

ORCID: 0000-0003-4689-1251

О. Р. ГОХМАН

доктор фізико - математичних наук, професор,
професор кафедри прикладної математики та інформатики
Південноукраїнського національного педагогічного університету ім. К.Д. Ушинського,
Одеса, Україна
alexander.gokhman@gmail.com

ORCID: 0000-0001-5023-2094

Б. В. НАЗАРЧУК

старший викладач кафедри фундаментальних наук
Військової академії (Одеса),
Одеса, Україна
nazarchuk@pdu.edu.ua

ORCID: 0009-0009-8500-3334

І. С. СІВАК

аспірант
кафедри прикладної математики та інформатики
Південноукраїнського національного педагогічного університету ім. К.Д. Ушинського,
Одеса, Україна
igorsivak97@gmail.com

DOI: 10.31651/2076-5851-2025-67-79

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

**КІНЕТИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕВОЛЮЦІЇ КЛАСТЕРІВ ТОЧКОВИХ
ДЕФЕКТІВ У ПРОЦЕСІ ВІДНОВЛЕННЯ КОРПУСУ ВВЕР РЕАКТОРА**

Досліджено еволюцію кластерів вакансій (КВ) та кластерів міжвузлів (КМ) у сталях корпусів реакторів водо-водяного типу (ВВЕР), опромінених нейтронами, потім відновлених шляхом відпалу, і нарешті опромінених повторно. Розглянуті характерні умови експлуатації реактора типу ВВЕР. Метод кластерної динаміки був використаний для визначення розміру та концентрації КВ та КМ у корпусі реактора. З отриманих даних оцінювалася зміна межі плинності сталей в досліджуваних процесах. Результати порівнювалися з результатами малокутового розсіювання нейтронів, що проводилися на зразках, опромінених на вибраних позиціях реактора ВВЕР. Було визначено комбінацію температури та часу відпалу, найбільш ефективною для відновлення корпусу реактора. Проаналізовано, яка з теорій відновлення відповідає встановленим результатам.

Ключові слова: Кластерна динаміка, кластери вакансій, кластери міжвузлів, опромінення, відпад, межа плинності,

1. Вступ

Домінуючими факторами, які впливають на ступінь відновлення властивостей опромінених сталей корпусів реактору (КР), є температура відпалу відносно температури опромінення (експлуатації), тривалість витримки при температурі відпалу, рівні домішок та легуючих елементів, а також тип виробу (виплавка, поковка, зварний

шов тощо) [1]. Досвід відпалу корпусів ВВЕР, результати лабораторних досліджень матеріалів КР західного типу, опромінених у дослідницьких реакторах, а також матеріали, отримані в рамках програм дослідження зразків-свідків (ЗС) комерційних АЕС узгоджуються між собою і вказують на те, що температура відпалу має бути щонайменше на 150°C вищою температури опромінення, а тривалість витримки від 100 до 168 годин для того, щоб отримати суттєвий результат. Для вивчення впливу температури відпалу на ступінь відновлення властивостей матеріалів корпусів ВВЕР було проведено комплексні дослідження на зразках, опромінених в реакторах АЕС у місцях розташування ЗС [2]. Визначення оптимального температурно-часового режиму проведення термічного відпалу потребує проведення значної кількості досліджень [3].

На даний час існує три стандартні підходи до оцінки крихчущого металу КР під дією повторного опромінення [4]. Перша модель – консервативний зсув. Вона припускає, що повторне крихчущого буде продовжуватися з відновленого стану з тією ж швидкістю, з якою окрихчався метал під час первинного опромінення. Другою є модель бічного зсуву, яка передбачає, що повторне крихчущого відбувається з такою ж швидкістю, як і первинне крихчущого на тому ж горизонтальному рівні. Третя модель, яку називають вертикальним зсувом, передбачає, що швидкість крихчущого буде відповідати початковій, починаючи з того ж вертикального рівня на кривій крихчущого. Вибір моделі процесів, що відбуваються при повторному опроміненні, вимагає комп'ютерного експерименту, який доповнюватиме реальний експеримент. Відповідно до [5], радіаційне окрихчущого сталей викликане формуванням та еволюцією точкових дефектів та їх кластерів, преципітатів, а також сегрегацією елементів (переважно фосфору) у зерна матеріалу. Аналіз наявних даних у [6] показав, що внесок точкових дефектів є домінуючим у збільшення межі текучості під час опромінення сталей ВВЕР. Протягом останніх 30 років моделювання кінетики точкових дефектів та їх комплексів в опромінених матеріалах успішно здійснюється методом кластерної динаміки (КД) [7]. У [8] методом КД моделюється вплив часу на зміну межі плинності комерційно чистого заліза, опроміненого у науково-дослідному реакторі БР-2 (місто Мол, Бельгія). Однак, до тепер не проводилось моделювання методом КД еволюцію кластерів вакансій (КВ) та кластерів між вузлів (КМ) у сталях корпусів реакторів (ВВЕР), опромінених нейтронами, потім відновлених шляхом відпалу, і нарешті опромінених повторно.

Метою нашого дослідження було обрано дослідження процесу відновлення сплаву заліза з малим вмістом легуючих елементів, який був опромінений у реакторі Рівненської АЕС.

Методом кластерної динаміки вивчалось формування та еволюція кластерів вакансій та кластерів міжвузлів опроміненого сплаву заліза, а також вплив зміни температури та часу відпалу на їх розмір і кількість. Результати моделювання порівнювались з даними малокутового розсіювання нейтронів. Зроблено прогноз щодо кінетики точкових дефектів у процесі повторного опромінення. Проведено оцінку зміни межі плинності опромінених та відпалених досліджуваних зразків.

2. Матеріали та методи.

Сплав А (0.01C0.004S0.015Cu0.002P0.01Ni0.15Si0.39Mn) був виготовлений у промисловому дрібносерійному виробництві. Остаточна термічна обробка відповідала термічній обробці сталі реактора типу ВВЕР 1000. Сплав має феритну мікроструктуру. Зразки-свідки були розташовані на позиціях спостереження реакторів ВВЕР-440 РОВНО-1 протягом одного реакторного циклу (289 діб). При цьому флюкс дорівнював $0,4 \times 10^{12}$ см⁻² н/с, $E > 1$ MeV; а флюенс - 10^{19} см⁻²н. Температура опромінення становила 270 °С. Після опромінення зразків були відпалені при 475 °С протягом 100 годин. Експеримент з малокутового розсіювання проводився на спектрометрі BENSC V4 НМІ

Berlin (Німеччина) та спектрометрі PAXE LLB CEA Saclay (Франція) в насичувальному магнітному полі $H = 1,4$ Тл, перпендикулярному до напрямку нейтронного пучка. Майстер-рівняння кластерної динаміки для опромінення та відпалу записувалась як система звичайних диференціальних рівнянь відносно чисельної щільності ізольованих вакансій (C_{IV}) та міжвузлів (C_{II}) та їх кластерів (C_{nv}) та (C_{ni}), у наближенні, що мобільними є лише ізольовані точкові дефекти. Вирішувач LSODA [9] був використаний для безпосереднього інтегрування зазначеної системи звичайних диференціальних рівнянь. Був використаний комп'ютерний код [8] для моделювання кінетики кластерів точкових дефектів при опроміненні та відпалі. Енергії формування, енергії міграції, пред-експоненціальні коефіцієнти дифузії для ізольованих точкових дефектів, енергія зв'язку диммера вакансій та міжвузлів, радіус рекомбінації пари вакансія-міжвузловий атом були і такими, що й в [8, 10]. Згідно з [11], густина дислокацій дорівнювала 10^{14} м⁻². Питома поверхнева енергія на границі кластер вакансій – матриця (γ) визначалась з умови найкращого збігу результатів моделювання з даними експерименту малокутового розсіювання щодо середнього радіусу кластера вакансій у первинно опроміненому зразку сплаву А. Оцінку зміни межі плинності ($\Delta\sigma$) опромінених та відпалених досліджуваних зразків проведено згідно з [12]:

$$\Delta\sigma = 3.1 \frac{Gb}{\beta L} \quad (1)$$

Тут $G = (8.84 \cdot 10^4 - 31T)$ МПа залежність модуль зсуву заліза від температури T за [20], $b = 0.249$ нм – вектор Бюргерса, $L = (Nd)^{0.5}$ – середня відстань між кластерами, N – концентрація кластерів, d – середній діаметр кластерів, β – для малих кластерів точкових дефектів в ОЦК-матеріалах коливаються від 1,5 до 5,0.

3. Результати

Варіювання значення значення питомої поверхневої енергії на границі кластер вакансій – матриця (γ) показало, що найкращий збіг результатів моделювання з даними експерименту досягається при $\gamma = 0.77$ Дж/м². Зазначимо, що знайдено значення σ для сплаву А суттєво менше від знайденого $\gamma = 1.20$ Дж/м² для комерційного чистого заліза у [10], що відповідає змісту міді у сплаві А. Вплив часу опромінення на концентрацію ізольованих вакансій (C_{IV}), середнього розміру (R_{vc_aver}) та загальної концентрацію кластерів вакансій (N_{vc}) представлено на Рис.1.

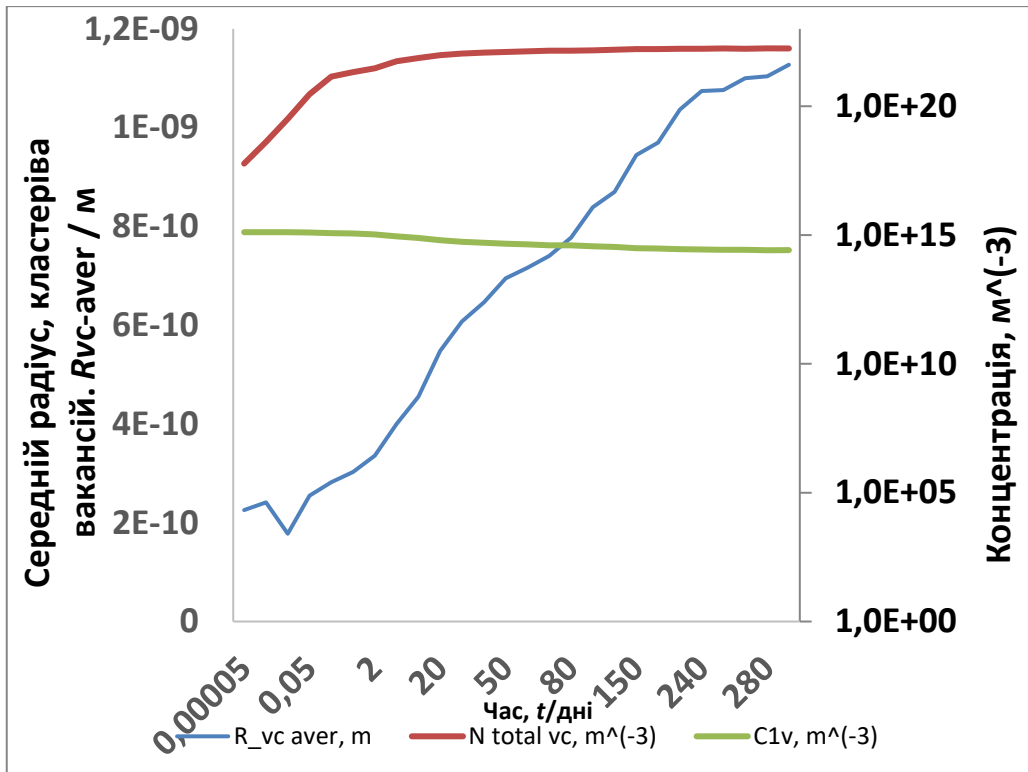


Рис.1. Вплив часу опромінення на концентрацію ізолюваних вакансій (C_{1v}), середній розмір (R_{vc_aver}) та загальну концентрацію кластерів вакансій (N_{vc}).
 Fig. 1. Influence of irradiation time on the concentration of isolated vacancies (C_{1v}), the average size (R_{vc_aver}), and the total concentration of vacancy clusters.

Згідно з цим, до 0,005 днів (мінімум R_{vc_aver} має місце при $t=0.005$ дня). Залежність $C_{1v}(t)$, $R_{vc_aver}(t)$, $N_{vc}(t)$ може бути представлена рівняннями (2-4):

$$C_{1v}(t) = 200,53t^6 - 189627t^5 + 7 \cdot 10^7 t^4 - 10^{10} t^3 + 10^{12} t^2 - 5 \cdot 10^{13} t + 10^{15} \quad (2)$$

$$R_{vc_aver}(t) = 10^{-20} t^5 - 8 \cdot 10^{-18} t^4 + 2 \cdot 10^{-15} t^3 - 3 \cdot 10^{-13} t^2 + 2 \cdot 10^{-11} t + 2 \cdot 10^{-10} \quad (3)$$

$$N_{vc}(t) = 3 \cdot 10^{11} t^5 - 2 \cdot 10^{14} t^4 + 6 \cdot 10^{16} t^3 - 9 \cdot 10^{18} t^2 + 6 \cdot 10^{20} t + 10^{21} \quad (4)$$

У (2-4) t – в днях.

Вплив часу опромінення на концентрацію ізолюваних міжвузлів (C_{1i}), середнього розміру (R_{ic_aver}) та загальну концентрацію кластерів міжвузлів (N_{ic}) представлено на Рис.2.

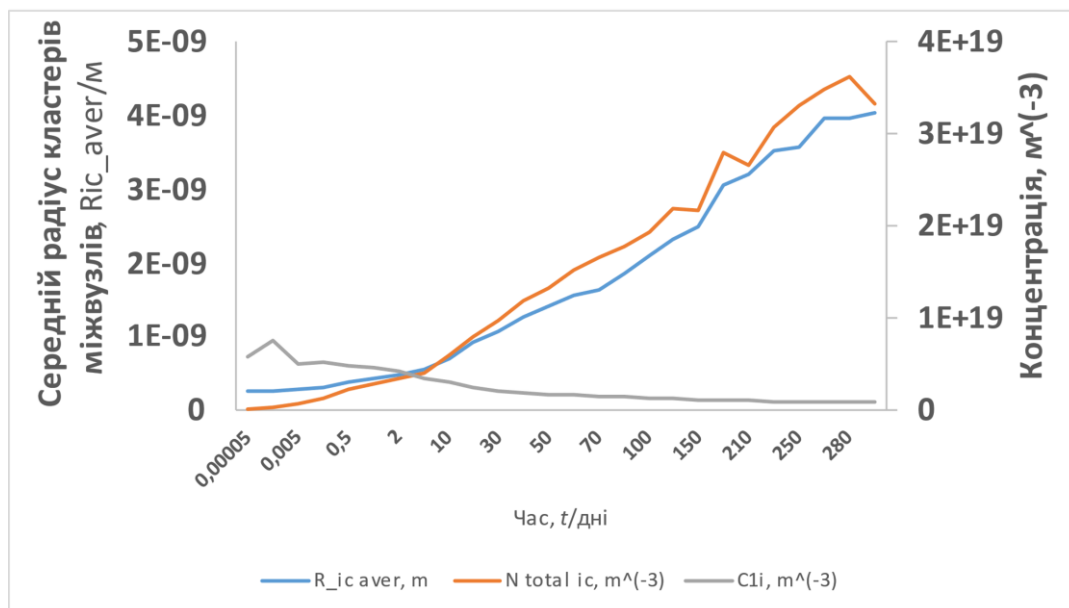


Рис.2. Вплив часу опромінення на концентрацію ізольованих міжвузлів (C_{1i}), середній розмір ($R_{ic-aver}$) та загальну концентрацію кластерів міжвузлів (N_{ic}).

Fig. 2. Influence of irradiation time on the concentration of isolated interstitials (C_{1i}), the average size ($R_{ic-aver}$), and the total concentration of interstitial clusters (N_{ic}).

Флуктаційна стадія еволюції кластерів міжвузлів не спостерігається. Однак, зауважимо, що при $t=0.005$ годин має місце мінімум концентрації ізольованих міжвузлів. Залежність $C_{1i}(t)$, $R_{ic-aver}(t)$, $N_{ic}(t)$ може бути представлена рівняннями (5-7):

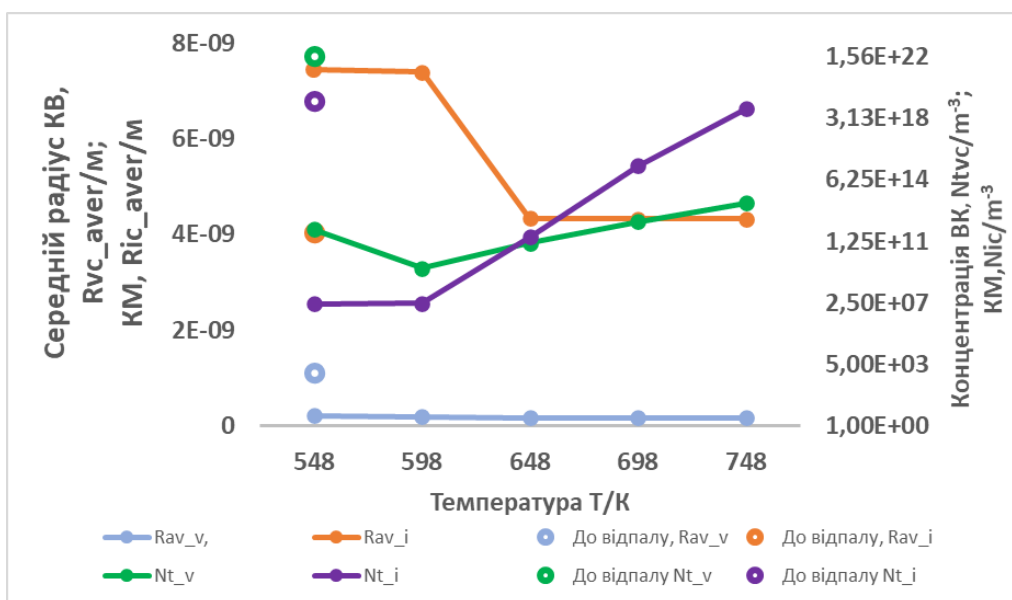
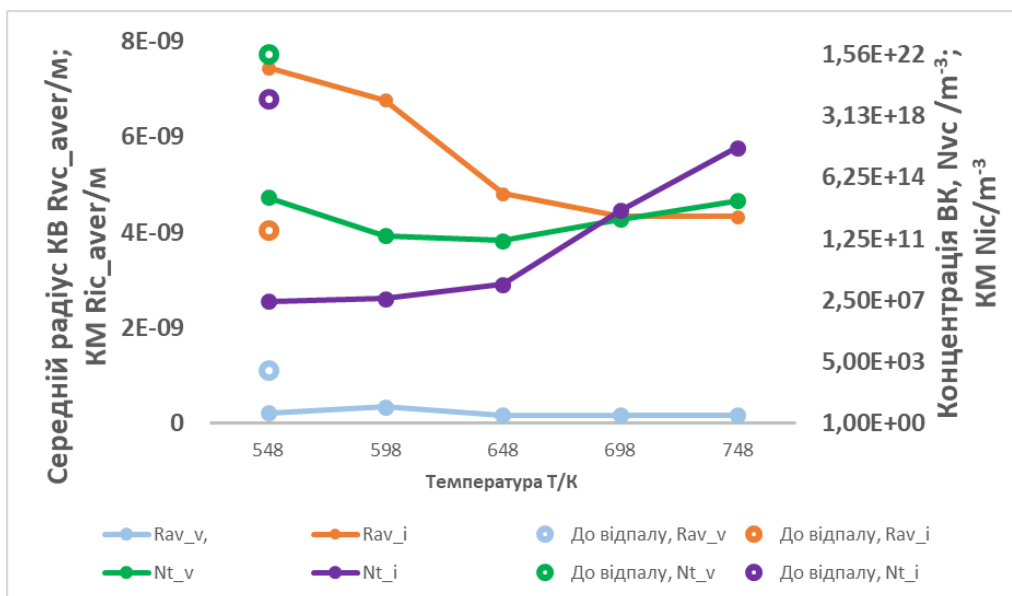
$$C_{1i}(t) = -10^6 t^6 - 10^9 t^5 + 4 \cdot 10^{11} t^4 - 7 \cdot 10^{13} t^3 + 6 \cdot 10^{15} t^2 - 2 \cdot 10^{17} t + 5 \cdot 10^{18} \quad (5)$$

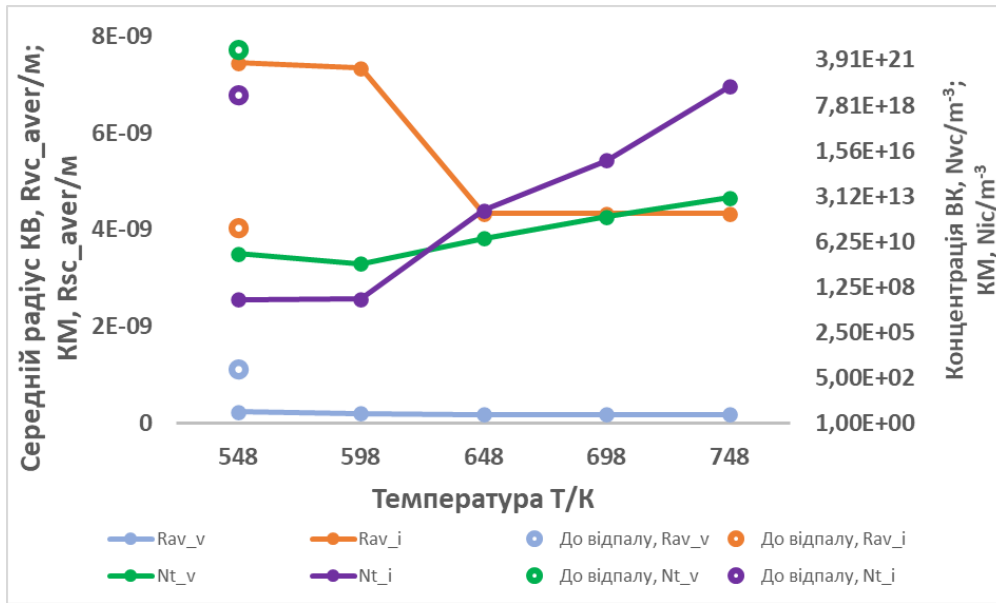
$$R_{ic-aver}(t) = 10^{-22} t^6 + 10^{-19} t^5 - 4 \cdot 10^{-17} t^4 + 8 \cdot 10^{-15} t^3 - 7 \cdot 10^{-13} t^2 + 4 \cdot 10^{-11} t + 3 \cdot 10^{-10} \quad (6)$$

$$N_{ic}(t) = -3 \cdot 10^6 t^6 + 2 \cdot 10^9 t^5 - 7 \cdot 10^{11} t^4 + 10^{14} t^3 - 8 \cdot 10^{15} t^2 + 5 \cdot 10^{17} t + 10^{18} \quad (7)$$

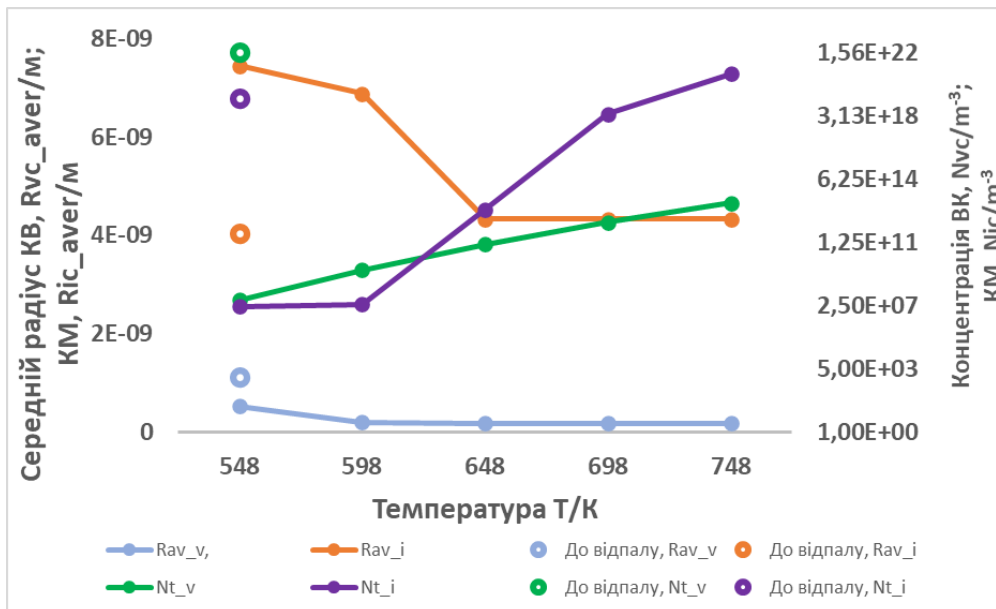
У (5-7) t – в днях.

Значення C_{1b} на три порядки менше ніж C_{1i} протягом усього часу опромінення. Для наближення розрахункового за формулою (1) значення зміни межі плинності ($\Delta\sigma$) опромінених зразків в зазначених умовах протягом 289 діб ($R_{vc-aver} = 1,13$ нм, $N_{vc} = 1,73 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $R_{ic-aver} = 4,05$ нм, $N_{ic} = 3,34 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$) до експериментально знайденого значення $\Delta\sigma = 196$ МПа у [14], необхідно взяти $\beta = 1,91$. На Рис.3 представлено яким чином температура та час відпалу впливає на середній розмір та концентрацію кластерів точкових дефектів.





В



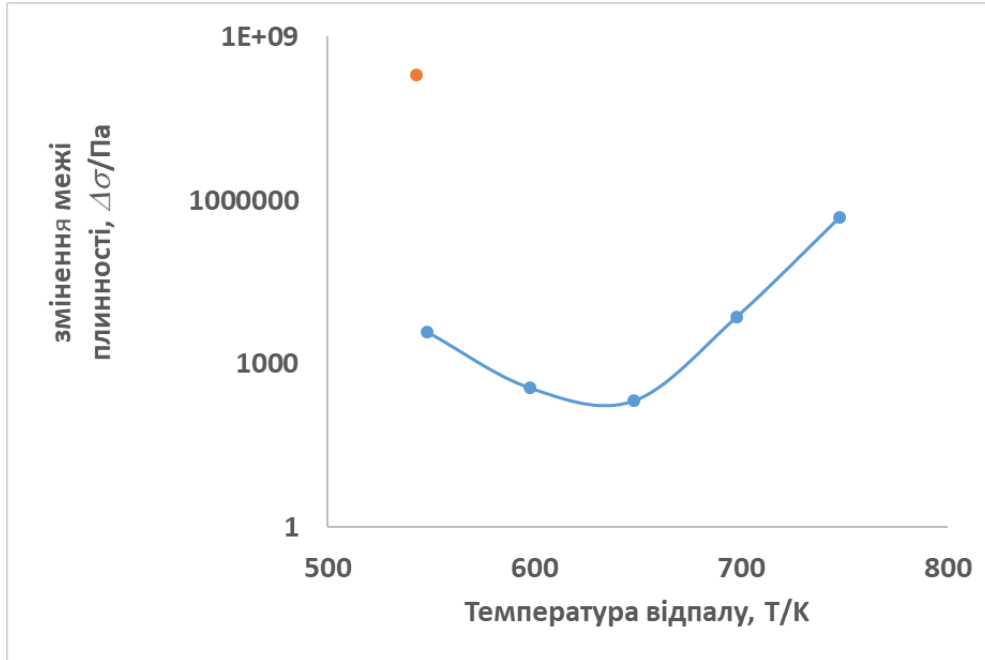
Г

Рис.3. Вплив температури (T) на середній розмір та концентрацію кластерів вакансій (КВ) та кластерів міжвузлів (КМ) в опроміненому сплаві А після відпалу протягом 5 годин (а), 25 годин (б), 50 годин(в) та 100 годин (г).

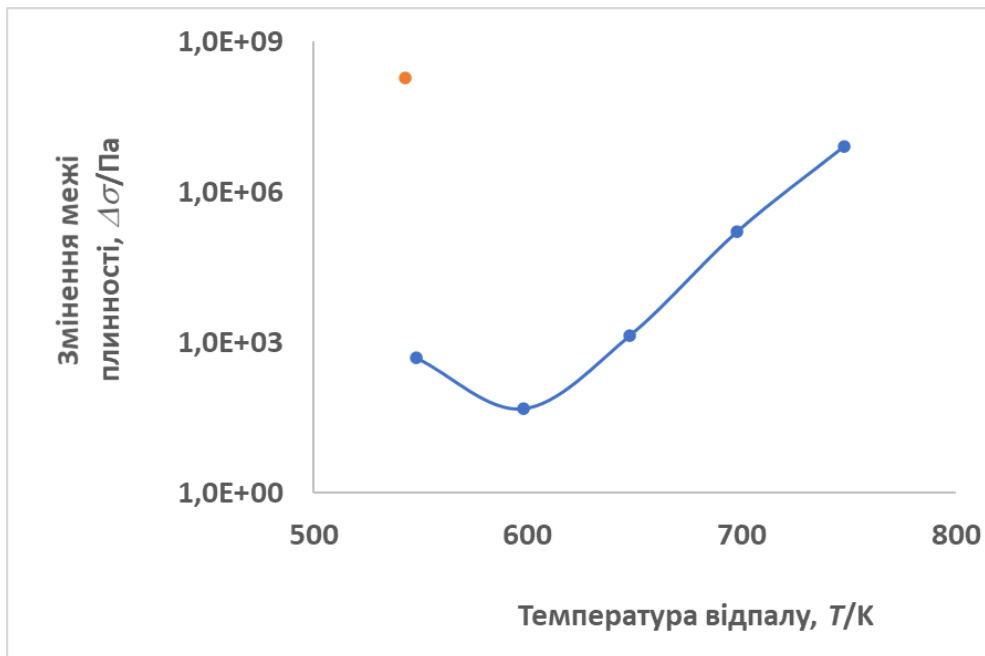
Fig. 3. Influence of temperature (T) on the average size and concentration of vacancy clusters (VC) and interstitial clusters (IC) in irradiated alloy A after annealing for 5 hours (a), 25 hours (b), 50 hours (c), and 100 hours (d).

Концентрація як кластерів вакансій, і кластерів міжвузлів зменшується на 10-12 порядків вже за відпалу з температурою 548К незалежно від часу опромінення. Відпал із температурою 648К і вище призводить до розпаду кластерів вакансій із середнім розміром понад 1.79нм (радіус димеру вакансій) та кластерів міжвузлів із середнім розміром понад 4.74нм (1000 міжвузлів). Зауважимо, що у [10] спостерігалось повільніше зменшення середнього радіусу кластерів вакансій, що можна пояснити великим значенням питомої поверхневої енергії на межі кластер вакансій – матриця для

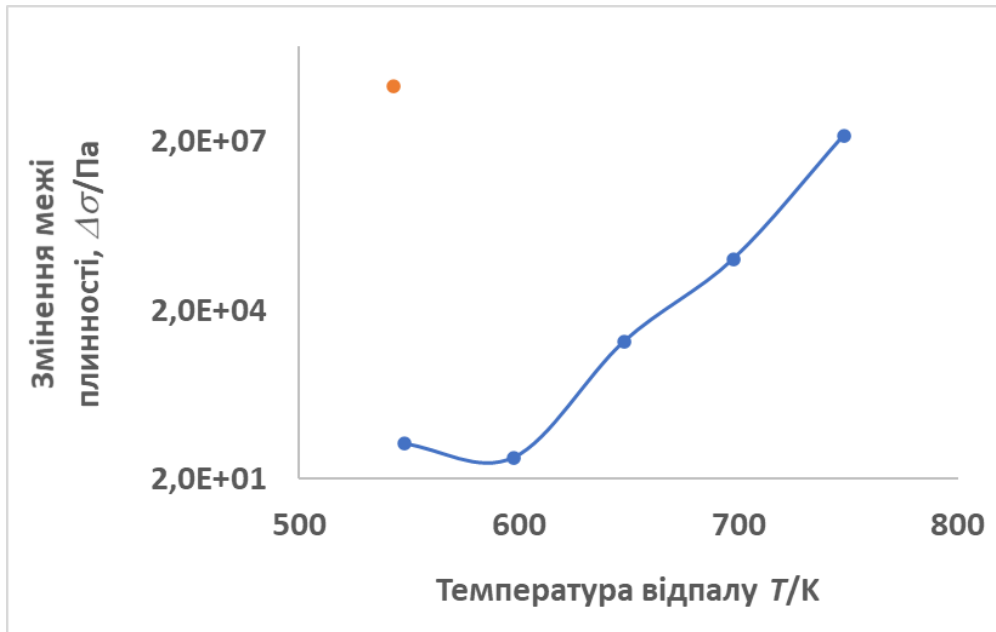
комерційного чистого заліза [10] ніж для досліджуваного сплаву А. При цьому зазначений відпал із температурою 648К і вище спричиняє зростання на декілька порядків концентрації точкових дефектів, тобто к явищу термічного старіння, яке також не спостерігалось в дослідженні [10]. На Рис. 4 представлено вплив температури та часу відпалу на зміни межі плинності $\Delta\sigma$ опромінених зразків.



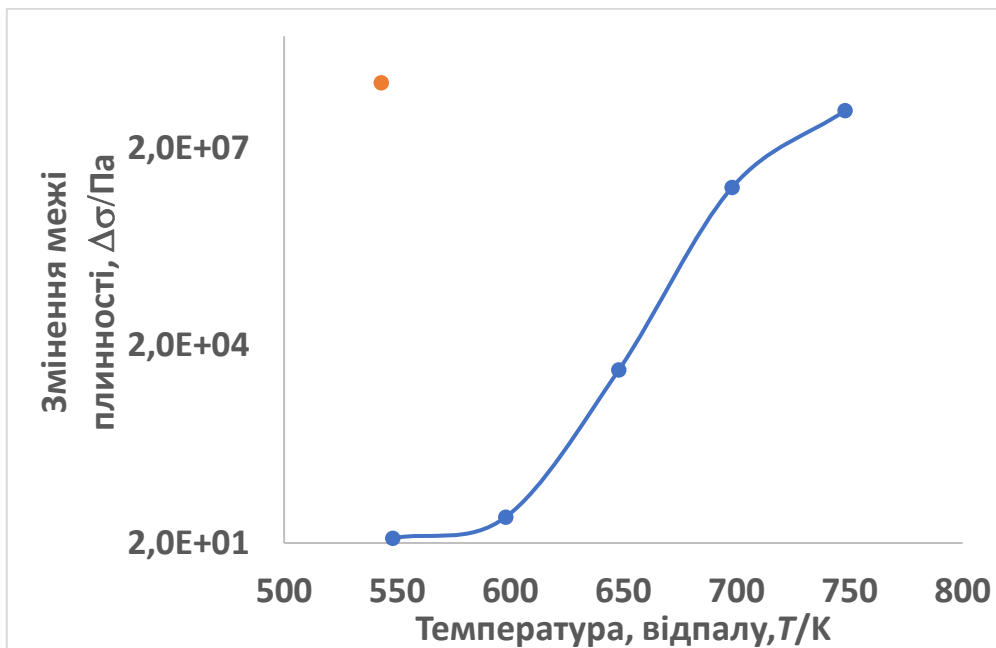
а



б



в



г

Рис.4 . Вплив температури (T) відпалу на зміну межі плинності $\Delta\sigma$ опроміненого сплаву А після відпалу протягом 5 годин (а), 25 годин (б), 50 годин(в) та 100 годин (г); коричнево коло означає зміну межі плинності після опромінення (до відпалу).

Fig. 4. Influence of annealing temperature (T) on the change in yield strength $\Delta\sigma$ of irradiated alloy A after annealing for 5 hours (a), 25 hours (b), 50 hours (c), and 100 hours (d); the brown circle indicates the change in yield strength after irradiation (before annealing).

Найбільш ефективним відпалом виявився відпал 100 годин при температурі 548К, а не при температурі 748К, використаної в [14]. Отриманий результат свідчить про необхідність брати до уваги ефект термічного старіння під час відновлення відпалу корпусів реакторів атомних електростанцій.

Однак, відповідно до мети нашого дослідження, на наступному етапі вивчалася еволюція точкових дефектів у сплаві А, повторно опроміненого при відпалі, що застосовується в [14]. тобто при температурі 748К протягом 100 годин. Результати розподілу кластерів вакансій та міжвузлових кластерів та значення концентрації ізольованих вакансій та ізольованих міжвузлів після зазначеного відпалу були початковими даними для коду [10], що моделює методом кластерної динаміки зміни в дефектній системі заліза внаслідок опромінення нейтронами. З'ясувалося, що повторне опромінення призводить до таких даних, що і при первинному опроміненні досліджуваного сплаву А. Отже, можна зробити висновок, що крихчвання сплаву А (0.01C0.004S0.015Cu0.002P0.01Ni0.15Si0.39Mn) під дією повторного опромінення описується моделлю консервативного зсуву [4].

Висновки.

1. Методом кластерної динаміки було досліджено процес відновлення сплаву заліза А (0.01C0.004S0.015Cu0.002P0.01Ni0.15Si0.39Mn), який був опромінений у реакторі Рівненської АЕС.

2. Показано, що найкращий збіг результатів моделювання з даними експерименту [14] досягається при значенні 0.77 Дж/м^2 питомої поверхневої енергії на границі кластер вакансій-матриця.

3. Знайдено значення параметра $\beta = 1,91$, при якому розрахункове за формулою (1) значення зміни межі плинності $\Delta\sigma$ опромінених зразків сплаву А збігається зі експериментальним значенням $\Delta\sigma = 196 \text{ МПа}$ у [14].

4. При відпалі сплаву А з температурою 648К і вище, спостерігається явище термічного старіння.

5. Повторне опромінення крихчвання сплаву А (0.01C0.004S0.015Cu0.002P0.01Ni0.15Si0.39Mn) під дією повторного опромінення описується моделлю консервативного зсуву [4].

Список використаної літератури:

1. Brumovsky M. Annealing and re-embrittlement of reactor pressure vessel materials / M. Brumovsky, et al. // State-of-the-art report, ATHENA WP-4, AMES Report No. 19. – JRC 46534. – EUR 23449 EN. – 2008. – 54 p.
2. Amayev A.D. Recovery of the Transition Temperature of Irradiated WVER-440 Vessel Metal by Annealing / A.D. Amayev, A.M. Kryukov, M.A. Sokov // Steele L.E. (ed.) Radiation Embrittlement of Nuclear Pressure Vessel Steels: An International Review (Fourth Volume). – ASTM STP 1170. – 1993. – P. 369–379.
3. Тригубенко О. В. Ефект зниження ударної в'язкості металу корпусів реакторів ВВЕР в умовах понадпроектної експлуатації : дис. ... канд. техн. наук / О. В. Тригубенко. – Інститут ядерних досліджень НАН України. – Київ, 2020. – 162 с.
4. Shtrombakh Ya. I. Examination of VVER-440 RPV steel re-irradiation behavior using materials from operating units / Ya. I. Shtrombakh // International Journal of Pressure Vessels and Piping. – 2000. – Vol. 77. – P. 585–590 – Режим доступу: [https://doi.org/10.1016/S0308-0161\(00\)00030-2](https://doi.org/10.1016/S0308-0161(00)00030-2)
5. Almirall N. Irradiation microstructures and hardening in commercial nuclear reactor pressure vessel steels at high extended-life fluence / N. Almirall, P. B. Wells, T. Yamamoto, G. R. Odette // Materialia – 2024, – V. 34, – P. 102056 – Режим доступу: <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2024.102056>
6. Zeman A. Evaluation of radiation stability of Generation IV structural materials by positron annihilation spectroscopy / A. Zeman, L. Debarberis, J. Kočík, V. Slugeň // Physica Status

- Solidi (C). – 2007. – Vol. 4, No. 10. – P. 3581–3586. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1002/pssc.200675840>
7. Jourdan T. Efficient simulation of kinetics of radiation-induced defects: A cluster dynamics approach / T. Jourdan, G. Bencteux, G. Adjanor // *Journal of Nuclear Materials*. – 2014. – Vol. 444. – P. 298–313.
 8. Гохман О. Р. Дослідження ефекту відпалу на дефектну структуру нейтронно опроміненого чистого заліза методом кластерної динаміки / О. Р. Гохман, Л. В. Загорулько, Т. С. Совкова // *Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки»*. – 2021. – № 1. – С. 44–54. – Режим доступу: <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-44-54>
 9. Hindmarsh A.C. LSODA – частина пакета ODEPACK / A.C. Hindmarsh // Lawrence Livermore National Laboratory. – Livermore, CA 94551, USA. – 1984. – Режим доступу: <https://computing.llnl.gov/projects/odepack>.
 10. Gokhman A. Cluster dynamics simulation of point defect clusters in neutron irradiated pure iron / A. Gokhman, F. Bergner // *Radiation Effects and Defects in Solids*. – 2010. – Vol. 165, No. 3. – P. 216–226. – DOI: 10.1080/10420151003631928.
 11. Gokhman A. A kinetics study of vacancy cluster evolution under VVER-type reactor conditions / A. Gokhman, J. Boehmert // *Radiation Effects and Defects in Solids*. – 2003. – Vol. 158. – P. 499–511. – Режим доступу: <https://doi.org/10.1080/1042015021000043836>
 12. Sun G. Orowan strengthening with consideration of thermal activation / G. Sun, M. Lei, S. Liu, B. Wen // *Computational Materials Science*. – 2024. – Vol. 233. – 112720. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112720.
 13. Russell K.C. A dispersion strengthening model based on differing elastic moduli applied to the iron-copper system / K.C. Russell, L. Brown // *Acta Metallurgica*. – 1972. – Vol. 20. – P. 969–974. – Режим доступу: [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(72\)90091-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(72)90091-0)
 14. Altstadt E. Recovery of neutron-irradiated VVER-440 RPV base metal and weld exposed to isothermal annealing at 343 °C up to 2,000 h / E. Altstadt, F. Bergner, J.-E. Brandenburg, P. Chekhonin, J. Dykas, M. Houska, A. Ulbricht // *Frontiers in Nuclear Engineering*. – 2024. – V. 3, – P. 1446635. – Режим доступу: <https://doi.org/10.3389/fnuen.2024.1446635>.

References:

1. Brumovsky M. *Annealing and re-embrittlement of reactor pressure vessel materials* / M. Brumovsky et al. // State-of-the-art report, ATHENA WP-4, AMES Report No. 19. – JRC 46534. – EUR 23449 EN. – 2008.
2. Amayev A.D. *Recovery of the Transition Temperature of Irradiated WVER-440 Vessel Metal by Annealing* / A.D. Amayev, A.M. Kryukov, M.A. Sokov // In: Steele L.E. (ed.) *Radiation Embrittlement of Nuclear Pressure Vessel Steels: An International Review (Fourth Volume)*. – ASTM STP 1170. – 1993. – P. 369–379.
3. Тригубенко О. В. *Ефект зниження ударної в'язкості металу корпусів реакторів ВВЕР в умовах понадпроектної експлуатації* : дис. ... канд. техн. наук / О. В. Тригубенко. – Інститут ядерних досліджень НАН України. – Київ, 2020.
4. Shtrombakh Ya.I. *Examination of VVER-440 RPV steel re-irradiation behavior using materials from operating units* / Ya.I. Shtrombakh // *International Journal of Pressure Vessels and Piping*. – 2000. – Vol. 77. – P. 585–590 Retrieved from [https://doi.org/10.1016/S0308-0161\(00\)00030-2](https://doi.org/10.1016/S0308-0161(00)00030-2)
5. Almirall, N., Wells, P. B., Yamamoto, T., & Odette, G. R. (2024). *Irradiation microstructures and hardening in commercial nuclear reactor pressure vessel steels at high extended-life fluence*. *Materialia*, 34, 102056 Retrieved from <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2024.102056>

6. Zeman A. *Evaluation of radiation stability of Generation IV structural materials by positron annihilation spectroscopy* / A. Zeman, L. Debarberis, J. Kočík, V. Slugeň // *Physica Status Solidi (C)*. – 2007. – Vol. 4, No. 10. – P. 3581–3586. – Retrieved from <https://doi.org/10.1002/pssc.200675840>
7. Jourdan T. *Efficient simulation of kinetics of radiation-induced defects: A cluster dynamics approach* / T. Jourdan, G. Bencteux, G. Adjanor // *Journal of Nuclear Materials*. – 2014. – Vol. 444. – P. 298–313.
8. Гохман О. Р. *Дослідження ефекту відпалу на дефектну структуру нейтронно опроміненого чистого заліза методом кластерної динаміки* / О. Р. Гохман, Л. В. Загорулько, Т. С. Совкова // *Вісник Черкаського університету. Серія «Фізико-математичні науки»*. – 2021. – № 1. – С. 44–54. Retrieved from <https://doi.org/10.31651/2076-5851-2021-44-54>
9. Hindmarsh A.C. *LSODA – частина пакета ODEPACK* / A.C. Hindmarsh // Lawrence Livermore National Laboratory. – Livermore, CA, USA. – 1984. – Retrieved from <https://computing.llnl.gov/projects/odepack>
10. Gokhman A. *Cluster dynamics simulation of point defect clusters in neutron irradiated pure iron* / A. Gokhman, F. Bergner // *Radiation Effects and Defects in Solids*. – 2010. – Vol. 165, No. 3. – P. 216–226. – Retrieved from <https://doi.org/10.1080/10420151003631928>
11. Gokhman A. *A kinetics study of vacancy cluster evolution under VVER-type reactor conditions* / A. Gokhman, J. Boehmert // *Radiation Effects and Defects in Solids*. – 2003. – Vol. 158. – P. 499–511. Retrieved from <https://doi.org/10.1080/1042015021000043836>
12. Sun G. *Orowan strengthening with consideration of thermal activation* / G. Sun, M. Lei, S. Liu, B. Wen // *Computational Materials Science*. – 2024. – Vol. 233. – Article No. 112720. – DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112720.
13. Russell K.C. *A dispersion strengthening model based on differing elastic moduli applied to the iron–copper system* / K.C. Russell, L. Brown // *Acta Metallurgica*. – 1972. – Vol. 20. – P. 969–974. – Retrieved from [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(72\)90091-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(72)90091-0)
14. Altstadt, E., Bergner, F., Brandenburg, J.-E., Chekhonin, P., Dykas, J., Houska, M., & Ulbricht, A. (2024). *Recovery of neutron-irradiated VVER-440 RPV base metal and weld exposed to isothermal annealing at 343 °C up to 2,000 h*. *Frontiers in Nuclear Engineering*, 3, 1446635. Retrieved from <https://doi.org/10.3389/fnuen.2024.1446635>

O. R. GOKHMAN

doctor of physical and mathematical sciences, professor,
professor of the Department of Applied Mathematics and Computer Science,
South Ukrainian National Pedagogical University named after K. D. Ushinsky,
Odesa, Ukraine

alexander.gokhman@gmail.com

B. V. NAZARCHUK

senior lecturer
of the Department of fundamental science
Military Academy (Odesa),
Odesa, Ukraine

nazarchuk@pdpu.edu.ua

I. S. SIVAK

post-graduate student
of the Department of Applied Mathematics and Computer Science,
South Ukrainian National Pedagogical University named after K. D. Ushinsky,

Odesa, Ukraine
igorsivak97@gmail.com

EVOLUTION OF VACANCY AND INTERSTITIAL CLUSTERS IN IRRADIATED ALLOY A DURING ANNEALING

DOI: 10.31651/2076-5851-2025-67-79

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

The present work is devoted to the study of the evolution of point defects and their clusters in irradiated alloy A under subsequent isothermal annealing. The dominant mechanisms of defect interaction, including the formation of vacancy (VC) and interstitial clusters (IC), have been analyzed within the framework of diffusion theory and reaction kinetics. By applying analytical models and numerical simulations, we investigated how irradiation time and annealing temperature affect the concentration of isolated vacancies (C_{1v}), isolated interstitials (C_{1i}), as well as the average cluster size ($R_{vc-aver}$, $R_{ic-aver}$) and the total cluster concentration (N_{vc} , N_{ic}).

The obtained results show that prolonged irradiation leads to an increase in both vacancy and interstitial concentrations, while annealing promotes their recombination and clustering. At higher temperatures, vacancy clusters become less stable, and growth of interstitial clusters is accelerated. A good correlation between theoretical predictions and experimental data was found, which confirms the reliability of the proposed model.

Particular attention was paid to the influence of defect evolution on the mechanical properties of alloy A. It was established that irradiation-induced defects significantly reduce the yield strength. However, annealing restores the plasticity due to the annihilation of point defects and restructuring of defect clusters. The dependence of yield strength variation $\Delta\sigma$ on annealing temperature and time has been analyzed, and the role of defect stabilization processes has been discussed.

The results obtained are important for understanding the long-term stability of irradiated structural materials, as well as for predicting their performance under extreme operating conditions. The developed approach can be applied to optimize annealing regimes and to improve the radiation resistance of alloys used in nuclear power engineering and other advanced technologies.

Keywords: irradiation, alloy A, vacancies, interstitials, defect clusters, annealing, yield strength, diffusion modeling, radiation resistance

Одержано редакцією 25.10.2025.
Прийнято до друку 17.11.2025

Опубліковано 24.12.2025