

CRYSTAL-LATTICE DEFECTS

PACS numbers: 07.05.Tr, 61.72.J-, 61.80.Az, 61.80.Hg, 61.82.Bg, 66.30.-h

Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в стопі Fe–9 ат.% Cr з урахуванням дислокаційної підсистеми стопу

Р. В. Скороход, О. В. Коропов

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

Для стопу Fe–9 ат.% Cr в рамках моделю, який базується на першому і другому законах Фіка з урахуванням оберненого ефекту Кіркендала, проведено моделювання радіаційно-індукованої сегрегації та систематизацію і розрахунки визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації. До таких характеристик ми відносимо наступні: концентраційні профілі атомів Cr і точкових дефектів, поверхневу концентрацію атомів Cr, величину поверхневого збагачення (збіднення) атомів Cr, повну ширину концентраційного профілю атомів Cr на рівні половини максимального збагачення (збіднення), сегрегаційну площу Cr та дискримінант радіаційно-індукованої сегрегації атомів Cr в стаціонарному режимі. Досліджено вплив дислокаційної підсистеми стопу Fe–9 ат.% Cr на зазначені характеристики радіаційно-індукованої сегрегації і показано, що дислокаційна підсистема пригнічує ефекти радіаційно-індукованої сегрегації за рахунок поглинання нерівноважних точкових дефектів. Розраховані концентраційні профілі атомів Cr та точкових дефектів при обраних значеннях густин дислокацій в дислокаційній підсистемі стопу (0 , 10^{12} м^{-2} , 10^{14} м^{-2} , 10^{16} м^{-2}). Для даних значень густин дислокацій досліджена залежність поверхневого збагачення атомів Cr від дози опромінення при її збільшенні від 10^{-4} зна до 10^2 зна і проаналізовані залежності визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації від температури при її зміні від 250°C до 650°C .

Corresponding author: Roman Volodymyrovych Skorokhod
E-mail: r.skorokhodqq@gmail.com

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

Citation: R. V. Skorokhod and O. V. Koropov, Modelling of Radiation-Induced Segregation in Fe–9 at.% Cr Alloy with the Alloy Dislocation Subsystem Considered, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 691–711 (2022) (in Ukrainian). DOI: [10.15407/mfint.44.06.0691](https://doi.org/10.15407/mfint.44.06.0691)

Ключові слова: радіаційно-індукована сегрегація, концентровані металеві стопи, дислокаційна підсистема стопу, точкові дефекти, концентраційні профілі, поверхнєве збагачення, комп'ютерне моделювання.

For the Fe–9 at.% Cr alloy, radiation-induced segregation is simulated in the model based on the first and second Fick's laws with inverse Kirkendall effect considered. The governing quantitative characteristics of radiation-induced segregation are systematized and calculated. Such characteristics include the following: concentration profiles of Cr atoms and point defects, surface concentration of Cr atoms, the value of surface enrichment (depletion) of Cr atoms, the full width of the concentration profile of Cr atoms at half maximum enrichment (depletion), segregation area of Cr and discriminant of radiation-induced segregation of Cr atoms in a steady state. The effect of the Fe–9 at.% Cr alloy dislocation subsystem on the specified characteristics of radiation-induced segregation is studied due to the absorption of nonequilibrium point defects. The dislocation subsystem is shown to suppress the effects of radiation-induced segregation. The concentration profiles of Cr atoms and point defects at the selected values of dislocation densities in the alloy dislocation subsystem (0 , 10^{12} m^{-2} , 10^{14} m^{-2} , 10^{16} m^{-2}) are calculated. For the values of dislocation densities, the dependence of the surface enrichment of Cr atoms on the irradiation dose increased from 10^{-4} dpa to 10^2 dpa is studied and the dependences of the governing quantitative characteristics of radiation-induced segregation on temperature changed from 250°C to 650°C are analysed.

Key words: radiation-induced segregation, concentrated metal alloys, alloy dislocation subsystem, point defects, concentration profiles, surface enrichment, computer modeling.

(Отримано 8 вересня 2020 р.; остаточн. варіант — 24 грудня 2021 р.)

1. ВСТУП

Дослідження еволюції механічних та фізико-хімічних властивостей конструкційних матеріалів ядерних реакторів в процесі експлуатації є актуальною задачею радіаційного матеріалознавства [1–6]. Для аналізу впливу опромінення на матеріали ядерної енергетики використовують зразки-свідки [7] та симуляційні експерименти з електронами, протонами чи важкими йонами (див., наприклад, [8–12]). В сучасних дослідженнях змін елементного складу та мікроструктури опромінених металевих стопів активно впроваджується комп'ютерне моделювання фізичних процесів, які протікають за умов опромінення (див., наприклад, [1, 2, 13]). Це, насамперед, пов'язано з постійним ростом потужності комп'ютерів і розрахункових кластерів, відносно дешевизною комп'ютерного моделювання та достатньо високою точністю розрахунків.

Дану роботу присвячено моделюванню явища радіаційно-індукованої сегрегації (РІС), яке полягає в просторовому перерозподілі атомів різного сорту металевго стопу під дією опромінення. В результаті такого перерозподілу спостерігається збіднення або збагачення зразка стопу по головним, домішковим чи легуючим компонентам поблизу стоків точкових дефектів (ТД), таких як поверхні зразка, пори, дислокаційні петлі, міжзеренні межі та інші [1, 14]. Наслідками РІС, зокрема, можуть бути погіршення механічної міцності та корозійної стійкості матеріялу, прискорення утворення, взагалі кажучи, багатокомпонентних виділень нової фази, тощо [1]. Виділення нової фази, як відомо, гальмують рух дислокацій, які є носіями пластичної деформації [15, 16], а насамперед пластичний металевий стоп стає більш твердим і навіть може окрихчуватись шляхом утворення і розростання тріщин [17]. Різні питання, пов'язані з РІС, досліджувались в роботах [18–21] (див. також докторську дисертацію А. А. Туркіна [22]).

Метою даної роботи є систематизація та розрахунки визначальних кількісних характеристик РІС в стопі Fe–9 ат. % Cr з урахуванням дислокаційної підсистеми матеріялу при різних значеннях густин дислокацій. Відмітимо, що дислокації в металах відіграють роль ефективних стоків ТД [23], та, завдяки цьому, за умов опромінення впливають на формування концентраційних профілів як ТД, так і компонентів стопу.

2. БАЗОВИЙ МОДЕЛЬ

Для моделювання РІС в двокомпонентному стопі Fe–9 ат. % Cr будемо використовувати модель, який базується на першому та другому законах Фіка з урахуванням оберненого ефекту Кіркендалла (inverse Kirkendall model) [1, 14, 24–26]. Вважаємо, що зразок стопу являє собою шар з постійною товщиною l , який займає область $0 \leq x \leq l$, а поверхні зразка ($x = 0$, $x = l$) є ідеальними стоками ТД. На відміну від попередніх робіт [27–30] введемо до розгляду дислокаційну підсистему в стопі, яка є розосередженим стоком ТД і описується густиною дислокацій ρ_D . Також врахуємо, що концентрації ТД — вакансій (v) і міжвузельних атомів (i) $C_{v(i)}(x, t)$ на декілька порядків менше концентрацій атомів Fe $C_{Fe}(x, t)$ та атомів Cr $C_{Cr}(x, t)$, тобто з достатньо великою точністю можна вважати, що

$$C_{Cr} + C_{Fe} = 1. \quad (1)$$

Просторово-часова еволюція концентрацій атомів Cr $C_{Cr}(x, t)$, вакансій $C_v(x, t)$ та міжвузельних атомів $C_i(x, t)$ задається системою трьох пов'язаних між собою нелінійних диференціальних рівнянь у частинних похідних [1, 24]:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{Cr}}{\partial t} = -\nabla \mathbf{J}_{Cr}, \\ \frac{\partial C_v}{\partial t} = -\nabla \mathbf{J}_v + K_0 - R_{iv} C_v C_i - k_v^2 D_v (C_v - C_v^{eq}), \\ \frac{\partial C_i}{\partial t} = -\nabla \mathbf{J}_i + K_0 - R_{iv} C_v C_i - k_i^2 D_i (C_i - C_i^{eq}), \end{cases} \quad (2)$$

де $\mathbf{J}_{Cr}$ та $\mathbf{J}_p$ (тут і далі нижній індекс $p = v, i$) — потоки атомів Cr ($\mathbf{J}_{Cr}$) і ТД сорту p ($\mathbf{J}_p$), K_0 — швидкість продукування радіаційних (нерівноважних) ТД (пар Френкеля), R_{iv} — коефіцієнт рекомбінації вакансій та міжвузельних атомів, k_p — потужність стоків ТД сорту p [1], C_v^{eq} і C_i^{eq} — термодинамічно рівноважні концентрації вакансій та міжвузельних атомів. Для коефіцієнта рекомбінації ТД має місце формула [31]

$$R_{iv} = \frac{4\pi r_{iv}}{\Omega} [(d_{Cr,v} + d_{Cr,i})C_{Cr} + (d_{Fe,v} + d_{Fe,i})(1 - C_{Cr})]. \quad (3)$$

Тут r_{iv} — радіус рекомбінації ТД, Ω — середній атомний об'єм в стопі, $d_{j,p}$ (нижній індекс $j = Cr, Fe$) — кінетичні коефіцієнти (diffusivity coefficients) [1], які пов'язані з парціальними коефіцієнтами дифузії атомів ($D_{Cr(Fe)} = d_{Cr(Fe),v}C_v + d_{Cr(Fe),i}C_i$), та ТД ($D_{v(i)} = d_{Cr,v(i)}C_{Cr} + d_{Fe,v(i)}C_{Fe}$). Оскільки стоп Fe-9 ат. % Cr має ОЦК-ґратницю, то середній атомний об'єм дорівнює $\Omega = a^3/2$, де a — параметр ґратниці. Кінетичні коефіцієнти $d_{j,p}$ визначаються як [1]:

$$d_{j,p} = d_{j,p}^0 \exp\left(\frac{-E_{j,p}^m}{k_b T}\right), \quad (4)$$

де $d_{j,p}^0$ — передекспоненційний фактор, $E_{j,p}^m$ — енергія міграції ТД за допомогою атомів сорту j , k_b — стала Больцмана, T — температура. Потужність стоків ТД має вигляд [1, 32]

$$k_p^2 = 4\pi r_{pD} \frac{\rho_D}{\Delta}, \quad (5)$$

де r_{pD} — радіус захвату дислокацією ТД сорту p , Δ — відстань між кристалографічними площинами ($\Delta = a$). Для термодинамічно рівноважних концентрацій ТД C_v^{eq} та C_i^{eq} справедливі наступні формули [1]

$$C_v^{eq} = \exp\left(\frac{S_v^f}{k_b}\right) \exp\left(-\frac{E_{Fe,v}^f}{k_b T}\right), \quad (6)$$

$$C_i^{\text{eq}} = \exp\left(-\frac{E_{\text{Fe},i}^f}{k_b T}\right), \quad (7)$$

де S_v^f — ентропія формування вакансій, $E_{\text{Fe},v}^f$ — енергія формування вакансій Fe, $E_{\text{Fe},i}^f$ — енергія формування міжвузельних атомів Fe.

Потоки атомів Cr (J_{Cr}) та ТД ($J_{v(i)}$) задаються виразами [1]:

$$J_{\text{Cr}} = -\alpha D_{\text{Cr}} \nabla C_{\text{Cr}} + (d_{\text{Cr},v} \nabla C_v - d_{\text{Cr},i} \nabla C_i) C_{\text{Cr}}, \quad (8)$$

$$J_v = \alpha C_v (d_{\text{Cr},v} - d_{\text{Fe},v}) \nabla C_{\text{Cr}} - D_v \nabla C_v, \quad (9)$$

$$J_i = -\alpha C_i (d_{\text{Cr},i} - d_{\text{Fe},i}) \nabla C_{\text{Cr}} - D_i \nabla C_i, \quad (10)$$

де α — термодинамічний фактор [1, 24].

Як і в попередній роботі [27], будемо вважати, що в початковий момент часу ($t = 0$) атоми Cr та Fe розподілені однорідно в об'ємі зразка, тобто

$$C_{\text{Cr}}(x, t)|_{t=0} = 0,09, C_{\text{Fe}}(x, t)|_{t=0} = 0,91, \quad (11)$$

а концентрації ТД $C_{v(i)}(x, t)$ дорівнюють відповідним термодинамічно рівноважним значенням $C_{v(i)}^{\text{eq}}$

$$C_v(x, t)|_{t=0} = C_v^{\text{eq}}, C_i(x, t)|_{t=0} = C_i^{\text{eq}}. \quad (12)$$

Оскільки поверхню зразка вважаємо ідеальним стоком ТД, концентрації ТД $C_{v(i)}(x, t)$ на поверхні ($x = 0$) приймаємо наступними:

$$C_v(x, t)|_{x=0} = C_v^{\text{eq}}, C_i(x, t)|_{x=0} = C_i^{\text{eq}}. \quad (13)$$

В площині симетрії зразка стопу ($x = l/2$) градієнти концентрацій атомів Cr $C_{\text{Cr}}(x, t)$ і ТД $C_{v(i)}(x, t)$ природно прийняти рівними нулю

$$\left. \frac{\partial C_{\text{Cr}}(x, t)}{\partial x} \right|_{x=l/2} = \left. \frac{\partial C_v(x, t)}{\partial x} \right|_{x=l/2} = \left. \frac{\partial C_i(x, t)}{\partial x} \right|_{x=l/2} = 0. \quad (14)$$

Додатково для концентрації атомів Cr $C_{\text{Cr}}(x, t)$ має виконуватися закон збереження речовини

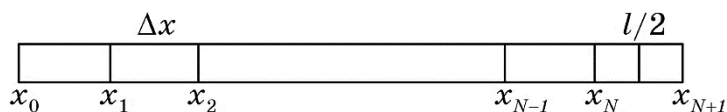


Рис. 1. Схематичне зображення різницевої схеми.

Fig. 1. Schematic representation of the difference scheme.

ТАБЛИЦЯ 1. Вхідні параметри.

TABLE 1. Input parameters.

Параметр	Символ	Значення	Посилання
Параметр ґратниці	a	$2,86 \cdot 10^{-10}$ м	[37]
Радіус рекомбінації ТД	r_{iv}	$3,3a$	[38]
Радіус захвату міжвузельних атомів дислокацією	r_{iD}	10^{-9} м	[39]
Радіус захвату вакансій дислокацією	r_{vD}	10^{-9} м	[40]
Енергія формування міжвузельних атомів Fe	$E_{Fe,i}^f$	5,0 eV	[41]
Енергія формування вакансій Fe	$E_{Fe,v}^f$	1,6 eV	[42]
Енергія міграції міжвузельних атомів Fe	$E_{Fe,i}^m$	0,35 eV	[26]
Енергія міграції вакансій Fe	$E_{Fe,v}^m$	0,625 eV	[26]
Передекспоненційний фактор дифузії міжвузельних атомів в Fe	$d_{Fe,i}^0$	$6,59 \cdot 10^{-7}$ м ² /с	[37]
Передекспоненційний фактор дифузії вакансій Fe	$d_{Fe,v}^0$	$5,92 \cdot 10^{-6}$ м ² /с	[37]
Енергія міграції міжвузельних атомів Cr	$E_{Cr,i}^m$	0,28 eV	[26]
Енергія міграції вакансій Cr	$E_{Cr,v}^m$	0,55 eV	[26]
Передекспоненційний фактор дифузії міжвузельних атомів Cr	$d_{Cr,i}^0$	$6,85 \cdot 10^{-7}$ м ² /с	[37]
Передекспоненційний фактор дифузії вакансій Cr	$d_{Cr,v}^0$	$5,46 \cdot 10^{-6}$ м ² /с	[37]
Ентропія формування вакансій	S_v^f	$1,0k_b$	[42]
Термодинамічний фактор	α	1	[42]

$$\int_0^{l/2} C_{Cr}(x, t) dx = \frac{l}{2} C_{Cr}(x, t)|_{t=0}, \quad (15)$$

який відіграє роль ще однієї граничної умови.

Система диференціальних рівнянь (2) з початковими та граничними умовами (11)–(15) розв'язувалася чисельно. Вхідні параметри до цієї системи представлені в табл. 1. Математичний алгоритм, який використовувався при розв'язанні системи (2), обговорювався в роботі [27]. Всі розрахунки проведені для зразків стопу Fe–9 ат. % Cr товщиною $l = 300$ нм з кроком різницевої схеми $\Delta x = l/(2N + 1) \approx 0,2498$ нм по просторовій координаті x , де

$N = 600$ (рис. 1). Після визначення концентрації атомів Cr $C_{Cr}(x, t)$ концентрація атомів Fe $C_{Fe}(x, t)$ знаходилась з рівності (1).

Значення температури T , набраної дози опромінення D , швидкості продукування радіаційних ТД K_0 та густини дислокацій ρ_D , за замовченням, обрані наступними: $T = 300^\circ\text{C}$, $D = 1$ зна (зміщення на атом), $K_0 = 10^{-5}$ зна/с, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$. Відмітимо, що за умов достатньо тривалого опромінення густина дислокацій зазвичай виходить на стаціонарне значення (див. наприклад роботи [1, 33–36]); для стопів Fe–Cr зазвичай спостерігаються значення $\rho_D \approx 10^{14} \text{ м}^{-2}$ [33–36]. Тоді можна думати, що густина дислокацій $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, прийнята в

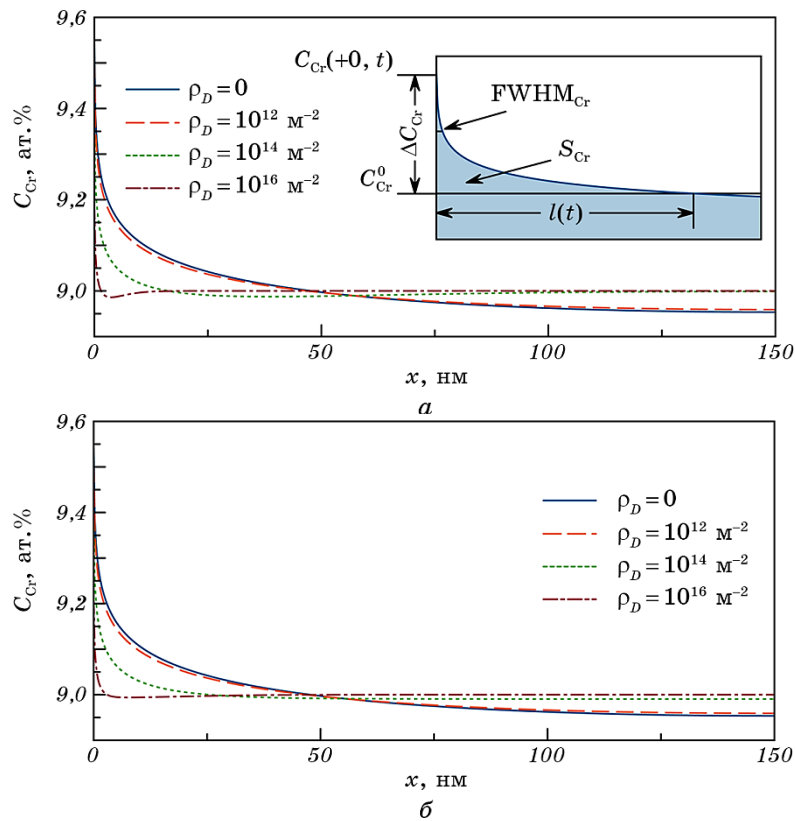


Рис. 2. Залежності концентрації атомів Cr від координати при дозах опромінення 1 зна (а) і 12 зна (б) та різних значеннях густин дислокацій. На вставці до рис. 2, а схематично зображені визначальні кількісні характеристики РІС 1, 3–6.

Fig. 2. Concentration of Cr atoms as a function of coordinates at irradiation doses of 1 dpa (a) and 12 dpa (b) and different values of dislocation densities. The insert to Fig. 2, a schematically depicts governing quantitative characteristics of RIS 1, 3–6.

розрахунках, не буде помітно змінюватися під час процесів РІС, а розрахунки з іншими значеннями густин дислокацій можна розглядати як суто модельні.

3. ВИЗНАЧАЛЬНІ КІЛЬКІСНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ РІС

До визначальних кількісних характеристик РІС в двокомпонентних стопах Fe–Cr будемо відносити наступні:

1) концентраційний профіль атомів Cr

$$C_{Cr} = C_{Cr}(x, t), \quad (16)$$

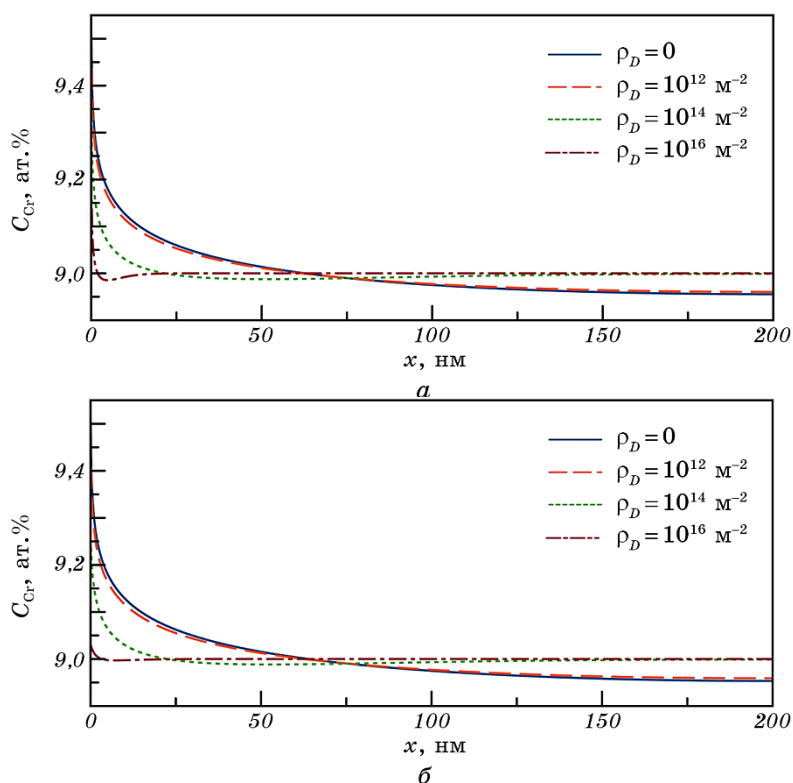


Рис. 3. Залежності концентрації атомів Cr від координати при швидкостях продукування радіаційних ТД 10^{-4} зна/с (а) і 10^{-7} зна/с (б) та різних значеннях густин дислокацій.

Fig. 3. Concentration of Cr atoms as a function of coordinates at production rates of point defect (PD) of 10^{-4} dpa/s (a) and 10^{-7} dpa/s (b) and different values of dislocation densities.

2) концентраційні профілі ТД (вакансій та міжвузельних атомів)

$$C_v = C_v(x, t), C_i = C_i(x, t), \quad (17)$$

3) поверхнева концентрація атомів Cr (концентрація атомів Cr в безпосередній близькості від поверхні зразка)

$$C_{Cr}(+0, t) = C_{Cr}(x, t)|_{x \rightarrow +0}, \quad (18)$$

4) поверхнєве збагачення (збіднення) атомів Cr

$$\Delta C_{Cr} = C_{Cr}(+0, t) - C_{Cr}^0, \quad (19)$$

де C_{Cr}^0 — концентрація атомів Cr в умовах однорідного розподілу атомів в стопі Fe–Cr;

5) сегрегаційна площа Cr — площа фігури, яка обмежена кривою $C_{Cr} = C_{Cr}(x, t)$ і прямою $C_{Cr} = C_{Cr}^0$ в межах $0 \leq x \leq l(t)$ [1]:

$$S_{Cr} = \int_0^{l(t)} |C_{Cr}(x, t) - C_{Cr}^0| dx, \quad (20)$$

де $l(t)$ — відстань від початку координат ($x=0$) до точки перетину кривої $C_{Cr} = C_{Cr}(x, t)$ та прямої $C_{Cr} = C_{Cr}^0$,

6) повна ширина концентраційного профілю атомів Cr на рівні половини максимального збагачення (збіднення) FWHM_{Cr} (full width at half maximum),

7) дискримінант РІС атомів Cr — величина, яка вказує на поверхнєве збагачення ($\mathcal{D}_{Cr} < 0$) або збіднення ($\mathcal{D}_{Cr} > 0$) атомів Cr у ста-

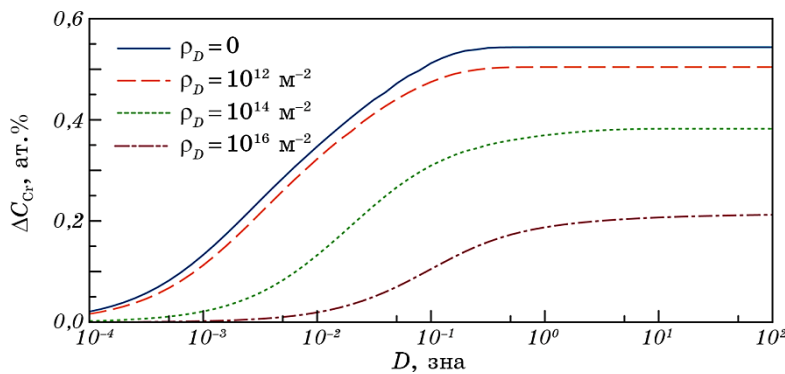


Рис. 4. Залежності поверхневого збагачення атомів Cr від дози при різних значеннях густин дислокацій.

Fig. 4. Surface enrichment of Cr atoms as a function of dose at different values of dislocation densities.

ціонарному режимі РІС [1, 24, 28]:

$$\mathcal{D}_{Cr} = \frac{\nabla C_{Cr}}{\nabla C_v} = \frac{C_{Cr} C_{Fe} d_{Fe,i} d_{Fe,v}}{\alpha(d_{Fe,i} C_{Fe} D_{Cr} + d_{Cr,i} C_{Cr} D_{Fe})} \left(\frac{d_{Cr,v}}{d_{Fe,v}} - \frac{d_{Cr,i}}{d_{Fe,i}} \right). \quad (21)$$

Зазначимо, що характеристика (20) є єдиною інтегральною характеристикою РІС.

4. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Концентраційні профілі атомів Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x, t)$, які розраховані при температурі $T = 300^\circ\text{C}$, швидкості продукування радіаційних ТД $K_0 = 10^{-5}$ зна/с, різних значеннях густин дислокацій в дислокацій-

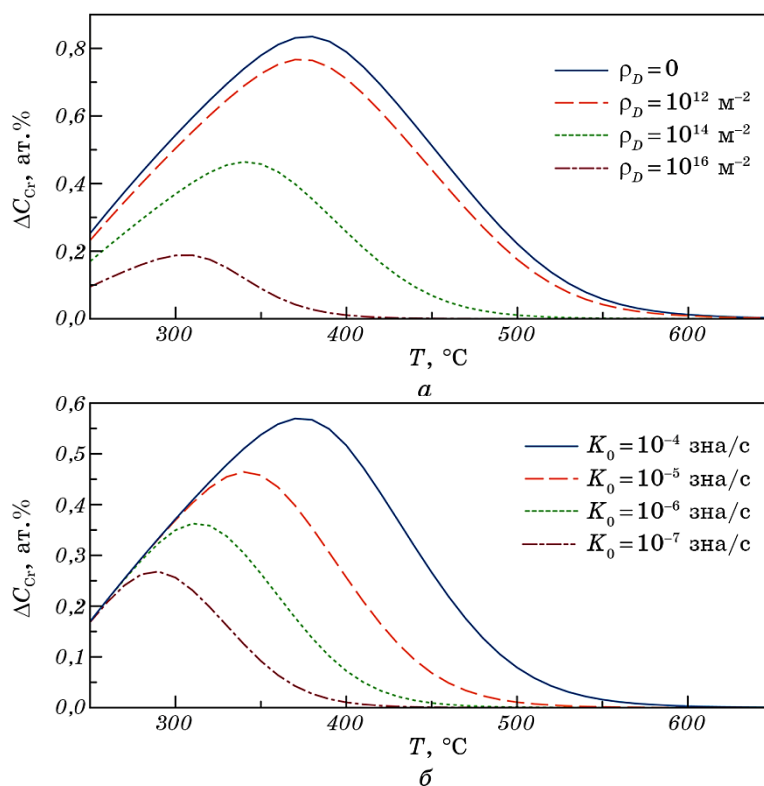


Рис. 5. Залежності поверхневого збагачення атомів Cr від температури при різних значеннях густин дислокацій (а) та швидкостей продукування радіаційних ТД (б).

Fig. 5. Surface enrichment of Cr atoms as a function of temperature at different values of dislocation densities (a) and production rates of PD (b).

ній підсистемі стопу ($\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$) та дозах опромінення $D = 1$ зна і $D = 12$ зна представлені на рис. 2, а та б відповідно. Схематичні зображення визначальних кількісних характеристик РІС 1, 3–6 наведені на вставці до рис. 2, а. Як видно з рис. 2, а для дози $D = 1$ зна зі збільшенням густини дислокацій зменшується поверхнева концентрація атомів Cr $C_{Cr}(+0) = C_{Cr}(x \rightarrow +0)$, а саме при $\rho_D = 0$ $C_{Cr}(+0) = 9,54$ ат.%, при $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$ $C_{Cr}(+0) = 9,50$ ат.%, при $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ $C_{Cr}(+0) = 9,37$ ат.%, при $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ $C_{Cr}(+0) = 9,19$ ат.%. Для значень густин дислокацій $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ та $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ і дози $D = 1$ зна мають місце мінімуми концентрації Cr як функції просторової координати x ($C_{Cr}(x)$) (пунктирна та штрихпунктирна криві на рис 2, а). Для дози $D = 12$ зна (рис. 2, б) мінімум концентрації Cr в залежностях $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$ спостерігається лише при $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ (штрихпунктирна крива на рис 2, б).

Відмітимо, що згідно з проведеними розрахунками для значення $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ мінімум концентрації Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$ зникає при практично не досяжних дозах $D \approx 10^3$ зна. Наявності зазначених мінімумів при високих значеннях густин дислокацій $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ та $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ для дози $D = 1$ зна та при $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ ($D = 12$ зна) пов'язані з невстановленням стаціонарного режиму РІС при обраних значеннях дози D . Інакше кажучи, атоми Cr ефективно накопичуються поблизу поверхні зразка, а дифузійні потоки атомів Cr з глибини зразка, через їхню відносну малість, не встигають поповнювати область збіднення атомів Cr на відстані від поверхні.

На рисунку 3 наведено концентраційні профілі атомів Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$, які розраховані при дозі опромінення $D = 1$ зна, швидко-

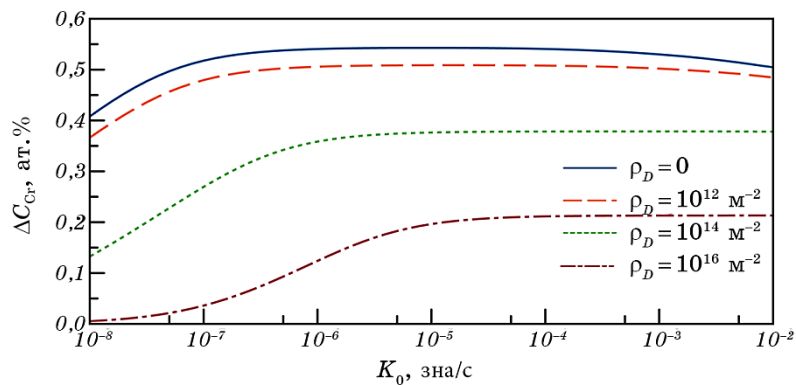


Рис. 6. Залежності поверхневого збагачення атомів Cr від швидкостей продукування радіаційних ТД при різних значеннях густин дислокацій.

Fig. 6. Surface enrichment of Cr atoms as a function of production rate of PD at different values of dislocation densities.

стях продукування радіаційних ТД $K_0 = 10^{-4}$ зна/с (рис. 3, а) та $K_0 = 10^{-7}$ зна/с (рис. 3, б) і зазначених вище значеннях густин дислокацій.

З рисунку 3 видно, що при вказаних значеннях K_0 як і при $K_0 = 10^{-5}$ зна/с (див. рис 2, а) для значень $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ та $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ мають місце мінімуми концентрації Cr як функції просторової координати x ($C_{Cr}(x)$) (пунктирна та штрихпунктирна криві на рис 2, а). Така залежність свідчить про те, що стаціонарний режим РІС не встановлюється для значень $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ та $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ при дозі $D = 1$ зна навіть для $K_0 = 10^{-7}$ зна/с. Відмітимо, що при менших швидкостях продукування радіаційних ТД мінімуми концентрації Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$ більш розмиті при одних і тих же набраних дозах.

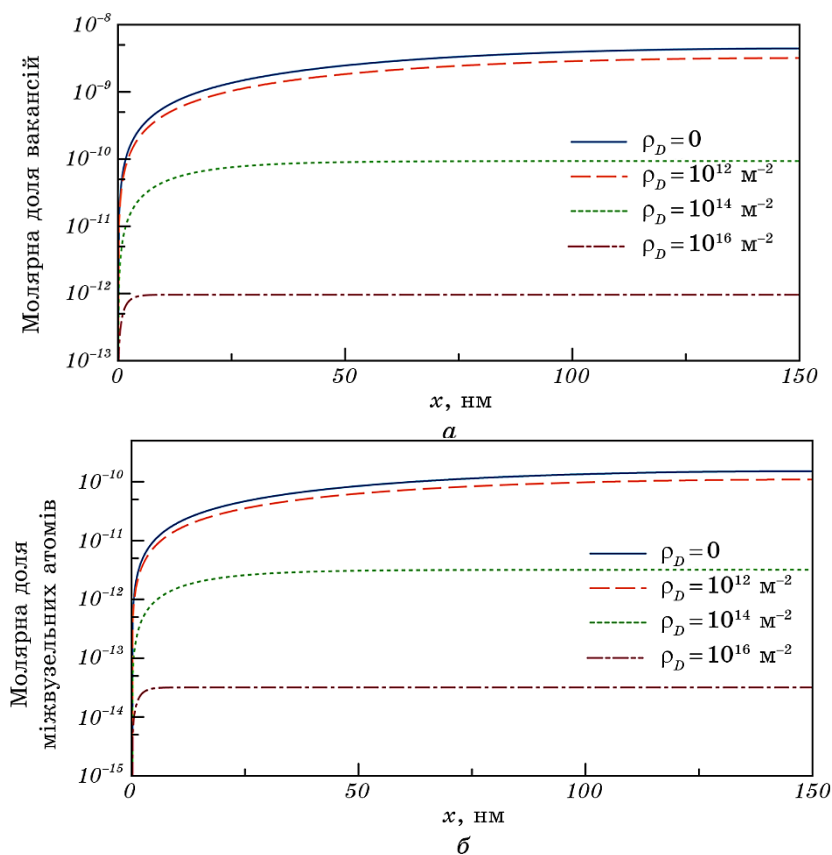


Рис. 7. Залежності молярної долі вакансій (а) та міжвузельних атомів (б) від координати при різних значеннях густин дислокацій.

Fig. 7. Mole fraction of vacancies (a) and interstitials (b) as a function of coordinates at different values of dislocation densities.

Таким чином, якісно можна стверджувати, що висока густина дислокацій ρ_D та велика швидкість продукування радіаційних ТД K_0 є факторами, які уповільнюють встановлення стаціонарного режиму РІС. Висока густина дислокацій ρ_D зменшує дифузійні потоки атомів, пов'язаних з дифузійними потоками ТД, за рахунок інтенсивного поглинання ТД дислокаціями, а великі значення K_0 підвищують нерівноважність системи.

На рисунку 4 представлені залежності величини поверхневого збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(D)$ при зазначених вище значеннях густин дислокацій ρ_D . Як випливає з рис. 4, для всього інтервалу набраних доз опромінення $10^{-4} < D < 10^2$ зна ΔC_{Cr} помітно зменшується зі збільшенням значення густини дислокацій ρ_D при фіксованому значенні дози D , що узгоджується з поведінкою поверхневої концентрації атомів Cr $C_{Cr}(+0)$, представленої на рис. 2, для доз $D = 1$ зна та $D = 12$ зна. При значеннях $\rho_D = 0$ і $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$ величина ΔC_{Cr} зростає зі збільшенням дози опромінення D в інтервалі $10^{-4} < D < 1$ зна, а при подальшому збільшенні дози D залишається практично незмінною. Така поведінка $\Delta C_{Cr}(D)$ вказує на те, що при дозі $D \approx 1$ зна ($\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$) спостерігається вихід на стаціонарний режим РІС. Для густин дислокацій $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ вихід на стаціонарний режим РІС спостерігається при дозі $D \approx 12$ зна. Проте для $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ величина поверхневого збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr}(D)$ зростає на всьому обраному інтервалі набраних доз ($10^{-4} < D < 10^2$ зна), тобто на цьому інтервалі значень D стаціонарний режим РІС ще не встановлюється.

Характерні робочі температури сучасних ядерних реакторів лежать в діапазоні $265 < T < 350^\circ\text{C}$, а для перспективних ядерних реакторів IV покоління можуть сягати $T = 1100^\circ\text{C}$ [2, 43, 44]. В даній роботі моделювання РІС для всіх обраних значень густин дислокацій ($\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ і $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$) проведено від температури $T = 250^\circ\text{C}$ до $T = 650^\circ\text{C}$.

На рисунку 5 зображені залежності $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(T)$ при $D = 1$ зна, $K_0 = 10^{-5}$ зна/с і різних значеннях густин дислокацій $\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ (рис. 5, а) та при $D = 1$ зна, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, і різних значеннях швидкостей продукування ТД $K_0 = 10^{-4}$ зна/с, $K_0 = 10^{-5}$ зна/с, $K_0 = 10^{-6}$ зна/с, $K_0 = 10^{-7}$ зна/с (рис. 5, б). Приведені залежності вказують, що на всьому обраному температурному інтервалі $265 < T < 350^\circ\text{C}$ спостерігається поверхневе збагачення атомів Cr ($\Delta C_{Cr} > 0$). Зі збільшенням температури T та фіксованих інших параметрах (D , K_0 , ρ_D) в залежності $\Delta C_{Cr}(T)$ спостерігається зростання ΔC_{Cr} , яке досягає максимального значення та потім суттєво спадає (див. рис. 5). Такий характер залежності $\Delta C_{Cr}(T)$ пов'язують з конкуренцією двох механізмів [1]: (i) відносно високою рекомбінацією ТД при низьких температурах та (ii) зростанням ролі зворотної дифузії при збільшенні T . Температура $T_{\Delta C}^{\max}$,

при якій спостерігається максимальне значення поверхневого збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr}(T)$ та й саме максимальне значення збагачення $\Delta C_{Cr}^{\max}$ зменшуються як зі збільшенням густини дислокацій ρ_D (рис. 5, а) так і зі зменшенням швидкості продукування ТД K_0 (рис. 5, б). Наприклад (див. рис. 5, а), для $K_0 = 10^{-5}$ зна/с при $\rho_D = 0$:

$T_{\Delta C}^{\max} = 377,23^\circ\text{C}$,	$\Delta C_{Cr}^{\max} = 0,84$ ат.%,	при $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$:
$T_{\Delta C}^{\max} = 377,82^\circ\text{C}$,	$\Delta C_{Cr}^{\max} = 0,77$ ат.%,	при $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$:
$T_{\Delta C}^{\max} = 341,18^\circ\text{C}$,	$\Delta C_{Cr}^{\max} = 0,46$ ат.%,	при $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$:
$T_{\Delta C}^{\max} = 305,49^\circ\text{C}$,	$\Delta C_{Cr}^{\max} = 0,19$ ат.%,	

На рисунку 6 наведено залежності $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(K_0)$ при зазначених значеннях ρ_D . Зі збільшенням швидкості продукування ТД K_0 в залежностях $\Delta C_{Cr}(K_0)$ спостерігається суттєве зростання ΔC_{Cr} , яке виходить на плато та потім поступово спадає. При відносно низьких

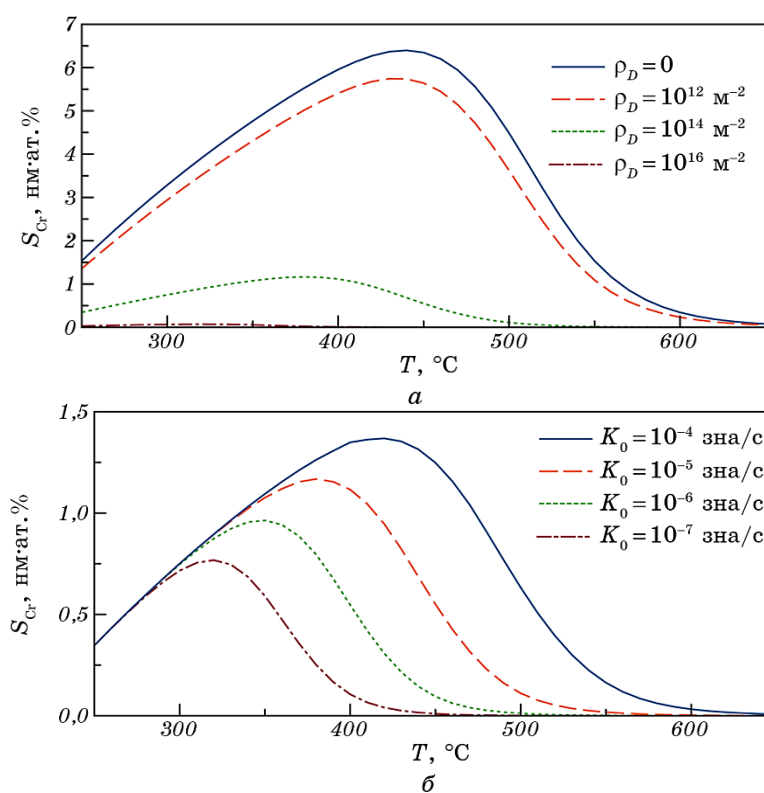


Рис. 8. Залежності сегрегаційної площі Cr від температури при різних значеннях густин дислокацій (а) та швидкостей продукування радіаційних ТД (б).

Fig. 8. Segregation area of Cr as a function of temperature at different values of dislocation densities (a) and production rates of PD (b).

значеннях K_0 зростання $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(K_0)$ пов'язане зі збільшенням концентрації нерівноважних ТД. Натомість, подальше збільшення концентрації ТД зі збільшенням K_0 супроводжується збільшенням коефіцієнту рекомбінації ТД та швидкості поглинання ТД дислокаційною підсистемою (для $\rho_D \neq 0$), що призводить до виникнення плато в залежностях $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(K_0)$ та поступового зменшення ΔC_{Cr} .

На рисунку 7 зображено концентраційні профілі ТД (вакансій $C_v = C_v(x)$ та міжвузельних атомів $C_i = C_i(x)$) при обраних вище значеннях густин дислокацій ρ_D . Оскільки дислокації є природним стоком ТД [23], зі збільшенням значення ρ_D зменшуються концентрації вакансій (рис. 7, а) та міжвузельних атомів (рис. 7, б), що призводить до зменшення дифузійних потоків атомів Cr та Fe, які

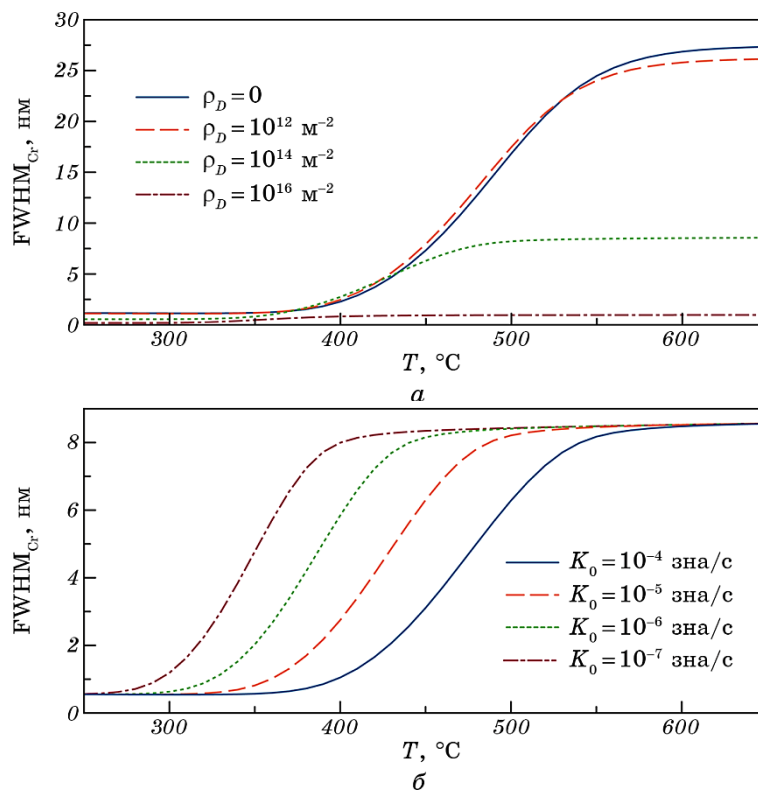


Рис. 9. Залежності повної ширини концентраційного профілю атомів Cr на рівні половини максимального збагачення від температури при різних значеннях густин дислокацій (а) та швидкостей продукування радіаційних ТД (б).

Fig. 9. Full width of the concentration profile of Cr atoms at half maximum enrichment as a function of temperature at different values of dislocation densities (a) and production rates of PD (b).

пов'язані з дифузійними потоками ТД. Внаслідок цього величини поверхневої концентрації атомів Cr $C_{Cr}(+0)$ (рис. 2, *a*) та поверхневого збагачення атомів Cr ΔC_{Cr} (рис. 4, 5, *a*) зменшуються. Як впливає з рис. 7, при значенні густини дислокацій, наприклад, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$ максимальні значення концентрацій ТД дорівнюють: $C_v = 3,19 \cdot 10^{-9}$ молярних долей, $C_i = 1,09 \cdot 10^{-10}$ молярних долей. В той же час при тому ж самому значенні ρ_D і аналогічних умовах опромінення максимальне значення концентрації атомів Cr складає $C_{Cr} = 0,919 \cdot 10^{-1}$ молярних долей (на 8–9 порядків вище концентрацій ТД), тобто умова (1) свідомо виконується.

Залежності $S_{Cr} = S_{Cr}(T)$, які розраховані при $D = 1$ зна, $T = 300^\circ\text{C}$, $K_0 = 10^{-5}$ зна/с і різних значеннях густин дислокацій $\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$ представлені на рис. 8, *a*. Також самі залежності $S_{Cr} = S_{Cr}(T)$ при $D = 1$ зна, $T = 300^\circ\text{C}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, і різних значеннях швидкостей продукування ТД $K_0 = 10^{-4}$ зна/с, $K_0 = 10^{-5}$ зна/с, $K_0 = 10^{-6}$ зна/с, $K_0 = 10^{-7}$ зна/с наведені на рис. 8, *б*. Величини сегрегаційних площ Cr $S_{Cr}(T)$ досягають максимальних значень при більш високих температурах $T_s^{\max}$ в порівнянні з температурами $T_{\Delta C}^{\max}$ (див. вище) за одних і тих же значеннях ρ_D та K_0 .

В рамках даного дослідження також були одержані залежності $\text{FWHM}_{Cr} = \text{FWHM}_{Cr}(T)$ при різних значеннях густин дислокацій ρ_D (див. рис. 9, *a*) та швидкостей продукування радіаційних ТД K_0 (див. рис. 9, *б*). Зазначимо, що для обраного температурного проміжку ($250 < T < 650^\circ\text{C}$) спостерігається зростання $\text{FWHM}_{Cr}(T)$ при фіксованих значеннях ρ_D і K_0 . Для стопу Fe–9 ат. % Cr для всього дослідженого в даній роботі температурного проміжку $250 < T < 650^\circ\text{C}$ дискримінант РІС атомів Cr $\mathcal{D}_{Cr}$ менше нуля ($\mathcal{D}_{Cr} < 0$), що вказує на поверхневе збагачення атомів Cr ($\Delta C_{Cr} > 0$) в стаціонарному режимі РІС. Відмітимо, що одержані залежності поверхневого збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr}(T)$, які розраховані в стаціонарному режимі РІС (див. суцільну та штрихову криві на рис. 5, *a*) узгоджуються зі знаком дискримінанта РІС $\mathcal{D}_{Cr}$.

5. ВИСНОВКИ

Таким чином, в роботі проведено моделювання РІС в стопі Fe–9 ат. % Cr при різних значеннях густин дислокацій в дислокаційній підсистемі стопу ($\rho_D = 0$, $\rho_D = 10^{12} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{14} \text{ м}^{-2}$, $\rho_D = 10^{16} \text{ м}^{-2}$), на основі загальноприйнятого моделю РІС [1, 14, 24–26]. Для двокомпонентних стопів Fe–Cr сформульовані визначальні кількісні характеристики РІС. Розраховані та наведені наступні визначальні характеристики РІС: концентраційні профілі атомів Cr $C_{Cr} = C_{Cr}(x)$ (рис. 2, 3) та ТД (вакансій $C_v = C_v(x)$ і міжвузельних атомів $C_i = C_i(x)$) (рис. 7), поверхнева концентрація атомів Cr $C_{Cr}(+0)$ (рис. 2), поверхневе збагачення атомів Cr $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(D)$ (рис. 4), $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(T)$ (рис.

5) і $\Delta C_{Cr} = \Delta C_{Cr}(K_0)$ (рис. 6), сегрегаційна площа Cr $S_{Cr} = S_{Cr}(T)$ (рис. 8) та повна ширина концентраційного профілю атомів Cr на рівні половини максимального збагачення $FWHM_{Cr} = FWHM_{Cr}(T)$ (рис. 9). Зазначимо, що для досліджуваних в роботі інтервалів температур $250 < T < 650^\circ\text{C}$, швидкостей продукування точкових дефектів $10^{-8} < K_0 < 10^{-2}$ зна/с та доз опромінення $10^{-4} < D < 10^2$ зна спостерігається саме поверхнєве збагачення, а не збіднення атомів Cr ($\Delta C_{Cr} > 0$). Показано, що за однакових умов опромінення зі збільшенням густини дислокацій зменшуються концентрації ТД та величини $C_{Cr}(+0)$, ΔC_{Cr} , S_{Cr} . Пояснення цього полягає в тому, що дислокаційна підсистема, яка є ефективним стоком ТД, поглинає нерівноважні ТД і зменшує потоки ТД та пов'язані з ними потоки компонентів стопу, в наслідок чого ефекти РІС слабшають. Розрахунки показують, що зі збільшенням значення ρ_D збільшується доза, при якій спостерігається вихід на стаціонарний режим РІС. В стаціонарному режимі РІС знак поверхнєвого збагачення атомів Cr ($\Delta C_{Cr} > 0$) відповідає знаку дискримінанту РІС ($\mathcal{D}_{Cr} < 0$).

Автори висловлюють щире подяку д.ф.-м.н. А. А. Туркіну, який люб'язно прочитав текст статті, за корисне обговорення даної роботи. Автори також дуже вдячні рецензенту статті за цінні критичні зауваження. Робота виконана в рамках цільової програми наукових досліджень НАН України «Ядерні та радіаційні технології для енергетичного сектору і суспільних потреб» на 2019–2023 рр.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys*. 2nd Ed. (New York: Springer: 2017).
2. A. Aitkaliyeva, L. He, H. Wen, B. Miller, X. M. Bai, and T. Allen, *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors* (Ed. P. Yvon) (Amsterdam: Elsevier: 2017), p. 253.
3. S. J. Zinkle, H. Tanigawa and B. D. Wirth, *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications* (Eds. G. R. Odette and S. J. Zinkle) (Amsterdam: Elsevier: 2019), p. 163.
4. G. S. Was and S. Ukai, *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications* (Eds. G. R. Odette and S. J. Zinkle) (Amsterdam: Elsevier: 2019), p. 293.
5. В. Н. Воеводин, И. М. Неклюдов, *Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов* (Київ: Наукова думка: 2006).
6. В. Н. Воеводин, И. М. Неклюдов, «Вісник Харківського національного університету». Серія фізична «Ядра, частинки, поля», **746**, вип. 4 (32): 3 (2006).
7. А. Гриценко, В. Демехин, В. Илькович, В. Буканов, Е. Васильева, *Ядерная радиационная безопасность*, **50**: 29 (2011).
8. J. P. Wharry and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, **442**: 7 (2013).
9. C. Zheng and D. Kaoumi, *Mater. Charact.*, **134**: 152 (2017).

10. C. Zheng, M. A. Auger, M. P. Moody, and D. Kaoumi, *J. Nucl. Mater.*, **491**: 162 (2017).
11. H.-H. Jin, S. S. Hwang, M. J. Choi, G.-G. Lee, and J. Kwon, *J. Nucl. Mater.*, **513**: 271 (2019).
12. X. Liu, J. G. Gigax, J. D. Poplawsky, W. Guo, H. Kim, L. Shao, F. A. Garner, and J. F. Stubbins, *Materialia*, No. 9: 100542 (2020).
13. B. D. Wirth, G. R. Odette, J. Marian, L. Ventelon, J. A. Young-Vandersall, and L. A. Zepeda-Ruiz, *J. Nucl. Mater.*, **329–333 (Part A)**: 103 (2004).
14. A. J. Ardell and P. Bellon, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **20**, No. 3: 115 (2016).
15. Я. И. Френкель, *Введение в теорию металлов* (Ленинград: Наука: 1972).
16. А. М. Косевич, *Физическая механика реальных кристаллов* (Киев: Наукова Думка: 1981).
17. С. А. Котречко, Ю. Я. Мешков, *Предельная прочность. Кристаллы, металлы, конструкции* (Киев: Наукова Думка: 2008).
18. A. S. Bakai, O. V. Borodin, V. V. Bryk, V. N. Voyevodin, V. F. Zelenskij, I. M. Neklyudov, P. V. Platonov, and A. A. Turkin, *J. Nucl. Mater.*, **185**: 260 (1991).
19. А. С. Бакай, А. А. Туркин, *Радиационно-индуцированная модификация фазовой диаграммы бинарного сплава* (Москва: ЦНИИАтоминформ: 1988).
20. А. А. Туркин, А. С. Бакай, *Вопросы атомной науки и техники*, Вып. 4 (89): 47 (2006).
21. А. А. Туркин, *Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды*, Вып. 3 (Ред. А. Г. Загородний, Н. Ф. Шульга, В. В. Яновский) (Харьков: ХНУ имени В. Н. Каразина: 2019), с. 58.
22. А. А. Туркин, *Теорія фазових перетворень у неупорядкованих сплавах заміщення під опроміненням* (Дис. ... докт. фіз.-мат. наук) (Харків: 2010).
23. R. Bullough and R. C. Newman, *Rep. Prog. Phys.*, **33**, No. 1: 101 (1970).
24. H. Wiedersich, P. R. Okamoto, and N. Q. Lam, *J. Nucl. Mater.*, **83**: 98 (1979).
25. J. P. Wharry, Z. Jiao, and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, **425**: 117 (2012).
26. J. P. Wharry and G. S. Was, *Acta Mater.*, **65**: 42 (2014).
27. R. V. Skorokhod, O. M. Buhay, V. M. Bilyk, V. L. Denysenko, and O. V. Koropov, *Східно-європейський фізичний журнал*, **5**, № 1: 61 (2018).
28. О. В. Коропов, Р. В. Скороход, *IX Міжнародна науково-практична конференція «Математика в сучасному технічному університеті» (28–29 грудня 2020, Київ)* (Вінниця: ФОП Ю. В. Кушнір: 2021), с. 80.
29. О. В. Коропов, *18 Міжнародна наукова конференція ім. академіка Михайла Кравчука (7–10 жовтня 2017)* (Київ: НТУУ «КПІ»: 2017), т. 1, с. 86.
30. О. В. Коропов, *17 Міжнародна наукова конференція ім. академіка Михайла Кравчука (19–20 травня 2016)* (Київ: НТУУ «КПІ»: 2016), т. 1, с. 161.
31. F. Soisson, *J. Nucl. Mater.*, **349**: 235 (2006).
32. K. G. Field, L. M. Barnard, C. M. Parish, J. T. Busby, D. Morgan, and T. R. Allen, *J. Nucl. Mater.*, **435**: 172 (2013).
33. D. S. Gelles, *J. Nucl. Mater.*, **108–109**: 515 (1982).
34. S. I. Porollo, A. M. Dvoriashin, A. N. Vorobyev, and Yu. V. Konobeev, *J. Nucl. Mater.*, **256**: 247 (1998).
35. Yu. V. Konobeev, A. M. Dvoriashin, S. I. Porollo, and F. A. Garner, *J. Nucl. Mater.*, **355**: 124 (2006).
36. W.-Y. Chen, Y. Miao, J. Gan, M. A. Okuniewski, S. A. Maloy, and J. F. Stubbins, *Acta Mater.*, **111**: 407 (2016).

37. S. Choudhury, L. Barnard, J. D. Tucker, T. R. Allen, B. D. Wirth, M. Asta, and D. Morgan, *J. Nucl. Mater.*, **411**: 1 (2011).
38. C.-C. Fu, J. Dalla Torre, F. Willaime, J.-L. Bocquet, and A. Barbu, *Nat. Mater.*, **4**: 68 (2005).
39. K. Vörtler, M. Mamivand, L. Barnard, I. Szlufarska, F. A. Garner, and D. Morgan, *J. Nucl. Mater.*, **479**: 23 (2016).
40. P. Olsson, C. Domain, and J. Wallenius, *Phys. Rev. B*, **75**: 014110 (2007).
41. H.-E. Schaefer, K. Maier, M. Weller, D. Herlach, A. Seeger, and J. Diehl, *Scripta Metallurgica*, **11**: No. 9: 803 (1977).
42. T. R. Allen and G. S. Was, *Acta Mater.*, **46**, No. 10: 3679 (1998).
43. S. J. Zinkle and J. T. Busby, *Mater. Today*, **12**, No. 11: 12 (2009).
44. D. Buckthorpe, *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors* (Ed. P. Yvon) (Amsterdam: Elsevier: 2017), p. 1.

REFERENCES

1. G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys*, 2nd Ed. (New York: Springer: 2017).
2. A. Aitkaliyeva, L. He, H. Wen, B. Miller, X. M. Bai, and T. Allen, *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors* (Ed. P. Yvon) (Amsterdam: Elsevier: 2017), p. 253.
3. S. J. Zinkle, H. Tanigawa and B. D. Wirth, *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications* (Eds. G. R. Odette and S. J. Zinkle) (Amsterdam: Elsevier: 2019), p. 163.
4. G. S. Was and S. Ukai, *Structural Alloys for Nuclear Energy Applications* (Eds. G. R. Odette and S. J. Zinkle) (Amsterdam: Elsevier: 2019), p. 293.
5. V. N. Voevodin and I. M. Neklyudov, *Evolutsiya Strukturno-Fazovogo Sostoyaniya i Radiatsionnaya Stoykost' Konstruktsionnykh Materialov* [The Evolution of the Structural Phase State and Radiation Resistance of Structural Materials] (Kyiv: Naukova Dumka: 2006) (in Russian).
6. V. N. Voevodin and I. M. Neklyudov, 'Visnyk Kharkivs'koho Natsional'noho Universytetu'. Seriya Fizychna 'Yadra, Chastynky, Polya', **746**, Iss. 4 (32): 3 (2006) (in Russian).
7. A. Gritsenko, V. Demekhin, V. Il'kovich, V. Bukanov, and E. Vasil'eva, *Yaderna ta Radiatsiyina Bezpeka*, **50**: 29 (2011) (in Russian).
8. J. P. Wharry and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, **442**: 7 (2013).
9. C. Zheng and D. Kaoumi, *Mater. Charact.*, **134**: 152 (2017).
10. C. Zheng, M. A. Auger, M. P. Moody, and D. Kaoumi, *J. Nucl. Mater.*, **491**: 162 (2017).
11. H.-H. Jin, S. S. Hwang, M. J. Choi, G.-G. Lee, and J. Kwon, *J. Nucl. Mater.*, **513**: 271 (2019).
12. X. Liu, J. G. Gigax, J. D. Poplawsky, W. Guo, H. Kim, L. Shao, F. A. Garner, and J. F. Stubbins, *Materialia*, No. 9: 100542 (2020).
13. B. D. Wirth, G. R. Odette, J. Marian, L. Ventelon, J. A. Young-Vandersall, and L. A. Zepeda-Ruiz, *J. Nucl. Mater.*, **329–333 (Part A)**: 103 (2004).
14. A. J. Ardell and P. Bellon, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **20**, No. 3: 115 (2016).

15. Ya. I. Frenkel', *Vvedenie v Teoriyu Metallov* [Introduction to the Theory of Metals] (Leningrad: Nauka: 1972) (in Russian).
16. A. M. Kosevich, *Fizicheskaya Mekhanika Real'nykh Kristallov* [Physical Mechanics of Real Crystals] (Kyiv: Naukova Dumka: 1981) (in Russian).
17. S. A. Kotrechko and Yu. Ya. Meshkov, *Predel'naya Prochnost'. Kristally, Metally, Konstruktsii* [Strength of Crystals, Metals, and Structures] (Kyiv: Naukova Dumka: 2008) (in Russian).
18. A. S. Bakai, O. V. Borodin, V. V. Bryk, V. N. Voyevodin, V. F. Zelenskij, I. M. Neklyudov, P. V. Platonov, and A. A. Turkin, *J. Nucl. Mater.*, **185**: 260 (1991).
19. A. S. Bakay and A. A. Turkin, *Radiatsionno-Indutsirovannaya Modifikatsiya Fazovoy Diagrammy Binarnogo Splava* [Radiation-Induced Modification of the Phase Diagram of a Binary Alloy] (Moscow: TsNIIatominform: 1988) (in Russian).
20. A. A. Turkin and A. S. Bakay, *Voprosy Atomnoy Nauki i Tekhniki*, Iss. 4 (89): 47 (2006) (in Russian).
21. A. A. Turkin, *Problemy Teoreticheskoy i Matematicheskoy Fiziki. Nauchnye Trudy, Vyp. 3* [Problems of Theoretical and Mathematical Physics. Scientific Works, Vol. 3] (Eds. A. G. Zagorodniy, N. F. Shul'ga, and V. V. Yanovskiy) (Kharkiv: KhNU imeni V. N. Karazina: 2019), p. 58 (in Russian).
22. A. A. Turkyn, *Teoriya Fazovykh Peretvoren' u Neuporyadkovanykh Splavakh Zamishchennya pid Oprominennyam* [Theory of Phase Transformations in Disordered Substitutional Alloys under Irradiation] (Dis. ... Dr. Sci. (Phys.-Math.)) (Kharkiv: 2010) (in Ukrainian).
23. R. Bullough and R. C. Newman, *Rep. Prog. Phys.*, **33**, No. 1: 101 (1970).
24. H. Wiedersich, P. R. Okamoto, and N. Q. Lam, *J. Nucl. Mater.*, **83**: 98 (1979).
25. J. P. Wharry, Z. Jiao, and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, **425**: 117 (2012).
26. J. P. Wharry and G. S. Was, *Acta Mater.*, **65**: 42 (2014).
27. R. V. Skorokhod, O. M. Buhay, V. M. Bilyk, V. L. Denysenko, and O. V. Koropov, *Skhidno-Yevropeys'kyi Fizychnyy Zhurnal*, **5**, No. 1: 61 (2018).
28. O. V. Koropov and R. V. Skorokhod, *IX International Scientific-Practical Conference 'Mathematics in Modern Technical University' (Dec. 28–29, 2020, Kyiv)* (Vinnytsia: FOP Yu. V. Kushnir: 2021), p. 80 (in Ukrainian).
29. O. V. Koropov, *18th International Scientific Mykhailo Kravchuk Conference (Oct. 7–10, 2017)* (Kyiv: NTUU «KPI»: 2017), vol. 1, p. 86 (in Ukrainian).
30. O. V. Koropov, *17th International Scientific Mykhailo Kravchuk Conference (May 19–20, 2016)* (Kyiv: NTUU «KPI»: 2016), vol. 1, p. 161 (in Ukrainian).
31. F. Soisson, *J. Nucl. Mater.*, **349**: 235 (2006).
32. K. G. Field, L. M. Barnard, C. M. Parish, J. T. Busby, D. Morgan, and T. R. Allen, *J. Nucl. Mater.*, **435**: 172 (2013).
33. D. S. Gelles, *J. Nucl. Mater.*, **108–109**: 515 (1982).
34. S. I. Porollo, A. M. Dvoriashin, A. N. Vorobyev, and Yu. V. Konobeev, *J. Nucl. Mater.*, **256**: 247 (1998).
35. Yu. V. Konobeev, A. M. Dvoriashin, S. I. Porollo, and F. A. Garner, *J. Nucl. Mater.*, **355**: 124 (2006).
36. W.-Y. Chen, Y. Miao, J. Gan, M. A. Okuniewski, S. A. Maloy, and J. F. Stubbins, *Acta Mater.*, **111**: 407 (2016).
37. S. Choudhury, L. Barnard, J. D. Tucker, T. R. Allen, B. D. Wirth, M. Asta, and D. Morgan, *J. Nucl. Mater.*, **411**: 1 (2011).

- 38. C.-C. Fu, J. Dalla Torre, F. Willaime, J.-L. Bocquet, and A. Barbu, *Nat. Mater.*, **4**: 68 (2005).
- 39. K. Vörtler, M. Mamivand, L. Barnard, I. Szlufarska, F. A. Garner, and D. Morgan, *J. Nucl. Mater.*, **479**: 23 (2016).
- 40. P. Olsson, C. Domain, and J. Wallenius, *Phys. Rev. B*, **75**: 014110 (2007).
- 41. H.-E. Schaefer, K. Maier, M. Weller, D. Herlach, A. Seeger, and J. Diehl, *Scripta Metallurgica*, **11**: No. 9: 803 (1977).
- 42. T. R. Allen and G. S. Was, *Acta Mater.*, **46**, No. 10: 3679 (1998).
- 43. S. J. Zinkle and J. T. Busby, *Mater. Today*, **12**, No. 11: 12 (2009).
- 44. D. Buckthorpe, *Structural Materials for Generation IV Nuclear Reactors* (Ed. P. Yvon) (Amsterdam: Elsevier: 2017), p. 1.