

офіційного опонента на дисертацію Р.В. Скороход «Радіаційно-індукована сегрегація в концентрованих металевих сплавах Fe-Cr та Fe-Cr-Ni», представлену на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 – Фізика та астрономія.

Актуальність теми. Феритні/мартенситні сталі з високим вмістом Cr є основними кандидатами на роль конструкційних матеріалів для майбутніх атомних електростанцій, завдяки їх толерантності до набухання та задовільним механічним властивостям. Ці сталі з об'ємно-центрованою кубічною кристалографічною структурою містять 7–14 мас.% Cr, близько 1–2 мас.% інших легуючих елементів (Mo, Nb, V, W, Ta, Mn . в залежності від виду сталі) і близько 0,1 мас.% вуглецю. Бінарні сплави Fe–Cr можна використовувати як модельні матеріали для вивчення поведінки цих сталей.

Опромінення, як правило, призводить до деградації механічних властивостей матеріалів за допомогою створення радіаційних дефектів та частинок вторинної фази, що заважають руху дислокацій у металах. Дослідження впливу радіації на мікроструктуру та властивості матеріалу шляхом розробки довгострокових прогнозів має велике значення з погляду безпечної експлуатації ядерних реакторів IV покоління.

З цього погляду тема дисертації Р.В. Скороход «Радіаційно-індукована сегрегація в концентрованих металевих сплавах Fe-Cr та Fe-Cr-Ni», у якій здійснюється спроба теоретичного пояснення експериментальних даних щодо модельних сплавів Fe-Cr та Fe-Cr-Ni, безумовно актуальна.. Зокрема, у роботі методом комп'ютерного моделювання проведено дослідження радіаційно-індукованої сегрегації (PIC) сплаву Fe-9Cr, що має найкращі механічні властивості у лінійці сплавів Fe-Cr. При цьому значну увагу приділена впливу дислокаційної підсистеми, що є домінуючим стоком точкових дефектів у цьому сплаві. Також актуальним є порівняння результатів моделювання PIC в сплавах Fe-xCr-8Ni та Fe-20Cr-yNi, де $x=19; 19,5; 20; 20,5; 21$ і $y=7; 7,5; 8; 8,5; 9$, з експериментальними дослідженнями цих матеріалів іншими авторами. Для розвитку фізичної кінетики слід визнати важливим теоретичний розгляд у

дисертації Р.В. Скороход пізньої стадії рівноважної сегрегації домішки на міжзеренній межі по механізму визрівання Оствальда у випадку утворення сферичних виділень нової фази.

Наукова новизна дисертаційної роботи полягає наступному:

1. Вперше визначено визначальні кількісні характеристики радіаційно-індукованої сегрегації для сплавів Fe-9Cr та Fe-20Cr-8N за різних швидкостей продукування точкових дефектів, доз опромінення і температур та проаналізовано залежності обраних кількісних характеристик від названих умов опромінення.
2. Вперше проведено дослідження впливу дислокаційної підсистеми на ефекти радіаційно-індукованої сегрегації для сплавів Fe-9Cr та Fe-20Cr-8Ni.
3. Вперше показано, що при радіаційно індукованій сегрегації вплив збільшення швидкості продукування точкових дефектів на профілі концентрації компонентів сплаву з достатньо значним.
4. Вперше теоретично проаналізовано для сплаву Fe-9Cr кінетику пізньої стадії сегрегації домішки (визрівання Оствальда) на міжзеренній межі у випадку утворення сферичних виділень нової фази, ріст яких лімітується поверхневою кінетикою вбудовування атомів домішки в виділення.

Практична значення роботи полягає в тому, що

1. Отримані в дисертації результати можуть бути використані при моделюванні й прогнозуванні змін локального складу концентрованих сплавів Fe-Cr та Fe-Cr-Ni за умов опромінення, а також слугувати основою для дослідження радіаційно-індукованої сегрегації в сплавах з більшим числом компонент.
2. Результати дисертації можуть бути використані при дослідженні кінетики росту сферичних виділень нової фази, які розташовані на міжзеренній межі. Зокрема, у роботі докладно досліджено залежності визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації від швидкості продукування точкових дефектів, дози опромінення, густини дислокацій в

дислокаційній підсистемі сплаву, температури, товщини зразку, тощо. Показано, що дислокаційна підсистема, яка є ефективним стоком точкових дефектів, подавляє ефекти радіаційно-індукованої сегрегації.

3. Отримані в дисертації результати можуть бути використані для вибору граничних умов на поверхні зразка на результати моделювання радіаційно-індукованої сегрегації.

Результати дисертаційної роботи можуть бути використані в Інституті прикладної фізики НАН України, Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України, Інституті ядерних досліджень НАН України, Інституті електрофізики і радіаційних технологій НАН України, Державному підприємстві «Національна атомна енергогенеруюча компанія «Енергоатом», на фізико-технічному факультеті Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна та в інших наукових центрах.

Зв'язок дисертаційних досліджень з науковими програмами. Робота проводилася у відділі № 30 «Ядерно-фізичних досліджень» та в лабораторії №41 «Інтегрованого моделювання механічних властивостей конструкційних матеріалів під дією опромінення» Інституту прикладної фізики НАН України і є частиною досліджень, які проводилися за темами: «Дослідження радіаційно-індукованої сегрегації в конструкційних матеріалах ядерної енергетики при їх опроміненні іонами» (державний реєстраційний номер 0118U002291, термін виконання 2018-2019 рр.), «Дослідження радіаційних дефектів та радіаційно-індукованої сегрегації домішок у сплавах цирконію під дією опромінення іонами з використанням методів ядерного мікроаналізу» (державний реєстраційний номер 0116U002993, термін виконання 2016-2018 рр.), «Інтегроване багаторівневе моделювання і експериментальна перевірка радіаційної стійкості конструкційних матеріалів реакторів на період експлуатації понад 60 років» (державний реєстраційний номер 0119U102415, термін виконання 2019-2021 рр.), «Дослідження радіаційної стійкості матеріалів реакторів ВВЕР в умовах понаднормової експлуатації з використанням інтегрованого багаторівневого моделювання та експериментальної валідації ядерно-фізичними та

структурними методами» (державний реєстраційний номер 0122U002427, термін виконання 2022-2024 рр.).

Апробація результатів дисертації. Матеріали дисертаційного дослідження доповідалися та обговорювалися на наукових семінарах в Інституті прикладної фізики НАН України та на наступних конференціях: XIV Міжнародній науково-технічній конференції молодих вчених та фахівців «Проблеми сучасної ядерної енергетики» (Харків, 2018), XVII Конференції з фізики високих енергій та ядерної фізики (Харків, 2019), Міжнародній науково-практичній конференції «Математика в сучасному технічному університеті» (Київ, 2019, 2020), Conference of Young Scientists “Problems of Theoretical Physics” (Kyiv, 2021, 2024), XXIII Всеукраїнській школі-семінарі молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої 27 речовини (Львів, 2023), Всеукраїнській науково-практичній конференції «Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики» (Суми, 2018-2024).

Публікації. Результати дисертації роботи опубліковані у 3 наукових працях, із них: 1 стаття в провідному фаховому журналі, що індексується наукометричними базами Scopus та Web of Science, 1 стаття в провідному фаховому журналі, що індексуються наукометричною базою Web of Science, 1 стаття в провідному фаховому журналі, що індексується наукометричною базою Scopus та 14 тез доповідей конференцій.

Зміст роботи. Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, переліку використаних джерел та додатку. Обсяг дисертації складає 161 сторінку машинописного тексту, обсяг основної частини становить 115 сторінок та містить 75 рисунків. Список використаних джерел складається із 199 найменувань.

У вступі наведено актуальність теми, мета роботи завдання дослідження, об'єкт і предмет дослідження, особистий внесок автора, зв'язок дисертаційних досліджень з науковими програмами, наукова новизна та практичне значення результатів дослідження.

У першому розділі представлено огляд літератури з фізики процесів радіаційного пошкодження матеріалів, радіаційно-індукованої сегрегації, зворотного ефекту Кіркендала, пізньої стадії сегрегації домішки на міжзеренній межі, аналізу експериментальних досліджень радіаційно-індукованої сегрегації Cr в аустенітних та феритно-мартенситних сплавах.

У другому розділі описано модель РІС для N-компонентних концентрованих металевих сплавів, наведено основні рівняння РІС для сплавів, що досліджуються; сформульовані початкові та граничні умови до рівнянь РІС у випадку плоского металевого шару; описано перетворення системи рівнянь РІС для числових розрахунків, вказані визначальні кількісні характеристики РІС; наведено рівняння РІС для сплавів Fe-9Cr та вхідні параметри моделювання, проаналізовано дискримінант РІС в сплаві Fe-9Cr та чутливість моделі РІС до вхідних параметрів; наведено результати розрахунків визначальних кількісних характеристик РІС в сплаві Fe-9Cr та їх залежності від зовнішніх параметрів, досліджено вплив різних граничних концентрацій ТД на результати моделювання та дислокаційної підсистеми сплаву на ефекти РІС в сплаві Fe-9Cr; наведено порівняння результатів моделювання з експериментом.

Третій розділ присвячений дослідженню РІС у трикомпонентних концентрованих сплавах Fe-Cr-Ni. Записано відповідні основні рівняння моделі та вхідні параметри, дискримінант РІС в сплаві

Fe-20Cr-8Ni, наведено результати розрахунків визначальних кількісних характеристик РІС в сплаві

Fe-20Cr-8Ni та їх залежності від зовнішніх параметрів, оцінка енергій міграції вакансій в аустенітних сплавах Fe-Cr-Ni та наведено дослідження впливу швидкості продукування точкових дефектів та

температури на радіаційно-індуковану сегрегацію, коефіцієнту заповнення міжзеренної межі та повного числа атомів домішки у виділеннях.

У четвертому розділі наведено систему рівнянь, яка описує стадію визрівання Оствальда сферичних виділень на міжзеренній межі, ріст яких лімітується поверхневою кінетикою вбудовування атомів домішки в виділення, здійснюється асимптотичний аналіз Ліфшиця-Сльозова зміни критичного

радіуса виділення та пересичення твердого розчину атомів домішки, функції розподілу виділень нової фази за розмірами та густини виділень та наведено оцінку розміру виділень нової α' -фази, збагаченої Cr, в сплавi FeCr.

Дискусійні питання та зауваження. Позитивно оцінюючи в цілому досягнуті в дисертації

Р.В. Скороход «Радіаційно-індукована сегрегація в концентрованих металевих сплавах Fe-Cr та Fe-Cr-Ni», теоретичні та практичні результати дослідження, вважаю за необхідне висловити певні недоліки та побажання:

1) У дисертаційному дослідженні не береться до уваги формування кластерів вакансій та кластерів міжвузельних атомів. Кластери вакансій дійсно не були знайдені в дослідках із малокутового розсіювання нейтронів опромінених сплавах Fe-Cr [A. Ulbricht, C. Heintze, F. Bergner, H. Eckerlebe, SANS investigation of a neutron-irradiated Fe-9at%Cr alloy, Journal of Nuclear Materials, 2010, **407**, 29]. Але формування дислокаційних петель у зазначених сплавах має місце згідно з результатами їх досліджень методом електронної мікроскопії [Bergner, F., Mayoral M., Heintze C., Konstantinovič M., Malerba L. and Pareige C. TEM Observation of Loops Decorating Dislocations and Resulting Source Hardening of Neutron-Irradiated Fe-Cr Alloys, Metals 2020, **10**, 147]. Саме тому систему рівнянь (1.7) доцільно доповнити рівняннями відносно концентрацій кластерів міжвузельних атомів, які будуть додатковими стоками точкових дефектів.

2). У Розділі 2 не розглядається жорсткість системи диференціальних рівнянь (1.7) стосовно часу. Зазначена жорсткість є наслідком різниці у характерному часі для вакансій, міжвузельних атомів та атомів хрому. У свою чергу, рішення жорстких систем диференціальних рівнянь вимагає використання відповідних спеціальних методів з адаптованим кроком інтегрування.

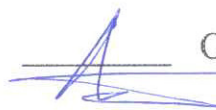
3) Відомо, що асимптотичний аналіз Ліфшиця-Сльозова може буде застосований тільки для розчинів із малою концентрацією, але в Розділі 4 дисертаційного дослідження розглядаються концентровані сплави Fe-Cr. На жаль, у дисертації відсутній аналіз впливу зростання концентрації на точність результатів щодо розміру виділень нової α' -фази, збагаченої Cr.

Загальний висновок.

Дисертаційна робота на тему «Радіаційно-індукована сегрегація в концентрованих металевих сплавах Fe-Cr та Fe-Cr-Ni» є цільним завершеним самостійним науковим дослідженням, що виконане на належному теоретичному та експериментальному рівні. Структура та обсяг дисертації відповідає встановленим вимогам. Зміст дисертації відповідає поставленій меті та завданням, які повністю вирішено в процесі дослідження. Основні положення роботи, винесені на захист, мають наукову новизну та практичну цінність. Авторка виявила високий рівень аналізу літератури з проблем дослідження. У тексті не виявлено ознак плагіату, самоплагіату, фальсифікації.

Дисертаційна робота Р.В. Скороход відповідає чинним вимогам «Порядку присудження ступеня доктора філософії», затвердженому Постановою Кабінету Міністрів України від 14 січня 2022 року № 44, а її автор Р.В. Скороход заслуговує на присудження ступеня доктора філософії зі спеціальності 104 – Фізика та астрономія.

Офіційний опонент
доктор фізико-математичних наук,
професор кафедри прикладної математики
та інформатики Державного закладу
«Південноукраїнського національного
університету імені К.Д. Ушинського»

 Олександр ГОХМАН

