# ТЕОРИЯ ДИССИПАТИВНЫХ СТРУКТУР КИНЕТИЧЕСКОЙ СИСТЕ-МЫ ДЛЯ ДЕФЕКТОВ НЕЛИНЕЙНОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ «МЕТАЛЛ+НАГРУЗКА+ОБЛУЧЕНИЕ». ЧАСТЬ 1

## В.А. Тарасов, Т.Л. Бориков, Т.В. Крыжановская, С.А. Чернеженко, В.Д. Русов Одесский национальный политехнический университет, г. Одесса, Украина; E-mail: siiis@te.net.ua

Дано обоснование применимости к кинетической системе радиационных дефектов некоторых требований, характерных для компонент химической кинетической системы Гирера и Мейнхардта [1] (например, автокатализ компонент). Проведенный сравнительный анализ этих кинетических систем позволил нам существенно уточнить кинетическую систему для дефектов физической нелинейной системы «металл+нагрузка+облучение» [2]. Развивая подходы, предложенные в [3], где формализованы различая механизмов радиационной ползучести и областей их применимости (в зависимости от внешних параметров) для топливных и конструкционных металлов, проводится разделение кинетических систем для дефектов конструкционных и топливных металлов. При этом делается акцент на автокаталитические особенности кинетической системы для дефектов реакторных топливных металлов, обусловленные экзотермическим автокаталитическим характером реакций ядерных делений, являющихся основным источником точечных дефектов для топливных металлов. Статья состоит из 4-х частей. 1 и 2 части опубликованы в настоящем номере, а 3 и 4 - будут опубликованы в последующих номерах.

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

В работе [2] в рамках теории автоволновых процессов в распределенных кинетических системах обсуждаются результаты моделирования механизмов образования, миграции и взаимодействия дефектов в металлической системе, находящейся под воздействием внешних радиационных и механических нагрузок. Там же в рамках теории так называемых режимов с обострением в нелинейных средах, развиваемой научной школой Курдюмова [4], акцентируется внимание на том, что в материаловедении одна из причин появления тепловых, а значит «дефектных» структур, может быть обусловлена тем, что объемный температурный источник нелинейным образом зависит от температуры (что, несомненно, делает его подобным автокаталитическому источнику). В [2] в качестве базовой модели использовалась кинетическая система, впервые предложенная Гирером и Мейнхардтом [1] и для которой результаты моделирования демонстрируют возможность образования диссипативных структур дефектов, а также возможность существования солетоноподобной концентрационной волны дефектов. В [2] также отмечалось, что кинетическая система для дефектов физической нелинейной системы «металл + нагрузка + облучение» может быть уточнена и может отличаться от базовой модели типа Гирера-Мейнхардта, исследованной в [1], из-за существования некоторого произвола в виде уравнений, при сохранении главных условий: диффузионные уравнения с нелинейными источниками. Работа [2] носила программно-постановочный характер, и в ней обоснование построения базовой модели для кинетической системы точечных дефектов металлической системы, находящейся под воздействием внешних

радиационных и механических нагрузок, в виде, идентичном кинетической системе Гирера и Мейнхардта [1], основывалось на сходстве этих кинетических систем. Традиционная для радиационного материаловедения кинетическая система точечных дефектов для металлической системы, находящейся под воздействием внешних радиационных и механических нагрузок, например, приведена в [5-8]. Однако обоснование применимости к системе радиационных точечных дефектов некоторых требований, характерных для компонент химической системы Гирера и Мейнхардта (например, автокатализ компонент), сегодня нами не только уточнено, но и предложены конкретные их механизмы. Отметим также то, что проведенный сравнительный анализ этих кинетических систем позволил нам существенно уточнить кинетическую систему для дефектов физической нелинейной системы «металл + нагрузка + облучение», т.е. восстановить диффузионные члены, которые исчезали при усреднении по объему  $\delta V$ , включающему большое число стоков, и по временному интервалу  $\delta t$ .

## 2. АВТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗ-МЫ КИНЕТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ДЕФЕКТОВ В СИСТЕМЕ «МЕТАЛЛ + НАГРУЗКА + ОБЛУЧЕНИЕ»

Для наглядности последующего анализа представляется необходимым здесь напомнить вид этих кинетических систем [2, 5-8].

Согласно [2] кинетическая система точечных дефектов металлической системы, находящейся под воздействием внешних радиационных и механических нагрузок (кинетическая система типа Гирера и Мейнхардта [1]), была такой.

Рассматривалась реакционно-диффузионная система, в которой два компонента связаны следующим взаимодействием (в процессе облучения и действия нагрузки). Обозначим концентрацию первого компонента – вакансии через a(r,t). Предполагалось, что a(r,t) автокаталитически активирует собственный синтез и синтез второго компонента h(r,t), который, в свою очередь, ингибирует синтез первого. В качестве ингибитора в этой нашей модели выступали междоузельные атомы. Полагалось, что ингибитор h обладает большей диффузионной подвижностью, чем активатор а. Здесь же лишь отметим, что, как хорошо известно, диффузионная подвижность междоузельных атомов значительно выше диффузионной подвижности вакансий.

Рассматривалась скорость изменения a(r,t), т.е.  $\partial a(r,t)/\partial t$ . Это изменение происходит по следующим причинам: 1) подвод в реакционный объем вакансий с постоянной скоростью р; 2) выход части вакансий из-за механизмов рекомбинации µа; 3) диффузия  $D_a \Delta a(r,t)$ , где  $D_a$  – коэффициент диффузии компонента  $a; \Delta$  – лапласиан. Кроме того, полагалось, что наблюдается автокаталитический процесс. В зависимости от вида процессов автокаталитический синтез активатора может быть описан такими скоростями образования, как ka или  $ka^2$  и т.д. Наконец, эффект ингибирования синтеза активатора описывался следующим образом. Наиболее прямой путь, которым ингибитор может замедлить действие активатора, состоит в понижении концентрации активатора а. Тогда скорость ингибирования можно задать в виде *ah*. Другая возможность заключается в уменьшении скорости автокатализа. В последнем случае это приводит к выражению вила  $ka^2/h$ .

Таким образом, для интерпретации, обсуждаемой в [2] задачи, использовалась следующая кинетическая система (типа Гирера и Мейнхардта [1]), обладающая перечисленными выше свойствами:

,

$$\frac{\partial a(r,t)}{\partial t} = \rho + k \frac{a^2(r,t)}{h} - \mu a(\vec{r},t) + \frac{\partial h(r,t)}{\partial t} = ca^2(\vec{r},t) - vh(\vec{r},t) + D_h \Delta h(\vec{r},t),$$
(1)

где с и V - соответствующие постоянные для ингибитора, аналогичные вышеописанным для активатоpa.

Традиционная же для радиационной физики кинетическая система точечных дефектов для металлической системы, находящейся под воздействием внешних радиационных и механических нагрузок (например, приведена в [4-8]), обосновывается и представляется в соответствии с работой [7] надлежащим образом.

Объем облучаемого материала заполнен стоками для точечных дефектов (ТД): дислокациями, петлями, порами и т.д. Поэтому концентрация ТД в образце зависит от пространственных координат и времени и может быть найдена из решения системы двух диффузионных уравнений, описывающих миграцию ТД:

$$\frac{\partial c_V(\mathbf{r}, \mathbf{t})}{\partial t_{\star}} + \omega \nabla J_V(\mathbf{r}, t) = -\alpha c_V(\mathbf{r}, t)c_I(\mathbf{r}, t);$$

$$\frac{\partial c_I(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \omega \nabla J_I(\mathbf{r}, t) = -\alpha c_V(\mathbf{r}, t)c_I(\mathbf{r}, t),$$
(2)

где  $c_V(r,t)$  и  $c_I(r,t)$  – концентрации вакансий и междоузельных атомов соответственно;  $J_V(r,t)$  и  $J_{I}(r,t)$ – плотности потоков вакансий и междоузельных атомов;  $\omega \sim a^3 -$ атомный объем; a постоянная решетки;  $\alpha$  – коэффициент взаимной рекомбинации ТД. Решение этих уравнений сопряжено с преодолением больших вычислительных трудностей, обусловленных необходимостью задания граничных условий на всех стоках ТД, которые, как правило, хаотически распределены по объему образца. В работе [7] показано, что путем усреднения этих уравнений по объему  $\delta V$ , включающему большое число стоков, и δt. по временному интервалу значительно превосходящему время жизни каскадов (для делящихся материалов превосходящему и время жизни термических пиков), совершается переход от вышеприведенных уравнений к уравнениям для скоростей реакций образования и гибели ТД, которые известны в литературе как уравнения для скоростей химических реакций. Таким образом, уравнения для усредненных концентраций C<sub>V</sub> и C<sub>I</sub> принимают вид:

$$\frac{\partial C_V(r,t)}{\partial t} = (1 - f) \cdot K - \omega \cdot \sum_S NS \cdot I_V^S - \frac{1}{\sigma} + \frac{1}{\sigma}$$

где  $K/\omega$  – число френкелевских пар, создаваемых в единице объема за единицу времени; N<sub>S</sub> – число стоков типа S в единице объема;  $I_{\alpha}^{S}$  – число ТД типа α, приходящих за единицу времени на сток типа S; f К – число вакансий, идущих за единицу времени в единице объема на образование вакансионных петель, если в центральных областях каскадов (для делящихся материалов и в центральных областях термических пиков) образуются вакансионные петли, время жизни которых превышает  $\delta t$ .

Согласно [8] в [7] усреднение входящих в (2) величин проводилось следующим образом:

$$\frac{1}{\delta V} \frac{1}{\delta t} \int dt \int dV c_{\alpha}(\vec{r}, t) = C_{\alpha}(\vec{r}, t);$$
  
$$\frac{1}{\delta V} \frac{1}{\delta t} \int dt \int dV \frac{\partial c_{\alpha}(r, t)}{\partial t} = \frac{\partial C_{\alpha}(r, t)}{\partial t};$$
  
$$\frac{1}{\delta V} \frac{1}{\delta t} \int dt \int dV c_{V}(\vec{r}, t) c_{I}(\vec{r}, t) = C_{V}(\vec{r}, t) C_{I}(\vec{r}, t);$$

<sup>64</sup>ПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ. 2007. № 2.

Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (90), с. 63-71.

$$\frac{1}{\delta V} \frac{1}{\delta t} \int dt \int dV \nabla J_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = N_{C} I_{\alpha}^{C} - \sum_{\alpha} N_{S} I_{\alpha}^{S} , \qquad (4)$$

где  $N_C$  – число каскадов в единице объема;  $I_{\alpha}^C$  – поток вектора  $J_{\alpha}$  через поверхность  $S_C$ , ограничивающую каскад, или, другими словами, число точечных дефектов типа  $\alpha$ , выходящих за единицу времени из каскадной области через поверхность  $S_C$ ;  $N_S$ 

– число стоков типа *s* в единице объема;  $I_{a}^{S}$  – число точечных дефектов типа α, приходящих на сток типа s за единицу времени. При выводе последнего соотношения (4) использовалась теорема Остроградского-Гаусса, с помощью которой сделан переход от интегрирования по объему  $\delta V$  к интегрированию по поверхностям стоков и источников точечных дефектов, причем, полагалось, что в качестве последних служат создаваемые облучением каскады атоматомных соударений. Кроме того, предполагалось, что интенсивность облучения не меняется в течение времени  $\delta t$ . Величина N<sub>C</sub>I<sup>C</sup><sub> $\alpha$ </sub> есть число френкелевских пар К/ю, создаваемых облучением в единице объема за единицу времени. Отмечается: соотношение (4) получено в предположении, что вакансионные петли в каскадах не образуются. Если же в центральных областях каскадов создаются вакансионные петли, время жизни которых значительно превышает  $\delta t$ , то в этом случае скорость создания свободных вакансий снижается на величину  $fK/\omega$ , представляющую собой число вакансий, идущих на образование вакансионных петель в елинице объема за единицу времени. Тогда, в свою очередь, следует также вакансионные петли включить как один из типов стоков в последнее слагаемое в правой части выражения (4).

Отметим существенное различие кинетических систем (1) и (3). И поэтому сразу перейдем к уточнению кинетической системы для точечных дефектов (вакансий и междоузельных атомов) металла, находящегося под воздействием внешних радиационных и механических нагрузок.

Начнем с рассмотрения кинетических уравнений для точечных дефектов (вакансий и междоузельных атомов) металла, находящегося под воздействием внешних радиационных и механических нагрузок. Рассмотрение будем проводить на примере междоузельных атомов. Для вакансий уравнения строятся аналогичным образом. Кинетические уравнения являются уравнениями баланса для точечных дефектов. Если через  $C_1(r,T,t)$  обозначить концентрацию междоузельных атомов, то уравнение баланса для междоузельных атомов мы можем записать в следующем виде:

$$\int_{V} \frac{\partial C_{I}(r,T,t)}{\partial t} dV = - \oint_{S_{V}} \vec{j}_{I}(\vec{r},T,t) dS - \int_{S_{S}} \vec{j}_{I}(\vec{r},T,t) dS + \int_{V} \vec{q}_{I}(\vec{r},T,t) dV$$
(5)

где  $q_{I}(r,T,t)$  – объемная плотность источника междоузельных атомов; j<sub>I</sub>(x,T,t) – плотность потока междоузельных атомов;  $S_V$  – поверхность объема V; S<sub>5</sub> – поверхность вокруг всех дефектов (за исключением точечных дефектов, причем их взаимная рекомбинация учитывается нами в  $q_{I}(r, T, t)$  как будет ниже описано) объема V, т.е. это суммарная поверхность вокруг всех стоков для точечных дефектов, которыми, главным образом, являются дислокации и поры. Причем обычно для суммарного объема  $V_{\scriptscriptstyle S}$ , соответствующего поверхности  $S_{\scriptscriptstyle S}$ , выполняется соотношение V<sub>S</sub> << V. Необычность вида (5) обусловлена тем, что в левой части выделено второе слагаемое, задающее рождение и поглощение междоузельных атомов всеми стоками объема *V*. Именно такой вид уравнения (5) (и аналогичного уравнения для вакансий) позволит нам провести, как мы увидим ниже, наш анализ и сделать важные выводы.

Пока предварительно отметим (ибо в Части 3 данной работы этому будет уделено особое внимание), что выделенная роль второго слагаемого в левой части уравнения (5) и аналогичного слагаемого уравнения для вакансий для всего радиационного материаловедения состоит в том, что они связывают кинетическую систему точечных дефектов с системой других дефектов, например, таких как система дислокаций и система пор, кинетика которых определяет радиационную ползучесть и распухание металла. Отметим, что для корректного описания этих слагаемых надо учитывать то, что дефекты могут перемещаться (например, движение дислокаций, ответственное за ползучесть), могут изменяться их размеры (например, рост или растворение пор), а также могут рождаться и исчезать.

Очевидно, второе слагаемое выражения (5) мы можем записать в виде:

$$\oint_{S_{S}(t)} \vec{j}_{I}(\vec{r},T,t) dS = \sum_{i(t)}^{N_{i}(t)} \oint_{S_{i}} \vec{j}_{I}(\vec{r},T,t) dS = \sum_{i(t)}^{N_{i}(t)} \oint_{S_{i}} \vec{j}_{I}(\vec{r},T,t) dV,$$
(6)

где i(t) – индекс дефекта;  $N_i(t)$  – число дефектов типа і в объеме V;  $S_S(t) = \sum_{i(t)}^{N_i(t)} S_i(t) H V_S(t) = \sum_{i(t)}^{N_i(t)} V_i(t)$ .

Если обозначить через

$$q^{S}(\vec{r},T,t) = -\sum_{i(t)}^{N_{i}(t)} \oint_{S_{i}} \vec{j}_{i}(\vec{r},T,t) dS, \qquad (7)$$

где суммирование ведется лишь по дефектам, попадающим в элемент объема dV, тогда (6) запишется в виде

$$-\oint_{S_{S}} j_{I}(r,T,t) dS = \int_{V} q^{S}(r,T,t) dV.$$
(8)

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ. 2007. № 2.

Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (90), с. 63-71.

Теперь выражению (5) можно придать следующий вид:

$$\int_{V} \frac{\partial C_{I}(\mathbf{r}, \mathbf{T}, t)}{\partial t} d\mathbf{V} = -\int_{V} \vec{divj_{I}(\mathbf{r}, \mathbf{T}, t)} d\mathbf{V} + \int_{V} \left[ q^{S}(\mathbf{r}, \mathbf{T}, t) + q_{I}(\mathbf{r}, \mathbf{T}, t) \right] d\mathbf{V},$$
(9)

из которого следует уравнение

$$\frac{\partial C_I(r,T,t)}{\partial t} = -\operatorname{div} \vec{j_I(r,T,t)} + q^S(\vec{r},T,t) + q_I(r,T,t) + q_I(r,T,t).$$
(10)

Выражение для плотности потока междоузельных атомов  $j_{I}(x, T, t)$  имеет следующий вид:

$$j_{I}(r,T_{,t}) = -\underline{D}_{I}(r,T)\nabla C_{I}(r,T,t) - \frac{D_{I}(r,T)C_{I}(r,T,t)}{kT}\nabla E_{I}(r,t),$$

$$(11)$$

где  $D_I(r,T)$  – коэффициент диффузии для междоузельных атомов;  $E_I(r,t)$  – энергия взаимодействия междоузельного атома с суммарным полем упругих напряжений

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = \sigma_{ij}^{BH}(\mathbf{r}) + \sum_{\alpha} \sigma_{ij}^{\alpha}(\mathbf{r},\mathbf{t}), \qquad (12)$$

создаваемого полем напряжений внешней нагрузки  $\sigma_{ij}^{BH}(r)$  (здесь мы рассматриваем случай постоянной внешней нагрузки, а при переменной нагрузке -  $\sigma_{ij}^{BH}(r,t)$ ) и локальными полями напряжений дефектов  $\sigma_{ij}^{a}(r,t)$ , где  $\alpha$  – индекс типа дефекта (зависимость  $\sigma_{ij}(r,t)$  от времени обусловлена возможным перемещением дефектов, например, скольжением дислокации под действием внешнего напряжений мелких дефектов, например, самих точечных дефектов (вакансии и междоузельные атомы) и учитывают поля напряжений главных стоков для точечных дефектов, которыми являются дислокации и поры.

Согласно [8] энергия взаимодействия точечного дефекта с полем напряжения обусловлена несколькими причинами: размерное взаимодействие первого порядка и модульное взаимодействие. Например, с порами точечные дефекты в первом порядке по деформации не взаимодействуют.

В работе [7] представлено вычисление энергии взаимодействия точечного дефекта с полем напряжения с учетом размерного взаимодействия первого порядка и модульного взаимодействия. Здесь у нас нет возможности это подробно рассматривать, отметим лишь важность корректного описания энергии взаимодействия точечных дефектов для описания их потоков на стоки, в частности на дислокации, а следовательно, для теорий ползучести (например, модели SIPA (Strength Induced Preference Absorption), Саралидзе-Слезова [8] и [5]). Таким образом, возвращаясь к уравнениям баланса для точечных дефектов и подставляя выражение (11) в уравнение (10), получаем:

$$\frac{\partial C_{I}(r,T,t)}{\partial t} = D_{I}(\vec{r},T)\Delta C_{I}(\vec{r},T,t) + \nabla \left[\frac{D_{I}(\vec{r},T)C_{I}(\vec{r},T,t)}{kT}\nabla E_{I}(\vec{r},t)\right] + q^{S}(\vec{r},T,t) + q_{I}(\vec{r},T,t), \qquad (13)$$

где объемную плотность источника  $q_I(r, T, t)$  запишем в виде:

$$q_{I}(r,T,t) = q_{I}^{Irrad}(r, \Phi, T, t) - (14)$$
$$-\alpha(T)C_{I}(r,T,t)C_{V}(r,T,t).$$

В (14)  $q_{I}^{Irrad}(r, \Phi, T, t)$  – плотность источника междоузельных атомов, обусловленного действием облучения и естественно зависящего от типа облучения, плотности потока частиц облучения  $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ , а также от температуры T[10]: второе слагаемое описывает взаимную рекомбинацию точечных дефектов (а (T) – коэффициент рекомбинации, зависящий от температуры). Однако хотелось подчеркнуть, что для конструкционных металлов действие облучения всегда начинается с поверхности металла, и поэтому действие облучения пространственно неоднородно. А в реакторных топливных металлах, так как нейтроны рождаются при ядерных делениях в металле, предполагая однородность металла, для модельных условий часто можно считать плотность источника пространственно однородным и независящим от времени  $q_I^{Irrad}(\Phi, T)$ .

Для  $q_{\alpha}^{Irrad}(r, \Phi, T, t)$  мы можем записать выражение (одногрупповое приближение):

$$q_{\alpha}^{Irrad}(r, E_{n}, \Phi, T, t) = \Phi(r, E_{n}, t) \times \\ \times \sum_{i} C_{\alpha,i}^{casc} \sigma_{casc}^{i}(E_{n}, T) N_{i}(r, T, t)$$
(15)

и в случае многогруппового приближения

$$q_{\alpha}^{Irrad}\left(r,\Phi,T,t\right) = \sum_{j=1}^{N^{gr}} \Phi\left(\vec{r},E_{n}^{j},t\right) \sum_{i=8,9,Pu} C_{\alpha,i}^{casc} \sigma_{casc}^{i}\left(E_{n}^{j},T\right) N_{i}\left(\vec{r},T,t\right),$$
(16)

где  $C_{a,i}^{casc}$  – среднее число дефектов типа  $\alpha$ , рождающееся в одном каскаде;  $N_i(r,T,t)$  – концентрации компонентов среды;  $N^{gr}$  – число групп нейтронов.

Подчеркнем, что для прогнозирования внутриреакторного поведения основных прочностных и эксплуатационных характеристик металлов, очевидно, необходимо учитывать кинетику нейтронного поля реактора  $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{t})$  без грубых упрощений, что возможно лишь с помощью моделирования кинетики реактора (например, [11-13]). Такое моделирование можно провести для тепловых реакторов с помощью

бопросы атомной науки и техники. 2007. № 2.

Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (90), с. 63-71.

программных кодов, разработанных Окриджской национальной лабораторией США, «Scale» или «MCNP 4.0». Для перспективных реакторов необходимо разрабатывать кинетическую систему реактора и моделирующую ее программу; нами проводится моделирование кинетики быстрого уран-плутониевого реактора IV поколения [13].

Подставляя (14) в уравнение (13), получаем окончательный вид кинетического уравнения для междоузельных атомов:

$$\frac{\partial C_{I}(r,T,t)}{\partial t} = D_{I}(\vec{r},T)\Delta C_{I}(\vec{r},T,t) + \nabla D_{I}(\vec{r},T)\nabla C_{I}(\vec{r},T,t) + \nabla D_{I}(\vec{r},T)\nabla C_{I}(\vec{r},T,t) + \nabla \left[\frac{D_{I}(r,T)C_{I}(r,T,t)}{kT}\nabla E_{I}(\vec{r},t)\right] + \alpha (17) + q^{S}(\vec{r},T,t) + q^{Irrad}(\vec{r},\Phi,T,t) - \alpha (T)C_{I}(r,T,t)C_{V}(r,T,t).$$

Аналогичным образом получаем кинетическое уравнение для вакансий.

Зависимость членов кинетических уравнений от температуры, очевидно, требует дополнения кинетической системы уравнением теплопереноса, которое можно записать в следующем виде (неизотропный случай \$(r,t)):

$$\rho(\vec{r},T,t)\widetilde{C}(\vec{r},T,t)\frac{\partial T(r,t)}{\partial t} =$$

$$= \Re(\vec{r},T,t)\Delta T(\vec{r},t) + \nabla \Re(\vec{r},T,t)\nabla T(\vec{r},t) +$$

$$+ q_T(\vec{r},T,t),$$
(18)

где  $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) = \sum_{i} N_{i}(\mathbf{r}, \mathbf{t}, \mathbf{T})\rho_{i}$  – плотность вещества;  $\rho_{i}$  – табличные значения;  $N_{i}(\mathbf{r}, \mathbf{T}, \mathbf{t})$  – концентрации компонентов среды;  $\widetilde{C}(\mathbf{r}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) = \sum_{i} N_{i}(\mathbf{r}, \mathbf{t}, \mathbf{T})\widetilde{C}_{i}$  – удельная теплоемкость;  $\widetilde{C}_{i}$  – табличные значения;  $\aleph(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \sum_{i} \aleph_{i} C_{i}(\mathbf{r}, \mathbf{t}, \mathbf{T})$  – коэффициент теплопроводности вещества;  $\aleph_{i}$  – табличные значения;  $q_{T}(\mathbf{r}, \mathbf{T}, \mathbf{t})$  – плотность источника тепла, равная

$$q_{T}(\mathbf{r}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) = \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{E}_{irr}, \mathbf{t}) \times \overrightarrow{\mathbf{L}}_{i}^{casc} \sigma_{casc}^{i}(\mathbf{E}_{irr}, \mathbf{T}) \mathbf{N}_{i}(\mathbf{r}, \mathbf{t}, \mathbf{T}), \qquad (19)$$

где  $E_i^{casc}$  – энергии, выделяемые в каскадных областях;  $\sigma_{casc}^i(E_{irr},T)$  – сечения для возникновения каскадов;  $E_{irr}$  – энергия облучающих частиц (одногрупповое приближение). Для многогруппового приближения (19) принимает вид:

$$\vec{q_{T}(r,t)} = \sum_{j=1}^{N^{gr}} \Phi(\vec{r}, E_{irr}^{j}, t) \sum_{i} E_{i}^{casc} \sigma_{irr}^{i} (E_{irr}^{j}, T) N_{i}(\vec{r}, t, T) ,$$
(20)

где  $N^{gr}$  – число групп нейтронов. Также напомним, что надо задать начальные и граничные условия для уравнения теплопроводности, например, в следующем виде:

$$T(x, t = 0) = 300 K_{H}$$
  
 $j_n = \Re (x = 0, t) [T(x = 0, t) - \widetilde{T}_0]$ 

где (x,t) – коэффициент теплопроводности;  $\tilde{T}_0$  – температура граничащей среды.

В результате теперь можем записать кинетическую систему точечных дефектов:

$$\frac{\partial C_{I}(\boldsymbol{r},T,t)}{\partial t} = D_{I}(\boldsymbol{r},T)\Delta C_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T)\nabla C_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T)\nabla C_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T)\nabla C_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T)\nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T)\nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T)\nabla C_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T)\nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,t) + \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,T,t) + \nabla \nabla \nabla D_{I}(\boldsymbol{r},T,T,T) + \nabla \nabla$$

Кинетические уравнения реактора описаны, например, в Приложениях работ [11-13].

Отметим, что эти уравнения включают в себя уравнение переноса нейтронов, кинетические уравнения для концентраций нуклидов и начальные и граничные условия [11-13].

Для проводимого здесь анализа важно отметить, что уравнение переноса нейтронов для всех реакторов в диффузионном приближении является диффузионным уравнением с нелинейным источником, а для уран-плутониевых быстрых реакторов, как будет показано в Части 2 данной статьи, это уравнение является диффузионным уравнением с нелинейным источником по температуре, описываемым степенной зависимостью с показателем степени большим единицы, т.е. попадает в область теории режимов с обострением в нелинейных средах [4]. Подчеркнем важность этого и для кинетики быстрого уран-плутониевого реактора типа Феоктистова [13].

Теперь после получения уточненной системы кинетических уравнений для точечных дефектов для металла, находящегося под воздействием внешних радиационных и механических нагрузок (21), можем провести их сравнительный анализ с кинетической системой типа Гирера и Мейнхардта (1).

Для начала отметим, что в системе типа Гирера и Мейнхардта отсутствуют уравнение теплопереноса и уравнения кинетики реактора, а также отсутствует

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ. 2007. № 2.

Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (90), с. 63-71.

зависимость от напряжений. Однако для установления принципиального сходства системы (21) с системой типа Гирера и Мейнхардта необходимо обосновать свойства системы (21), сходные с автокатализом и ингибированием.

В системе (21) эти свойства, по нашему мнению, представлены членами  $q_{I}^{S}(r,t)$  и  $q_{V}^{S}(r,t)$ , которые в себя включают кинетику системы дислокаций. Мы считаем, что механизм автокатализа связан с кинетикой дислокаций (отметим здесь, что в топливных делящихся металлах к этому механизму автокатализа добавляется еще аналог автокатализа, связанный с экзотермическим характером реакций ядерных делений, который также будет рассматриваться в Части 2 данной статьи) и кратко может быть описан следующим образом. Если дислокации обладают внутренней структурой (ступеньки и перегибы), то согласно [14] под действием внешнего напряжения, заставляющего двигаться дислокации, они при движении могут создавать точечные дефекты (междоузельные атомы и вакансии). Дислокационные ступеньки и перегибы образуются как термически равновесные, а ступеньки могут образовываться также и при пересечениях движущихся под действием напряжений дислокаций [14]. Определяющим фактором для скорости движения дислокаций, которые должны преодолевать действие различных препятствий-дефектов, является скорость переползания, определяющаяся результирующим потоком на дислокацию междоузельных атомов и вакансий (механизм радиационной ползучести [5, 6]). Поэтому, по нашему мнению, активатором следует считать междоузельные атомы, появление которых (междоузельные атомы создаются главным образом действием облучения, так как их термическая концентрация обычно мала), приводит к существенному повышению скорости переползания дислокаций, а следовательно, и к увеличению скорости движения дислокаций. Дислокации, двигающиеся с большей скоростью, рождают большее количество междоузельных атомов и вакансий. И увеличение концентрации междоузельных атомов увеличивает скорость движения дислокаций. Этот процесс можно рассматривать как аналог автокатализа. В такой схеме междоузельные атомы также активируют появление дополнительного количества вакансий, а ингибирующее действие вакансий проявляется в снижении скорости переползания дислокаций (при доминирующей роли междоузельных атомов, что является столь характерным для радиационной ползучести), которая определяется результирующим потоком точечных дефектов (разностью потока междоузельных атомов и потока вакансий) на дислокации.

Таким образом, сравнительный анализ кинетической системы (21) и системы типа Гирера и Мейнхардта (1) без учета уравнения теплообмена и кинетики реактора показывает, что они имеют принципиально сходный вид. Поэтому на основании того, что для кинетической системы типа Гирера и Мейнхардта при моделировании обнаружено образование диссипативных структур и солетоноподобной волны концентраций [1], то и для кинетической системы (21) при определенных внешних условиях следует ожидать образования диссипативных систем точечных дефектов, а также возможность существования солетоноподобной концентрационной волны дефектов.

#### 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обращаем внимание на то, что уравнения кинетики реактора (с учетом энергетического спектра нейтронов, т.е. в многогрупповом приближении) при строгом рассмотрении должны включаться в кинетическую систему (21).

Согласно системе (21), очевидно, что кинетика реактора влияет на кинетику системы точечных дефектов реакторного топлива, однако здесь хочется подчеркнуть (совсем не очевидное) и обратное влияние кинетики системы дефектов реакторного топлива на кинетику реактора, в частности, на его реактивность. Действительно, изменение кинетики системы дефектов реакторного топлива, связанное с членами  $q_{I}^{S}(r,t)$  и  $q_{V}^{S}(r,t)$  системы (21), которые ответственны за кинетику дислокаций и пор, а следовательно, за ползучесть и распухание топлива, конечно же, влияет на реактивность реактора. Ползучесть и распухание меняют геометрические размеры реактора, что влияет, например, на утечку нейтронов. Распухание также меняет концентрации нуклидов, теплофизические характеристики топлива и диффузионные свойства нейтронов, что сказывается на длинах пробега нейтронов. Все это, как хорошо известно, влияет на реактивность реактора. Действие этих факторов, связанных с кинетикой системы дефектов реакторного топлива, может оказаться особо важным и для кинетики волны ядерного горения в перспективном быстром уран-плутониевом реакторе типа Феоктистова, так как в нем предполагается использовать металлическое урановое топливо при интенсивных радиационных и тепловых нагрузках [13].

В заключение отметим, что пренебречь влиянием кинетики системы дефектов реакторного топлива на кинетику реактора как незначительным, по-видимому, не удастся из-за нелинейности кинетических уравнений реактора. Ведь согласно [15-17] существование в кинетических уравнениях реактора какой-либо обратной связи с шумом (таким шумом, реальным, а не абстрактным, по нашему мнению, и является влияние кинетики системы дефектов реакторного топлива на кинетику реактора) может радикальным образом повлиять на кинетику реактора.

Подчеркнем также, что для решения кинетической системы (21) требуется задание граничных и начальных условий для точечных дефектов. Задание начальных и граничных условий для внешней границы объема металла не вызывает проблем, здесь на этом не будем останавливаться. Определенные спорные вопросы могут возникать, как следует из работ по радиационной ползучести, при задании граничных условий на дефектах, являющихся стоками, т.е. для членов  $q_I^S(r,t)$  и  $q_V^S(r,t)$ . Рассмотрение этих принципиально важных для нашего анализа вопросов проведем в Части 3 данной работы.

Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (90), с. 63-71.

## ПРИЛОЖЕНИЕ. КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕ-НИЯ ДЛЯ УРАН-ПЛУТОНИЕВОГО БЫ-СТРОГО РЕАКТОРА ТИПА Л.П. ФЕОКТИСТОВА (ОДНОГРУППОВОЕ ДИФФУЗИОННОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ)

Уравнение баланса для нейтронов (упрощенное одномерное по пространственной координате представление) имеет вид:

$$\int_{V} \frac{\partial n(x, E_n, T, t)}{\partial t} dV = -\oint_{S} j_n(x, E_n, T, t) dS + \int_{V} q(x, E_n, T, t) dV,$$
(II.1)

где q – объемная плотность источника нейтронов;  $j_n$  – плотность потока нейтронов; x – пространственная координата,  $E_n$  – энергия нейтронов; T – температура. Откуда получаем:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -div j_n + q \quad . \tag{II.2}$$

Рассмотрим одну группу нейтронов с заданной энергией  $E_n$ . Для того чтобы не загромождать написание формул, примем следующее обозначение:  $n(x,t) = n(x,t,E_n)$ .

Согласно первому закону Фика  $j_n(x,t,E_n,T)$  = -  $D(x,t,E_n,T)$  n(x,t), где коэффици-ент диффузии для нейтронов

$$\begin{split} & D(x, E_n, T, t) = \\ & = \frac{V_n \lambda_s(x, E_n, T, t)}{3} = = \frac{V_n}{3\Sigma_s(x, E_n, T, t)} = \\ & = \frac{V_n}{3\sum_{i=8,9, Pu, Np, OCKOJKH}} = \frac{V_n}{3\Sigma_s(x, T, t)}, \end{split}$$

 $\lambda_s$  – длина свободного пробега нейтрона при рассеянии;  $\sigma_s^i$  – микросечения рассеяния нейтрона и  $V_n$ 

– скорость нейтронов (Е  $\approx$  1 МэВ, одногрупповое приближение).

Тогда

$$\frac{\partial \mathbf{n}(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \mathbf{D}(\mathbf{x},\mathbf{E}_{n},\mathbf{T},t)\Delta \mathbf{n}(\mathbf{x},t) + \nabla \mathbf{D}(\mathbf{x},\mathbf{E}_{n},\mathbf{T},t)\cdot\nabla \mathbf{n}(\mathbf{x},t) + \mathbf{q}(\mathbf{x},\mathbf{E}_{n},\mathbf{T},t).$$
(II.3)

Объемная плотность источника:

) (

$$q(\mathbf{x}, \mathbf{E}_{n}, \mathbf{T}, t) = n(\mathbf{x}, t) \mathbf{V}_{n} \times \\ \times \begin{bmatrix} \sum (v_{i} - 1)\sigma_{f}^{i}(\mathbf{E}_{n}, \mathbf{T})\mathbf{N}_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, t) - \\ -\sum \sigma_{a}^{i}(\mathbf{E}_{n}, \mathbf{T})\mathbf{N}_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, t) \\ -\sum (\mathbf{e}_{i=8,9, Np, Pu} \sigma_{a}^{i}(\mathbf{E}_{n}, \mathbf{T})\mathbf{N}_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, t) \end{bmatrix} - \\ - n(\mathbf{x}, t)\mathbf{V}_{n} \sum_{i=1}^{6} \sigma_{a}^{i}(\mathbf{E}_{n}, \mathbf{T})\widetilde{\mathbf{N}}_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, t) =$$

$$= \sum_{i=8,9,Np,Pu} [v_i(1-p_i) - 1] \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{E}_n, \mathbf{T}, \mathbf{t}) \times \\ \times \sigma_{\mathbf{f}}^i(\mathbf{E}_n, \mathbf{T}) \mathbf{N}_i(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) + \sum_{i=1}^6 \frac{ln 2 \cdot \widetilde{\mathbf{N}}_i(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t})}{\mathbf{T}_{1/2}^i} - \\ - \sum_{i=8,9,Np,Pu} \sigma_{\mathbf{a}}^i(\mathbf{E}_n, \mathbf{T}) \mathbf{N}_i(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) - \\ - \sum_{i=1}^6 \sigma_{\mathbf{a}}^i(\mathbf{E}_n, \mathbf{T}) \widetilde{\mathbf{N}}_i(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}),$$
(II.4)

где  $\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{E}_{n}, \mathbf{T}, \mathbf{t})$  – плотность потока нейтронов;  $V_{i}$  равно среднему числу мгновенных нейтронов на один акт деления для нуклидов <sup>238</sup>U, <sup>239</sup>U, <sup>239</sup>Np, <sup>239</sup>Pu;  $N_{8}, N_{9}, N_{Np}, N_{Pu}$  – концентрации <sup>238</sup>U, <sup>239</sup>U, <sup>239</sup>Np, <sup>239</sup>Pu соответственно;  $\tilde{N}_{i}$  – концентрации нейтронно-избыточных осколков деления для нуклидов <sup>238</sup>U, <sup>239</sup>U, <sup>239</sup>Np, <sup>239</sup>Pu;  $\sigma_{a}$  и  $\sigma_{f}$  – микросечения захвата нейтрона и деления ядра; параметры  $p_{i}(p = \sum_{i=1}^{6} p_{i})$  и  $T_{1/2}^{i}$ , характеризующие группы запаздывающих нейтронов для основных топливных делящихся нуклидов известны [18]. Отметим, что для учета запаздывающих нейтронов использовался метод Ахиезера-Померанчука [19].

Следовательно, получаем следующую систему кинетических уравнений:

$$\frac{\partial n(x,t)}{\partial t} = D(x, E_n, T, t) \Delta n(x, t) +$$

$$+ \nabla D(x, E_n, T, t) \cdot \nabla n(x, t) + q(x, E_n, T, t),$$
(II.5)

где  $q(x, E_n, T, t)$  задается выражением (П.4);

$$\begin{aligned} &\frac{\partial N_8(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t})}{\partial \mathbf{t}} = \mathbf{D}_8(\mathbf{T}) \Delta N_8(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) - \\ &- \Phi \left( \mathbf{x}, \mathbf{E}_n, \mathbf{T}, \mathbf{t} \right) \left[ \sigma_a^{\ 8}(\mathbf{E}_n, \mathbf{T}) + \sigma_f^{\ 8}(\mathbf{E}_n, \mathbf{T}) \right] \times \\ &\times N_8(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) - \frac{N_8(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t})}{\tau_8} - \\ &- N_8(\mathbf{x}, \mathbf{T} = \mathbf{T}_0, \mathbf{t} = \mathbf{0}) \mathbf{C}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) \times \\ &\times \left[ 1 - \frac{1}{\alpha_x^{\ 8}(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)} \right], \end{aligned}$$
(II.6)

где  $\alpha_x^8$  – коэффициенты линейного расширения по оси х,  $N_8(x, T = T_0, t = 0) = \frac{\rho_8}{\mu_8} N_A \approx \frac{19}{238} N_A$ , где  $\rho_8$  – плотность, г/см<sup>3</sup>,  $\mu_8$  – моль, г·моль<sup>-1</sup>,  $N_A$  – число Авогадро;

$$\begin{aligned} &\frac{\partial N_{9}(x,T,t)}{\partial t} = D_{9}(T)\Delta N_{9}(x,T,t) + \\ &+ \Phi (x,E_{n},T,t)\sigma_{a}^{8}(E_{n},T)N_{8}(x,T,t) - \\ &- \Phi (x,E_{n},T,t)[\sigma_{a}^{9}(E_{n},T) + \sigma_{f}^{9}(E_{n},T)] \times \\ &\times N_{9}(x,T,t) - \frac{1}{\tau_{\beta}^{9}}N_{9}(x,T,t) - \frac{N_{9}(x,T,t)}{\tau_{9}} - (\Pi.7) \\ &- N_{9}(x,T = T_{0},t = 0,)C_{9}(x,T,t) \times \\ &\times \left[1 - \frac{1}{\alpha_{x}^{9}(T - T_{0})}\right], \end{aligned}$$

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ. 2007. № 2.

Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (90), с. 63-71.

причем можно принять, что при t <  $t_1^9$  N<sub>9</sub>(x,t = 0,T = T<sub>0</sub>)  $\approx$  0, где  $t_1^9$  находится из N<sub>9</sub>(x,t =  $t_1^9$ ,T = T<sub>0</sub>)  $\approx$  0,1, где  $\tau_{\beta}^i$  – время жизни *i*-го ядра по отношению к  $\beta$  - распаду;

$$\frac{\partial N_{Np}(x,T,t)}{\partial t} = D_{Np}(T)\Delta N_{Np}(x,T,t) + 
+ \frac{1}{\tau_{\beta}^{9}}N_{9}(x,T,t) - \Phi(x,E_{n},T,t) \times 
\times \left[\sigma_{a}^{Np}(E_{n},T) + \sigma_{f}^{Np}(E_{n},T)\right]N_{Np}(x,T,t) - 
- \frac{1}{\tau_{\beta}^{Np}}N_{Np}(x,T,t) - \frac{N_{Np}(x,T,t)}{\tau_{Np}} - 
- N_{Np}(x,T=T_{0},t=0)C_{Np}(x,T,t) \times 
\times \left[1 - \frac{1}{\alpha_{x}^{Np}(T-T_{0})}\right],$$
(II.8)

примем при  $t < t_1^{Np}$   $N_{Np}(x, t = 0, T = T_0) \approx 0$ , где  $t_1^{Np}$  находится из  $N_{Np}(x, t = t_1^{Np}, T = T_0) \approx 0,1$ ;

$$\frac{\partial \mathbf{N}_{Pu}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t})}{\partial \mathbf{t}} = \mathbf{D}_{Pu}(\mathbf{T})\Delta \mathbf{N}_{Pu}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) + 
+ \frac{1}{\tau_{\beta}^{Np}} \mathbf{N}_{Np}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) - \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{E}_{n}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) \times 
\times \left[ \sigma_{a}^{Pu}(\mathbf{E}_{n}, \mathbf{T}) + \sigma_{f}^{Pu}(\mathbf{E}_{n}, \mathbf{T}) \right] \mathbf{N}_{Pu}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) - 
- \frac{\mathbf{N}_{Pu}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t})}{\tau_{\beta}^{Pu}} - \frac{\mathbf{N}_{Pu}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t})}{\tau_{Pu}} - 
- \mathbf{N}_{Pu}(\mathbf{x}, \mathbf{T} = \mathbf{T}_{0}, \mathbf{t} = \mathbf{0}) \mathbf{C}_{Pu}(\mathbf{x}, \mathbf{T}, \mathbf{t}) \times 
\times \left[ 1 - \frac{1}{\alpha_{x}^{Pu}(\mathbf{T} - \mathbf{T}_{0})} \right],$$
(II.9)

при  $t < t_1^{Pu}$   $N_{Pu}(x,t=0,T=T_0) \approx 0$ , где  $t_1^{Pu}$  находится из  $N_{Pu}(x,t=t_1^{Pu},T=T_0) \approx 0,1$ ; где относительные концентрации

$$C_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{t}, \mathbf{T}) = \frac{N_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{t}, \mathbf{T})}{\sum_{i=8,9,Np,Pu} N_{i}(\mathbf{x}, \mathbf{t}, \mathbf{T}) + \sum_{j=8,9,Np,Pu} \sum_{i=1}^{6} \widetilde{N}_{i}^{j}(\mathbf{x}, \mathbf{t}, \mathbf{T})}, \quad (\Pi.10)$$

 $D_i = D_0^i exp(-E_m^i/kT) - коэффициенты диффузии для нуклидов делящейся среды, где <math>D_0^i$  и  $E_m^i$  – та-бличные значения, *i*=8,9, *Np*, *Pu*;  $T_0$  – начальная температура.

Аналогично можно написать кинетические уравнения и для осколков, например,  $^{238}U$ :

$$\begin{split} & \frac{\partial N_{i}^{s}(\mathbf{x}, t, T)}{\partial t} = \overline{D}_{i}^{8}(T) \Delta \widetilde{N}_{i}^{8}(\mathbf{x}, t, T) + \\ &+ p_{i} \cdot V_{n} \cdot n(\mathbf{x}, t) \cdot \sigma_{f}^{s} \cdot N_{8}(\mathbf{x}, t, T) - \\ &- V_{n}n(\mathbf{x}, t) \left( \sigma_{a}^{\widetilde{N}_{i}^{s}} + \sigma_{f}^{\widetilde{N}_{i}^{s}} \right) - \frac{\widetilde{N}_{i}^{8}(\mathbf{x}, t, T)}{{}^{8}T_{1/2}^{i}} - \\ &- \frac{\widetilde{N}_{i}^{8}(\mathbf{x}, t, T)}{\tau_{\widetilde{N}_{i}^{s}}} - \widetilde{N}_{i}^{8}(\mathbf{x}, t = 0, T = T_{0}) C_{i}^{8}(\mathbf{x}, t, T) \times \\ &\times \left[ 1 - \frac{1}{\alpha_{1}^{8,i} \alpha_{2}^{8,i} \alpha_{3}^{8,i} (T - T_{0})^{3}} \right], \quad i = 1, 6, \end{split}$$
(II.11)

причем можно принять, что при  $t < t_1^{8,i}$   $\widetilde{N}_8(x,t=0,T=T_0) \approx 0$ , где  $t_1^{8,i}$  находится из  $\widetilde{N}_i^8(x,t=t_1^{8,i},T=T_0) \approx 0,1$ ,  $\overline{D}_i^8 = D_0^{8,i} \exp\left(-E_m^{8,i}/kT\right)$ , где  $D_0^{8,i}$  и  $E_m^{8,i}$  – табличные значения, i = 1 - 6.

Кинетические уравнения для осколков других нуклидов записываются аналогично.

Граничные условия:

$$n(x,t)\Big|_{x=0} = \frac{\Phi_0}{V_n} \mathbf{H} n(x,t)\Big|_{x=1} = 0, \qquad (\Pi.12)$$

где  $\Phi_0$  – плотность нейтронов, создаваемых плоским диффузионным источником нейтронов, расположенным на границе при х=0; l – длина уранового блока, задаваемая при моделировании.

Начальные условия:

$$n(x,t)\Big|_{x=0,t=0} = \frac{\Phi_0}{V_n} |_{\mathbf{N}} n(x,t)\Big|_{x\neq 0,t=0} = 0; \quad (\Pi.13)$$

$$N_8(x,t)\Big|_{t=0} = \frac{\rho_8}{\mu_8} N_A \approx \frac{19}{238} N_A$$
, (II.14)

где  $\rho_8$  – плотность, г/см<sup>3</sup>,  $\mu_8$  – моль, г·моль<sup>-1</sup>; N<sub>A</sub> – число Авогадро;

$$\begin{split} & N_{9}(\mathbf{x},t)|_{t=0} = 0; N_{Np}(\mathbf{x},t)|_{t=0} = 0; N_{Pu}(\mathbf{x},t)|_{t=0} = 0; \\ & \widetilde{N}_{i}^{8}(\mathbf{x},t)|_{t=0} = 0, i = 1, 6; \widetilde{N}_{i}^{9}(\mathbf{x},t)|_{t=0} = 0, i = 1, 6; \\ & \widetilde{N}_{i}^{Np}(\mathbf{x},t)|_{t=0} = 0, i = 1, 6; \widetilde{N}_{i}^{Pu}(\mathbf{x},t)|_{t=0} = 0, i = 1, 6. (\Pi.15) \end{split}$$

Граничные условия:

$$n(x,t)\Big|_{x=0} = \frac{\Phi_0}{V_n} {}_{H} n(x,t)\Big|_{x=1} = 0. \quad (\Pi.16)$$

#### ЛИТЕРАТУРА

- A. Gierer, H. Meinhardt. Lectures on Mathematics in the Life Sciences //Berlin: Springer. 1974, v. 7, p. 163–189.
- В.Д. Русов, В.А. Тарасов, С.М. Ушеренко, М.М. Овсянко. Моделирование диссипативных структур и волн концентраций точечных дефектов в открытой нелинейной физической системе «металл + нагрузка + облучение» //Вопросы атомной науки техники. Серия

₿ОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ. 2007. № 2.

Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение (90), с. 63-71.

«Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение» (80). 2001, №4, с. 3–8.

- 3. В.Д. Русов, В.А. Тарасов, Д.А. Терещенко. Механизмы радиационной ползучести уранового топлива металлического и ее //Вопросы температурные нелинейности атомной науки «Физика техники. Серия радиационных повреждений и радиационное материаловедение» 2003. (84). № 6, c. 20–23.
- Режимы с обострением. Эволюция идеи: законы коэволюции сложных структур. М.: «Наука», 1998, 255 с.
- В.А. Тарасов. Математическое моделирование радиационной ползучести реакторного топлива на примере урана и его сплавов //Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение» (79). 2001, №2, с. 23–30.
- В.А. Тарасов. Комп'ютерне моделювання радіаційной повзучості реакторного палива //УФЖ. 2000, №10, с. 23–35.
- W.G. Wolfer, L.K. Mansur, J.A. Sprague //Rad. Eff. in Breeder Reactor Structural Materials. Scottsdale, Ariz., 1977, 841 p.
- Ш.Ш. Ибрагимов, В.В. Кирсанов, Ю.С. Пятилетов. *Радиационное повреждение* металлов и сплавов М.: «Энергоатомиздат», 1985, 239 с.
- 9. Р. Баллоу, Р. Ньюмен. Термически активированные процессы в кристаллах. М.: «Мир», 1973, 329 с.
- 10. Ю.Н. Девятко, А.А. Маклецов, В.Н. Тронин. Стохастические процессы и накопление точечных дефектов в облучаемых металлах //Известия Латвийской академии наук. Серия

*физических и технических наук.* 1990, №4, с. 11–30.

- 11. А.И. Ахиезер, Д.П. Белозоров, Ф.С. Рофе-Бекетов, Л.Н. Давыдов, З.А. Спольник. К теории распространения цепной ядерной реакции в диффузионном приближении //Ядерная физика. 1999, т. 62, №9, с. 1567–1575.
- 12. В.Я. Гольдин, Д.Ю. Анистратов. Реактор на быстрых нейтронах в саморегулируемом нейтронно-ядерном режиме //Математическое моделирование. 1995, т. 7, №10, с. 12–32.
- 13. В.Д. Русов, В.Н. Павлович, В.А. Тарасов, С.И. Косенко, Д.А. Литвинов, В.Н. Большаков. Учет запаздывающих нейтронов в нестационарных мультиплицирующих системах и кинетические уравнения реактора Л.П. Феоктистова //Труды XVI Международной конференции по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению. 6-11 сентября 2004 г., Алушта, Крым. С. 42.
- 14. Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. М.: «Атомиздат», 1972, 599 с.
- Н.С. Постников. Области управляемости реактора при ограничении на скорость введения реактивности //Атомная энергия. 1988, т. 64, в. 3,

c. 170–173.

- 16. Н.С. Постников. Стохастические автоколебания в реакторе с линейной обратной связью //*Атомная энергия*. 1992, т. 72, в. 3, с. 232–237.
- 17. Н.С. Постников. Динамический хаос в реакторе с нелинейными обратными связями //*Атомная* энергия. 1993, т. 74, в. 4, с. 328–334.
- 18. В.И. Владимиров. Практические задачи по эксплуатации ядерных реакторов. М.: «Энергатомиздат», 1986, 304 с.
- 19. А.И. Ахиезер, И.Я. Померанчук. Введение в теорию нейтронных мультиплицирующих систем (реакторов). М.: «ИздАТ», 2002, 367 с.

## ТЕОРІЯ ДИСИПАТИВНИХ СТРУКТУР КІНЕТИЧНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ ДЕФЕКТІВ НЕЛІНІЙНОЇ ФІЗИЧНОЇ СИСТЕМИ «МЕТАЛ+НАВАНТАЖЕННЯ+ОПРОМІНЕННЯ». ЧАСТИНА 1

#### В.О. Тарасов, Т.Л. Боріков, Т.В. Крижанівська, С.А. Чернеженко, В.Д. Русов

Дається обгрунтування можливості застосування до кінетичної системи радіаційних дефектів деяких вимог, що характерні для компонент хімічної кінетичної системи Гірера і Мейнхардта [1] (наприклад, автокаталіз компонент). Порівняльний аналіз цих кінетичних систем, що був нами проведений, дозволив нам значно уточнити кінетичну систему для дефектів фізичної нелінійної системи «метал+навантаження+опромінення» [2]. Розвиваючи підходи, запропоновані в [3], де формалізовані відмінності механізмів радіаційної повзучості і областей їх застосування (в залежності від зовнішніх параметрів) для паливних і конструкційних металів, здійснюється розподіл кінетичних систем для дефектів конструкційних і паливних металів. При цьому робиться акцент на автокаталітичні особливості кінетичної системи для дефектів реакторних паливних металів, обумовлені екзотермічним автокаталітичним характером реакцій ядерного поділу, що є основним джерелом точечних дефектів для паливних металів.

## THE THEORY OFDISSIPATIVE STRUCTURES OF THE KINETIC SYSTEM FOR DEFECTS OF NONLINEAR PHYSICAL SYSTEM "METAL + LOADING + IRRADIATION".

## PART 1

#### V.A. Tarasov, T.L. Borikov, T.V. Kryzhanovskaja, S.A. Chernegenko, V.D. Rusov

The applicability ground of some requirements characteristic for the components of Girer and Meinhardt chemical kinetic system [1] (for example, component autocatalysis) to the radiation defect kinetic system is given. Our fulfilled comparative analysis of these kinetic systems has permitted essentially to amend the kinetic system for the defects of nonlinear physical system "metal+load+irradiation" [2]. Developing the approaches having suggested in [3], where the differences between radiation creep mechanisms and the ranges of their application (depending on external parameters) for fuel and constructional metals were formalized, the division of the kinetic systems for the defects of constructional and fuel metals is carrying out. Here autocatalytic singularities of the kinetic system for the defects of reactor fuel metals resulting from the exoenergic autocatalytic character of nuclear fission reactions being the main dot defect source for fuel metals are emphasized.