

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПОРОГИ СМЕЩЕНИЙ И ИХ МЕХАНИЗМЫ В ВАНАДИЕВЫХ СПЛАВАХ

В.В.Кирсанов,
А. Н.Балашов
(ТГТУ, г.Тверь)

В последние годы в России, как и в других странах, привлеченных к работе над проектом ИТЕР, широким фронтом ведутся исследования по подбору, аттестации и обоснованию работоспособности конструкционных металлов и сплавов в составе энергонапряженных элементов международного экспериментального термоядерного реактора.

Ставится задача найти конструкционные материалы, способные выдерживать воздействие уникального по своему сочетанию набора жестких повреждающих факторов, каждый из которых способен вызвать существенное ухудшение физико-механических и эксплуатационных характеристик. Прежде всего это циклически повреждающее и синхронизированное во времени совместное воздействие :

- интенсивных потоков 14-ти МЭв нейтронов реакции синтеза дейтерия и трития:

- мощных тепловых потоков;

- силовых нагрузок с амплитудным значением напряжений, близких к пределу текучести , обусловленных наличием термоупругих напряжений.

Несомненный интерес также представляют параметры, характеризующие ремонтнопригодность материалов, и в первую очередь их свариваемость, как функцию от времени эксплуатации.

Одно из направлений разработок - получение радиационно стойких ванадиевых сплавов с оптимальным сочетанием жаропрочности и удовлетворительной свариваемости. В состав этой группы входят сплавы, легированные титаном, хромом, молибденом, цирконием и углеродом . Ванадиевые сплавы характеризуются высокой жаропрочностью, малой плотностью, оптимальными ядерно-физическими параметрами, достаточно технологичны и стойки в агрессивных средах жидко-металлического теплоносителя.

Широкого их применения следует ожидать при создании будущих термоядерных установок. В исследовании изменения их свойств при облучении и определении пригодности для тех или иных узлов важную роль играет получение достоверной информации о величине повреждающей дозы (количестве атомных смещений, dpa, произошедших за период воздействия на них того или иного флюенса нейтронов). Именно значение достоверной дозы позволяет сделать прогноз поведения материалов в конструкциях промышленных реакторов, провести аналоговое моделирование трудновоспроизводимых условий облучения, например, в проектируемых термоядерных реакторах.

Как известно, в настоящее время при определении повреждающей дозы (в dpa) используется пороговая энергия атомных смещений (E_d). Причем, именно эти константы несут в себе практически всю информацию о кристаллической решетке, где происходит смещение, и о механизме самого смещения. Их определение осуществляется в настоящее время с помощью достаточно громоздких экспериментов с электронными пучками и с помощью компьютерных экспериментов. Причем роль последних, с учетом экспрессности, постоянно возрастает. Натурные эксперименты все больше используются для получения отдельных контрольных точек на угловых зависимостях E_d .

Если вопрос определения E_d для чистых материалов решается удовлетворительно, то ситуация в сложных соединениях и сплавах не такая благополучная. Чаще всего здесь приходится пользоваться пороговыми энергиями для чистых компонент. Но в этом случае от реальной кристаллической структуры в расчетах остаются только концентрации отдельных элементов. Ниже с использованием компьютерных экспериментов будут определены пороговые энергии смещения в ванадиевых сплавах, интерес к которым возрос в последнее время в ядерной энергетике.

МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА СМЕЩЕНИЯ

Одним из основных методов теоретического исследования процессов дефектообразования в кристаллических твердых телах является метод молекулярной динамики (ММД). Именно с его помощью удастся проанализировать и процесс образования устойчивых атомных смещений. Этот метод основан на решении уравнений ньютоновской механики для ансамблей, состоящих из большого числа атомов (N). Зная начальные положения и векторы скорости каждого атома, можно воспроизвести эволюцию поведения такого ансамбля путем численного решения системы $6N$ уравнений для скоростей и координат атомов [2].

В процессе молекулярно-динамических расчетов сначала производится построение модельного кристаллита. Нами для воспроизведения ванадиевых сплавов были выбраны прямоугольные микрокристаллиты, содержащие более 1000 атомов сплава. Поскольку рассматривается ограниченная область кристалла, необходимо, чтобы она верно отражала свойства и остального бесконечного материала. Как принято в ММД, нами использовались два типа граничных условий: "гибкие" и "периодические" [2].

Задача нахождения пороговой энергии смещения относится к классу динамических задач. Ее решение начинается с задания одному из атомов микрокристаллита - первично-выбитому атому (ПВА) - начальной скорости в выбранном кристаллографическом направлении и продолжается до тех пор, пока возмущение не затухает и не заканчивается формирование устойчивого смещения (например, устойчивой пары Френкеля: вакансии и межузельного атома). Причем поиск устойчивой конфигурации начинается с небольших энергий ПВА, что приводит, чаще всего на на-

чальном этапе расчета, к образованию неустойчивых смещений (например, неустойчивые пары Френкеля аннигилируют, восстанавливая первоначальную решетку). Постепенно повышая энергию ПВА, можно наконец подойти к E_d , после чего будут образовываться только устойчивые смещения.

В задачах динамики радиационных повреждений и, в частности, определения E_d расстояния между атомами в процессах смещения меняются в широких пределах. Достаточно трудно подобрать теоретический потенциал межатомного взаимодействия, чтобы он удовлетворял реальному в этом широком диапазоне расстояний.

В настоящее время достаточно полно разработаны потенциалы взаимодействия практически для всех металлов периодической системы. Однако межатомные потенциалы для двойных систем существуют лишь для некоторых конкретных сплавов и конкретных кристаллических структур. Поскольку такие работы для ванадиевых сплавов необходимого типа нам неизвестны, учитывая химическую близость V и Cr, разумно будет взять для потенциалов взаимодействия VCr, VMo усредненные смешанные потенциалы вида

$$U_{vgr} = f\left(\frac{a_v^1 + a_{Gr}^1}{2}, \frac{a_v^2 + a_{Gr}^2}{2}, \dots\right), \quad (1)$$

где a^1, a^2, \dots - параметры соответствующих потенциалов для чистых металлов. В связи с этим необходимо иметь однородные потенциалы межатомного взаимодействия для чистых металлов.

За основу нами был выбран потенциал Джонсона [3]:

$$U(R) = K_3 \left(\frac{R}{R_0} - 1\right)^3 + K_2 \left(\frac{R}{R_0} - 1\right)^2 + K_1 \left(\frac{R}{R_0} - 1\right) + K_0 \quad \text{для } R > R_0, \quad (2)$$

$$U_m(R) = U(R) + K_4 \left(U(R) - U(R_0)\right) \left(\frac{R}{R_0} - 1\right)^2 \quad \text{для } R < R_0,$$

где R_0 - расстояние между ближайшими соседями, $K_1 = K_1(a_1, \dots, a_4)$ - параметрическая функция энергии сублимации, упругих постоянных, энергии образования вакансии и постоянной равновесной решетки.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОРОГОВОЙ ЭНЕРГИИ СМЕЩЕНИЙ В ВАНАДИИ И ЕГО СПЛАВАХ: V-Cr, V-Mo

Пороговые энергии определялись с использованием общепринятой методики: расчеты были сделаны для основных низкоиндексных плоскостей. Для ОЦК - это плоскости :

(100), (010), (001), (110), (101), (011), $(\overline{101})$, $(\overline{011})$, $(\overline{110})$. Для определения среднего значения $\overline{E_d}$ учитывался удельный вес различных плоскостей. Поскольку плоскости (100), (010), (001) эквивалентны между собой, также как и плоскости (110), (101), (011), $(\overline{101})$, $(\overline{011})$, $(\overline{110})$, задача сводится к определению средних значений пороговых энергий в двух плоскостях: например, (100) и (110). Тогда

$$\overline{E_d} = (\overline{E_{d(100)}} + 2 \overline{E_{d(110)}}) / 3. \quad (3)$$

Для каждой плоскости представлены полученные гистограммы зависимости пороговой энергии смещения E_d от угла вылета ПВА (рис. 1, 2, 3 для плоскости (110) и рис. 4, 5, 6 для плоскости (100)). Следует отметить, что данные приводятся для углов вылета ПВА с учетом симметрии соответствующих плоскостей, т.е. от 0° до 90° для плоскости (110), от 0° до 45° для плоскости (100), причем углы отсчитывались от направления [110] для плоскости (110) и от направления [010] для плоскости (100).

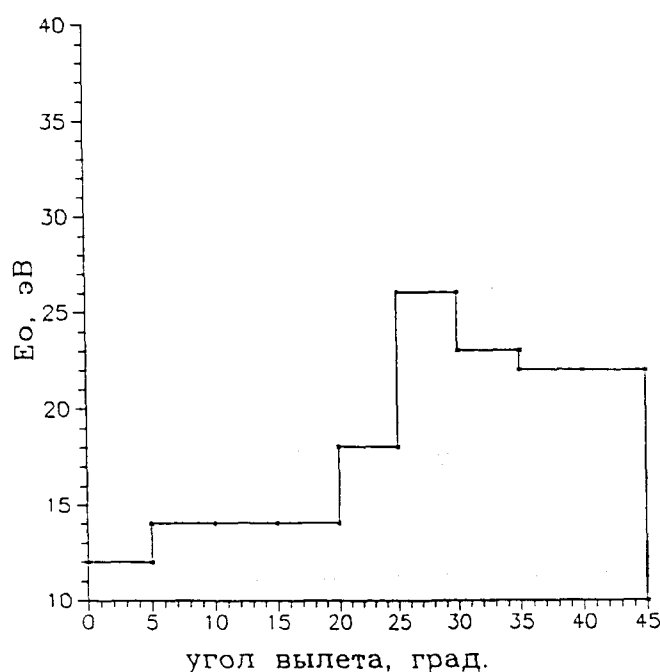


Рис.1. Зависимость пороговой энергии смещения E_d от угла вылета ПВА-U в ванадии в плоскости (100), $E_d=17.8$ эВ.

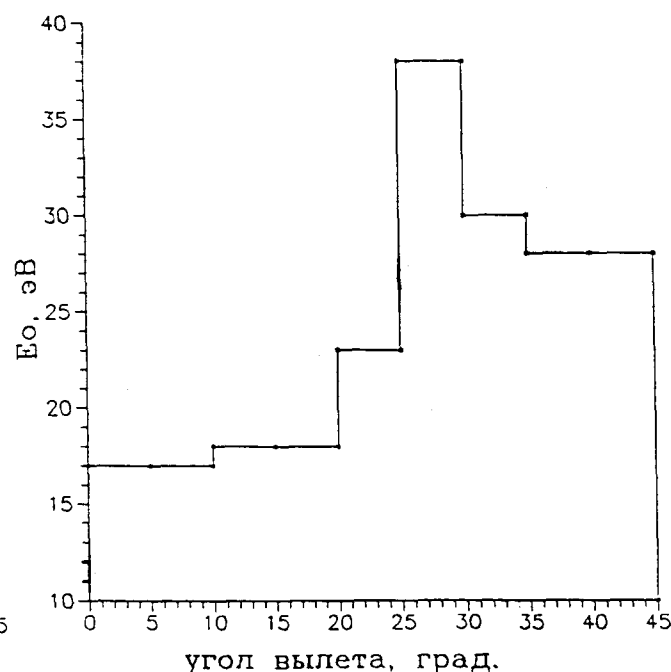


Рис. 2. Зависимость пороговой энергии смещения E_d от угла вылета ПВА-Cr в U-Cr в плоскости (100), $E_d=23.5$ эВ.

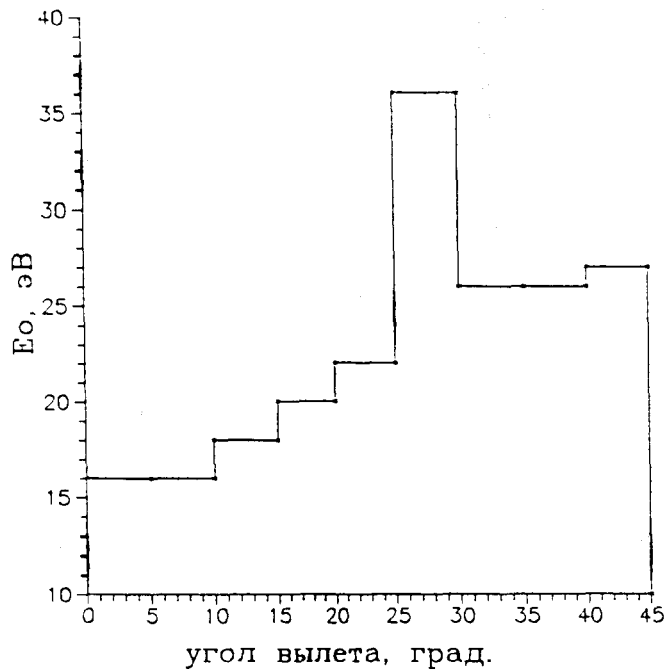


Рис. 3. Зависимость пороговой энергии смещения E_d от угла вылета ПВА-Мо в плоскости (100), $E_d=22.4$ эВ.

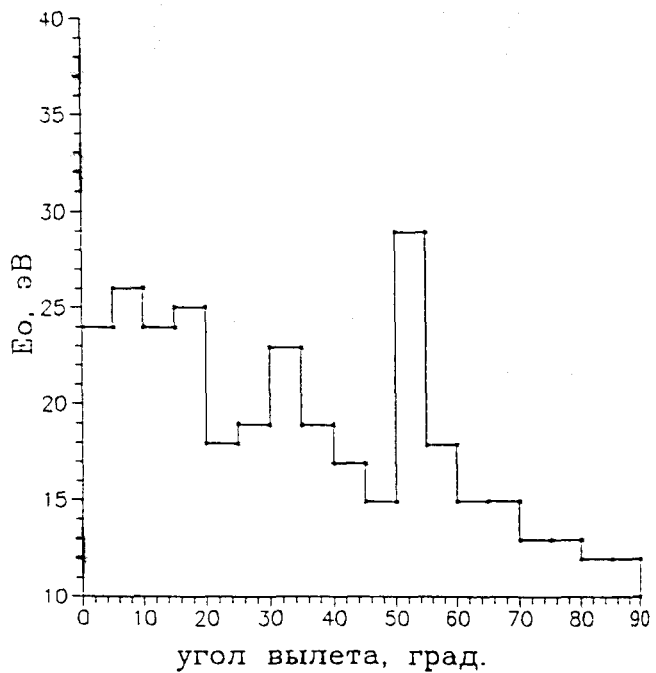


Рис. 4. Зависимость пороговой энергии смещения E_d от угла вылета ПВА-U в ванадии в плоскости (110), $E_d=19.1$ эВ.

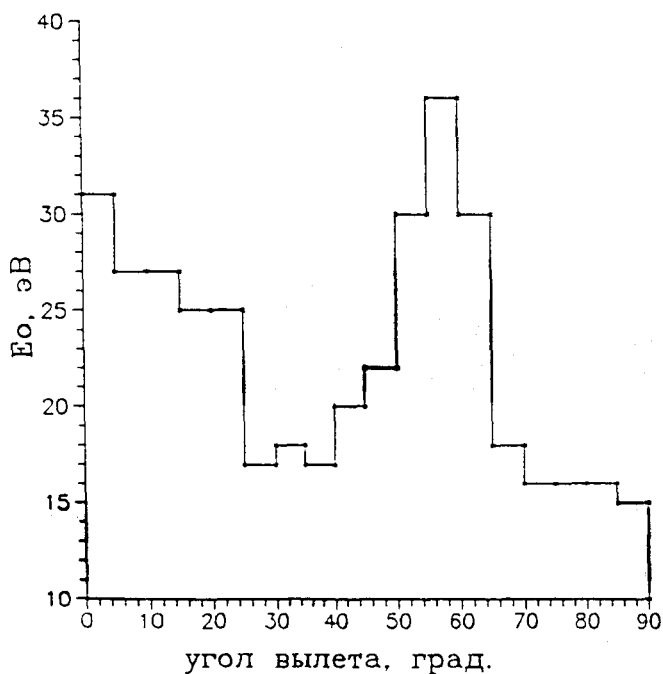


Рис. 5. Зависимость пороговой энергии смещения E_d от угла вылета ПВА-Cr в U-Cr в плоскости (110), $E_d=23$ эВ.

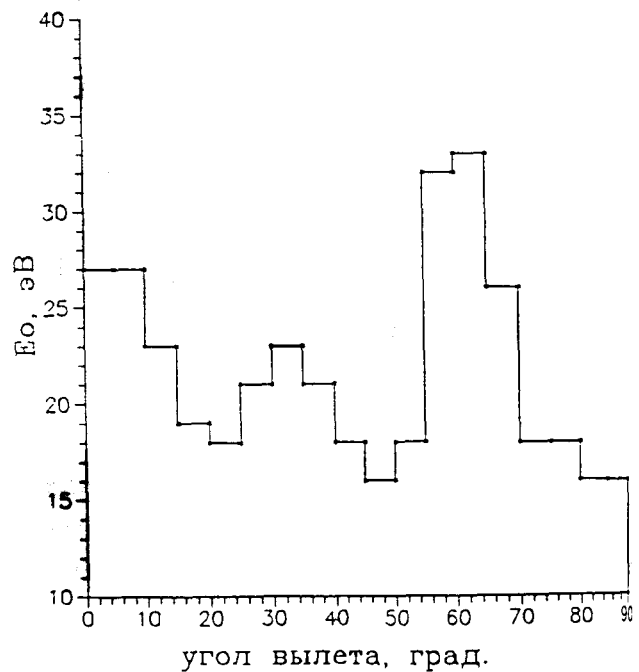


Рис. 6. Зависимость пороговой энергии смещения E_d от угла вылета ПВА-Мо в U-Мо в плоскости (110), $E_d=22$ эВ.

Таким образом, средние значения пороговой энергии образования устойчивых пар Френкеля для V, V-Gr, V-MO равны, соответственно, 18.8, 23.2, 22.1 (эВ).

В настоящей работе с помощью компьютерного моделирования процессов смещения в ванадиевых сплавах установлено, что в сплавах пороговая энергия смещения возрастает (по сравнению с однокомпонентными материалами) практически во всех кристаллографических направлениях за счет появления неоднородности в цепочках замещающих соударений. Превалирующим механизмом образования смещений в твердых растворах внедрения для атомов растворенного компонента является механизм перехода в соседнюю кристаллическую ячейку, на что затрачивается минимальная энергия, сравнимая с энергией термической миграции.

Информация о величине E_d и их угловых зависимостях позволяет надлежащим образом ориентировать модифицирующие пучки и регулировать их энергию, чтобы сформировать заданные дефектные структуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кирсанов В.В. ЭВМ - эксперимент в атомном материаловедении. М.: Энергоатомиздат, 1990 . - С. 14-22 .
2. Johnson R.A., Oh P.J. Analytic embedded atom method model for bcc metals // J.Mater.Res. 4, 1989, p. 1195.

ЗАЩИТА ЦИРКОНИЕВЫХ ОБОЛОЧЕК ТВЭЛОВ АТОМНЫХ РЕАКТОРОВ СОРБЦИОННОЙ ОТКАЧКОЙ ГАЗООБРАЗНЫХ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ (ГПД)

В.М.Ажажа, Б.В.Борц,
Л.В.Карнацевич,
В.С.Коган, И.М.Неклюдов
(ННЦ ХФТИ)

В наиболее распространенных в настоящее время водо-водяных корпусных реакторах типа ВВЭР теплоноситель имеет высокое давление (до 16 Мпа) и, проходя активную зону, нагревается до достаточно высоких температур (300-350⁰С). Это предъявляет высокие требования к жаропрочности материалов оболочек твэлов (кроме требования минимальности сечения захвата тепловых нейтронов). Требованиям жаропрочности лучше всего удовлетворяют сплавы циркония и нержавеющей стали. По сечению же захвата тепловых нейтронов лучше всего АІ (0,07 барна) и цирконий (0,17 барн). У компонентов нержавеющей стали эти сечения на порядки больше (от 2,5 барна у Fe и до 5,8 у Ti). Таким образом, практически единственным материалом для оболочек твэлов является Zr и его сплавы.