

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИАЦИОННОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ РЕАКТОРНОГО ТОПЛИВА НА ПРИМЕРЕ УРАНА И ЕГО СПЛАВОВ

В. А. ТАРАСОВ

Одесский государственный политехнический университет, Украина

E – mail: siiis@te.net.ua

Розроблено модель радіаційної повзучості в рамках механізму повзання та переповзання дислокацій на основі концепції дислокації як неідеального стоку для точкових дефектів. Запропонована модель працездатна для усталеної концентрації точкових дефектів (ТД), які створюються опроміненням, що значно перевищує термічно рівноважну. Наведені результати комп'ютерного дослідження кінетики гнучкої дислокації, яка взаємодіє з перешкодами при пересиченні ТД в залежності від зовнішнього навантаження, температури, концентрації ТД, потужності сферичного центру розширення, діаметра дислокаційної петлі, а також результати дослідження кінетики гнучкої дислокації у системі випадково розподілених сферичних центрів розширення і дислокаційних петель. Наведені криві залежності усталеної швидкості радіаційної повзучості від температури для технічного урана та його сплавів з малими домішками молібдена (від 0,9 до 1,3%).

Разработана модель радиационной ползучести в рамках механизма скольжения и переползания дислокаций, основанная на концепции дислокации как неидеального стока для точечных дефектов. Предложенная модель работоспособна при установившейся концентрации точечных дефектов (ТД), создаваемых облучением, значительно превышающей термически равновесную. Представлены результаты компьютерного исследования кинетики гибкой дислокации, взаимодействующей с препятствиями, при пересыщении ТД в зависимости от внешней нагрузки, температуры, концентрации ТД, мощности сферического центра расширения, диаметра дислокационной петли, а также результаты исследования кинетики гибкой дислокации в системе случайно распределенных сферических центров расширения и дислокационных петель. Представлены кривые зависимости установившейся скорости радиационной ползучести от температуры для технического урана и его сплавов с малыми добавками молибдена (от 0,9 до 1,3%).

The model of a radiation creep is explained within the framework of the mechanism of gliding and climbing dislocations based on the conception of a dislocation as not ideal sink for point radiation defects (PRD). The offered model is efficient for installed concentration PRD, considerably exceeding thermally steady state concentration. The gliding of dislocation are describing as due to moving dislocation kinks in Peierl's relief. The climbing of dislocation are describing as due to moving dislocation jogs. The mathematical model for the computer program simulating the offered model of radiation creep is developed. The complex of the computer programs simulating the radiation creep is developed. The computer simulation researches are conducted and the outcomes of a research of a kinetics of a flexible sliding and climbing dislocation interacting to obstacles of a various type (spherical centre of extension, dislocation prismatic loop and their spatially random distributions) for various installed concentration PRD, external loadings and temperatures are represented. The curves of installed rate of a radiation creep from temperature for uranium and its alloys with small additions of molybdenum (from 0,9 to 1,3 %) are obtained.

ВВЕДЕНИЕ

Большинство экспериментальных данных по радиационной ползучести относится к уже используемым в действующих реакторах материалам, которые испытывались в условиях, близких к рабочим режимам реакторов. Экспериментальные исследования радиационного повреждения материалов и изменения их свойств сопряжены с большими затратами труда, средств и времени, а также часто со значительными трудностями технического и технологического характера. Поэтому особую ценность представляет разработка теоретических моделей радиационной ползучести, позволяющих получить

оценки скорости радиационной ползучести в значительных диапазонах изменения таких параметров, как температура, нагрузка и плотность потока.

Большое разнообразие теоретических моделей радиационной ползучести объединяет общее положение - наличие в облучаемом материале высокой концентрации точечных дефектов (ТД) и стоков для них. Учет этого положения с привлечением дислокационных представлений позволяет объяснить особенности радиационной ползучести материалов под напряжением результатами скольжения и переползания дислокаций в поле распределенных препятствий. Теоретические модели, построенные на основе этих представлений и использующие аналитиче-

ское описание, дают аналитические выражения для скорости радиационной ползучести, позволяющие качественно судить о характере влияния некоторых факторов на скорость радиационной ползучести. Однако количественное выявление особенностей радиационной ползучести на основе модели движения дислокаций в поле распределенных препятствий возможно лишь с привлечением методов математического моделирования на ЭВМ

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАДИАЦИОННОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ

Физическая модель, принятая автором, предполагает наличие в облучаемом материале активных к движению дислокаций препятствий движущимся дислокациям, в качестве которых рассматривались сферические центры расширения различной мощности, дислокационные петли краевого типа, и ТД (междоузельные атомы и вакансии), генерируемые облучением (в делящихся материалах ТД генерируются также процессом торможения осколков деления), причем установившаяся концентрация ТД значительно превышает термически равновесную.

УСТАНОВИВШАЯСЯ КОНЦЕНТРАЦИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

Если температура, при которой проводится облучение, такова, что образующиеся дефекты подвижны, то будет достигнут баланс между постоянными скоростями образования ТД (при постоянной интенсивности потока излучений) и их отжига [1,2]. При некоторых условиях (определяемых, главным образом, плотностью потока облучений, температурой и плотностью стоков для ТД) в образце установится постоянная, избыточная (по сравнению с термически равновесной) концентрация ТД. В [3] приведены результаты экспериментов на α -латуни с 30% цинка, проведенные в атомном реакторе при потоке нейтронов $5 \cdot 10^{12}$ нейтр./см²·с, которые позволяют провести оценку установившейся концентрации вакансий в интервале температур 100...200°C и получить для нее значение $\sim 10^{-8}$. В [4] приведены оценки установившейся концентрации для вакансий $C_v \sim 10^{-5}$ и для междоузельных атомов $C_i \sim 10^{-10}$ для тонких фольг из циркония, облучаемых в колонне высоковольтного электронного микроскопа при скорости генерации ТД $\sim 10^{-4}$ с⁻¹.

В [5] проведены оценки, показывающие, что установившиеся концентрации ТД в уране при плотности потока тепловых нейтронов $\sim 10^{12}$ нейтр./см²·с, температуре $\sim 100^\circ$ С и плотности дислокаций $\rho \sim 10^9$ см⁻² находятся в следующих интервалах: $C_v \sim 10^{-8} \dots 10^{-10}$ (при термически равновесной $\sim 10^{-12}$) и $C_i \sim 10^{-10} \dots 10^{-14}$ (при термически равновесной $\sim 10^{-30}$). Таким образом, с учетом того, что установившаяся концентрация ТД зависит от плотности потока излучений, для математического моделирования на ЭВМ можно принять следующие интервалы изменений для установившихся концентраций ТД: $C_v \sim$

$10^{-7} \dots 10^{-11}$ и $C_i \sim 10^{-8} \dots 10^{-15}$.

МОДЕЛЬ РАДИАЦИОННОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ

Так как главная цель автора - математическое моделирование на ЭВМ радиационной ползучести, то здесь будет обосновано аналитическое описание для скоростей скольжения и переползания дислокации, которое будет использовано при создании математической модели и моделирующей программы для ЭВМ.

Скорость переползания дислокации получают, решив задачу об определении результирующего потока ТД на дислокацию. Широко распространено определение потока ТД на дислокацию, например [6,7], на основе решения, предложенного в работе [8]. Результаты, представленные в [8], были усовершенствованы в [9], где учтены объемные источники ТД, и в [10], где учитывалась взаимная рекомбинация ТД. Авторы [8-10] полагали малую пересыщенность ТД в материале $C_\alpha - C_\alpha^P \ll 1$, где

$$C_\alpha^P = C_\alpha^0 \cdot \exp\left(\frac{\theta}{3kT} \cdot \sigma_{\ell\ell}^{ex}\right) - \text{равновесная концентрация ТД типа } \alpha \text{ в материале под действием внешних напряжений, } \sigma_{\ell\ell}^{ex} - \text{след тензора внешних напряжений, } C_\alpha^0 - \text{термически равновесная концентрация ТД типа } \alpha \text{ в ненапряженном кристалле. Тогда для нахождения потока ТД на сток достаточно решить стационарную диффузионную задачу. При наличии объемных источников ТД это означает, что стоки успевают поглощать все рождающиеся в объеме ТД, что позволяет вокруг каждого стока условно выделить область его влияния, определяемую тем, что все ТД, рожденные в данной области, поглощаются данным стоком. Чтобы решить диффузионное уравнение, необходимо задать граничные условия. В [8-10] предполагается, что дислокация является идеальным стоком для ТД, т.е., что у ядра дислокации (при } \gamma = \gamma_0) \text{ поддерживается концентрация}$$

где C_α^P - равновесная концентрация ТД типа α вблизи дислокации. Другое граничное условие получают из предположения, что на некотором расстоянии R $E_\alpha(R, \theta) = 0$, и тогда $C_\alpha(R) \approx C_\alpha$. Полученные в [8] выражения, широко используются для получения аналитических выражений для скорости радиационной ползучести без учета предположений, при которых они получены. Например, в работах [6,7 и др.] считают всю модель [8] приемлемой, за исключением второго граничного условия, которое вводится следующим образом: $C_\alpha(R_d) = C_\alpha^0$, где R_d - среднее расстояние между дислокациями; C_α^0 - некоторая средняя по образцу концентрация ТД, создаваемых облучением, которая находится из усредненных по времени и объему кинетических уравнений [11]. Тогда все решения, полученные в

$$C_\alpha(r_0) = C_\alpha^P \cdot \exp(-E_\alpha(r_0, \theta) / kT),$$

где C_α^P - равновесная концентрация ТД типа α вблизи дислокации. Другое граничное условие получают из предположения, что на некотором расстоянии R $E_\alpha(R, \theta) = 0$, и тогда $C_\alpha(R) \approx C_\alpha$. Полученные в [8] выражения, широко используются для получения аналитических выражений для скорости радиационной ползучести без учета предположений, при которых они получены. Например, в работах [6,7 и др.] считают всю модель [8] приемлемой, за исключением второго граничного условия, которое вводится следующим образом: $C_\alpha(R_d) = C_\alpha^0$, где R_d - среднее расстояние между дислокациями; C_α^0 - некоторая средняя по образцу концентрация ТД, создаваемых облучением, которая находится из усредненных по времени и объему кинетических уравнений [11]. Тогда все решения, полученные в

[8], сохраняют свой вид с заменой R на R_d и C_α на C_α^0 . Однако при таком подходе порождается ряд противоречий и физических неопределенностей. Действительно, в усредненных кинетических уравнениях [11] C_α не зависит от пространственной переменной, т.е. полагается, что концентрация ТД постоянна по всему образцу, в рассматриваемом же случае концентрация зависит от пространственной переменной. Зависимость концентрации ТД от пространственной координаты обусловлена предположением о дислокации как идеальном стоке для ТД. Для модели дислокации как идеального стока характерна сильная зависимость потока ТД на дислокацию (а следовательно, и скорости переползания дислокации) от задаваемого значения R_d , причем при постоянном значении C_α^0 I_α будет менять свою величину от некоторой конечной величины при R_d , достаточно большом по сравнению с r_0 до ∞ при $R_d = r_0$. Отметим, что C_α^0 также меняет свое значение согласно усредненным кинетическим уравнениям в зависимости от задаваемого значения R_d . При этом совершенно не ясно, какими физическими соображениями можно обосновать выбор величины R_d . Выбор R_d на основе плотности дислокаций, очевидно, не достаточно корректен. Действительно, в работе [8] физической основой рассматриваемого распределения ТД у дислокации полагается поле напряжений, создаваемое дислокацией, что и отражено в решении, которое дает граничную концентрацию C_α на расстоянии R , на котором E_α пренебрежимо мала. Так как в рассматриваемом случае R_d связано с плотностью дислокаций, то R_d может быть как больше R , так и меньше R . Если же плотность дислокаций достаточно велика и $R_d < R$, то решение из [8] перестает быть справедливым. Таким образом, для моделей радиационной ползучести, использующих модель идеального стока для дислокации, физическая неопределенность в задании параметра R_d приводит к неопределенности всего процесса кинетики ТД при облучении, а следовательно, и самого процесса радиационной ползучести.

Поэтому представляется целесообразным для процесса радиационной ползучести, который проходит при значительных пересыщениях ТД, принять, что дислокация не является идеальным стоком для ТД, и вблизи нее так же, как и во всем образце устанавливается концентрация ТД в соответствии с усредненными кинетическими уравнениями. При этом дислокация должна иметь конечный сток ТД. Действительно, если рассматривать дислокацию как объект с некоторой внутренней структурой ядра, например, со ступеньками, которые являются стоками для ТД, то она перестает быть идеальным стоком для ТД, т.е. поток ТД, стекающих на дислокацию, конечен, и вблизи дислокации может устанавливаться концентрация ТД, превышающая равновесную. Подчеркнем, что в модели дислокации, как идеального стока, полагается, что вблизи последней поддерживается равновесная концентрация ТД, и

поток ТД на дислокацию определяется отличием ее от некоторой объемной концентрации ТД. В модели же дислокации, как неидеального стока, если у дислокации концентрация ТД превышает термически равновесную, то поток ТД на дислокацию определяется разностью между концентрацией ТД у дислокации и термически равновесной (с учетом и поля напряжений самой дислокации), т.е. дислокация как бы стремится восстановить термически равновесную концентрацию, но не может этого сделать.

В работе [12] Н. Мотт впервые было предложено выражение для скорости дрейфа дислокационной ступеньки, поглощающей и испускающей вакансии в кристалле под внешней нагрузкой (диффузионная ползучесть), причем выражение учитывало возможность пересыщения вакансиями через осмотическую силу. Осмотические силы возникают, если рассматривать кристалл под внешней нагрузкой как открытую термодинамическую систему с переменным числом ТД.

В предположении, что ступенька является точечным источником-стоком для вакансий было показано, что параллельным перемещением ее можно пренебречь, а при рассмотрении диффузии ТД можно использовать решение, которое получено для квазиравновесного состояния, и тогда согласно [13] статическое поле диффузии вокруг ступеньки

$$C_\alpha - C_\alpha^0 = C'_\alpha \frac{b}{r} \quad (1)$$

вызывает увеличение потока ТД типа α :

$$I_\alpha = -4\pi r^2 D_\alpha \frac{\partial C}{\partial r} = 4\pi D_\alpha C'_\alpha b \quad (2)$$

где избыточная концентрация ТД, находящихся в локальном равновесии со ступенькой, равна

$$C'_\alpha = C_\alpha^0 \left[\exp\left(\frac{F_\alpha v_a}{LbkT}\right) - 1 \right] \quad (3)$$

и скорость дрейфа ступеньки

$$v_{ст}^\alpha = I_\alpha a \quad (4)$$

Отметим, что Н. Мотт рассматривал лишь вакансии, а индекс α -типа ТД введен в выражения (1)-(4) автором настоящей статьи с целью облегчения обобщения этих выражений на случай радиационной ползучести, предусматривающий совместное рассмотрение вакансий и межузельных атомов. Сила переползания F^α/L , действующая на дислокацию и входящая в выражение (3), задается выражением

$$\frac{F^\alpha}{L} = \frac{F_{упр}}{L} + \frac{F_{осм}^\alpha}{L} \quad (5)$$

где $F_{упр}/L$ - сила переползания, обусловленная действием поля упругих напряжений и задаваемая выражением

$$\frac{F_{упр}}{L} = \frac{(b\Sigma \times \xi)(b \times \xi)}{|b \times \xi|} \quad (6)$$

где Σ - тензор упругих напряжений, b - вектор Бюр-

герса; ξ - единичный вектор, задающий направление дислокационной линии, где $F_{осм}^a/L$ - осмотические силы, обусловленные пересыщением ТД и задаваемые выражениями

$$\frac{F_{осм}^v}{L} = \frac{kTb_{кр}}{v_a} \ln \frac{C_v}{C_v^0} \quad (7)$$

и

$$\frac{F_{осм}^I}{L} = - \frac{kTb_{кр}}{v_a} \ln \frac{C_I}{C_I^0}. \quad (8)$$

В своей работе Н. Мотт разложил экспоненту, входящую в выражение (3), в предположении малости упругих напряжений и малых пересыщений вакансий, и привел окончательное выражение для скорости дрейфа ступеньки в следующем виде:

$$V_{ст}^v = 4\pi abC_v^0 D_v \frac{F^v v_a}{LbkT} = \frac{4\pi D_S^v a F^v}{LkT}. \quad (9)$$

Авторы работы [13], используя выражение (9) и учитывая то, что диффузионная подвижность вакансий в ядре дислокации выше, чем в объеме, а также то, что концентрация дислокационных ступенек задается выражением

$$C_{ст} = \frac{1}{a} \exp\left(-\frac{F_{ст}}{kT}\right) \quad (\text{где } a - \text{ постоянная}$$

решетки; $F_{ст}$ - энергия образования ступеньки), представили следующее выражение для скорости переползания дислокации:

$$V_{пер}^v = \frac{4\pi D_S^v v_a (F^v / L)}{abkT \ln(\bar{z}_v / b)} \exp\left(\frac{\Delta W_S^v - 2F_{ст}}{2kT}\right)$$

,(10) где \bar{z}_v - среднее квадратическое расстояние, на которое происходит диффузия вакансии ядра вдоль дислокации до того, как произойдет испарение вакансии в решетку; ΔW_S^v - разница между энергией активации самодиффузии в объеме и энергией активации самодиффузии в ядре, $F_{ст}$ - энергия образования ступеньки. Отказавшись от разложения экспоненты, входящей в (3), ибо для радиационной ползучести нельзя делать предположения о малой пересыщенности ТД, и рассматрив вакансии и межузельные атомы, автор настоящей статьи получил следующее выражение для скорости переползания дислокации (11):

$$V_{пер} = \frac{4\pi D_S^I}{akT \ln(\bar{z}_I / b)} \left[\exp\left(\frac{F^I v_a}{LbkT}\right) - 1 \right] \cdot \exp\left(\frac{\Delta W_S^I - 2F_{ст}}{2kT}\right) - \frac{4\pi D_S^v}{akT \ln(\bar{z}_v / b)} \cdot \left[\exp\left(\frac{F^v v_a}{LbkT}\right) - 1 \right] \exp\left(\frac{\Delta W_S^v - 2F_{ст}}{2kT}\right) \quad (11)$$

Отметим, что преимущественное поглощение дислокацией межузельных атомов по сравнению с вакансиями (преференс) в разработанной модели определяется не только различием в упругом взаи-

модействии дислокации с межузельными атомами и вакансиями как в [8 и др.], но и различием в пересыщении межузельными атомами и вакансиями, что выражается через различие соответствующих осмотических сил. А различие преференса для разных стоков (при одинаковых пересыщениях межузельными атомами и вакансиями), например, между дислокациями, по-разному ориентированными по отношению к внешней нагрузке, определяется их различием в упругом взаимодействии с межузельными атомами и вакансиями.

Скорость скольжения дислокации с перегибами в рельефе Пайерлса согласно [13] задается выражением:

$$V_{ск} = \frac{2F_{пер} h}{akT} D_k \exp\left(-\frac{F_k}{kT}\right), \quad (12)$$

где, $F_{пер}$ - сила, обусловленная действием упругих напряжений на перегиб и задаваемая выражением

$$F_{пер} = h \cdot \frac{\left[(b \cdot \Sigma) \times \xi \right] \cdot \left[\xi \times (b \times \xi) \right]}{\left| (b \times \xi) \right|}, \quad (13)$$

D_k - коэффициент диффузии перегибов, h - высота перегиба, F_k - энергия образования перегиба.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ МОДЕЛИРУЮЩЕЙ РАДИАЦИОННУЮ ПОЛЗУЧЕСТЬ ПРОГРАММЫ

Согласно [14] скорость ползучести моделируемого блока кристалла равна

$$\dot{\epsilon} = b\rho u^* \quad (14)$$

$$\text{где } u^* = \frac{1}{\Delta \tau \rho V} \sum_i^N \Delta S_i, \quad (15)$$

ρ - плотность подвижных дислокаций, b ; - модуль вектора Бюргеса; ΔS_i - площадь, заматаемая i - й дислокацией за время $\Delta \tau$; V - объем кристалла; N - число дислокаций в объеме V . Поэтому предметом моделирования было выбрано скольжение и переползание гибкой дислокации в блоке кристалла, описуемого в приближении упругоизотропного континуума с модулем сдвига μ и коэффициентом Пуассона ν , взаимодействующей с препятствиями, в условиях пересыщения кристалла ТД, создаваемыми облучением.

Математическая модель движения дислокации основывается на модели скольжения дислокации в рельефе Пайерлса, осуществляемого посредством движения перегибов (выражение (12)), и на модели переползания дислокации, осуществляемого посредством движения ступенек дислокационной линии (выражение (11)). Препятствия описываются своими полями напряжений, например, поры, сферические скопления точечных дефектов, сферические выделения в сплавах и при определенных условиях примесные атомы в твердых растворах замещения, а также внедренные осколки делящихся материалов описываются полем напряжения сферически-симметричного центра расширения [15].

Математическое моделирование на ЭВМ движения гибкой дислокации осуществлялось следующим

образом. На линии дислокации выбирается N опорных точек (каждой точке соответствует элементарный сегмент дислокационной линии), движение каждой из которых рассчитывается согласно уравнениям следующей системы:

$$\begin{aligned} (\vec{V}, \vec{\xi}) &= 0, \\ (\vec{V}, \vec{n}_{СК}) &= A_1 |dF_Y| (\text{sign}\{dF_{ТР} - (dF_Y, \vec{n}_{СК})\} - 1), \\ (\vec{V}, \vec{n}_{ПЕР}) &= A_2^I (dF_Y + F_K^I, \vec{n}_{ПЕР}) - \\ &- A_2^V (dF_Y + F_K^V, \vec{n}_{ПЕР}), \end{aligned} \quad (16)$$

где \vec{V} - скорость движения опорной точки дислокации; $\vec{\xi}$ - единичный вектор касательной к линии дислокации; $\vec{n}_{СК}$ - единичный вектор, определяющий направление скольжения; $\vec{n}_{ПЕР}$ - единичный вектор, определяющий направление переползания; dF_Y - сила, обусловленная полями упругих напряжений: напряжение внешней нагрузки, напряжения препятствий, напряжение самодействия дислокации; $dF_{ТР}$ - сила трения, определяемая стартовым напряжением дислокации [16], A_1 - коэффициент, значение для которого можно получить из выражения (12) для скорости скольжения дислокации; A_2^{α} - коэффициенты, значения для которых можно получить из выражения (11) для скорости переползания дислокации; F_K^{α} - осмотические силы (7), (8), обусловленные пересыщением кристалла ТД.

Система уравнений (16) привязана к локальной системе координат, образованной векторами $\vec{\xi}, \vec{n}_{СК}, \vec{n}_{ПЕР}$, причем, при движении гибкой дислокации эти векторы могут менять свое направление, поэтому в общей системе координат составляющие скорости движения опорной точки определяются следующим выражением:

$$V_i' = \ell_{ij} V_j, \quad i, j=1,2,3, \quad (17)$$

где V_j - вычисляются по уравнениям (16), ℓ_{ij} - косинусы углов между осями локальной и общей систем координат. Положение опорной точки "n" в общей системе координат через k шагов расчета определяется выражением

$$(x_i^n)^k = (x_i^n)^{k-1} + (V_i^n)^k \cdot \tau, \quad (18)$$

где $i=1,2,3$

Положение дислокационной линии определяется посредством аппроксимации положения опорных точек.

РЕЗУЛЬТАТЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделировалась радиационная ползучесть блока материала, имеющего упругие характеристики, параметр кристаллической решетки, размер атома, коэффициент диффузии и другие параметры, соответствующие урану, задание которых необходимо для

моделирования на ЭВМ согласно разработанной модели.

Первоначально исследовалась кинетика моделируемой гибкой дислокации в зависимости от внешней нагрузки, температуры, концентрации межузельных атомов (для пересыщений ТД, характерных для урана, в уравнениях (16) можно пренебречь вакансионным членом), мощности сферического центра расширения, диаметра дислокационной петли, а также кинетика гибкой дислокации в системе случайно распределенных сферических центров расширения и дислокационных петель [5].

На основе полученных результатов моделирующей расчетов, использующих соответствующие различным элементам в уране мощности препятствий, и с учетом таблиц растворимостей в уране был выделен ряд легирующих добавок, эффективно (согласно рассматриваемой модели) влияющих на радиационную ползучесть урана: W, Ta, Hf, Nb, Ir, Pt, Mo, Rh, Th, Ru, Zr, Au, Y, Ti, V, Sm, Tl, Pb, Ag и некоторые другие.

Данные моделирования для установившейся скорости радиационной ползучести технического урана

Концентрация межузельных атомов C_1	Эффективная скорость u^* , м · с ⁻¹	Скорость ползучести $\dot{\epsilon}$, ч ⁻¹
10^{-11}	$1 \cdot 10^{-11}$	$0,9 \cdot 10^{-4}$
10^{-12}	$5 \cdot 10^{-12}$	$4,5 \cdot 10^{-5}$
10^{-13}	$8 \cdot 10^{-13}$	$7,2 \cdot 10^{-6}$

Как показало моделирование, кинетика гибкой дислокации, взаимодействующей с дислокационной петлей краевого типа, в основном, совпадает с кинетикой гибкой дислокации, взаимодействующей со сферическим центром расширения. Результаты моделирования показывают, что дислокационные петли являются значительно более эффективными препятствиями движению дислокаций по сравнению с примесными атомами. Результаты исследования зависимости u^* от концентрации дислокационных петель краевого типа диаметром $20 \cdot 10^{-8}$ см показывают, что выход u^* на стационарный уровень происходит при концентрации дислокационных петель $\sim 0,01$ ат.%. Так как концентрация 0,01 ат.% соответствует флюенсу $\sim 10^{17}$ нейтр./см², при котором согласно экспериментальным данным для урана наблюдается выход на установившуюся скорость радиационной ползучести, то можно сделать вывод о том, что выход на установившуюся скорость ползучести урана связан с окончанием формирования системы препятствий из дислокационных петель. Отметим также, что при моделировании движения гибкой дислокации, взаимодействующей с дислокационными петлями, впервые был обнаружен процесс образования дислокационных петель, оставляемых сильно искривленными участками движущейся дислокации, причем петли образуются не вокруг препятствий, что хорошо известно, а, предположи-

тельно, на пиках полей напряжений.

Результаты моделирования позволяют сделать оценки установившейся скорости радиационной ползучести урана при температуре 373 К и нагрузке 1 кг/мм² (таблица). Сравнение результатов, представленных в таблице, и имеющихся экспериментальных данных для установившейся скорости радиационной ползучести технического урана общей чистотой 99,8% (плотность дислокаций $\rho \sim 10^9 \text{см}^{-2}$),

полученные при плотности потока $\sim 10^{12} \text{нейтр./см}^2 \cdot \text{с}$, температуре 373 К и нагрузке 1 кг/мм², свидетельствует об их хорошем согласии. Сравнение полученных результатов также позволяет сделать вывод о том, что установившаяся концентрация междоузельных атомов в уране при плотности потока $\sim 10^{12} \text{нейтр./см}^2 \cdot \text{с}$ находится в интервале $10^{-11} \dots 10^{-13}$.

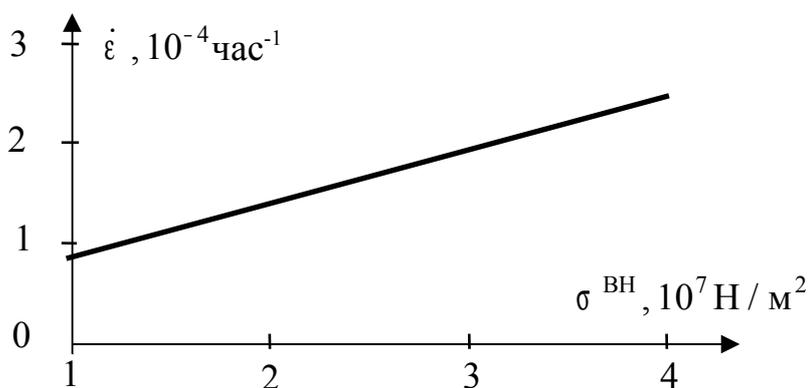


Рис.1. Зависимость установившейся скорости радиационной ползучести технического урана $\dot{\epsilon}$ от величины внешней нагрузки σ^{BH} при температуре 373 К и $C_I = 1 \cdot 10^{-11}$, где C_I - концентрация междоузельных атомов

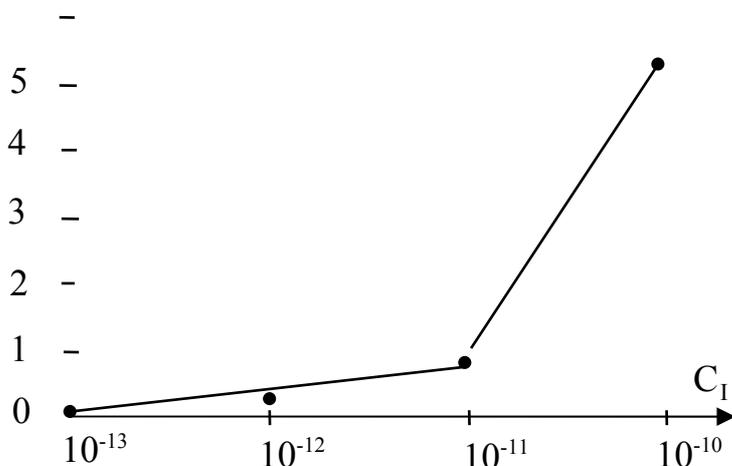


Рис.2. Зависимость установившейся скорости радиационной ползучести технического урана $\dot{\epsilon}$ от величины

ны концентрация междоузельных атомов C_I при температуре 373 К и внешней нагрузке $\sigma_{BH} = 1 \cdot 10^7 \text{ Н/м}^2$

На рис.1 представлена зависимость установившейся скорости радиационной ползучести технического урана от величины внешней нагрузки, построенная по результатам моделирования. Зависимость имеет линейный характер и находится в хорошем согласии с экспериментальными данными. На рис.2 представлена зависимость установившейся скорости радиационной ползучести технического урана от величины концентрации междоузельных атомов, построенная по результатам моделирования. Так как концентрация междоузельных атомов пропорциональна плотности потока нейтронов, правомочен сравнительный анализ представленной кривой (см.рис.2) и экспериментальной зависимости скорости ползучести технического урана от плотности потока нейтронов. Сравнительный анализ показывает, что расчетная и экспериментальная зависимости качественно и количественно согласуются между собой.

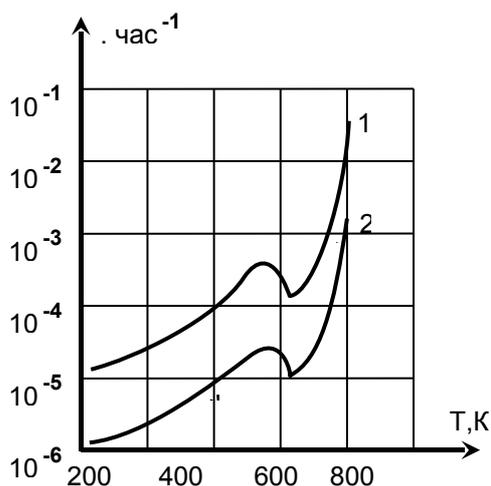


Рис.3. Температурные зависимости установившейся скорости радиационной ползучести $\dot{\epsilon}$ технического урана (кривая 1) и сплавов урана с малыми добавками молибдена (0,9...1,3%) (кривая 2) при плотности потока $\sim 10^{12}$ н/см²с, где T - температура (*) - экспериментальные значения

На рис.3 представлена зависимость установившейся скорости радиационной ползучести от температуры для технического урана, полученная в результате моделирующих расчетов при нагрузке 1 кг/мм² и установившейся концентрации междоузельных атомов $\sim 10^{12}$. Также представлена зависимость установившейся скорости радиационной ползучести от температуры для сплавов урана с малыми добавками молибдена (0,9...1,3%), полученная в результате моделирующих расчетов при нагрузке 1 кг/мм², установившейся концентрации междоузельных атомов $\sim 10^{13}$ и такой же функции отжига. При построении кривой учитывались экспе-

риментальные данные, отмеченные на рисунке звездочками.

Заключение

Разработана теоретическая модель радиационной ползучести в рамках механизма скольжения и переползания дислокаций, основанная на концепции дислокации как неидеального стока для ТД. Предложенная модель работоспособна при установившейся концентрации ТД, создаваемых облучением, значительно превышающей термически равновесную.

Разработан "динамический" метод математического моделирования скольжения и переползания гибкой дислокации и комплекс программ для ЭВМ, моделирующих предложенную модель радиационной ползучести.

Проведены исследования кинетики гибкой дислокации, взаимодействующей с препятствиями, при пересыщении ТД в зависимости от внешней нагрузки, температуры, концентрации ТД, мощности сферического центра расширения, диаметра дислокационной петли, а также результаты исследования кинетики гибкой дислокации в системе случайно распределенных сферических центров расширения и дислокационных петель. Было показано, что с помощью разработанного метода моделирования, оказывается возможным установить область температур, нагрузок, концентраций ТД, создаваемых облучением, в пределах которых влияние легирующих элементов-стопоров эффективно. Был выделен ряд легирующих добавок, эффективно (согласно рассматриваемой модели) влияющих на радиационную ползучесть урана. Разработанный метод моделирования позволяет количественно оценивать влияние различного типа препятствий на кинетику дислокаций.

При моделировании движения гибкой дислокации, взаимодействующей с дислокационными петлями, впервые был обнаружен процесс образования дислокационных петель, оставляемых сильно искривленными участками движущейся дислокации, причем петли образуются не вокруг препятствий, что хорошо известно, а предположительно, на пиках полей напряжений.

Показано, что для технического урана полученные в результате моделирования оценки установившейся скорости радиационной ползучести хорошо согласуются с экспериментальными данными. Сравнение результатов моделирования и экспериментальных данных позволяет сделать вывод о том, что установившаяся концентрация междоузельных атомов в уране при плотности потока $\sim 10^{12}$ нейтр./см²с находится в пределах 10^{-11} ... 10^{-13} .

Представлены кривая зависимости установившейся скорости радиационной ползучести от температуры для урана, полученная в результате моделирующих расчетов при нагрузке 1 кг/мм² и установившейся концентрации междоузельных атомов $\sim 10^{12}$, и кривая зависимости установившейся скорости радиационной ползучести от температуры для спла-

вов урана с малыми добавками молибдена (0,9±1,3%), полученная в результате моделирующих расчетов при нагрузке 1 кг/мм² и установившейся концентрации междоузельных атомов ~10⁻¹³. Представленные кривые позволяют прогнозировать температурное поведение урана и его сплавов и имеют практическое значение для успешного проектирования элементов реакторных конструкций, их безопасной эксплуатации и прогнозирования их поведения в аварийных ситуациях. Полученные результаты показывают, что разработанный метод моделирования является эффективным дополнением к прямым экспериментальным исследованиям.

ЛИТЕРАТУРА

1. C.J. Dienes A.G. Damask // *Journ. Appl. Phys.* 1958, v.29, p.1713.
2. С.Т. Конобеевский. *Действие облучения на материалы*. М.: «Атомиздат», 1967, 401с.
3. А. Дамаск, Дж. Динс. *Точечные дефекты в металлах*. М.: «Мир», 1966, 291с.
4. В.Г. Жарков, И.И. Новиков, Г.Ф. Жарков. *Концентрация радиационных точечных дефектов в условиях доминирования постоянных стоков*: Препринт АН СССР Физический институт. М., 1985, N140, 42с.
5. В.А. Тарасов. Математическое моделирование радиационной ползучести реакторного топлива на примере урана и его сплавов // *Ядерная и радиационная безопасность*. 1999, т.2, вып.1, с.77-107.
6. Ш.Ш. Ибрагимов, В.В. Кирсанов, Ю.С. Пятилетов *Радиационные повреждения металлов и сплавов*. М.: «Энергоатомиздат», 1985, 239с.
7. P.T. Heald The preferential trapping of interstitials at dislocations // *Philos. Mag.* 1975, v.31, p.551.
8. И.Г. Маргвелашвили, З.К. Саралидзе Влияние упругого поля дислокаций на стационарные диффузионные потоки точечных дефектов // *ФТТ*. 1973, №15, с.2665-2668.
9. Г.З. Горбатов, А.Л. Ройтбурд, Д.Е. Темкин // *ФММ*. 1981, т.52, вып.4, с.790-799.
10. В.И. Дубинко, В.В. Слезов / *ФММ*. 1982, т.53, вып. 3, с.456-464.
11. W.G. Wolfer, L.K. Mansur, J.A. Sprague // *Rad. Eff. in Breeder Reactor Structural Materials*. «Scottsdale», Ariz. 1977, p.841.
12. N.F. Mott // *Proc. Phys. Soc.* 1951, v.64, p.729.
13. Дж. Хирт, И. Лоте *Теория дислокаций*. М.: «Атомиздат». 1972, 599с.
14. А.А. Предводителев/ *Анализ возможностей построения теории упрочнения из опытов по дислокациям*. Киев: «Наукова думка», 1972, с.74-94.
15. Дж. Эшелби. *Континуальная теория дислокаций*. –М.: «Иностран. Лит.», 1963, 248с.
16. А.А. Предводителев, Г.В. Бушуева, Г.И. Ничуговский. Моделирование процессов пластической деформации в кристаллах // *Известия вузов. Физика*. 1982, №6, с.28.