

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Інститут прикладної фізики НАН України

**Наукова робота, представлена
на здобуття щорічної премії Президента України для молодих учених**

ДОСЛІДЖЕННЯ ЕВОЛЮЦІЇ ДЕФЕКТНОЇ СТРУКТУРИ ТА МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ В ОПРОМІНЮВАНИХ КРИСТАЛІЧНИХ СИСТЕМАХ

1. **ЩОКОТОВА Ольга Михайлівна** – кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник відділу моделювання радіаційних ефектів та мікроструктурних перетворень у конструкційних матеріалах Інституту прикладної фізики НАН України
2. **БАШТОВА Анна Іванівна** – кандидат фізико-математичних наук, науковий співробітник відділу моделювання радіаційних ефектів та мікроструктурних перетворень у конструкційних матеріалах Інституту прикладної фізики НАН України

Реферат

2020

Актуальність теми. Істотні прориви у розвитку радіаційних технологій пов'язані із вивченням радіаційних явищ та ефектів у матеріалах, що використовуються як конструкційні для проектування ядерних та термоядерних реакторів. Ці нерівноважні явища є наслідком взаємодії високоенергетичних частинок з твердим тілом, що приводить до утворення нерівноважних дефектів та спричинених ними змін структурно-фазового складу і, як наслідок, фізичних і механічних властивостей (розпухання, радіаційний ріст, окрихчення, зміцнення тощо). Фізика радіаційно-стимульованих процесів є підґрунтям сучасних технологічних розробок при проектуванні та виборі сплавів для потреб атомної енергетики.

З'ясування фізичних змін в опромінюваних твердотільних системах безпосередньо пов'язано з формуванням структурного безладу внаслідок проходження каскадних зміщень атомів кристалів. Тому актуальними на сьогодні є дослідження, спрямовані на вивчення еволюції дефектної структури опромінюваних матеріалів та ефектів, індукованих перерозподілом нерівноважних дефектів кристалічної будови. Подана робота спрямована на вивчення особливостей перерозподілу, дифузії та кластеризації точкових дефектів, утворення дислокаційних петель, вакансійних пор, руху дислокацій та, відповідно, проходження процесів сегрегації (фазового розшарування) в опромінюваних кристалічних системах, дослідження їх механічних властивостей при зовнішньому навантаженні. У дослідженнях особливостей кластеризації точкових дефектів, що проводяться у цій роботі, враховано основні механізми взаємодії дефектів між собою та стоками, а також ураховано вплив деформаційних полів на характер структуроутворення в системі дефектів. Про актуальність дисертаційних досліджень також свідчить розвинення існуючих теоретичних положень та підходів щодо подання та моделювання радіаційно-стимульованих процесів розпаду твердих розчинів та структуроутворення з атермічним атомовим перемішуванням, індукованим проходженням каскадів за наявності флуктуацій швидкості радіаційних пошкоджень та потоку атермічного перемішування. Інформація, одержана в таких дослідженнях, може бути використана для з'ясування радіаційно-стимульованих змін

властивостей опромінюваних твердотільних систем та пояснення експериментальних даних щодо утворення кластерів дефектів, проходження сегрегації, з'ясування стійкості фаз, радіаційного росту та пороутворення.

Метою досліджень є розвинення послідовного опису мікроструктурних перетворень у рамках мультимасштабного моделювання у системах, що перебувають у сильно нерівноважних умовах, викликаних дією опромінення. У даній роботі на основі застосування аналітичних підходів та методів числового моделювання, реалізовано дослідження матеріалів під опроміненням, використано методи Монте-Карло, метод Вінера-Гопфа, розвинуто існуючі підходи теорії фазового поля кристалу для дослідження поведінки дефектів кристалічної структури при опроміненні та рекристалізації та запропоновано теорію мікроструктурних перетворень у кристалічних матеріалах, підданих опроміненню та зовнішньому навантаженню, побудовано аналітичні розв'язки плоских контактних задач для пружного клина, що можуть бути використані для визначення характеристик напружено-деформованого стану зерноподібних компонент кусково-неоднорідної структури реакторних матеріалів. Практичне значення такого підходу полягає у тому, що його використання дозволяє прогнозувати зміни властивостей конструкційних матеріалів, що зазнають тривалого радіаційного впливу.

Наукова новизна отриманих результатів полягає у тому, що вперше:

- показано, що процеси самоорганізації в системі точкових дефектів з виникненням компактних кластерів, дислокаційних петель та пор пов'язані з локальними деформаційними нестійкостями, генерованими самими дефектами, їхньою просторовою взаємодією та флуктуаціями швидкості радіаційних пошкоджень;
- у рамках використання стохастичного підходу для дослідження процесів формування дефектних структур вакансійного типу виявлено, що флуктуації швидкості набору дози прискорюють просторовий перерозподіл дефектів у скупчення з нанометровим розміром;

- встановлено, що флуктуації швидкості набору дози збільшують критичний радіус вакансійних пор, зі збільшенням інтенсивності стоків точкових дефектів відбувається уповільнення процесу росту пор з переходом від сценарію Алена-Кана до режиму Ліфшиця-Сльозова-Вагнера (зі спаданням показника росту середнього розміру пори з часом від значення $1/2$ до $1/3$);
- з'ясовано, що при кластеризації вакансій у приповерхневих шарах тонких плівок процеси відбору структур відбуваються внаслідок взаємозв'язку між концентрацією дефектів і локальними змінами температури приповерхневого шару, при зростанні швидкості пошкоджень відбувається зміна морфології вакансійних кластерів;
- виявлено, що при збільшенні швидкості набору дози опромінення радіаційностимульоване випадіння фаз у бінарному твердому розчині за вакансійним механізмом трансформується у процес формування структур вакансій, перерозподіл вакансій приводить до уповільнення спінодального розпаду відповідно до зворотного ефекту Кіркендала;
- із застосуванням методу Вінера – Гопфа розроблена методика визначення двовимірного напружено-деформованого стану клиноподібних пружних тіл в умовах гладкого та фрикційного контакту зі штампом, за якою вперше отримано аналітичні розв'язки відповідних плоских контактних задач, на основі яких проведено модельне дослідження контактної взаємодії зерноподібних компонент кусково-неоднорідної структури матеріалів.
- моделювання механічних навантажень у бінарному сплаві Zr-Nb показало, що формування ліній проковзування та дислокацій у опроміненому зразку при збільшенні швидкості набору дози відбувається при вищих значеннях прикладеної деформації, що підтверджує підвищення опірності матеріалу пластичній деформації.

Практична значимість. Отримані у роботі результати можуть бути використані для пояснення процесів формування кластерів дефектів та виникнення

дислокаційних петель і пор у конструкційних матеріалах, що зазнають сталої дії опромінення в режимах опромінення в реакторах та на прискорювачах у широкому інтервалі температур та швидкостей пошкоджень. Вони можуть бути застосовані для пояснення радіаційно-стимульованих процесів сегрегації за вакансійним та дислокаційним механізмами у дво- та багатокомпонентних сплавах та оцінювання значень величин, що характеризують розпухання та радіаційний ріст існуючих та нових матеріалів, що експлуатуються в умовах радіаційного опромінення. Розвинуті підходи можуть бути корисними для моделювання і прогнозування стійкості матеріалів, зокрема на основі цирконію, до механічних навантажень з встановленням умов виникнення смуг пластичної течії при деформації; виявлення впливу параметрів опромінення, а саме температури опромінення, дози опромінення та швидкості набору дози, на критичні значення напружень та деформацій, що відповідають межі міцності та текучості, що є важливим при виборі сплавів для конструкційних елементів реакторів нового покоління.

Структура та зміст роботи. За структурою цикл наукових праць складається із вступу, шести змістовних розділів, загальних висновків, списку використаних джерел із 119 найменувань, списку опублікованих робіт, що ввійшли до циклу наукових праць, списків публікацій кожного автора та копій основних статей. Опис циклу викладено на 197 сторінці з 87 рисунками та 6 таблицями. Загалом роботу викладено на 243 сторінках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** розкривається сутність та стан наукової проблеми, визначено актуальність проведених досліджень, вказано мету і задачі дослідження, розкривається зміст роботи.

У **першому** розділі проведено модельне дослідження контактної взаємодії зерен кусково-неоднорідної структури у матеріалах. Розглядається модель структури на прикладі взаємодії трьох зерен різної жорсткості, з яких пружне зерно містить кутову точку та має клиноподібну форму і взаємодіє з жорсткими зернами карбідів. Розглядувану схему взаємодії зерен кусково-

неоднорідної структури ми моделюємо відповідною схемою взаємодії пружних та абсолютно жорстких тіл контактної механіки, а саме приходимо до змішаної задачі контактної механіки для пружного клина, розв'язок якої отримуємо із застосуванням методу Вінера – Гопфа.

У **другому** розділі на основі розвиненої швидкісної теорії, яка враховує процеси взаємодії точкових дефектів, проводиться дослідження процесів формування скупчень дефектів вакансійного типу у припущенні про швидкоплинність процесів руху міжвузлів та їх вихід на стоки. Показано, що за умови врахування процесів генерації дефектів пружним полем самих дефектів в такій системі можливими стають бістабільні стаціонарні стани. Проаналізовано типи структур дефектів та знайдено умови їх реалізації при варіюванні швидкості дефектоутворення та температури опромінення. Розвинута детерміністична модель узагальнюється урахуванням флуктуацій швидкості пошкоджень відповідно до флуктуаційно-дисипаційної теореми. Проводиться дослідження впливу стоків на динаміку структуризації вакансій у кластери та аналізується динаміка стоків.

Метою **третього** розділу є встановлення мікроскопічних характеристик опромінення та розроблення моделі динаміки точкових та лінійних дефектів для вивчення динаміки дефектів, що утворюються в чистому цирконії при опроміненні потоками нейтронів при сталих температурах опромінення при різному вмісті дислокацій у дислокаційній сітці та при різних енергіях нейтронів. Проведено аналіз поведінки стаціонарних значень концентрації вакансій та вивчення впливу опромінення на властивості коефіцієнту самодифузії атомів цирконію. Встановлено умови самоорганізації ансамблю вакансій в кластери при врахуванні взаємодії точкових дефектів із полями пружних напружень кристалу. Вивчено зміну пружних полів при деформації кристалу цирконію, що містить вакансійні кластери.

Четвертий розділ присвячено дослідженню процесів відбору структур вакансійного типу у опромінюваних металевих плівках за наявності нестійкостей Грінфелда (які належать до класу нестійкостей Маллінса-Секеркі), де чітко виражені коливання температури на поверхні, і порівняння з відповідними проце-

сами всередині матеріалу. У даному дослідженні розглядаються два пов'язаних між собою поля, а саме, концентрації точкових дефектів та локальної температури приповерхневого шару. Наводиться модель класу подібних систем та встановлюються умови проходження процесів відбору структур.

У **п'ятому** розділі досліджується динаміка росту розміру пор в рамках швидкісної теорії з включенням стохастичних ефектів в утворення дефектів, а також проводиться вивчення впливу зовнішнього шуму на процеси росту пор. Проводиться аналіз для однорідної моделі та досліджується процес росту пор у розподіленій системі дефектів з деформаційними нестійкостями. Проводиться опис впливу зовнішніх флуктуацій на критичний радіус та робиться оцінка кросоверу динамічних режимів за наявності додаткових стоків точкових дефектів. Досліджується універсальна динаміка росту та проводиться числове моделювання.

Шостий розділ присвячено дослідженню нерівноважних процесів фазового розшарування у твердих бінарних розчинах, індукованих дією опромінення. Розглянуто процеси перерозподілу нерівноважних вакансій при спінодальному розпаді бінарного твердого розчину, що знаходиться при сталій дії опромінення в рамках узагальнення теорії Кана-Хільярда та підходу Даркена, де враховується деформаційні нестійкості обумовлені взаємодією дефектів, яка враховує формування структурного безладу внаслідок опромінення. Досліджено кінетику розпаду та структуроутворення, статистичні розподіли полів концентрації розчину та концентрації вакансій за різних швидкостей набору дози опромінення. Розглянуто мікроструктурні перетворення та еволюцію дефектної структури в бінарній системі Zr-Nb при нейтронному опроміненні. Основна увага приділяється розробці та застосуванню розроблених підходів, заснованих на комбінованому використанні теорій фазового поля, теорії швидкісних реакцій та теорії пружності для дослідження мікроструктурних перетворень, перегрупування нерівноважних точкових дефектів, збільшення дислокаційних петель та зміни механічних властивостей при різного виду навантаженнях пов'язаних зі зростанням дози опромінення.

Публікації. В наукову роботу «Дослідження еволюції дефектної структу-

ри та механічних властивостей в опромінюваних кристалічних системах» входять 40 публікацій, зокрема 15 статей у періодичних наукових журналах, з яких 10 – у виданнях, що індексуються наукометричною базою даних Scopus, та 25 тез доповідей. Загальна кількість цитувань публікацій складає 60 згідно баз даних Scopus, 58 згідно Google Scholar, 54 згідно Web of Science, *h* індекси: Баштова А.І. – 4, Щокотова О.М. – 3, *h*-індекс роботи згідно баз даних Scopus - 3, Google Scholar - 1, Web of Science - 3.

ВИСНОВКИ

1. Розроблено методику визначення напружено-деформованого стану пружного клина в умовах плоскої деформації за гладкого та фрикційного контакту зі штампом різної форми. Із застосуванням методу Вінера – Гопфа знайдені аналітичні розв'язки контактних задач теорії пружності для клина з однією закріпленою гранню, що дозволяє дослідити контактну взаємодію зерноподібних компонент кусково-неоднорідної структури реакторних матеріалів та дає можливість визначити характеристики напружено-деформованого стану зерен з урахуванням особливостей їх геометрії та умов контакту між ними.

2. Проведено узагальнення динамічного підходу еволюції точкових дефектів та їх стоків із урахуванням процесів генерування дефектів полями деформації та взаємодією дефектів за наявності флуктуацій швидкості радіаційних пошкоджень. Установлено, що виникнення локальних деформаційних нестійкостей в обмеженому інтервалі температур та швидкості генерації дефектів приводить до формування бістабільних станів та утворення вакансійних комплексів у вигляді кластерів нанометрових розмірів.

3. Установлено, що флуктуації швидкості пошкоджень прискорюють процеси структуроутворення незалежно від умов опромінення. Виявлено, що при зниженні температури та підвищенні швидкості пошкоджень відбувається зміна морфології вакансійних структур; флуктуації швидкості набору дози пригнічують ріст густин петель при опроміненні за реакторних умов.

4. Із застосуванням швидкісної теорії розроблено кінетичну модель еволюції дефектної структури чистого цирконію, що враховує динаміку стоків.

Встановлено, що внаслідок генерації великої кількості нерівноважних дефектів та процесів взаємодії та нелінійних ефектів вакансії збираються у кластери при перевищенні критичного значення концентрацією вакансій внаслідок взаємодії з пружними полями кристалу.

5. При дослідженні динаміки пороутворення виявлено, що флуктуації швидкості набору дози збільшують критичний радіус пори внаслідок ефективного зростання температури системи дефектів. У випадку домінуючого внеску дислокацій розмір пори еволюціонує відповідно до динаміки Ліфшиця-Аллена-Кана з показником росту $1/2$; у випадку, коли пори є основними стоками, ріст розміру пори описується за сценарієм Ліфшиця-Сльозова-Вагнера з динамічним показником $1/3$.

6. Установлено, що внаслідок взаємозв'язку між локальними змінами концентрації точкових дефектів та температурою у приповерхневих шарах опромінюваних іонами металевих тонких плівок проходять процеси відбору структур з утворенням вакансійних кластерів. Флуктуації швидкості радіаційних пошкоджень приводять до зменшення критичних значень швидкості генерування дефектів та температури мішені, за яких можливе проходження відбору структур.

7. При дослідженні процесів поділу фаз в опромінюваних бінарних сплавах з несумірними коефіцієнтами самодифузії в рамках узагальненої моделі Кана-Хіллярда, яка враховує формування структурного безладу, виявлено, що зі збільшенням швидкості дефектоутворення процеси спінодального розпаду замінюються процесами формування просторових вакансійних структур. З'ясовано, що формування кластерів вакансій за цим механізмом супроводжується відбором структур.

8. Моделювання механічних навантажень у бінарному сплаві Zr-Nb показало, що формування ліній проковзування та дислокацій у опроміненому зразку сплаву при збільшенні швидкості набору дози відбувається при вищих значеннях прикладеної деформації, що підтверджує підвищення опірності матеріалу пластичній деформації. Аналіз деформаційних кривих показав, що

межі текучості та міцності збільшуються зі швидкістю набору дози та зменшуються із підвищенням температури. Показано, що опромінення призводить до зміцнення сплаву Zr-Nb та підвищення стійкості до пластичної деформації.

9. Розглядаючи вплив дислокацій невідповідності, ми виявили, що розмір включень β -ніобію зменшується зі швидкістю набору дози при фіксованій температурі. Ядра дислокацій локалізуються на границях поділу фаз. Було встановлено, що збільшення дози опромінення призводить до зростання густини дислокацій невідповідності, що сприяє утворенню великої кількості малих доменів β -фази ніобію.

Претенденти:

н.с. ІПФ НАН України

О.М. Щокотова

н.с. ІПФ НАН України

А.І. Баштова

Учений секретар ІПФ НАН України

к.ф.-м.н.

О.І. Ворошило