

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ РУЙНУВАННЯ МАТЕРІАЛІВ, ЩО МІСТЯТЬ У СОБІ РАДІОАКТИВНЕ ПАЛИВО

Т. М. Пацаган, М. Ф. Головка

Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, Україна

Я. Стафей

Інститут фізичної хімії, Польська академія наук, Варшава, Польща

Ж.-П. Бадіалі, А. Талєб

Університет П'єра і Марії Кюрі, Париж, Франція

Використовуючи концепцію коміркового автомату, досліджено процеси руйнування твердих матеріалів, що містять у собі радіоактивне паливо. На основі наявних знань про такі процеси розроблено двомірну мезоскопічну модель, яка дозволила ефективно відобразити руйнування поверхні матеріалу та якісно відтворити гістограми розпилених частинок, що були раніше отримані з експерименту. Отримано ряд характеристик для опису шорсткості поверхні матеріалу та динаміки деградації поверхні. Показано, що при збільшенні концентрації радіонуклідів в об'ємі, середні розміри розпилених частинок зменшуються, а рівень шорсткості матеріалу знижується.

1. Вступ

Дослідження руйнування лавоподібних паливовмісних матеріалів (ЛПВМ) під дією різноманітних внутрішніх процесів, спричинених наявністю в їх об'ємі радіоактивних елементів, вимагає особливого підходу, за допомогою якого можна було б отримати основні характеристики фронту руйнування матеріалу і який дозволив би робити при цьому довготермінові передбачення. Виокремимо декілька проблем, що виникають при вирішенні такої задачі. Перша, це вибір моделі, що здатна описати сам процес руйнування. Друга проблема – це поєднання отриманих характеристик із наявними експериментальними даними. Також питання впливу мікроскопічної структури та пружних властивостей досліджуваного матеріалу на процеси руйнування представляють неабиякий інтерес. Існує також ряд інших питань, що вимагають окремого вивчення. Зокрема, які саме процеси, спричинені радіонуклідами, є визначальними при розгляді ушкоджень у матеріалі (ядра віддачі, альфа-випромінювання, кулонівський вибух, тепловий клин) та як розвиваються ушкоджені області з часом.

На даний час існує ряд робіт, в яких вивчаються проблеми ушкодження матеріалів під дією атома віддачі в наслідок альфа-розпаду радіонукліда [1, 2]. Такі дослідження проводилися на мікроскопічному рівні за допомогою методу молекулярної динаміки. Каскад зміщень атомів, який був отриманий при цьому, дає уявлення про масштаби структурних змін у матеріалі. Проте даний опис є надзвичайно ресурсоємкий і може бути використаний тільки при дослідженні відносно малої області матеріалу, що співмірна з розмірами пошкодженої області. Насправді ж, вивчаючи руйнування матеріалу, ми маємо справу з багатьма ушкодженнями, які в підсумку приводять до розпилення субмікронних частинок із поверхні даного матеріалу [3]. Тому, розв'язуючи поставлену задачу, опис системи необхідно здійснювати виключно на мезоскопічному рівні. На жаль, на даний час не має експериментальних та теоретичних досліджень, які б давали вичерпне уявлення про сам процес формування ушкоджених областей та їх вплив на процес розпилення частинок матеріалу з поверхні. Відомо лише, що ушкоджені області є невпорядковані і їх мікроскопічна структура є відмінною від всієї решти матеріалу. Розмір такої області порядку 25 - 30 нм [3 - 5]. Також є дані щодо розмірів розпилених частинок, що виникли внаслідок руйнування ЛПВМ. Дані розміри, у середньому, близько 60 - 70 нм. Ці результати було отримано експериментально [3], що дає змогу зробити попередні оцінки при побудові теоретичної моделі. Крім того, отриманий у

цій же роботі розподіл розмірів розпиленних частинок дає чудову можливість провести порівняння з результатами теоретичних розрахунків.

У представлений роботі запропоновано модель для опису руйнування ЛПВМ, що виникає за рахунок об'ємних пошкоджень, спричинених радіоактивними процесами всередині матеріалу. Використовуючи концепцію коміркового автомату, проведено комп'ютерне моделювання процесів руйнування ЛПВМ на мезоскопічному рівні та отримано ряд характеристик для фронту руйнування, а також розподіли розмірів розпиленних частинок матеріалу. У другому розділі даної статті пропонується стислий огляд фізичної моделі процесу руйнування, а в третьому розділі читач ознайомиться з теоретичною моделлю, що вивчається в даній роботі. Четвертий розділ присвячено отриманим результатам та їх обговоренню. Деякі загальні висновки даного дослідження наведено в п'ятому розділі.

2. Загальна фізична модель

Перед тим, як розглянути модель, запропоновану в даній роботі, розглянемо ряд фізичних аспектів, які відомі з літератури й допоможуть нам усвідомити загальну картину руйнування ЛПВМ. Для отримання розуміння природи та механізмів даного процесу цінним дослідженням можна вважати роботу [3], присвячену проблемам руйнування ЛПВМ та пилоутворенню, в якій наведено експериментальні дані та здійснено їх детальний аналіз. У цій же роботі, на основі спостережених даних, запропоновано модель, що спирається на такі положення:

- 1) унаслідок різного роду активності радіонуклідів, що знаходяться в об'ємі ЛПВМ, утворюються дефекти, що являють собою розупорядковані області (РО);
- 2) саме утворення РО приводить до руйнування матеріалу;
- 3) частинки матеріалу, що відокремлюються в процесі руйнування, формують пил субмікронного розміру;
- 4) розпилені внаслідок руйнування частинки є різного розміру, і ці розміри можуть бути описані певним нормальним розподілом;
- 5) розпилені частинки формуються з РО і мають форму, подібну до сферичної.

Дана модель суттєво розширила уявлення про процеси руйнування ЛПВМ, а експериментальні значення дали змогу отримати деякі вхідні параметри для запропонованої моделі. Проте необхідно зробити декілька застережень відносно даної моделі. Перше зауваження стосується твердження, що частинки сформовані виключно з РО. А друге – це те, що частинки утворилися внаслідок руйнування і мають форму, близьку до сферичної. Ми вважаємо, що розпилені при руйнуванні частинки не можуть формуватися виключно з РО. Адже РО мають нестабільну структуру, яка може існувати тільки в цілісній формі як частина субстрату, що формує ЛПВМ. Тобто РО повинні утримуватися всередині стабільних областей матеріалу і не можуть розглядатися як окремі незалежні області. Співмірність розмірів найдрібніших частинок та розмірів РО всередині ЛПВМ ще не свідчить, що це є одні й ті самі частини матеріалу. Щодо “сферичності” розпиленних частинок, то така форма може бути прийнята тільки умовно. Адже не можуть бути всі частинки опуклої форми, бо в такому випадку ми б мали допустити, що частина зруйнованого матеріалу може залишатися поза нашою увагою (неможливо суцільний матеріал розбити на частинки виключно опуклої форми). Тому ми вважаємо, що розпилені частинки сформовані одночасно з РО і частин непошкодженого субстрату ЛПВМ. Форма ж цих частинок повинна вважатися неправильною й визначатися механізмом відколювання окремо взятих частин матеріалу від поверхні.

Найбільш ефективним і зрозумілим механізмом утворення РО є локальне розпорядкування атомів унаслідок віддачі ядра під час альфа-розпаду. У такому випадку можна припустити, що концентрація РО є числом, яке співмірне з концентрацією радіонуклідів, що знаходяться в об'ємі ЛПВМ. Виходячи з даних про масову частку радіонуклідів в ЛПВМ, що становить близько 10 %, та розміру РО (~30 нм), можна зробити висновок, що об'ємна частка всіх РО є суттєво нижчою за 100 % (біля 8 %). Це додатково підтверджує, що розпилені

частинки не можуть містити в собі *лише* РО матеріалу, бо концентрація цих областей є набагато меншою. Знову ж таки, урахуваючи невелике значення концентрації РО в об'ємі та їх розміри, важко говорити в такому випадку про стаціонарність процесу руйнування, тим паче про можливе *повне* руйнування ЛПВМ унаслідок виникнення неперервного кластера РО. Звичайно, якщо спостерігається акумулювання РО з часом, тобто коли процеси утворення РО є інтенсивнішими, ніж їх релаксація, виникнення неперервного кластера буде неминучим. Проте до цього моменту можуть виникнути інші чинники, що прискорять руйнівні процеси матеріалу. Одними з таких чинників є мікротріщини (МТ), що формуються внаслідок локальних напружень в області РО. І хоча негайного руйнування ЛПВМ може не відбутися внаслідок малого розміру РО й подальшої релаксації напружень унаслідок послаблення міжатомних зв'язків, можливий механізм “сповільненої” деградації матеріалу, який пов'язаний з термоактивацією внутрішніх напружень та гетерогенною структурою ЛПВМ [6]. Раніше вже вивчалось питання поширення МТ в ЛПВМ [6] як важливого фактора, що приводить до руйнування матеріалу. Ми також вважаємо, що вплив формування МТ на руйнування матеріалу є визначальним, тому він обов'язково повинен бути взятий до уваги. Проте в нашому дослідженні ми зосереджуємо свою увагу не так на поширенні МТ, як на їх наявності, опускаючи при цьому деталі, пов'язані з динамікою поширення кожної тріщини зокрема.

Запропонована нами нижче модель базується на експериментальних даних та на уявленнях про процеси руйнування, представлених у роботі [3]. Проте враховуючи вищевикладене, ми розвиваємо дане уявлення. Таким чином, можемо окреслити основні положення, якими ми керувались при розробці моделі:

- 1) ЛПВМ містять у собі певну концентрацію РО, випадковим чином розподілених в об'ємі;
- 2) РО спричиняють локальні напруження, що приводить до утворення МТ у матеріалі;
- 3) МТ є основним чинником руйнування матеріалу;
- 4) розпилені частинки (РЧ), що утворилися в результаті руйнування, містять у собі як РО, так і частини непошкодженого субстрату ЛПВМ.

Звичайно, перелік можна б було розширити ще рядом особливостей, притаманних ЛПВМ, наприклад урахування корозійних процесів на поверхні матеріалу, наявність пор в об'ємі тощо. Але це може бути предметом наступних досліджень, а поки що обмежимося тими аспектами, які було виділено.

3. Опис теоретичної моделі

Як уже згадувалося, моделювання процесів руйнування ЛПВМ проводилося за допомогою комп'ютерного моделювання, використовуючи відому концепцію коміркового автомату. Алгоритм, за яким працював комірковий автомат, визначався розробленою нами моделлю. У рамках даної моделі система являє собою двомірну тетрагональну ґратку розміром $N_x \times N_y$. Частина вузлів N_d позначається як РО й розташована випадковим чином. При розгляді взаємодії між вузлами беруться до уваги тільки чотири найближчі сусіди (модель ван Неймана [7]). Крім того, на ґратку накладено граничні періодичні умови в напрямку осі X.

На кожному кроці моделювання випадковим чином вибираються один за одним РО-вузли й від них виконується побудова, що моделює утворення МТ. Урахуваючи те, що середовище поширення МТ є аморфним, а отже, ізотропним, шлях ходу поширення МТ визначається випадковим блуканням [8]. МТ поширюється в різні боки відносно вихідного вузла РО (МТ1 і МТ2 на рис. 1). Існують два варіанти початку поширення МТ, а саме, коли МТ1 рухається вліво, а МТ2 – вправо, а також, коли МТ1 розповсюджується вгору, а МТ2 – відповідно вниз. Кожен раз один із цих варіантів вибирається випадковим чином. Тобто для однієї побудови МТ необхідно здійснити два випадкових блукання МТ1 і МТ2. Кожне

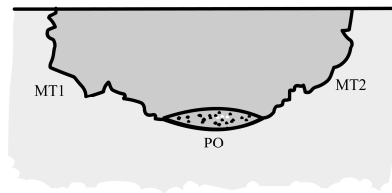


Рис. 1. Приклад поширення МТ.

блукання здійснює обмежену кількість кроків N_{srw} , що визначає певну ефективну довжину МТ в даному середовищі при певних умовах. Очевидно, що значення N_{srw} залежить від багатьох факторів, таких як пружні властивості матеріалу, температура, енергія активації дефектів тощо. Розрахунок N_{srw} є окремою й дуже непростою задачею, тому ми розглянемо лише якісний вплив даного параметра на різні властивості ЛПВМ, що руйнуються. Слід зауважити, що в рамках запропонованої моделі, нами накладено певне обмеження на випадкове блукання, яке полягає в тому, що кожний наступний крок блукання віддаляє кінець МТ від точки її зародження ($OA'' > OA'$, $OB'' > OB'$, рис. 2). Це забезпечує, як мінімум, неможливість того, що МТ1 і МТ2 перетнуться (див. рис. 1), а також те, що тріщина не піде у зворотному напрямку. З іншого боку, таким чином визначається пріоритетний напрямок розповсюдження для кожної з тріщин МТ1 і МТ2, який залежить від початкового напрямку в точці О.

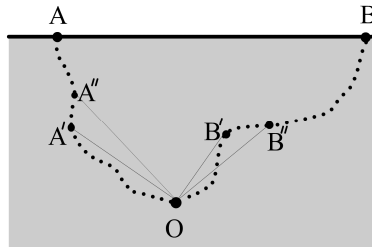


Рис. 2. Ілюстрація побудови МТ. Пунктирними лініями зображено шляхи випадкового блукання.

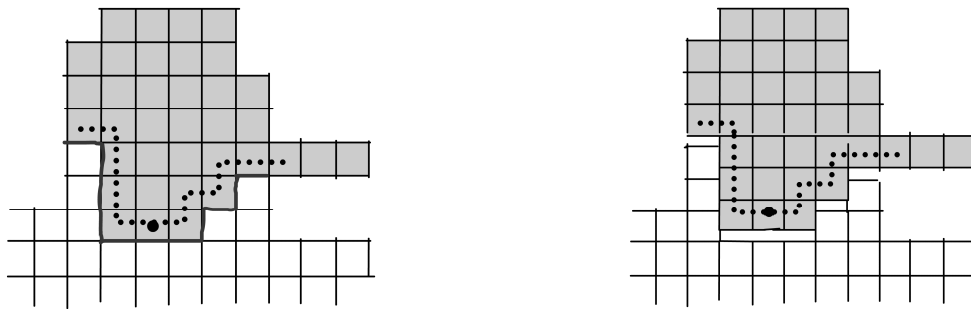


Рис. 3. Детальний приклад побудови МТ за допомогою випадкового блукання при $N_{srw} \geq 6$.

На наведеному прикладі (рис. 3) показано умови відокремлення частини матеріалу модельного ЛПВМ, тобто утворення РЧ. Сірі клітинки належать до частини матеріалу, що відривається. Пунктирною лінією позначено шлях випадкового блукання МТ1 і МТ2, а суцільна товста лінія позначає межу, по якій відбувається відокремлення частинки.

Незважаючи на те, що ми задаємо певні правила розповсюдження тріщин, сам процес їх формування не представляє для нас інтересу на даному етапі. Припускаємо, що тріщини утворюються достатньо швидко, щоб у рамках вибраної моделі можна було вважати таке формування миттєвим. Тому в першу чергу нас цікавлять уже остаточно сформовані тріщини, а саме їх траєкторія формування, яка може привести до відколювання частини матеріалу від поверхні. Для цього необхідно сформулювати умови, при яких таке відколювання

відбувається. На рис. 3 показано окремий приклад, коли МТ1 і МТ2 через певну кількість випадкових кроків ($\leq N_{srw}$) досягають поверхні. У такому випадку повинно відбуватися відколювання частини матеріалу і формування окремої частинки, яка потім потрапляє у навколишнє середовище. Якщо ж принаймні одна з МТ не досягає поверхні матеріалу, відколювання не відбувається. Причому приймаємо, що дані МТ з часом зникають, тобто релаксують. Тому при наступних побудовах МТ ми не враховуємо МТ, що були побудовані раніше. Таке наближення є цілком добрим, якщо припустити, що ймовірність активації двох дефектів протягом часу релаксації t_r на віддалі не більшій, ніж N_{srw} , є малою величиною. При малій густині РО та малому N_{srw} дане наближення цілком обгрунтоване.

На кожному кроці моделювання робиться спроба відокремити частину матеріалу шляхом побудови відповідної пари МТ1 і МТ2. Для цього здійснюється N_d спроб. Кожна спроба відповідає випадковому вибору одного з наявних в об'ємі РО з наступними побудовами МТ1 і МТ2. Такі спроби виконуються доти, поки не вдасться відокремити хоча б одну частинку. Після цього відбувається перехід до наступного кроку моделювання. Таким чином, здійснюючи послідовно побудови МТ, що приводять до розпилення частинок з поверхні, спостерігається поступова деградація досліджуваного матеріалу. Одночасно збір інформації про стан поверхні та розміри розпилених частинок на кожному кроці дає змогу отримати необхідні характеристики, такі як шорсткість поверхні, гістограми розподілу частинок за розмірами тощо.

Представлена модель є достатньо простою та ефективною. Однією з переваг даної моделі є кількість параметрів, якими вона описується. Адже на даному етапі нам вдалося обмежитися лише двома параметрами. Перший параметр характеризує концентрацію радіонуклідів в об'ємі ЛПВМ і позначається як

$$f_d = \frac{N_d}{N_x \times N_y}, \quad (1)$$

а другий – залежить від пружних та структурних властивостей матеріалу, що мають безпосередній вплив на формування МТ, у нашому випадку – на їх довжину, яка визначається кількістю кроків випадкового блукання N_{srw} для МТ1 і МТ2. Звичайно, слід згадати також про ще один параметр, пов'язаний із масштабом системи, а саме розмір однієї комірки a_0 . Проте в даній роботі ми обмежуємося відносними одиницями довжини, що нормовані на даний параметр, і тому a_0 не береться до розгляду.

4. Результати та обговорення

Проводячи комп'ютерне моделювання представленої системи, нами було отримано ряд характеристик при різних параметрах f_d і N_{srw} , зокрема шорсткість поверхні ЛПВМ у процесі руйнування, зміщення фронту руйнування та, найголовніше, гістограми розподілу розпилених частинок, що виникли в процесі руйнування. Нами пораховано декілька властивостей, що характеризують шорсткість поверхні. Перша з них – це поточна кількість поверхневих вузлів N_s , пронормована на кількість поверхневих вузлів плоскої поверхні N_x [9]:

$$r(N_{steps}) = \frac{N_s(N_{steps})}{N_x}. \quad (2)$$

У початковий момент дана функція рівна одиниці ($r(0)=1$), так як поверхня стартової конфігурації системи є плоскою. Далі, у процесі руйнування, відбувається відхилення r від початкового значення, причому це відхилення зростаючого характеру. Проте після певної кількості кроків (у нашому випадку $N_{steps} > 50000$), коли процес стає стаціонарним, значення

r виходить на константу. Саме ця константа й характеризує шорсткість матеріалу. Інша характеристика шорсткості – це корінь квадратний середньоквадратичного відхилення від середнього положення фронту [10]

$$\sigma(N_{steps}) = \left[\frac{1}{N_x} \sum_{i=1}^{N_x} (h_i - h(N_{steps}))^2 \right]^{1/2}. \quad (3)$$

Залежність цієї характеристики від кількості кроків моделювання має також зростаючий характер з наступним насиченням. У початковий момент $\sigma(0)$ рівна нулю, так як усі поверхневі вузли лежать на одній лінії фронту.

І, нарешті, характеристика зміщення фронту залежно від кількості кроків моделювання розраховується із співвідношення

$$h(N_{steps}) = \frac{1}{N_x} \sum_{i=1}^{N_x} h_i \quad (4)$$

і описує динаміку процесу руйнування [9].

На рис. 4а представлено залежність $r(N_{steps})$ при постійному значенні $N_{srw} = 3$, але при різних значеннях $f_d = 0.19, 0.20, 0.30, 0.50, 0.80$. Як бачимо, при збільшенні густини РО, шорсткість поверхні зменшується. Зауважено, що при $N_{srw} = 3$ та $f_d < 0.19$, процес руйнування перестає бути стаціонарним, тобто руйнування через деякий час припиняється. Тому мінімальне значення f_d , яке розглядалося в даному випадку, було рівне 0.19. Це пояснюється тим, що в якийсь момент не знайшлося біля поверхні матеріалу жодної РО, яка б могла привести до розпилення частинки. Значення, при якому процес руйнування перестає бути стаціонарним, можна вважати критичним, і при цьому значенні шорсткість поверхні матеріалу досягає свого максимального значення. Для випадку, коли $N_{srw} = 5$ (рис. 4б), бачимо, що за рахунок більшої кількості кроків випадкового блукання критичне значення f_d є суттєво нижчим і знаходиться близько 0.1. Проте якісна картина для $r(N_{steps})$ у цілому залишається такою самою, як і при $N_{srw} = 3$.

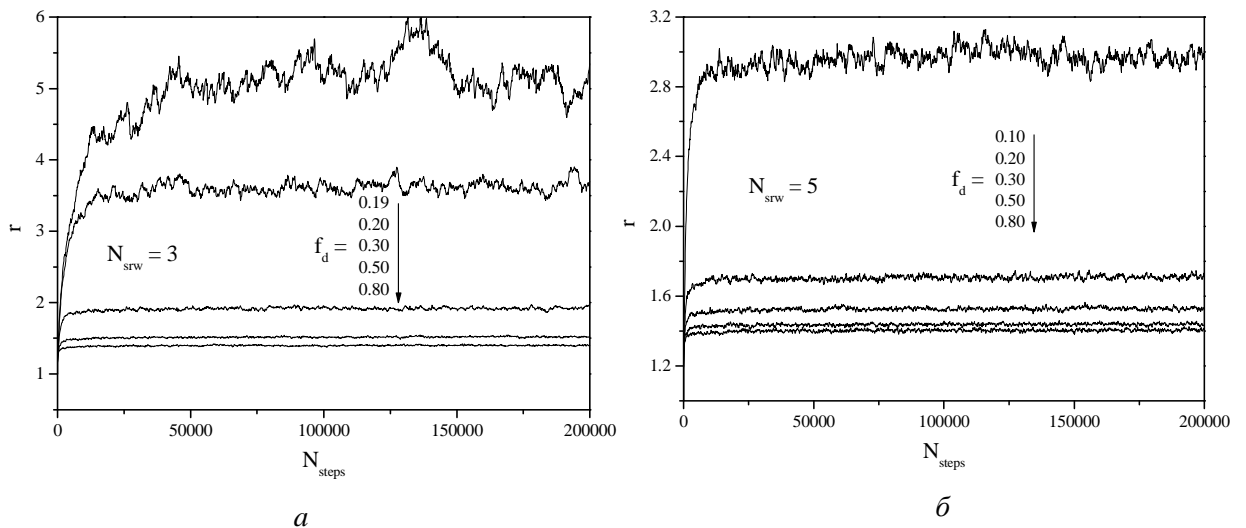


Рис. 4. Залежність показника шорсткості r від кількості кроків моделювання для випадків $N_{srw} = 3$ та $N_{srw} = 5$ і при вказаних параметрах f_d .

Зростання показника шорсткості не може не позначатися на ширині фронту руйнування, що описується характеристикою $\sigma(N_{steps})$. На рис. 5 наведено дані характеристики для випадків $N_{srw} = 3$ і $N_{srw} = 5$ при різних значеннях f_d . Так само, як і $r(N_{steps})$, $\sigma(N_{steps})$ значно

зростає в області критичного значення $f_d = 0.19$ при $N_{srw} = 3$ та $f_d = 0.1$ при $N_{srw} = 5$, що свідчить про виникнення на поверхні матеріалу виступів (“півостровів”) великого розміру. При збільшенні f_d ширина фронту руйнування поверхні зменшується, а, отже, розміри таких півостровів стають помітно меншими. Так, у випадку $N_{srw} = 5$ ширина фронту руйнування менша внаслідок більшої ймовірності розпилення частинок при даному значенні, ніж при $N_{srw} = 3$.

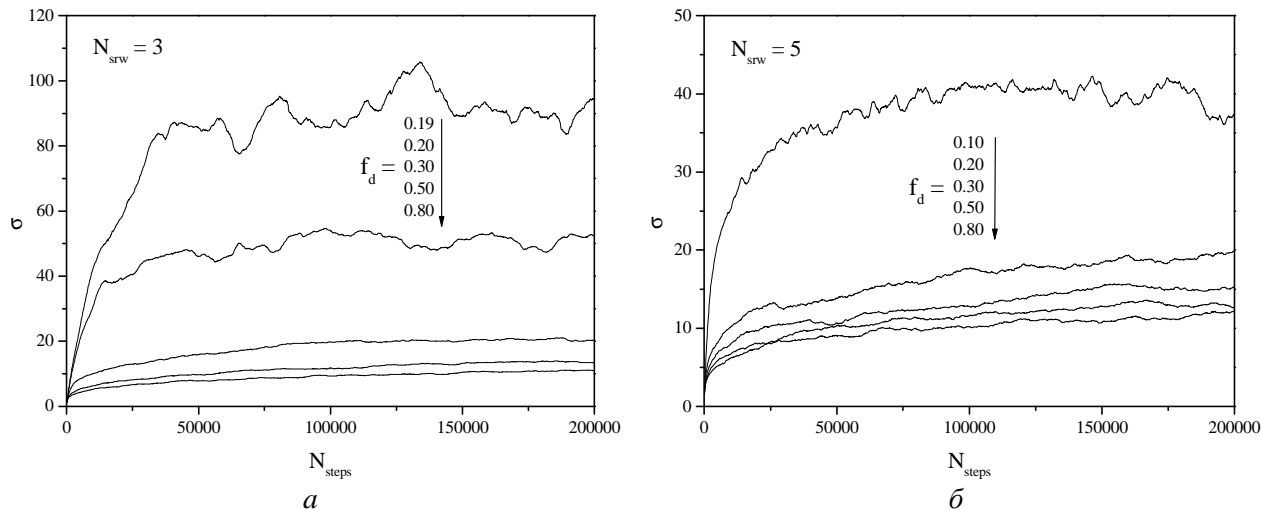


Рис. 5. Залежність ширини фронту руйнування σ від кількості кроків моделювання для випадків $N_{srw} = 3$ та $N_{srw} = 5$ і при вказаних параметрах f_d .

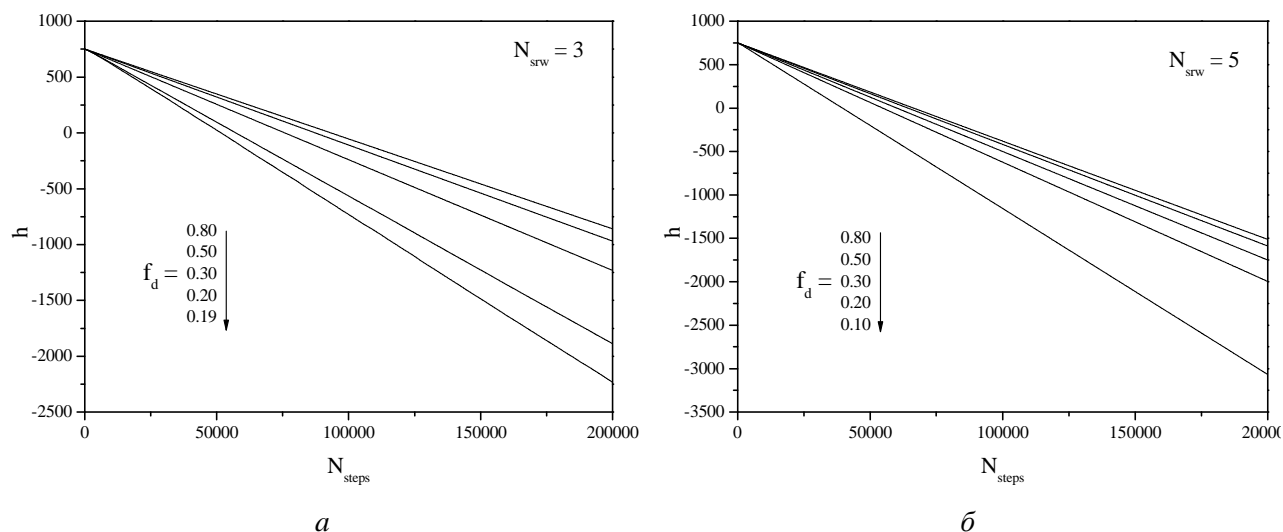


Рис. 6. Середнє положення фронту руйнування залежно від кількості кроків моделювання для випадків $N_{srw} = 3$ та $N_{srw} = 5$ при вказаних параметрах f_d .

Розглядаючи залежність зміщення фронту руйнування $h(N_{steps})$ на рис. 6, можна зауважити абсолютну лінійність процесу, що свідчить про його стаціонарність. Тангенс нахилу лінії характеризує швидкість руху усередненого фронту, тобто швидкість руйнування. При зменшенні густини f_d ця швидкість зростає, що, на перший погляд, виглядає достатньо дивним. Проте слід нагадати, що в алгоритм моделювання закладено можливість лише одного відколювання частинки за один крок. Тому цьому результату існує просте пояснення. Як вже було показано вище, при зменшенні f_d зростає шорсткість, що приводить до утворення великих півостровів на поверхні матеріалу, які згодом стають здатними до відокремлення від поверхні, формуючи при цьому частинки великих розмірів. Чим більший розмір частинок,

тим більша частина матеріалу покидає ЛПВМ за один крок. Реальна ж швидкість руйнування залежить від величини, що характеризує кількість відколювань, що відбуваються за певний період часу, тобто від кількості розпилених частинок, продукованих за одиницю часу з одиниці площі матеріалу. Володіючи цією величиною, можна пов'язати її з результатами, отриманими в даній роботі, і, таким чином, здійснювати довготермінові передбачення стосовно до загального процесу руйнування. З іншого боку, існує можливість оцінки ймовірності відриву частинки від поверхні матеріалу, що дасть змогу розрахувати швидкість руйнування лише на основі комп'ютерного експерименту. Проте така оцінка вимагатиме відповідної модифікації розробленого алгоритму, а також постане необхідність більшої кількості обчислювальних ресурсів. Тому дані оцінки не робилися на даному етапі й будуть проводитися в рамках подальшого дослідження. Слід лише зауважити, що при $N_{srw} = 5$ (рис. 6б) “швидкість руйнування” помітно більша, ніж у випадку $N_{srw} = 3$ (див. рис. 6а). Це пояснюється більшою ймовірністю утворення нових частинок унаслідок відокремлення частин матеріалу від поверхні, що приводить до більш інтенсивного розпилення частинок при більших значеннях N_{srw} .

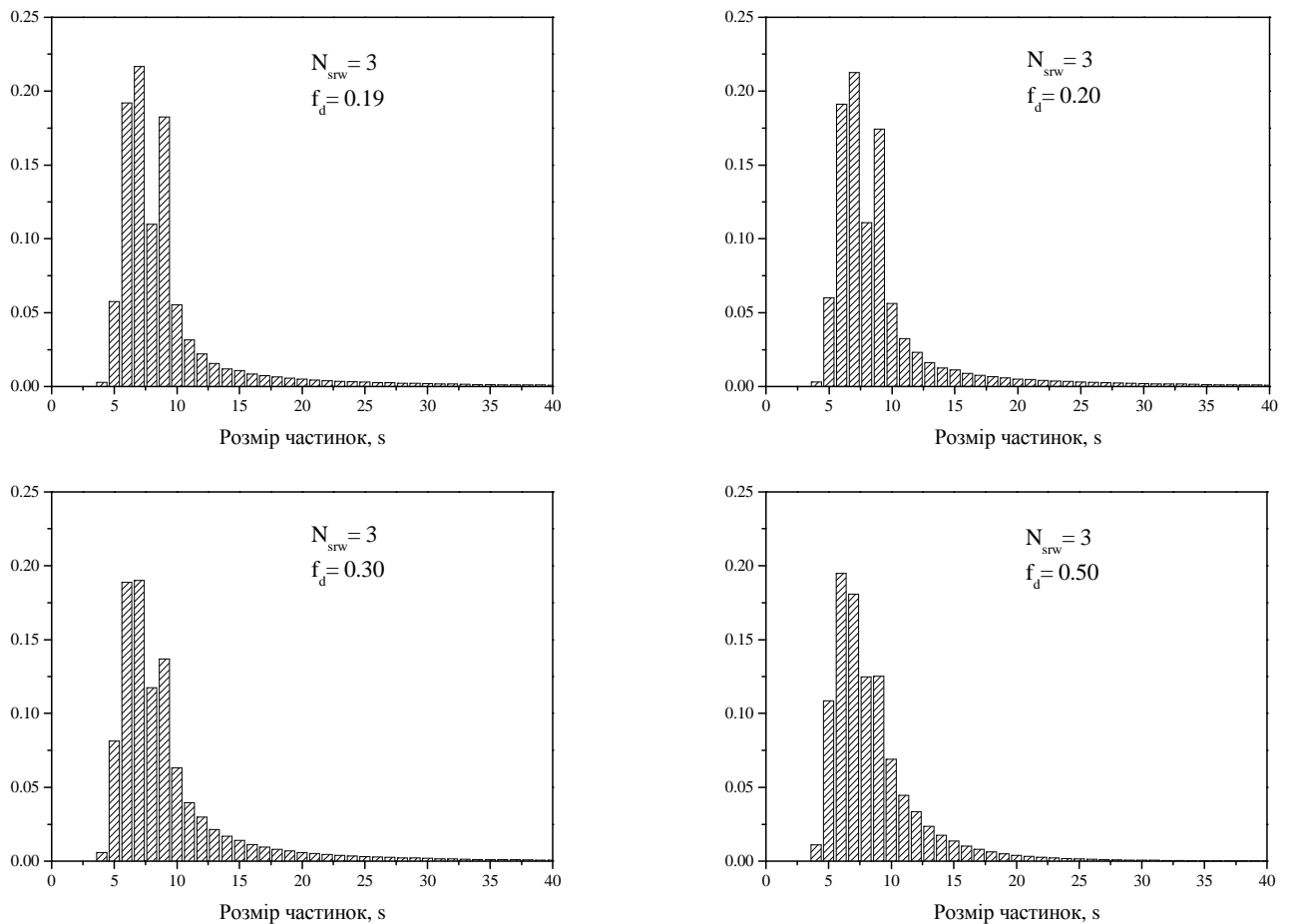


Рис. 7. Гістограми розподілу розпилених частинок за розмірами при $N_{srw} = 3$ та вказаних значеннях f_d .

Основною метою цієї статті був розрахунок гістограм, що описують розподіли розпилених частинок за розмірами. Інтерес до вивчення такого роду гістограм був викликаний експериментальними даними, опублікованими в роботі [3], в якій було наведено розподіл частинок, що утворилися внаслідок руйнування ЛПВМ під дією радіоактивних процесів, що протікали всередині даного матеріалу. Аналізуючи розміри розпилених частинок протягом комп'ютерного моделювання, нами було отримано ряд гістограм при різних значеннях концентрації радіонуклідів в об'ємі $f_d = 0.1-0.8$. Аналогічно, як і у випадку розрахунку

шорсткості, було розглянуто два значення максимального значення кроків випадкового блукання для побудови тріщин $N_{srw} = 3$ і $N_{srw} = 5$.

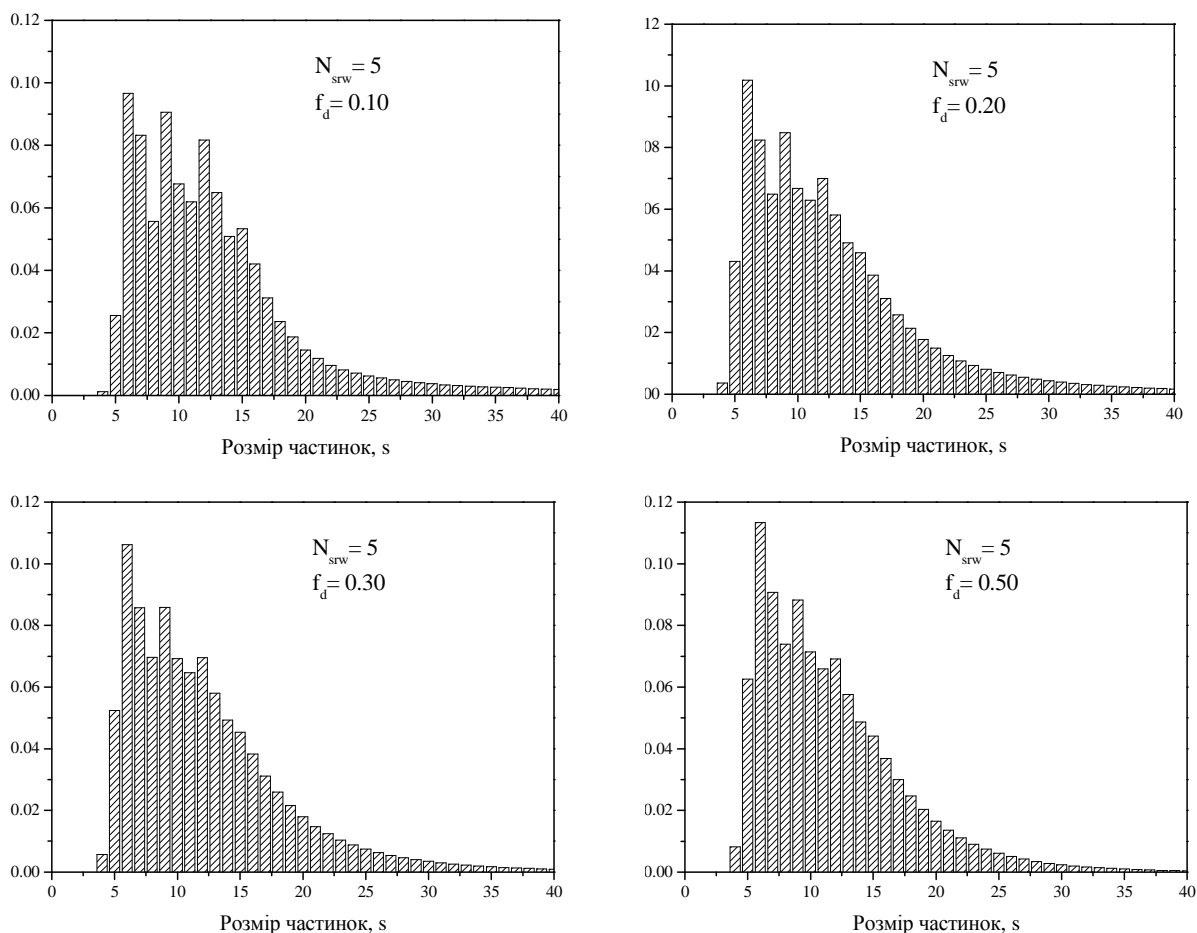


Рис. 8. Гістограми розподілу розпилених частинок за розмірами при $N_{srw} = 5$ та вказаних значеннях f_d .

На рис. 7 можна побачити розраховані гістограми при $N_{srw} = 3$. Два чітко виражені піки при $s = 7$ і $s = 9$ для $f_d = 0.19$ і $f_d = 0.3$ характеризують найбільш імовірні розміри розпилених частинок. Із збільшенням f_d другий пік ($s = 9$) стає менш виразним і при $f_d = 0.5$ зовсім зникає. При цьому перший пік зміщується в бік меншого розміру розпилених частинок ($s = 6$). По гістограмах також видно, що мінімальне значення розміру, яким може володіти розпилена частинка, становить $s_{min} = 4$. Максимального ж значення розміру частинки як такого не спостерігається. Замість того є рівномірне загасання розподілу до нуля при $s > 10$. Розглядаючи гістограми для випадку $N_{srw} = 5$ (рис. 8), помічено, що при даному параметрі таке рівномірне загасання починається при суттєво вищих значеннях розмірів розпилених частинок ($s > 15$). Таким чином, унаслідок більших розмірів МТ, що можуть формуватися при заданому параметрі N_{srw} , отримано ширший спектр розмірів розпилених частинок. Крім того, можна зауважити, що на відміну від випадку $N_{srw} = 3$, при $N_{srw} = 5$ на гістограмах (див. рис. 8) спостерігається вже три виражені піки, а не два. Два перших піки відповідають значенням $s = 6$ і $s = 9$, а третій – $s = 12$. А коли $f_d = 0.1$, незначно проявляється ще й четвертий пік при $s = 15$. Очевидно, що кратність трьом для отриманих значень розмірів розпилених частинок не є випадковою й значною мірою визначається ґратковістю

моделі, що досліджується в даній роботі. Проте певну періодичність максимальних значень на гістограмах було помічено й в експериментальних дослідженнях.

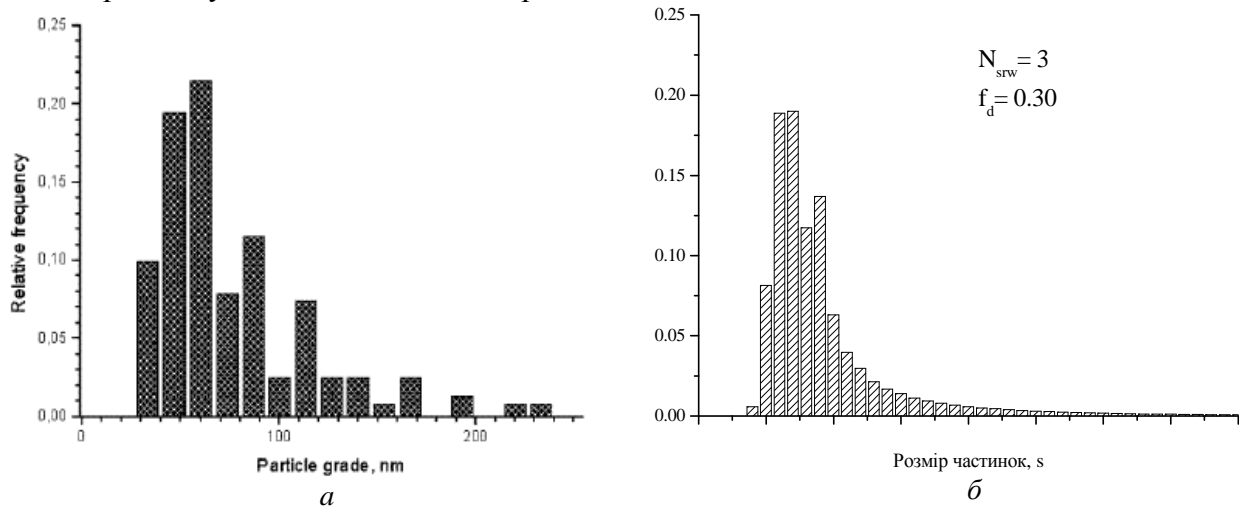


Рис. 9. Гістограми розподілу розпилених частинок за розмірами: а - експериментальні вимірювання [3]; б - результати комп'ютерного моделювання, отримані в даній роботі.

На рис. 9а представлено результати вимірювань розмірів розпилених частинок ЛПВМ, отриманих у роботі [3]. На даній гістограмі можна побачити три виразних піки, що розташовані на приблизно однаковій віддалі один від одного по осі абсцис. Помічена тенденція чудово узгоджується з результатами, отриманими в нашій роботі за допомогою комп'ютерного моделювання, і свідчить про застосовність розробленої нами моделі для опису процесів руйнування ЛПВМ. Поряд з тим на рис. 9б для порівняння показано одну з порохованих нами гістограм. Тут можна бачити хороше якісне узгодження представлених результатів. Якісна подібність обох гістограм додатково підтверджує успішність запропонованого нами опису руйнування ЛПВМ та утворення розпилених частинок.

5. Висновки

Запропонована в даній роботі теоретична модель руйнування ЛПВМ є достатньо простою, завдяки чому вона дає змогу ефективно описувати такого роду процеси. Дана модель описується двома параметрами, які, на нашу думку, є найбільш визначальними комплексно враховують основні чинники, що приводять до руйнування матеріалу. На основі представленої моделі, використовуючи концепцію коміркового автомату, стало можливим проводити комп'ютерне моделювання деградації поверхні матеріалів, що містять у собі радіоактивне паливо, а також дослідити деякі аспекти, пов'язані з пилоутворенням. Отримані результати показують, що розпилені частинки мають різні розміри, що описуються певним нормальним розподілом, при чому такий розподіл є чутливим до кількості радіоактивного палива в об'ємі ЛПВМ. Інший аспект пов'язаний із виникненням МТ у матеріалі. Унаслідок активності радіонуклідів усередині матеріалу виникають РО, що спричинює локальні напруження в матеріалі, які, у свою чергу, приводять до утворення МТ. МТ, що утворюються біля поверхні матеріалу, є основним рушієм руйнування матеріалу та пилоутворення, тоді як МТ, що знаходяться далеко від поверхні, з часом здатні заліковуватися. Ті МТ, що виникли біля поверхні, породжують частинки субмікронного розміру. Утворений радіоактивний пил такого розміру є особливо небезпечним, бо, потрапляючи в навколишнє середовище, здатний розповсюджуватися на великі відстані. Очевидно, що параметри МТ, такі як їх розміри, форма, динаміка їх виникнення, залежать від багатьох факторів, які повинні бути більш детально вивчені. У нашому дослідженні при описі процесів руйнування ми обмежилися лише одним параметром – максимальною довжиною МТ. Крім того, нами було знехтувано взаємодією між тріщинами, що само по собі може приводити до недооцінки динаміки

руйнування ЛПВМ. З іншого боку, якісне узгодження отриманих гістограм розпиленних частинок з експериментом дає змогу припустити, що накладені на модель обмеження не є визначальними. У будь-якому випадку дана модель ще потребує подальшого вдосконалення, що дасть змогу виявити важливість згаданих вище параметрів.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Geisler T., Trachenko K., Rios S. et al.* Impact of self-irradiation damage on the aqueous durability of zircon ($ZrSiO_4$): implications for its suitability as a nuclear waste form // *J. Phys.: Condens. Matter.* - 2003. - Vol. 15. - P. 597 - 605.
2. *Trachenko K., Dove M.T., Artacho E. et al.* Atomistic simulations of resistance to amorphization by radiation damage // *Phys. Rev. B.* - 2006. - Vol. 73. - P. 174207.
3. *Baryakhtar A., Gonchar V., Zhidkov A.* Radiation damages and self-sputtering of high-radioactive dielectrics: spontaneous emission of submicronic dust particles // *Condens. Matter Phys.* - 2002. - Vol. 5. - P. 449.
4. *Wronkiewicz D.J.* Argonne National Laboratory Radionuclide decay effects on waste glass corrosion and weathering // Preprint ANL/CMT/CP-80028. - 1993.
5. *Ewing R.C., Weber W.J., Clinard Jr. F.W.* Radiation Effects in Nuclear Waste Forms for High-Level Radioactive Waste // *Progress in Nuclear Energy.* - 1995. - Vol. 29. - P. 63.
6. *Мриглюд І.М., Гнатюк В.В.* До теорії формування мікротріщин в твердих тілах під впливом радіаційного опромінення // Препринт ІФКС, ІСМР-04-13U. - 2004.
7. *Chopard B., Droz M.* Cellular automata modeling of physical systems / Cambridge University. - Press Collection Alea, 1998.
8. *Herrmann H., Roux S.* Statistical models for the fracture of disordered media. - North Holland, 1990.
9. *Taleb A., Stafiej J., Chausse A. et al.* Simulations of film growth and diffusion during the corrosion process // *J. Electroanal. Chem.* - 2001. - P. 500 - 554.
10. *Barabasi A.L., Stanley H.Y.* Fractal Concepts in Surface Growth / Cambridge University. - Cambridge, 1995.

Надійшла до редакції 16.05.07

8 МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАЗРУШЕНИЯ В МАТЕРИАЛАХ, СОДЕРЖАЩИХ РАДИОАКТИВНОЕ ТОПЛИВО

Т. М. Пацаган, М. Ф. Головко, Я. Стафей, Ж.-П. Бадиали, А. Талёб

Используя концепцию ячеечного автомата, исследованы процессы разрушения твердых материалов, содержащих радиоактивное топливо. На основании имеющихся данных об этих процессах разработана двухмерная мезоскопическая модель, которая сделала возможным эффективно отобразить разрушение поверхности материала и качественно воспроизвести гистограммы распыленных частиц, полученные ранее экспериментально. Получен ряд характеристик для описания шероховатости поверхности материала и динамики деградации поверхности. Показано, что при увеличении концентрации радионуклидов в объеме материала средние размеры распыленных частиц уменьшаются, а уровень шероховатости поверхности материала понижается.

8 MODELING OF DAMAGE PROCESSES FOR MATERIALS CONTAINING IRRADIATED FUEL

T. M. Patsahan, M. F. Holovko, J. Stafiej, J.-P. Badiali, A. Taleb

Using the conception of cellular automata the damage processes of solid materials containing irradiated fuel are studied. On the base of available knowledge about the processes considered a two-dimensional mesoscale model is developed to describe efficiently the damages of the material surface and to reproduce qualitatively the histograms of sputtered particles obtained from the experiment. A series of characteristics for surface roughness and a surface degradation dynamics of the damaged material are obtained. It is observed that an increase of the radionuclides concentration leads to decreasing of the mean value of the sputtered particles sizes and the surface roughness is getting lower as well.

Шановні автори!

Дуже уважно, будь ласка, вичитайте редакційну верстку статті, зробіть необхідні виправлення й дайте згоду на публікування виправленої верстки.

Індекси у формулах, тексті, рисунках бажано писати мовою видання. Зверніть, будь ласка, увагу на рис 9а - підписи на осях мають бути укр. мовою.

З повагою,
редакція.

Шановна редакція!

Стаття вичитана. Кілька неважливих помарок виправлені. Даємо згоду на публікацію цієї статті.

Індекси залишаємо написаними латинськими буквами, зрештою вони використані для символічного позначення, і зміст їх достатньо зрозумілий з тексту.

Рис.9а є не наш, а взятий із англomовного журналу Condensed Matter Physics. Цей результат, опублікований в даному виданні раніше, використаний нами для порівняння. Ми вирішили, що доцільніше представити рис.9а у вигляді, в якому його подали автори (*Baryakhtar A., Gonchar V., Zhidkov A.*) хоч би і з тих міркувань, що в іншому вигляді ми даним результатом не володіємо.

З повагою,
Т. Пацаган