

Раздел первый

ФИЗИКА РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ И ЯВЛЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

КИНЕТИКА ЗАРОЖДЕНИЯ ГЕЛИЙ-ВАКАНСИОННЫХ КЛАСТЕРОВ С УЧЕТОМ ИХ ПОДВИЖНОСТИ

М.П. Фатеев

Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
Харьков, Украина

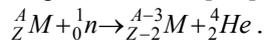
E-mail: mfateev@kipt.kharkov.ua

Предложена теоретическая модель для описания зарождения смешанных гелий-вакансионных кластеров в никеле при нейтронном облучении в реакторе синтеза. Рассмотрение проведено на основе нестационарных уравнений баланса с использованием параметров, полученных методами молекулярной динамики, с учетом разных конфигураций гелиевых кластеров в матрице. Найдены скорость зарождения и функция распределения гелий-вакансионных комплексов на стадии зарождения. Показано, что наличие подвижного гелия резко увеличивает скорость зарождения пор за счет повышения тепловой стабильности кластеров, которые имеют размер меньше, чем критический.

PACS: 61.80.Az; 61.82.bg; 61.72.Cc; 61.72.Ji; 61.72.Qq; 66.30.Jt

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из факторов, определяющих деградацию физико-механических свойств конструкционных материалов при реакторном облучении, является накопление значительного количества трансмутационного гелия, образующегося в результате ядерных реакций типа [1-3]



В связи с этим поведению гелия в различных материалах уделяется большое внимание. Сравнение наработки гелия в различных типах ядерных реакторов показывает, что соотношение He/сна в атомных реакторах по сравнению с термоядерными реакторами на один-два порядка меньше [1]. Исключение составляет исследовательский реактор High Flux Isotop Reactor (HFIR), где были достигнуты значения генерации гелия порядка 60 аррт/сна при скорости создания смещений 10^6 сна/с, что близко к условиям облучения в реакторах синтеза. В типичном реакторе на быстрых нейтронах эта величина составляет приблизительно 0,1 аррт/сна при 10^6 сна/с (реактор EBR-II).

В настоящее время исследования структуры и свойств материалов, содержащих гелий, выявили ряд особенностей и определенных закономерностей. К ним относится влияние гелия на радиационное набухание, высокотемпературное и низкотемпературное радиационное упрочнение и охрупчивание, а также на радиационно-ускоренную ползучесть.

Атомы гелия практически не растворимы в решетке металлов [1-3] и вследствие этого стремятся объединяться в вакансионно-гелиевые кластеры и пузырьки, которые приводят к деградации эксплуатационных свойств реакторных

материалов. В настоящее время неглубоко изучены даже основные характеристики гелия, такие как энергия миграции и растворения, а также энергии образования микроскопических гелиевых пузырьков.

При облучении диффундирующие атомы гелия могут вступать в различные реакции с дефектами кристаллической решетки, включая: 1) захват и тепловую эмиссию гелия одиночными вакансиями, дивакансиями, а также кластерами больших размеров; 2) поглощение гелия дислокациями и границами зерен; 3) реакции замещения гелия, находящегося в узлах решетки, собственными междоузлиями металла; 4) образование гелиевых и гелий-вакансионных кластеров; 5) радиационное выбивание захваченных атомов гелия в межузельные положения; 6) миграцию атомов гелия, находящихся в межузельных положениях [3]. В литературе существует несколько подходов для описания кинетики эволюции гелий-вакансионных кластеров. При этом, как правило, подвижными считаются только точечные дефекты (вакансии и междоузлия), а также межузельные атомы гелия. Однако есть основания считать, что микроскопические вакансионные и гелиевые кластеры могут иметь заметную диффузионную подвижность. Учет этого фактора существенным образом усложняет теоретическое описание кинетики эволюции смешанных гелий-вакансионных кластеров, поскольку в этом случае резко возрастает число реакций между различными комплексами He_nV_m .

Раньше была исследована эволюция гелий-вакансионных кластеров без учета их подвижности [4]. В этой работе рассматривается более общая модель зарождения газовых пузырьков, которая учитывает диффузию гелиевых и вакансионных

комплексов, а также все типы реакций, упомянутых выше. Расчет проведен для никеля, однако качественные выводы остаются в силе и для других материалов, которые имеют кубические графенцентрованные решетки.

2. КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Будем предполагать, что взаимодействие атомов гелия с точечными дефектами, а также с подвижными гелий-вакансионными комплексами, является однородным в пространстве и во времени. Тогда можно использовать уравнения химических реакций для описания кинетики кластеризации между свободно мигрирующими дефектами: вакансиями, междоузлиями металла и гелия, а также их кластерами [3]. Этот метод был применен в предыдущих работах [5-7], где рассмотрена кинетика зарождения и роста газовых пузырей в условиях ядерного и термоядерного излучений. В отличие от этих исследований, здесь используется микроскопическая модель образования гелий-вакансионных комплексов, которые играют определяющую роль при зарождении макро-

скопических гелиевых пузырей [4]. Энергии образования таких кластеров плохо описываются макроскопическими моделями из-за малого числа частиц в кластере и, как следствие, невозможностью описания энергетики кластера с помощью введения эффективной поверхностной энергии. В работе [8] методом молекулярной динамики найдены энергии образования малых кластеров гелия в меди и никеле в приближении парных потенциалов. При этом рассматривались кластеры, содержащие до 19 вакансий и до 10 атомов гелия. Из этих расчетов следует, что энергии образования микроскопических гелиевых кластеров сильно зависят от отношения числа атомов гелия к числу вакансий, и эта зависимость носит крайне нерегулярный характер при $m/n \geq 1$ [8, 9]. Здесь эти результаты взяты за основу для описания кинетики зарождения гелий-вакансионных кластеров.

Система уравнений для атомных концентраций различных кластеров с учетом их подвижности имеет вид:

$$dC_{1,0} / dt = (1 - \varepsilon)G + Z_v \rho_d D_v (C_v^0 - C_{1,0}) + gGC_{1,1} + (R_{2,0}^I C_{2,0} - R_{1,0}^I C_{1,0})C_I + \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^M (E_{i,j}^v - R_{i,j}^v C_{1,0})C_{i,j}; \quad (1)$$

$$dC_{2,0} / dt = \varepsilon G / 2 + R_{1,0}^v C_{1,0} C_{1,0} + Z_{2v} \rho_d D_{2v} (C_{2v}^0 - C_{2,0}) + gGC_{2,1} + (R_{3,0}^I C_{3,0} - R_{2,0}^I C_{2,0})C_I - E_{2,0}^v C_{2,0} + E_{3,0}^v C_{3,0} + E_{2,1}^{He} C_{2,1} + \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^M (E_{i,j}^{2v} - R_{i,j}^{2v} C_{2,0})C_{i,j}; \quad (2)$$

$$dC_I / dt = G - Z_I \rho_d D_I C_I - \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^M R_{i,j}^I C_{i,j} C_I; \quad (3)$$

$$dC_{0,1} / dt = G_{He} - Z_{He} \rho_d D_{He} C_{0,1} - R_{1,0}^{He} C_{1,0} C_{0,1} + R_{1,1}^I C_{1,1} C_I + \sum_{i=0}^N \sum_{j=1}^M (E_{i,j}^{He} + jgG - R_{i,j}^{He} C_{0,1})C_{i,j}; \quad (4)$$

$$dC_{2,1} / dt = E_{2,2}^{He} C_{2,2} - gGC_{2,1} - Z_{He} \rho_d D_{2vHe} + R_{0,1}^v C_{1,1} C_{0,1} - E_{1,2}^{He} C_{1,2} - R_{1,1}^I C_{2,1} C_I - \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^M R_{i,j}^{2,1} C_{2,1} C_{i,j}; \quad (5)$$

$$dC_{i,j} / dt = E_{i,j+1}^{He} C_{i,j+1} - \left[\sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M (R_{i,j}^{n,m} C_{n,m}) + R_{i,j}^I C_I + E_{i,j}^{He} + E_{i,j}^v + E_{i,j}^{2v} + jgG \right] C_{i,j} + \sum_{\substack{k+l=i \\ l+n=j}}^{N,M} R_{k,l}^{n,m} C_{k,l} C_{m,n} + E_{i+1,j}^v C_{i+1,j} + R_{i+1,j}^I C_I C_{i+1,j} + E_{i+2,j}^{2v} C_{i+2,j}, \quad (6)$$

где G – скорость создания междоузлий; $(1 - \varepsilon)G$, $\varepsilon G / 2$ – скорости создания вакансий и бивакансий; G_{He} – скорость производства гелия. Здесь $C_{1,0}$ – концентрация свободных вакансий; C_I – концентрация собственных междоузлий; $C_{0,1}$ – концентрация междоузлий гелия; $C_{1,1}$ – концентрация гелия в узлах решетки; $C_{i,j}$ – атомная концентрация кластеров, содержащих i вакансий и j атомов гелия. Параметр

радиационного выбивания g определяется как вероятность выбивания атома гелия в расчете на одно смещение. Скорости рекомбинации и эмиссии для кластеров (i, j) , при участии междоузельных атомов гелия, собственных междоузлий, вакансий и кластеров (n, m) обозначены соответственно как $R_{i,j}^\alpha$, $E_{i,j}^\alpha$ и $R_{i,j}^{n,m}$ ($\alpha = i, v, vv, He$). В дальнейшем, для простоты, будем предполагать, что подвижными, наряду с вакансиями, междоузлиями и атомами гелия, являются кластеры, которые состоят из двух вакансий $C_{2,0}$ (бивакансии), а также

гелиевые и гелий-вакансионные комплексы $C_{0,2}$ и $C_{2,1}$. Также будем предполагать, что возможна эмиссия как вакансий, так бивакансий и атомов гелия. Для простоты предполагается, что остальные кластеры являются неподвижными.

Уравнения (1)–(6) невозможно решить аналитически, следовательно, необходимо использовать численную процедуру. Система уравнений является так называемой жесткой системой уравнений и требует особого рассмотрения.

3. РЕАКЦИИ ПОГЛОЩЕНИЯ И ЭМИССИИ

Предположим, что при соприкосновении двух кластеров типа α и β между ними происходит реакция поглощения. Тогда, в рамках приближения непрерывной среды, скорость столкновения кластеров пропорциональна относительному коэффициенту их диффузии $D_{\alpha,\beta}$ и эффективной площади захвата $A_{\alpha,\beta}$:

$$R_{\beta}^{\alpha} = Z_{\beta}^{\alpha} A_{\alpha,\beta} D_{\alpha,\beta}, \quad (7)$$

где Z_{β}^{α} – фактор предпочтения, учитывающий эффекты упругого дальнего действия между дефектами типа α и β . Тогда для диффузионно-контролируемых реакций скорость рекомбинации можно записать в виде выражения, впервые предложенного Чандрасекаром:

$$R_{\beta}^{\alpha} = (48\pi^2 / \Omega^2)^{1/3} Z_{\beta}^{\alpha} (x_{\alpha}^{1/3} + x_{\beta}^{1/3}) [D_{\alpha} + D_{\beta}], \quad (8)$$

где Ω – атомный объем; $x_{\alpha,\beta}$ – эффективные числа точечных дефектов, из которых состоят кластеры. Используя результаты работ [8, 9], можно вычислить скорости эмиссии вакансий, бивакансий и гелия для различных гелий-вакансионных кластеров. Очевидно, что скорость эмиссии подвижного дефекта типа α ($\alpha = v, vv, He$) из кластера типа (i, j) определяется энергией связи этого дефекта с кластером. Энергия связи вакансий и бивакансии с кластером типа (i, j) равна:

$$E_v^B(i, j) = E_v^f + E^f(i-1, j) - E^f(i, j); \quad (9)$$

$$E_{2v}^B(i, j) = E_{2v}^f + E^f(i-2, j) - E^f(i, j),$$

где E_v^f и E_{2v}^f – энергии образования вакансий и бивакансии; $E^f(i, j)$ – энергия образования кластера. Соответственно получаем энергию связи гелия с кластером (i, j) :

$$E_{He}^B(i, j) = E_{He}^f + E^f(i, j-1) - E^f(i, j), \quad (10)$$

где E_{He}^f – энергия атома гелия в межузельном положении. Зная эти энергии связей [8], можно найти скорости эмиссии вакансий и межузельного гелия. В результате имеем:

$$E_{i,j}^{\alpha} = K_{i,j}^{\alpha} e^{\frac{-E_{\alpha}^B}{k_B T}} \left(v_{\alpha} e^{\frac{-E_{\alpha}^m}{k_B T}} + v_{i',j'} e^{\frac{-E_{i',j'}^m}{k_B T}} \right). \quad (11)$$

Здесь ν_{α} – частота прыжков нулевых колебаний дефектов типа α ; E_{α}^m – энергия их миграции;

$K_{i,j}^{\alpha}$ – комбинаторный множитель, который учитывает число возможных вариантов ухода дефекта типа α из кластера (i, j) . Он зависит от геометрии размещения данного кластера на узлах решетки и деталей диффузионной кинетики. Вычисление этого множителя практически невозможно, за исключением случая простой модели распада кластера, занимающего пару ближайших узлов решетки. Для определения $K_{i,j}^{\alpha}$ воспользуемся принципом детального баланса. Тогда, используя (9), (10), имеем

$$E_{i,j}^{\alpha} = Z_{\beta}^{\alpha} (48\pi^2 / \Omega^2)^{1/3} (x_{\alpha}^{1/3} + x_{i',j'}^{1/3}) e^{-E_{i',j'}^B / k_B T} e^{-\Delta S_{i,j}^{\alpha} / k_B}.$$

Последний множитель описывает изменение конфигурационной энтропии, вызванное перестройкой кластера $(i, j \rightarrow i', j')$.

Конфигурационная энтропия определяется количеством различных конфигураций кластера на решетке, отнесенных к одному узлу [10]. Эта величина не может быть найдена аналитически даже для простых кластеров. Путем численного моделирования в работе [10] было показано, что конфигурационная энтропия убывает с ростом числа узлов, на которых размещен комплекс, и для бивакансии она равна $\Delta S \approx 1,8k$. Это является следствием хорошо известного факта, что для равновесной концентрации бивакансий предэкспоненциальный множитель пропорционален $z/2$, где z – число ближайших соседей. В дальнейшем будем учитывать этот фактор только для реакций с бинарными дефектами. Также пренебрегаем дальним действием между реагирующими комплексами, за исключением случая рекомбинации вакансий и междоузлий.

Коэффициенты диффузии точечных дефектов при их миграции к стокам определяются обычным образом:

$$D_{\alpha} = d_{\alpha}^2 f_{\alpha} \nu_{\alpha} \exp(-E_{\alpha}^m / k_B T), \quad (12)$$

где d_{α} – длина диффузионного прыжка, f_{α} – численный коэффициент порядка единицы.

4. СКОРОСТЬ ЗАРОЖДЕНИЯ

Классическая теория зарождения основывается на предположении, что существует критический размер кластера новой фазы, так что все кластеры меньше критического размера растворяются, а больше – неограниченно растут [7, 11]. Диффузия в пространстве размеров приводит к появлению потока зародышей из одной области размеров в другую. Целью теории зарождения и является вычисление этого потока зародышей новой фазы. В случае зарождения микроскопических газовых пузырьков с размерами порядка нескольких атомных ситуация более сложная. Оказывается, что исходя из найденных численным моделированием скоростей тепловой эмиссии дефектов типа α , в области атомных размеров невозможно однозначно

определить критический размер газового пузырька. В этих условиях скорость роста гелиевых кластеров сильно флуктуирует в пространстве размеров, принимая как положительные, так и отрицательные значения. И лишь в области, где количество вакансий в кластере больше или порядка 10 и гелия больше 2, величина этой скорости приобретает более или менее регулярный характер. Таким образом, ограничение размера критического кластера размером не более трех вакансий и трех атомов гелия, как это используется в некоторых работах при рассмотрении теории зарождения газовых пузырьков [5, 6], может приводить к неправильным результатам. Следовательно, необходимо задавать граничные условия таким образом,

чтобы результаты расчетов не зависели от этого выбора. В данной работе заранее не предполагается существование кластеров, имеющих строго определенный критический размер. Рассмотрение проведено для кластеров, содержащих до 19 вакансий и до 9 атомов гелия. Граничные условия выбирались обычным образом. Концентрация кластеров с размерами $i \geq 20$ и $j \geq 10$ полагается равной нулю: $C_{i,j} = 0$. Предполагается, что эти кластеры заведомо устойчивы и неограниченно растут, тем самым “удаляясь” из системы. Тогда скорость зарождения вакансионных кластеров, содержащих гелий, с учетом их подвижности определяется следующим образом:

$$J = \sum_{m=0}^M \left[-\left(E_{i+1,j}^v + E_{i+1,j}^{2v} + R_{i+1,j}^I C_I \right) C_{i+1,j} - E_{i+2,j}^{2v} C_{i+2,j} + R_{i,j}^{1,0} C_{i,j} C_{1,0} + R_{i,j}^{2,0} C_{i,j} C_{2,0} + R_{i-1,j}^{2,0} C_{i-1,j} C_{2,0} \right] + \sum_{m=0}^M \left[R_{i,j}^{2,1} C_{i,j} C_{2,0} + R_{i-1,j}^{2,1} C_{i-1,j} C_{2,0} \right]. \quad (13)$$

Для численного решения системы связанных нелинейных «жестких» уравнений использовался пакет программ Radau [12]. При этом выбранные параметры облучения соответствовали условиям термоядерного реактора HFIR для температуры

450 °С и скорости создания смещений порядка $2 \cdot 10^{-6}$ сна/с со скоростью генерации гелия порядка 60 арпм/сна. Остальные параметры для никеля даны в таблице.

Основные параметры для никеля

Обозначение	Параметр	Значение	Единицы измерения	Ссылки
a_0	Параметр решетки	0,363	нм	[13]
ρ	Плотность дислокаций	10^9	см/см ³	[14, 15]
E_v^m	Энергия миграции вакансий	1,38	эВ	[14, 15]
E_{2v}^m	Энергия миграции бивакансий	0,9	эВ	–
E_I^m	Энергия миграции собственных междоузлий	0,15	эВ	[14, 15]
E_{He}^m	Энергия миграции междоузлий гелия	0,2	эВ	[14,15]
$E_{2V,He}^m$	Энергия миграции комплекса гелия	0,9	эВ	–
E_v^f	Энергия образования вакансий	1,62	эВ	–
Ω	Атомный объем	$1,094 \cdot 10^{-23}$	см ³	[13]
ν_i	Межузельная частота колебаний	$5 \cdot 10^{12}$	с ⁻¹	[13]
ν_{He}	Частота колебаний междоузлия гелия	$5 \cdot 10^{13}$	с ⁻¹	[13]
ν_v	Частота колебаний вакансии	$5 \cdot 10^{13}$	с ⁻¹	[13]
g	Параметр выбивания гелия	1	–	–
Z_i	Фактор предпочтения для междоузлий	1,1	–	–

На рис. 1 показаны концентрации вакансий, собственных междоузлий, междоузлий гелия и гелия, находящегося в узлах решетки, а также кластеров, содержащих до трех вакансий и до трех атомов гелия, в зависимости от времени облучения. На начальной стадии гелий генерируется главным образом в межузельных положениях, но вскоре захватывается вакансиями, которые постепенно накапливаются в матрице. Это приводит к тому, что концентрация подвижного гелия остается на два–

три порядка меньше, чем концентрация междоузлий для всего времени облучения.

Приведем скорости зарождения газовых пузырьков, полученных с помощью численного расчета для двух скоростей генерации гелия и без гелия. Из рис. 2 видно, что увеличение скорости генерации гелия резко ускоряет процесс зарождения пор. Это является следствием того, что наличие гелия в облучаемом материале не позволяет полностью растворяться кластерам, имеющим

подкритический размер, и, следовательно, приводит к увеличению скорости зарождения пор.

Распределение гелия и вакансий в зарождающихся кластерах показано на рис. 3. Как видно из рисунка, в основном преобладают кластеры, содержащие 1...3 атома гелия. При этом распределение кластеров по числу вакансий явно

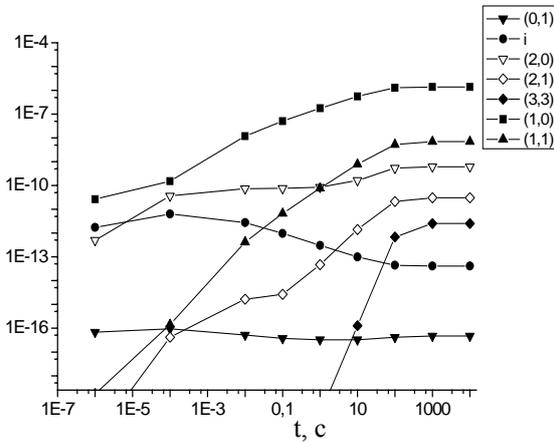


Рис. 1. Концентрация радиационных дефектов $C_{1,0}, C_{2,0}, C_1$ и гелиевых кластеров $C_{3,3}, C_{2,1}, C_{0,1}, C_{1,1}$ в зависимости от времени облучения в условиях термоядерного реактора HFIR при $T = 450\text{ }^\circ\text{C}$

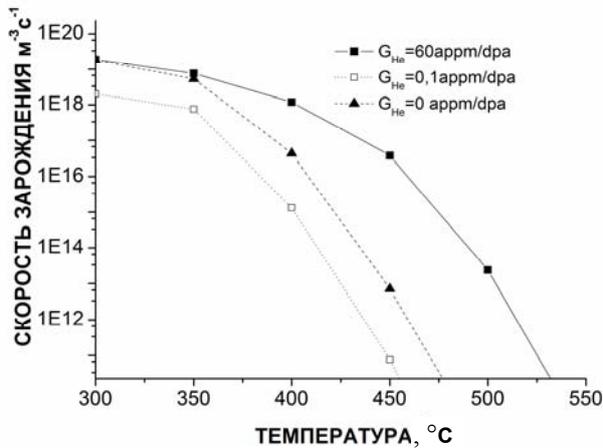


Рис. 2. Скорость зарождения гелий-вакансионных кластеров для различных скоростей генерации гелия: $\text{appm/cna} = 0,1$ (EBR-II); 60 (HFIR)

5. ВЫВОДЫ

1. Сформулирована микроскопическая модель, которая описывает влияние подвижного гелия на зарождение пор в никеле в условиях облучения в термоядерном реакторе. Для вычисления скоростей поглощения и эмиссии точечных дефектов и подвижного гелия газовыми пузырьками использовались данные молекулярно-динамических расчетов для энергий образования кластеров. Рассмотрены различные реакции образования и растворения микроскопических комплексов с

указывает на пороговый характер зарождения. Следовательно, можно сделать вывод, что, несмотря на резкое увеличение устойчивости гелий-вакансионных кластеров относительно тепловой эмиссии вакансий, фаза зарождения критических кластеров существует и ее необходимо учитывать при рассмотрении эволюции пор под облучением.

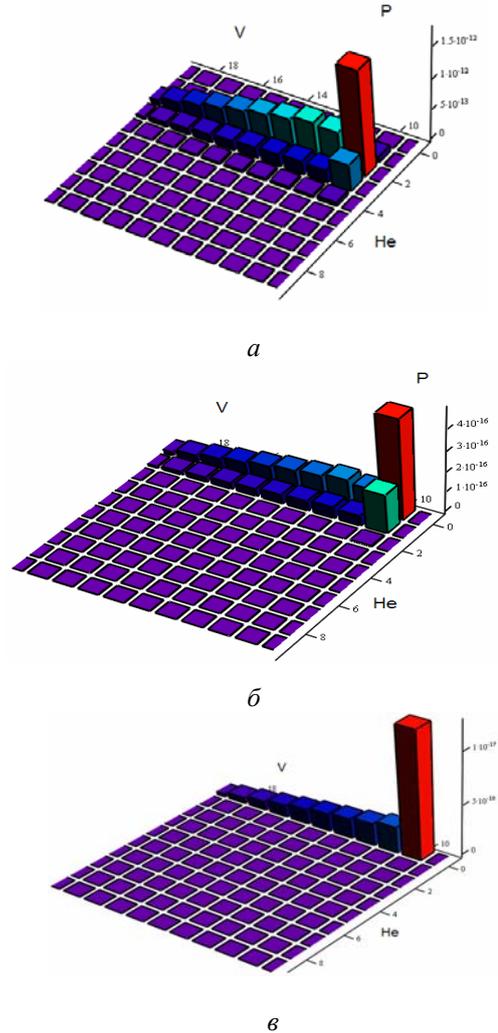


Рис. 3. Распределение кластеров по размерам на стационарном этапе зарождения для различных скоростей генерации гелия: а – $\text{He} / \text{dpa} = 60$; б – $\text{He} / \text{dpa} = 0,1$; в – $\text{He} / \text{dpa} = 0$, в условиях облучения в термоядерном реакторе (HFIR) при $T = 450\text{ }^\circ\text{C}$

учетом возможных положений атомов гелия в матрице.

2. На основе предложенной кинетической модели проведено исследование фазы зарождения микроскопических газовых пузырьков в условиях нейтронного облучения в реакторе синтеза при температуре $450\text{ }^\circ\text{C}$. Показано, что в отличие от предыдущих исследований, как и в классической теории нуклеации, существует хорошо определенная фаза зарождения гелиевых кластеров, которая предшествует фазе устойчивого роста.

3. С помощью численного анализа найдены функция распределения гелий-вакансионных кластеров в двухмерном пространстве размеров, а также скорости зарождения в зависимости от температуры. Показано, что наличие гелия резко ускоряет скорость зарождения газовых пор, причем концентрация газа в них составляет несколько процентов. В дальнейшем эти поры растут практически независимо от наличия газа в матрице.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. И.М. Неклюдов, Г.Д. Толстолуцкая. Гелий и водород в конструкционных материалах // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»*. 2003, №3(83), с. 3-14.
2. E.E. Bloom. Mechanical properties of materials in fusion reactor first-wall and blanket systems // *J. of Nucl. Mater.* 1979, v. 85&86, part 2, p. 795-804.
3. N.M. Ghoniem, S. Sharafat, J.M. Williams, L.K. Mansur. Theory of helium transport and clustering in materials under irradiation // *J. Nucl. Mater.* 1983, v. 117, p. 96.
4. М.П. Фатеев. Кинетика зарождения гелий-вакансионных кластеров при реакторном облучении // *Металлофиз. новейшие технол.* 2008, т. 30, с. 1573-1582.
5. N.M. Ghoniem. Nucleation and growth theory of cavity evolution under conditions of cascade damage and high helium generation // *J. Nucl. Mater.* 1990, v. 174, p. 168-177.
6. S. Sharafat, N.M. Ghoniem. Non-equilibrium agglomeration of helium-vacancy clusters in irradiated

materials // *Radiat. Eff. and Defects in Solids*. 1990, v. 113, p. 331-358.

7. H. Wiedersich, J.J. Burton. Effect of mobile helium on void nucleation in materials during irradiation // *J. Nucl. Mater.* 1974, v. 51, p. 287-301.

8. J.B. Adams, W.G. Wolfer. Formation energies of helium-void complexes in nickel // *J. Nucl. Mater.* 1989, v. 166, p. 235-242.

9. J. Yang, B. Ao, W. Hu, X. Wang // *J. Physics: Conf. Series*. 2006, v. 29, p. 190.

10. S.S. Kapur, M. Prasad, J.C. Crocker, and T. Sinno. Role of configurational entropy in the thermodynamics of clusters of point defects in crystalline solids // *Phys. Rev.* 2005, v. B72, p. 014119.

11. M. Volmer, A. Weber. Nuclei formation in supersaturated states // *Z. Physik. Chem.* 1926, v. 119, p. 277-301.

12. E. Hairer, G. Wanner. *Solving ordinary differential equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems, Second Edition*. Berlin: "Springer-Verlag", 1996, 619 p.

13. J.E. Inglesfield, J.B. Pendry. Energy of helium dissolved in metals // *Philos. Mag.* 1976, v. 34, N2, p. 205-215.

14. J.B. Adams, W.G. Wolfer. On the diffusion mechanisms of helium in nickel // *J. Nucl. Mater.* 1988, v. 158, p. 25-29.

15. D.B. Poker, J.M. Williams. Low-temperature release of ion-implanted helium from nickel // *Appl. Phys. Lett.* 1982, v. 40, p. 851-854.

16. P. Jung, K. Schroeder. Diffusion and agglomeration of helium in FCC metals // *J. Nucl. Mater.* 1988, v. 155-157, part 2, p. 1137-1141.

Статья поступила в редакцию 10.01.2012 г.

КІНЕТИКА ЗАРОДЖЕННЯ ГЕЛІЙ-ВАКАНСІЙНИХ КЛАСТЕРІВ З УРАХУВАННЯМ ЇХНЬОЇ РУХЛИВОСТІ

М.П. Фатеев

Запропоновано теоретичну модель для опису зародження змішаних гелій-вакансійних кластерів у нікелі в умовах опромінення в реакторі синтезу. Розгляд проведено на основі нестационарних рівнянь балансу з використанням параметрів, отриманих методами молекулярної динаміки, з урахуванням різних конфігурацій гелієвих кластерів у матриці. Знайдено швидкість зародження й функція розподілу гелій-вакансійних комплексів на стадії зародження. Показано, що наявність рухливого гелію різко збільшує швидкість зародження пор за рахунок підвищення теплової стабільності кластерів, які мають розмір менше, ніж критичний.

KINETICS OF NUCLEATION OF HELIUM-VACANCY CLUSTERS WITH TAKE INTO ACCOUNT THEIR MOBILITY

M.P. Fateev

A theoretical model is developed to describe nucleation of mixed helium-vacancy clusters in nickel within the fusion energy environment. Consideration is based on the non-stationary balance equations using the parameters obtained by methods of molecular dynamics with the account of different configurations helium clusters in a matrix. The nucleation rates and distribution functions of helium-vacancy complexes during nucleation stage is found. It is shown, that presence of the mobile helium sharply increments the nucleation rate of voids due to increase of thermal stability of the subcritical clusters.