

А. Танирберген^{1*} , Н. Амангелди¹ , Ш. Реванкар² , Г. Ергалиулы¹ .

¹Евразийский национальный университет имени Л.Н.Гумилева, Астана, Казахстан

²Университет Пурдью, Индиана, США

*e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

РОЛЬ СПЛАВОВ FeCrAl В ОБЕСПЕЧЕНИИ РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ И БЕЗОПАСНОСТИ ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

С целью разработки оболочек ядерного топлива, обладающих стойкостью в аварийных условиях, сплавы FeCrAl рассматриваются как важный материал в области ядерной энергетики. Эти сплавы демонстрируют отличную устойчивость к коррозии и окислению при высоких температурах и в агрессивной среде. Кроме того, они обладают теплопроводностью, не уступающей современным циркониевым сплавам, используемым в настоящее время. Однако в процессе эксплуатации ядерного реактора под воздействием ионизирующего излучения механические свойства материала могут изменяться, приводя к радиационному упрочнению. В данной статье рассматриваются основные экспериментальные методы – наноиндентация и испытания на микротвёрдость – и теоретические подходы, такие как модель Никса-Гао, теория дисперсионного барьера упрочнения (DBH), теория функционала плотности (DFT), молекулярная динамика (MD) и дискретная дислокационная динамика (DDD), применяемые для изучения процесса упрочнения в сплавах FeCrAl после облучения. Также рассматривается влияние микроструктурных изменений, таких как образование дислокационных петель и α' -выделений. Представлены методы повышения радиационной стойкости с использованием оксидных дисперсных частиц (ODS). Теоретические модели позволяют установить взаимосвязь между атомными дефектами и макромеханическими свойствами. В качестве перспективных направлений будущих исследований выделены оптимизация состава сплавов, оценка их долгосрочной стабильности и внедрение технологий аддитивного производства.

Ключевые слова: оболочка топлива с повышенной устойчивостью к авариям (ATF), сплав FeCrAl, упрочнение при облучении, упрочнение оксидными дисперсными частицами (ODS), наноиндентация, DFT

A. Tangirbergen^{1,*}, N. Amangeldi¹, S. Revankar², G. Yergaliuly¹.

¹L.N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, Kazakhstan

²Purdue University, Indiana, USA

*e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

The role of FeCrAl alloys in ensuring radiation resistance and safety of nuclear reactors

In order to develop accident-tolerant fuel (ATF) cladding for nuclear reactors, FeCrAl alloys are considered a key material in the nuclear energy sector. These alloys demonstrate excellent resistance to corrosion and oxidation under high temperatures and aggressive environments. Moreover, they exhibit thermal conductivity comparable to the zirconium-based alloys currently in use. However, during nuclear reactor operation, exposure to ionizing radiation can alter the mechanical properties of these materials, leading to irradiation-induced hardening. This article provides an overview of the primary experimental techniques—such as nanoindentation and microhardness testing - and theoretical approaches including the Nix-Gao model, dispersion barrier hardening (DBH) theory, density functional theory (DFT), molecular dynamics (MD), and discrete dislocation dynamics (DDD), used to study the hardening process in FeCrAl alloys after irradiation. It also discusses the effects of microstructural changes, such as the formation of

dislocation loops and α' -precipitates. Strategies to enhance radiation resistance through the incorporation of oxide dispersion-strengthened (ODS) particles are also described. Theoretical models help bridge atomic-scale defects with macroscopic mechanical behavior. Future research directions include alloy composition optimization, long-term performance assessment, and the application of additive manufacturing technologies.

Keywords: accident-tolerant fuel (ATF), FeCrAl alloy, irradiation hardening, oxide dispersion strengthening (ODS), nanoindentation, DFT.

А. Тәңірберген^{1*}, Н. Амангелді¹, Ш. Реванкар², Ф. Ерғалиұлы¹.

¹Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия үлттых үниверситеті, Астана, Қазақстан

²Пурдью университеті, Индиана, США

*e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

FeCrAl қорытпаларының ядролық реакторлардың радиациялық төзімділігі мен қауіпсіздігін қамтамасыз етудегі рөлі

Апат жағдайында төзімділік танытатын отын қабықшаларын әзірлеу мақсатында FeCrAl қорытпалары ядролық реакторлар саласында маңызды материал ретінде қарастырылып отыр. Бұл қорытпалар жоғары температура мен агрессивті орта жағдайында коррозия мен тотығуға тамаша төзімділік көрсетеді. Сонымен қатар, қазірге таңда қолданылатын цирконийға негізделген қоспалардан кем емес жылу алмасу көрсеткіші бар. Алайда, ядролық реактор жұмыс барысында иондаушы сәулеленуге ұшыраған кезде, материалдардың механикалық қасиеттері өзгеріп, сәулелену арқылы қатайтылуы мүмкін. Бұл мақалада FeCrAl қорытпаларының сәулеленуден кейінгі қатайуы үдерісін зерттеуде қолданылатын негізгі эксперименттік әдістерге – наноиндентация және микро қатайу сынақтары – және теориялық тәсілдерге – Nix-Gao моделі, дисперсиялық кедергі теориясы (DBH), тығыздық функционалы теориясы (DFT), молекулалық динамика (MD), және дислокацияның дискреттік динамикасы (DDD) – шолу беріледі. Сонымен қатар, дислокациялық ілмектер мен α' -тұнбалар сияқты сәулеленуден туындайтын микроқұрылымдық өзгерістердің әсері қарастырылады. Радиациялық тұрақтылықты арттыру үшін оксидті дисперсті бөлшектерді (ODS) енгізу тәсілдері сипатталады. Теориялық модельдер атомдық деңгейдегі ақаулар мен макромеханикалық қасиеттер арасындағы байланысты түсінуге мүмкіндік береді. Болашақ зерттеулердің маңызды бағыттары ретінде қорытпа құрамын оңтайландыру, ұзақ мерзімді сенімділікті бағалау және аддитивті өндіріс технологияларын енгізу ұсынылады.

Түйін сөздер: апатқа төзімді отын (ATF), FeCrAl қорытпасы, сәулелену арқылы қатайтылу, оксидті дисперсті қатайтылу (ODS), наноиндентация, DFT.

Введение

В стремлении к устойчивой энергетике ядерная энергия выделяется как надёжный источник с низким уровнем выбросов парниковых газов [1–3]. Несмотря на её преимущества перед ископаемыми и возобновляемыми источниками энергии, вопросы безопасности остаются актуальными, особенно после крупных инцидентов, таких как авария на Фукусиме-Даичи [4–6]. Эти события подчеркнули необходимость повышения уровня безопасности ядерных реакторов, что стимулировало разработку материалов оболочек для топлива с повышенной устойчивостью к авариям (ATF). В числе предложенных решений – использование новых

материалов оболочек, таких как SiC, FeCrAl, высокоэнтропийные сплавы (HEA), нержавеющая сталь (SS), а также нанесение тонких покрытий из диоксида циркония на материал, способный противостоять коррозии и химическому разложению со временем [7–10]. Однако каждый из этих материалов имеет свои преимущества и ограничения для применения в ATF, связанные с их физическими и химическими характеристиками.

В таблице 1 приведены усреднённые значения ключевых параметров для ряда основных материалов, рассматриваемых для использования в качестве оболочек топлива.

Таблица 1 – Свойства оболочечных материалов для ядерного топлива

Название материала	Температура плавления °C	Предел текучести /прочность на растяжение при низкой температуре (МПа)	Теплопроводность W/m*K	Среднее сечение поглощения тепловых нейтронов (барн)
SiC/SiC	~2900 [11]	~250 [12,13]	~138 [14]	~ 0.086 [15]
SS-316	~1450 [16]	~300- 1110 [17,18]	~14 [19]	~3.1 [20]
Zircaloy-4	~1760 [21]	~386 [22]	~ 13-21.5 [23][24]	~ 0.20 [15]
Ti-6Al-4V	~1660 [25]	~980 [22,26]	~6.6 [27]	~7.3 [28]
FeCrAl-(APMT)	~1530 [29]	~500 [12]	~12 [30]	~1.95-2.43 [15,20]

В условиях стремления к устойчивому развитию энергетики ядерная энергия выделяется как надёжный и низкоуглеродный источник [1–3]. Однако безопасность этого источника продолжает оставаться в центре внимания, особенно после крупных инцидентов, таких как авария на Фукусиме-Даичи [4–6]. Эти события подчеркнули необходимость повышения безопасности ядерных реакторов, что привело к разработке оболочек топлива с повышенной устойчивостью к авариям (ATF). В этом контексте разрабатываются альтернативные материалы для оболочек топлива, такие как SiC, FeCrAl, высокоэнтропийные сплавы (HEA), нержавеющая сталь (SS) и покрытия на основе диоксида циркония с добавками, устойчивыми к коррозии [7–10]. Эти материалы обладают как преимуществами, так и ограничениями, которые определяются их физическими и химическими свойствами. В таблице 1 представлены основные параметры различных материалов, потенциально подходящих для оболочек топлива

SiC, например, отличается высокой температурой плавления (~2900°C), отличной теплопроводностью (~138 Вт/м·К) и низким поглощением нейтронов (~0,086 барн), что делает его идеальным для высокотемпературных и нейтронно-чувствительных приложений, хотя его хрупкость и умеренная прочность (~250 МПа) являются недостатками. Нержавеющая сталь SS-316 обладает высокой прочностью (300–1110 МПа) и стойкостью к коррозии, но её ограничивают высокое поглощение нейтронов (~3,1 барн) и умеренная теплопроводность (~14 Вт/м·К). Zircaloy-4 имеет низкое поглощение нейтронов (~0,20 барн) и умеренную теплопроводность (13–21,5 Вт/м·К), что делает его подходящим для ядерных применений, хотя его коррозионная стойкость и прочность на растяжение (~386 МПа) остаются вопросом.

FeCrAl-(APMT) сочетает хорошие свойства для окисления и теплопроводности (~12 Вт/м·К), но его поглощение нейтронов (~1,95–2,43 барн) и прочность (~500 МПа) могут быть недостаточными.

НЕА, представляющие собой сплавы нескольких элементов в эквимолярных пропорциях, демонстрируют высокую стойкость к износу и коррозии при высоких температурах, делая их перспективными для ATF. Например, сплав AlCrCuFeMo обладает хорошей коррозионной стойкостью, но его низкая пластичность усложняет производство тонкостенных оболочек для ядерного топлива.

FeCrAl, один из первых материалов, предложенных для оболочек топлива, демонстрирует отличную коррозионную стойкость в водных и жидкокометаллических средах, что делает его подходящим для реакторов IV поколения. В сплавах с содержанием 10–15% Cr и 3–5% Al образуется оксидный слой с кристаллами, богатыми железом. При добавлении небольших количеств Si улучшается коррозионная стойкость, а оптимальное содержание Al и Cr способствует образованию защитного оксидного слоя. Однако FeCrAl требует более обогащённого топлива из-за его нейтронного поглощения, что увеличивает стоимость топливного цикла.

Настоящая статья восполняет пробел в обобщении экспериментальных и теоретических данных по упрочнению сплавов FeCrAl под действием облучения. Рассматривается влияние состава и структурные изменения до и после облучения ионами и нейtronами. Статья включает экспериментальные исследования (nanoинденсация, микротвердость) и теоретические подходы (модели Никса Гао для эффекта размера, упрочнение дисперсионными барьерами, DFT, MD и DDD).

Теоретические исследования упрочнения при облучении в сплавах FeCrAl

Теоретические модели, такие как модель упрочнения за счет дислокационного барьера (DBH) [31], модель Ника-Гао [33], молекулярная динамика (MD) [34], теория функционала плотности (DFT) [35,36] и термодинамические расчеты [32,36], играют ключевую роль в изучении и понимании упрочнения, вызванного облучением. Эти теоретические подходы помогают понять основные аспекты дефектов, вызванных облучением, таких как вакансии, интерстиции, дислокационные линии, петли, пустоты и пузырьки, которые влияют на твердость материала. Совместно с экспериментальными подходами, эти модели позволяют предсказывать поведение материала под воздействием радиации, что способствует разработке радиационно-стойких материалов для ядерных реакторов, космических приложений и других условий, где радиационные повреждения имеют важное значение. Соединяя атомарные явления и макроскопические механические свойства, эти модели незаменимы для продвижения материаловедения в области радиационных материалов.

Модель Ника-Гао

Большинство экспериментальных испытаний твердости проводятся с использованием наноиндентационных или микротвердостных тестов, где размер отпечатка влияет на общую твердость материала. В ходе тестов при уменьшении глубины вдавливания твердость материала возрастает, что может приводить к недостоверным результатам [37-40].

Эффект размера отпечатка (ISE) относится к явлению, когда механические свойства материала, такие как твердость, жесткость или прочность, зависят от размера отпечатка или глубины проникновения. Как правило, ISE характеризуется увеличением твердости или прочности по мере уменьшения глубины проникновения, особенно заметным на глубинах менее 1 мкм, как показано Фарром и др. [41]. Этот эффект часто наблюдается в микротвердостных и наноиндентационных тестах и объясняется различными факторами, такими как поверхностные эффекты, трение между индентором и образцом и упрочнение за счет градиента деформации [42].

Модель Ника-Гао в первую очередь используется для описания упрочнения, зависящего от размера, в частности для отношения Холла-Петча, которое связывает предел текучести

материала с размером зерна. Эта модель была расширена для учета других эффектов размера, таких как влияние толщины пленки в тонкопленочных материалах и эффект размера отпечатка. Модель Ника-Гао связывает увеличение предела текучести или твердости с плотностью геометрически необходимых дислокаций (GND), которая увеличивается по мере уменьшения характерного размера (размера зерна, толщины пленки, размера отпечатка). В области радиационно-стойких материалов, где радиация вызывает значительные микроструктурные изменения, такие как изменение зерна или образование зон с высокой концентрацией дефектов, дефекты, вызванные облучением, могут увеличивать плотность GND, особенно в областях с высокими градиентами деформации, что способствует упрочнению. Модель Ника-Гао помогает объяснить, как эти изменения приводят к упрочнению, зависящему от размера.

Модель Ника-Гао была применена для оценки твердости материалов FeCrAl. Эта модель оказалась полезной для понимания механического поведения материалов, включая сплавы FeCrAl, предоставляя информацию о зависимости между твердостью и глубиной вдавливания в этих материалах [43]. Способность модели Ника-Гао учитывать эффект размера отпечатка имеет важное значение при изучении механических свойств сплавов FeCrAl и других материалов на микро- и наноуровне. Модель предполагает линейную зависимость между квадратом твердости и обратной величиной глубины вдавливания, как это описано в уравнении (1).

$$\frac{H}{H_0} = \sqrt{1 + \frac{h^*}{h}}, \quad (1)$$

где H – твердость, h – глубина вдавливания, H_0 – твердость при бесконечно большой глубине, что фактически соответствует объемной твердости материала, h^* – характерная длина, зависящая как от индентора, так и от конкретного материала.

Как показано на рисунке 1, кривые для необлученных образцов демонстрируют устойчивую линейную зависимость от обратной глубины вдавливания по всему диапазону. В отличие от этого, кривые для облученных образцов отклоняются от этой линейной зависимости на малых глубинах ($h > 0,005 \text{ нм}^{-1}$, что соответствует глубине вдавливания менее 200 нм). Тест на нанотвердость особенно чувствителен к условиям в этой малой области. Поэтому данные по нанотвердости от 0 до $0,005 \text{ нм}^{-1}$ для облученных образцов были использованы для аппроксимации с использованием модели Ника-Гао [43].

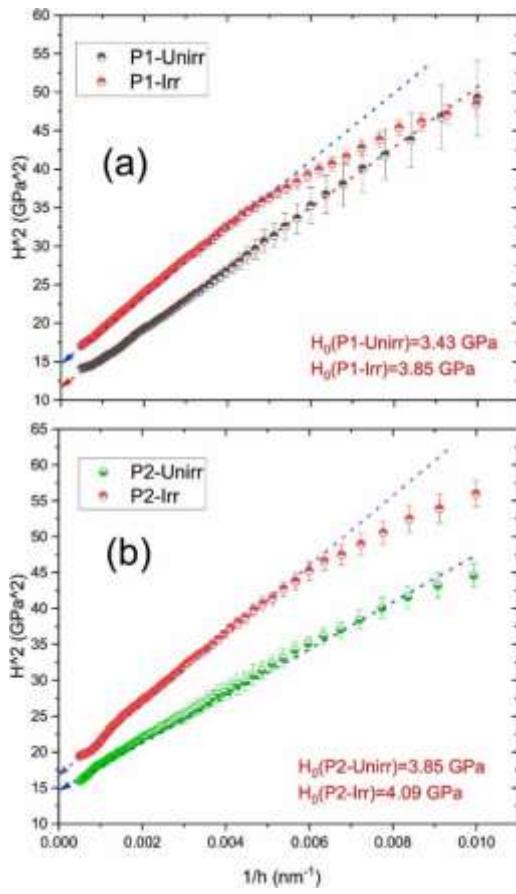


Рисунок 1 – Графики зависимости H^2 от $\frac{1}{h}$ для (а) Р1 и (б) Р2 в необлученных и облученных состояниях. Пунктирные точки представляют значения, предсказанные моделью Ника-Гао [43]

Упрочнение за счет дисперсионного барьера

Теоретически значения упрочнения при облучении можно количественно оценить с помощью модели упрочнения за счет дисперсионного барьера (DBH). Эта модель качественно описывает зависимость между облучением, вызванным дефектом, и механическими свойствами материала. Считается, что упрочнение при облучении приводит к линейному увеличению предела текучести. Используя упрощенную модель DBH и статистические данные о дислокационных петлях из ТЕМ, можно теоретически рассчитать степень упрочнения [38]. Изменение предела текучести, σ_{tot} , может быть выражено следующим образом:

$$\sigma_{tot} = \sqrt{\sum_i (\Delta\sigma_{SR,i}^2)} + \Delta\sigma_{LR}, \quad (2)$$

$$\Delta\sigma_{SR} = \Delta\sigma_{ppt} + \Delta\sigma_{void} + \Delta\sigma_{loops}, \quad (3)$$

$$\Delta\sigma_{LR} = \Delta\sigma_{dislocations}, \quad (4)$$

где $\Delta\sigma_{SR}$ связано с краткодействующими препятствиями, такими как преципитаты $\Delta\sigma_{ppt}$, пустоты $\Delta\sigma_{void}$ и дислокационные петли $\Delta\sigma_{loops}$, в то время как $\Delta\sigma_{LR}$ обусловлено дальнодействующими препятствиями, такими как дислокационные линии и сети. В большинстве случаев основными дефектами после облучения являются дислокационные петли. Пустоты и преципитаты Cr редко наблюдаются в материалах FeCrAl. Следовательно, увеличение прочности, вызванное дислокационными петлями после облучения, описывается следующим образом [44]:

$$\Delta\sigma = M\alpha_l\mu b\sqrt{Nd}, \quad (5)$$

где $\Delta\sigma$ представляет собой изменение предела текучести по сравнению с необлученным значением; M – фактор Тейлора (3,06 для большинства материалов с ОЦК решеткой); α_l – прочность барьера (82 ГПа); b – вектор Бюргерса движущейся дислокации, примерно 0,248 нм; N и d – обозначают плотность и средний размер дефекта, соответственно. Для дефектов типа петель α_l в железе составляет 0,38, а для учета дальнодействующих дефектов, таких как дислокации, α_{dis} будет равна 0,3. Значения прочности барьера получены экспериментально. Следовательно, σ_{tot} будет следующим:

$$\sigma_{tot} = M\alpha_l\mu b\sqrt{Nd} + M\alpha_{dis}\mu b\sqrt{\rho_d} = M\mu b(\alpha_l\sqrt{Nd} + \alpha_{dis}\sqrt{\rho_d}). \quad (6)$$

Соответственно, модель DBH использовалась для изучения упрочнения при облучении оболочек FeCrAl ATF. Изменения в твердости по DBH следуют тенденции, аналогичной экспериментальной твердости и эквивалентной объемной твердости, показанной на рис. 2 (а) и (б). Однако по мере увеличения дозы повреждений значение упрочнения оказывается значительно ниже, чем экспериментальные данные, что приводит к снижению кривой твердости. Определение значения α в модели DBH с высокой точностью затруднительно. Одним из объяснений является то, что в статистические результаты включены только четко определенные дислокационные петли и дислокационные линии; очень маленькие дислокационные петли были неразличимы, и черные точки, вызванные облучением, не учитывались. Кроме того, α' -преципитаты Cr не

наблюдались на изображениях TEM, вероятно, из-за их слишком малых размеров для методов электронной микроскопии. Подтверждение образования кластеров, обогащенных Cr, в результате ионного облучения требует более точных испытаний. Подобные тенденции наблюдались в других исследованиях [44,45].

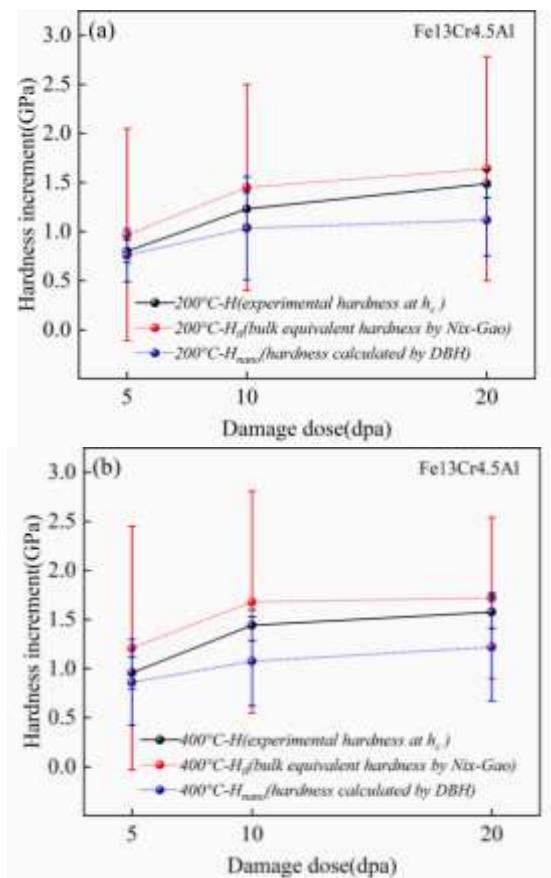


Рисунок 2 – (а, б) Значения экспериментальных изменений твердости по сравнению с изменениями твердости, рассчитанными с использованием модели Никса-Гао и модели DBH [38].

Теоретические симуляции: подходы теории функционала плотности (DFT), молекулярной динамики (MD) и дискретной динамики дислокаций (DDD)

Несмотря на приближения, используемые в теоретических вычислительных симуляциях, они точно описывают физические, химические и механические свойства материалов [46-48]. Теория функционала плотности (DFT) — это квантовомеханический метод, используемый для исследования электронной структуры многотельной системы, особенно атомов, молекул и твердых тел. Этот метод основан на концепции, что энергия основного состояния

системы может быть определена по плотности электронов системы. Основные принципы DFT основаны на теоремах Хоэнберга-Кона [49,50]

Первая теорема Хоэнберга-Кона утверждает, что свойства основного состояния системы многих электронов однозначно определяются плотностью электронов ρ . Это означает, что все наблюдаемые величины основного состояния являются функционалами плотности электронов. Вторая теорема Хоэнберга-Кона вводит понятие функционала энергии и устанавливает, что плотность электронов в основном состоянии минимизирует этот функционал [51]. Идея основывается на вариационном принципе: энергия основного состояния E_0 получается минимизацией функционала энергии $E[\rho]$:

$$E_0 = \min_{\rho} \{E[\rho]\}, \quad (7)$$

$$\frac{\delta E[\rho]}{\delta \rho}|_{\rho=\rho_0} = 0. \quad (8)$$

Для практической реализации DFT используется уравнение Кона-Шэма, которое описывает плотность невзаимодействующих электронов в заданном внешнем потенциале [52].

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + U_{eff}(r) \right) \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r), \quad (9)$$

где $U_{eff}(r)$ — эффективный потенциал, $\psi_i(r)$ — волновая функция невзаимодействующих электронов, а ϵ_i — собственные значения системы.

$$U_{eff}(r) = U_{ext}(r) + \int \frac{\rho(r')}{|r - r'|} dr' + U_{xc}(r), \quad (10)$$

$$U_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}(r)}{\delta \rho(r)}. \quad (11)$$

Уравнение является самосогласованным: начальное предположение для плотности электронов уточняется итеративным решением уравнений Кона-Шэма и обновлением плотности электронов до достижения сходимости. Сложной частью уравнения является последняя часть, отвечающая за обменно-корреляционные взаимодействия, которая включает квантовое взаимодействие частиц, такие как взаимодействия Паули. Существует несколько видов потенциалов, отличающихся точностью и сложностью. Наиболее популярным является обобщенное градиентное приближение (GGA) Пердью-Берк-Эрнзергофа (PBE) [53]. В последнее время наблюдается значительный интерес к атомис-

тическим симуляциям оболочек ATF с использованием DFT. В частности, DFT эффективно иллюстрирует поведение материала при коррозии, напряжение и деформацию после добавления небольших количеств легирующих элементов, а также позволяет рассчитывать термические и оптические свойства материала. Например, Ли и др. (2021) исследовали влияние адсорбции водорода на поверхность FeCrAl в различных положениях. Результаты показывают, что адсорбция водорода оказывает значительное влияние на различные элементы. В частности, алюминий (Al) имеет наименьшее взаимодействие с водородом. Однако, когда водород находится в мостиковом положении между адсорбцией Al и Cr, энергия возрастает [54]. Аналогичные исследования были проведены для адсорбции воды и кислорода [55,56]. Эти исследования подчеркивают важность расчетов DFT для задач, связанных с коррозией, окислением и поглощением водорода. Тем не менее, исследования механических свойств и влияния элементарных дефектов на физико-химические свойства FeCrAl с использованием DFT пока не проводились. Кроме того, влияние химического шума на коррозию материала во время нормальной работы реактора, а также атомистические симуляции механических эффектов добавления ODS в материалы являются актуальными темами для обсуждения.

Помимо исследований DFT, исследования с использованием дискретной динамики дислокаций (DDD) и MD-симуляций для материалов FeCrAl предоставили ценные сведения о их механическом поведении в различных условиях. Молекулярная динамика (MD) – это метод компьютерного моделирования, используемый для изучения физических движений атомов и молекул. Основной принцип MD основан на уравнениях движения Ньютона. Дискретная динамика дислокаций (DDD) – это вычислительный метод, используемый для моделирования поведения дислокаций в кристаллических материалах. В отличие от MD, который моделирует движение атомов, DDD фокусируется на коллективном поведении дислокаций – линейных дефектов внутри кристаллической структуры, которые играют ключевую роль в пластической деформации. Дислокации представляются в виде дискретных линий внутри кристаллической решетки, где каждая линия описывается вектором Бюргерса b , который определяет величину и направление искажения решетки. Движение дислокаций определяется силой Пича-Келера:

$$F_{PK} = (\sigma * \mathbf{b}) * l, \quad (12)$$

где σ – тензор напряжений, b – вектор Бюргерса, l – направление линии дислокации. Учитывая, что упрочнение при облучении в материалах, особенно в ядерных приложениях, происходит из-за взаимодействия дислокаций с дефектами, вызванными радиацией, такими как пустоты, интерстиции и кластеры вакансий, методы MD и DDD предоставляют мощный инструмент для изучения этих взаимодействий и их влияния на свойства материала. Например, в недавнем исследовании пластичности облученных FeCrAl наностолбиков с использованием симуляций DDD подчеркивалось влияние дефектов, вызванных облучением, на поведение напряжение-деформация, отмечая необычное сочетание эффектов упрочнения, вызванное неоднородностью состава и радиационными петлями [57]. В другом исследовании наноиндентации сплавов FeNiCr, проведенном Домингес-Гутьерресом и др. (2022), было обнаружено, что хром снижает подвижность призматических дислокационных петель, тем самым увеличивая твердость этих сплавов [58]. Кроме того, MD-симуляции сплавов FeCrAl показали, что более высокое содержание хрома и алюминия приводит к увеличению скорости ползучести, при этом напряжение влияет на переход от ползучести по Коблу к дислокационной ползучести [59]. Включение графовых нейронных сетей для ускорения симуляций DDD обещает улучшить эффективность этих вычислительных методов [60]. Наконец, многоуровневое исследование, проведенное Цю и Чжу (2023) на высокоэнтропийных сплавах Fe2Ni2CrAl, подчеркнуло их отличные механические характеристики при разных температурах благодаря взаимодействиям дислокаций и двойникованию [61].

Будущие направления и заключительные замечания

На основе обзора литературы можно выделить несколько ключевых направлений для будущих исследований FeCrAl-сплавов как оболочек топливных элементов с повышенной толерантностью к аварийным условиям (ATF), особенно в контексте радиационного упрочнения.

- **Необходимость изучения воздействия высоких доз и длительного облучения нейтронами и ионами.** Для более точного воспроизведения условий в реакторах при аварийных ситуациях важно проведение исследований в условиях высоких доз и длительного облучения.

- Исследования с использованием нейтронного и делящихся продуктов (ксенон, криптон).

Дополнительные эксперименты с нейтронным облучением, а также облучением продуктами деления, такими как ксенон (Xe) и криптон (Kr), позволяют более точно моделировать реальные условия в реакторах. Это даст ценные данные о стабильности и целостности сплавов FeCrAl под воздействием радиации.

- Оптимизация состава сплавов FeCrAl.

Изменение содержания легирующих элементов, таких как хром и алюминий, может существенно повлиять на их устойчивость к радиационному упрочнению и хрупкости. Систематические исследования, связывающие состав сплавов с их реакцией на облучение, являются важным шагом в создании более устойчивых материалов. Также требуется углубление сотрудничества между экспериментаторами и теоретиками: экспериментальные данные необходимы для проверки и улучшения моделей, а теоретические исследования могут направлять разработку новых экспериментов. Для такого сотрудничества требуется создание обширных экспериментальных баз данных, включая детальную микроструктурную характеристику материалов до и после облучения. Рекомендуется проведение кросс-валидации с использованием различных источников облучения, таких как нейтроны, ионы и продукты деления, для получения комплексного представления о влиянии радиации на FeCrAl и их роли в повышении безопасности реакторов.

- Современные методы производства FeCrAl.

Современные технологии, такие как аддитивное производство, предоставляют возможность создания сложных форм и деталей из порошков FeCrAl, что делает процесс более гибким и экономичным. Также перспективной методикой является продвинутая порошковая металлургия, включая быстрые методы затвердевания и механическое легирование, которые позволяют улучшить механические свойства, такие как прочность и устойчивость к деформации при высоких температурах.

- Экономическая оценка производства FeCrAl.

Необходим анализ экономической

целесообразности производства FeCrAl и его использования с различными ядерными топливами. Также важно провести сравнительный анализ с другими материалами ATF-оболочек, такими как композиты SiC/SiC, высокоэнтропийные сплавы (HEA) и традиционные материалы, например, Zircaloy-4.

Заключение

В исследованиях и разработке систем сплавов FeCrAl для оболочек топлива с повышенной устойчивостью к авариям в ядерных реакторах получены обнадеживающие результаты, особенно с учетом упрочнения при облучении. Сплавы FeCrAl являются идеальными кандидатами для повышения производительности и безопасности легководных реакторов благодаря их исключительной стойкости к коррозии и высокотемпературному окислению.

Микроструктурные изменения, вызванные облучением, такие как образование дислокационных петель и преципитатов α' , обогащенных Cr, значительно способствуют упрочнению этих сплавов. При облучении использование передовых методов, таких как добавление компонентов ODS, дополнительно улучшает их механические свойства. Тем не менее, остаются многочисленные препятствия, включая необходимость более углубленных исследований долгосрочных эффектов радиации и оптимизации состава сплавов. Будущие исследования должны быть сосредоточены на детальных теоретических и экспериментальных исследованиях, чтобы полностью понять взаимодействия между дефектами и легирующими элементами, что в конечном итоге приведет к разработке более совершенных материалов для оболочек топлива с повышенной устойчивостью к авариям.

Финансирование

Данное исследование было профинансировано Министерством науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP23489124).

Литература

- 1 W.S. Ebhota, T.-C. Jen, *Int. J. Precis. Eng. Manuf. Technol.* **7**, 97–117 (2020). <https://doi.org/10.1007/s40684-019-00101-9>
- 2 R.E.H. Sims, *Sol. Energy* **76**, 9–17 (2004). [https://doi.org/10.1016/S0038-092X\(03\)00101-4](https://doi.org/10.1016/S0038-092X(03)00101-4)
- 3 H.S. Hirsh, Y. Li, et al., *Adv. Energy Mater.* **10**, 202001274 (2020). <https://doi.org/10.1002/aenm.202001274>
- 4 D. Takata, *Agric. Implic. Fukushima Nucl. Accid.* 143–162 (2013). https://doi.org/10.1007/978-4-431-54328-2_14

- 5 P. Robbins, *Encyclopedia of Environ. Soc.* (SAGE Publications, Inc., 2007).
- <https://doi.org/10.4135/9781412953924>
- 6 Y. Morino, T. Ohara, et al., *Geophys. Res. Lett.* **38** (2011). <https://doi.org/10.1029/2011GL048689>
- 7 P. Chen, B. Qiu, et al., *Nucl. Eng. Des.* **371**, 110889 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2020.110889>
- 8 R.T. Sweet, G. Pastore, et al., *Nucl. Eng. Des.* **414**, 112556 (2023).
- <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2023.112556>
- 9 B. Cheng, Y.-J. Kim, et al., *Nucl. Eng. Technol.* **48**, 16–25 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.net.2015.12.003>
- 10 H.V. Pham, M. Kurata, et al., *Thermo.* **1**, 151–167 (2021). <https://doi.org/10.3390/thermo1020011>
- 11 P.S. Sokolov, V.A. Mukhanov, et al., *J. Superhard Mater.* **34**, 339–341 (2012).
- <https://doi.org/10.3103/S1063457612050097>
- 12 M.N. Gussev, K.G. Field, et al., *Mater. Des.* **129**, 227–238 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.05.009>
- 13 K. Hironaka, T. Nozawa, et al., *J. Nucl. Mater.* **307–311**, 1093–1097 (2002). [https://doi.org/10.1016/S0022-3115\(02\)01049-8](https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01049-8)
- 14 W. Feng, L. Zhang, et al., *Fusion Eng. Des.* **90**, 110–118 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2014.12.005>
- 15 N.M. George, K. Terrani, et al., *Ann. Nucl. Energy* **75**, 703–712 (2015).
- <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.09.005>
- 16 M. Hussain, V. Mandal, et al., *Opt. Laser Technol.* **97**, 46–59 (2017).
- <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2017.06.006>
- 17 A. Ghosh, H.-G. Brokmeier, et al., *Int. J. Fatigue* **125**, 35–46 (2019).
- <https://doi.org/10.1016/j.ijfatigue.2019.03.035>
- 18 A. Bansal, A.K. Sharma, et al., *Proc. Inst. Mech. Eng. Part B J. Eng. Manuf.* **230**, 439–448 (2016).
- <https://doi.org/10.1177/0954405414558694>
- 19 J.C. Simmons, X. Chen, et al., *Addit. Manuf.* **32**, 100996 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.addma.2019.100996>
- 20 A. Veverková, D. Preisler, et al., *Materials (Basel)* **14**, 418 (2021). <https://doi.org/10.3390/ma14020418>
- 21 P. Hofmann, D. Kerwin-Peck, *J. Nucl. Mater.* **124**, 80–105 (1984). [https://doi.org/10.1016/0022-3115\(84\)90013-8](https://doi.org/10.1016/0022-3115(84)90013-8)
- 22 F. Han, G. Li, et al., *Mater. Chem. Phys.* **242**, 122539 (2020).
- <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.122539>
- 23 H. Wang, J. Thomas, et al., *J. Nucl. Mater.* **539**, 152338 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2020.152338>
- 24 I.R. Magalhães, L.V.G. Chaves, et al., *Nucl. Eng. Des.* **422**, 113109 (2024).
- <https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2024.113109>
- 25 O.O. Bilous, L.V. Artyukh, et al., *Mater. Sci. Eng. A* **402**, 76–83 (2005).
- <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.05.011>
- 26 C.J. Todaro, M.A. Easton, et al., *Nat. Commun.* **11**, 142 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13874-z>
- 27 L. Bolzoni, E.M. Ruiz-Navas, et al., *Mater. Des.* **52**, 888–895 (2013).
- <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.06.036>
- 28 D.J.M. King, A.J. Knowles, et al., *J. Nucl. Mater.* **559**, 153431 (2022).
- <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153431>
- 29 Y. Chen, Y. Li, et al., *Prog. Nucl. Energy* **129**, 103502 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2020.103502>
- 30 K.A. Gamble, T. Barani, et al., *J. Nucl. Mater.* **491**, 55–66 (2017). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2017.04.039>
- 31 F. Li, Y. Long, et al., *Metals (Basel)* **12**, 1645 (2022). <https://doi.org/10.3390/met12101645>
- 32 X. Wu, P. Sabharwall, et al., Neutronics and Fuel Performance Evaluation of Accident Tolerant Fuel under Normal Operation Conditions, Report (Idaho Falls, ID, United States, 2014). <https://doi.org/10.2172/1166052>
- 33 X. Han, C. Zhang, et al., *Nucl. Mater. Energy* **37**, 101556 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.nme.2023.101556>
- 34 Y. Pachaury, G. Warren, et al., *Int. J. Plast.* **167**, 103676 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2023.103676>
- 35 X. Li, Y. Ma, et al., *Front. Energy Res.* **9**, 713493 (2021). <https://doi.org/10.3389/fenrg.2021.713493>
- 36 Y. Yuan, K. Xu, et al., *Surf. Coatings Technol.* **446**, 128774 (2022).
- <https://doi.org/10.1016/j.surfcot.2022.128774>
- 37 P. Song, K. Yabuuchi, et al., *Acta Mater.* **234**, 117991 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.117991>
- 38 Y. Luo, J. Wang, et al., *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **547**, 165215 (2024).
- <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2023.165215>
- 39 R. Kögler, W. Anwand, et al., *J. Nucl. Mater.* **427**, 133–139 (2012).
- <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.04.029>
- 40 R. Wang, H. Wang, et al., *J. Nucl. Mater.* **557**, 153243 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2021.153243>
- 41 G.M. Pharr, E.G. Herbert, et al., *Annu. Rev. Mater. Res.* **40**, 271–292 (2010). <https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070909-104456>
- 42 J. Sort, N. Van Steenberge, et al., *Open Mater. Sci. J.* **2**, 1–5 (2008).
- <https://doi.org/10.2174/1874088X00802010001>
- 43 X. Han, C. Zhang, et al., *Int. J. Press. Vessel. Pip.* **194**, 10452 2 (2021).
- <https://doi.org/10.1016/j.ijpvp.2021.104522>
- 44 X. Zhou, H. Wang, et al., *J. Mater. Sci. Technol.* **95**, 181–192 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.04.020>
- 45 X. Han, C. Zhang, et al., *Mater. Sci. Eng. A* **841**, 143050 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.msea.2022.143050>

- 46 M. Islam, M.A. Rob Sheikh, *Phys. B Condens. Matter* **668**, 415244 (2023).
<https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415244>
- 47 E. Kiely, R. Zwane, et al., *CrystEngComm* **23**, 5697–5710 (2021). <https://doi.org/10.1039/D1CE00453K>
- 48 M.I. Khan, H. Arshad, et al., *J. Alloys Compd.* **819**, 152964 (2020).
<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.152964>
- 49 N. Salami, A. Shokri, [Book Chapter – Electronic Structure of Solids and Molecules] 325–373 (2021).
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818806-4.00002-4>
- 50 J. Hafner, *J. Comput. Chem.* **29**, 2044–2078 (2008). <https://doi.org/10.1002/jcc.21057>
- 51 P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864–B871 (1964). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- 52 W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133–A1138 (1965). <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- 53 J.P. Perdew, K. Burke, et al., *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865–3868 (1996).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- 54 X. Li, Y. Ma, et al., *Front. Energy Res.* **9**, 713493 (2021). <https://doi.org/10.3389/fenrg.2021.713493>
- 55 J. Wei, S. Li, et al., *Appl. Surf. Sci.* **465**, 259–266 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.09.202>
- 56 J. Wang, K. Yan, et al., *Appl. Surf. Sci.* **644**, 158782 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.158782>
- 57 Y. Pachaury, G. Warren, et al., *Int. J. Plast.* **167**, 103676 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2023.103676>
- 58 F.J. Dominguez-Gutierrez, A. Ustrzycka, et al., *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **30**, 085010 (2022).
<https://doi.org/10.1088/1361-651X/ac9d54>
- 59 A.A. Al Anazi, G.R.L. Al-Awsi, et al., *Mech. Adv. Mater. Struct.*.. 1-10 (2023).
<https://doi.org/10.1080/15376494.2023.2179706>
- 60 N. Bertin, F. Zhou, *J. Comput. Phys.* **487**, 112180 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2023.112180>
- 61 L. Qiao, J. Zhu, *Mater. Today Commun.* **34**, 105296 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.105296>

История статьи:

Поступила – 25.11.2025

Поступила в доработанном виде – 09.05.2025

Принята – 20.05.2025

Article history:

Received 12 November 2025

Received in revised form 9 May 2025

Accepted 20 May 2025

Информация об авторах:

1. Абылай Тәңірберген (автор корреспондент) – докторант 2-го года обучения Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева. Астана, Казахстан. e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz
2. Нурлан Амангельди – доцент Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева. Исполняющий обязанности заведующего лабораторией ядерной физики. Астана, Казахстан. e-mail: nurlan.amangeldi1979@gmail.com

3. Шрипад Реванкар – профессор ядерной инженерии и директор исследовательской лаборатории многофазных и топливных элементов в Университете Пердью. Индиана, США. e-mail: shripad@purdue.edu

4. Гани Ергалиұлы – старший преподаватель Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева и старший научный сотрудник Национальной лаборатории Астаны. Астана, Казахстан. e-mail: gani.yergaliuly@gmail.com

Information about authors:

1. Abylay Tangirbergen (corresponding author) – 2nd year PhD student at L.N. Gumilyov Eurasian National University. Astana, Kazakhstan. e-mail: abylay.tangirbergen@nu.edu.kz

2. Nurlan Amangeldi – Ass. Prof., L.N. Gumilyov Eurasian National University. Acting Head of the Nuclear Physics Laboratory. Astana, Kazakhstan. e-mail: nurlan.amangeldi1979@gmail.com

3. Shripad Revankar – Dr., Professor of Nuclear Engineering at Purdue University, Head of the Research Laboratory of Multiphase and Fuel Cells, Indiana, USA. e-mail: shripad@purdue.edu

4. Gani Yergaliuly – Senior Lecturer at the L.N. Gumilyov Eurasian National University and Senior Researcher at the Astana National Laboratory, Astana, Kazakhstan. e-mail: gani.yergaliuly@gmail.com