

*На правах рукописи*

**ХАСАНОВ Фархат Асгатович**

**АКТИВАЦИЯ, СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ И  
РАДИАЦИОННОЕ УПРОЧНЕНИЕ РЯДА  
МАЛОАКТИВИРУЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ**

Специальность: 01.04.07- Физика конденсированного состояния

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва - 2009

Работа выполнена в Учреждении Российской академии наук Институте металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова (ИМЕТ РАН) и Московском Государственном Индустриальном Университете (МГИУ).

Научные руководители: доктор физико-математических наук,  
Платов Юрий Михайлович

доктор химических наук,  
Колотов Владимир Пантелеймонович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,  
профессор Захаров Андрей Петрович

доктор физико-математических наук,  
профессор Бондаренко Геннадий Германович

Ведущая организация: Научно-исследовательский институт ядерной  
физики (НИИЯФ МГУ), г. Москва.

Защита состоится « 18 » июня 2009 г. в 14.00 часов на заседании Диссертационного Совета Д.002.060.01 в Учреждении Российской академии наук Институте металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова (ИМЕТ РАН) по адресу: 119991, ГСП-1, г. Москва, Ленинский проспект, дом 49.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Учреждения Российской академии наук Института металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова (ИМЕТ РАН).

Автореферат разослан « 16 » мая 2009 г.

Ученый секретарь Диссертационного Совета  
доктор технических наук, профессор

Блинов В.М.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность работы:

Основные экологические проблемы современной ядерной энергетики связаны с радиологическими аспектами демонтажа топливных сборок и конструктивных элементов реакторов, переработки и захоронения радиоактивных отходов. Радиоактивные отходы активной зоны реакторов деления на тепловых и быстрых нейтронах, а в перспективе отходы конструкций реакторов термоядерного синтеза представляют особую экологическую опасность, поскольку наряду с высокоактивными конструкционными материалами содержат долгоживущие радиоактивные компоненты ядерного топлива и радионуклиды осколков деления.

Эффективным методом решения проблемы является применение в реакторостроении, так называемых малоактивируемых материалов [1]. Эти материалы отличаются ускоренным спадом наведенной радиоактивности по сравнению с традиционно применяемыми в настоящее время конструкционными металлическими материалами. При этом по радиационной стойкости малоактивируемые материалы не должны уступать их традиционным прототипам.

Новое направление в радиационном материаловедении по разработке малоактивируемых материалов может дать большой экологический, экономический и социальный эффект за счет повышения эксплуатационной безопасности ядерной энергетики, упрощения технологии переработки и утилизации радиоактивных конструкций выводимых из эксплуатации атомных реакторов, снижения стоимости строительства и эксплуатации хранилищ для их захоронения.

В рамках развития этого направления существенную роль играет компьютерное моделирование ядерных трансмутаций в облучаемых материалах с целью оценки выгорания и наработки элементов и их изотопов, расчета параметров активации материалов и динамики ее снижения во времени.

В совокупности с исследованиями по влиянию трансмутационных ядерных превращений на свойства материалов особое внимание в диссертационной работе уделено влиянию радиационных дефектов на структурно-фазовые изменения и радиационную повреждаемость малоактивируемых металлических материалов, что представляет несомненную актуальность для радиационной физики металлов и радиационного материаловедения. В частности, исследовано влияние облучения электронами на процессы зарождения и роста дислокационных междоузельных петель в ванадии, алюминии и его сплавах, которые в значительной степени определяют структурно-фазовую нестабильность и радиационную повреждаемость металлических материалов.

---

<sup>1</sup> Иванов Л.И., Платов Ю.М. Радиационная физика металлов и ее приложения. М. Интерконтакт Наука, 2002 , 300с.

**Цель работы** состояла в следующем:

Исследование структуры и свойств конструкционных малоактивируемых материалов при облучении.

В соответствии с поставленной целью в работе решали следующие **задачи**:

- модернизация программного обеспечения АСТИВА для оценки ядерных трансмутаций при облучении нейтронами и др. активирующим излучением;
- оценка ядерных трансмутаций с использованием компьютерного моделирования воздействия нейтронов деления и синтеза на фазовую стабильность и свойства ряда перспективных малоактивируемых конструкционных материалов: их активация, выгорание и наработка элементов;
- исследование влияния электронного и нейтронного облучения на процессы зарождения и роста дислокационных междуузельных петель в ванадии, алюминии и его сплавах;
- разработка модельных представлений, описывающих процессы эволюции дислокационных междуузельных петель и радиационного упрочнения и охрупчивания при облучении.

**Научная новизна работы** состоит в следующем:

- модернизированы алгоритмы и полностью переработан код отечественной программы АСТИВА для расчета трансмутационных превращений при нейтронном облучении материалов;
- оценены ядерные трансмутации и рассчитана кинетика спада наведенной радиоактивности для алюминия и его сплавов: Al-99,999%, Al-0,01%Sc, Al-1,0%Sc, Al-2%Mg-0,1%V, Al-2%Mg-0,2%Sc-0,1%V-0,15%Zr, Al-2%Mg-0,38%Sc-0,02%Ce-0,15%Zr, при нейтронном облучении в реакторах ВВЭР-1500, ВВР; проведено сравнение активационных свойств корпусной стали СК-15 (15Х2НМФА) и сплава Al-2%Mg-0,38%Sc-0,02%Ce-0,15%Zr, как перспективного конструкционного материала для реактора типа ВВЭР;
- сделан прогноз возможных фазовых изменений сплавов V-4Ga, V-Ga-Si и V-4Cr-4Ti при их облучении нейтронами термоядерного реактора различного флюенса в результате ядерных трансмутаций элементов; оценено пороговое значение флюенса нейтронов, при котором эти сплавы критически деградируют;
- сделан прогноз фазовой стабильности ферритных сталей Fe-9Cr-W-V-Mn и ЭК-181 при облучении нейтронами реактора БН-600 при различном флюенсе путем расчета хромо-никелевых эквивалентов и использования фазовой диаграммы Шеффлера-Шнейдера;
- предложена кинетическая модель, включающая в себя анализ инкубационного периода образования зародышей петель, стадии стационарного зарождения петель и выхода общей концентрации междуузельных атомов в петлях на насыщение;
- впервые определены основные параметры зарождения петель в ванадии, алюминии и его сплавах: число атомов в зародышах критического и закритического размеров, фактор Зельдовича и свободная энергия Гиббса

образования зародышей критического размера; рассчитан ряд параметров, характеризующих рост петель при их постоянной плотности в зависимости от скорости введения дефектов, чистоты материалов и температуры облучения;

- с использованием предложенной в диссертации формулы, описывающей кинетику радиационного упрочнения, обусловленного образованием дислокационных междуузельных петель, проведены оценки радиационного упрочнения в ванадии, алюминии и его сплавов на основе электромикроскопических данных по зарождению и росту дислокационных междуузельных петель в этих металлах.

### **Практическая ценность**

- Модернизировано программное обеспечение АСТИВА для оценки ядерных трансмутаций при облучении нейтронами и др. активирующим излучением. Программа имеет развитый пользовательский интерфейс, создана в архитектуре объектно-ориентированного программирования на языке C#, обновлены библиотеки ядерно-физических данных, упрощена компиляция атласа активации, который может быть использован для практических расчетов сторонними пользователями.

- Проведены систематические расчеты активации, кинетики спада наведенной радиоактивности, а также выполнены оценки допустимых содержаний элементов в малоактивируемых конструкционных материалах, после облучения нейтронами различных ядерных установок (реакторы деления на тепловых и быстрых нейтронах, а также реакторы термоядерного синтеза).

- Показано, что сплавы на основе алюминия и, в частности, системы Al-Mg-Sc могут быть использованы в качестве конструктивных малоактивируемых материалов ядерных реакторов деления. Определены радионуклиды, контролирующие остаточную радиоактивность низколегированной стали СК-15 и сплавов на основе алюминия. Приведены элементы, на которых эти радионуклиды нарабатываются.

- На основании результатов панорамного анализа реальных образцов материалов и шихтовых материалов выполнены расчеты активации и кинетики спада наведенной радиоактивности и мощности дозы для сталей Fe-9Cr-W-V-Mn и ЭК-181 (реактор БН-600) и сплавов на основе ванадия V-4Ga, V-Ga-Si и V-4Cr-4Ti (термоядерный реактор).

- На основе предложенной кинетической модели, описывающей процесс эволюции междуузельных петель, разработано программное обеспечения для расчета параметров зарождения и роста дислокационных петель – «Dloops» [2]. При помощи данной программы оценены параметры зарождения и роста дислокационных междуузельных петель в ванадии, алюминии и его сплавов с Mg, Zn и Sc.

- Получена формула, корректно описывающая экспериментальные данные и прогнозирующая радиационное упрочнение материалов при более высоких дозах облучения.

### **Основные положения**, выносимые на защиту:

- модернизация программного обеспечения АСТИВА для расчета активации и ядерных трансмутаций при нейтронном облучении материалов; новая объектно-ориентированная модель программного комплекса;
- сравнительные результаты расчета ядерных трансмутаций, активации, кинетики спада наведенной радиоактивности и мощности дозы для ряда конструкционных материалов при облучении нейтронами различного энергетического распределения, а так же значения предельно допустимых концентраций элементов с точки зрения вклада в активацию материала для ядерных установок;
- прогноз возможных фазовых изменений сплавов V-4Ga, V-Ga-Si и V-4Cr-4Ti при их облучении нейтронами термоядерного синтеза при различных флюенсах; оценка порогового значения флюенса нейтронов, при котором эти сплавы критически деградируют;
- прогноз фазовой стабильности ферритных сталей Fe-9Cr-W-V-Mn и ЭК-181 при их облучении нейтронами реактора БН-600 при различном флюенсе путем расчета хромо-никелевых эквивалентов и положения на фазовой диаграмме Шеффлера-Шнейдера;
- кинетическая модель, описывающая процесс зарождения и роста дислокационных петель в ванадии, алюминии и его сплавах; оценка ряда параметров, характеризующих рост петель в зависимости от скорости введения дефектов, чистоты материалов и температуры облучения;
- оценка параметров радиационного упрочнения в ванадии, алюминии и его сплавов с использованием полученной в диссертации формулы, описывающей кинетику упрочнения в облучаемых материалах, на основе электрономикроскопических данных по размерам и плотности дислокационных петель;

### **Апробация работы** проводилась на следующих научных конференциях:

1. Международный конгресс по аналитической химии (ICAS-2006), Москва, 25-30 июня 2006 г.;
2. Российская конференция «Материалы ядерной техники», (МАЯТ–ОФИЭ–2006) Агой, Краснодарский край, 3-7 октября 2006 г.;
3. Конференция молодых ученых в ИМЕТ РАН, Москва, 20-24 ноября 2006 г.;
4. XVII Международное совещания «Радиационная физика твердого тела», Севастополь, 9-14 июля 2007 г.;
5. Российская конференция «Материалы ядерной техники», (МАЯТ–ОФИЭ–2007), Звенигород, МО, 18-22 ноября 2007 г.;
6. VIII Межвузовская научная школа молодых специалистов, Москва, 24-25 ноября 2008 г.;
7. XXXVIII Международная конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами, Москва, 27-29 мая 2008 г.;
8. Отраслевой семинар «Физика радиационных повреждений материалов атомной техники», Обнинск, Калужская область, 21-23 апреля 2009 г.

## Структура и объем работы.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, выводов, приложений и списка использованной литературы. Общий объем диссертации составляет 168 страниц, включая 49 рисунков и 26 таблиц.

## Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность темы работы, сформулированы цели исследования, представлены положения выносимые на защиту, а так же кратко представлена структура диссертации.

**Первая глава** содержит обзор литературы по теме работы. Она состоит из четырех частей. В первой части рассматривается концепция разработки малоактивируемых материалов, которая основана на использование для их производства химических элементов, обладающих наибольшими скоростями спада наведенной радиоактивности. Это означает, что после определенного периода выдержки остановленного реактора, он может быть демонтирован с применением робототехники ( $1 \cdot 10^{-2}$  Зв/ч) или вручную без использования средств специальной защиты (28 мкЗв/ч). Во второй части кратко описана структура и основные особенности программного комплекса АСТИВА, который является первым и пока единственным российским продуктом, обеспечивающим расчет активации облученных материалов, кинетики последующего спада наведенной радиоактивности, а также наработки и выгорания элементов для задач разработки малоактивируемых материалов и дано ее сравнение с аналогичными программами. В третьей части обзора описаны основные принципы разработки малоактивируемых металлических материалов:

- Выбор матричных и легирующих элементов металлических конструкционных материалов.
- Роль примесных элементов и оценка их допустимых концентраций.
- Применение изотопно-обогащенных элементов при создании малоактивируемых материалов.
- Нарботка газообразующих элементов, дегазация облученных материалов
- Выбор шихтовых материалов.

В четвертой части рассмотрены структурно-фазовые изменения металлических материалов при облучении. Описаны процессы взаимодействия радиационных дефектов друг с другом и атомами растворенных элементов зарождения и роста дислокационных петель и пор. Рассмотрены механизмы миграции междоузельных атомов и вакансий, и атомов растворенных элементов в комплексе с точечными дефектами.

На Рис.1 и Рис.2 в схематическом виде представлены зависимости, отражающие процессы классической теории зарождения, роста и коагуляции выделений второй фазы при распаде твердых растворов [3] и, как отмечено в

---

3 Russell K.C. Advances in Colloid and Interface Science.,1980, №3/4, p.205.

работе [4], данная схема соответствует и процессам эволюции дислокационных петель при облучении. Эти представления впервые были использованы для анализа экспериментальных данных, как взятых из литературы, так и полученных в диссертационной работе.

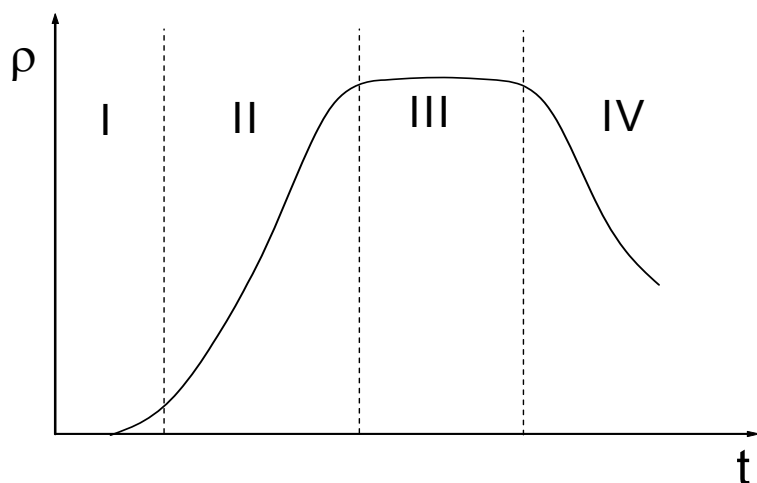


Рис.1. Схематическая зависимость изменения плотности петель (в общем случае выделений в процессе фазового превращения) от времени облучения. I – инкубационный период, II – период стационарного зарождения, III – период роста петель при постоянной плотности, VI – период коагуляции.

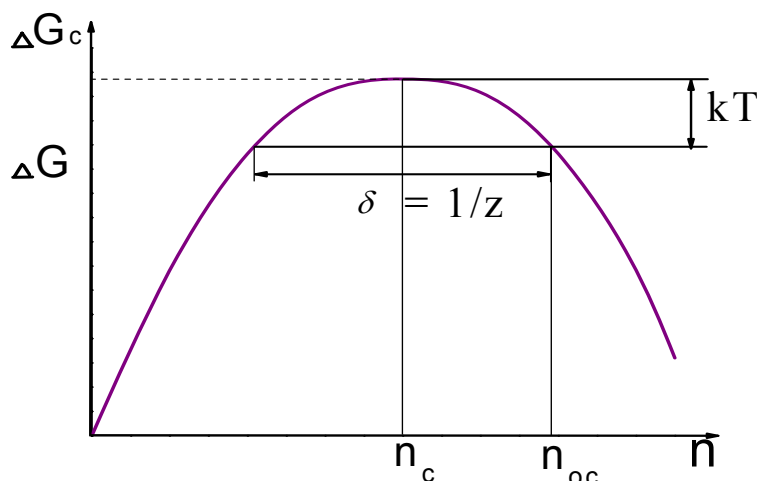


Рис.2. Схематическая зависимость изменения свободной энергии Гиббса  $\Delta G$  от числа междоузельных атомов в зародышах фаз и петель.

где  $\Delta G_c$  – соответствует энергии образования критического зародыша  $n_o$ ,  $\delta$  – ширина энергетического барьера для зарождения,  $Z$  – фактор Зельдовича,  $n_{oc}$  – число атомов в зародышах закритического размера, которые в отличие от зародышей критического размера в дальнейшем растут с вероятностью, равной единице.

Заключительная часть посвящена фазовым изменениям в металлических материалах при облучении. Рассмотрены процессы и механизмы в рамках традиционных представлений, обусловленных процессами упругих взаимодействий заряженных частиц и нейтронов с атомами кристаллической решетки, а также фазовые изменения, рассматриваемые на основе процессов неупругих взаимодействий излучений с атомами кристаллической решетки материалов.

4 Russell K.C., Powell R.W. Dislocation loop nucleation in irradiated metals. Acta Met., 1973, v.21, p.187-193.



Кратко рассматриваются основные механизмы повреждения конструкционных металлических материалов при облучении. Для конструкционных материалов, основную роль в деградации эксплуатационных свойств играют механизмы, приводящие к их упрочнению и охрупчиванию, ускорению ползучести, разупрочнению и распуханию.

**Во второй главе** приведены составы исследуемых сплавов, методики их получения, дано описание используемых методов исследований.

В работе использовали два типа металлических материалов: с гранецентрированной кубической решеткой (алюминий и его сплавы) и объемноцентрированной кубической решеткой (ванадий и его сплавы, ферритные стали).

Образцы алюминия чистотой 99,999 % и бинарных сплавов алюминия облучали в высоковольтном электронном микроскопе JEM-1000 в интервале температур от 20 до 150°C. Интенсивность облучения составляла  $6,15 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  и  $1,48 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ . Электролитический ванадий V-99,98% облучали при комнатной температуре пучком электронов с разными интенсивностями  $6,15 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  и  $4,42 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$  (JEM-1000). Образцы ванадия чистотой 99,52% облучались на ускорителе У-10 электронами с энергией 2,2 МэВ. Интенсивность пучка электронов облучения составляла  $1,1 \cdot 10^{18} \text{ м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ .

Для корректной оценки динамики спада наведенной радиоактивности необходимо определять в пробе максимально возможное число химических элементов, что подразумевает использование методов панорамного анализа (т.е. методов, обеспечивающих определение максимально возможного числа элементов).

Для исследования структуры в исходных и облученных сплавах алюминия и ванадия использовался в работе метод просвечивающей электронной микроскопии. Изучение структуры сплавов проводилось при комнатной температуре и вплоть до 150° С в светлом и темном полях методом слабых пучков. Метод слабых пучков имеет высокое разрешение, позволяет проводить исследования скоплений дефектов (от ~ 1 нм): дислокационных петель и пор.

Диаметр и плотность петель измеряли на фотографиях при увеличении  $\sim 2 \cdot 10^5$ . Концентрация междоузельных атомов в петлях рассчитывалась по формуле:

$$c = \frac{\pi \bar{d}^2 b \rho}{4} \quad (1)$$

где  $\bar{d}^2$  - средний квадрат диаметра петель,  $b$  - модуль вектора Бюргерса,  $\rho$  - плотность петель. Максимальная относительная ошибка при определении концентрации точечных дефектов не превышает 30 % (для малых скоплений до 5 нм).

Расчеты по активации облученных материалов, кинетики последующего спада их наведенной радиоактивности и мощности дозы, а также расчеты наработки и выгорания элементов для задач разработки малоактивируемых

материалов проведены с использованием программного комплекса АСТІВА (включая и ее модернизированной версии WinActiva). Модернизация проведена в ходе выполнения данной работы.

Представлены нейтронные спектры, которые были использованы при расчетах.

**В третьей главе** описана модернизация программного комплекса АСТІВА, а так же результаты расчетов активации и трансмутационных превращений при облучении чистых элементов и сплавов на основе алюминия.

Первым этапом модернизации программного обеспечения стала полная переработка кода с использованием объектно-ориентированного языка программирования С# для работы в операционной системе WINDOWS NET. Разработана оригинальная объектная модель (структура взаимосвязанных классов) и современный и логичный интерфейс программного комплекса WinActiva. Усовершенствованы алгоритмы с целью расширения функциональности программы, а также проведено обновление библиотеки ядерных данных. В результате модернизации пользователь имеет возможность динамического подключения различных библиотек ядерных данных, а благодаря встроенному взаимодействию с реляционными базами данными имеется возможность автоматически компилировать атлас активации для любого нейтронного спектра и проводить ряд дополнительных расчетов.

Были проведены сравнительные расчеты изменения элементного состава стали ЭК-181 (Fe-12Cr-W-Ta-V) по программам WinActiva и FISPACT (используется в Европейском союзе). Показано, что для большинства элементов, рассчитанные значения достаточно близки. Небольшие расхождения могут объясняться возможным различием ядерно-физических данных.

Для сравнения активационных свойств различных элементов, используемых в качестве основы конструкционных материалов, проведены расчеты для различных нейтронных спектров реакторов: ДЕМО, ВВЭР-1500, БОР-60, БН-600 (см. Рис.3). Ранее, подобные комплексные расчеты, насколько нам известно, проведены только для спектров ДЕМО и БОР-60. Лишь нескольких элементов - ниобия, молибдена, никеля и алюминия мощность дозы наведенных радионуклидов не достигает безопасного уровня даже в течение ста лет выдержки.. Это связано с образованием долгоживущих радионуклидов с высокой гамма-постоянной ( $Nb^{94}$   $2,03 \cdot 10^4$  лет,  $Nb^{91}$  680 лет,  $Mo^{93}$   $4,0 \cdot 10^3$  лет,  $Ni^{59}$   $7,6 \cdot 10^4$  лет,  $Al^{26}$   $7,6 \cdot 10^5$  лет). Хорошую динамику спада активности показывают облученные Cr, V, Ti, Ga и др. Железо, являющееся основой радиационностойких жаропрочных сталей, широко применяемых в реакторостроении, показывает спад дозы до безопасного уровня за несколько десятилетий, что также приемлемо. Из сравнения динамики спада мощности дозы для различных нейтронных спектров (см. Рис.3) можно сделать вывод, что малоактивируемые материалы, разработанные для термоядерного реактора, полностью подходят и для реактора на быстрых нейтронах.

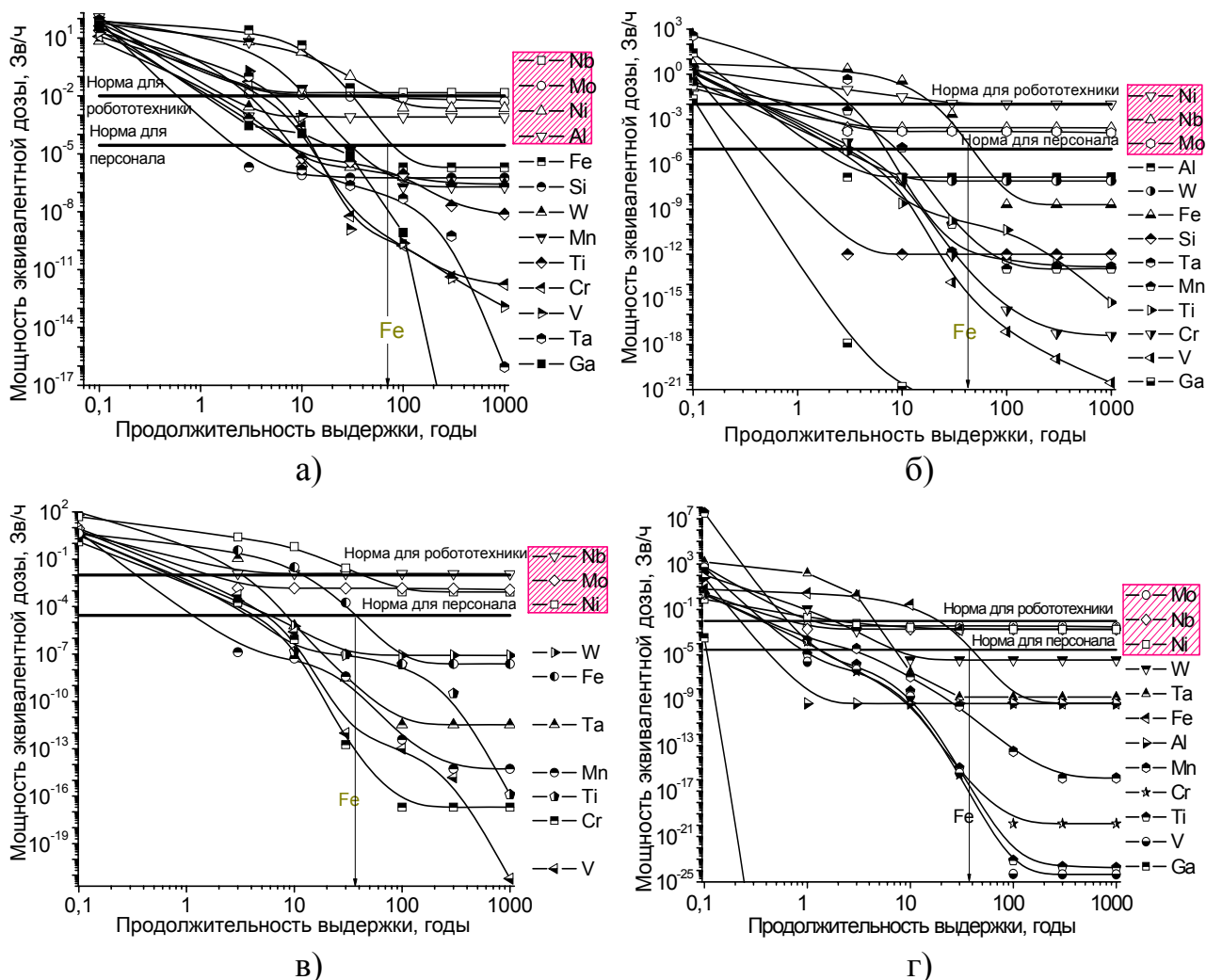


Рис.3. Кинетика спада мощности дозы для ряда основных элементов металлических конструкционных материалов, облученных в различных нейтронных спектрах: а)ДЕМО;б)ВВЭР-1500;в)БОР-60;г)БН-600. Список хим. элементов соответствует порядку кривых (по последней точке сверху вниз).

В диссертационной работе приведены оценки допустимых содержаний элементов в малоактивируемых конструкционных материалах или их компонентах, после облучения нейтронами различных ядерных установок (реакторы деления на тепловых и быстрых нейтронах, а также реакторы термоядерного синтеза). Значения получены на основании расчета мощности дозы на конец облучения и после 100 лет выдержки. При создании малоактивируемых материалов оптимального состава необходим детальный аналитический контроль за содержанием как базовых элементов, так и различных примесных элементов (желательно в варианте панорамного элементного анализа). При этом методы контроля должны обеспечивать нижний предел обнаружения микропримесей на уровне не хуже, чем  $10^{-5}\%$ .

На основе результатов компьютерных расчетов оценены трансмутационные превращения алюминия и его сплавов (Al-99,999%; Al-0,01%Sc; Al-1,0%Sc; Al-2%Mg-0,1%V; Al-2%Mg-0,2%Sc-0,1%V-0,15%Zr; Al-2%Mg-0,38%Sc-0,02%Ce-0,15%Zr) при нейтронном облучении в реакторах: ВВЭР-1500, ВВР. Проведено сравнение активационных свойств ферритной

корпусной стали СК-15 и сплава Al-2%Mg-0,38%Sc-0,02%Ce-0,15%Zr, как перспективного конструкционного материала для реакторов на тепловых нейтронах.

В Табл. 1 представлены обобщенные данные для некоторых исследованных материалов. Для каждого материала указаны характерные времена спада наведенной радиоактивности до уровней, допускающих работу с использованием робототехники ( $1 \cdot 10^{-2}$  Зв/ч) и до биологически безопасного уровня ( $28 \cdot 10^{-6}$  Зв/ч), приведены радионуклиды, контролирурующие характерные времена спада наведенной радиоактивности, а в скобках указаны элементы, на которых они, главным образом, нарабатываются.

Табл. 1. Время охлаждения облученных сплавов для спада радиоактивности до допустимых уровней

Материал (панорамный анализ)	Реактор	Работа с использованием робототехники		Биологически безопасный уровень	
		t, год	Радионуклиды*	t, год	Радионуклиды*
Al-2%Mg-0,38%Sc-0,15%Zr-0,02%Ce	ВВР	<3	Nb <sup>95</sup> , Zr <sup>95</sup> (Zr)	<10	Nb <sup>95</sup> , Zr <sup>95</sup> (Zr)
	ВВЭР-1500	<3	Fe <sup>55</sup> (Fe, Ni); Sc <sup>46</sup> (Sc, Ca, Ti); Ta <sup>182</sup> (Ta, W)	~20	Fe <sup>55</sup> (Fe, Ni)
Al-99,999%	ВВЭР-1500	<1	Al <sup>28</sup> (Al, Mg)	<10	Fe <sup>55</sup> (Fe, Ni); Ag <sup>108</sup> (Ag, Cd); Al <sup>26</sup> (Al, Mg)
	ВВР	<1	Fe <sup>55</sup> (Fe, Ni)	<3	Fe <sup>55</sup> (Fe, Ni); Ni <sup>59</sup> (Ni, Fe)
Al-2%Mg-0,2%Sc-0,1%V-0,15%Zr	ВВЭР-1500	~2	Sc <sup>46</sup> (Sc, Ca, Ti); Fe <sup>55</sup> (Fe, Mn, Ni)	<20	Fe <sup>55</sup> (Fe, Mn, Ni); Ag <sup>108</sup> (Ag, Sn, Cd)
	ВВР	<3	Fe <sup>55</sup> (Fe, Ni)	<10	Fe <sup>55</sup> (Fe, Ni); Ni <sup>59</sup> (Ni, Fe)
СК-15	ВВЭР-1500	~20	Fe <sup>55</sup> (Fe, Ni); Ni <sup>59</sup> (Ni); Co <sup>60</sup> (Fe, Ni)	>1000	Ni <sup>59</sup> (Ni); Mo <sup>93</sup> (Mo)

\*Радионуклиды, вносящие основной вклад в значение мощности эквивалентной дозы. В скобках указаны элементы, из изотопов которых образуются данные радионуклиды.

Показано, что сплавы на основе алюминия могут быть рекомендованы в качестве конструкционного материала для энергетических реакторов на тепловых нейтронах, а сплав Al-2%Mg-0,38%Sc-0,15%Zr-0,02%Ce по уровню радиационной стойкости при нейтронном облучении флюенсом  $3,15 \cdot 10^{22}$  см<sup>-2</sup> существенно превосходит низколегированную сталь СК-15.

В четвертой главе описаны фазовые изменения при нейтронном облучении металлических конструкционных материалов в результате трансмутационных ядерных превращений (при неупругих взаимодействиях нейтронного излучения с атомами кристаллической решетки).

Проведены исследования зависимости ядерных трансмутаций от флюенса нейтронов и оценены выходы радионуклидов, определяющих остаточную

радиоактивность. Рассмотрены случаи облучения нейтронами гипотетически чистых элементов V, Ga, Ti, Cr, Si, являющиеся наиболее важными компонентами конструкционных ванадиевых сплавов. Для расчетов использовали нейтронный спектр ДЕМО, флюенс от  $10^{18}$  до  $10^{23}$  н/см<sup>2</sup>.

Анализ динамики спада мощности эквивалентной дозы подтверждает, что ванадий, титан, хром, галлия и кремний могут служить основой для создания малоактивируемых материалов для применения в нейтронных полях различной интенсивности.

Проведена оценка ядерных трансмутаций при облучении ванадиевых сплавов (V-4Ga, V-Ga-Si и V-4Cr-4Ti) нейтронами термоядерного реактора (спектр ДЕМО) при флюенсах, изменяющихся с шагом в один порядок в интервале от  $1 \cdot 10^{18}$  до  $1 \cdot 10^{25}$  н/см<sup>2</sup>.

Результаты расчетов позволили констатировать, что с ростом нейтронного флюенса происходит увеличение выгорания основных компонентов рассмотренных сплавов и наработки иных химических элементов, что оказывает влияние на фазовую стабильность ванадиевых сплавов (см.Табл.2). Если флюенс нейтронов не превышает  $1 \cdot 10^{23}$  н/см<sup>2</sup>, то выгорание и наработка химических элементов в сплавах незначительны и они не приводят к фазовым изменениям в материалах. При гипотетическом флюенсе  $1 \cdot 10^{24}$  н/см<sup>2</sup> для спектра реактора типа БН-600 выгорание основных компонентов становится заметным, при этом для случая V-Ga-Si это может способствовать уменьшению количества вторых фаз в теле зерна и по его границам. Для сплава V-4Cr-4Ti возникает тенденция к уменьшению суммарной концентрации примесей внедрения (O, N, C), что может привести к сокращению исходного количества фазы Ti(O,N,C)<sub>x</sub> и к радиационному разупрочнению материала. Для сплава V-4Ga возможно появление новой фазы GaV<sub>3</sub>, если рабочая температура сплава будет ниже 400°C.

При гипотетическом флюенсе  $1 \cdot 10^{25}$  н/см<sup>2</sup> для спектра реактора типа БН-600 трансмутационные превращения приводят к критическим фазовым изменениям во всех ванадиевых сплавах элементов.

Табл.2. Изменение концентрации основных компонентов ванадиевых сплавов (в вес.%) в зависимости от флюенса нейтронов

Флюенс, н/см <sup>2</sup>		Материал					
		$1 \cdot 10^{18}$	...	$1 \cdot 10^{22}$	$1 \cdot 10^{23}$	$1 \cdot 10^{24}$	$1 \cdot 10^{25}$
V-Cr-Ti	V	91,54	...	91,53	91,43	90,54	87,03
	Ti	3,99	...	4,00	4,04	4,38	5,50
	Cr	3,99	...	4,00	4,06	4,60	6,92
V-Ga-Si	V	94,66	...	94,65	94,53	93,49	89,76
	Ga	4,89	...	4,89	4,83	4,30	2,45
	Si	0,44	...	0,44	0,44	0,43	0,38
V-Ga	V	94,53	...	94,62	94,50	93,46	89,73
	Ga	4,70	...	4,69	4,63	4,12	2,35
	Si	0,20	...	0,20	0,19	0,19	0,17

Водород и гелий в сплавах на основе ванадия стимулируют охрупчивание всех рассматриваемых сплавов, поэтому растущая наработка этих элементов в сплавах при увеличении нейтронного флюенса заметно вносит свои ограничения на температуру эксплуатации материала.

С помощью программного комплекса WinActiva была выполнена сравнительная оценка кинетики спада наведенной радиоактивности и мощности дозы для ферритно-мартенситной стали ЭК-181 и ферритной стали Fe-9Cr-W-V-Mn после их облучении нейтронами реактора БН-600. Кинетика спада наведенной радиоактивности подтверждает, что стали Fe-9Cr-W-V-Mn и ЭК-181 (Fe-12Cr-W-Ta-V) являются перспективными малоактивируемыми материалами. Оценены изменения химического состава исследованных материалов в результате ядерных трансмутаций при облучении с целью прогнозирования влияния трансмутационных эффектов на фазовую стабильность облученных материалов. Полученные результаты находятся в полном согласии с теорией фазовой нестабильности металлических материалов, обусловленной трансмутационными эффектами за счет протекания различных ядерных реакций [5,6].

Так, в спектре реактора БН-600 (плотность потока нейтронов  $6,5 \cdot 10^{15}$  н/см<sup>2</sup>·с, продолжительность облучения 560 дней) химический состав и хромо-никелевые эквиваленты сталей изменяются незначительно. Координаты, характеризующие местоположение сталей на модифицированной фазовой диаграмме Шеффлера после облучения практически не меняются (см. Рис.4). Это свидетельствует об отсутствии значимого влияния трансмутационных превращений на фазовую стабильность сталей при заданных параметрах облучения. При компьютерном моделировании гипотетического увеличения флюенса для спектра реактора БН-600 на порядок, химический состав и хромо-никелевые эквиваленты всех сталей заметно изменяются. Усиливается тенденция к стабилизации мартенситной фазы (Fe-9Cr-W-V-Mn) и к дестабилизации феррита (ЭК-181). На фазовой диаграмме сталь ЭК-181 занимает положение, близкое к границам фазовой устойчивости и проявляет тенденцию к переходу этих границ при увеличении флюенса нейтронов.

---

5 Platov Yu. M., Pletnev M.N. Phase instability of alloys caused by transmutation effects during neutron irradiation. Journal of Nuclear Materials, 1994, v. 212, p.95-100.

6 Аленина М.В., Иванов Л.И., Колотов В.П., Платов Ю. М. Влияние трансмутационных ядерных превращений на фазовую стабильность аустенитных и ферритных сталей. Перспективные материалы, 2000, №3, с.54-58.

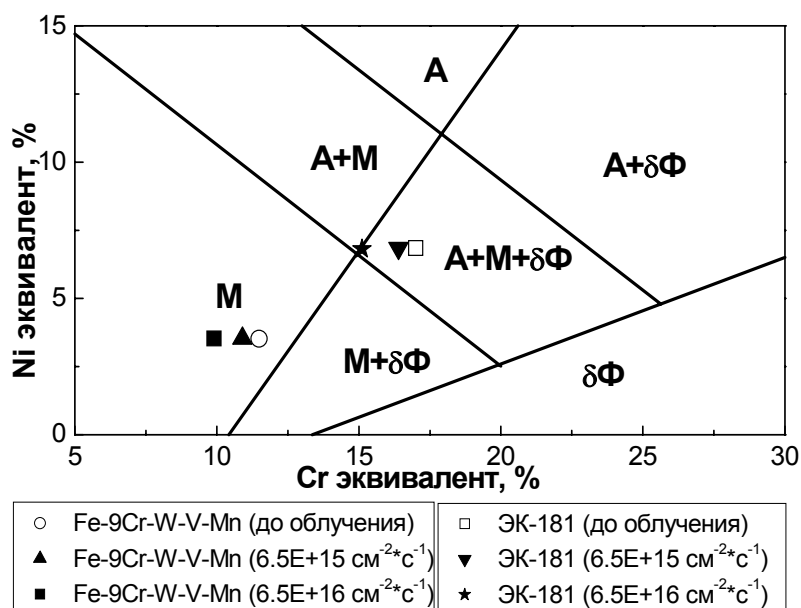


Рис.4. Фазовая диаграмма Шеффлера для двух типов стали, облученных нейтронами при разных плотностях потока.

Так же проведен анализ изменения химического состава сталей в результате облучения в зависимости от плотности нейтронного потока. Плотность потока нейтронов меняли от  $1 \cdot 10^{14}$  до  $1 \cdot 10^{16}$  н/(см<sup>2</sup>с) с шагом в один порядок, при этом продолжительность облучения изменяли в интервале от  $1 \cdot 10^4$  до  $1 \cdot 10^6$  часов для обеспечения набора фиксированного значения флюенса нейтронов ( $3,6 \cdot 10^{23}$  н/см<sup>2</sup>). Условия облучения специально были выбраны в определенной степени гипертрофированными (например, продолжительность облучения может превышать 100 лет) с тем, чтобы более ярко проявить тенденции изменения фазового состава в зависимости от плотности потока нейтронов.

Исследования показали, что химический состав и хромо-никелевые эквиваленты обеих сталей изменяются не существенно (см. Рис.5). Небольшая дестабилизация стали ЭК-181(Fe-12Cr-W-Ta-V) обусловлена незначительным выгоранием азота, а также небольшой наработкой Со.

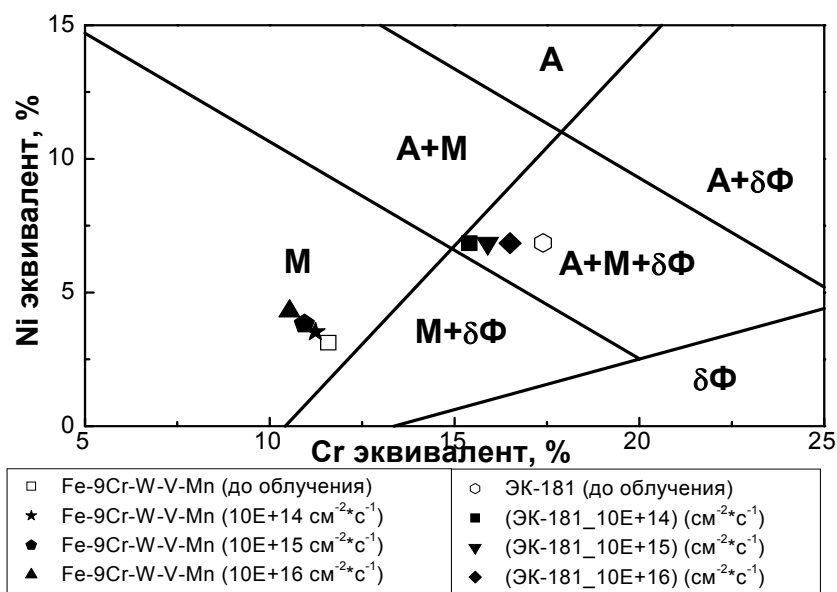


Рис.5. Фазовая диаграмма Шеффлера для двух типов стали, облученных нейтронами реактора БН-600.

**Пятая глава** посвящена структурно-фазовым изменениям в результате образования радиационных точечных дефектов (при упругих взаимодействиях электронного излучения с атомами кристаллической решетки) и радиационному упрочнению ванадия, алюминия и его сплавов при электронном облучении. Она состоит из пяти частей.

В первой части впервые предложена кинетическая модель, описывающая процессы зарождения и роста дислокационных петель. Данная модель разработана с учетом теоретических представлений, опубликованных в работах [7,8,9].

Выражение для кинетики изменения общей концентрации междоузельных атомов в петлях при облучении в рамках данной модели [9]:

$$c_i^e = c_{io}^e + athb(t - \tau) \quad (2)$$

Величина  $c_{io}^e$  - общая концентрация междоузельных атомов в зародышах закритического размера, а  $\tau$  - как время их образования. Под зародышами закритического размера подразумевались скопления междоузельных атомов, которые растут с вероятностью равной единице.

Параметры  $a$  и  $b$  в формуле (2) соответственно равны:

$$a = \left[ \frac{2GK_i}{(R + K_i)K_v} \right]^{1/2} \quad (3)$$

$$b = \left[ \frac{GK_iK_v}{2(R + K_i)} \right]^{1/2} \quad (4)$$

В силу того, что  $c_{io}^e \ll a$ , величина  $a$  в формуле (2) фактически соответствует общей концентрации междоузельных атомов в петлях при насыщении. Параметр  $b$  характеризует скорость поглощения междоузельных атомов и вакансий петлями при насыщении.

В уравнениях (3) – (4)  $G$  – скорость введения вакансий и междоузельных атомов,  $R$  – константа рекомбинации,  $K_v$  и  $K_i$  – константы поглощения междоузельных атомов и вакансий междоузельными петлями

Приведены основные формулы модели.

Следует отметить, что рассмотренная модель корректно описывает кинетику изменения концентрации междоузельных атомов в дислокационных петлях как на стадии их зарождения, так и роста и, в отличие от других известных моделей, позволяет получить более подробную информацию о

7 Лазоренко В.М., Платов Ю.М., Плетнев М.Н. Исследование распределения междоузельных петель дислокаций по размерам в металлах, облучаемых в высоковольтном электронном микроскопе. Физика металлов и материаловедение, 1980 г., т.50, №1, с.164-174.

8 Плетнев М.Н., Платов Ю.М. Образование и рост скоплений междоузельных атомов при электронном облучении. Физика металлов и материаловедение, 1975 г., т. 40, вып. 2, с. 304-310.

9 Лазоренко В.М., Платов Ю.М., Симаков С.В., Зарождение и рост дислокационных петель междоузельного типа в разбавленных сплавах на основе алюминия. Физика металлов и материаловедение, 1984 г., т.58, №5, с. 943-949.



параметрах контролирующего данный процесс. Это показано как при анализе собственных экспериментальных данных авторов этой модели [1,5,9,10], так и аналогичных данных других авторов приведенных в работах [1].

Во второй части приведена модернизация модели, выполненная в ходе выполнения диссертационной работы с целью получения информации не только о параметрах роста петель, но и параметрах их зарождения с учетом того, что в инкубационном периоде происходит преимущественное образование зародышей петель критического размера, которые при дальнейшем облучении на стадии стационарного зарождения трансформируются в дислокационные петли, поглощая как свободные междоузельные атомы, так и вакансии. Проведены оценки инкубационного периода  $\tau_i$  в рамках нашей модели, которые показали, что  $\tau_i$  очень мало по сравнению со временем эксперимента. При этом значение  $\tau_i$  резко уменьшается с увеличением скорости введения радиационных дефектов и им можно пренебречь при проведении аппроксимации экспериментальных данных особенно в случае облучения материалов в высоковольтном электронном микроскопе.

Выражение (2) в рамках модернизированной модели можно записать как:

$$c_i^e = ath\{b(t - \tau_i)\} \rightarrow c_i^e = ath\{b(t_n)\} \quad (5)$$

В уравнении (5)  $t_n$  - время зарождения петель, которое соответствует периоду времени от  $\tau_i$  до  $t$ , при котором плотность петель становится постоянной величиной (период II на Рис.1).

В рамках наших модифицированных модельных представлений на стадии зарождения петель выведены уравнения для определения параметров зарождения и роста петель.

В третьей части приведены основные формулы классической теории зарождения дислокационных междоузельных петель, которые также как и формулы модифицированной кинетической модели, были использованы при анализе экспериментальных данных по зарождению дислокационных междоузельных петель как с точки зрения получения дополнительной информации о параметрах зарождения петель, так и целью сравнения параметров зарождения, полученных в рамках этих двух моделей.

В четвертой части представлены экспериментальные данные, а также расчет и анализ параметров зарождения и роста дислокационных междоузельных петель в рамках указанных выше моделей в ванадии, алюминии и его бинарных сплавах с магнием, цинком и скандием. На основе анализа полученных результатов и литературных данных обсуждается взаимосвязь процессов образования дислокационных петель и фазовых изменений при облучении.

Четвертая часть разделена на две части. В первой части рассматривается ванадий, а во второй алюминий и его сплавы.

---

10 Платов Ю.М., Лазоренко В.М., Симаков С.В., Товтин В.И. Зарождение и рост дислокационных петель в металлических материалах. В кн.: Моделирование на ЭВМ дефектов в металлах. Л., Наука, 1990, с. 146-157.

## 1. Ванадий.

По ходу выполнения диссертационной работы экспериментальные данные последовательно обрабатывались как в рамках модели [9], так и в рамках модифицированной модели. Это было обусловлено как развитием модельных представлений, так и на их основе корректировочными численными оценками, главным образом, инкубационных периодов, периодов зарождения петель и скорости их зарождения. При этом параметры роста петель при их постоянной плотности, определенные ранее, лишь незначительно количественно изменились.

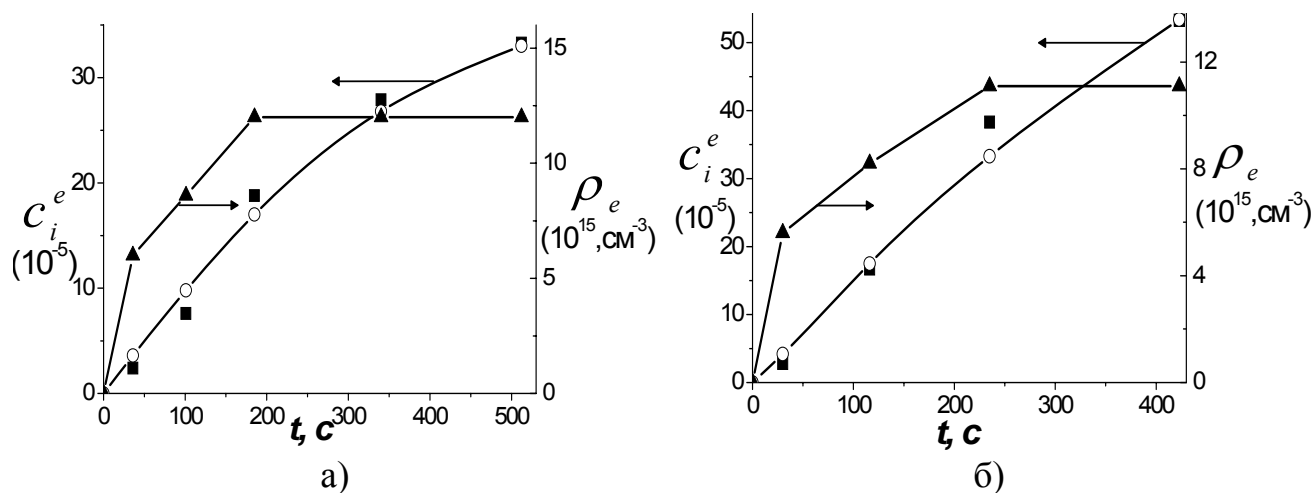


Рис.6. Изменение общей концентрации междуузельных атомов в дислокационных петлях  $c_i^e$  в электролитическом ванадии (■ – эксперимент, ○ – аппроксимация при  $\tau_i=0$ ) и плотности петель  $\rho_e$  (▲) в зависимости от времени облучения при интенсивности:

а)  $I=4,43 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $G=8,8 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$ ; б)  $I=6,15 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ ,  $G=1,2 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ .

Следует отметить, что в электролитическом ванадии в отличие от классификации периодов эволюции числа петель (или выделений второй фазы) на Рис.6 четко фиксируются не один, а два периода стационарного зарождения. При этом, скорости зарождения петель на первом и втором периодах различаются примерно на порядок, хотя концентрация образовавшихся петель и на том и на другом периоде одинакова.

Впервые на основе анализа как оригинальных, так и литературных экспериментальных данных с использованием разработанной модели и классической теории зарождения определены основные параметры зарождения петель в ванадии: число атомов в зародышах критического и закритического размеров, фактор Зельдовича и свободная энергия Гиббса образования зародышей критического размера. Получен также ряд параметров, характеризующих рост петель при их постоянной плотности.

С учетом теории [11] установлено, что критический зародыш междуузельных петель состоит из двух параллельных гантелей, а

11 Bullough R., Perrin R.C. The morphology of interstitial aggregates in iron. Pros. Roy. Soc., 1968, v. 305 A, p. 541-552.

закритический из трех междоузельных атомов [110], локализованных в плоскостях {110}.

Показана идентичность полученных результатов в рамках двух рассмотренных моделей (кинетической и классической).

Анализируя полученные результаты отметим следующее:

1. Как в электролитическом, так и в техническом ванадии на кратковременном инкубационном периоде происходит образование зародышей петель критического размера, которые на стадии зарождения трансформируются в дислокационные петли. Затем следует стадия роста петель при их постоянной плотности и стадия насыщения, где петли больше не растут и общая концентрация междоузельных атомов в петлях сохраняется неизменной. При дальнейшем облучении обычно начинается процесс коагуляции петель с образованием сетки дислокаций.
2. Инкубационный период образования зародышей дислокационных междоузельных петель крайне мал и может не учитываться при аппроксимации экспериментальных данных по кинетике изменения плотности и размера скоплений междоузельных атомов и дислокационных петель в рамках разработанных модельных представлений.
3. С повышением температуры облучения изменение свободной энергии Гиббса при образовании критических зародышей дислокационных петель увеличивается, что согласно диффузионной теории зарождения [12] соответствует увеличению вероятности диссоциации зародышей петель, преодолевающих энергетический барьер.
4. На стадии роста петель при их постоянной плотности концентрации междоузельных атомов в петлях  $c_i^e$  и диаметры петель стремятся к насыщению, что согласуется с результатами работ [1,9,10].

Далее показано, что практически все параметры, определяющие процессы зарождения и роста дислокационных петель, за исключением концентрации междоузельных атомов в петлях при насыщении, существенно зависят от скорости введения радиационных точечных дефектов. Следует особо отметить, что при высоких скоростях введения радиационных точечных дефектов усиливается тенденция к низкотемпературному радиационному упрочнению и охрупчиванию облученных материалов, а времена инкубационных периодов порообразования и ползучести уменьшаются.

Фазовая нестабильность твердых растворов возрастает с увеличением скорости введения дефектов и концентрации примесных атомов.

## *2. Алюминий и его сплавы.*

На Рис. 7 - Рис.10 приведены результаты обработки экспериментальных данных.

---

12 Russell K.C. Nucleation in Solids. The induction and steady state effects. Advances in Colloid and Interface Science.,1980, v. 13, №3-4, p.205-318.

Экспериментальные кинетические зависимости изменения концентрации междоузельных атомов в зародышах и дислокационных петлях, полученные при облучении алюминия и его электронами 1 МэВ.

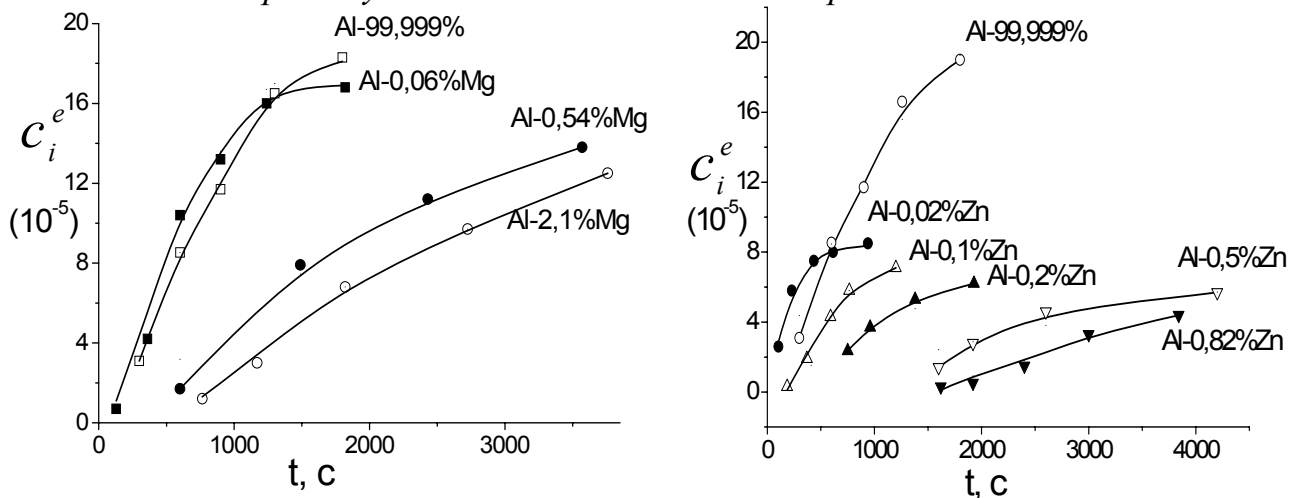


Рис. 7. Изотермическое облучение:  $T=20^{\circ}\text{C}$ ;  $G=7\cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$  [1,10,11].

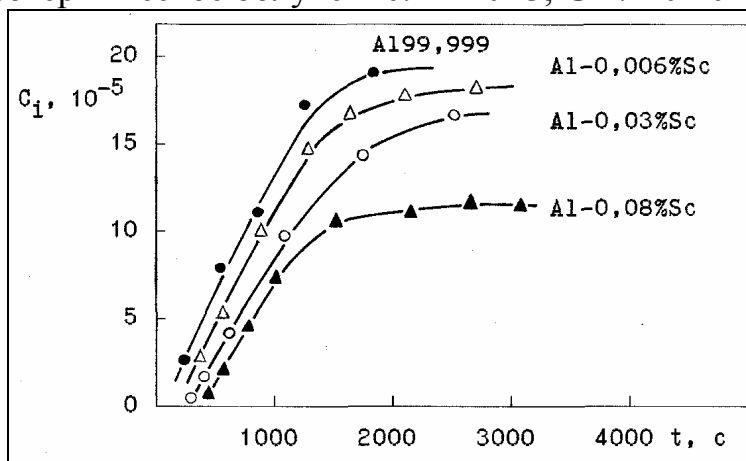


Рис.8. Изотермическое облучение:  $T=20^{\circ}\text{C}$ ;  $G=7\cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$  [13].

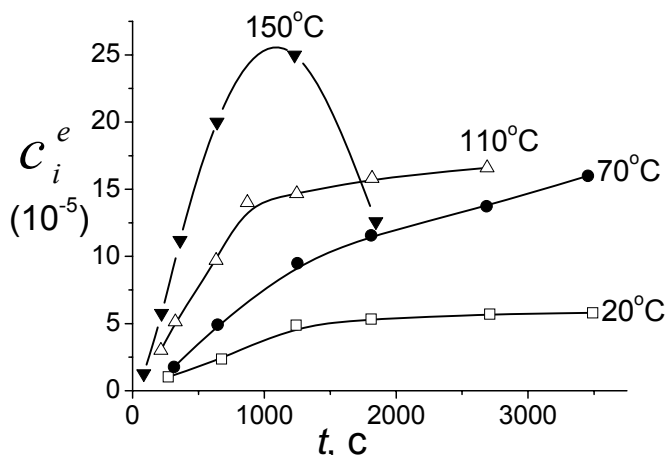


Рис.9. Облучение Al в интервале температур 20-150°C:  $G=1,6\cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$  [13].

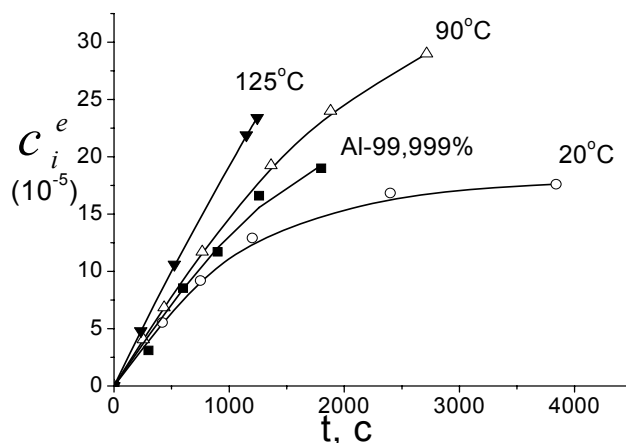


Рис.10. Облучение Al-0,03 ат.%Sc в интервале температур 20-125°C и алюминия при  $T=20^{\circ}\text{C}$ :  $G=7\cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$ .

13 Платов Ю.М., Лазоренко В.М., Товтин В.И., Хасанов Ф.А. Влияние легирующих элементов Sc и Mg на структуру и свойства сплавов на основе алюминия при облучении. В книге «Труды XVII Международного совещания (Радиационная физика твердого тела)», 2007 год, стр. 361-375.

В процессе анализа сначала рассмотрены экспериментальные результаты для чистого алюминия. Отметим сразу, что они полностью идентичны соответствующим экспериментальным данным для чистого ванадия, а именно:

1. Как в том, так и в этом случае критический зародыш петли представляет собой комплекс из двух междоузельных атомов, а закритический зародыш – из трех междоузельных атомов. Различие лишь в структуре закритических зародышей- для ОЦК - они плоские, для ГЦК – объемные.
2. Как для алюминия, так и для ванадия число междоузельных атомов в зародышах критического размера с повышением температуры не изменяется, что в значительной степени связано с их стабильностью по отношению к термической диссоциации, отмеченной выше.
3. Также как и в облученном ванадии инкубационный период образования зародышей петель  $\tau_i$  крайне мал.
4. С повышением температуры, время выхода плотности петель на насыщение в алюминии резко уменьшается и стадия их коагуляции наступает значительно раньше.

Из температурной зависимости логарифма  $\beta_{oc}$  от  $(1/T)$   $\beta_{oc} \sim D_i$  определена энергия миграции междоузельных атомов в алюминии, равная 0,12 эВ, где  $\beta_{oc}$ - начальная скорость поглощения междоузельных атомов петлями при их постоянной плотности.

Рассмотрено влияние легирующих элементов Mg, Zn и Sc в алюминии на процессы зарождения и роста дислокационных междоузельных петель и фазовую стабильность этих твердых растворов. В общем случае оно сводится к следующему:

1. Инкубационный период образования зародышей петель во всех сплавах увеличивается с повышением концентрации легирующих элементов, оставаясь, при этом, крайне незначительным по сравнению со временем эксперимента.
2. Плотность петель в облученных сплавах с ростом концентрации легирующих элементов увеличивается, а их диаметр и общая концентрация междоузельных атомов в петлях при насыщении уменьшается. Увеличение плотности петель в значительной степени связано с повышением роли гетерогенного механизма образования зародышей петель на атомах растворенных элементов.
3. Время выхода концентрации междоузельных атомов в дислокационных петлях на насыщение  $t_s$  с увеличением концентрации растворенных элементов возрастает, что главным образом, связано с увеличением параметра взаимной рекомбинации точечных дефектов  $\eta'$  и, соответственно, снижением динамической концентрации междоузельных атомов в результате уменьшения их диффузионной подвижности при образовании смешанных гантелей и захвате собственных междоузельных атомов в гантельной конфигурации атомами растворенных элементов.

Показано, что цинк, по сравнению с магнием, оказывает на процессы зарождения и роста дислокационных петель значительно более сильное

влияние. В первую очередь это связано с различием знаков и величин их абсолютных дилатационных объемов в алюминии. Дилатационные объемы атомов цинка и магния соответственно отрицательны (-0,05) и положительны (+0,41). Согласно теории [14], смешанные гантели в сплавах алюминий-магний нестабильны в отличие от сплавов алюминий-цинк.

Эффективность диффузионного переноса атомов цинка на стоки по сравнению с атомами магния более высокая, поскольку, в отличие от магния, перенос контролируется двумя механизмами: междоузельным и вакансионным. Эти процессы могут приводить к образованию фаз на дислокационных петлях и порах как при электронном, так и при нейтронном облучении даже в ненасыщенных твердых растворах Al-Mg, Al-Zn и Al-Mg-Zn (фазы  $Mg_4Al_8$ ,  $Mg_2Si$ ,  $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$  и Al-Mg-Zn) [15,16]. В результате, радиационное упрочнение сплавов Al-Zn на единицу концентрации растворенного элемента значительно выше, чем сплавов Al-Mg, что подтверждается данными работы [17].

Нами получены зависимости ряда параметров зарождения и роста дислокационных междоузельных петель от концентрации Sc в бинарных сплавах Al-Sc, отражающих его аномальное влияние по сравнению с Mg и Zn, т.е. отсутствие его концентрационного и температурного влияния на эти параметры. Подобная аномалия может быть объяснена в рамках чисто дилатационных представлений о стабильности комплексов междоузельных атом-атом растворенного элемента и вероятностей коррелированной и некоррелированной рекомбинации междоузельных атомов с вакансиями при облучении в зависимости от типа, концентрации легирующих элементов, а так же температуры облучения. Дополнительный, а возможно и определяющий вклад в суммарное взаимодействие междоузельных атомов с атомами Sc вносит деформация решетки Al в результате их электронного взаимодействия, что по-видимому, и определяет аномальное влияние Sc на параметры зарождения и роста петель в Al.

Наряду с высокой эффективностью скандия как легирующего элемента в алюминии в отношении усиления взаимной рекомбинации междоузельных атомов и вакансий, так же показано положительное влияние на фазовую стабильность, механические свойства и радиационную стойкость сплавов системы Al-Mg-Sc, которое обусловлено наличием в структуре сплавов

---

14 Dederichs P.H., Lehman C., Schober H.R., Scholz A., Zeller R. Lattice theory of point defects. Journal of Nuclear Materials, 1978, v. 69-70, p. 176-199.

15 Иванов Л.И., Лазоренко В.М., Платов Ю.М., Калинин В.Г., Симаков С.В., Смирнов А.В., Товтин В.И., Торопова Л.С., Шамардин В.К. Образование фаз в разбавленных твердых растворах на основе алюминия при нейтронном облучении. Физика и химия обработки материалов, 1985, №4, с. 15-24.

16 Иванов Л.И., Лазоренко В.М., Платов Ю.М. Образование фаз  $Mg_{32}(Al,Zn)_{49}$  и Al-Mg-Zn в ненасыщенном твердом растворе алюминий-магний-цинк при электронном облучении в режиме дифракционного каналирования. Физика и химия обработки материалов, 1991, №6, с. 50-52.

17 Иванов Л.И., Калинин В.Г., Платов Ю.М., Плетнев М.Н., Смирнов А.В., Товтин В.И., Шамардин В.К. Радиационное повреждение бинарных сплавов на основе алюминия при нейтронном облучении. Физика и химия обработки материалов, 1983, №6, с. 3-7.

когерентных и полуккогерентных сферических частиц упрочняющей фазы  $\text{ScAl}_3$  стабильной к радиационно-стимулированной коагуляции.

Следующий раздел этой главы специально посвящен сравнительному исследованию кинетики радиационного упрочнения в ванадии, алюминии и его сплавов Al-Mg, Al-Zn и Al-Sc, обусловленному образованию дислокационных междоузельных петель при электронном облучении.

В диссертационной работе получена формула, описывающая кинетику радиационного упрочнения, обусловленного образованием дислокационных междоузельных петель при облучении.

$$\Delta\sigma_y = M\mu|\bar{b}|\alpha\left(\frac{4\rho_e}{\pi|\bar{b}|}\right)^{1/4} \{athb(t - \tau_i)\}^{1/4} \quad (6)$$

где  $M$  – фактор Тейлора, связывающий напряжения течения монокристаллов с пределом текучести поликристаллов  $\sigma$ . Для ГЦК и ОЦК металлов он равен, соответственно, 3,0 и 2,75;  $\alpha$  – коэффициент жесткости барьеров. Для барьеров средней прочности, к которым относятся и дислокационные петли, по принятой в настоящей классификации он принимается обычно равным:  $\alpha = 0,25 - 0,5$ ;  $\mu$  – модуль сдвига;  $\bar{b}$  – вектор Бюргерса,  $\rho$  и  $d$  – плотность и диаметр дислокационных барьеров, соответственно.

С использованием формулы (6) оценена кинетика радиационного упрочнения в ванадии, алюминии и его сплавах.

Из формулы (6) следует, что максимальное радиационное упрочнение, и соответственно, охрупчивание достигается за время облучения  $t_s$  или при дозах облучения  $\Phi = J \cdot t_s$ , где  $J$  – интенсивность облучения, а  $t_s$  – время, при котором концентрация междоузельных атомов в дислокационных петлях достигает насыщения, т.е. при дальнейшем облучении до стадии их коагуляции не изменяется.

В этом случае  $thb(t_s - \tau_i)$  в формуле (6) равен единице:

$$\Delta\sigma_y = M\mu|\bar{b}|\alpha\left(\frac{4\rho_e}{\pi|\bar{b}|}\right)^{1/4} \{a\}^{1/4} \quad (7)$$

а время  $t_s$  при этом равно:

$$t_s = \pi/b \quad (8)$$

Этот результат полностью согласуется с известными экспериментальными результатами как для электронного, так и нейтронного облучения в том числе и реальных сталей и сплавов ядерной энергетики [1].

### **Основные результаты и выводы диссертации:**

1. Проведена модернизация компьютерного комплекса АСТИВА с целью повышения экспрессности и корректности расчетов трансмутационных превращений в материалах при облучении нейтронами заданного энергетического распределения.
2. С использованием модернизированной программы АСТИВА проведены расчеты активации, выгорания/наработки элементов в ряде малоактивируемых материалов: сплавы на основе ванадия (V-4Ga, V-Ga-Si и V-4Cr-4Ti), сплавы алюминия (Al-Mg-Sc-Zr-Ce, Al-Mg-Sc-V-Zr), ферритные стали (Fe-9Cr-W-V-Mn и ЭК-181). С использованием фазовых диаграмм сделан прогноз фазовых изменений материалов в зависимости от флюенса нейтронов. Показано, что при значении флюенса нейтронов  $\geq 1 \cdot 10^{24+25}$  н/см<sup>2</sup> во всех исследуемых материалах происходят критические фазовые изменения, приводящие к полной деградации механических свойств.
3. Разработана модель зарождения и роста дислокационных междоузельных петель в металлических материалах при облучении. В рамках данной модели проведен анализ экспериментальных результатов для ванадия, алюминия и его сплавов. Впервые определены как в рамках данной модели, так и классической теории зарождения следующие параметры образования зародышей дислокационных петель: число атомов в зародышах критического и закритического размера, фактор Зельдовича и свободная энергия Гиббса образования зародышей критического размера.
4. Обнаружено аномальное влияние скандия на процессы зарождения и роста дислокационных петель в сплавах Al-Sc. Дана интерпретация этого эффекта в рамках дилатационного и электронного взаимодействия атомов скандия в кристаллической решетке алюминия.
5. Получена формула, описывающая кинетику радиационного упрочнения, обусловленного образованием дислокационных междоузельных петель и на ее основе проведены численные расчеты радиационного упрочнения в ванадии и алюминии и его сплавах при электронном облучении.
6. Развита модельные представления о влиянии неупругих взаимодействий нейтронов с атомами кристаллической решетки в ванадии, алюминии и его сплавах на фазовую стабильность этих материалов.

### **Список публикаций по теме диссертации:**

1. Платов Ю.М., Лазоренко В.М., Симаков С.В., Товтин В.И., Хасанов Ф.А., Колокольцев В.Н.. Изменение структуры электролитического и технического ванадия при электронном облучении. «Перспективные материалы», 2007 , №2, стр. 43-47.
2. Хасанов Ф.А., Платов Ю.М. Механизмы зарождения и роста дислокационных петель в облученном ванадии. Вопросы атомной науки и техники. Серия: «Материаловедение и новые материалы», Вып. 3(72), 2008, стр. 147-150.
3. Хасанов Ф.А. Влияние скорости введения радиационных точечных дефектов на процесс зарождения и рост дислокационных петель в ванадии. В



книге: «Труды молодых научных сотрудников и аспирантов ИМЕТ им. А.А. Байкова РАН 2006», 2006, с. 51-54.

4. Платов Ю.М., Лазоренко В.М., Товтин В.И., Влияние легирующих элементов Sc и Mg на структуру и свойства сплавов на основе алюминия при облучении. В книге: «Труды XVII Международного совещания (Радиационная физика твердого тела)», 2007, стр. 361-375.

5. Хасанов Ф.А. Зарождение и рост дислокационных петель в ванадии в зависимости от скорости введения радиационных дефектов. В книге: Труды VIII межвузовской научной школы молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине» и доклад на межвузовской школе, 2007, стр. 123-126.

6. Ю.М. Платов, В.М. Лазоренко, В.И. Товтин, Ф.А. Хасанов. Параметры гомогенного зарождения дислокационных междоузельных петель в электролитическом ванадии, облученном электронами с энергией 1 МэВ. «Физика и химия обработки материалов», 2008, №4, стр. 18-25.

7. Аленина М.В., Колотов В.П., Платов Ю.М., Хасанов Ф.А. Оценка ядерных трансмутаций при облучении ванадиевых сплавов нейтронами термоядерного реактора различного флюенса и их влияние на фазовую устойчивость материалов. «Перспективные материалы», №8, 2008, стр.33-38.

8. Хасанов Ф.А., Колотов В.П., Аленина М.В., Платов Ю.М., Шляпин А.Д. Трансмутационные превращения химических элементов при облучении сталей в реакторе БН-600 и их влияние на их фазовую устойчивость. «Перспективные материалы», №1, 2009, стр. 41-49.