#### Вестник Самарского үниверситета. Естественнонаучная серия. 2016. № 1-2 69 ФИЗИКА

УДК 621.039.531

Д.А. Корнилов, В.М. Косенков, П.П. Силантьев<sup>1</sup>

### ВЛИЯНИЕ ИСХОДНОЙ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ НА КИНЕТИКУ ТОЧЕЧНЫХ И МАКРОСКОПИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ

Работа направлена на обоснование количественного эффекта уменьшения концентрации радиационных дефектов в материалах в зависимости от плотности краевых дислокаций, являющихся их стоками. Получены результаты моделирования кинетики накопления дефектов, учитывающие их рекомбинацию на дислокационных петлях, краевых дислокациях и порах. Выводы работы полезны в рамках решения проблемы уменьшения радиационного распухания и деградации свойств материалов в процессе нейтронного облучения.

Ключевые слова: реакторное материаловедение, атомный реактор, конструкционные материалы, микроструктура, нейтронное облучение, отражатель нейтронов, радиационные дефекты, рентгенография, радиационная повреждаемость, бериллий.

#### Введение

Существующие экспериментальные данные показывают [1; 2] существенное влияние исходной концентрации стоков радиационных дефектов в материалах на изменение их макроскопических характеристик, обусловленное диффузией и накоплением радиационных дефектов, образующихся при нейтронном облучении. Одной из таких характеристик является радиационное распухание — явление, которое сопровождает поведение кристаллических тел под облучением. Во многих случаях оно становится основным препятствием увеличения ресурса материалов, работающих в активной зоне атомного реактора. Величина вакансионного или "рентгеновского" (из-за увеличений среднего размера элементарной ячейки) распухания различных материалов определяется главным образом количеством соответствующих точечных дефектов, объединившихся в устойчивые скопления. Борьба с этим явлением успешно проводится путем создания материалов с высокой плотностью стоков как в металлах (например, в результате пластической деформации [3] и

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>© Корнилов Д.А., Косенков В.М., Силантьев П.П., 2016

Корнилов Дмитрий Александрович (kornilovda@niiar.ru), Косенков Владимир Михайлович (kosenkovv1938@mail.ru), Силантьев Павел Петрович (silantievpp@mail.ru), АО "ГНЦ НИИАР", 433510, Российская Федерация, Ульяновская обл., г. Димитровград, 10

изменения микроструктуры материала [4; 5]), так и в неметаллических кристаллах (воздействием взрывной волной [6]). В настоящее время появляются другие схемы получения исходных состояний материалов, содержащих различные особенности структуры, являющиеся стоками первичных радиационных дефектов — пар Френкеля. При этом необходимо учитывать, что характер эволюции радиационных дефектов зависит как от исходной концентрации этих стоков [7–9], так и от концентрации стоков, образующихся в процессе облучения. При этом существенно усложняется задача математического моделирования эволюции радиационных дефектов, т. к., во-первых, увеличивается размерность системы кинетических уравнений, учитывающей в том числе и процессы зарождения стоков под облучением, а во-вторых, существенно затруднен процесс калибровки математической модели, т. к. трудно получить состояние материала, содержащее лишь один тип стоков.

В настоящей статье изучаются вопросы, описывающие эволюцию как точечных, так и макроскопических радиационных дефектов, образующихся в процессе нейтронного облучения в атомных реакторах, а также влияние исходного микроскопического состояния материала на эту эволюцию.

# 1. Кинетика вакансий и междоузельных атомов под облучением

Основу теоретических моделей радиационного распухания составляют кинетические уравнения концентрации точечных дефектов среды, содержащих стоки. При этом предполагается, что концентрация радиационных точечных дефектов при характерных температурах распухания  $(0, 2-0, 6)T_{n,n}$  превосходит концентрацию термически равновесных дефектов. Вакансии и междоузельные атомы, мигрируя по решетке, могут: во-первых, рекомбинировать; во-вторых, образовывать скопления одноименных дефектов и, в-третьих, уходить на стоки, в качестве которых могут служить сетки дислокаций, дислокационные петли, поры и другие протяженные дефекты. Следовательно, скорость изменения концентрации междоузельных атомов и вакансий равна разности скоростей их образования и гибели, что может быть описано кинетическими уравнениями [7]:

...

$$\frac{dC_v}{dt} = G - RC_iC_v - C_v \sum_j K_v^j,$$

$$\frac{dC_i}{dt} = G - RC_iC_v - C_i \sum_j K_i^j,$$
(1.1)

где  $C_v, C_i$  – усредненные концентрации вакансий и междоузельных атомов;  $G = \sigma_f \varphi$  – скорость введения свободно мигрирующих дефектов ( $\sigma_f$  – сечение их образования,  $\varphi$  – интенсивность облучения);  $R = 4\pi r_{vi} (D_i + D_v)$  – константа рекомбинации точечных дефектов, где  $r_{vi}$  – радиус взаимной рекомбинации,  $D_{i,v} = D_{i,v}^0 \exp\left(-E_{i,v}^m/kT\right)$  – коэффициенты диффузии междоузельных атомов и вакансий, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура,  $E_{i,v}^m$  – энергия миграции междоузельного атома и вакансии;  $K_{i,v}^j = S_{i,v}^j D_{i,v}$  – коэффициент поглощения точечных дефектов стоками типа j, где  $S_{i,v}^j$  – величины, характеризующие мощность стоков типа j для междоузельных атомов и вакансий.

В качестве основных источников стоков точечных дефектов, образующихся в результате нейтронного облучения, в данной статье будут рассматриваться краевые дислокации, дислокационные петли и поры. В большинстве работ, посвященных моделированию эволюции микроструктуры материалов под облучением, рассматриваются либо квазистационарные состояния, когда сформированы и слабо изменяются с течением времени дислокационная подсистема и количество пор [8], либо рассматриваются только отдельные типы стоков [10; 11].

## 2. Расчет коэффициентов поглощения точечных дефектов различными стоками

Для формулировки системы уравнений, описывающих эволюцию микроструктуры материала под облучением, необходимо получить потоки точечных дефектов на дислокации и поры, также зарождающихся в процессе облучения. Энергия взаимодействия между дислокацией и точечным дефектом имеет упругую природу и фактически является взаимодействием дальнодействующего поля напряжения дислокации с полем атомных смещений вокруг точечного дефекта [12]. Для краевой прямолинейной дислокации, направленной вдоль оси z [13; 14]:

$$E_{int}^{j}(r,\theta) = \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\mu b}{3\pi} \frac{\sin\theta}{r} \Delta V_{j}$$
(2.1)

где r – расстояние дефекта от дислокации;  $\Delta V_j$  – релаксационный объем (разница между объемом дефекта и атомным объемом);  $\nu$  – коэффициент Пуассона,  $\mu$  – модуль сдвига, b – величина вектора Бюргерса,  $\theta$  – угол между направлением вектора Бюргерса и радиус-вектором **r**, индекс j означает или междоузельные атомы i, или вакансии v.

Поток точечных дефектов

$$\vec{J}_j = -D_j \vec{\nabla} C_j - \frac{D_j C_j}{kT} \vec{\nabla} E^j_{int}$$
(2.2)

на дислокацию определяется суммой градиента их концентрации  $_j$  в пространстве между дислокациями и на границах стоков и дрейфовым потоком, вызванной силовым полем с энергией взаимодействия (2.1). В установившемся режиме, характеризуемом стационарными потоками точечных дефектов, получаем следующее уравнение для концентрации точечных дефектов:

$$\nabla^2 C_j + \frac{1}{kT} \vec{\nabla} C_j \vec{\nabla} E^j_{int} = 0.$$

Решение уравнения (2.2) дает следующие выражения для потоков вакансий и междоузельных атомов [9]:

• на единицу длины дислокационной линии прямолинейной дислокации:

$$j_{j}^{D} = -\frac{2\pi D_{k} \left(C_{k} - C_{k}^{0}\right)}{\ln L_{r_{k}}}$$

• на единицу длины круговой дислокации:

$$j_j^L = -\frac{2\pi D_k \left(C_k - C_k^0\right)}{\ln 8R_{L/r_k}}.$$

Отсюда можно получить выражение для константы поглощения точечных дефектов дислокационными петлями в системе уравнений (1.1):

$$K_{j}^{l} = \frac{4\pi^{2} r_{l} D_{j} \rho_{l}}{\ln \frac{2r_{l}}{L_{j}}}$$
(2.3)

#### Д.А. Корнилов, В.М. Косенков, П.П. Силантьев

Учитывая связь между константой поглощения точечных дефектов с параметром эффективности поглощения точечных дефектов  $K_j^l = Z_j^l \rho_l$ , получим выражение для параметра эффективности поглощения дислокационными петлями точечного дефекта j:

$$Z_{j}^{l} = \frac{4\pi^{2}r_{l}}{\ln\frac{2r_{l}}{L_{j}}}.$$
(2.4)

Учитывая (2.3)–(2.4) можно получить следующее выражение для изменения радиуса дислокационных петель:

$$\frac{dr_l}{dt} = \frac{\Omega}{b} \left\{ Z_i D_i C_i - Z_v D_v \left( C_v - C_v^0 \right) \right\},\,$$

где  $r_l$  – радиус дислокационных петель,  $C_v^0$  – термически равновесная концентрация вакансий.

Поток точечных дефектов на пору рассчитывается таким же способом, как и на дислокацию. В простейшем случае, если объем облучаемого образца равномерно заполнен порами среднего радиуса  $r_v$  и плотностью  $\rho_v$ , на каждую пору приходится часть объема образца:

$$\frac{4}{3}\pi R_v^3 = \rho_v^{-1}.$$

Предполагается, что в сферической области радиуса Rv других стоков, кроме поры, нет, и поэтому все точечные радиационные дефекты поглощаются порой. Стационарное уравнение диффузии (2.2) для случая поры выглядит проще, чем для дислокации, так как не содержит дрейфового члена  $\nabla^2 C_j = 0$ . По аналогии с (2.3) получается, что  $Z_j^v = 4\pi r_v - эффективность поглощения междоузельных атомов$  $и вакансий отдельной сферической порой радиуса <math>r_v$ . Таким образом, видно, что поры являются нейтральными стоками, т. е. поглощают за единицу времени одинаковое число междоузельных атомов и вакансий, а изменение радиуса поры будет описываться уравнением [6]

$$\frac{dr_v}{dt} = \frac{\Omega}{r_v} \left\{ D_v \left( C_v^{irr} - C_v^{tv} \right) - D_i C_i^{irr} \right\},\tag{2.5}$$

где  $\Omega \sim a^3$  – атомный объем, a – параметр решетки.

Первое слагаемое в правой части (2.5) характеризует скорость присоединения вакансий и их термического испарения из поры, второе — скорость присоединения междоузельных атомов. При выводе (2.5) термически равновесную концентрацию междоузельных атомов считали равной нулю. Из (2.5) следует, что рост вакансионной поры может происходить лишь тогда, когда правая часть положительна, т. е. при некотором критическом размере поры.

# 3. Учет зарождения и роста дислокационных петель и пор под облучением

Изменение плотности дислокационных петель в материалах под облучением сильно меняется для разных типов веществ и зависит от многих факторов: уровня деформации, химического состава, технологии деформации, формы изделия и др. Начальный уровень плотности дислокаций не оказывает большого влияния на его дальнейшее поведение, т. к. через некоторое время после начала облучения материалы с разными уровнями плотности дислокаций выходят на примерно одинаковый уровень, и он почти не зависит от дальнейшего облучения [15].

72

Так как дислокационные петли являются линейными дефектами, то для нахождения плотности петель  $\rho_l$  используется следующая зависимость [10]:

$$\rho_l = 2\pi N_l r_l,$$

где  $N_l$  – число петель в единице объема,  $r_l$  – радиус петли.

Для описания моделей зарождения и роста петель используются модели кластеризации междоузельных атомов, которые заключаются в следующем: под действием облучения в материале образуются каскады атомных смещений, которые вызывают рост концентрации междоузельных атомов. Междоузельные атомы образуют скопления в виде кластеров, которые в дальнейшем могут служить зародышами для дислокационных петель. В работе [16] показано, что выражение для скорости зарождения дислокационных петель имеет вид:

$$J_l = \frac{dN_l}{dt} = \frac{\varepsilon_{i0}GP_i}{n_i} \quad , \tag{3.1}$$

где  $\varepsilon_{i0}$  определяет долю междоузельных атомов, образующихся в каскаде в виде неподвижных кластеров; G — скорость генерации дефектов;  $P_i$  — вероятность достижения кластером некоторых критических размеров, при которых он становится устойчивым ( $P_i$  зависит от концентрации примесей, энергии нейтронов, температуры облучения и т. д.);  $n_i$  — число междоузельных атомов в устойчивом кластере.

В выражении (3.1) необходимо учесть зависимость величины  $\varepsilon_{i0}$  от числа петель  $N_l$ , так как с ростом  $N_l$  количество междоузельных атомов, образующих в результате каскада неподвижный кластер, будет уменьшаться, поскольку будет увеличиваться число междоузельных атомов, уходящих на уже имеющиеся стоки (петли и поры). Это подтверждается и результатами экспериментальных исследований [17–19], показывающих, что в процессе облучения плотность дислокационных петель  $N_l(t)$  начинает возрастать спустя некоторое время после начала процесса облучения и со временем достигает насыщения. Такое поведение достаточно хорошо может быть аппроксимировано зависимостью:

$$N_l(t) = N_{l0} + \tilde{N}_l \operatorname{th}\left(\frac{t-\tau}{\delta}\right), \qquad (3.2)$$

где  $N_{l0}$  – исходное число дислокационных петель (до облучения);  $\tau$  – время зарождения дислокационных петель;  $\delta$  – параметр, определяющий скорость протекания процессов зарождения и роста петель;  $\tilde{N}_l$  – нормировочная постоянная, определяемая исходя из условий облучения. Сравнивая уравнение (3.2) с (3.1), получаем следующие выражения для постоянных величин, входящих в уравнение (3.2):

$$\delta = \frac{n_i}{\varepsilon_{i0} G P_i}, \qquad \varepsilon_{i0} = \tilde{\varepsilon}_{i0} \left[ 1 - \left( \frac{N_l}{\tilde{N}_l} \right)^2 \right],$$

где  $\tilde{\varepsilon_{i0}}$  – доля междоузельных атомов, образующих неподвижные кластеры в чистом материале [16; 20].

Таким образом, для скорости образования петель получается выражение:

$$\frac{dN_l}{dt} = \frac{\tilde{\varepsilon}_{i0} \left[1 - \left(\frac{N_l}{\bar{N}_l}\right)^2\right] GP_i}{n_i}$$

а кинетическое уравнение, описывающее изменение плотности дислокационных петель, будет иметь вид:

$$\frac{d\rho_l}{dt} = 2\pi N_l \frac{dr_l}{dt} + 2\pi r_l \frac{dN_l}{dt}$$

Д.А. Корнилов, В.М. Косенков, П.П. Силантьев

Проведя аналогичные рассуждения для процессов образования вакансионных пор в облучаемом материале и с учетом того, что они являются объемными дефектами, для плотности пор имеем [16]

$$\rho_v = N_v.$$

Выражение для скорости зарождения пор будет иметь вид [6]:

$$J_v = \frac{dN_v}{dt} = \frac{\varepsilon_{v0}GP_v}{n_v}$$

где  $\varepsilon_{v0}$  определяет долю вакансий, образующихся в каскаде в виде неподвижных кластеров; G – скорость генерации дефектов;  $P_v$  – вероятность достижения кластером некоторых критических размеров, при которых он становится устойчивым ( $P_v$  зависит от концентрации примесей, энергии нейтронов, температуры облучения и т. д.);  $n_v$  – число вакансий в устойчивом кластере.

По аналогии со случаем дислокационных петель получаем

$$\varepsilon_{v0} = \tilde{\varepsilon}_{v0} \left[ 1 - \left( \frac{N_v}{\tilde{N}_v} \right)^2 \right],$$

где  $\tilde{\varepsilon}_{v0}$  – доля вакансий, образующих неподвижные кластеры в чистом материале,  $\tilde{N}_v$  — нормировочная постоянная.

Тогда скорость зарождения пор:

$$\frac{dN_v}{dt} = \frac{\tilde{\varepsilon}_{v0} \left[1 - \left(\frac{N_v}{\bar{N}_v}\right)^2\right] GP_v}{n_v},$$

а кинетическое уравнение, описывающее изменение плотности пор, будет иметь вид:

$$\frac{d\rho_v}{dt} = \frac{dN_v}{dt}$$

# Полная система уравнений, описывающая кинетику накопления точечных и макроскопических дефектов под облучением

Учитывая приведенные выше рассуждения, а также выражения для скорости изменения радиусов дислокационных петель и пор, запишем систему уравнений, описывающую кинетику радиационных дефектов с учетом их взаимной аннигиляции и рекомбинации на краевых дислокациях, дислокационных петлях и порах:

$$\frac{dC_v}{dt} = G - \left(Z_v^l \rho_l + Z_v^d \rho_d + Z_v^v \rho_v\right) D_v C_v - RC_v C_i,$$

$$\frac{dC_i}{dt} = G - \left(Z_i^l \rho_l + Z_i^d \rho_d + Z_i^v \rho_v\right) D_i C_i - RC_i C_v,$$

$$\frac{dr_l}{dt} = \frac{\Omega}{b} \left(Z_i^l D_i C_i - Z_v^l D_v C_v\right),$$

$$\frac{dr_v}{dt} = \frac{\Omega}{r_v} \left(D_v C_v - D_i C_i\right),$$

$$\frac{d\rho_l}{dt} = 2\pi \left(N_l + N_{l0}\right) \frac{dr_l}{dt} + 2\pi r_l \frac{dN_l}{dt},$$
(4.1)

74

Влияние исходной дислокационной структуры на кинетику...

$$\frac{dN_l}{dt} = \frac{\tilde{\varepsilon}_{i0} \left[1 - \left(\frac{N_l}{N_l}\right)^2\right] GP_i}{n_i},$$
$$\frac{d\rho_v}{dt} = \frac{dN_v}{dt} = \frac{\tilde{\varepsilon}_{v0} \left[1 - \left(\frac{N_v}{\bar{N}_v}\right)^2\right] GP_v}{n_v}.$$

Все используемые обозначения расписаны выше при выводе соответствующих формул.

В данной статье эффективность поглощения дефекта краевой дислокацией  $Z_{i,v}^d$  принимается равной  $Z_{i,v}^l$ .

Исследование системы уравнений (4.1) проводилось для нитрида бора *BN* и никеля *Ni*. Значения параметров системы приведены в таблице [7; 21].

## 5. Результаты моделирования эволюции точечных и макроскопических дефектов для никеля

Моделирование кинетики точечных и макроскопических дефектов осуществлялось в предположении, что исходный материал близок по своим характеристикам к идеальному монокристаллу, и использовались следующие начальные условия:

$$\begin{array}{ll} C_v(0) = 1 \ {}_{\rm M}{}^{-3}, & N_l(0) = 0 \ {}_{\rm M}{}^{-3}, \\ C_i(0) = 1 \ {}_{\rm M}{}^{-3}, & \rho_v(0) = 1 \ {}_{\rm M}{}^{-3}, \\ \rho_l(0) = 1 \ {}_{\rm M}{}^{-2}, & r_v(0) = 10^{-9}0 \ {}_{\rm M}, \\ r_l(0) = 10^{-9} \ {}_{\rm M}, & N_v(0) = 0 \ {}_{\rm M}{}^{-3}. \end{array}$$

Результаты моделирования кинетики дефектов представлены на рис. 1-4.



Рис. 1. Зависимость концентрации вакансий (*a*) и междоузельных атомов (б) от времени облучения

Как видно из рис. 1, зависимость концентрации междоузельных атомов отличается от зависимости вакансий. Поясним, с чем это связано. В начале облучения происходит почти линейный рост концентраций вакансий и междоузельных атомов. Когда образуется достаточное количество дефектов, они начинают рекомбинировать друг с другом и аннигилировать. На графиках этот момент характе-

75

#### Таблица

#### Значения физических постоянных для никеля и нитрида бора

Физическая постоянная	Значение	
	Никель	Нитрид
		бора
Т, температура	573 K	
<i>G</i> , скорость введения свободно мигрирующих	$10^{-6} \ m^{-3} c^{-1}$	
дефектов	10 , M C	
Е <sup>m</sup> , энергия миграции междоузельного ато-	0.15 aB	0.1 aB
ма	0,10 3D	0,1 5D
$E_v^m$ , энергия миграции вакансии	0,38 эВ	1 эВ
$D_{v0}$ , предэкспоненциальный коэффициент	$6 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \text{c}^{-1}$	$10^{-4} \text{ M}^2 \text{c}^{-1}$
для вакансии	0 10 M C	10
$D_{i0}$ , предэкспоненциальный коэффициент	$1 2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2 \text{c}^{-1}$	$10^{-4} \text{ m}^2 \text{c}^{-1}$
для междоузельного атома	1,2 10 , M C	10 , M C
а, параметр решетки	$3 \cdot 10^{-1}$	10 м
b, модуль вектора Бюргерса	$3 \cdot 10^{-8}$ M	
$ ho_d$ , плотность краевых дислокаций	10 <sup>8</sup> м <sup>-2</sup>	
$\tilde{\varepsilon}_{i0}$ , доля междоузельных атомов, ушедших	10-4	
на образование кластеров в чистом матери-	10	
але		
$\tilde{\varepsilon}_{v0}$ , доля вакансий, ушедших на образование	$10^{-3}$	
кластеров в чистом материале		
$N_l$ , величина, на которую может вырасти	$5 \cdot 10^{12}$	
число дислокационных петель	5 10	
$N_l$ , величина, на которую может вырасти	$5 \cdot 10^{14}$	
число пор	5 10	
$n_i$ , число междоузельных атомов, образую-	5	
щих устойчивый кластер	, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	
$n_v$ , число вакансий, образующих устойчивый	10	
кластер		
$P_i$ , вероятность кластера междоузельных ато-	$10^{-6}$	
мов стать устойчивым		
$P_v$ , вероятность вакансионного кластера	$2 \cdot 10^{-5}$	
стать устойчивым		
<i>N</i> <sub>l0</sub> , начальное число дислокационных петель	100	102
$N_{v0}$ , начальное число пор	100	10'
$\nu$ , коэффициент Шуассона	0,3	0,186
μ, модуль сдвига	$7,7\cdot10^{10}$	389

ризуется наличием максимума у междоузельных атомов и изгибом у вакансий. В дальнейшем, так как междоузельные атомы более подвижны и, соответственно, быстрее уходят на стоки, на графике наблюдается уменьшение концентрации междоузельных атомов, которая с течением времени, как и концентрация вакансий, выходит на насыщение.

На рис. 2 представлены зависимости плотности дислокационных петель и пор. Как и следовало ожидать, данные кривые выходят на насыщение.



Рис. 2. Зависимости плотности дислокационных петель (a) и пор (b) от времени облучения



Рис. 3. Зависимости радиуса дислокационных петель (a) и пор (b) от времени облучения

На рис. 3–4 представлены зависимости радиуса и числа дислокационных петель и пор. Практически все они имеют одинаковый характер: в начале облучения происходит быстрый рост стоков за счет увеличения генерируемых дефектов, который затем выходит на насыщение. Иной характер имеет зависимость радиуса пор от времени облучения. Видно, что радиус пор сначала уменьшается, затем начинает увеличиваться. Это обусловлено тем, что в начальные моменты облучения концентрация междоузельных атомов увеличивается, они активнее начинают рекомбинировать на порах, что приводит к уменьшению их радиуса. В дальнейшем концентрация междоузельных атомов снижается, в результате чего радиус пор начинает увеличиваться.



Рис. 4. Зависимости числа дислокационных петель (a) и пор (b) от времени облучения

## 6. Результаты моделирования эволюции точечных и макроскопических дефектов для нитрида бора

Для моделирования кинетики дефектов нитрида бор<br/>а BN использовались те же начальные условия, что и для никел<br/>яNi.

Полученные зависимости представлены на рис. 5-8.

Представленные на рис. 5 зависимости концентрации междоузельных атомов и вакансий имеют несколько иной характер, чем наблюдалось у никеля. Это связано в первую очередь с тем, что пористость нитрида бора гораздо больше, чем у никеля, соответственно, изначально имеется большее число стоков — пор. А так как эффективность поглощения дефектов порой одинакова для междоузельных атомов и вакансий, то и кривые имеют практически одинаковый вид.



Рис. 5. Зависимость концентрации вакансий (a) и междоузельных атомов (b) от времени облучения

При этом необходимо отметить, что поскольку концентрация вакансий немного превышает концентрацию междоузельных атомов, то для радиуса пор и радиуса дислокационных петель наблюдается линейный рост.



Рис. 6. Зависимости плотности дислокационных петель (a) и пор (б) от времени облучения



Рис. 7. Зависимости радиуса дислокационных петель (a) и пор (b) от времени облучения



Рис. 8. Зависимости числа дислокационных петель (a) и пор $(\delta)$ от времени облучения

# 7. Влияние исходной дислокационной структуры на кинетику точечных дефектов при облучении

Помимо этого были построены зависимости, которые показывают влияние начальной плотности краевых дислокаций в материале на эволюцию точечных дефектов под облучением (рис. 9–10).



Рис. 9. Эволюция концентрации междоузельных атомов в зависимости от плотности краевых дислокаций для никеля (*a*) и нитрида бора (*б*)



Рис. 10. Эволюция концентрации вакансий в зависимости от плотности краевых дислокаций для никеля (*a*) и нитрида бора (*б*)

При получении на рис. 9 и 10 зависимости изменения концентрации элементов пар Френкеля от флюенса и плотности стоков (краевых дислокаций) исходили из численных значений энергетических параметров их взаимодействия, известных для конкретных материалов. Это дает теоретическую основу для разработки способов обработки реакторных материалов с повышенной устойчивостью в изменении свойств, влияющих на продолжительность эксплуатации материалов активной зоны атомных реакторов [22]. Это существенный момент в увеличении экономических показателей атомной промышленности (увеличение флюенса, набираемого в реакторе без остановки на замену деталей, уменьшение количества облученных материалов, требующих захоронения или дорогостоящей очистки). Легко допустить, что наличие других типов искусственно созданных стоков (например, границы областей когерентного рассеяния) также приводит к уменьшению в структуре количества точечных дефектов в разы для флюенса нейтронов.

## Выводы

- 1. Построена модель кинетики накопления радиационных дефектов под облучением, учитывающая их рекомбинацию на дислокационных петлях, краевых дислокациях и порах.
- Проведено математическое моделирование кинетики дефектов до повреждающих доз 30 сна для никеля и нитрида бора. Полученные зависимости согласуются с теоретическими представлениями о характере зависимостей.
- Проведено исследование кинетики дефектов в зависимости от плотности краевых дислокаций. Показано, что увеличение данного параметра приводит к уменьшению концентрации дефектов, что говорит об уменьшении радиационного распухания.

#### Литература

- Косенков В.М., Воробьёв С.А., Колесников А.В. Способ подготовки материалов, преимущественно неметаллических, к использованию в нейтронных полях. Патент RU 2105362 C1 1998.
- [2] Косенков В.М., Корнилов Д.А., Кобылянский Г.П., Силантьев П.П. Способ подготовки материалов к использованию в нейтронных полях. Патент РФ RU 2410775C1 2011.
- [3] Зеленский В.Ф., Некрасов И.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и распухание металлов. Киев: Наукова думка, 1988, 296 с.
- [4] Р.А. Андриевский. Радиационная стойкость наноматериалов // Российские нанотехнологии. 2011. Т. 6. № 5–6. С. 34–42.
- [5] Андриевский Р.А. Влияние облучения на свойства наноматериалов // Физика металлов и металловедение. 2010. Т. 110. № 3. С. 243–254.
- [6] Kosenkov V.M., Vorobjev S.A., Kolesnikov A.V. Radiation swelling decrease by means of explosive wave // J. of Nucl. Mater. 1998. Vol. 258–263. P. 1809–1811.
- [7] Иванов Л.И., Платов Ю.М. Радиационная физика металлов и ее приложения. М.: Интерконтакт Наука, 2002. 300 с.
- [8] Слезов В.В., Субботин А.В., Осмаев О.А. Влияние облучения на временную эволюцию микроструктуры в сплавах. // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 2005. № 5. С. 10–15.
- Слезов В.В. Диффузионная скорость роста макродефектов в ансамблях // ФТТ. 1989. Т. 31. Вып. 8. С. 20–30.
- [10] Borodin V.A., Ryazanov A.I., Sherstennikov D.G. Low-temperature swelling of metals and ceramics // Journal of Nuclear Materials. 1993. № 202. P. 169–179.
- [11] Черняева Т.П., Красноруцкий В.С., Грицина В.М. Цирконий и циркониевые сплавы. Атлас структур (Поры в цирконии и циркониевых сплавах) // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 2005. № 3. С. 78–86.

- [12] Фридель Ж. Дислокации. М.: Мир. 1967. 643 с.
- [13] Углов В.В. Радиационные эффекты в твердых телах. Минск: БГУ, 2011, 207 с.
- [14] Воеводин В.Н., Неклюдов И.М. Проблемы радиационной стойкости конструкционных материалов ядерной энергетики // Вестник Харьковского университета. Сер.: Физическая. 2006. № 4(32). С. 3–22.
- [15] Гуляев А.П. Металловедение. М.: Металлургия, 1986. 544 с.
- [16] Gary S. Was. Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys. Springer, 2007. 827 p.
- [17] Norris D.I. Evolution of dislocation in irradiated austenitic alloys // Radiat. Effects. 1972. Vol. 14. P. 1–12.
- [18] Norris D.I. Dislocation in irradiated austenitic Steels // Radiat. Effects. 1972. Vol. 15. P. 1–8.
- [19] Неустроев В.С. Экспериментальное исследование упрочнения и его корреляции с микротвердостью в облученных аустенитных нержавеющих сталях. В кн.: Моделирование поведения реакторных материалов под облучением. Ульяновск: УлГУ, 2006, С. 35–42.
- [20] Агранович В.М., Кирсанов В.В. Проблемы моделирования радиационных повреждений в кристаллах // УФН. 1976. Т. 118. Вып. 1. 51 с.
- [21] Твердость и прочность высокочистых поликристаллических материалов кубического нитрида бора / И.А. Петруша [и др.] // Актуальные проблемы физики твердого тела: сборник докладов международной научной конференции. Минск: Национальная академия Беларуси, 2005. С. 484–486.
- [22] Уменьшение радиационного распухания графита, обработанного взрывом / В.М. Косенков [и др.] // Атомная энергия. 2005. Т. 99. № 1. С. 43–47.

### References

- Kosenkov V.M., Vorobiev S.A., Kolesnikov A.V. Sposob podgotovki materialov, preimushchestvenno nemetallicheskikh, k ispol'zovaniiu v neitronnykh poliakh [Method of preparing materials, mainly non-metallic, to use in neutron fields]. Patent RU 2105362, published 20.02.1998 [in Russian].
- [2] Kosenkov V.M., Kornilov D.A., Kobyluyansky G.P., Silantiev P.P. Sposob podgotovki materialov k ispol'zovaniiu v neitronnykh poliakh [Method of preparing materials and articles for use in neutron fields]. Patent RU 2410775, published 10.03.2007 [in Russian].
- [3] Zelinsky V.F., Nekrasov I.M., Chernyaeva T.P. Radiatsionnye defekty i raspukhanie metallov [Radiation defects and swelling of metals]. Kiev: Naukovadumka, 1988, 296 p. [in Russian].
- [4] Andrievskii R.A. Radiatsionnaia stoikost' nanomaterialov [Radiation stability of nanomaterials]. *Rossiiskie nanotekhnologii* [Nanotechnologies in Russia], 2011, Vol. 6, No. 5–6, pp. 34–42 [in Russian].
- [5] Andrievskii R.A. Vliianie oblucheniia na svoistva nanomaterialov [Effect of Irradiation on the Properties of Nanomaterials]. *Fizika metallov i metallovedenie* [Physics of Metals and Metallography], 2010, Vol. 110, no. 3, pp. 243–254 [in Russian].
- [6] Kosenkov V.M., Vorobjev S.A., Kolesnikov A.V. Radiation swelling decrease by means of explosive wave. J. of Nucl. Mater, 1998, Vols. 258–263, pp. 1809–1811.
- [7] Ivanov L.I., Platov Yu.M. Radiatsionnaia fizika metallov i ee prilozheniia [Radiation physics of metals and its applications]. Moscow: Interkontakt, Nauka, 2002, 300 p. [in Russian].

- [8] Slezov V.V., Subotin A.V., Osmayev O.A. Vliianie oblucheniia na vremennuiu evoliutsiiu mikrostruktury v splavakh [Irradiation influence on alloys microstructure time evolution]. Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Seriia: Fizika radiatsionnykh povrezhdenii i radiatsionnoe materialovedenie [Problems of Atomic Science and Technology. Topics: Physics of Radiation Effects and Radiation Materials Science], 2005, no. 5, pp. 10–15 [in Russian].
- [9] Slezov V.V. Diffuzionnaia skorost' rosta makrodefektov v ansambliakh [Diffusion growth rate of macro-defects in ensembles]. *FTT* [Solid State Physics], 1989, Vol. 31, no. 8, pp. 20–30 [in Russian].
- [10] Borodin V.A., Ryazanov A.I., Sherstennikov D.G. Low-temperature swelling of metals and ceramics. *Journal of Nuclear Materials*, 202, 1993, pp. 169–179 [in Russian].
- [11] Chernyayeva T.P., Krasnorutsky V.S., Grytsyna V.M. Tsirkonii i tsirkonievye splavy. Atlas struktur (Pory v tsirkonii i tsirkonievykh splavakh) [Zirconium and zirconium alloys. Structure atlas (voids in zirconium and zirconium alloys)]. Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Seriia: Fizika radiatsionnykh povrezhdenii i radiatsionnoe materialovedenie [Problems of Atomic Science and Technology. Topics: Physics of Radiation Effects and Radiation Materials Science], 2005, no. 3, pp. 78–86 [in Russian].
- [12] Friedel J. Dislokatsii [Dislocations]. M.: Mir, 1967, 643 p. [in Russian].
- [13] Uglov V.V. Radiatsionnye effekty v tverdykh telakh [Radiation Effects in Solids]. Minsk: BGU, 2011, 207 p. [in Russian]
- [14] Voyevodin V.N., Neklyudov I.M. Problemy radiatsionnoi stoikosti konstruktsionnykh materialov iadernoi energetiki [Problems of radiation stability of structural materials in nuclear power]. Vestnik khar'kovskogo universiteta. Seriia fizicheskaia. [Bulletin KhNU. Physical series], 2006, Vol. 4(32), pp. 3–22 [in Russian]
- [15] Gulyaev A.P. Metallovedenie [Metallurgical science]. M.: Metallurgiia, 1986, 544 p. [in Russian].
- [16] Gary S. Was. Fundamentals of Radiation Materials Science. Metals and Alloys. Springer, 2007, 827 p. [in English].
- [17] Norris D.I. Evolution of dislocation in irradiated austenitic alloys. *Radiat. Effects*, 1972, Vol. 14, pp. 1–12 [in English].
- [18] Norris D.I. Dislocation in irradiated austenitic Steels. Radiat. Effects, 1972, Vol. 15, pp. 1–8 [in English].
- [19] Neustroev V.S. Eksperimental'noe issledovanie uprochneniia i ego korreliatsii s mikrotverdost'iu v obluchennykh austenitnykh nerzhaveiushchikh staliakh [Experimental study of hardening and its correlation with a microhardness in the irradiated austenitic stainless steels] in Modelirovanie povedeniia reaktornykh materialov pod oblucheniem [Modelling of behaviour of reactor materials under irradiation]. Ulyanovsk: UlGU, 2006, pp. 35–42 [in Russian].
- [20] Agranovich V.M., Kirsanov V.V. Problemy modelirovaniia radiatsionnykh povrezhdenii v kristallakh [Problems of modeling radiation damage in crystals]. (UFN) [Advances in Physical Sciences], 1976, Vol. 118, Issue 1, 51 p. [in Russian].
- [21] Petrusha I.A., Smirnova T.I., Osipov A.S., Stratiychuk D.A., Shishonok N.A. Tverdost' i prochnost' vysokochistykh polikristallicheskikh materialov kubicheskogo nitrida bora. Sbornik dokladov mezhdunarodnoi nauchnoi konferentsii "Aktual'nye problemy fiziki tverdogo tela" [The hardness and strength of high-purity polycrystalline materials of cubic boron nitride. Collection of materials of International scientific conference "Topical issues of solid state physics"]. Minsk, Natsional'naia akademiia Belorusi, pp. 484–486 [in Russian].

[22] Kosenkov V.M., Vorob'ev S.A., Kolesnikov A.V., Subbotin A.V. Umen'shenie radiatsionnogo raspukhaniia grafita, obrabotannogo vzryvom [Decrease of Radiation Swelling of Explosion-Worked Graphite]. *Atomnaia energiia* [Atomic Energy], 2005, Vol. 99, Issue 1, pp. 43–47 [in Russian].

#### D.A. Kornilov, V.M. Kosenkov, P.P. Silantev<sup>2</sup>

### INFLUENCE OF INITIAL DISLOCATION STRUCTURE ON POINT AND MICROSCOPIC DEFECTS KINETIC UNDER IRRADIATION

This work is aimed for justification of quantitative effect of radiation defect concentration decreasing in materials depending on density of edge dislocation which are their outlet. The results of defect kinetics modeling with taking into account their recombination on dislocation loops, edge dislocations and pores are given. The summery of this work is useful in the frame of solving problem of decreasing radiation swelling and material properties degradation during neutron irradiation.

Key words: reactor materials science, nuclear reactor, constructional materials, mechanical properties, microstructure, neutron radiation, reflector of neutrons, radiation defects, X-ray analysis, radiation damageability, beryllium.

Статья поступила в редакцию 10/II/2016. The article received 10/II/2016.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Kornilov Dmitri Alexandrovich (kornilovda@niiar.ru), Kosenkov Vladimir Mikhailovich (kosenkovv1938@mail.ru), Silantev Pavel Petrovich (silantievpp@mail.ru), JSC "SSC RIAR", 9, Zapadnoye Shosse, Dimitrovgrad, Ulyanovsk region, 433510, Russian Federation.