

ORCID: 0000-0002-0533-2114

O. R. Gokhman

Professor, Department of Physics, South Ukrainian
Pedagogical University named after K.D. Ushynsky
65020 Odesa, Ukraine
alexander.gokhman@gmail.com

ORCID: 0000-0001-7511-3868

L. V. Zagorulko

PhD student, Department of Physics, South Ukrainian
Pedagogical University named after K.D. Ushynsky
65020 Odesa, Ukraine
zagorulko2018@gmail.com

ORCID: 0000-0001-7508-2563

T. S. Sovkova

Associated Professor, Department of Physics, South Ukrainian
Pedagogical University named after K.D. Ushynsky
65020 Odesa, Ukraine
tatayana.sovkova@gmail.com

PACS: 07.05.Tp, 61.72.Cc, 61.72.Ji,
61.80.Az, 61.80.Hg, 61.82.Bg

DOI: 10.31651/2076-5851-2021-44-54

**STUDY OF THE ANNEALING EFFECT ON THE DEFECT STRUCTURE OF
NEUTRON IRRADIATED PURE IRON BY THE CLUSTER DYNAMICS
METHOD**

For WWER-1000 reactors, which are the basis of Ukraine's nuclear energy, to date, the possibility of restoring irradiated vessel steel has not been fully studied, in particular, temperature-time annealing regimes have not been developed. This article is devoted to this problem. The effect of annealing on the evolution of defect clusters formed in commercially pure iron ($C < 30$ ppm), which was irradiated in a Belgian reactor BR2 at 300°C with neutrons with a flux of 1.39×10^{-7} dpa / s (9×10^{17} n/m²/s, $E > 1$ MeV) to a dose of 0,026 dpa ($1,7 \times 10^{19}$ n/m², $E > 1$ MeV), has been studied by cluster dynamics method. The temperature and annealing time varied in the range (300°C - 500°C) and (2 hours -1 day), respectively. The cluster dynamics master equation was written as a system of ordinary differential equations with respect to the numerical density of isolated vacancies (V) and interstitials (SIA) and their clusters (VC) and (SIAC), assuming that only V and SIA are mobile. Formation energies, migration energies, pre-exponential coefficients for V and SIA, vacancy and interstitial dimers binding energies, V-SIA recombination radius were preliminarily determined from the best coincidence between computer simulation data and experimental data. A conclusion was made about the optimal temperature and duration of annealing to restore the defect structure of neutron irradiated pure iron.

Keywords: cluster dynamics, neutron irradiation, annealing, pure iron, self-interstitial atom clusters, vacancy clusters

1. Introduction

In accordance with regulatory documents operating power units of Ukrainian NPPs have a service life of 30 years. World experience testifies about the possibility of continuing operation of similar power units up to 50...60 years. Taking into account the commissioning time of power units currently operating in Ukraine, the life of the blocks will not be extended, it is necessary close all power units, except for the 6th unit of ZNPP and newly built blocks: Khmel'nitskaya-2 and Rivne-4. The possibility of renewing the design life of VVER reactors is associated before only with the solution of problems of justification of reliable operation of buildings at doses exceeding design, and, if necessary, restoring their properties. It is known that, based on the results of many years of studies by many authors a method for restoring mechanical properties of VVER-440 reactor pressure vessels by roasting them at a temperature of 450 ... 460°C [1]. The annealing treatment is recognized by international supervision authorities and has been successfully used for the restoration of the properties of more than a dozen buildings VVER-440 reactors. However, for reactors VVER-1000, which form the basis of nuclear power energetics in Ukraine, the possibility of restoration of irradiated vessel steel to date has not been studied. In particular, temperature-time modes have not been developed. The experience of annealing WVER vessels, the results of laboratory studies of Western-type vessel materials irradiated in research reactors, as well as materials obtained from the programs of witness samples of commercial NPPs are consistent and indicate that the annealing temperature should be at least 150°C higher irradiation temperature, and exposure time from 100 to 168 hours in order to obtain a significant result. To study the effect of annealing temperature on the degree of restoration of the properties of VVER vessel materials, comprehensive studies were carried out on samples irradiated in NPP reactors at the locations of the Armed Forces [2].

Meanwhile, there is a lack of modeling for the annealing of irradiated steels in order to find the optimal combination of temperature and duration of the annealing procedure. Submitted manuscript dedicated to just this problem. The effect of annealing on the defect structure of commercial pure iron (<30 ppm C) after neutron irradiation at the Callisto (IPS2) facility at the Callisto drilling rig (IPS2) in the Belgian reactor (BR2) is studied by cluster dynamics (CD) method [3]

2. Cluster dynamics simulation of the irradiated pure iron

Commercially pure Fe (<30 ppm C, average grain size 250 μ m, dislocation density $7 \times 10^{13} \text{m}^{-2}$) was neutron-irradiated at the Callisto rig (IPS2) in the Belgian reactor (BR2). An irradiation temperature of 300 °C and a neutron flux of about $9 \times 10^{17} \text{ n/m}^2\text{s}$ and neutron fluence ($E > 1 \text{ MeV}$) were maintained. The mentioned flux and fluence correspond to a dose rate of 139 ndpa/s and the neutron exposure of 0.026 dpa, respectively. An experimental study of vacancy clusters (VC) and self-interstitial atoms clusters (SIAC) in this irradiated pure iron by transmission electron microscopy, small-angle neutron scattering, and positron annihilation spectroscopy is given in [4]. Comparison of CD simulation data with experimental data [4] provided the possibility of estimating a set of characteristics of point defect clusters, determined with insufficient accuracy from both experiment and theory. They are vacancy formation energy, E_{vf} , the binding energy of vacancy dimer, E_{b2v} , vacancy migration energy, E_{vm} , vacancy pre-exponential, D_{v0} , self-interstitial formation energy, E_{if} , the binding energy of self-interstitial dimer, E_{biv} , self-interstitial atom migration energy, E_{im} , self-interstitial atom pre-exponential, D_{i0} , recombination radius, r_{rec} ; capture efficiency for a vacancy (self-interstitial atom) by the dislocation net, $z\nu(i)$.

The master equation of CD for the case of annealing is written as the system of ordinary differential equations in terms of the number density of VCs and SIACs, $C_{nv}(i)$, Equations (1)–(3), assuming that only vacancies and self-interstitial atoms (SIA_s) are mobiles [5]:

$$\frac{dC_{1v(i)}}{dt} = -\frac{4\pi r_{rec}(D_v + D_i)C_{1v} C_{1i}}{\Omega_{Fe}} - \rho_d Z_{v(i)} \left(1 + \frac{6(\rho_d Z_{v(i)})^{-0,5}}{d}\right) D_{v(i)} (C_{1v(i)} - C_{1v(i)}^e) - 4\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} + 4\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \sum_{n=3} \alpha_{nv(i)}^{v(i)} C_{nv(i)} + \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} - \sum_{n=2} \beta_{ni(v)}^{v(i)} C_{ni(v)} \quad (1)$$

$$\frac{dC_{2v(i)}}{dt} = 2\beta_{1v(i)}^{v(i)} C_{1v(i)} - 2\alpha_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} - \beta_{2v(i)}^{v(i)} C_{2v(i)} + \alpha_{3v(i)}^{v(i)} C_{3v(i)} - \beta_{2v(i)}^{i(v)} C_{2v(i)} + \beta_{3v(i)}^{i(v)} C_{3v(i)} \quad (2)$$

$$\frac{dC_{nv(i)}}{dt} = \beta_{(n-1)v(i)}^{v(i)} C_{(n-1)v(i)} + \left(\beta_{(n+1)v(i)}^{i(v)} + \alpha_{(n+1)v(i)}^{v(i)}\right) C_{(n+1)v(i)} - \left(\beta_{nv(i)}^{v(i)} + \beta_{nv(i)}^{i(v)} + \alpha_{nv(i)}^{v(i)}\right) C_{nv(i)} \quad for \ n > 2 \quad (3)$$

Here, Ω_{Fe} is the atomic volume of bcc iron, $C_{e\ 1v(i)}$ is the thermal equilibrium concentration of vacancies (SIACs), $Z_v = 1$ and $Z_i = 1.2$ are the capture efficiencies of the vacancy and SIA, respectively, by dislocation net, $D_{v(i)}$ is the diffusion coefficient of the vacancy (SIA) calculated according to Equation (4):

$$D_{v(i)} = D_{v(i)0} \exp\left(-\frac{E_{mv(i)}}{k_B T}\right) \quad (4)$$

$\beta_{v(i)}$ are the attachment coefficients of the point defects by the planar SIAC calculated in accordance with [5] from Equation (5):

$$\beta_{ni}^{v(i)} = (2\pi r_{ni} D_{v(i)} C_{1v(i)} / \Omega_{Fe}) \cdot Z_n^{v(i)} \quad (5)$$

where $Z_{v(i)} n_i$ is the capture efficiency of vacancy (SIA) by the SIAC calculated from Equation (6):

$$Z_{ni}^{v(i)} = Z_{v(i)} + \left[\left(\frac{b}{8\pi a}\right)^{0.5} \cdot z_{fv(i)} - Z_{v(i)}\right] / n^{0.35} \quad (6)$$

Here a is the lattice parameter of bcc pure iron, b is the Burgers vector and $z_{fv(i)} = 35$ (42) for vacancy (SIA).

$\beta_{nv}^{v(i)}$ are the attachment coefficients of the point defects by the spherical VC calculated according to the assumption of a diffusion-limited regime from Equation (7):

$$\beta_{nv}^{v(i)} = (4\pi R_{nv} D_{v(i)} C_{1v(i)} / \Omega_{Fe}) \quad (7)$$

α_{nv}^v are the emission coefficients of one vacancy (SIA) from the VC (SIAC) calculated in accordance with the detailed balance principle via the $\Delta G(n)$ in the case of VCs and via the E_{bni} in the case of SIACs:

$$\alpha_{nv}^v = \beta_{(n-1)v}^v \cdot \exp \frac{\Delta G_v(n) - \Delta G_v(n-1)}{k_B T} \quad (8)$$

$$\alpha_{ni}^i = \frac{\beta_{(n-1)i}^i}{c_{1i}} \cdot \exp \left(- \frac{E_{bni}}{k_B T} \right) \quad (9)$$

Here E_{bni} is calculated in accordance with [5,6] from Equation (10):

$$\Delta G_v(n) = -n\Delta\mu_v + 4\pi R_{nv}^2 \gamma \quad (10)$$

The solver LSODA has been used to integrate directly the master equation for the study of the point defect system containing free vacancies, spherical VC with sizes from 2 up to 1000 vacancies, free SIA, and planar SIAC with sizes from 2 up to 4000 SIA. The input material parameters of pure iron are given in Table 1.

Table 1.
Material parameters of pure iron
Таблиця 1
Матеріальні параметри чистого заліза

| Parameter | Value |
|---|---|
| Vacancy formation energy, E_f | 1.60 eV |
| Binding energy of vacancy dimmer, E_{b2v} | 0.60 eV |
| Vacancy migration energy, E_{mv} | 0.65 eV |
| Vacancy pre-exponential, D_{vo} | $2.1 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ |
| Interstitial formation energy, E_{fi} | 3.0 eV |
| Binding energy of interstitial dimmer, E_{b2i} | 0.8 eV |
| Interstitial migration energy, E_{mi} | 0.30 eV |
| Interstitial pre-exponential, D_{io} | $4.0 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ |
| Recombination radius, r_{rec} | 0.65 nm |
| Capture efficiency for vacancy by dislocation net, z_v | 1.0 |
| Capture efficiency for interstitial by dislocation net, z_i | 1.2 |
| Burgers vector of the loop assumed to be prismatic, b | 0.2 nm |
| Dislocation density, ρ_d | $0.7 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$ |
| Average grain size, d | $2.5 \times 10^{-4} \text{ m}$ |

The total number density of SIAC and VC, N_{SIAC} and N_{VC} , average number of SIA in SIAC, n_{SIAC} , and an average number of vacancies in VC, n_{VC} , were calculated for the temperature and duration of annealing varying within (300-500)°C and (2-24) hours, respectively.

To estimate the effect of annealing on the restoring of ductile properties, to consider the irradiated induced increase in yield strength $\Delta\sigma$. For the formula (11) for $\Delta\sigma$ was used

according to the model [8] based on periodic arrays of obstacles and ignoring dislocation self-stress:

$$\Delta\sigma = \alpha M G b r_0 (SC) \quad (11)$$

where M is the Taylor factor, G is the shear modulus; α is the obstacle strength of VC (SIAC) that have no dependence of defect clusters characteristics as discussed in [9]; r_0 is the radius of one SIA (vacancy), SC is the strength coefficient depends on the average number of monomers in cluster and number density of clusters:

$$SC_{SIAC(VC)} = \left(N_{SIAC(VC)} \cdot n_{SIAC(VC)}^{\frac{1}{3}} \right)^{0.5} \quad (12)$$

3. Results

The calculated dependences of the total number density of SIAC (VC) on the annealing temperature at a fixed time of annealing were shown in Figures (1,2), the average number of SIA_s (vacancies) – in Figures (3,4) and the strength coefficient – in Figures (5,6).

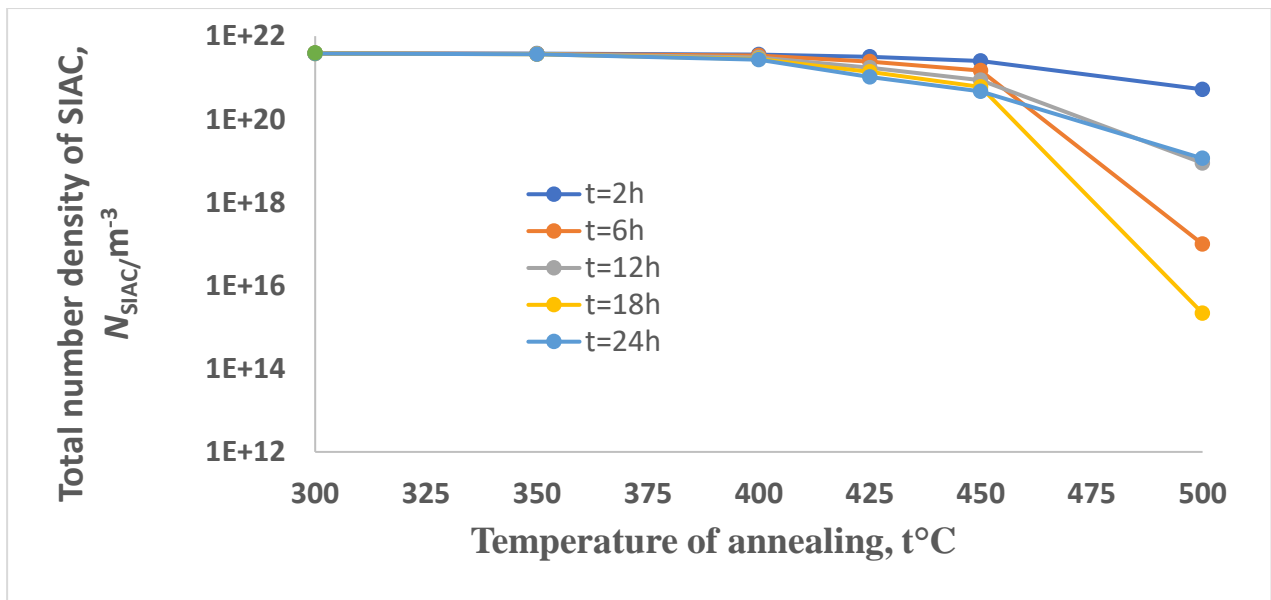


Fig. 1. Calculated dependences of the total concentration of SIAC, N_{SIAC} , on the annealing temperature at a fixed annealing time, green circle indicates N_{SIAC} before annealing (after neutron irradiation with an exposure of 0.026 dpa).

Рис. 1. Розраховані залежності сумарної концентрації кластерів міжвузлей, N_{SIAC} , від температури відпалу для фіксованого часу відпалу, зелене коло вказує на N_{SIAC} перед відпалом (після нейтронного опромінення з експозицією 0,026 dpa).

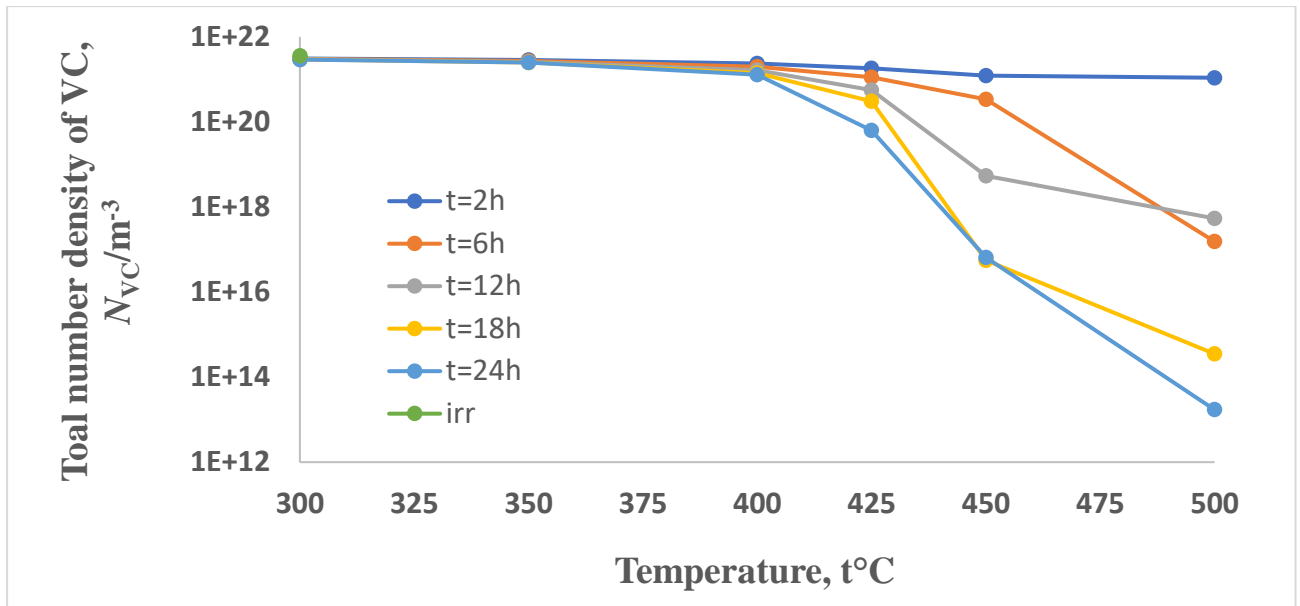


Fig. 2. Calculated dependences of the total concentration of VC, N_{VC} , on the annealing temperature at a fixed annealing time, green circle indicates N_{VC} before annealing (after neutron irradiation with an exposure of 0.026 dpa).

Рис. 2. Розраховані залежності сумарної концентрації кластерів вакансій, N_{VC} , від температури відпалу для фіксованого часу відпалу, зелене коло вказує на N_{VC} перед відпалом (після нейтронного опромінення з експозицією 0,026 dpa).

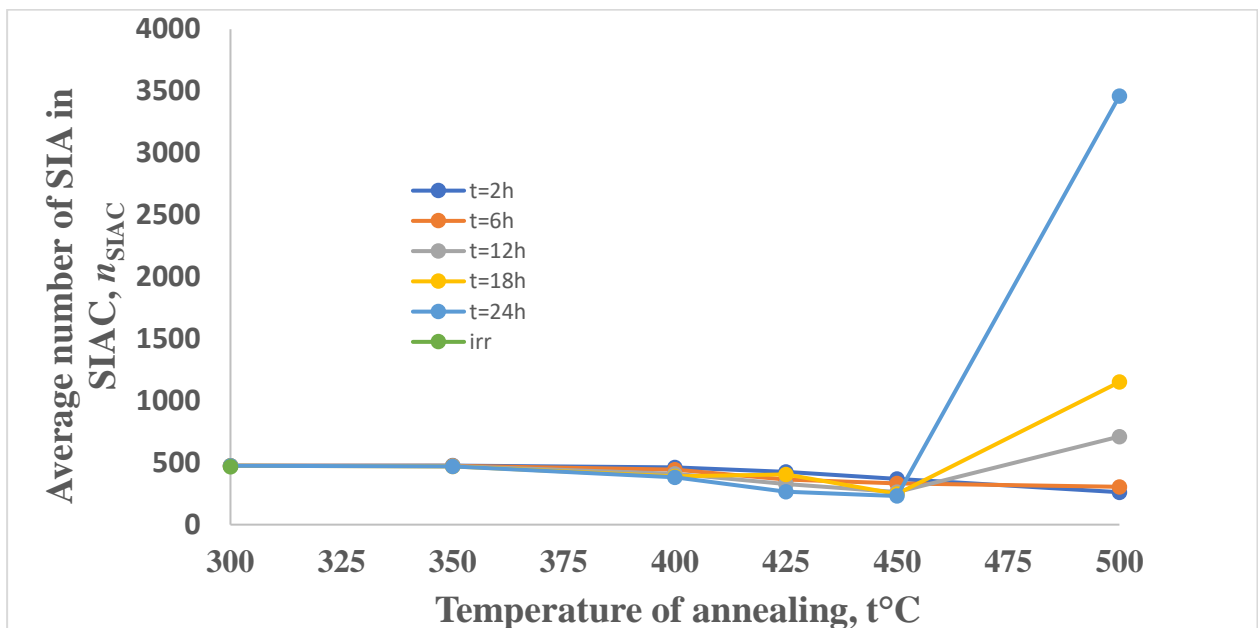


Fig. 3. Calculated dependences of the average number of SIA in SIAC, n_{SIAC} , on the annealing temperature at a fixed annealing time, green circle indicates n_{SIAC} before annealing (after neutron irradiation with an exposure of 0.026 dpa).

Рис. 3. Розраховані залежності середньої кількості міжвузлей у кластерах міжвузлей, n_{SIAC} , від температури відпалу для фіксованого часу відпалу, зелене коло вказує на n_{SIAC} перед відпалом (після нейтронного опромінення з експозицією 0,026 dpa).

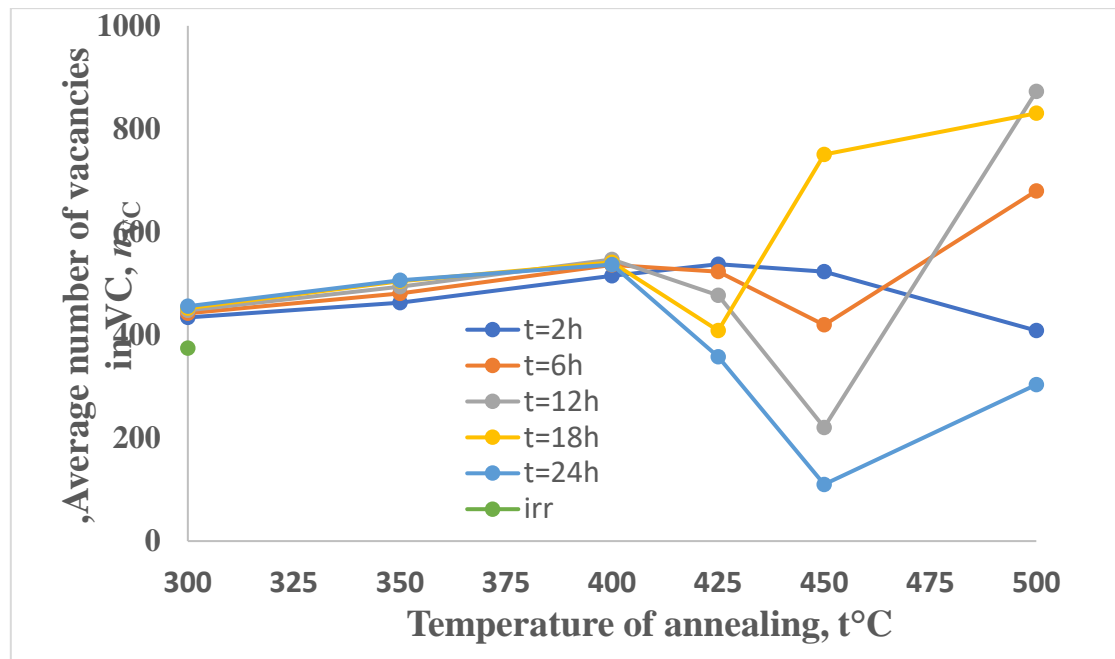


Fig. 4. Calculated dependences of the average number of VC in VC, n_{VC} , on the annealing temperature at a fixed annealing time, green circle indicates n_{VC} before annealing (after neutron irradiation with an exposure of 0.026 dpa).

Рис. 4. Розраховані залежності середньої кількості вакансій у кластерах вакансій, n_{VC} , від температури відпалу для фіксованого часу відпалу, зелене коло вказує на n_{VC} перед відпалом (після нейтронного опромінення з експозицією 0,026 dpa).

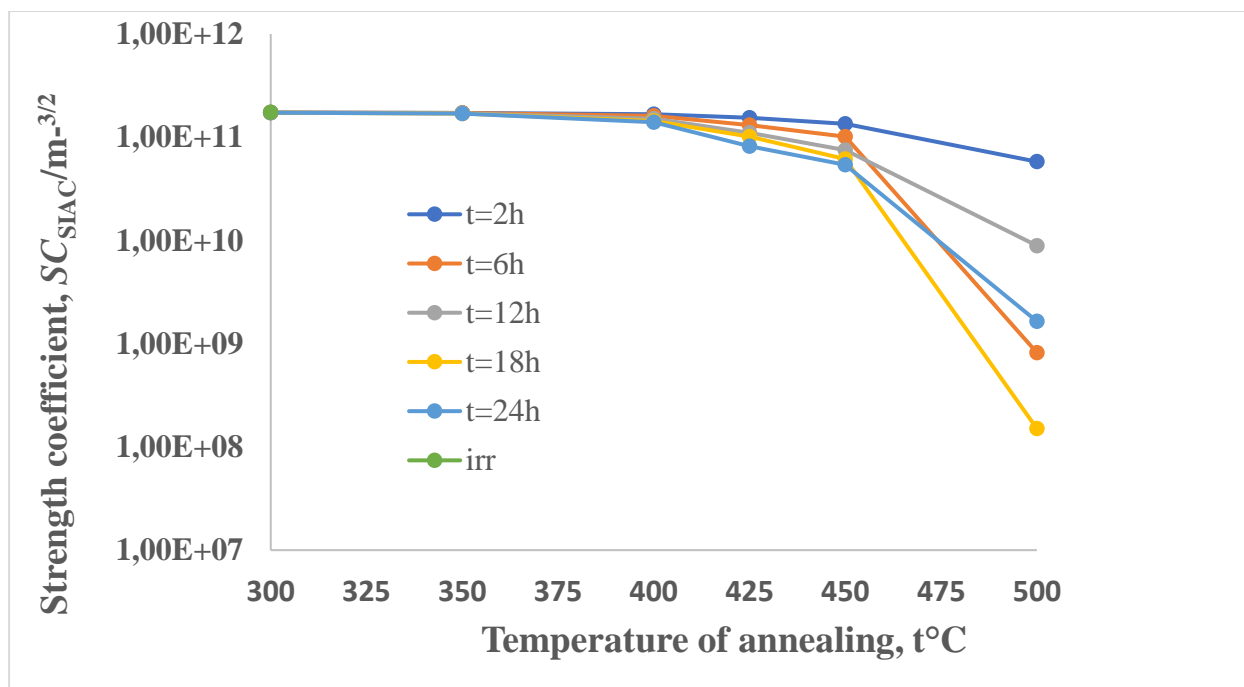


Fig. 5. Calculated dependences of the strength coefficient of SIAC, SC_{SIAC} , on the annealing temperature at a fixed annealing time, green circle indicates SC_{SIAC} before annealing (after neutron irradiation with an exposure of 0.026 dpa).

Рис. 5. Розраховані залежності коефіцієнта міцності кластерів міжвузлей, SC_{SIAC} , від температури відпалу для фіксованого часу відпалу, зелене коло вказує на SC_{SIAC} перед відпалом (після нейтронного опромінення з експозицією 0,026 dpa).

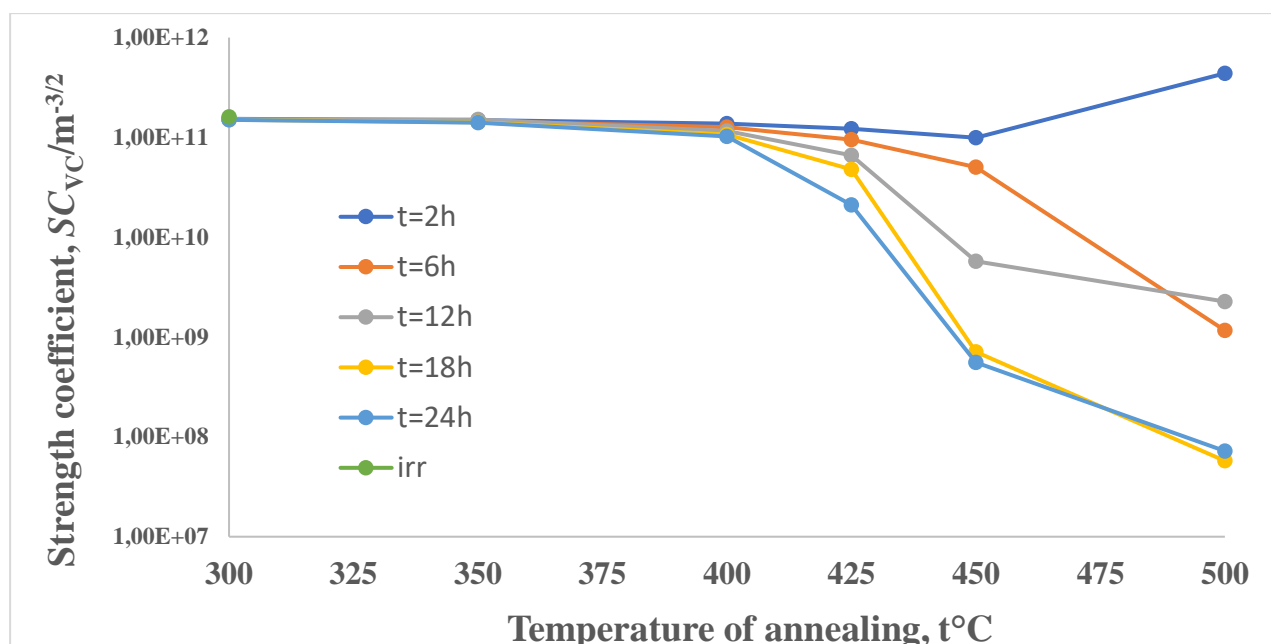


Fig. 6. Calculated dependences of the strength coefficient of VC, SC_{VC} , on the annealing temperature at a fixed annealing time, green circle indicates SC_{VC} , before annealing (after neutron irradiation with an exposure of 0.026 dpa).

Рис. 6. Розраховані залежності коефіцієнта міцності кластерів вакансій, SC_{VC} , від температури відпалу для фіксованого часу відпалу, зелене коло вказує на SC_{VC} перед відпалом (після нейтронного опромінення з експозицією 0,026 dpa).

A substantial effect of annealing on the total number density of both SIAC, N_{SIAC} and VC, N_{VC} , was observed for temperatures above 400°C and times longer than 2 hours. A nonmonotonic dependence of N_{SIAC} decrease on annealing duration was revealed. For the maximum used annealing temperature of 500°C, the largest decrease in N_{SIAC} was found to be $1.8 \times 10^6 \text{ m}^{-3}$ at an annealing time of 18 hours, N_{VC} - $2.1 \times 10^8 \text{ m}^{-3}$ at an annealing time of 24 hours (Figs 1,2).

Annealing also has little effect on the average number of SIA and VC, n_{SIA} and n_{VC} , for temperatures less than 400°C. With an increase of annealing temperature above 450°C, n_{SIA} and n_{VC} grow sharply. A simultaneous decrease in the total number density of clusters and an increase in the average number of monomers in the cluster (Figs. 3,4) indicates that due to annealing at temperatures above 450°C and an annealing time of more than 2 hours, both SIAC and VC reach the Ostwald' stage.

The maximum effect of annealing was expected at the maximum annealing temperature (500°C) and the maximum annealing time (24 hours). This has been found to be only partially true. According to our simulation, annealing has been found to be most effective to decrease the irradiated induced increase in yield strength $\Delta\sigma$, at an annealing temperature of 500°C and an annealing time of not 24 but 18 hours: the impact of SIAC and VC decreases by 1160 and 2800 times, respectively (Figs. 5,6).

4. Conclusions

1. A substantial effect of annealing on the total number density of both SIAC and VC was observed for temperatures above 400°C and times longer than 2 hours. With an increase of annealing temperature above 450°C, the average number of SIA and VC in clusters grows sharply.

2. Due to annealing at temperatures above 450°C and an annealing time of more than 2 hours, both SIAC and VC reach the Ostwald stage.
3. According to our simulation, annealing has been found to be most effective to decrease the irradiated induced increase in yield strength, at an annealing temperature of 500°C and an annealing time of not 24 but 18 hours: impact of SIAC and VC decreases by 1160 and 2800 times, respectively.

References (in language original):

1. Амаев А.Д., Крюков А.М., Неклюдов И.М. и др. Радиационная повреждаемость и работоспособность конструкционных материалов. Под ред. А.М. Паршина, П.А. Платонова– СПб.: Политехника, 1997. – 312 с.
2. Amayev A. D., Kryukov A. M., Sokolov M. A. Recovery of the transition temperature of irradiated WWER-440 vessel metal by annealing //ASTM Spec. Tech. Publ. – 1993. –P. 369–379.
3. Gokhman A., Bergner F. Cluster dynamics simulation of point defect clusters in neutron irradiated pure iron. Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology, 2010. – 165 – P. 215-226. – Режим доступа: <https://doi.org/10.1080/10420151003631928>
4. Bergner F., Almazouzi A., Hernandez-Mayoral M., Lambrecht M., Ulbricht A. In Combined TEM, PAS and SANS Investigations of Neutron Irradiated Pure Iron // Workshop Proceedings Karlsruhe Germany, June 4–6, 2007. – Nuclear Energy Agency. – 2008. – № 260.– OECD. – P. 283–290.– Режим доступа: <https://www.oecd-ne.org/upload/docs/application/pdf/2019-12/6260-smins2008.pdf>
5. Hardouin Duparc A. Moingeon C., Smetaninsky-de-Grande N., Barbu A.. Microstructure modelling of ferritic alloys under high flux 1MeV electron irradiations // Journal of Nuclear Materials. – 2002. – 302. – P. 143–155. – Режим доступа: [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)00776-6](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)00776-6)
6. Soneda N., Ishino S., Takahashi A., Dohi K., Modeling the microstructural evolution in bcc-Fe during irradiation using kinetic Monte Carlo computer simulation.// J. Nucl. Mater. –2003. – Vol. 323. – P. 169–180. – Режим доступа: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2003.08.021>
7. LSODA is part of the ODEPACK provided by Alan C. Hindmarsh 1984 on the CASC server of the Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551, USA. N.N.
8. Matijasevic M., Almazouzi A., Effect of Cr on the Mechanical Properties and Microstructure of FeCr Model Alloys After n-Irradiation // J. Nucl. Mater. – 2008. – 377. – P. 147–154. – Режим доступа: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2008.02.061>
9. Bergner F., Gillemot F., Hernández-Mayoral M., Serrano M, Török G., Ulbricht A., Altstadt E., Contributions of Cu-Rich Clusters, Dislocation Loops and Nanovoids to the Irradiation-Induced Hardening of Cu-Bearing low-Ni Reactor Pressure Vessel Steels //J. Nucl.Mater. – 2015, – 461, P. 37–44. – Режим доступа: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2015.02.031>

References:

1. Amayev A. D., Kryukov A. M., Neklyudov I. M. et al. (1997) Radiation damage and performance of structural materials. / Ed. A.M. Parshina, P.A. Platonov-SPb. Polytechnic, 312.
2. Amayev A. D., Kryukov A. M., Sokolov M. A. (1993) Recovery of the transition temperature of irradiated WWER-440 vessel metal by annealing. *ASTM Spec. Tech. Publ*, 369–379.

3. Gokhman A., Bergner F. (2010) Cluster dynamics simulation of point defect clusters in neutron irradiated pure iron. *Radiation Effects and Defects in Solids: Incorporating Plasma Science and Plasma Technology*, 165 (3), 216-226. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1080/10420151003631928>

4. Bergner F., Almazouzi A., Hernandez-Mayoral M., Lambrecht M., Ulbricht A. (2008) In Combined TEM, PAS and SANS Investigations of Neutron Irradiated Pure Iron, Workshop Proceedings Karlsruhe, Germany, June 4–6, 2007. *Nuclear Energy Agency*, 260, 283–290. – Retrieved from: <https://www.oecd-neo.org/upload/docs/application/pdf/2019-12/6260-smins2008.pdf>

5. Hardouin Duparc A., Moingeon C., Smetaninsky-de-Grande N., Barbu A. (2002). Microstructure modelling of ferritic alloys under high flux 1MeV electron irradiations. *Journal of Nuclear Materials*. 302, 143–155. – Retrieved from: [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)00776-6](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)00776-6)

6. Soneda N., Ishino S., Takahashi A., Dohi K. (2003) Modeling the microstructural evolution in bcc-Fe during irradiation using kinetic Monte Carlo computer simulation. *J. Nucl. Mater.*, 323, 169–180. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2003.08.021>

7. LSODA is part of the ODEPACK provided by Alan C. Hindmarsh 1984 on the CASC server of the Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551, USA. N.N.

8. Matijasevic M., Almazouzi A. (2008) Effect of Cr on the Mechanical Properties and Microstructure of FeCr Model Alloys After n-Irradiation. *J. Nucl. Mater.*, 377, 147–154. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2008.02.061>

9. Bergner F., Gillemot F., Hernández-Mayoral M., Serrano M, Török G., Ulbricht A., Altstadt E. (2015) Contributions of Cu-Rich Clusters, Dislocation Loops and Nanovoids to the Irradiation-Induced Hardening of Cu-Bearing low-Ni Reactor Pressure Vessel Steels. *J. Nucl. Mater.*, 461, 37–44. – Retrieved from: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2015.02.031>

О. Р. Гохман

Професор, кафедра фізики, Південноукраїнський
національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського
65020 Одеса, Україна
alexander.gokhman@gmail.com

Л. В. Загорулько

Аспірант, кафедра фізики, Південноукраїнський
національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського
65020 Одеса, Україна
zagorulkol2018@gmail.com

Т. С. Совкова

національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського
65020 Одеса, Україна
tatayana.sovkova@gmail.com

ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДОМ КЛАСТЕРНОЇ ДИНАМІКИ ВПЛИВУ ВІДПАЛУ НА ДЕФЕКТНУ СТРУКТУРУ ЧИСТОГО ЗАЛІЗА, ЯКЕ ОПРОМІНЕНО НЕЙТРОНАМИ

Можливість продовження проектного терміну експлуатації атомних реакторів водо-водяного типу (ВВЕР) пов'язана, перш за все, з вирішенням задач обґрунтування надійності експлуатація корпусів реакторів при дозах опромінення, що перевищують проектні, та, у разі необхідності, відновлення їх властивостей. Відомі результати багаторічних досліджень багатьох авторів щодо способу відновлення механічних властивостей корпусів реакторів ВВЕР-440 під тиском шляхом випалу їх при температурі 450 ... 460°C. Однак, для реакторів ВВЕР-1000, які становлять основу атомної енергетики України, можливість відновлення опроміненої корпусної сталі на сьогоднішній день не вивчена у повному обсязі, зокрема, не розроблені температурно-часові режими відпау. Так, отримано низку експериментальних даних з досліджень зразків-свідків. Проте, бракує комп'ютерного моделювання відпау опроміненних сталей щодо визначення оптимального поєднання температури і тривалості процедури відпау. Дана стаття присвячена саме цій проблемі. Методом кластерної динаміки вивчається вплив відпау на еволюцію дефектних кластерів, що утворились у комерційно чистому залізі $C < 30 \text{ ppm}$), яке було опромінено у бельгійському реакторі BR2 при температурі 300°C нейтронами зі флаксом $1,39 \times 10^{-7} \text{ дпа/с}$ ($9 \times 10^{17} \text{ н/м}^2/\text{с}$, $E > 1 \text{ MeV}$) до дози 0,026 дпа ($1,7 \times 10^{19} \text{ н/м}^2$, $E > 1 \text{ MeV}$).

Майстер-рівняння кластерної динаміки для відпау записується як система звичайних диференціальних рівнянь відносно чисельної щільності ізольованих вакансій (V) та міжатомних вузлів (SIA) та їх кластерів (VC) та (SIAC), у наближенні, що мобільними є лише V та SIA.

Енергії формування, енергії міграції, пред-експоненціальні коефіцієнти дифузії для V та SIA, енергія зв'язку диммера вакансій та міжатомних вузлів, радіус рекомбінації пари V - SIA попередньо визначались з умови найкращого збігу даних комп'ютерного моделювання та експериментальних даних для опромінення нейтронами. Температура та час відпау варіювалися у діапазоні (300°C-500°C) та (2 години -1 доба), відповідно. Вирішувач LSODA був використаний для безпосереднього інтегрування зазначеної системи звичайних диференціальних рівнянь.

Істотний вплив відпау на загальну чисельну щільність як SIAC, N_{SIAC} , так і VC, N_{VC} , спостерігався при температурах вище 400°C і часах більше 2 годин. Виявлено немонотонну залежність зменшення N_{SIAC} від тривалості відпау. Для максимальної використовуваної температури відпау 500°C було виявлено, що найбільше зниження N_{SIAC} спостерігається при часі відпау 18 годин.

Відпал мало впливає на середню кількість SIA і VC у кластерах, n_{SIA} і n_{VC} , для температур нижче 400°C. При підвищенні температури відпау вище 450°C n_{SIA} і n_{VC} різко зростають. Одночасне зменшення загальної щільності та збільшення середньої кількості мономерів у кластерах свідчить про те, що внаслідок відпау при температурах вище 450°C та часі відпау більше 2 годин SIAC і VC досягають стадії Оствальда.

Згідно з нашим моделюванням, відпал був найефективнішим для зменшення індукованого опроміненням збільшення межі текучості при температурі відпау 500°C і часі відпау протягом не 24, як очікувалося, а 18 годин.

Ключові слова: кластерна динаміка, опромінення нейтронами, відпал, чисте залізо, кластери міжвузлей, кластери вакансій.

Одержано редакцією 14.07.2021

Прийнято до друку 19.08.2021