимо, що зі збільшенням деформації $\langle \epsilon_{yy} \rangle$ відбувається зростання максимальних значень густини пружної енергії.

4. ВИСНОВКИ

Розглянуто механізм пластичної течії та зміну механічних властивостей бінарного стопу Zr–Nb у разі радіаційного опромінення. Із застосуванням методу фазового поля та теорії швидкостей реакцій числовим моделюванням одержано зразки стопу Zr–Nb із включеннями β -фази ніобію до та після опромінення нейтронами. Із врахуванням пружного внеску підготовлені зразки стопу досліджено на механічні навантаження у вигляді деформації зсуву, розтягу та стиску із постійною швидкістю.

У результаті вивчення деформаційних кривих показано, що опромінення призводить до підвищення опору стопу пластичній те-

чії та до його зміцнення.

Встановлено, що межі плинності та міцності зростають із швидкістю набору дози та спадають із підвищенням температури опромінення.

Виявлено, що найвищі значення механічних характеристик спостерігаються за навантажень у формі деформації стиску порівняно із розтягом та зсувом. Під час аналізу впливу дози опромінення на зміну механічних властивостей знайдено, що зміцнення стопу Zr–Nb відбувається за доз до 15 з.н.а. у випадках стиснення та зсуву, а у разі деформації розтягу — за доз до 18 з.н.а.

Також досліджено вплив швидкості деформації зсуву, розтягу та стиску на зміну механічних властивостей матеріалу. Установлено, що значення меж плинності та міцності вищі за більших швидкостей деформування зразків стопу до та після опромінення.

Моделювання еволюції пружних полів у стопі Zr–Nb у разі деформування показало, що із підвищенням швидкості набору дози прояв ліній проковзування та дислокацій у зразка відбувається за вищих значень деформацій. Під час дослідження поведінки густини пружної енергії установлено, що її значення за початкових деформацій нижчі для опромінених зразків порівняно із неопроміненими. Водночас підвищені значення густини пружної енергії для опромінених зразків на відміну від неопромінених спостерігаються в областях деформацій, що відповідають діапазону підвищених напружень.

Одержані результати щодо формування та росту преципітатів у разі опромінення та росту дислокаційних петель $\langle a \rangle$ - та $\langle c \rangle$ -типів відповідають експериментальним даним [12, 38, 89] та узгоджуються із результатами числового моделювання методами теорії швидкостей реакцій [83, 84, 89]. Результати стосовно зростання опору стопу пластичній деформації та його зміцнення у разі опромінення узгоджуються з експериментальними даними [27–30, 33–36, 39, 41] та результатами моделювань [37, 40].

Одержані дані щодо впливу швидкості пошкоджень та температури опромінення на зміну пластичних та міцнісних властивостей стопу Zr–10% Nb узгоджуються з результатами робіт [27–32, 34, 37, 39–41]. Одержані результати з впливу швидкості деформації на межі плинності та міцності узгоджуються із результатами експериментів та числового моделювання [59–63] для багатьох кристалічних матеріалів, у яких спостерігається зростання механічних властивостей зі збільшенням швидкості прикладеного навантаження.

Одержана динаміка значень меж міцності у разі зростання дози опромінення узгоджується із даними для кристалічних матеріалів, зокрема для цирконієвих стопів, стопів алюмінію, нержавійних сталей тощо (див., наприклад, [2, 7, 41, 90]).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science* (Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag: 2007).
2. *Radiation Effects Design Handbook. Sec. 7: Structural Alloys* (Ed. M. Kangilaski) (Washington, D.C.: NASA Contractor Report: 1971).
3. В. Ф. Зеленский, И. М. Неклюдов, Л. С. Ожигов, *Некоторые проблемы физики радиационных повреждений материалов* (Киев: Наукова думка: 1979).
4. И. М. Неклюдов, Н. В. Камышанченко, *Основы физики прочности и пластичности металлов* (Белгород: Изд-во БелГУ: 2003).
5. В. Н. Воеводин, И. М. Неклюдов, *Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов* (Киев: Наукова думка: 2006).
6. S. J. Zinkle, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 65.
7. M. L. Grossbeck, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 99.
8. M. Nastar and F. Soisson, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 471.
9. G. I. Miller, *Zirconium* (London: Butterworths Scientific Publications: 1957).
10. D. L. Douglass, *Atomic Energy Review, Supplement. The Metallurgy of Zirconium* (Vienna: International Atomic Energy Agency: 1971).
11. А. С. Займовский, А. В. Никулина, Н. Г. Решетников, *Циркониевые сплавы в ядерной энергетике* (Москва: Энергоатомиздат: 1981).
12. F. Onimus and J. L. Bechade, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 4, p. 1.
13. H. Yu, Z. Yao, and M. R. Daymond, *J. Nucl. Mater.*, **493**: 84 (2017).
14. S. Banerjee and P. Mukhopadhyay, *Phase Transformations: Examples from Titanium and Zirconium Alloys* (Oxford: Elsevier Science, Pergamon Material Series: 2007), vol. 12.
15. R. A. Holt, *J. Nucl. Mater.*, **35**: 322 (1970).
16. Т. П. Черняева, В. М. Грицина, Е. А. Михайлов, Р. Л. Василенко, Е. А. Слабоспицкая, *ВАНТ*, **2**: 95 (2011).
17. V. Perovic, G. C. Weatherly, and R. G. Fleck, *Can. Metall. Q.*, **24**: 253 (1985).
18. D. Srivastava, P. Mukhopadhyaya, S. Banerjee, and S. Ranganathan, *Mater. Sci. Eng., A*, **288**: 101 (2000).
19. N. Saibaba, S. K. Jha, S. Tonpe, K. Vaibhaw, V. Deshmukh, S. V. Ramana Rao, K. V. Mani Krishna, S. Neogy, D. Srivastava, G. K. Dey, R. V. Kulkarni, B. B. Rath, E. Ramadasan, and S. A. Anantharaman, *J. ASTM. Int.*, **8**, Iss. 6: JAIOAD (2011).
20. R. Tewari, D. Srivastava, G. K. Dey, J. K. Chakravarty, and S. Banerjee, *J. Nucl. Mater.*, **383**, Nos. 1–2: 153 (2008).
21. K. Nuttall and D. Faulkner, *J. Nucl. Mater.*, **67**: 131 (1977).
22. Y. Etoh and S. Shimada, *J. Nucl. Mater.*, **200**: 59 (1993).
23. M. Griffiths, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 190 (1988).
24. V. N. Shishov, M. M. Perehud, A. V. Nikulina, G. P. Kobylansky, A. E. Novoselov, Z. E. Ostrovsky, A. V. Obukhov, and Y. V. Pimenov, *J. ASTM Int.*, **2**, Iss. 8: JAI12431 (2005).

25. S. Doriot, D. Gilbon, J. L. Bechade, M. Mathon, L. Legras, and J. P. Mardon, *J. ASTM Int.*, **2**, Iss. 7: JAI2332 (2005).
26. C. D. Cann, C. B. So, R. C. Styles, and C. E. Coleman, *J. Nucl. Mater.*, **205**: 267 (1993).
27. C. Song, *CNL Nuclear Review*, **5**(1): 17 (2016).
28. Z. L. Pan, S. Lawrence, P. H. Davies, M. Griffiths, and S. Sagat, *Zirconium in the Nuclear Industry: 14th Int. Symp.* (Eds. P. Rudling and B. Kammenzind) (West Conshohocken, PA: ASTM International: 2005), p. 759.
29. S. Sagat, C. E. Coleman, M. Griffiths, and B. J. S. Wilkins, *Zirconium in the Nuclear Industry: 10th Int. Symp.* (Eds. A. M. Garde and E. R. Bradley) (Philadelphia, PA, USA: ASTM STP: 1994), p. 35.
30. C. Coleman, M. Griffiths, V. Grigoriev, V. Kiseliyov, B. Rodchenkov, and V. Markelov, *J. ASTM Int.*, **4**, No. 10: JAI101111 (2007).
31. D. D. Himbeault, C. K. Chow, and M. P. Puls, *Metal. Mater. Trans. A*, **25**: 135 (1994).
32. M. Griffiths, P. H. Davies, W. G. Davies, and S. Sagat, *Zirconium in the Nuclear Industry: 13th Int. Symp.* (Eds. G. D. Moan and P. Rudling) (Conshohocken, PA, USA: ASTM STP: 2002), p. 507.
33. C. R. Cupp, *J. Nucl. Mater.*, **6**, No. 3: 241 (1962).
34. A. Sawatzky, *The Effect of Neutron Irradiation on the Mechanical Properties of Hydrided Zirconium Alloys* (Ontario: AECL: 1964).
35. B. A. Cheadle, *The Physical Metallurgy of Zirconium Alloys* (Ontario: CRNL: 1975).
36. F. Long, L. Balogh, D. W. Brown, P. Mosbrucker, T. Skippon, C. D. Judge, and M. R. Daymond, *Acta Mater.*, **102**: 352 (2016).
37. Q. Wang, F. Long, Z. Wang, N. Guo, and M. R. Daymond, *J. Nucl. Mater.*, **512**: 371 (2018).
38. Q. Dong, H. Qin, Z. Yao, and M. R. Daymond, *Materials and Design*, **161**: 147 (2019).
39. Г. П. Кобылянский, А. Е. Новоселов, *Радиационная стойкость циркония и сплавов на его основе: Справочные материалы по реакторному материаловедению* (Ред. В. А. Цыканов) (Дмитровград: Гос. научный центр Российской Федерации «Научно-исследовательский институт атомных реакторов»: 1996).
40. P. V. Fedotov, L. P. Loshmanov, and A. V. Kostyukhina, *Russ. Metall.*, **2014**: 762 (2014).
41. H. L. Yang, S. Kano, Y. Matsukawa, J. J. Shen, Z. S. Zhao, Z. G. Duan, D. Y. Chen, K. Murakami, Y. F. Li, Y. Satoh, and H. Abe, *J. Nucl. Mater.*, **495**: 138 (2017).
42. J. W. Cahn, *Acta Metall.*, **9**: 795 (1961).
43. J. W. Cahn, *Acta Metall.*, **11**: 1275 (1963).
44. J. W. Cahn and J. E. Hilliard, *J. Chem. Phys.*, **28**: 258 (1958).
45. J. Liu and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **66**: 020303 (2002).
46. G. Demange, L. Luneville, V. Pontikis, and D. Simeone, *J. Appl. Phys.*, **121**: 125108 (2017).
47. R. A. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. Lett.*, **84**: 2885 (2000).
48. D. O. Kharchenko and V. O. Kharchenko, *Radiat. Eff. Defects Solids*, **171**, Nos. 11–12: 819 (2016).
49. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, O. M. Shchokotova, X. Wu, B. Wen,

- L. Wu, and W. Zhang, *Radiat. Eff. Defects Solids.*, **173**: 527 (2018).
50. H.-C. Yu and W. Lu, *Acta Mater.*, **53**: 1799 (2005).
51. Y. Li, S. Hu, X. Sun, and M. Stan, *npj Comput. Mater.*, **3**: 16 (2017).
52. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, and A. I. Bashtova, *Eur. Phys. J. B*, **89**: 123 (2016).
53. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, Y. M. Ovcharenko, O. B. Lysenko, I. A. Shuda, L. Wu, and R. Pan, *Condens. Matter. Phys.*, **21**: 13002 (2018).
54. Akira Onuki, *Phase Transition Dynamics* (Cambridge : Cambridge University Press: 2002).
55. A. Minami and A. Onuki, *Phys. Rev. B*, **70**: 184114 (2004).
56. A. Onuki, A. Furukawa, and A. Minami, *Pramana J. Phys.*, **64**, No. 5: 661 (2005).
57. Д. О. Харченко, О. М. Щёкотова, И. О. Лысенко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **35**, № 12: 1697 (2013).
58. D. O. Kharchenko, O. M. Shchokotova, I. O. Lysenko, and V. O. Kharchenko, *Radiat. Eff. Defects Solids*, **170**: 584 (2015).
59. Ch. Peng, Y. Zhong, Y. Lu, S. Narayanan, T. Zhu, and J. Lou, *Appl. Phys. Lett.*, **102**: 083102 (2013).
60. Z. L. Liu, X. C. You, and Z. Zhuang, *Int. J. Solids Struct.*, **45**: 3674 (2008).
61. A. Lehtinen, L. Laurson, F. Granberg, K. Nordlund, and M. J. Alava, *Sci. Rep.*, **8**: 6914 (2018).
62. Z. Chen , Y. Gan, and L. M. Shen, *Multiscale in Molecular and Continuum Mechanics: Interaction of Time and Size from Macro to Nano* (Ed. G. C. Sih) (Springer: 2007), p. 67.
63. Y. Guo, Z. Zhuang, X.Y. Li, and Z. Chen, *Int. J. Solids Struct.*, **44**: 1180 (2007).
64. D. O. Kharchenko, O. M. Shchokotova, V. O. Kharchenko, V. V. Kupriienko, S. V. Kokhan, X. Wu, and L. Wu, *Radiat. Eff. Defects Solids*, **175**: 602 (2020).
65. I. Loginova, J. Odqvist, G. Amberg, and J. Agren, *Acta Mater.*, **51**: 1327 (2003).
66. G. Choudhuri, S. Chakraborty, D. Srivastava, and G. K. Dey, *Results in Physics*, **3**: 7 (2013).
67. N. Saunders and A. P. Miodownik, *CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide* (Ed. R. W. Cahn) (Oxford: Pergamon Press: 1998), vol. 1.
68. A. T. Dinsdale, *Calphad*, **15**, No. 4: 317 (1991).
69. S. I. Golubov, A. V. Barashev, and R. E. Stoller, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 357.
70. <https://www.sgte.net/en/free-pure-substance-database>
71. M. J. Norgett, M. T. Robinson, and I. M. Torrens, *Nucl. Eng. Des.*, **33**: 50 (1975).
72. A. S. Bakaj and A. A. Turkin, *J. Nucl. Mater.*, **152**, Iss. 2–3: 331 (1988).
73. A. A. Turkin, A. V. Buts, and A. S. Bakai, *J. Nucl. Mater.*, **305**: 134 (2002).
74. H. Wiedersich, P. R. Okamoto, and N. Q. Lam, *J. Nucl. Mater.*, **83**: 98 (1979).
75. C. H. Woo, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 237 (1988).
76. P. Ehrhart and B. Schönfeld, *Point Defects and Defect Interactions in Metals* (Eds. J. I. Takamura, M. Doyama, and M. Kiritani) (Amsterdam: North-Holland Pub.: 1982), p. 47.
77. W. Frank, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 122 (1988).
78. D. J. Bacon, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 176 (1988).
79. Y. N. Osetsky, D. J. Bacon, and N. de Diego, *Metall. Mater. Trans. A*, **33**: 777

- (2002).
80. Ф. Х. Мирзоев, В. Я. Панченко, Л. А. Шелепин, *Успехи физ. наук*, **166**: 3 (1996).
 81. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, A. I. Bashtova, and I. O. Lysenko, *Phys. A*, **463**: 152 (2016).
 82. G. L. Kulchinski and J. L. Brimhall, *American Society for Testing and Materials Report No. ASTM-STP 529* (Philadelphia: ASTM: 1973), p 258.
 83. A. V. Barashev, S. I. Golubov, and R. E. Stoller, *J. Nucl. Mater.*, **461**: 85 (2015).
 84. L. Wu, D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, O. B. Lysenko, V. Kupriienko, S. Kokhan, I. A. Shuda, and R. Pan, *Condens. Matter. Phys.*, **23**: 13604 (2020).
 85. A. A. Semenov and C. H. Woo, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **34**: 3500 (2001).
 86. A. Onuki, *Phys. Rev. E*, **68**: 061502 (2003).
 87. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (New York: Pergamon: 1973).
 88. W. G. Wolfer, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 1.
 89. A. Patra, C. N. Tom, and S. I. Golubov, *Philos. Mag.*, **97**: 2018 (2017).
 90. F. Garzarolli, R. Adamson, and K. Coleman, *Microstructure of Zirconium Alloys and Effects on Performance* (Molnlycke: A.N.T. International: 2015).

REFERENCES

1. G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science* (Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag: 2007).
2. *Radiation Effects Design Handbook. Sec. 7: Structural Alloys* (Ed. M. Kangilaski) (Washington, D.C.: NASA Contractor Report: 1971).
3. V. F. Zelenskij, I. M. Neklyudov, and L. S. Ozhigov, *Nekotorye Problemy Fiziki Radiatsionnykh Povrezhdeniy Materialov* [Some Problems of the Physics of Radiation Damage of Materials] (Kyiv: Naukova Dumka: 1979) (in Russian).
4. Y. M. Neklyudov and N. V. Kamyshanchenko, *Osnovy Fiziki Prochnosti i Plastichnosti Metallov* [Fundamentals of Physics of Strength and Plasticity of Metals] (Belgorod: BelGU: 2003) (in Russian).
5. V. N. Voevodin and I. M. Neklyudov, *Evolutsiya Strukturno-Fazovogo Sostoyaniya i Radiatsionnaya Stoykost Konstruktsionnykh Materialov* [Structural-Phase State Evolution and Radiation Resistance of Structural Materials] (Kyiv: Naukova Dumka: 2006) (in Russian).
6. S. J. Zinkle, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 65.
7. M. L. Grossbeck, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 99.
8. M. Nastar and F. Soisson, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 471.
9. G. I. Miller, *Zirconium* (London: Butterworths Scientific Publications: 1957).
10. D. L. Douglass, *Atomic Energy Review, Supplement. The Metallurgy of Zirconium* (Vienna: International Atomic Energy Agency: 1971).
11. A. S. Zajmovskij, A. V. Nikulina, and N. G. Reshetnikov, *Tsirkonievye Splavy v Yadernoy Energetike* [Zirconium Alloys in Nuclear Power] (Moscow: Energoatomizdat: 1981) (in Russian).

12. F. Onimus and J. L. Bechade, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 4, p. 1.
13. H. Yu, Z. Yao, and M. R. Daymond, *J. Nucl. Mater.*, **493**: 84 (2017).
14. S. Banerjee and P. Mukhopadhyay, *Phase Transformations: Examples from Titanium and Zirconium Alloys* (Oxford: Elsevier Science, Pergamon Material Series: 2007), vol. 12.
15. R. A. Holt, *J. Nucl. Mater.*, **35**: 322 (1970).
16. T. P. Chernyaeva, V. M. Grytsyna, E. A. Mykhaylov, R. L. Vasilenko, and E. A. Slabospickaya, *VANT*, **2**: 95 (2011).
17. V. Perovic, G. C. Weatherly, and R. G. Fleck, *Can. Metall. Q.*, **24**: 253 (1985).
18. D. Srivastava, P. Mukhopadhyaya, S. Banerjee, and S. Ranganathan, *Mater. Sci. Eng., A*, **288**: 101 (2000).
19. N. Saibaba, S. K. Jha, S. Tonpe, K. Vaibhaw, V. Deshmukh, S. V. Ramana Rao, K. V. Mani Krishna, S. Neogy, D. Srivastava, G. K. Dey, R. V. Kulkarni, B. B. Rath, E. Ramadasan, and S. A. Anantharaman, *J. ASTM Int.*, **8**, Iss. 6: JA10AD (2011).
20. R. Tewari, D. Srivastava, G. K. Dey, J. K. Chakravarty, and S. Banerjee, *J. Nucl. Mater.*, **383**, Nos. 1–2: 153 (2008).
21. K. Nuttall and D. Faulkner, *J. Nucl. Mater.*, **67**: 131 (1977).
22. Y. Etoh and S. Shimada, *J. Nucl. Mater.*, **200**: 59 (1993).
23. M. Griffiths, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 190 (1988).
24. V. N. Shishov, M. M. Perehud, A. V. Nikulina, G. P. Kobylansky, A. E. Novoselov, Z. E. Ostrovsky, A. V. Obukhov, and Y. V. Pimenov, *J. ASTM Int.*, **2**, Iss. 8: JA112431 (2005).
25. S. Doriot, D. Gilbon, J. L. Bechade, M. Mathon, L. Legras, and J. P. Mardon, *J. ASTM Int.*, **2**, Iss. 7: JA12332 (2005).
26. C. D. Cann, C. B. So, R. C. Styles, and C. E. Coleman, *J. Nucl. Mater.*, **205**: 267 (1993).
27. C. Song, *CNL Nuclear Review*, **5**(1): 17 (2016).
28. Z. L. Pan, S. St. Lawrence, P. Davies, M. Griffiths, and S. Sagat, *Zirconium in the Nuclear Industry: 14th Int. Symp.* (Eds. P. Rudling and B. Kammenzind) (West Conshohocken, PA: ASTM Int.: 2005), p. 759.
29. S. Sagat, C. E. Coleman, M. Griffiths, and B. J. S. Wilkins, *Zirconium in the Nuclear Industry: 10th Int. Symp.* (Eds. A. M. Garde and E. R. Bradley) (Philadelphia, PA, USA: ASTM STP: 1994), p. 35.
30. C. Coleman, M. Griffiths, V. Grigoriev, V. Kiseliyov, B. Rodchenkov, and V. Markelov, *J. ASTM Int.*, **4**, No. 10: JA1101111 (2007).
31. D. D. Himbeault, C. K. Chow, and M. P. Puls, *Metal. Mater. Trans. A*, **25**: 135 (1994).
32. M. Griffiths, P. H. Davies, W. G. Davies, and S. Sagat, *Zirconium in the Nuclear Industry: 13th Int. Symp.* (Eds. G. Moan and P. Rudling) (West Conshohocken, PA, USA: ASTM Int.: 2002), p. 507.
33. C. R. Cupp, *J. Nucl. Mater.*, **6**, No. 3: 241 (1962).
34. A. Sawatzky, *The Effect of Neutron Irradiation on the Mechanical Properties of Hydrided Zirconium Alloys* (Ontario: AECL: 1964).
35. B. A. Cheadle, *The Physical Metallurgy of Zirconium Alloys* (Ontario: CRNL: 1975).
36. F. Long, L. Balogh, D. W. Brown, P. Mosbrucker, T. Skippon, C. D. Judge, and M. R. Daymond, *Acta Mater.*, **102**: 352 (2016).

37. Q. Wang, F. Long, Z. Wang, N. Guo, and M. R. Daymond, *J. Nucl. Mater.*, **512**: 371 (2018).
38. Q. Dong, H. Qin, Z. Yao, and M. R. Daymond, *Materials and Design*, **161**: 147 (2019).
39. G. P. Kobylanskii and A. E. Novoselov, *Radiatsionnaya Stoykost Tsirkoniya i Splavov na Ego Osnove* [Radiation Resistance of Zirconium and Its Alloys]: *Handbook on Reactor Materials Science* (Ed. V. A. Tsykanov) (Dimitrovgrad: Russian State Scientific Center Research Inst. Atomic Reactors: 1996) (in Russian).
40. P. V. Fedotov, L. P. Loshmanov, and A. V. Kostyukhina, *Russ. Metall.*, **2014**: 762 (2014).
41. H. L. Yang, S. Kano, Y. Matsukawa, J. J. Shen, Z. S. Zhao, Z. G. Duan, D. Y. Chen, K. Murakami, Y. F. Li, Y. Satoh, and H. Abe, *J. Nucl. Mater.*, **495**: 138 (2017).
42. J. W. Cahn, *Acta Metall.*, **9**: 795 (1961).
43. J. W. Cahn, *Acta Metall.*, **11**: 1275 (1963).
44. J. W. Cahn and J. E. Hilliard, *J. Chem. Phys.*, **28**: 258 (1958).
45. J. Liu and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **66**: 020303 (2002).
46. G. Demange, L. Luneville, V. Pontikis, and D. Simeone, *J. Appl. Phys.*, **121**: 125108 (2017).
47. R. A. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. Lett.*, **84**: 2885 (2000).
48. D. O. Kharchenko and V. O. Kharchenko, *Radiat. Eff. Defects Solids*, **171**, Nos. 11–12: 819 (2016).
49. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, O. M. Shchokotova, X. Wu, B. Wen, L. Wu, and W. Zhang, *Radiat. Eff. Defects Solids.*, **173**: 527 (2018).
50. H.-C. Yu and W. Lu, *Acta Mater.*, **53**: 1799 (2005).
51. Y. Li, S. Hu, X. Sun, and M. Stan, *npj Comput. Mater.*, **3**: 16 (2017).
52. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, and A. I. Bashtova, *Eur. Phys. J. B*, **89**: 123 (2016).
53. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, Y. M. Ovcharenko, O. B. Lysenko, I. A. Shuda, L. Wu, and R. Pan, *Condens. Matter. Phys.*, **21**: 13002 (2018).
54. Akira Onuki, *Phase Transition Dynamics* (Cambridge : Cambridge University Press: 2002).
55. A. Minami and A. Onuki, *Phys. Rev. B*, **70**: 184114 (2004).
56. A. Onuki, A. Furukawa, and A. Minami, *Pramana J. Phys.*, **64**, No. 5: 661 (2005).
57. D. O. Kharchenko, O. M. Shchokotova, and I. O. Lysenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 12: 1697 (2013) (in Russian).
58. D. O. Kharchenko, O. M. Shchokotova, I. O. Lysenko, and V. O. Kharchenko, *Radiat. Eff. Defects Solids*, **170**: 584 (2015).
59. Ch. Peng, Y. Zhong, Y. Lu, S. Narayanan, T. Zhu, and J. Lou, *Appl. Phys. Lett.*, **102**: 083102 (2013).
60. Z. L. Liu, X. C. You, and Z. Zhuang, *Int. J. Solids Struct.*, **45**: 3674 (2008).
61. A. Lehtinen, L. Laurson, F. Granberg, K. Nordlund, and M. J. Alava, *Sci. Rep.*, **8**: 6914 (2018).
62. Z. Chen, Y. Gan, and L. M. Shen, *Multiscale Modeling in Molecular and Continuum Mechanics: Interaction of Time and Size from Macro to Nano* (Ed. G. C. Sih) (Springer, 2007), p. 67.
63. Y. Guo, Z. Zhuang, X.Y. Li, and Z. Chen, *Int. J. Solids Struct.*, **44**: 1180 (2007).

64. D. O. Kharchenko, O. M. Shchokotova, V. O. Kharchenko, V. V. Kupriienko, S. V. Kokhan, X. Wu, and L. Wu, *Radiat. Eff. Defects Solids*, **175**: 602 (2020).
65. I. Loginova, J. Odqvist, G. Amberg, and J. Agren, *Acta Mater.*, **51**: 1327 (2003).
66. G. Choudhuri, S. Chakraborty, D. Srivastava, and G. K. Dey, *Results in Physics*, **3**: 7 (2013).
67. N. Saunders and A. P. Miodownik, *CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide* (Ed. R. W. Cahn) (Oxford: Pergamon Press: 1998), vol. 1.
68. A. T. Dinsdale, *Calphad*, **15**, No. 4: 317 (1991).
69. S. I. Golubov, A. V. Barashev, and R. E. Stoller, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 357.
70. <https://www.sgte.net/en/free-pure-substance-database>
71. M. J. Norgett, M. T. Robinson, and I. M. Torrens, *Nucl. Eng. Des.*, **33**: 50 (1975).
72. A. S. Bakaj and A. A. Turkin, *J. Nucl. Mater.*, **152**, Iss. 2–3: 331 (1988).
73. A. A. Turkin, A. V. Buts, and A. S. Bakai, *J. Nucl. Mater.*, **305**: 134 (2002).
74. H. Wiedersich, P. R. Okamoto, and N. Q. Lam, *J. Nucl. Mater.*, **83**: 98 (1979).
75. C. H. Woo, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 237 (1988).
76. P. Ehrhart and B. Schönfeld, *Point Defects and Defect Interactions in Metals* (Eds. J. I. Takamura, M. Doyama, and M. Kiritani) (Amsterdam: North-Holland Pub.: 1982), p. 47.
77. W. Frank, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 122 (1988).
78. D. J. Bacon, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 176 (1988).
79. Y. N. Osetsky, D. J. Bacon, and N. de Diego, *Metall. Mater. Trans. A*, **33**: 777 (2002).
80. F. Kh. Mirzoev, V. Ya. Panchenko, and L. A. Shelepin, *Phys. Usp.*, **39**: 1 (1996).
81. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, A. I. Bashtova, and I. O. Lysenko, *Phys. A*, **463**: 152 (2016).
82. G. L. Kulchinski and J. L. Brimhall, *American Society for Testing and Materials Report No. ASTM-STP 529* (Philadelphia: ASTM: 1973), p. 258.
83. A. V. Barashev, S. I. Golubov, and R. E. Stoller, *J. Nucl. Mater.*, **461**: 85 (2015).
84. L. Wu, D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, O. B. Lysenko, V. Kupriienko, S. Kokhan, I. A. Shuda, and R. Pan, *Condens. Matter. Phys.*, **23**: 13604 (2020).
85. A. A. Semenov and C. H. Woo, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **34**: 3500 (2001).
86. A. Onuki, *Phys. Rev. E*, **68**: 061502 (2003).
87. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (New York: Pergamon: 1973).
88. W. G. Wolfer, *Comprehensive Nuclear Materials* (Ed. R. F. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. 1, p. 1.
89. A. Patra, C. N. Tom, and S. I. Golubov, *Philos. Mag.*, **97**: 2018 (2017).
90. F. Garzarolli, R. Adamson, and K. Coleman, *Microstructure of Zirconium Alloys and Effects on Performance* (Molnlycke: A.N.T. International: 2015).