

**TREAT REAKTÖRÜNDE İŞINLANAN GELİŞMİŞ
METALİK ALAŞIMLARIN RADYASYON HASARI
HESAPLAMALARI**

**RADIATION DAMAGE CALCULATIONS OF ADVANCED
METALLIC ALLOYS IRRADIATED IN THE TREAT
REACTOR**

BURAK SARIOĞLU

Dr. Öğr. Üyesi Erol ÇUBUKÇU
Tez Danışmanı

Hacettepe Üniversitesi
Lisans Eğitim –Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin
Nükleer Enerji Mühendisliği Anabilim Dalı için Öngördüğü
YÜKSEK LİSANS TEZİ
olarak hazırlanmıştır.

2020

ÖZET

TREAT REAKTÖRÜNDE IŞINLANAN GELİŞMİŞ METALİK ALAŞIMLARIN RADYASYON HASARI HESAPLAMALARI

BURAK SARIOĞLU

Yüksek Lisans, Nükleer Enerji Mühendisliği Bölümü

Tez Danışmanı: Dr. Öğr. Üyesi Erol ÇUBUKÇU

Ocak 2020, 89 sayfa

Şimdiye dek tasarlanmış olan yeni nesil reaktör konseptleri, nükleer enerjinin daha güvenli, daha uzun ömürlü, nükleer silahlanmaya karşı dirençli ve daha ekonomik kullanımı için ortak bir hedef doğrultusunda öngörülmektedir. Yeni nesil reaktör sistemlerinin başarılı bir şekilde geliştirilmesi ve uygulanması sürecinde dikkate alınması gereken en önemli husus, reaktör kabının içi ve dışındaki uygulamalar için kullanılan yapısal malzemelerin performans ve güvenilirlik sorunudur. Yapısal materyallerin mevcut nükleer enerji santrallerinden edinilen tecrübenin ötesinde, çok daha yüksek sıcaklıklara, daha yüksek nötron dozlarına ve yüksek sıcaklıkta aşındırıcı soğutucu etkisine dayanması gerekmektedir. Farklı reaktör bileşenlerinde kullanılmak üzere aktif olarak düşünülmekte olan materyaller, çeşitli ferritik/martensitik çelikler, östenitik paslanmaz çelikler, nikel bazlı süper-alaşım, seramik kompozitler vb. malzemeleri içermektedir.

Yüksek sıcaklık, ışınlama ve aşındırıcı ortam gibi çalışma koşulları malzeme özelliklerini olumsuz etkiler ve maliyeti yüksek veya ağır sonuçlara neden olabilecek çevresel hasar riski oluşturur. Gelişmiş metalik alaşımlar, yüksek-entropi alaşımlar da bu gruba dahildir, yeni nesil reaktörler için umut verici yapısal malzemeler olarak düşünülmektedir. Üstün radyasyon direnci açısından, bu alaşımlar, füzyon teknolojisi için de aday malzemeler olarak seçilebilir. Gelişmiş metalik alaşımların kullanımındaki yenilikler, yüksek sıcaklık kapasitesini arttırmayı ve ışınlamayla uyarılan yapısal değişimi önlemeyi içerir. Son yıllarda yapılan çalışmalar ile bu alaşımların kullanımında oluşabilecek problemlerin üstesinden gelinmesi için kılavuzlar belirlenmeye başlamıştır. Bu alanda veri eksikliklerinin giderilmesi ve yeni malzemelerin geliştirilmesi nükleer teknolojinin geliştirilmesi açısından önem arz etmektedir. Uzun süren ve pahalı deneme yanılma

deneilerini aşmak için, malzeme davranışının modellenmesi umut verici bir araçtır. Yapılacak arařtırmalar için tahminler üretmemizi sağlayacak modelleme yöntemi tezin de metodolojisini oluřturmaktadır. Bu tezin amacı, nükleer teknolojide, yapısal malzeme olarak kullanılmaya aday alařımların, radyasyon altındaki davranıřlarının modellenmesiyle, radyasyon hasar parametrelerini belirlemek ve öngörülen diđer alařımlara alternatif olup olmadığını gözlemlenektir. Bu amaç dođrultusunda TREAT reaktörünün koru ve test bölgesi SERPENT kodu ile nötronik açıdan modellenmiř, modelin tutarlılıđı literatürdeki referans model sonuçları ile karşılařtırıldıktan sonra, SPECOMP ve SPECTER kodları kullanılarak farklı geliřmiř metalik alařımlar için radyasyon hasar deđerleri hesaplanmıřtır.

Anahtar Kelimeler: TREAT, yüksek-entropi alařımlar, SERPENT, SPECOMP, SPECTER, radyasyon hasarı, DPA.

ABSTRACT

RADIATION DAMAGE CALCULATIONS OF ADVANCED METALLIC ALLOYS IRRADIATED IN THE TREAT REACTOR

BURAK SARIOĞLU

Master of Science, Department of Nuclear Engineering

Advisor: Assistant Prof. Dr. Erol ÇUBUKÇU

January 2020, 89 pages

The new generation reactor concepts that have been designed so far are foreseen for a common goal for safer, longer-lasting, nuclear non-proliferation and more economical use of nuclear energy. The most important issue to be considered in the process of successful development and application of new generation reactor systems is the problem of performance and reliability of structural materials used for applications inside and outside reactor vessel. Beyond the experience gained from existing nuclear power plants, structural materials need to be able to withstand much higher temperatures, higher neutron doses and high temperature corrosive coolant action. The materials considered to be active for use in different reactor components include various ferritic/martensitic steels, austenitic steels, nickel-based superalloys, ceramic composites and such materials.

Operating conditions, such as high temperature, irradiation and corrosive environment, adversely affect material properties and create a risk of environmental damage, which can lead to high or severe consequences. Advanced metallic alloys including high-entropy alloys are considered to be promising structural materials for new generation reactors. In terms of superior radiation resistance, these alloys can also be selected as candidate materials for fusion technology. Innovations in the use of advanced metallic alloys include increasing the high temperature capacity and preventing irradiation-induced structural change. In recent years, with the help of these alloys, guidelines have been determined to overcome the problems that may arise in the use of these alloys. In this area, the elimination of data deficiencies and the development of new materials are important for the development of nuclear technology. Modeling material behavior is a promising tool to overcome long and expensive trial and error experiments. The modeling method, which will enable us to predict the behavior of materials, to be employed in this thesis constitutes one example of such method. The aim of this thesis is to determine the radiation damage parameters of nuclear alloys by modeling their behavior under radiation. For this purpose, neutronic characteristics of the TREAT reactor will be modeled using the SERPENT code. Upon checking the consistency of the obtained result with reference model results provided in the literature, radiation damage values for

different advanced metallic alloys will be evaluated using SPECOMP and SPECTER codes.

Keywords: TREAT, high entropy alloys, SERPENT, radiation damage, DPA, SPECOMP, SPECTER.

TEŐEKKÜR

Çalıřmamın her ařamasında bana destek olan, bilgi ve deneyimleri ile yol gösteren danıřman hocam Sayın Dr. Öğr. Üyesi Erol ÇUBUKÇU ve tez konusunu belirlememde önerileri için Sayın Prof. Dr. Üner ÇOLAK'a teőekkürlerimi sunarım.

Tez komitemde bulunan Sayın Prof. Dr. Mehmet TOMBAKOĞLU, Sayın Prof. Dr. Cemil KOCAR, Sayın Dr. Öğr. Üyesi Banu BULUT ACAR'a yol göstericiliklerinden ötürü teőekkür ederim.

Ayrıca çalıřmam boyunca tecrübelerini paylařan, Sayın Doç. Dr. řule Ergün, Sayın Dr. Osman řahin ÇELİKTEN ve Hacettepe Üniversitesi Nükleer Enerji Mühendislięi Bölümü akademik-idari personeline minnettarlıęımı sunarım.

Son olarak her zaman yanımda olup beni destekleyen aileme ve arkadaşlarıma teőekkürlerimi sunarım.

Burak SARIOĞLU

Ocak 2020, Ankara

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT.....	iii
TEŞEKKÜR.....	v
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ	x
SİMGELER VE KISALTMALAR	xi
1.GİRİŞ	1
1.1. Tezin Amacı.....	2
1.2. Yöntem.....	2
1.3. Kapsam	2
2. TREAT (GEÇİCİ DURUM REAKTÖR TEST TESİSİ)	4
2.1. TREAT Kor Tasarımı	6
2.2. Reaktör Operasyonları	7
2.3. Sabit Reflektör	8
2.4. Yakıt çubukları ve Yakıt Üretimi	9
2.5. Kontrol Çubukları ve Kontrol Mekanizması	11
2.6. Reaktör Soğutması.....	14
2.7. M8 Kalibrasyon Deneyi.....	16
3. NÜKLEER ENDÜSTRİ VE MEVCUT NÜKLEER ALAŞIMLAR.....	18
3.1. Demir Alaşımları	19
3.2. Zirkonyum Alaşımları	20
3.3- Nikel Alaşımları	20
4. YÜKSEK ENTROPİ ALAŞIMLAR	21
4.1. Faz Oluşumu ve Mikro yapılar	23
4.2. Genel Karakteristik Özellikleri.....	26
4.2.1. Yüksek Entropi Etkisi	26
4.2.2. Şiddetli Kafes Bozulma Etkisi	27
4.2.3. Yavaş Difüzyon Etkisi	28
4.2.4. Kokteyl Etkisi	28
4.3. Mekanik Özellikleri	29
4.4. Refrakter Yüksek Entropi Alaşımlar	30
5. RADYASYON HASARI	34
5.1. Radyasyonun Malzemeler Üzerindeki Etkileri.....	35

5.2. Parçacık-Katı Etkileşimleri.....	39
5.2.1. Nötronların Madde ile Etkileşimi	41
5.2.1.1. Elastik Saçılma	41
5.2.1.2. İnelastik Saçılma	41
5.2.1.3. (n, γ) Tepkimeleri	42
5.2.1.4. Diğer Yutulma Tepkimeleri	42
5.3. Yer Değiştirme Teorisi	43
5.3.1. Eşik Enerjisi (E_d).....	46
5.3.2. Radyasyon Hasarı Modelleri	47
5.3.3. Kanallama ve Odaklanma.....	50
5.4. Hidrojen ve Helyum Oluşumu.....	50
6. SERPENT, SPECOMP VE SPECTER KODLARI	53
6.1. Monte Carlo Yöntemi	53
6.2. SERPENT Kodu	54
6.3. SPECOMP ve SPECTER Kodları	56
7. RADYASYON HASARI HESAPLAMARI.....	56
7.1. TREAT SERPENT Modeli.....	56
7.1.1. Yakıt ve Kontrol Çubukları	56
7.1.2. M8CAL Kor Modeli	59
7.2. DPA, Hidrojen ve Helyum Oluşumunun Hesaplanması	62
8. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME	64
8.1. TREAT Test Bölgesindeki Nötron Spektrumu.....	64
8.2. Metalik Alaşımlarda DPA, Hidrojen ve Helyum Gazı Üretim Hızı.....	66
8.3. Yüksek Entropi Alaşımları Oluşturan Elementlerin DPA ve Gaz Üretimine Etkileri	76
9. TARTIŞMA ve YORUM	78
KAYNAKLAR	80
ÖZGEÇMİŞ	89

ŞEKİLLER

Şekil 2.1 TREAT reaktörünün kesit görünümü [2]

Şekil 2.2 TREAT tesisi özelliklerinin genel planı [10]

Şekil 2.3 TREAT Standart yakıt düzeneği [8]

Şekil 2.4 TREAT Korunda Kontrol Çubuğu Pozisyonları [17]

Şekil 2.5 Farklı bölümlerin gösterildiği kontrol çubuğu çizimi [17]

Şekil 2.6 Reaktör soğutma sisteminin şematik gösterimi [20]

Şekil 2.7 Dört yakıt elementinin bir araya gelerek oluşturduğu soğutma kanalı [20]

Şekil 4.1 Yüksek entropi alaşımlarda faz seçimi [23]

Şekil 4.2 Diyagram 5 bileşenli BCC kafesinde kafes bozulmasını göstermektedir [25,26]

Şekil 4.3 $Al_xCoCrCuFe$ alaşımında elementlerin etkileşimi ile kokteyl etkisinin gösterimi [63]

Şekil 4.4 Refrakter metallerin periyodik cetvelde gösterimi

Şekil 4.5 MoNbTaW ve MoNbTaVW refrakter yüksek-entropi alaşımlarının ve Inconel718 ve Haynes 230 nikel-bazlı süper-alaşımın sıcaklığa göre akma dayanımı değişim grafiği [97]

Şekil 5.1 Nötron ışınımının gerilme mukavemeti üzerine etkisi [130]

Şekil 5.2 Tesir-kesiti konseptinin şematik gösterimi [132]

Şekil 5.3 Brinkman'ın tanımladığı yer değiştirme çivisi [131], b) Seeger'in [135] FCC metalinde incelediği birincil hasar olayları konsepti

Şekil 5.4 Metallerde yer değiştirme enerjisinin erime sıcaklığının fonksiyonu olarak değişimi [121]

Şekil 5.5 Kinchin-Pease formülünün türetilmesinin gösterimi [132]

Şekil 5.6 Karbon, bakır ve uranyum elementleri için Kinchin-Pease ve Lindhard modellerine göre yer değiştirmeler [132]

Şekil 7.1 Radyasyon hasarı hesaplamalarının akış şeması

Şekil 7.2 Yakıt demetinin iki boyutlu üst görünüşü

Şekil 7.3 Standard yakıt düzeneği modeli

Şekil 7.4 Kontrol çubuğu düzeneğinin iki boyutlu üst görünüşü

Şekil 7.5 Kontrol çubuğu düzeneği modeli

Şekil 7.6 Zircaloy-zarflı işlevsiz düzeneğinin iki boyutlu üst görünüşü

Şekil 7.7 Yarı-oluklu M8CAL kuru SERPENT modeli (XY- düzlemi) çizimi

Şekil 7.8 M8CAL kuru ve test bölgesinin (XZ-düzlemi) çizimi

Şekil 8.1 TREAT Test Bölgesindeki Nötron spektrumlarının karşılaştırılması

Şekil 8.2 Yüksek-entropi alaşımlarda DPA'nın hasar tesir-kesitine göre değişimi

Şekil 8.3 Alaşımlar için tepkime gazlarının üretim miktarları-I

Şekil 8.4 Alaşımlar için tepkime gazlarının üretim miktarları -II

Şekil 8.5 Elementlerin yer değiştirme tesir-kesitleri-1

Şekil 8.6 Elementlerin yer değiştirme tesir-kesitleri-2

Şekil 8.7 Yüksek-entropi alaşımların DPA ve hasar tesit-kesitlerinin ticari alaşımlarla karşılaştırması

Şekil 8.8 Yüksek-entropi alaşımların ve ticari alaşımların tepkime gazı üretimlerinin karşılaştırması

ÇİZELGELER

Çizelge 4.1 13 bileşene kadar oluşturulan eşit atomik alaşımların R'ye bağlı yapılandırma entropileri [55]

Çizelge 4.2 Refrakter elementlerin erime sıcaklıkları ve öz kütleleri [94]

Çizelge 4.3 Üretilmiş refrakter yüksek-entropi alaşımların özellikleri [101-119]

Çizelge 5.1 Seramik metaller için yer değiştirme enerjileri [121]

Çizelge 7.1 Yüksek-entropi alaşımların yapısal özellikleri [101-119]

Çizelge 8.1 Ticari alaşımlar için sonuçlar

Çizelge 8.2 Yüksek-entropi alaşımlar için radyasyon hasarı ve tepkime gazlarının üretim sonuçları

Çizelge 8.3 Yüksek-entropi alaşımlar için radyasyon hasarı ve tepkime gazlarının üretim sonuçları (DPA/s değerlerine göre göre sıralanmış)

Çizelge 8.4 Yüksek-entropi alaşımlar için radyasyon hasarı ve tepkime gazlarının üretim sonuçları (Helyum (He) gazı üretim miktarına göre sıralanmış)

Çizelge 8.5 Yüksek-entropi alaşımlar için radyasyon hasarı ve tepkime gazlarının üretim sonuçları (Hidrojen (H) gazı üretim miktarına göre sıralanmış)

Çizelge 8.6 Yüksek-entropi alaşımların içerdiği elementlerin radyasyon hasarı sonuçları

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

ϕ	Nötron akısı ($n/cm^2.s$)
Φ	Nötron akı birikimi (n/cm^2)
σ	Mikroskobik tesir-kesiti (barn)
N	Atom yoğunluğu (cm^{-3})
Σ	Makroskobik tesir-kesiti (cm^{-1})
σ_D	Yer değiştirme tesir-kesiti (barn)
ρ	Öz kütle (g/cm^3)
R	Gaz sabiti
σ_y	Akma dayanımı

Kısaltmalar

BCC	Body Centered Cubic	Hacim Merkezli Küp (Kafes)
B_4C	Boron carbide	Bor karbür
CAD	Computer-Aided Design	Bilgisayar Destekli Tasarım
CSG	Constructive Solid Geometry	Yapıcı Katı Geometri
ΔG_{mix}	Mixing Gibbs free energy	Karışım Gibbs serbest enerjisi
ΔH_{mix}	Mixing enthalpy	Karışım entalpisi
DPA	Displacement per atom	Atom başına yer değiştirme
ΔS_{mix}	Mixing entropy	Karışım entropisi
E_d	Displacement treshold energy	Yer değiştirme eşik enerjisi
ENDF	Evaluated Nuclear Data File	Hesaplanmış Nükleer Veri Kütüğü
FCC	Face Centered Cubic	Yüzey Merkezli Küp (Kafes)
INL	Idaho National Laboratory	Idaho Ulusal Laboratuvarı
HEA	High Entropy Alloy	Yüksek Entropi Alaşım
K-P	Kinchin-Pease (Theory)	Kinchin-Pease (Teorisi)

NRT	Norgett Robert Torrents (Theory)	Norgett Robert Torrents (Teorisi)
PCF	Power Coupling Factor	Güç Bağlantı Faktörü
PKA	Primary knock-on atom	Birincil çarpma atomu
RHEA	Refractory High Entropy Alloys	Refrakter Yüksek Entropi Alaşımlar
RIS	Radiation Induced Segregation	Radyasyona Bağlı Ayrışma
TREAT	Transient Reactor Test Facility	Geçiş Durumu Reaktör Test Tesisi
UO ₂	Uranium dioxide	Uranyum dioksit
VEC	Valance Electron Concentration	Değerlik Elektronu Yoğunluğu

1. GİRİŞ

Yenilikçi nükleer sistemlerin geliştirilmesi sıcaklık, yüksek nötron akısı, aşındırıcı ortam ve ömürleri açısından talepleri karşılayabilecek malzemeyi bulmak, nitelenmek ve kodlamak için kapsamlı bir araştırma gerektirir. Çoğu durumda, yeni malzemeler bu kavramların uygulanabilirliği ve bu tür materyalleri elde etme yeteneğine güvenme prensibi ile geliştirilmelidir.

Gelişmiş metalik alaşımların ve seramik kompozitlerin geliştirilmesi ve uygulanması, proses geliştirmeden (malzeme üretimi, montaj) performans değerlendirmesine (birleştirilmiş sıcaklık altında davranış, mekanik stres ve ışınlama) kadar önemli yeniliklere ihtiyaç duyacaktır. Bu geliştirmeler kapsamlı testler ve yapısal malzemelerin derinlemesine incelenmelerini gerektirir.

Aday materyallerin kapsamlı bir şekilde tanımlanması, uluslararası topluluklardan ortak bir çaba gerektirecek ve önceden kanıtlanmış farklı sistemler arasında karşılık kazanmaları gerekecektir.

Gelişmiş metalik alaşımlar sınıfında yeni bir konsept olan yüksek-entropi alaşımlar son yıllarda malzeme bilimi ve mühendisliğinde ilgi alanı olmuştur. Bir veya iki temel elementten oluşan ticari alaşımların aksine, çok sayıda temel element içermektedir. Üstün özgül güçleri, yüksek sıcaklıklardaki mekanik özellikleri ile de tartışma konusudur. Bununla birlikte yüksek-entropi alaşımların nükleer güç santrallerinde yapısal malzeme olarak kullanılabilmesi için mekanik özelliklerin yanında nötron akılarına dayanıklılığı da gerektirmektedir.

Nötronların malzemelerle etkileşiminin ana sonuçlarından biri saçılma tepkimeleri sonucunda atomlara aktarılan kinetik enerji nedeniyle hasar ve kafes kusurlarının oluşumudur. Radyasyon hasarının nitel ve nicel karşılaştırmaları için ana parametre "atom başına yer değiştirme (DPA)" olarak adlandırılmıştır. Ayrıca nötronların neden olduğu çekirdek tepkimeleri sonucu hidrojen ve helyum oluşumu da nötronların malzemelerde oluşturduğu bir diğer radyasyon hasarıdır. DPA'yı radyasyon hasarında referans olarak hesaplamak için ilk adım, nötron gibi yüksek enerjili parçacıkların birincil vuruş atomlarını (PKA) indükleyerek, kafes konumlarından çıkarıp, bir dizi çarpışma sonucu çarpışma zincirlerini (kaskadları) oluşturduğunu hesaplamakla başlar. PKA spektrumunu ve DPA'yı hesaplamak için farklı metotlar ve bilgisayar kodları mevcuttur.

Tezde, yeni nesil nükleer santrallerde ve füzyon reaktörlerinde yapısal malzeme olarak kullanılmasını önerilen yüksek-entropi alaşımların nötron radyasyonu ile oluşacak radyasyon hasarı ve buna bağlı olarak üretilecek helyum ve hidrojen gazlarının miktarı; malzeme testleri için kullanılan TREAT Reaktörü'nün test bölgesindeki kararlı durum koşullarındaki sırasındaki nötron akısı modellenerek hesaplanmıştır.

1.1 Tezin Amacı

Tezin amacı, nükleer reaktörlerde yapısal malzeme olarak kullanılabilen farklı gelişmiş metalik alaşımların (bunlar arasında yüksek-entropi alaşımlar önemli yer tutmaktadır.) TREAT reaktöründe ışınlanmasını modelleyerek DPA, gaz üretim miktarı gibi radyasyon hasar değerlerini hesaplamak ve elde edilen sonuçları diğer öngörülen malzemelerin özellikleri ile karşılaştırarak seçilen malzemenin yeni nesil reaktörler için yapısal malzeme olarak kullanılmaya uygun olup olmadığını belirlemektir.

1.2 Yöntem

Seçilen örnek malzemelerin TREAT Reaktörü'nde maruz kalacağı nötron akılarının belirlenebilmesi için öncelikle TREAT Reaktörünün koru SERPENT kodu ile modellenmiştir. Bu modelleme sonucu elde edilecek nötron akısı spektrumu literatürdeki referans sonuçlar ile karşılaştırılmıştır. Reaktörde ışınlanması düşünülen malzemenin maruz kalacağı enerjiye bağlı nötron akısı spektrumu bulunduktan sonra, SPECOMP kodu kullanılarak ilgili malzeme için yer değiştirme tesir kesitleri oluşturulmuştur. Hasar tesir kesitleri ile nötron akı değerleri SPECTER kodunun girdisi olarak kullanılıp ilgili alaşım için radyasyon hasar hesapları yapılmıştır. Farklı yüksek entropi alaşımlar için parametrik hesaplar yapılarak analizler tekrar edilmiştir.

1.3 Kapsam

Tez sekiz bölümden oluşmaktadır. Birinci bölümde tezin amacı, uygulanan yöntem ve kapsam yer almaktadır. İkinci bölüm Geçiş Durumu Reaktör Test Tesisi (TREAT)'nin tarihi, bölümleri ve operasyonları ile ilgili bilgileri içerir. Üçüncü ve dördüncü bölümlerde günümüzde nükleer güç reaktörlerinde yapısal malzeme olarak kullanılan metal alaşımlarına değinilmiş ve yeni gelişmiş metalik alaşım konsepti yüksek-entropi

alařımların tanımı ve zellikleri anlatılmıřtır. Beřinci blmde, yksek enerjili paracıkların malzemelerde meydana getirdiđi radyasyon hasarının ařamaları, sonuları ve hesaplanma yntemleri aıklanmıřtır. Altıncı blmde radyasyon hasarı hesaplamalarında kullanılan ve tezin metodolojisini oluřturan bilgisayar kodları (SERPENT, SPECOMP, SPECTER) ve alıřma metotları anlatılmıřtır. Yedinci, sekizinci ve dokuzuncu blmlerde tezde yapılan hesaplamalar, bu hesaplamaların sonuları ve yorumları yer almaktadır.

2. TREAT (GEÇİŞ DURUMU REAKTÖR TEST TESİSİ)

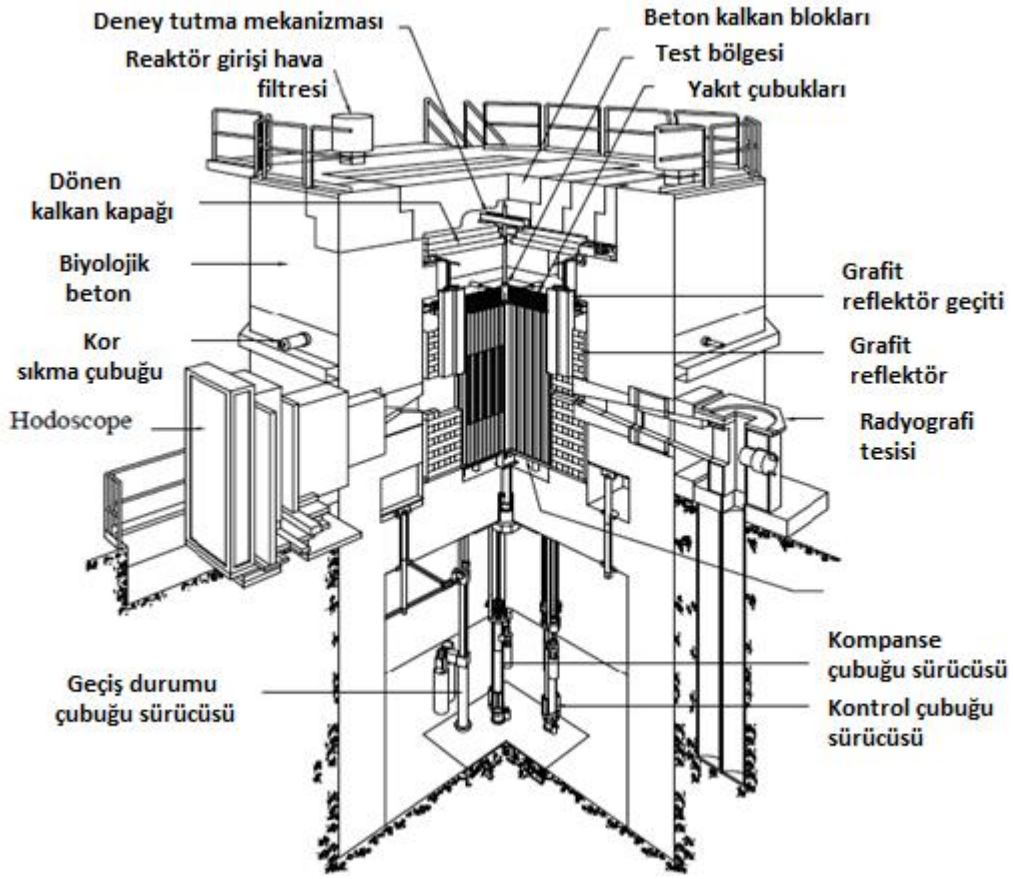
TREAT (Geçiş Durumu Reaktör Test Tesisi), Idaho Ulusal Laboratuvarı (INL)'ndaki Malzeme ve Yakıt Kompleksi (MFC)'nde, INL'nin doğu sınırından yaklaşık 11 mil (18 km) uzaklıkta ve 20. ABD Karayolu'nun 4 mil (6,4 km) kuzeyinde yer almaktadır.

TREAT, çeşitli tiplerdeki reaktör yakıtlarının ve yapısal malzemelerinde oluşacak radyasyon hasarlarını kısa süreli aşırı güç ve düşük soğutma durumları altında test etmek üzere tasarlanmış, hava soğutmalı, termal nötron spektrumlu, heterojen bir test tesisidir. Yakıt erimeleri, metal-su tepkimeleri, aşırı ısınmış yakıt ile soğutucu arasındaki termal etkileşim ve seramiklerin geçici davranışlarını incelemeye olanak sağlamaktadır. Kararlı durum operasyon modunda, TREAT büyük bir radyografi tesisi olarak kullanılır ve 15 ft. (4,6 m) uzunluğa kadar örnekleri ışınlamada kullanabilir [1]. Tesisin şematik gösterimi Şekil 2.1'de yer almaktadır.

TREAT'in reaktör güvenlik programına katkısı üç yönlü olmuştur, bunlar; yakıt tasarımlarının güvenlik marjını ve potansiyel kazaların ciddiyetini öngörmek için temel veri sağlamak [2], olası kazalar ile ortaya çıkan tehlikeleri azaltmak veya önlemek üzere yeni yakıt konseptleri için temel oluşturmak [3] ve yakıt örneklerinin nötron radyografisi yoluyla tahribatsız muayene verisini sağlamaktır [4]. Aynı hedefler, gelişmiş yakıt üretimi ve mevcut yakıtların modellenerek anlaşılması için günümüzde de mevcuttur.

TREAT'ın inşaatına, Teller İnşaat Şirketi (Oregon, Portland) tarafından Şubat 1958'de başlandı ve Kasım 1958'in başlarında tamamlandı. Reaktör ilk kritikliğe 23 Şubat 1959'da ulaştı. Önemli reaktör binası eklemeleri 1963, 1972, 1979 ve 1982'de gerçekleşti. 1988'de yeni enstrümantasyon ve kontrol sistemlerinin kurulmasının yanı sıra çubuk sürücü sistemlerinin değişimini içeren yenilemeye gidildi. Reaktör, Şubat 1958'den Nisan 1994'e kadar işletildi. Bu süre zarfında 6.604 reaktör başlaması ("startup") ve 2.885 geçiş durumu ışınlaması ve 2.600.000 MJ reaktör enerjisi üreterek tamamlandı.

Tesisin genel durumu kullanıma uygun, radyolojik açıdan temiz ve endüstriyel açıdan tehlikesizdir. Enstrümantasyon ve kontrol mekanizmaları iyi kondisyonda ve çalışabilir durumdadır. Orijinal TREAT yakıtı hala iyi durumdadır ve süresiz olarak kullanımda kalması beklenmektedir (Orijinal yakıtın kullanım ömrü zircaloy zarfın oksidasyonu ile



Şekil 2.1 TREAT reaktörünün kesit görünümü [2]

belirlenmektedir). Orijinal yakıt, 0,65 mm zarf kalınlığının oksidasyondan dolayı 0,15 mm'si kaybedilene kadar güvenli bir şekilde serviste kalabilir. Zircaloy zarfta, oksidasyon nedeni ile oluşan kaybın şu ana kadar yaklaşık 0,025 mm olduğu tahmin edilmektedir.

İki köprü vinç, büyük konteynerleri ve deneysel donanımı kullanmak için reaktör alanına erişebilir. Tesis kaldırma ve taşıma ekipmanları ve bina hizmetleri, tesisteki reaktör dışı deneyleri desteklemek için kullanılmaktadır.

TREAT Hodoskopu (yakıt hareket izleme sistemi)'nin bilgisayar bileşenleri ve deneysel veri toplama sistemleri eskidir ve işlevsel olmalarına rağmen artık satıcı desteğine sahip değildir. Enstrümantasyon ve veri toplama sistemlerini geliştirmek TREAT'deki testlerin ilerletilebilmesi için önem arz etmektedir [1].

2.1 TREAT Kor Tasarımı

TREAT'in kuru, grafit reflektör ile birlikte, aksel ve radyal yönde 5 ft. (1,53 m) kalınlığındaki biyolojik beton kalkan içinde bulunur. Beton reaktör kalkanı, reaktör kararlı durum operasyonda iken, reaktör çevresinden erişimi sağlayacak şekilde tasarlanmıştır. Beton kalkan, deney ve reaktör işlemlerini desteklemek için kullanılabilir çok sayıda kanal içerir. Kor hava soğutmalıdır ve kararlı durum veya geçiş durumu operasyonları sırasında üretilen ısının giderilmesi üzere tasarlanmıştır.

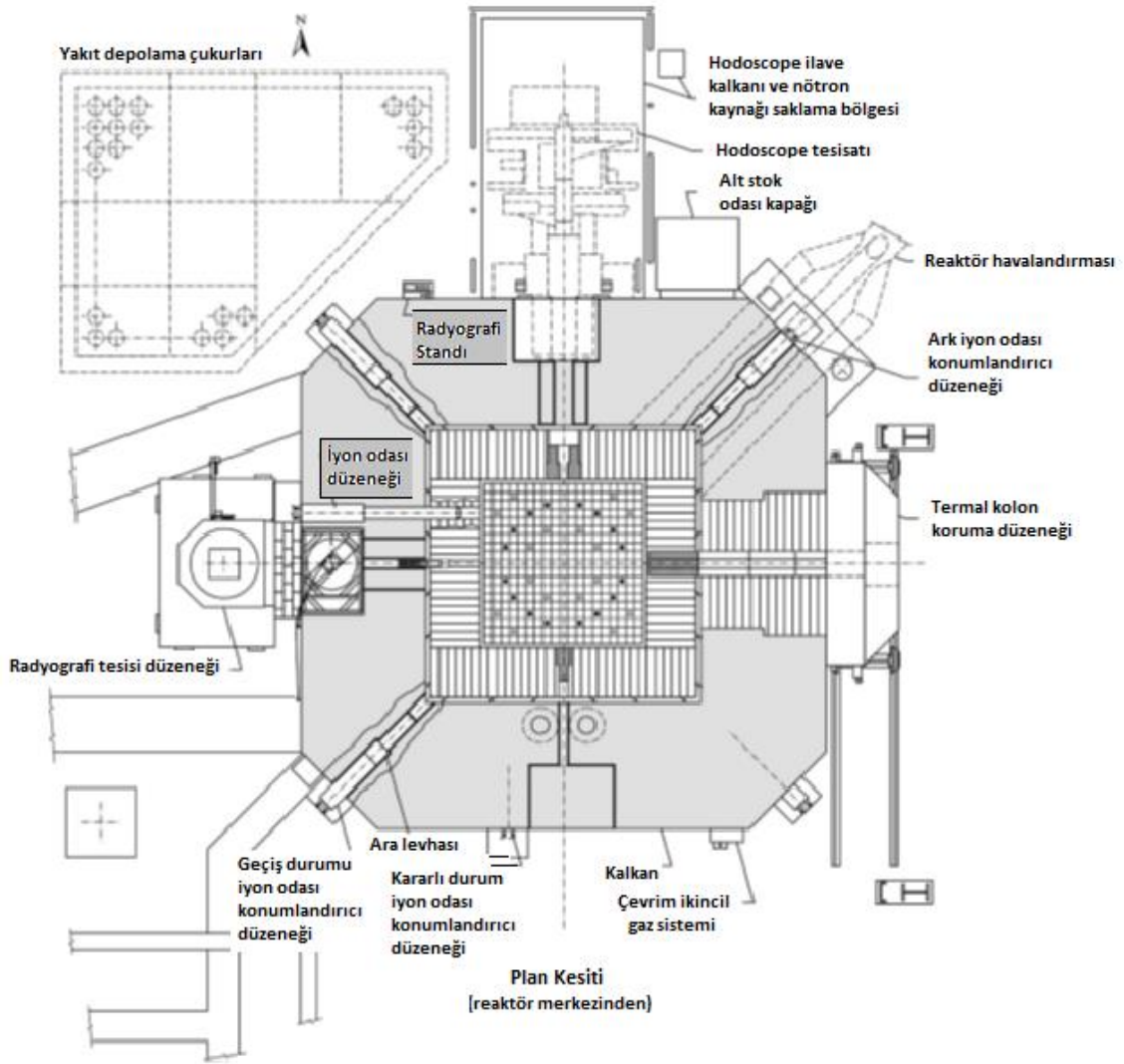
Kor; yakıt, reflektör ve kontrol çubuklarını içeren 19 x 19 kare dizilişindedir. Bu diziyi çevreleyen sabit 2 ft. (0,61 m) kalınlığında bloklardan oluşan grafit reflektör bulunmaktadır. Bu bloklarda görsel ışınım veya hava girişi için boşluklar bulunmaktadır. TREAT yakıt çubukları 4 inç² (25,81 cm²) kesit alanında ve 8 ft. (2,44 m) uzunluğundadır. Yakıt çubukları 4 ft. (1,22 m) aktif yakıt bölümü ve iki adet (alt ve üst olmak üzere) 2 ft. (0,61 m) uzunluğunda aksel grafit reflektör bölümü içermektedir [1].

Mevcut kor konfigürasyonunda 20 adet kontrol elemanı vardır. Reaktörün merkezinde, deney yakıtı veya kalibrasyon fisyon teli, deney düzeneğinin içerisinde yer alır. Deneme araçları (kapsüller, çevrimler) geleneksel olarak farklı yakıt gruplarını içerir [5].

TREAT deneyleri tipik olarak üst döner bir açıklıktan kora indirilir. Radyo aktif deneyler ise reaktörün dışında korumalı kasklar ile gerçekleştirilir. Deney düzenekleri, her biri yaklaşık 10 cm² kesit alanında ve 1,2 cm aktif uzunlukta korun ortasında bölgesinde yer alır. TREAT deney araçları herhangi bir tehlikeyi içerisinde tutabilecek şekilde tasarlanmıştır [6].

Kor tasarımı nispeten basit olsa da grafit yakıttaki nötronların ortalama serbest yolu ile orantılı küçük boyutta ve birçok analiz yöntemine olanak sağlar [7,8].

TREAT kor yüklemesi, her deneyin boyut, reaktivite ve diyagnostiğinin gerekliliklerini karşılamak üzere optimize edilmiştir. Kor elemanları deney prosedürlerine uygun olarak çıkarılabilir veya yer değiştirebilir. Bu da farklı reaktör geometrilerinin oluşturulmasına olanak sağlar. Reaktör bir dizi geçici şekil ve ebat geliştirebilir. Maksimum kor gücü enerji kapasitesi, kor yüklemesine ve uygulanan geçiş durumlarına bağlıdır. Bu yönetimsel limitlerle, yakıt elemanlarının maksimum sıcaklığının kontrol edilmesi ve uzun kor ömrünün sağlanması amaçlanmıştır [9].



Şekil 2.2 TREAT tesisi özelliklerinin genel planı [10]

2.2 Reaktör Operasyonları

Reaktörde dört güç çalışması modu mümkündür. Bunların üçü geçiş durumu (transient) modlarıdır. Geçiş durumları, gücün büyüklüğüne, toplam enerjiye, geçiş durumunun süresine ve düzenine göre değişiklik gösterebilir. Bu modlar şöyle sıralanabilir;

“Sıcaklık –sınırlı” geçiş durumları; düşük güç seviyesinde ani reaktivite girişi ile başlatılan ve reaktivitenin negatif sıcaklık katsayıları ile son bulan, Gauss veya çan şekli çizen güç eğrisi elde edilir. Büyük miktarda reaktivite girişi, daha dar ve daha yüksek güç değeri veren ve daha fazla enerji üreten güç-zaman geçmişleri oluşturur. En yüksek enerjili patlama, 100 ms genliğinde ve 18 GW pik gücünde 2600 MJ enerji üretir.

“Şekillendirilmiş geçiş durumları”, TREAT’in otomatik reaktör kontrol sistemiyle tamamen kontrol edilir. Deney gerekliliklerine göre şekiller değişkenlik gösterebilir. Kontrol sistemi reaktörün gücünü +100 ms ile -100 ms periyodu arasında, 10.000 MW üst değere kadar kontrol edebilme kapasitesindedir. Tipik olarak, şekillendirilmiş geçiş durumları birkaç saniye ile onlarca saniye aralığında, 3000 MW pik güce kadar çıkabilen, 800 ile 1900 MJ’lük kor enerjisi aralığındadır.

“Genişletilmiş güç geçiş durumları”; deney gereksinimlerini karşılamak için şekillendirilmiş, geçiş durumu çubuklarının bilgisayar kontrolünü ve yavaş hareketli kontrol çubuklarının manuel kontrolünü içerir. Bu ek reaktivitenin eklenmesine ve korda ek enerjinin üretilmesine izin verir. Dakikalarca süren uzatılmış geçişler süresince güç seviyesi yaklaşık birkaç MW ve kor tarafından üretilen enerji yaklaşık 2600 MJ kadardır.

“Kararlı durum operasyonu”; fizik ölçümleri, izotop (ör. I-131) üretimi ve nötron radyografisi için gerekli olan nötron akısını sağlayan 100 kW kor gücüyle sınırlıdır.

Reaktörü kontrol eden ve deneyleri görüntüleyen bilgisayar sistemleri, önceden belirlenmiş kararlar verebilmek ve geçiş deneyleri sırasında kontrolü sağlamak için birbirine bağlıdır. Otomatik Reaktör Kontrol Sistemi (ARCS) ara yüzleri, deney sınır koşullarının senkronizasyonu (termal-hidrolik, nötronik) ve geri besleme kontrolü için kullanılır [9].

Test yakıtında üretilen fisyon gücü ile TREAT korunda üretilen gücün oranına “güç bağlantısı faktörü” (PCF) adı verilmiştir ve reaktörün birim MW gücü başına test yakıtının birim gramdaki Watt (W/g-MW) şeklinde ifade edilmiştir, veya Joule cinsinden J/g-MJ şeklinde gösterilebilir. Sonuç olarak, yakıtta depolanan fisyon enerjisi, korda üretilen total enerji PCF faktörünün çarpımı şeklinde hesaplanabilir. Güç bağlantısı, deneye ve test yakıtının tasarımına büyük ölçüde bağlıdır [1].

2.3 Sabit Reflektör

TREAT koru; 4 inç (10,16 cm) x 4 inç (10,16 cm) x 24 inç (60,96 cm) boyutlarında grafit bloklardan oluşan, 7ft. 8 inç (2,33 m) yüksekliğinde, 2 ft. (0,61 m) duvar kalınlığı olan radyal sabit reflektöre yerleştirilmiştir. Reflektörün iç ve dış yüzeylerinde nominal 2 inç (0,61 m)’lik bir boşluk vardır. Bu boşluk reaktörü soğutacak basınçlı hava akışı için bir

geçiş sağlar. Reflektördeki grafit daha önce CP-2 (Chicago Pile-2) reaktöründe de kullanılmıştır.

Sabit reflektörün çeşitli bölgelerinde, ağırlıkları 275 lb (~ 125 kg) olan hareketli grafit bloklar bulunur ve çıkarılabilir beton koruma blokları sayesinde kora radyal erişimler sağlanır. Bloklar dikey olarak, reflektörün üzerinde yer alan beton kalkanın üstüne monte edilmiş alüminyum kaldırma aparatları ile hareket eder. Reflektörün güney ve batı taraflarının her biri 4,25 inç (10,8 cm) genişliğinde ve reflektörden 24 inç (61 cm) yükseklikte oluk oluşturan hareketli bloğa sahiptir. Kuzey tarafında 3 adet hareket edebilen blok vardır. Merkezdeki blok 4 inç (10,16 cm) x 32 inç (81,28 cm)'lik bir yuva açmak için kaldırılabilir veya 3 bloğun hepsi çıkarıldığında 14,25 inç (36,2 cm) x 32 inç (81,28 cm)'lik bir açıklık oluşturmaktadır.

Ayrıca reflektörün kuzey, güney ve batı yüzlerinin her birinde, kora yakın hızlı yanıt enstrümanlarının kurulumu için 6,5 inç (16,51 cm) çapında yatay boşluklar vardır.

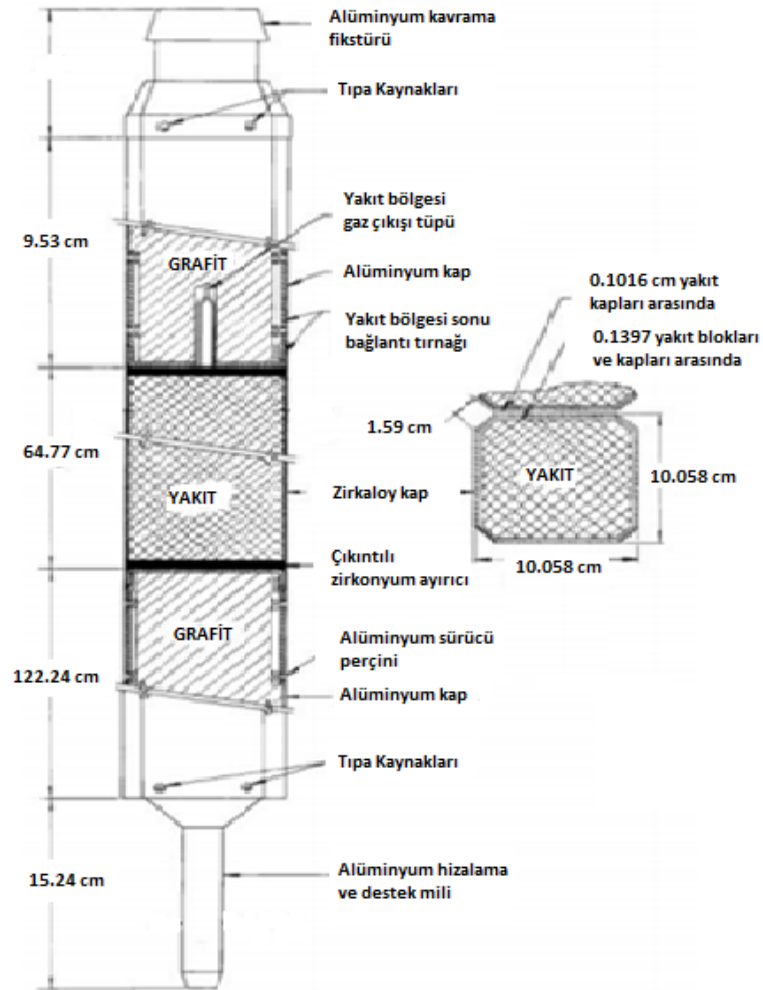
Radyal reflektör, 1 inç (2,54 cm) çapında 46 adet paslanmaz çelik cıvata ile yerine sabitlenmiştir. Açılı demir ara parçaları ve reflektörü çevreleyen beton kalkan boşluğunun çelik astarına tutturulmuş bir metal levha çerçeve ile desteklenir. Belirtildiği gibi reflektör ve biyolojik beton kalkan arasında hava geçişine izin veren, soğutucu akışı için oluşturulmuş bir boşluk vardır [10].

2.4 Yakıt Çubukları ve Yakıt Üretimi

TREAT reaktörünün yakıtı, karbon içerisinde homojen olarak dağılmış, yüksek zenginlikli (%93,1) ince UO_2 parçacıkları ile grafit karışımıdır. U-235, toplam karışım ağırlığının yaklaşık %0,2'si kadardır. Bu tasarım; fisyon enerjisinin, grafit ve karbon içerisine hızlı transferine olanak sağlar. Bu durumda moderatör hızlı ve homojen bir şekilde ısınır. Bu işlem esas olarak anlık, etkili, geniş reaktivitenin negatif-sıcaklık katsayısı ile ve buna bağlı kendi kendini sınırlayan nükleer geçiş durumları ile sonuçlanır. Yakıt blokları şekil aldıktan sonra iki hafta boyunca $950^{\circ}C$ sıcaklıkta pişirilmiştir. Bu işlem U_3O_8 'i UO_2 'ye dönüştürür. Pişirme işlemi sırasında kritiklik riskini azaltmak için bloklar arasında borlu çelik bölücüler kullanılmış ancak bir miktar bor grafitte yayılmıştır [19]. Grafit-uranyum karışımı yakıt bloklarında bor içeriği ortalama 5,9 ppm raporlanmıştır [11]. Daha sonraki çalışmalarda 7,53 ppm kabul edilmiştir [15]. TREAT

Reaktör 1959’da çalışmaya başlamasına rağmen, grafit ve karbonun bileşimi yakıt üreticisi tarafından yakın zamanda tescil edilmiştir. Üretici şirket hesaplama modelini geliştirmek için gerekli bilgileri yayınlamıştır. Karbonun kömür katranı içerisindeki ağırlıkça yüzdesi 0,913 ve grafitize olmuş karbonun toplam karbona oranı 0,59 elde edilmiştir [11]. Ayrıca 1970’te Brittan ve Doerner bu belirsizlikleri ele aldı ve gelecek fizik hesaplamaları için referans değerleri önermiştir [10].

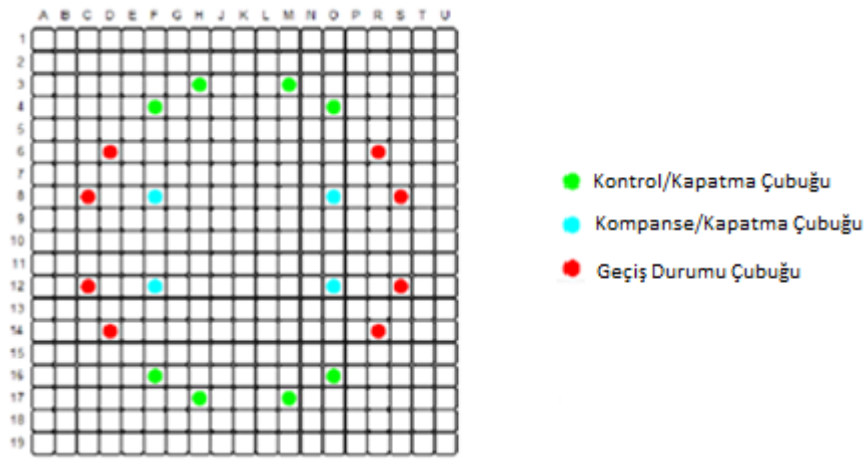
Yakıt elemanları soğutucu hava akışı için yivli köşeleri olan 10,06 cm kenar uzunluğunda karelerden oluşur. Aktif yakıt uzunluğu 122,24 cm’dir ve yakıt elemanının toplam uzunluğu ise 247,65 cm’dir. Bu elemanların her biri Zircaloy-3 kaplama zarf tabakası ile çevrilidir. Yakıt bölümünün hemen üzerinde gaz çıkışı için tüp bulunmaktadır. Her iki aksel ucunda alüminyum ile kaplanmış sekizgen grafit bloklar yer alır. Grafitlerin 9 cm iç tarafında yakıtı reflektöre bağlayan Zircaloy-3 küçük kanatlar vardır. Bu yakıt ve reflektör bölümleri 10,16 cm pitch uzunluğunda kare kafesleri oluşturur [5].



Şekil 2.3 TREAT Standart yakıt düzeneği [8]

2.5 Kontrol Çubukları ve Kontrol Mekanizması

Yüksek zenginlikte uranyum içeren kor kontrol sistemi üç tip reaktör kontrol çubuğuna sahiptir, bunlar; dört adet tekli pnömatik (gaz basıncını harekete çevirme amaçlı uygulamalar içeren sistemler) reaktivite ilavelerini kompanse etmek için kullanılan kompanse/kapatma çubukları, dört çift pnömatik kritikliği korumak için kullanılan kontrol/kapatma çubukları ve geçiş durumu olayları başlatmak için reaktivite değişikliği sağlayan dört çift hidrolik geçiş durumu çubuğu. Kor içerisindeki bu üç farklı kontrol sistemi Şekil 2.4'te gösterilmiştir

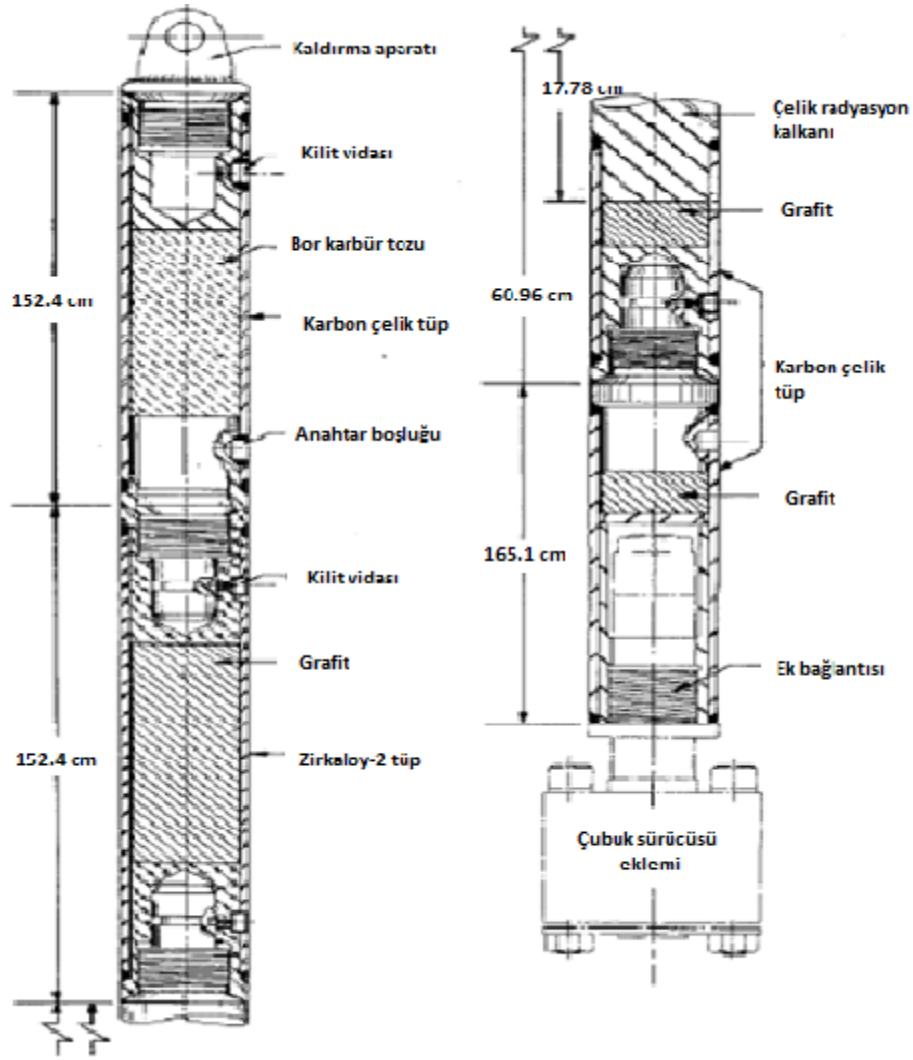


Şekil 2.4 TREAT Korunda Kontrol Çubuk Pozisyonları [17]

TREAT içerisindeki geçiş durumları, geçiş durum çubuklarının kordan çekilmeleri süresi boyunca sisteme eklenen reaktiviteyle gerçekleştirilir. Geçiş durumları iki kategoride toplanabilir; (1) şekillendirilmiş geçiş durumları, geçiş durum çubukların yavaş hareketiyle birkaç saniye sürebilir ve spesifik bir kor güç-zaman grafiği oluşturur. (2) Sıcaklık-limitli veya “patlama” adı verilen, bir saniyeden daha kısa süren ve geçiş durum çubukların maksimum hızlarıyla çekilmesiyle eklenen reaktiviteyle başlatılır. Yakıttaki grafitte negatif sıcaklık reaktivitenin geri besleme ile söndürülmesine neden olacak bir güç patlaması oluşturur.

Şekil 2.5 Kontrol çubuk düzeneğini göstermektedir. Kontrol çubukları, yakıt ve grafit bölümleri içeren yakıt çubuklarının arasından aşağı yönde, 2,25 inç (5,72 cm) çapındaki boşluklarda hareket eder. Yukarıdan aşağıya, her kontrol çubuğu; bir tutma aparatı, karbon çelik zarflı bor karbür tozu içeren (B_4C) kısmı, zircaloy zarflı grafit bölümü ve iki

parça çelik zarflı grafitle doldurulmuş, sürücü mekanizmaya bağlanan bölümlerden oluşur. Ağırlığı 65 lb (~30 kg) ve uzunluğu 17ft-6,5 inç (5,35 m) 'dir. Her bölümün ucunda dişli bağlantılar kuruludur. Bor-karbür (B_4C) bölümünün uzunluğu ise 56,125 inç (142,6 cm)'dir.



Şekil 2.5 Farklı bölümlerin gösterildiği kontrol çubuğu çizimi [8]

TREAT kontrol çubuklarının zehir (bor karbür) bölümü, içerisi minimum öz kütlesi $1,6 \text{ g/cm}^3$ olan B_4C tozu ile dolu soğuk-çekilmiş 1,75 inç (4,45 cm) Dış Çaplı x 5 ft (1,52 cm) uzunluk x 0,125 inç kalınlığındaki çelik tüplerden oluşmaktadır [12]. Bunu takip eden kısım 1,7 inç (4,45 cm) Dış Çap x 5 ft (1,52 m) uzunluk x 0,125 inç (0,32 cm) kalınlık ölçülerindeki Zirkaloy-2 tüpün içerisinde grafit çubuklardan oluşur. Uç tapalar (end plugs) her uçta kaynaklanmıştır. Çubuk “kapatma” konumundayken, ekstra uzun

erkek dişli bağlanma bölümü içeren 2 ft. (0,61 m) uzunluğundaki çelik üst bölüm koruma sađlar. Üst bağlanma kısmının geri kalanı grafit ile doludur ve diş tırnakla uç tapalara bağlanır. Alt kısım 5 ft. -5 inç (1,65 m) uzunlukta grafit ile doludur ve uç tapa sürücü mekanizmasına bağlıdır. Üç kontrol çubuđu grubu da reaktör trip sistemi tarafından başlatılan ani durdurma kapatmaları için kullanılabilir. Ve bütün kontrol çubuđu grupları “tekil-başarısızlık (*single-failure*)” kriterine göre tasarlanmıştır.

Geçiş durumu, kontrol/kapatma ve kompanse/kapatma gruplarının her biri, birbirinden bağımsız olarak sođuk kapanmayı (“*cold shutdown*”) sađlama yeteneđine sahiptir. Geçiş durumu sürücüleri hidrolik olarak çalıştırılır ve 40 inç (101,6 cm) aralıđa sahiptir. Reaktör bilgisayar kontrolünde çalışırken (geçiş durumu operasyonlarında), gerekli olan reaktör güç-zaman profilini üretmek için, geçiş durumu çubuklarının en yüksek 130-160 inç/s (330-400 cm/s) olmak üzere çeşitli hızlarda sisteme reaktivite eklemesine izin verilir. Bunun dışındaki zamanlarda, yüksek hız özelliđi kilitlenir ve çubuklar sadece 0,67 inç/s (1,7 cm/s) hızında hareket edebilir.

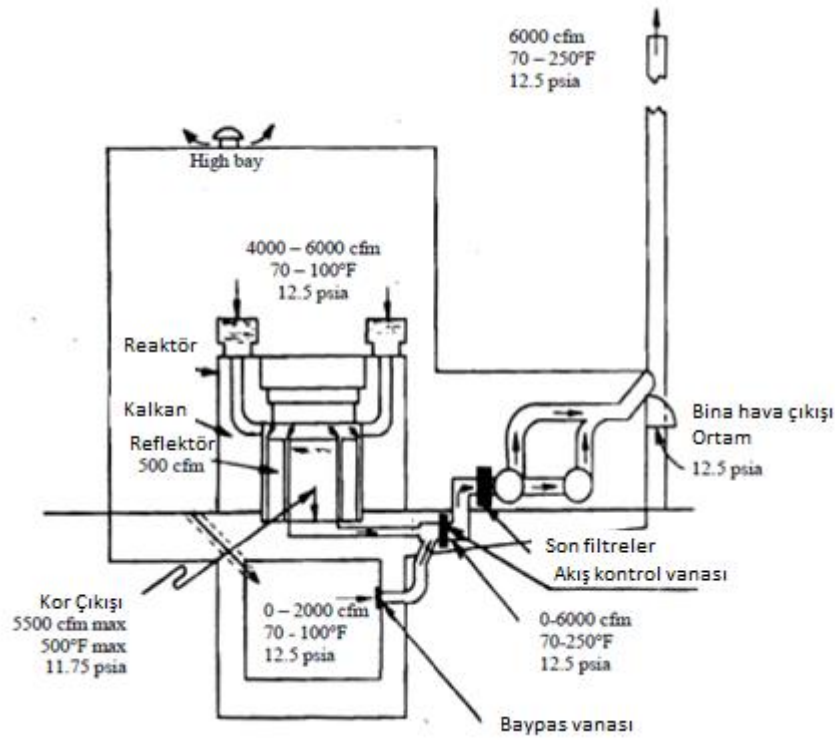
Dört kontrol/kapatma çubuđu sürücüsü ve dört kompanse/kapatma çubuđu sürücüsünün her biri pnömatik-yardımlı ani kapatma için kullanılır. Maksimum çekme hızları 19,75 inç/dk (50,17 cm/dk)’dir ve kararlı durum operasyonlarda manuel kontrol için kullanılırlar.

Dört kompanse/kapatma çubuđu sürücüsü, kontrol/kapatma çubuđu sürücüleriyle aynı tasarımdadır. Bunun yanında, kompanse/kapatma çubuk sürücülerinde daha hızlı ani kapatma başlatmak için yüksek-hızlı hidrolik mandallar kullanılır. Kompanse/kapatma çubukları herhangi bir reaktör işleminin başlangıcında tamamen korun dışındadır ve deney bitiminde tamamen kora girer. Bu çubukların amacı, deneyden kaynaklanan reaktivite ilavesini telafi etmektir [10].

2.6 Reaktör Sođutması

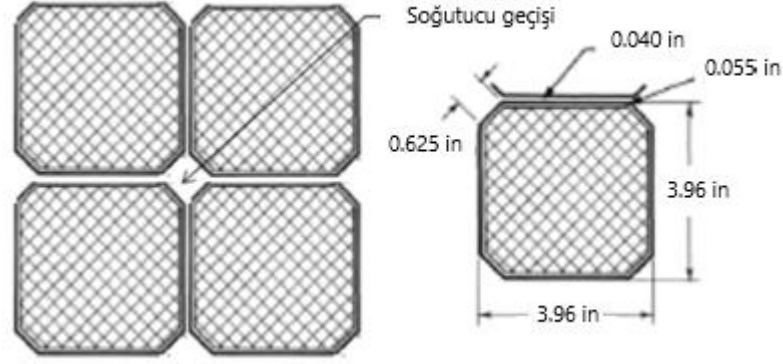
Reaktörü sođutacak hava, kor boyunca, her biri giriş basıncı 25 inç cıva (3,4 kPa) olan, 250°F (121°C)’de 1 psi (6,9 kPa)’lık basma yüksekliđine karşı 3250 cfm (5522 m^3/h) kapasitede iki adet vantilatör tarafından çekilir. Hava reaktör binasının çatısındaki damperlerden girer ve binanın egzoz istifinden çıkar. Şekil 2.6 kor boyunca sođutucu akışını göstermektedir. Yaklaşık olarak 6000 (10194 m^3/h) cfm havanın 500 cfm (850

m^3/h)'si reaktörden aşağı akar ve koru çevreleyen sabit reflektörü soğutur. Geri kalan 5500 cfm ($9345 m^3/h$), Şekil 2.7'da gösterilen, yakıt düzenekleri tarafından oluşturulan 0,625 in'lik geçitlerden akar. Yakıt düzeneklerinin olukları, her biri 17 cfm ($29 m^3/h$) hacimsel debide 324 adet geçit oluşturur. Bu geçitlerde hava girişi 12,5 psi (86,2 kPa)'da ve 70-100 °F (21-38°C) arası sıcaklıktadır. Soğuk havalarda, giriş sıcaklığını artırmak için hava ısıtma ünitesi kullanılır. Reaktör çıkış havasını soğutmak için giriş havasının bir kısmının alt bölme odasına çekilmesine izin veren yan geçit ("by-pass") vanası açılabilir. TREAT'in soğutma sistemi 120 kW termal güçteki kararlı-durum operasyonları için fazlasıyla yeterlidir.



Şekil 2.6 Reaktör soğutma sisteminin şematik gösterimi [20]

Referans [18] kor boyunca soğutucudaki sıcaklık değişiminin 118°F (48°C) olduğunu belirtiyor. Referans [11] sıcaklık artışının 68°F (20°C) ve akış hızının 6500 cfm ($11043 m^3/h$) olduğunu, referans [16] reaktör çıkış sıcaklığının kaza durumlarında 400 °F (204 °C)'a ulaştığını, alarm sesinin 345 °F (174°C)'da devreye girdiğini ve yan geçit vanasının 338 °F (170°C)'da tamamen açık olduğunu belirtiyor [13].



Şekil 2.7 Dört yakıt elementinin bir araya gelerek oluşturduğu soğutma kanalı [20]

2.7 M8 Kalibrasyon Deneyi

Tarihsel olarak nispeten birçok ham yöntem, deney düzeneğinde depolanan gücü tahmin etmek için kapsamlı kalibrasyon deneyleri ile desteklenmiştir. TREAT için modern analiz yöntemleri en son 1994'teki operasyonundan 2017'de tekrar başlatılmasına kadar takip edilmemiştir. Bu süre boyunca, TREAT'in deney performansını benzeştirmekteki bilgi ve deneyimlerde önemli bir kayıp oluşmuştur [7,8].

TREAT'deki deney programlarında, işletme tarihi boyunca, başlardaki deneylerde küçük korlarda ve küçük test araçlarındaki küçük yakıt örneklerinden, yüksek emiciliğe sahip büyük deney araçlarında büyük yakıt örneklerine, yüksek enerji üreten maksimum büyüklükteki korlara kadar çeşitli konfigürasyonlar kullanılmıştır. TREAT'in gelecekteki kullanımı, tekrardan test örneğinde depolanan yüksek yakıt enerjisi, büyük test aracı ve büyük kor yapılandırma ("*konfigürasyon*") birleşimini kullanmayı öngörecektir. Aslında, TREAT deney programı 1994'te askıya alınmadan önce, EBR-II'de veya Hızlı Akı Test Tesisi (FFTF)'nde ışınlanmış yakıt pinlerinin Mark-III sodyum döngülerinde testini içeren, izin verilen maksimum TREAT enerjisini ve dolayısıyla en büyük pratik koru kullanan Integral Fast Reactor (IFR) programı devam etmekteydi. 1990-1992 tarihleri arasında, TREAT reaktör gücü ile test örneğinde üretilen güç arasındaki korelasyonun belirlenmesini amaçlayan bu tür testler için, 23 testi içeren nötronik kalibrasyon ışımaları (M8CAL olarak adlandırılır) yapılmıştır. Bu testlerin amacı, kor detektörlerini test ortamı için kalibre etmek ve M8 yakıt arızası testi için hazırlamaktı. Korun beklemeye alınması nedeniyle M8 serisi testleri gerçekleştirilemedi. Ancak, bu deney serisi nispeten büyük geometri ve her geçiş durumunun enerji çıktısı hakkında mevcut bilgi miktarının fazla

olması nedeniyle korun mevcut konfigürasyonu ve reaktör performansı hakkında en iyi bilgi kaynağı kabul edilmektedir.

Bu deney serisinde, kor 19x19 elemanlı kafes şeklinde düzenlenmiştir. Her köşede bulunan üç pozisyona işlevsiz (*dummy*) elemanlar yerleştirilmiştir. Bu işlevsiz elemanlar yakıtsızdır ve aksenal uzunlukları boyunca grafitle doldurulmuştur. Merkezde kabaca 2 eleman boyutunda deney düzeneğinin bulunduğu bölge yer almaktadır. Bu deney serisinde deney düzeneği olarak pompalı sodyum döngüsü kullanılmıştır. Deney düzeneğinin dış tarafında yarım bloklu işlevsiz elemanları (iki adet) kullanılmıştır. Dış grafitin içinden geçen 10,16 cm'lik hava boşluğundan deney içindeki hareketler hızlı nötron detektörleri ile gözlemlenebilmektedir [7]. Bu toplanmış hızlı nötron detektörleri grubuna 'hodoskop' adı verilmiştir. Bu cihaz M8CAL ölçümlerinde kullanılmamış fakat deneylerde hodoskop ile deney bölgesi arasındaki hava boşluğu oluşturacak erişim boşluklu yakıt demetleri kullanılmıştır.

Sekiz kapatma çubuğu, deneyler sırasında geçiş durumu öncesinde kritikliğe ulaşmak için kora kısmen sokulmuştur. Korun merkezine yakın bulunan dört telafi kontrol çubuğu her deneyin sonunda geçiş durumlarını kapatmak için kullanılmıştır. Son olarak 8 adet geçiş durumu çubuğu kora kısmen yerleştirilmiştir. Sisteme reaktivite eklemek için, geçiş durumu çubukları hızlıca (~0,1s) reaktör korundan çekilmiş, Kapatma ve geçiş durumu çubuklarının aksenal yükseklikleri reaktör periyodunu değiştirmek için ayarlanmıştır.

M8CAL deneyleri TREAT'de bugüne kadar gerçekleştirilen en kapsamlı uygulamaydı. Bunun sebebi; ilk kez yenilenmiş kor (1980'lerin sonuna doğru yükseltilmiş yüksek zenginlikte TREAT koru) döngü deneyleri için kullanılmıştır. Yükseltilmiş korun nötronik özellikleri önceki kor konfigürasyonundan önemli ölçüde farklı olması beklenmektedir ve kalibrasyon deneyi gelecekteki deneyler için kalibrasyon bilgileri sağlayacaktır. Bu tez çalışması için de detaylı kor konfigürasyonu, büyük enerji kapasitesi ve maksimum performansın değerlendirilmesi nedeni ile M8CAL konfigürasyonu seçilmiştir [21].

3. NÜKLEER ENDÜSTRİ VE MEVCUT NÜKLEER ALAŞIMLAR

Klasik metalürjide, bronz çağının başlangıcından itibaren, alaşım tasarımı bir veya iki ana element içeren sistemlerin istenilen özelliklerini (sertlik, süneklik, dirençler vb.) iyileştirmek için diğer elementlerin ilave edilmesiyle geliştirilmesini izler. Bir ana elementli alaşımlara örnek olarak, ana element olarak demir içeren çelik ve bu sisteme yüzde on oranında eklenen karbon, manganez, krom, nikel tungsten ve benzer elementleri gösterebiliriz. Nikel (Ni-), alüminyum (Al-), titanyum (Ti-) ve bakır (Cu-) bazlı alaşımlar da bu sistemlerden bazılarıdır. Şu anda kullanılmakta olan yüksek performanslı alaşımların çoğu, birçok kişi tarafından geleneksel alaşımların olgunluğa ulaştığı dönem olarak kabul edilen 1970'lerde geliştirilmiştir. [22]

Nükleer endüstri büyük ölçüde 1. Nesil (Gen-I)'den 3. Nesil (Gen-III)'e su moderatörlü/soğutmalı reaktör tasarımlarının işletmelerinden elde edilen çok fazla bilgi ve deneyime sahiptir [23]. Kor içerisinde ve dışındaki bileşenlerde kullanılan nükleer malzemeler, iyi çalışılmış ve mevcut reaktör ortamlarında güvenli işletim için uygundur. Bu materyaller tipik olarak, demir (Fe), magnezyum (Mg), titanyum (Ti), zirkonyum (Zr) alaşımları ve silisyum karbür (SiC-) bazlı seramikleri [24-27] ve ferritik çelikleri [31] içerir. Doğal olarak, gelecek nesil su soğutmalı nükleer reaktörler eski nesillerin performansını optimize etmek üzere tasarlanmıştır ve önümüzdeki on ila yirmi yıl için; güvenlik, reaktör ömrü, güç çıkışı ve verimlilik gibi hususlar dikkate alınmıştır.

Bununla birlikte, gelecekteki reaktör tasarımlarında farklı soğutucu/yakıt kombinasyonlarını kullanarak daha da iyi performans elde edilebileceği yaygın olarak kabul edilmektedir [32]. Örneğin öncekilerden farklı ve daha zorlu ortamlar sunan yüksek sıcaklık, gaz-soğutmalı reaktörler veya ergimiş tuz reaktörleri, yeni nükleer sınıf malzemeler gerektiren tasarımlardır. Mevcut malzemelerin bileşimi, bu ortamlardaki mekanik özelliklerinin ve performanslarının tahmin edildiği ölçüde geliştirilmiş ve tekrar gözden geçirilmiştir.

Düşünülen 'yeni nesil' reaktör tipleri arasında gaz-soğutmalı hızlı reaktör (GFR), kurşun-soğutmalı hızlı reaktör (LFR), ergimiş tuz reaktörü (MSR), sodyum soğutmalı hızlı reaktör (SFR), süper-kritik su soğutmalı reaktör (SCWR) ve daha küçük çakıl yatağı reaktörü (PBR) gibi reaktör tasarımları vardır. Bu reaktörler için soğutucu çıkış

sıcaklıkları 550-850°C arasında olup, özellikle MSR ve SCWR tasarımları başta olmak üzere yeni olası korozyon sorunları ortaya çıkacağı öngörülmektedir [33]. Her bir tasarımın avantajları ve dezavantajları vardır. Malzemelerdeki gelişmeler seçilen tasarımların ticarileşmesini etkilemektedir.

Bugün çalışmakta olan tipik bir hafif su reaktörü (LWR) 350°C'lik bir soğutucu çıkış sıcaklığına ve termale yakın bir nötron spektrumuna sahiptir. Yeni nesil fisyon reaktörlerinde kullanılan malzemeler daha yüksek sıcaklıklara, daha yüksek enerjili nötron akılarına ve muhtemelen daha aşındırıcı ortamlara tabi tutulacaktır. Füzyon reaktörleri için teknolojinin nispeten daha az gelişmiş olmasına rağmen, kullanılacak malzemelerdeki özellik gereksinimleri benzerdir [34].

Yeni nesil reaktörlerde kullanılmak üzere mevcut aday malzemeler arasında grafit, paslanmaz veya yüksek alaşım çelikler (östenitik, martensitik veya ferritik) nikel-bazlı alaşımlar, seramikler ve bunların kompozitleri yer almaktadır [35].

3.1 Demir Alaşımları

Paslanmaz çelikler demir bazlı alaşımlar olup, özellikleri çok iyi çalışılmış ve anlaşılmıştır. Yapısal uygulamalar için, iyi mekanik özelliklere sahip, aşınmaya ve yüksek sıcaklıklara dayanıklıdır. Bununla birlikte, yüksek termal nötron yutma tesir-kisimleri kor-içi uygulamalar için uygulamalarını sınırlamaktadır.

Mühendislik açısından, paslanmaz çelikler, düşük maliyetleri, deneysel veri zenginlikleriyle, özel uygulamalar için uygundur. Krom, mükemmel korozyon direnci sağlayan ana alaşım elementidir. Bor (B), molibden (Mo), niyobyum (Nb), titanyum (Ti), kükürt (S) gibi diğer elementler özel amaçlar için eklenebilir. Amerikan Demir Çelik Enstitüsü (AISI)'nün 300 serisi çelikleri tipik olarak nükleer uygulamalarda yaygın olarak kullanılmaktadır. Tip-304 çeliği, yüzde %0,08 karbon (C), %1 silisyum (Si), %2 manganez (Mn), %18-20 krom (Cr) ve %8-12 nikel (Ni) içerir.

Nükleer uygulamalar için paslanmaz çeliklerle ilgili başlıca problemler hidrojen ve helyum gevrekleşmesi ve gerilme korozyonu çatlamasıdır. Korozyona yüksek dayanımı olmalarına karşın, güçlü indirgeyici fisyon ürünleri ve klorürler çeliklerde gerilme korozyonu çatlamasına neden olabilir [36]. Reaktör ortamında, aşındırıcı ortamlara maruz kalma ve gerilme stresi mekanik bozulmalara yol açar. Bu bozulma, ışınlama ile elementlerin ayrışması sonucu oluşur. $Cr_{23}C_6$ 'nın tane sınırında ("grain boundary")

oluşumu bu duruma örnek verilebilir. Bu krom (Cr) bakımından tükenmiş bölgeler tane sınırlarında çözülmeye yol açar. Uygulanan gerilme, çatlak uçlarında plastisiteye neden olur ve çatlak oluşumunu hızlandırır [37].

3.2 Zirkonyum Alaşımları

Zirkonyum yüksek ergime sıcaklığına, yüksek aşınma (“korozyon”) direncine, iyi mekanik özelliklere ve düşük termal nötron yutma tesir-kesitine sahiptir [38]. Bu özellikleri, zirkonyumun kor-ıçi uygulamalarda yapısal malzeme olarak kullanımını ideal kılmaktadır. Nükleer uygulamalar için kalay (Sn), demir (Fe), krom (Cr) ve nikel (Ni)’in zirkonyuma eklenmesi ile elde edilen katı çözeltili alaşımları, zirkonyuma göre daha fazla aşınma direncine sahiptir ve az da olsa daha mukavimdirler. Zircaloy-2, Zircaloy-4, Zirlo ve M5 söz konusu alaşımlardan bazılarının ticari adlarıdır.

Oksidasyon, zirkonyum alaşımlarında karşılaşılan ve mekanik bozulmaya neden olan bir problemdir [39,40]. Zirkonya (ZO_2) tabakası büyüdükçe iç kısımların çoğu daha fazla oksidasyona izin veren ve nispeten gözenekli olan monoklinik bir yapıya dönüşür.

Oksidasyon tepkimesi sonucu, zircaloy matrisine yayılabilen hidrojen üretilir. Bu durum, yüzeyde hidrit oluşumu, hidrojen gevrekleşmesi ve sonucunda yüzey kırılmasına yol açar [41]. Bu işlem yüksek sıcaklıklarda ve olası kaza durumlarında hidrojen oluşumunu hızlandırır [42]. Bu etkileri azaltmak için, neredeyse hiç nikel (Ni) içermeyen zircaloy-4 üretilmiştir ve hidrojen üretimini üç kat azalttığı kanıtlanmıştır [43].

3.3 Nikel-bazlı alaşımlar

Nikel alaşımları (örneğin Hastelloy, Inconel) aşınma direnci ve yüksek sıcaklıkta iyi mekanik özellikleriyle bilinir. Daha iyi sürünme-kopma mukavemeti gösterdiği yüksek sıcaklıktaki yapısal uygulamalarda ($>900^{\circ}C$) çeliklerin yerine yeğlenebilirler [35]. Nikel alaşımlarında faz geçişi yoktur. γ fazındaki katı çözeltili, yüksek yeniden kristalleşme sıcaklığında $Ni_2(Ti, Al)$ gibi intermetalik dağınıklıklar ile karakterize edilir ve bu durum kuvvetini artırır [38]. Nikel bazlı alaşımlar şu anda yüksek-sıcaklık reaktörlerinin türbin bıçaklarında yaygın olarak kullanılmaktadır [32].

Ne yazık ki, göreceli büyük termal nötron tesir-kesiti ve hidrojen afinitesi nikelin (Ni) zarf malzemesi olarak kullanımını kısıtlar.

4. YÜKSEK ENTROPİ ALAŞIMLAR

19. yüzyılın sonlarına doğru, M. Planck, J. Gibbs, L. Boltzman ve diğer birçok bilim insanının çalışmalarıyla, metalik sistemlerin termodinamik dengesini açıklayan matematiksel bir açıklama elde edildi [44]. Bu gelişme, şu an metalik alaşımların faz tahminlerini yapmada yaygın olarak kullanılan faz diyagramlarını oluşturmaya olanak sağladı. Tekil, ikili ve üçlü alaşımlar dengede oluşturulabilir fakat üçlü sistemlerin ötesine geçmeye çalıştıkça çeşitli sorunlarla karşılaşıldı. Bu sorunlar olası permutasyonların sayısının artması ile, bütün sistemin iki boyutlu bir platformda kolayca gösterilememesinden kaynaklanmaktadır. Daha da önemli bir sorun, elementlerin konsantrasyonunu arttırırken yüksek-entropi alaşımlarda gözlenecek intermetalik veya amorf yapıların oluşmasıdır.

1996'da K.H. Huang [45] ve T.J. Chen [46]'in yığın metalik cam araştırmalarından sonra 2004 yılında Prof. Brian Cantor ve Prof. Jien-Wei Yeh, “*multiprincipal*” ve neredeyse eşit atomik yapıda alaşım kompozisyonları ile ilgili bağımsız birkaç makale yayınladılar [44,45]. Yeh, bu yeni tip alaşımları, çok sayıdaki bileşenin eriyikteki katı çözeltiyi kararlı kılan yapılandırma (“*konfigürasyon*”) entropisini artırması nedeniyle, “yüksek entropi alaşımlar” (HEA) olarak adlandırdı. HEA'lar, yapısal ve işlevsel uygulamalardaki potansiyelleri nedeniyle önemli ilgi gördü [46]. Bu yayında beş ve daha fazla elementten oluşan, alaşım bileşenlerine bağlı olarak BCC veya FCC kristal yapılarda karışımlar oluşturdu. Dahası, yüksek-entropi alaşımların ısı kararlılık, dayanıklılık, süneklik ve sertlik gibi alanlarda geleneksel çeliklere alternatif olabileceği öngörüsünde bulundular. Şimdiye kadar yapılan çalışmalarda, mekanik özelliklerinin belirlenmesi için mikro-sertlik ve sıkıştırma dayanımı ölçümlerine odaklanılmıştır.

HEA'lar katı çözelti mekanizması nedeniyle yüksek dayanım ve sertliğe, kristal yapılarına bağlı olarak nispeten yüksek sünekliğe sahiptir. Krom (Cr) ve alüminyum (Al) gibi elementler, iyi aşınma ve oksitlenme direnci sağlar [47]. HEA'ların dökümü geleneksel metalurjik ekipman ve yöntemlerle yapılabilir [48].

Termodinamik açıdan en kararlı durum, sistemin kararlı veya yarı kararlı konuma erişmek için Gibbs serbest enerjisini (ΔG_{mix}) en aza indirmeye çalıştığı durumdur. Karışım entalpisi (ΔH_{mix}) ve toplam karışım entropisi (ΔS_{mix})'ne bağlı Gibbs serbest enerjisi, Kelvin biriminde verilmiş sıcaklık (T) için bağıntı Denklem 4.1'de gösterilmiştir [49].

$$\Delta G_{mix} = \Delta H_{mix} - T * \Delta S_{mix} \quad 4.1$$

Karışım entalpisini azaltmak veya karışım entropisini artırmak Gibbs serbest enerjisini azaltabilir. Birden fazla element içeren alaşımlar için, elementlere bağlı olarak çok sayıda çekişen fazlar (rekabet fazları) olabilir. ΔG_{mix} in en düşük olduğu faz, ilke olarak denge konumundadır. ΔH_{mix} ve $T * \Delta S_{mix}$ arasındaki çekişme faz formunu belirler. Daha yüksek sıcaklıklarda, $T * \Delta S_{mix}$ terimi baskın hale gelir ve katı çözeltili oluşumunu destekler. ΔS_{mix} 'in dört temel (majör) katkısı vardır: Bu katkılar yapılandırma (örneğin farklı büyüklükteki atomlar) ve şekilsel olmayan (titreşimsel, manyetik dipol, elektronik rasgelelik) bileşenlerin toplamına eşittir [50]. HEA'lar ile ilgili raporlanan literatür ΔS_{mix} 'in en büyük katkısının, ideal çözeltilere benzer, sekilsel entropiden geldiğinin önemine vurgu yapmaktadır [51]. Yapılandırma entropisi, bir veya iki temel (esas) element içeren geleneksel alaşımlara oranla, HEA'larda daha yüksektir [52]. İstatiksel termodinamik kullanılarak, Boltzmann denklemi ile N-bileşenli bir sistemin yapılandırma entropisini belirlenebilir [53]. N-bileşenli rasgele katı çözeltilinin her molü için ideal yapılandırma entropisi, c_i mol kesri olmak üzere, Denklem 4.2'de verilmiştir [54]. Entropi en yüksek değerine, alaşım eşit atom yüzdelерinden oluştuğunda ulaşır ve bu Denklem 4.3'de ifade edilmiştir. Bu denklemlerde R üniversal gaz sabiti olup 8.314 J/(Kmol)'e eşittir.

$$\Delta S_{mix} = -R \sum_{i=1}^N c_i \ln c_i \quad 4.2$$

$$\Delta S_{mix} = R \ln N \quad 4.3$$

Yapılandırma entropisi, element sayısı arttıkça artar. Çizelge 4.1.'de Denklem 4.3 kullanılarak elde edilen, eşit atomik alaşımların yapılandırma entropileri listelenmiştir.

Çizelge 4.1. 12 bileşene kadar oluşturulan eşit atomik alaşımların R'ye bağlı yapılandırma entropileri [55]

N	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\Delta S_{mix} / R$	0	0.69	1.1	1.39	1.61	1.79	1.95	2.08	2.2	2.3	2.4	2.49

İdeal şartlarda dört elementli alaşımların yapılandırma entropisi $1,39 * R$ 'ye eşittir. Element sayısını arttırmak ΔS_{mix} 'e kademeli olarak katkıda bulunur. Bununla birlikte

çok sayıda bileşenli HEA'ların daha yüksek yapılandırma entropisinin, ortam sıcaklığında tek fazlı katı çözeltiler eğiliminde olup olmadığını inceleyen çalışmalar vardır [29].

Güncel HEA'lar çoğunlukla nikel (Ni), demir (Fe), krom (Cr), kobalt (Co), magnezyum (Mn), çinko (Zn) ve bakır (Cu) içeren geçiş metallere veya vanadyum (V), titanyum (Ti), molibden (Mo), niyobyum (Nb), tantal (Ta), tungsten (W), zirkonyum (Zr) ve hafniyum (Hf)'u içeren refrakter metallere dayanır. Farklı oranlarda alüminyum (Al) genellikle geçiş metallere olan HEA'lara, yapısal ve mekanik özelliklerini geliştirmek için eklenir. Yakın zamanda, hafif metallerin karışımından oluşan düşük-öz kütürlü az sayıda HEA rapor edilmiştir [56,57]. Kalay (Sn) ve bizmut (Bi) gibi diğer elementlerin de bulunduğu HEA çalışmaları da vardır.

Çok bileşenli ideal rasgele katı çözeltilerdeki yüksek yapılandırma entropisi ile HEA konsepti faz stabilizasyonu düşüncesine dayansa da tek-fazlı HEA'lar çok bileşenli alaşımların yalnızca küçük bir kısmını oluşturmaktadır. Birbirinden farklı elementleri karıştırmak, genellikle tek-fazlı katı çözeltiler alaşımı oluşumuna yol açmaz. Buna karşın, tek-fazlı HEA'lar çekici özelliklere sahip, en ilginç alaşımlar arasındadır. Diğer yandan çok-fazlı HEA'lar için mikroyapı kontrolü ile ilgili birçok mühendislik çalışmaları yapılmasında alan oluşturur.

4.1. HEA'larda Faz Oluşumu ve Mikroyapılar

HEA'lar oksidasyon direncinin artmasına izin veren kompozisyonlarının esnekliği nedeniyle, yüksek sıcaklık malzemeleri için umut vermektedirler. Yavaş difüzyon kinetikleri ve yüksek sıcaklıklardaki yumuşama dirençleri de bu tip uygulamalar için avantajlar sağlar. Bununla birlikte, güncel yüksek sıcaklık malzemeleri arasında yerini alabilmesi için halen uzun bir yolu olduğu söylenebilir. HEA'ların mühendislik uygulamalarında yaygın kullanımındaki en büyük etken, büyük ölçüde istenilen faz yapısı ve özelliklerini elde etmek için bileşeni oluşturan elementlerin seçimine, mukavemet ve süneklik arasındaki değişime bağlıdır. Alaşım tasarımı, ağır ve pahalı elementleri hafif ve daha ucuz elementlerle değiştirme gibi başka özellikler de içerir [58,59]. FCC kristal yapılı HEA'lar sünek olarak bilinmekle beraber, mukavemetleri genellikle düşüktür. BCC HEA'ların ise mukavemetleri yüksektir fakat, çekme yükü sırasında oluşan kırılma süneklik beraberinde gelir. Alaşım tasarımı değerlik elektron derişimini ("Valence

Electron Concentration"-VEC) kullanılarak da düzenlenebilir. Yüksek VEC'li elementlerin alaşıma eklenmesi, FCC katı çözeltili, düşük VEC'li elementin eklenmesi BCC katı çözeltili oluşumunu destekler. Alaşım tasarımı, istenen mekanik özelliklerle göre belirlenmektedir [60]. VEC alaşımın ortalama değerlik elektronu yoğunluğu, Denklem 4.4 ile tanımlanır;

$$VEC = \sum n_i^V c_i \quad 4.4$$

Denklemde, n_i^V alaşımı oluşturan elementlin değerlik elektronları sayısını ve c_i ise ilgili elementin atom yüzdesini vermektedir. Genel olarak tek-fazlı bir HEA'da VEC değeri 6,87'den küçükse ise BCC, VEC değeri 8,0'den büyükse ise FCC kafes yapısını yeğlediği gözlemlenmiştir. Bununla birlikte, VEC kuralı yalnızca katı çözeltiler için geçerlidir. HEA'lar tek fazlı katı çözeltili oluşturabildiği gibi, intermetalik bileşikler ve hatta amorf fazlar da oluşturabilirler [61,62-64].

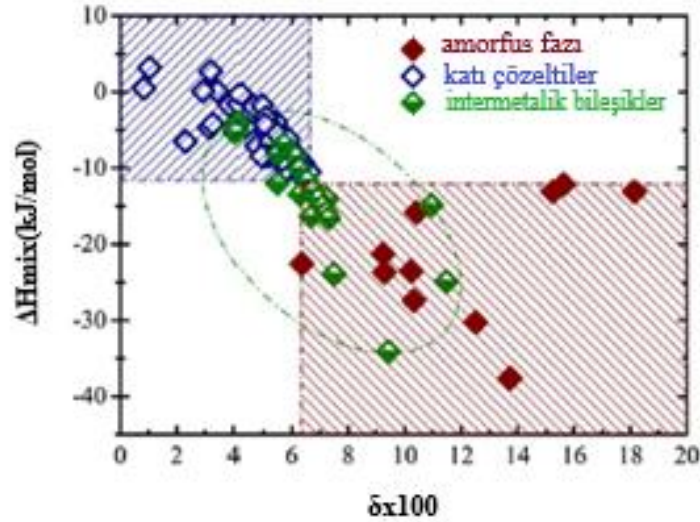
Yüksek karışma entropisinin HEA'larda katı çözeltilerin oluşumunu desteklediğini bilmemize rağmen, entropi faz oluşumuna karar veren tek baskın faktör değildir. Diğer belirgin faktörler, karışma entalpisi, atomik boyut farkı ve elektronegatifliği içerir. HEA'larda ikili katı çözeltilerden ve metalik camlardan katı çözeltili, intermetalik ve amorf fazların oluşumunu kontrol eden güncel alaşım tasarım stratejileri elde edilir. HEA'larda katı çözeltilerin oluşumunu kontrol etmek için, iki parametreden oluşan özel bir yaklaşım yaygın olarak kullanılmaktadır [65,62]. Bu amaçla kullanılan iki parametre δ Atom boyutu uyumsuzluğu, ΔH_{mix} alaşım için ortalama karışım entalpisi olmak üzere Denklem 4.5 ve Denklem 4.6'te tanımlanmıştır.

$$\delta = \sqrt{\sum_{i=1}^n (1 - r_i / \sum_{j=1}^n c_j r_j)^2} \quad 4.5$$

$$\Delta H_{mix} = \sum_{i=1, j>1}^n 4 \Delta H_{AB}^{mix} c_i c_j, \Delta H_{AB}^{mix} \quad 4.6$$

n alaşım elementlerinin sayısı, c_i i'ninci ve c_j j'ninci elementlerin atom yüzdeleri, r_i ve r_j i'ninci ve j'inci elementlerin atom yarıçapları, ve ΔH_{AB}^{mix} ikili eşit atomik AB alaşımının karışım entalpisidir. $T_m = \sum c_i T_i^m$ Ortalama ergime sıcaklığı olmak üzere $\Omega = \frac{T_m \Delta S_{mix}}{\Delta H_{mix}}$ eşitliği de çözeltilerdeki faz seçimlerini belirleyen bir diğer orandır.

$\delta \leq 6,6$ ve $\Omega \geq 1,1$ olduğu durumlarda katı çözeltiler oluşur ve ΔH_{mix} değeri genellikle $-11,6 \text{ kJ/mol} \leq \Delta H_{mix} \leq -3,2 \text{ kJ/mol}$ aralığındadır. Şekil 4.1’de, HEA’lardaki faz seçimine ilişkin iki parametreye bağlı olarak, deneysel olarak rapor edilen mevcut veriler gösterilmiştir [65].



Şekil 4.1 Yüksek entropi alaşımlarda faz seçimi [23]

Şekil 4.1’de mavi, yeşil ve kırmızı kareler sırasıyla katı çözeltiler, intermetalik bileşikler ve amorf fazları göstermektedir. İki boyutlu $\delta - \Delta H_{mix}$ grafiğinde intermetalik bileşiklerle katı çözeltilerin, aynı şekilde intermetalik bileşiklerle amorf fazların üst üste geldiği bölgeler görülmektedir. $\delta - \Delta H_{mix}$ Grafiğini kullanarak, katı çözeltiler ile intermetalik bileşiklerin bu üst üste binme durumu, fazları kesin olarak ayırt etmek olanaksız olduğundan, özellikle mekanik özellikler açısından alternatif alaşım tasarım kriterlerini kullanmak için motive eder. İntermetalik bileşikler, alaşımların güçlenmesinde ve gevrekleşmesinde kritik rol oynar [67]. Çabalar genellikle intermetalik oluşumunu önlemek, özellikle topolojik olarak kapalı-paket (TCP) fazları ve geometrik olarak kapalı-paket (GCP) fazları; örnek olarak σ fazı, R fazı, A15 fazı, μ fazı, χ fazı, Laves fazı ve η fazı. Bu fazlar genellikle istenmez, kırılabilir yapıdadırlar ve servis sırasında ortaya çıkma eğilimindedir. Yapısal olarak, TCP fazları, nispeten büyük atomlar arası mesafelerle bölünmüş, yakın paketlenmiş atom katmanları içerir. GCP ise bütün yönlerde yakın paketlenmiş atomlar içerir. Bu nedenle katı çözeltilerle intermetalik bileşikler arasında kesin bir ayırım yapabilmek hala bir zorluktur ve daha fazla dikkat gerektirir.

4.2. Genel Karakteristik Özellikleri

HEA'lar mikroyapılarını etkileyen en az dört temel unsur içerir [22,68].

4.2.1. Yüksek Entropi Etkisi

Yüksek entropi etkisi katı çözeltileri oluşturma eğilimini artırması nedeniyle en önemli etkidir. Karışım için Serbest Gibbs enerjisi $\Delta G_{mix} = \Delta H_{mix} - T\Delta S_{mix}$ şeklinde ifade edildiğinden, daha fazla sayıda elementin varlığı, özellikle yüksek sıcaklıklarda, karışım serbest enerjisini düşürebilir.

Termodinamiğin ikinci yasası gereğince, katılarda birkaç olası meta-kararlı durum olmasına rağmen, en kararlı faz en düşük karışım serbest enerjisine sahiptir. Alışmada, en düşük ergime noktasının altında, üç olası faz arasında rekabet vardır. Bu fazlar; temel fazlar, intermetalik bileşiklerin amorf fazları ve katı çözeltileridir [69]. Temel faz, metalik elementlerde katı çözeltilerine dayanır. İntermetalik bileşik özel kafes yapıları ile stokiometrik bileşimlerdir. Katı çözeltiler ise bütün elementlerin BCC, FCC veya HCP kristal yapılarında tamamen karıştığı fazlardır [70,71].

Elementel fazlar bir ana element nedeniyle küçük negatif ΔH_{mix} ve ΔS_{mix} 'e sahiptir. Bileşik fazlar düzenli yapının küçük konfigürasyon entropisine sahip olması nedeniyle büyük negatif ΔH_{mix} ve küçük ΔS_{mix} 'e sahiptir. Rasgele katı çözeltiler orta ölçekte negatif ΔH_{mix} 'e (çözeltilerinde farklı atom çiftlerinin varlığından dolayı) ve en yüksek ΔS_{mix} 'e sahiptir.

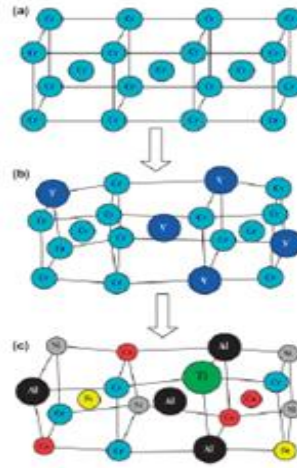
Bütün karışım sıcaklıklarının birbirinden farklı atom çiftleri için aynı olduğunu varsayarsak, daha fazla element sayısı, rasgele oluşan katı çözeltilerin düzenli konuma daha yakın ΔH_{mix} değerine izin verecektir. Yüksek ΔS_{mix} (bu durum ΔG_{mix} 'i düşürür)'den dolayı, rasgele katı çözeltiler konumu termal kararlılıkta düzenli konumdan daha elverişlidir. Gerçekte farklı atomlar için bütün karışım sıcaklıklarının eşit olduğu kesin bir doğru konum yoktur. Kısmen düzenli katı çözeltiler fazları çok bileşenli kompozisyonlara sahiptir ve denge durumunda stokiometrik bileşikler yerine belirli bir bozukluk derecesi müsaittir [72]. Bu eğilim yüksek sıcaklıklarda, $-T\Delta S_{mix}$ terimi nedeniyle daha güçlüdür.

Yüksek entropi alaşımlarda rastgele katı çözelti fazlarının kararlılığı atom büyüklüğü farklılıklarından da etkilenir. Büyük farklar ΔH_{mix} 'e ve bunun sonucu olarak ΔG_{mix} 'e gerilme enerjisi ekleyerek kafes yapısını bozar [73].

Teorik başlangıç hesaplamaları için, basit, tek-fazlı katı çözelti alaşımları dikkate alınır. Ancak pratik uygulamalar için, iki fazlı birçok HEA kullanışlıdır ve büyük potansiyele sahiptir.

4.2.2. Şiddetli Kafes Bozunma Etkisi

Eşit yüzdeli atomların oluşturduğu konsantrasyonlarda, atomlar farklı atomlarla çevrelendiğinden, matrislerden veya çözünen atomlar hakkında konuşamayız. Bu yapı farklı atom boyutlarından dolayı gerilme ve strese uğrar. Bu durum Şekil 4.2'de gösterilmiştir.



Şekil 4.2: Diyagram 5 bileşenli BCC kafesinde kafes bozulmasını göstermektedir [25, 26]

Kafes bozulması, çeşitli özellikleri etkiler ve özellikler üzerindeki termal etkiyi azaltır. Bozulan kafesteki katı çözelti sertleşmesi nedeniyle dayanıklılık ve sertlik etkili bir şekilde artar. Örneğin, literatürden [74,75] bilindiği üzere, eşit atomik BCC refrakter MoNbTaVW alaşımının sertlik değeri 5250 MPa'dır. Bu değer karışım kuralıyla elde edilen değerden 3 kat daha yüksektir. FCC malzemeler, BCC'lerden çok daha düşük katı

çözelti sertleşmesi gösterirler. Bunun nedeni, FCC kafeslerde bir atomun en yakın 12 komşusu varken, BCC'lerde bu sayı yalnızca 8'dir.

Aynı elementler için; FCC kafesleri, farklı atom çiftleri içermesi nedeniyle, BCC kafeslerinden daha düşük bozulma gerginliği ve çözelti sertleşmesine sahiptir .

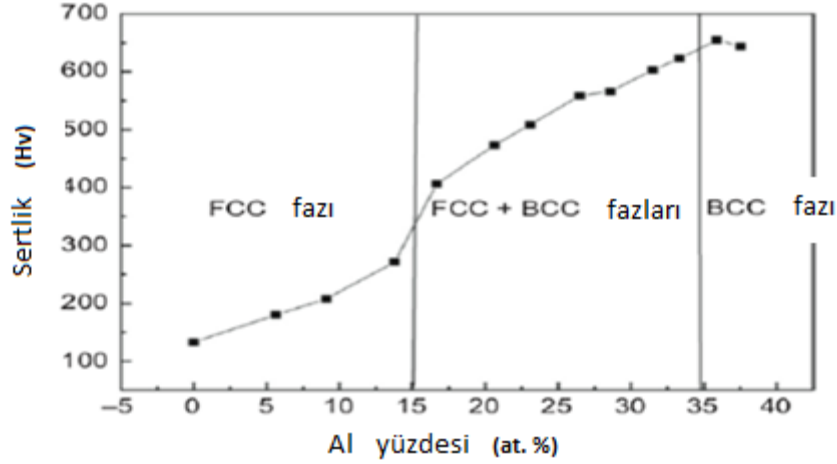
4.2.3. Yavaş Difüzyon Etkisi

Difüzyon kontrollü bir faz dönüşümünde, yeni bir faz oluşumu birçok farklı türde atomun birlikte hareket etmesini gerektirir. Bir önceki bölümde açıklandığı gibi HEA temel olarak çok sayıda rastgele ve düzenli katı çözeltiler içermektedir. Bütün çözünen matris içinde atomun difüzyonu konvansiyonel alaşımlardakinden farklı olacaktır. Tüm çözünen matristeki bir boşluk, tamamen farklı atomlarla çevrilebilir veya çekişebilir. Kafes potansiyel enerjisinin büyük dalgalanmaları nedeniyle daha yüksek aktivasyon enerjisi ve daha yavaş difüzyon beklenir [76]. Yavaş difüzyon ayrıca faz çekirdeklenmesini, faz büyümesini ve dağılımını da etkiler. HEA'lardaki yavaş kinetik, aşırı doymuş duruma ve nano-çökeltilere izin verir [77,78,79]. Bu nedenle HEA'lar kaplamalarda difüzyon bariyerleri olarak da kullanılabilir [80-82].

4.2.4. Kokteyl Etkisi

Bir HEA'da kompozisyona ve işleme bağlı olarak, bir iki veya daha fazla faz bulabiliriz. Örneğin özellikleri var olan fazlar, fazların boyutları, sınırlar, her bir fazın dağılımı ve özellikleri ile belirlenir. Dahası, her faz atomik ölçekli kompozitler olarak kabul edilebilir. Bu nedenle ortalama davranışın tahmini o kadar da kolay değildir. Kompozitlerin özellikleri sadece karışım kurallarından gelmez, ayrıca karşılıklı etkileşimler de etkili olur.

Yeh kokteyl etkisini, $Al_xCoCrCuFe$ alaşımında, karışımın Al yüzdesi arttırılmasının FCC yapıdan BCC yapıya bir faz transformasyonuna öncülük ettiğini göstererek açıklamıştır. Bu değişim Şekil 4.4'te gösterilmiştir



Şekil 4.3 $Al_xCoCrCuFe$ alaşımında elementlerin etkileşimi ile kokteyl etkisinin gösterimi- makale [87]

4.3. Yüksek Entropi Alaşımların Mekanik Özellikleri

HEA'lar üzerinde araştırma yapmak için en büyük itici güç ve motivasyonlardan biri, mevcut alaşımlara kıyasla üstün mekanik özelliklerinin olmasıdır. Belki de bunlardan en belirgin olanı süneklik mukavemetidir. Daha güçlü bir alaşım üretmek kolay görünse de mevcut alaşımlarla kıyaslandığında, istenen sünekliği muhafaza etmek zordur. Yapısal malzemelerde süneklik, hasar toleransı ve güvenlik için önemlidir.

HEA'ların mekanik üstünlüğe yol açabilecek bir yönü, katı çözeltili güçlendirmesi ile elde edilen özelliklerdir. Bu fenomen, katı çözeltili içindeki benzer olmayan atomların karışımına özgüdür ve solüsyon atomunun çözeltili içindeki çözeltili atomunun yerinden çıkmasına karşı yapılan engellerin bir sonucu olarak ortaya çıkar [88]. Çözücü elemanın konsantrasyonu arttıkça, çözücü-çözünen ilişkisi kaybolur ve her iki element de çözülmüş atom olarak kabul edilebilir. HEA'larda bu güçlendirici etkinin ikili alaşımlara kıyasla daha belirgin olduğu rapor edilmiştir [89].

Geleneksel alaşımlar göz önüne alındığında, en yaygın güçlendirme yöntemi çökelti güçlendirmesidir [90]. Örnek olarak, alüminyum (Al) alaşımları Al-Mg- (Cu, Zn) veya Al-Cu bileşiklerine dayanır. Çelikler perlit ve sementit, süper alaşımlar ise Ni_3Al bazlıdır. Bu yöntem, parçacık boşluğu ile alaşım kuvveti arasında ters ilişki olduğu için mikro yapı kontrolünü gerektirir. Prensipte olarak, HEA'nın katı çözeltili kuvvetlendirmesi, çökelti

kuvvetlendirmesi ile gerçekleştirilir (bu, yer değiştirme hareketi için çoklu kayma sistemleri sağlar) [91].

4.4. Refrakter Yüksek Entropi Alaşımlar (RHEA)

Refrakter HEA (RHEA)'ların tanımı temel olarak refrakter metallere ve oluşan ve yüksek ısı direnci gösteren alaşımlar şeklindedir. Refrakter metaller, Şekil 4.5'te koyu mavi ile gösterilmiştir ve açık mavi ile gösterilen metaller ise daha geniş tanımlı refrakter metallere dir. İki refrakter HEA Senkov [62] tarafından incelenmiştir ve kompozisyonları $Mo_{25}Nb_{25}Ta_{25}W_{25}$ ve $Mo_{20}Nb_{20}Ta_{20}V_{20}W_{20}$ 'dir. İlk alaşım 5 element içermemesine rağmen yüksek karışım entropisi nedeniyle HEA kabul edilmiştir. Bu alaşımlar umut verici Vicker sertlik değerlerine (4,46 Gpa ve 5,42GPa) sahiptir.

1																	18
H	2											13	14	15	16	17	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo
			3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17
			* La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu														
			** Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr														
			<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="width: 15px; height: 15px; background-color: #0056b3; margin-right: 5px;"></div> Refrakter metaller </div> <div style="display: flex; align-items: center; margin-top: 5px;"> <div style="width: 15px; height: 15px; background-color: #a6c9ec; margin-right: 5px;"></div> Refrakter metallere in daha geniş tanımı </div>														

Şekil 4.4 Refrakter metallere in periyodik cetvelde gösterimi

Isıya dayanıklı metaller, tungsten (W), molibden (Mo), tantal (Ta) ve niyobyum (Nb) ve bu metallere in oluşan, yüksek sıcaklık ve yüksek kuvvetli uygulamalar için kritik alaşımlar, ısı-rezistans alaşımlar olarak bilinir. Titanyum (Ti), zirkonyum (Zr), hafniyum (Hf), vanadyum (V), krom (Cr), rubidyum (Ru), osmiyum (Os), rodyum (Rh) ve iridyum (Ir) atomlarını içeren daha geniş ısıya dayanıklı metaller tanımı da vardır. Bu geniş listedeki metaller yüksek erime sıcaklıklarına sahip olmalarına rağmen ana refrakter

metallerinki kadar yüksek değildir. Refrakter metallerin kristal yapısı, periyodik tablodaki konumlarıyla ilgilidir ve elektronik yapılarıyla belirlenir. 4. Grup (Ti, Zr, Hf) düşük sıcaklıkta polimorfik, altıgen (HCP) yapıdadır ve yüksek sıcaklıkta BCC yapıda kararlıdır. 5. Grup (V, Nb, Ta) ve 6. Grup (Cr, Mo, W) monomorfik ve BCC kristal yapıda iken renyum (Re), rubidyum (Ru), osmiyum (Os) HCP yapıdadır [93]. Refrakter metallerin erime sıcaklığı ve öz kütleleri Çizelge 4.2’de gösterilmiştir. Titanyum (Ti) birim öz kütle başına en hafif metal iken iridyum (Ir) en ağır elementtir.

Çizelge 4.2 Refrakter elementlerin erime sıcaklıkları ve öz kütleleri [94]

Element	Erime sıcaklığı (°C)	P (g/cm ³)
Titanyum (Ti)	1668	4.507
Zirkonyum (Zr)	1855	6.511
Hafniyum (Hf)	2233	13.31
Vanadyum (V)	1910	6.11
Niyobyum (Nb)	2477	8.57
Tantal (Ta)	3017	16.65
Krom (Cr)	1907	7.14
Molibden (Mo)	2623	10.28
Tungsten (W)	3422	19.25
Renyum (Re)	3186	21.02
Rutenyum (Rh)	2334	12.37
Osmiyum (Os)	3033	22.61
Rodyum (Rh)	1964	12.45
İridyum (Ir)	2466	22.65

Yapısal uygulamalar için yüksek sıcaklık malzeme sistemleri geliştirirken, erime sıcaklığı, öz kütle, süneklik, sürünme ve oksitlenme direnci gibi ana unsurlar göz önüne alınmalıdır. HEA’lar yüksek sıcaklıklardaki yumuşama direnci ve yavaş difüzyon kinetikleri ile yeni tip yüksek sıcaklık alaşımları olarak düşünülebilir. Refrakter yüksek entropi alaşımlar yüksek sıcaklık uygulamalarındaki potansiyelleri ile 4.Grup (Ti, Zr, Hf), 5.Grup (V, Nb, Ta) ve 6.Grup (Cr, Mo, W) metallerini temel alır. Şimdiye kadarki RHEA’ların 3D geçiş metalleriyle karşılaştırma çalışmaları sınırlı sayıdadır. RHEA’ların mikro yapıları genellikle tek BCC faz veya BCC+Laves fazlarındadır (Cr ve V da göz önüne alındığında). Rapor edilen RHEA’ların mekanik özelliklerinin çoğu sertlik ve

sıkıştırma testi sonuçları içermektedir ve gerginlik testi verileri sınırlıdır. Üretilmiş bazı RHEA'ların sonuçları Çizelge 4.3'te gösterilmiştir.

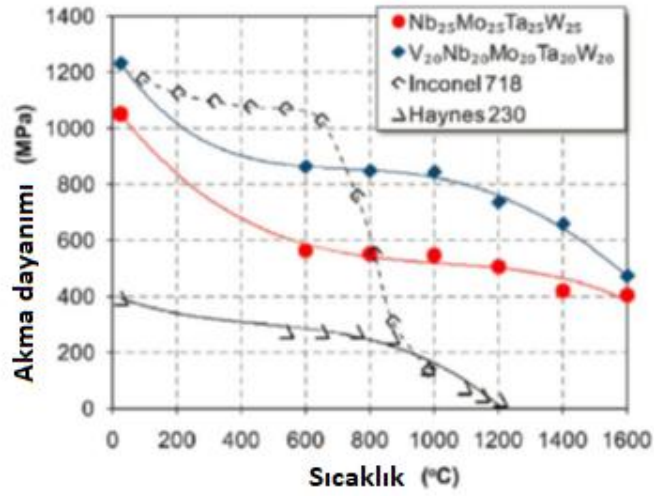
Çizelge 4.3 Üretilmiş refrakter yüksek-entropi alaşımların özellikleri

Alaşım	Faz Seçimi	P(g/)	σ (MPa)	ε (%)
$Al_{0,25}NbTaTiV$	BCC	8.8	1330	>50
$Al_{0,5}NbTaTiV$	BCC	8.46	1012	>50
$AlNbTaTiV$	BCC	7.89	991	>50
$CrHfNbTiZr$	BCC+laves	8.24	1375	2.8
$HfNbTiVZr$	BCC+bilinmeyen	8.06	1170	30
$MoNbTaVW$	BCC	12.36	1246	1.7
$MoNbTaW$	BCC	13.75	1058	2.6
$NbTaTiV$	BCC	9.17	1092	>50

$Al_xNbTaTiV$ ($x = 0,25-1$ aralığında) ve $HfNbTiVZr$ oda sıcaklığında, yeterli sıkıştırma sünekliği ve gerilme esnekliği göstermiştir. Ancak, kırılma testlerinde bölünme yetmezliği görülmüş ve sünek kırığı bulgusuna rastlanmadı. $CrHfNbTiZr$ yüksek sünme dayanımına (σ_y) sahiptir, ancak oda sıcaklığında kırılğan bir malzeme olarak davranır ve mikro yapısal kontrol ve kompozisyon değişimleri ile iyileştirmeler gerektirir. Senkov eşit atomik yüzdelerde $MoNbTaVW$ ve $MoNbTaW$ alaşımlarını vakum arc-melting yöntemi ile üretti [62]. Döküm sırasında, bu alaşımlar tek fazlı bcc ve dendritik yapıya sahiptir. Bu alaşımların bir diğer önemli özelliği 800 °C'nin üzerinde akma dayanımlarının Haynes230[95], Inconel718[96] gibi Nikel-bazlı süper alaşımlardan daha iyi performans göstermesidir. Şekil 4.6'da bu karşılaştırma gösterilmiştir.

Maksimum 1600 °C'de $MoNbTaW$ alaşımı için akma dayanımı 405 MPa'ya düşerken, $MoNbTaVW$ alaşımı için 470 MPa'a düşmüştür. 600 °C ve 1000 °C arasında iki alaşım da sıkıştırma gerginliği %10-15'in altında plastik akış göstermiştir. Süper alaşımlara kıyasla yüksek erime noktaları ve yavaş difüzyon kinetikleri sebebiyle, yüksek sıcaklık yumuşamasına daha dirençlidirler. Oda sıcaklığında yumuşaklığa sahip olmayışları ve kırılğan oluşları bu alaşımlar için endişe uyandırıcıdır. Oda sıcaklığında, sıkıştırma

altında MoNbTaVW ve MoNbTaW için kırılma %1,7 ve %2,6 uzama miktarlarında gerçekleşmektedir. Bu oran yapısal uygulamalar için kabul edilebilir değildir.



Şekil 4.5 MoNbTaW ve MoNbTaVW refrakter yüksek-entropi alaşımlarının ve Inconel718 ve Haynes 230 nikel-bazlı süper-alaşımın sıcaklığa göre akma dayanımı değişim grafiği [97]

Rapor edilmiş, oda sıcaklığında gerilme yumuşaklığına sahip az sayıda RHEA dört elementten oluşan HfNbTiZr [98], $Ta_xHfZrTi$ [99] ve eşit atomik yapıdaki HfNbTaTiZr [100]'dir. Bu nedenle RHEA'ların potansiyelini daha fazla araştırmak için yeni sünek RHEA'lar geliştirmek önemlidir. Sünekliği kontrol eden mekanizmalarla, yüksek sıcaklıklarda korozyon ve oksitlenme direnci yüksek RHEA'ları geliştirmek, bilimsel anlayış elde etmek açısından da önemlidir.

5. RADYASYON HASARI

Kinetik enerjileri geleneksel termal enerjilerin (ör. $E_{kin} > 1$ ev) açıkça üstünde olan parçacıklar kozmik radyasyon veya bozunum tepkimeleri sonucu doğada mevcuttur. Fakat günümüzde temel pratik ve araştırma uygulamalarında insan eliyle de yaygın olarak üretilmektedir. Hızlandırıcılar, parçacık fiziği laboratuvarları, silikon yonga üretiminde iyon yerleştirme ("*implementation*") faaliyetleri yüksek enerjili parçacıkların madde üzerindeki etkilerini anlamak açısından önemlidir. Ayrıca şu anda nükleer fisyon reaktörlerinde uranyum çekirdeğinin nötronlar ile fisyonunundan üretilen enerji, dünyadaki elektrik üretiminin %13'ünü sağlamaktadır. Bu sebeple nötron ışınlanmasından oluşan ve malzemelerin bozulmasına neden olan radyasyon hasarı önemli bir faktördür. [120]

Fisyon ürünleri ve nötronlar büyük ölçekli radyasyon hasarlarına neden olur. Radyasyonun diğer türleri yeterli enerjiye sahip olmaması ve yeterli yoğunlukta üretilmemesinden dolayı önemli radyasyon hasarı oluşturmaz. Nükleer reaktör senaryolarında, ışınlama nedeniyle katı malzemelerde üretilen, gözlemlenebilir, mikroskobik kusurlar 'radyasyon hasarı' olarak adlandırılır. Bu kusurlar 'radyasyon etkileri' olarak adlandırılan fiziksel, mekanik ve kimyasal özelliklerin ve malzemenin makroskobik özelliklerinin değişimi ile sonuçlanır. [121]

Radyasyon hasarı ve radyasyon etkileri karakteristik zaman ölçekleriyle ayırt edilebilirler. Nükleer ışınlamayla üretilen hasar üretim mekanizmaları çoğu durum için birincil ve ikincil hasar olmak üzere iki zaman kategorisine ayrılabilir. Birincil hasar, parçacık atom etkileşiminden hemen sonra oluşur ve atomları termodinamik dengeden uzaklaştıracak güçlü malzeme ısınmasına neden olur. Nümerik bilgisayar simülasyonları ve deneysel çalışma balistik atom çarpışma süreçleri için zaman ölçeğinin 0,1-1 ps aralığında ve çarpışmaların termalleşmesi için geçen sürenin 1-10 ps olduğunu göstermiştir. Sonraki süreçlerde, radyasyonla oluşmuş noktasal kusurların katı içerisinde difüzyonla yayılması milisaniyeler alabilir ve metal içindeki boşlukların çekirdekleşmesi (*nucleation*), büyümesi ve yığın haline gelmesi gibi çok daha uzun zaman ölçeğinde termal olarak aktive edilmiş hasar prosesleri meydana gelir. Bunlar da ikincil hasarı oluşturur [121, 122, 123].

Parçacıklar ile kafes atomlarının etkileşimini içeren, birincil birincil hasar üreten süreçler termal enerjiden ($\sim kT$) fazladır. Sonuç olarak katının sıcaklığı radyasyon hasarı analizinde önemli değildir. Radyasyon etkileri altında yer alan prosesler ise, nokta kusurlar, ana kristal ile termal dengede olan kümeler ile ilgilidir. Bu nedenle bu tür işlemler katı sıcaklığına Boltzmann faktörü $\exp(-E/kT)$ ile bağlıdır. Denklemden E, termodinamik işlemin veya göç olayının karakteristik enerjisidir.

5.1. Radyasyonun Malzemeler Üzerindeki Etkileri

Güçteki artış ve süneklikteki azalma, boşluk oluşumunun sıkça görülen etkilerinden bazılarıdır ve reaktör bileşenlerinin, özellikle yakıt zarfı gibi kor içi bileşenlerin, etkin ömrünü olumsuz etkiler. Boşluklar helyum gazı ("*transmütasyon*") tepkimeleri tarafından oluşturulan) içerir, fakat genellikle "baloncuk" olarak adlandırılacak miktarda içermezler. Malzeme içerisindeki boşluk ve baloncukların genellikle birbirleriyle ilişkileri çok kuvvetlidir. Boşluk oluşumu sadece paslanmaz çeliğe özgü değildir. Nitekim, tüm metaller ve alaşımların $0,3-0,55 \cdot T_m$ (T_m malzemenin Kelvin cinsinden ergime sıcaklığı) homolog sıcaklık aralığında boşluk oluşumu ile şişer. Malzeme kompozisyonuna, helyum içeriğine, sıcaklığa bağlı boşluk şişme davranışında değişiklik gözlemlenebilir.

Hızlı nötronlar kafes atomları ile etkileşimleri sonucu, boşluk-arayer atomu çiftleri gibi kusurları kolayca ortaya çıkarma eğilimindedir. Bu kusurların çoğu birbiriyle birleşir veya oluşumlarını takiben çukurlara ("*sink*") göç ederler. Kusurlar ("*defects*") dinamik dengede kalır ve termal dengeden daha fazla olan kararlı durum yoğunluklarını korurlar. Boşluk şişmesi oluşumu için gerekli koşullar vardır ve bunlar şu şekilde sıralanabilir; boşluklar ve arayer atomları katı içerisinde hareketli olmalı, en az bir çukur tipi boşluklar ve arayer atomları arasında farklılık göstermelidir ve diğer kusur tiplerine göre daha fazla etkileşime girmelidir. Son olarak boşlukların doygunluğu, boşlukların ve yer değiştirme döngülerinin çekirdeklenip büyümelerini mümkün kılacak kadar geniş olmalıdır. Helyum gibi çözünmeyen gazların oluşumu, embriyo boşlukların dengelenmesini ve boşluk döngülerinin çökmelerini önler.

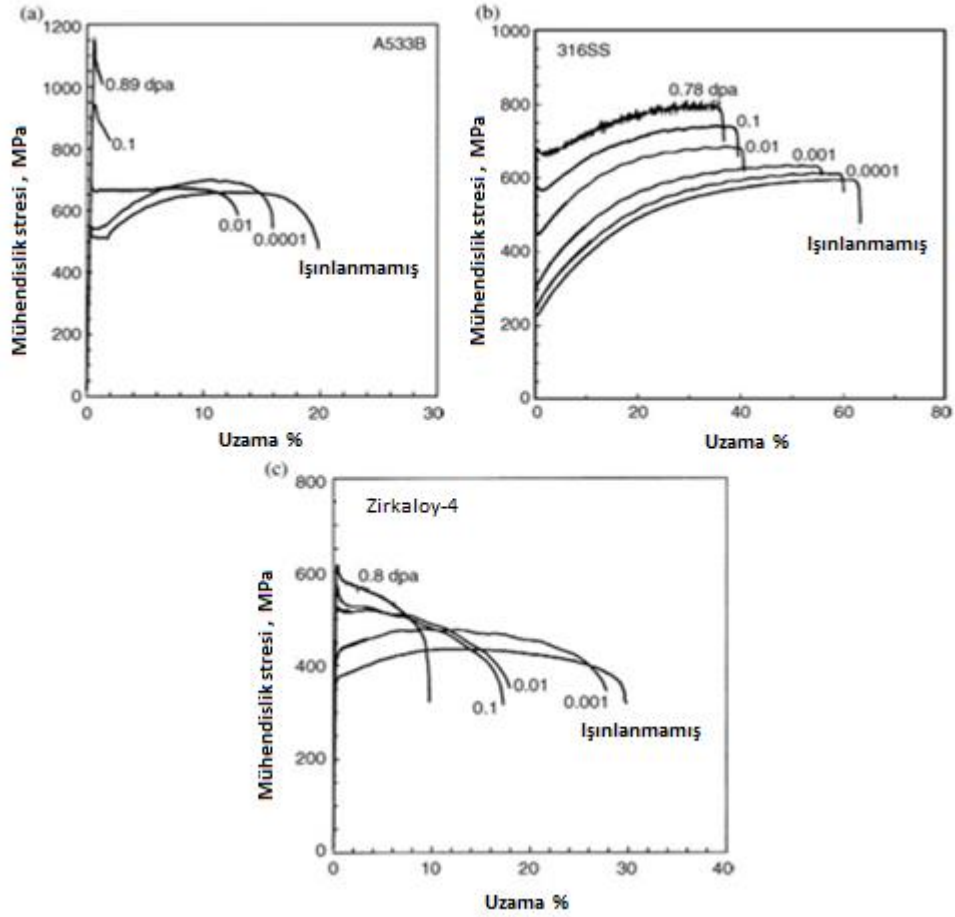
Diğer bir radyasyon etkisi 'Radyasyona Bağlı Ayrışma (RIS)' (Radiation-Induced Segregation), alaşım elementlerinin hızlı parçacık ışınması altında ayrılmasını ("*segregation*") içerir. Hızlı parçacık ışınması sırasında noktasal kusurların (boşluklar ve

arayen atomları) önemli difüzyon akışı, kusurların yakınlarında, yüzeylerde veya tane sınırlarında (“*grain boundary*”) gözlenir. Bir alaşımdaki farklı atomik türler noktasal kusur akılarıyla ile kusur boşluklarına doğru farklı oranlarda göç ederler. Bu nedenle, RIS lokal bölgelerdeki kompozisyonlarda, örnek olarak tane sınırlarında, önemli değişikliklere neden olabilir ve bu malzemenin makroskopik özellikleri açısından önem arz eder. Krom içeren östenitik çelikte veya nikel-bazlı süper-alaşımlarda RIS’i anlamak, ticari güç reaktörlerinde yaygın kullanımı ve yeni nesil reaktörler için potansiyel aday malzeme olmaları nedeniyle, özellikle önemlidir. RIS, kromun tane sınırlarından ayrılmasıyla, ışınlamaya bağlı stres korozyonuna neden olabilir. Düşük sıcaklıklarda, kusur konsantrasyonu artar ve boşluklara gitmek yerine, noktasal kusurlar yeniden birleşmeye eğilimlidir. Yüksek sıcaklıklarda, termal difüzyon hâkim olur ve kompozisyon dengeye gelir veya homojen hale gelir. Orta düzey sıcaklıklarda, RIS, ters Kirkedall etkisi olarak bilinen işlemin çalışması nedeniyle akut hale gelir [121].

Orta sıcaklıklarda ve 10 DPA’dan daha yüksek radyasyon dozlarında, RIS etkisi, aslında, fazların çökmesine veya dağılmasına neden olan faz kararsızlığına neden olur. Ni-Si sistemlerinde, atom yarıçapı 110 pm olan ve nikel (Ni) oranla küçük boyutlu çözünen silisyum (Si) boşlukları zenginleştirir ve koşullar uygun olduğunda, silisyumun nikel içerisindeki çözünürlüğü aşıldığında yeni Ni_3Si (γ -tip) fazı oluşur.

Nükleer reaktör bileşenlerinin mekanik özellikleri çoğunlukla değişen yükleme koşulları, sıcaklıklar ve ışınlama rejimleri altında değişkenlik gösterir.

Metal ve alaşımların mukavemeti ise, süneklikteki ve gerginlikteki sertlik üssünün azalması ile birlikte artar. Örnek olarak Zircaloy-2’nin gerginlik sertlik üssü (“*strain hardening exponent*”) tavlanmış koşulda 0,1-0,15 aralığında değişir. Ancak, ışınlamadan sonra, üstel radyasyon hasarının derecesine göre 0,02-0,01 aralığında değişebilir ve bu durum alaşımın düzgün uzamasını etkiler. Işınlanmış malzemelerde radyasyon sertleşmesi çok sayıda kusur oluşumundan dolayı oluşabilir; (i) nokta kusurlar (boşluklar ve kendiliğinden-geçişler), (ii) safsızlık atomları, (iii) küçük hata kümeleri, (iv) çıkık döngüler, (v) çıkık hatlar (“*dislocation lines*”), (vi) oyuklar (boşluklar/baloncuklar), ve (vii) çökeltiler. Genellikle, radyasyon sertleşmesinin etkileri $0,4 \cdot T_m$ ’den düşük sıcaklıklarda (düzleme etkilerinin görüldüğü) ve radyasyon hasarının $0,1 \cdot DPA$ ’dan yüksek olduğu koşullarda görülür. Nötron ışınlamının gerilme mukavemeti üzerindeki etkisine dair bir örnek ve süneklik özellikleri Şekil 5.1’de gösterilmektedir.



Şekil 5.1 Nötron ışınımının gerilme mukavemeti üzerine etkisi [126]

Yapısal malzemeler veya yük taşıyan herhangi bir nükleer reaktör bileşeni için süneklik önemli bir özelliktir. Radyasyon sertleşmesi çeşitli malzemelerde genellikle radyasyon gevrekliğine yol açar.

Radyasyon etkilerine yol açan diğer önemli neden helyum gazı östenitik çeliklerde ve diğer malzemelerde bileşendeki elementlerin tepkimeleri sonucunda üretilir. Bu durum yüksek sıcaklıkta tavlama ile ortadan kaldırılamayan kırılganlığa yol açabilir. Helyum pratikte metallerde çözünmez ve bu nedenle üretiminden sonra özellikle helyum atomları sıcaklığın yeterli olduğu durumlarda ($>0.5 \cdot T_m$) kabarcıklara çökme eğilimindedir. Helyum ışınlanmış alaşımlarda keskin sertleşme (taneler arası çatlama) üretebilir, yüksek sıcaklıklarda akma dayanımı geri kazanılsa bile, süneklik asla geri kazanılmaz. Helyum gevrekleşmesinin derecesi hızlı nötron akı birikimine, alaşım bileşimine ve sıcaklığa bağlıdır [124].

Sürünme (“*Irradiation creep*”), zamana bağlı, termal olarak aktive olan plastik deformasyon işlemidir. Genellikle stres altında yüksek sıcaklıklarda ($>0,4 \cdot T_m$) görülür. Nokta kusurların oluşumu ışınlama sürünmesi sürecinin kaynağıdır.

Hesaplamalar; boşluk (“*vacancy*”)-arayer atomu (“*interstitial*”) çiftlerinin, ışınlanmış malzemenin hacmi teorik olarak 1,5 kat artıracığından, önemli ölçüde değişime neden olduğunu belirtmektedir. Ancak deneysel gözlemler öz kütlede (Frenkel çiftlerinin oluşumu ile azalması gereken) değişimin çok az veya hiç olmadığını göstermektedir. (Boşlukların/baloncukların yaratılması yoluyla hacim artışının gerçekleştiği radyasyon şişme rejimi hariç). Arayer atomları yüksek hareketlilikleri nedeniyle dağılırlar ve tuzağa düşer veya yok olurlar. Bu da oda sıcaklığına yakın veya daha düşük sıcaklıklarda metallerin/alaşımların yoğunluğunda bir değişiklik görmeyeceğimiz anlamına gelir. Refrakter metaller gibi yüksek erime sıcaklığına sahip metallerde istisnalar görülmüştür. Bu gibi durumlarda, daha düşük sıcaklıklarda, arayer atomlarının o kadar hareketli olmaması, hacimde ve buna bağlı olarak yoğunlukta azalmayla sonuçlanır.

Çeşitli teorik hesaplamalardan, ışınlama sırasında oluşan noktasal kusurların elastik sabitleri (elastik modül ve kayma modülü) etkileyebileceği not edildi. Arayer atomlarının en büyük etkiye sahip olduğu gözlemlendi. Deneysel sonuçlar da fazla değişiklik göstermemiştir. Ayrıca, nokta kusur difüzyonu ve yok etmenin (“*annihilation*”) daha az etkisi olmuştur. Daha yüksek akıda, bir miktar etki gösterme eğilimindedir. Ancak, kusurlara duyarsız özelliklerden, elastik sabitler mikro yapıdaki değişimlerle önemli ölçüde değişmez.

Isı iletkenliği, ısıl genleşme, elastik sabitler, yoğunluk gibi fiziksel özellikler nükleer uygulamalar için ilgi konusudur. Bu nedenle, fiziksel özellikler üzerinde ışınlama etkilerini anlamak önemlidir. Termal iletkenlik yakıt zarf malzemelerinde, ısının yakıttan soğutucuya aktarılması için, çok önemli bir özelliktir. Teori, ışınlanan malzemelerde fonon saçılımının artması nedeniyle termal iletkenlikte azalma beklendiğini göstermektedir. Ancak, gerçek reaktör çalışma koşullarında söz konusu değişiklikler önemsiz olmuştur.

Noktasal kusurlar, deneysel olarak da onaylandığı üzere, termal genleşme katsayısını değiştirme eğiliminde değildir. Bununla birlikte nükleer reaktörlerdeki kimyasal ortam, çoğu aktif metaller ve alaşımlar için elektrokimyasal olarak serttir. Ayrıca kimyasalların toplanmasına izin veren yarıkların varlığı da çatlak korozyonlarına yol açabilir [125].

5.2 Parçacık-Katı Etkileşimleri

Yüksek enerjili parçacıkların (nötron, proton, elektron) metallere içerisindeki atomlarla etkileşimlerini belirlerken kullanılan miktar, akı yoğunluğu olarak da ifade edilen, Denklem 5.2’de de belirtilen integral parçacık akısıdır. Akı birim zamanda (saniye başına), birim alandan (1cm^2 kesit alanından) geçen, ışınımın yayılma doğrultusuna dik geçen parçacık sayısıdır. Akı yoğunluğu, E ile E+dE enerji aralığındaki parçacıkların akı yoğunluğunu belirtir.

$$\phi(E_a, E_b) = \int_{E_a}^{E_b} \varphi(E) dE \quad 5.2$$

$\varphi(E)$ E enerjisine bağlı akı yoğunluk spektrumunu, E_a ve E_b enerji aralığının limitlerini belirtir. Etkiler genellikle belirli enerji aralıkları için çalışılır.

Radyasyon hasarı belirlenmesinde kullanılan diğer bir büyüklük ise Denklem 5.3’de verilen ve radyasyonun zaman etkisini tanımlayan ‘nötron akısının zamana göre integrali (“fluence”)' dir.

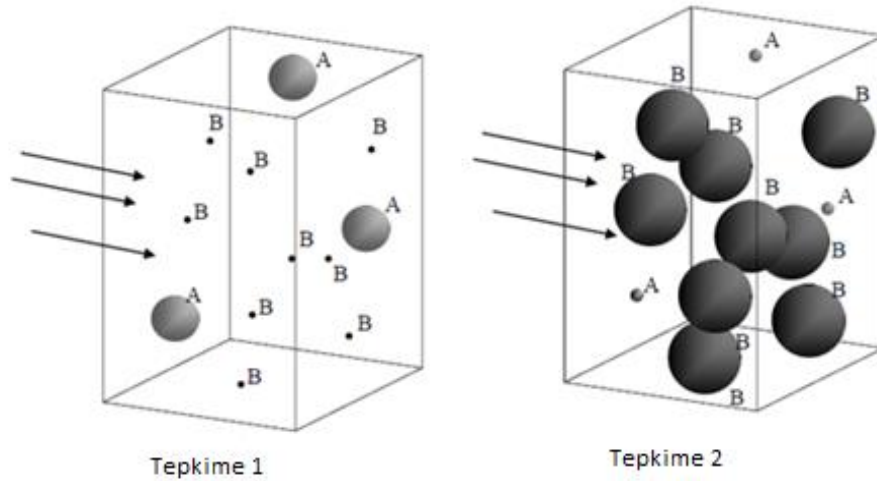
$$\Phi = \int_0^{t_r} \phi(t) dt = \int_0^{t_r} \int_{E_d}^{\infty} \varphi(E, t) dE dt \quad 5.3$$

E_d Etkileşim için eşik enerjisi, ϕ yer değiştirme akısıdır. Genel olarak akı zamanın fonksiyonudur. $\varphi(E, t)$ Nötron enerji spektrumunun sabit olduğu kabul edilirse, radyasyonun malzeme üzerindeki toplam etkisi t_r periyodu boyunca akının zamana göre integrali ile Φ (m^{-2}) verilir.

Radyasyon parçacıkları ile malzemenin etkileşim olasılığını ifade eden bir diğer parametre ise tesir-kesitidir. Tesir-kesitleri ışınlanmış atomların ve radyasyonun türüne bağlıdır. Enerjinin fonksiyonudur (enerji bağıllığının monoton veya sürekli olması gerekmez). Genel olarak her etkileşim (elastik veya inelastik çarpışma, atom elektronlarının uyarılması, iyonlaşma, nükleer tepkimeler, vb.) için tesir-kesitleri belirlenmiştir.

Parçacık ve ışınlanan malzemenin atomu arasındaki etkileşme olasılığı etkileşim tipinin diferansiyel tesir kesitiyle belirlenir. Örnek olarak $\sigma(\Theta)$, Θ saçılma açısı için tesir kesiti olarak tanımlanırsa, bu tesir-kesiti ve kinematik bağıntılar, saçılan parçacıklar, için

verilen tepkimeye göre saçılma açıları için bir dağılım belirtir. Ek olarak, $\sigma(\Theta)$ tesir kesiti alan ve açı büyüklükleriyle, enerjinin $\sigma(E)$ veya enerji ve açının birlikte bir fonksiyonu olarak $\sigma(\Theta, E)$ tanımlanabilir. Nicelik metrekare boyutundadır ve $10^{-28}m^2(\text{barn})$ biriminde tanımlanır. Mikroskobik tesir-kesiti tepkime hızlarının deneysel ölçümünden türetilir ve tepkime oranının yüksek veya düşük olmasına bağlı olarak değişir. Belirli bir atom yoğunluğuna sahip bir katıya parçacık akışı verildiğinde, tepkime olasılığı, belirli parçacık büyüklüğü ile artar. Bu durum Şekil 5.2’de gösterilmiştir. Katı içerisinde iki çeşit atom bulunmaktadır: atom A tepkime 1 için atom B’den daha büyük tepkime oranına sahiptir, bu sebeple tepkime 1 dikkate alındığında oldukça büyük görünmektedir. Tam tersi olarak, tepkime 2 için, atom B çok daha büyük tesir kesitine sahiptir ve tepkime 2 düşünüldüğünde bu atomlar daha büyük görünmektedir.



Şekil 5.2 Tesir-kesiti konseptinin şematik gösterimi [128]

Makroskopik tesir-kesitine karşılık gelen Σ ise verilen atom grubu ile ilgili olup, birim hacim başına hedef atom sayısı N ve mikroskobik tesir-kesiti σ çarpımı ile elde edilir. Değişken m^{-1} boyutlarındadır ve parçacığın malzeme içerisindeki ortalama serbest yolu (mean free path) ile ters orantılıdır. Çok bileşenli malzemelerde, makroskopik tesir kesiti her bir bileşenin katkısının toplamı ile hesaplanır [127]. Makroskopik tesir kesitinin parçacık akışı ile çarpımı sonucu tepkime hızı yoğunluğu $RR = \Sigma\phi$ (tepkime. $s^{-1}.cm^{-3}$) elde edilir.

Radyasyon hasarı saçılmaları için, kafes atomlarının yer değiştirmesine neden olan işlem önemlidir. Yer-değiştirme tesir-kesiti olarak tanımlanan $\sigma_D(E)$ sadece yer değiştirme eşik

enerjisinden (E_d) yüksek enerji transferi gerçekleşen etkileşimleri içerir. Reaktör radyasyonu için en basit varsayım, sadece elastik saçılmanın etkisini içerir. İnelastik saçılmanın etkisi ayrıca hesaplanmalıdır. Bununla birlikte reaktör korundaki yapısal bileşenlerin yer değiştirme hasarına en büyük katkı, hızlı nötronlardan gelmektedir. Hızlı nötronlar, katı atomlarıyla elastik saçılma ($\sum_k = \sum_s$) yapmakta, birincil çarpma atomlarının (kafes içinde) dağılmasına neden olmaktadır. Reaktör içindeki nötron akısının enerji spektrumu $\varphi(E)$ termal, epitermal ve hızlı olmak üzere genellikle 3 grupta incelenir. Termal nötronlar 0-1 ev aralığında, epitermal nötronlar genellikle 1 eV - 0,1 MeV aralığında, hızlı nötronlar ise 0,1 MeV- 20 MeV aralığında enerjiye sahiptir.

5.2.2. Nötronların Madde ile Etkileşimi

Nötron akısı katı içerisinden geçerken, hızlı nötronlar elastik veya inelastik saçılma yaparlar, termal nötronlar ise nükleer tepkimelere sebep olurlar. Bu tepkimelerin hemen hepsi malzeme üzerinde enerji birikimine yol açar.

5.2.2.1. Elastik Saçılma

Elastik saçılmada etkileşen parçacıkların (nötron ve çekirdek) kinetik enerjilerinin toplamı korunur. Elastik saçılma iki-gövde etkileşimidir ve kinematikler momentumun ve toplam enerjinin korunumu ile sınırlandırılmıştır. Nötronun çarpışma öncesi ve sonrası yönleri arasındaki açı genellikle Θ ve bu açının kosinüsü, $\mu = \cos \Theta$ ile gösterilir.

Etkileşen nötron ve çekirdeğin hızları, kütle merkezinde tanımlandığında problem büyük ölçüde kolaylaşır. Kütle merkezinde çarpışma öncesi ve sonrası net momentum sıfıra eşittir. [129]

5.2.2.2. İnelastik Saçılma

Elastik olmayan saçılma, bir nötronun maruz kalabileceği diğer bir saçılma türüdür, ancak bu durumda tepkimeye giren çekirdek ve nötronun kinetik enerjilerinin toplamı artık korunmaz. Tepkime öncesi kinetik enerjinin bir kısmı, hedef çekirdeğin iç enerjisine aktarılır. Bu enerji, Q , tipik olarak nötron ve hedef çekirdeğe enerji verilen tepkimeler için pozitif olarak tanımlanır. Örnek olarak parçacıkların tepkimeden sonraki toplam enerjisi tepkimeden önceki enerjilerinin toplamından büyük ise Q pozitifdir. Bu nedenle Q enerji değerleri elastik olmayan saçılmalar için her zaman iç durumda kaybedildiğinden

negatiftir. Nötron-çekirdek çarpışmalarında, eğer nötron yeterli enerjiye sahip ise hedef çekirdek zemin durumundan daha yüksek bir enerji seviyesine uyarılabilir. Uyarılan çekirdek genellikle uzun yarılanma ömürlerine sahip değildir ve çekirdek zemin durumuna tekrar döndüğünde bir gama ışını yayılır. Bu tarz tepkimeye, uyarılmış enerji seviyesi hedef çekirdek tarafından işgal edildiğinden, inelastik olmayan seviye saçılması adı verilir.

Bu tepkime hala iki-gövde tepkimesi olduğundan, tepkimenin kinematığı, Q değerinin sıfırdan farklı ve negatif olması dışında, elastik saçılma ile özdeştir. Bu tepkimelerde, nötronun hedef çekirdeği uyarabilmesi için eşik enerjiye sahip olması gerekir.

5.2.2.3. (n, γ) Tepkimeleri

Nötronun enerjisinin ve yönünün değiştiği fakat transportunun devam ettiği saçılma tepkimelerinin aksine yakalama tepkimeleri serbest nötronları ortadan kaldırır. Tipik olarak bu tepkimeden, daha sonra gama ışını yayarak zemin duruma geçecek olan, uyarılmış durumda bir çekirdek ayrılır. Bu sebeple bazen yakalama tepkimelerine (n, γ) tepkimeleri adı verilir.

5.2.2.4. Diğer Yutulma Tepkimeleri

Bu kategori nötronların atomlarla etkileşimi sonucu oluşabilecek diğer tüm tepkimeleri kapsar. Bu tepkimeleri ikincil nötronların üretilip üretilmemesine göre iki gruba ayırmak mümkündür. İkincil nötron üretmeyen tepkimeler alfa, Triton, proton gibi parçacıklar üretebilir. Tepkimede ikincil nötron üretilmediğinde, nötron taşınımı açısından, temel olarak bu tepkimeler yakalama tepkimelerine eşittir. Tamamen yakalama tepkimesi olmasa da nötronların izotop tarafından yutulmasına önemli ölçüde katkıda bulunabilirler. Bor (B-10) düşük enerjili nötronlar için çok güçlü bir yutucudur ve yaygın olarak termal-spektrumlu reaktörlerde güvenlik ve sistem kontrolünde kullanılır.

İkincil nötronların üretildiği tepkimelerin en önemlisi en düşük eşik enerjisine sahip olması sebebiyle (n,2n) tepkimesidir. Bu tepkimelere çokluk tepkimeleri adı verilir. Daha yüksek enerjideki nötronlar ile (n,3n) (n,4n) tepkimeleri mümkün olabilir [130].

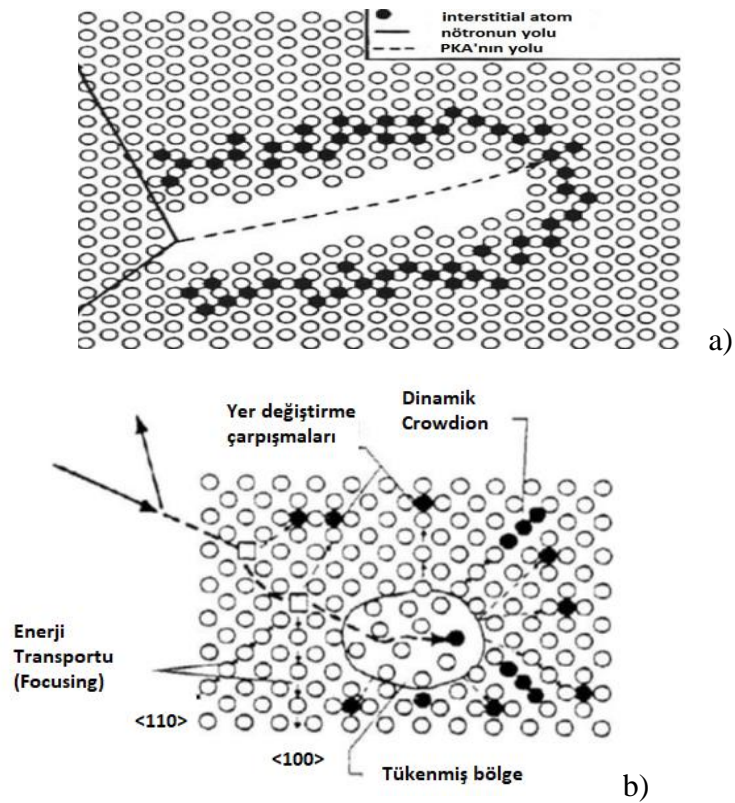
5.3 Yer Değiştirme Teorisi

Atom başına yer değiştirme (DPA) kavramı malzemelerdeki birincil noktasal kusurlar düşüncesinden ortaya konmuştur [131, 132, 133, 134]. Bu düşünceye göre; enerjili parçacık malzeme içerisinde, çoğunlukla düz bir yolda hareket eder, fakat zaman zaman kuvvetli ikili çarpışmalar gerçekleştirir ve kinetik enerjisini kafes atomuna aktarır. Kafes atomlarının bağlanma enerjisi, bu atomlara çarpan parçacıkların enerjisine kıyasla çok düşüktür (tipik olarak 10-60 eV aralığındadır). Yüksek enerjili bombardıman parçacığı ile çarpışma sırasında durgun kafes atomuna 10 keV ila 100 keV arasında enerji aktarılır. Bu sebeple aralarında kafes atomunun konumundan çıkması ile sonuçlanan yer değiştirme (saçılma) olayı oluşur. Çarpan atom yüksek enerjiye sahip olması nedeni ile, aynı zamanda bir başka kafes atomuyla da etkileşime girebilir. Gelen yüksek enerjili parçacıkla kafes konumundan çıkan atom birincil vuruş atomu ("*primary knock-on atom- PKA*") olarak adlandırılır ve doku arası durgun pozisyonuna (arayer atomu – "*interstitial*") geçene kadar çok sayıda atomu kafes konumundan çıkarır. Bir atom, kendi orijinal kafes yerinden uzakta durgun konuma geçmiş ve kendiliğinden orijinal konumuna dönemiyor ise yer değiştirmiş kabul edilir. Ayrıca bu atom başka bir boşluğun oluşturduğu yeniden birleşme ("*recombination*") bölgesinin de dışında olmalıdır. Böylece yerinden çıkan atomlar Frenkel çiftlerini (arayer atomu-boşluk çiftleri) ("*interstitial-vacancy pair*") oluşturur. Genellikle, PKA yüksek derecelerde ve çok sayıda atomun yer değiştirmesine neden olur. Bu atomlara (ikincil veya geri tepme ("*recoil*") atomu adı verilir.

PKA komşularıyla etkileşime girerek göreceli küçük bir bölgede birçok çarpışmaya ve atomik yer değiştirmeye neden olur. Yer değiştirmeler zinciri içinde hasarlı durum; kümelenme, yeniden birleşme, farklı büyüklükteki boşluklar ve arayer atomları dağılımları ile son şeklini alır. Bu kusurların uzaysal dağılımı homojen değildir. Yer değiştiren atomlar görece yüksek enerjili olduklarından, yer değiştirme çarpışma dizileri boyunca zincirin orta bölgesinden atılır ve arayer atomlarının çevrelendiği boşlukça zengin bölge oluşur. Zincir soğuduğunda, son hasar durumu belirlenmiş nokta kusurları ve nokta kusur kümelerinin sayıları ile oluşturulur. Sonuç olarak, uzun süren radyasyon hasarının mikro yapı ile etkileşimi, ışınlama altında mikro yapı evrimi ve buna bağlı ışınlama etkilerini meydana getirir.

Boş kafes bölgeleri ve noktasal kusurların kümelenmesi ile sonuçlanan yapıya yer değiştirme zinciri (“*displacement cascade*”) adı verilir. Eğer çarpışma işlemleri sırasında birçok çekirdek kafes pozisyonlarında daha yüksek enerjili duruma geçer ise termal sivrilikler meydana gelir. Parçacık-kafes atomu etkileşiminden önce, gelen parçacık elektronlarla etkileşime girebilir ve iyonlaşmaya neden olabilir. [121, 123]

Bir nötron akısının, çok sayıda PKA’ya ve daha sonra üretilen yüksek derecede yer değiştiren atomlara dönüşümü Şekil 5.3’a ve Şekil 5.3b’de örneklendirilmiştir.



Şekil 5.3'a) Brinkman'ın tanımladığı yer değiştirme zinciri [131], **b)** Seeger'in [135]

FCC metalinde incelediği birincil hasar olayları konsepti

Brinkman [131] ilk figür 3'te gösterilen yer değiştirme sivrileri modelini tanımladı. Bu modelde PKA hareketi çevresi arayer atomları bakımından zengin bir yapı oluşturur. Daha sonra Seeger [135] konsepti daha da işleyerek yakınlardaki boş kafes bölgelerinin yoksun bölgelere (“*depleted zones*”) yol açtığını gösterdi. Eğer bu bölgeler yeterince büyükse, şişme (“*swelling*”) adı verilen, yoğunluğu ve hacmin düşmesine neden olan boşluklar oluştururlar. Malzeme içerisinde bor (B), nikel (Ni), demir (Fe) gibi elementlerin bulunması durumunda, (n, α) tepkimesi ile üretilen helyum (He) bu

boşlukları stabilize edecek ve oyuk (“cavities”) adı verilen yapıları oluşturacaktır. Bununla birlikte malzemede kusur kümeleri, kayma döngüleri, amorf bölgeler veya üç boyutlu bozukluklar oluşabilir.

Radyasyon hasarında önemli birim olan atom başına yer değiştirme (DPA) ışınlamanın malzeme üzerine etkisini akı birikimine oranla daha iyi bir temsilidir. Hasar enerjisi veya DPA kullanımı nötron akışkanlık değeri kullanımından açıkça daha iyidir, bunun nedeni farklı nötron spektrumları malzemede farklı geri tepme spektrumu verebilir. Bu da farklı depolanan enerji ve hasar anlamına gelir. DPA standardını kullanırken “atom başına yer değiştirme” ismi, DPA’nın kusur konsantrasyonuna eşit olduğu şeklinde yorumlanabilir. Birim zamanda, birim hacimdeki yer değiştirmelerin sayısının R (yer değiştirme oranı) belirlenmesi ile elde edilir;

$$R = \frac{\# \text{ displacements}}{\text{cm}^3 \text{ s}} = N \int_E^{\hat{E}} \phi(E_i) \sigma_D(E_i) dE_i \quad 5.4$$

Denklem 5.4’te yer alan N atom yoğunluğunu, \hat{E} parçacığın maksimum enerjisini E parçacığı minimum enerjisini, $\phi(E_i)$ enerji bağımlı parçacık akısını ve $\sigma_d(E_i)$ enerjiye bağlı yer değiştirme tesir kesitini ifade etmektedir. Yer değiştirme tesir-kesiti ise;

$$\sigma_D(E_i) = \int_T^{\hat{T}} \sigma(E_i, T) v(T) dT \quad 5.5$$

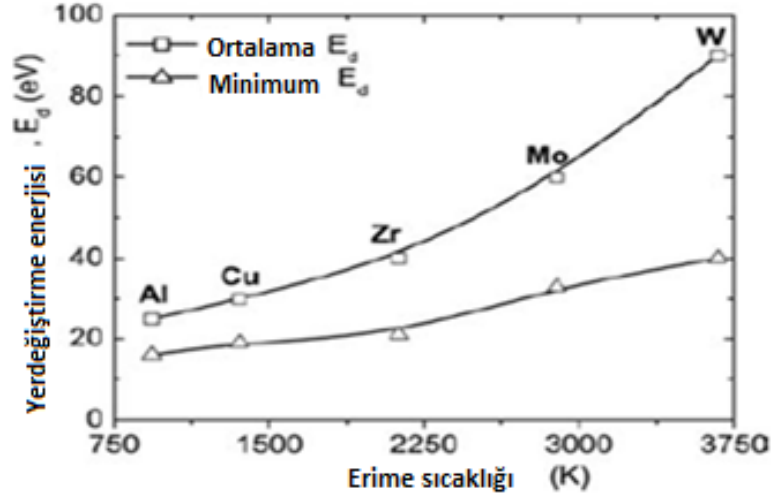
\hat{T} kafes atomu ile E_i enerjisindeki parçacığın çarpışmasından aktarılan maksimum enerjiyi, T kafes atomu ile parçacığın çarpışmasından aktarılan minimum enerjiyi, $\sigma(E_i, T)$ hedef atoma T enerjisinin transferi ile sonuçlanan E_i enerjisindeki parçacığın çarpışma tesir-kesitini, $v(T)$ ise her bir PKA için yer değiştirme sayısını ifade eder. Sonuç olarak elde edilen denklem;

$$DPA = R/N = \int_E^{\hat{E}} \int_T^{\hat{T}} \phi(E_i) \sigma(E_i, T) v(T) dT dE_i \quad 5.6$$

Bu denklemdeki iki önemli değişken $\sigma(E_i, T)$ ve $v(T)$ dir. $\sigma(E_i, T)$ Terimi parçacığın hedefte karşılaştığı ilk atoma, birincil vuruş atomuna (PKA), transfer ettiği enerjiyi tanımlar. İkinci değişken ise PKA’nın katı içerisinde ilerlemesi ile oluşan toplam yer değişimlerinin sayısını ifade eder. Sonuç olarak denklem, enerji dağılımı bilinen parçacık akısından kaynaklanan hedefteki toplam yer değiştirmelerin toplam sayısını verecektir[121].

5.3.1. Yer deęiřtirme Eřik Enerjisi E_d (Displacement Treshold)

Birincil hasar olayını tarif ederken, yer deęiřtirme enerjisinin eřięinin (E_d) (“Displacement Threshold”) net bir řekilde anlaşılması önemlidir. Kafes atomuna yerinden ıkarılması iin transfer edilen minimum enerji olarak tanımlanır. Genellikle ortalama 25 eV deęeri kullanılır. Bu deęer verilen malzemede farklı kristal yapı ynleri boyunca hesaplanan tm olası yer deęiřtirmelerin ortalamasıdır. Aynı zamanda deneysel olarak llen yer deęiřtirme enerjisine uygundur. Yer deęiřtirme enerjisinin spesifik deęerleri, momentum aktarımı, arpıřmanın yrngesi, kristal yapı ve atomların termal enerjisine baęlıdır.



řekil 5.4 Metallerde yer deęiřtirme enerjisinin erime sıcaklıęının fonksiyonu olarak deęiřimi [121]

řekil 5.4’te grldę gibi ısıya dayanıklı, yksek baęlanma enerjili molibden (Mo) ve tungsten (W) gibi metaller, erime noktası dřk metallere kıyasla daha yksek yer deęiřtirme enerjisine sahiptir.

Eęer kafes atomuna aktarılan enerji yer deęiřtirme enerjisinden daha dřk ise, atom kendi blgesinden ıkmayacak ve bir denge konumunda titreřerek enerjiyi komřu kafes atomlarına ısı olarak transfer edecektir.

Çizelge 5.1 Seramik metallere için yer deęiřtirme enerjileri [121]

Materyal	Eřik yer deęiřtirme enerjisi (eV)	
A_2O_3	$E_d^{Al} \sim 20$	$E_d^O = 50$
MgO	$E_d^{Mg} = 55$	$E_d^O = 55$
ZnO	$E_d^{Zn} \sim 50$	$E_d^O = 55$
UO_2	$E_d^U = 40$	$E_d^O = 20$

Yer deęiřtirme eřik enerjisi E_d 'nin, DPA konseptinde birincil hesabın hesaplanmasında önemli bir rolü vardır. Bu yüzden yapısını ve sınırlarını anlamak önemlidir. Kafes içindeki geri tepme hızı geleneksel termal hızdan daha büyüktür (örneğin 30 eV geri tepme kinetik enerjisi ortalama termal enerji olan 0,03 eV'den yaklaşık 1000 kat yüksektir, bu sebeple hız da 30 kat yüksektir). Kaba bir yaklaşım olarak, bir kusur oluşturmak için gereken enerji ile sadece geri tepme atomunun hareket ettięi varsayılır ve ilk geri tepme yönünde düz bir çizgi boyunca potansiyel bariyerin belirlenmesi ile elde edilir. Buna ani yaklaşım ("*sudden approximation*") adı verilir ve düşük indeksli kristal yönlerinde iyi çalıştığı gösterilmiştir [138]. Bu mekanizmanın termal olarak aktive edilmiş Frenkel çiftlerinden farklı olduğunu anlamak gerekir. Çünkü kusurlar oluşmadan önce potansiyel boşluklar içerisinde kafes titreřimleri olur ve bu metallerde erime noktasına çok yakinken gözlenir. Yer deęiřtirme eřik enerjileri tipik olarak 10-50 eV aralığında deęiřir. [122] Kabaca bu enerji Frenkel çifti oluşma enerjisinden yüksektir.

Yer deęiřtirme eřik enerjisinin deneyler ve benzeřimler ile birlikte çalışılmasının yanında, hala birkaç malzeme için belirsizlikler vardır. Örneğin demir için, deneysel ortalama bir eřik deęeri belirlenmemiştir. Ve klasik atomlar arası potansiyellerle öngörülen deęerler arasında farklılıklar vardır. Benzer olarak Si için de deneysel ve benzeřim deęerleri arasında büyük farklar vardır [139, 140].

5.3.2. Radyasyon Hasarı Modelleri

Nötronlar için, ikili çarpışmalar yapmaları nedeni ile, yer deęiřtirme modeli iyi bir yaklaşımdır. Atomik geri tepmeler ve iyonlar birden çok komşu atomla çoklu çarpışma ("*many body*") yapmaları nedeniyle model sorgulanabilir.

İkili çarpışmalar için, sezgisel olarak açıktır ki kafes atomuna aktarılan enerji, kafes atomunun bağlanma enerjisinden düşükse kusur oluşmayacaktır. Dięer yandan, atoma

verilen enerji bağlanma enerjisinden yüksek ise, atom kafes boyunca hareket edecek ve enerjisine bağlı olarak kusurlar üretecektir. Bu yaklaşım kusurların sayısını belirten Kinchin-Pease (K-P) modelinin geliştirilmesine öncülük etmiştir [136]. Başlangıç PKA enerjisi $E > 2E_d$ ise, PKA katı içerisinde birden fazla yer değiştirme yapabilir. Etkileşimi elastik saçılma varsayarsak, bir çarpışmadan sonra, yer değiştiren atom sayısı 2 ve bu atomların ortalama enerjileri $\bar{T} = E/2$ ye eşittir. İki çarpışmadan sonra dört atomu kapsar ve $\bar{T} = E/4$ elde edilir ve n çarpışma 2^n atomu kapsar ve atomların enerjisi $\bar{T} = E/2^n$. Yer değiştirme zincirinin sona erme koşulu $\bar{T} < 2E_d$ (eğer enerji E_d 'den daha fazla ve $2E_d$ 'den daha az ise, PKA yeterli enerjiyi yer değiştiren atoma aktarır, fakat onun yerini alır ve bu yeni kusur meydana getirmez). K-P modelinin yer değiştiren atom sayısı için formülü Denklem 5.6'da verilmiştir.

$$v_{KP}(E) = \begin{cases} 0 & , E < E_d \\ 1 & , E_d < E < 2E_d \\ \frac{E}{2E_d} & , 2E_d < E < E^* \end{cases} \quad 5.6$$

E değeri, hasar üretimi için geçerli enerjiyi ifade eder. Denklem 5.6'daki tek parametre **yer değiştirme eşik enerjisi (E_d)** dir. Bu parametrenin bağlanma enerjisinden (tipik sert metaller için bu değer ortalama 5 eV'dir) yüksek olması beklenir. Çarpışmaların toplam sayısını n_f ile gösterilirse, n_f aşama sonunda, toplam yer değiştiren atom sayısı 2^{n_f} 'ye eşittir. K-P formülünün türetilmesi Şekil 5.5'te gösterilmiştir.

Aşama	0	1	2	3		n_f	FINAL
Atom başına ortalama enerji	E	$E/2$	$E/4$		$E/2^{n_f}$	$2E_d$
Ek atomların sayısı	1	2	4	8	2^{n_f}	$E/2E_d$

Şekil 5.5 Kinchin-Pease formülünün türetilmesinin gösterimi [128]

K-P denklemi birkaç basitleştirici varsayım ile geçerlidir. Bunlar; sert kürelerin klasik elastik çarpışması, E^* limit ("cutoff") enerjisi üzerinde enerji elastik olmayan işlemlerle

dağıtılması, keskin E^* eşik enerjisinin varlığı, kristal yapının ve Frenkel çiftlerinin rekombinasyonun ihmalidir. K-P modeli, bir dizi iyileştirme için temel oluşturur, öncelikle hasar enerjisinin hesaplanmasını daha gerçekçi bir yer değiştirme limiti tahmininin yapılmasını sağlar.

Denklem Norgett, Robinson ve Torrens [136] tarafından ikili çarpışma yaklaşımı (BCA) uygulayan bilgisayar benzeşimleri ile balistik proseslerin olasılıkları hesaba katılarak (*recombining defect*) tekrar işlenmiş. NRT metodu elektronlarla elastik olmayan çarpışmalara ilişkin enerji kaybını ve çeşitli kristal yapı yönlerinde ve eş yönlü olmayan T_d değerinin hesabını içerir. Bu yaklaşım çarpışma zincirinin bilgisayar ile simüle edilmesine ve çeşitli radyasyon deneylerinin karşılaştırılmasına olanak verir. Sonuç olarak değiştirilmiş K-P denklemi, günümüzde NRT denklemi olarak bilinen, hasar oluşumu sayısını veren model;

$$v_{NRT} = \frac{\kappa E_d}{2E_d} = \frac{\kappa(T_d - \eta)}{2E_d} \quad 5.10$$

Denklemden T_d PKA'nın toplam enerjisi, η zincirdeki elektron uyarılmasından kaynaklanan enerji kaybını ve E_d ise elastik saçılma ile atomik yer değiştirme üretebilecek enerjiyi ifade eder ve hasar enerjisi olarak bilinir. Yeni faktör κ hasar verimi 0,8'e eşittir ve BCA benzeşimlerinden gelmektedir. E_d Enerjisi;

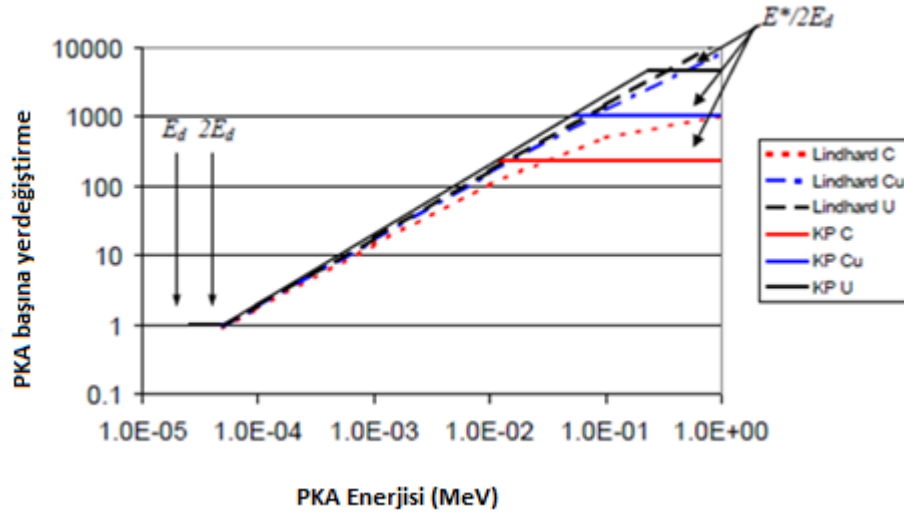
$$E_d = T/[1 + k_N g(\varepsilon_N)] \quad 5.11$$

ve inelastik enerji kaybı Lindhard [137] metodunda evrensel fonksiyon $g(\varepsilon_N)$ 'e nümerik yaklaşım kullanılarak hesaplanmıştır;

$$\begin{aligned} g(\varepsilon_N) &= 3.4008\varepsilon_N^{1/6} + 0.40244\varepsilon_N^{3/4} + \varepsilon_N \\ k_N &= 0.1337Z_1^{1/6} (Z_1/A_1)^{1/2} \\ \varepsilon_N &= \left(\frac{A_2 T}{(A_1 + A_2)} \right) \left(\frac{a}{Z_1 Z_2 \varepsilon^2} \right) \\ a &= \left(\frac{9\pi^2}{128} \right)^{1/3} a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2} \end{aligned} \quad 5.12$$

Denklemden a_0 Bohr yarıçapı ve ε birim elektron yüküdür. Atom enerjisinin tümü kusur oluşumuna yüklendiği için bu model yaklaşık olarak nükleer durdurma rejiminde geçerlidir ($E < E^*$). Bunun yanında elektronik durdurma da vardır. Lindhard modeli, sert-

küre modelinden (Thomas-Fermi) daha gerçekçi potansiyel kullanılmasıyla bu gibi durumlarda, elektronik ve nükleer durdurma arasındaki enerji bölümünü tahmin etmek için daha gerçekçi bir yaklaşımdır. Lindhard modeli elektronik durdurmaların baskın olduğu rejimden nükleer durdurma rejimine daha yumuşak geçişi sağlar.



Şekil 5.6 Karbon, bakır ve uranyum elementleri için Kinchin-Pease ve Lindhard modellerine göre yer değiştirmeler [128]

Şekil 5.6'da karbon (C), bakır (Cu) ve uranyum (U) elementleri için PKA enerjisine bağlı, PKA başına yer değiştirme fonksiyonu Kinchin-Pease ve Lindhard modelleri için gösterilmiştir. E^* limit değerinin iki farklı modeldeki değişimi de şekilde görülmektedir.

DPA kavramı ve KP/NRT denklemleri, malzemelerdeki radyasyon hasarı miktarının tahmininde yaygın olarak kullanılır. Temel sebep öncelikle basitliktir; hesaplama yöntemi kolaydır. Benzer şekilde DPA kavramı anlaşılması kolaydır ve ışınlama işlemi sırasında atomların ne oranda yer değiştirdiği hakkında bir tahmin verir. Örnek olarak 1×10^{10} nötron/cm².s toplam radyasyon dozu ("fulence") ne kadarlık kusur meydana geleceği ile ilgili bir şey söylemez, buna karşılık 0,01 DPA yüz atomdan birinin yer değiştirdiğini söyler.

5.3.3. Kanallama ve Odaklanma

Basit zincir analizi, gerçekçi enerji transfer tesir-kesitlerini ve yavaşlama sırasında elektron uyarma kayıplarını hesaba katacak şekilde değiştirilmiş olsa bile dolaylı olarak katı kristal yapının rastgele bir atom dizisinden oluştuğunu varsayar. Ancak, bu zincirin

kristalize yapıda art arda meydana geldiği düşünülürken iki önemli olgu ortaya çıkmaktadır. Birincisi Odaklanma (“*Focusing*”) bir sıra boyunca, neredeyse kafa kafaya çarpışmalarla enerjinin ve atomların transferini ifade eder ve bir diğeri Kanallama (“*Channeling*”) katı kristal yapı içerisinde atomların açık yönler boyunca uzun mesafelerce taşındığı tamamlayıcı bir işlemdir. Bu işlem sırasında, hareket eden atom duvar görevi gören sıralı atomlarla gerçekleşen çarpışmalarla kanalında tutulur. Odaklanma ve kanallama zincirdeki yer değiştiren atomların sayısını ve konfigürasyonunu etkiler. İlk olarak, kristal yapı yönü boyunca hareket eden atomlar, odaklanma ve kanallamaya uygun olarak, doğrultu yönünü çevreleyen atomlarla sadece direkt olmayan çarpışmalarla enerji kaybederler. Bu çarpışmalarda enerji transferi E_d değerinin çok altındadır ve bu eşik değer altındaki çarpışmalarda zincir teorisinde tahmin edilenden çok daha fazla enerji dağılır. Kristal etkileri hesaba katıldığında PKA’ların rasgele atom dizisinde oluşturacağı $v(E)$ sayısı daha küçüktür. İkinci olarak, odaklanmış veya kanallama yapan atomların diğer yer değiştiren atomlara kıyasla, durgun konuma geçmeden daha uzun mesafeler hareket etmesi mümkündür. Odaklanma veya kanallama mekanizmalarıyla oluşmuş yer değiştirme atomları, difüzyonla-geliştirilmiş sünme ve boşluk büyümesi (*void growth*) gibi radyasyon etkilerini kontrol eden radyasyonla oluşmuş geçişlere orantısız şekilde katkıda bulunur [124].

5.4. Helyum ve Hidrojen Gazlarının oluşumu

Alfa parçacıklarının (helyum atomunun çekirdeği) üreten tepkimeler termal ve hızlı nötron akıları ile tepkimeler sonucu meydana gelir. Termal akı spektrumu çekirdeklerde helyum oluşumu için birincil kaynaktır. Tepkime denklem 5.13’de gösterilmiştir.



Tepkimenin etkili tesir kesiti, termal akı spektrumunda 300 barndır. Paslanmaz çelik içerisinde bulunan az miktarda bor önemli miktarda helyum üretmektedir. Çekirdeklerdeki bor genellikle genel formülü $M_{23}(CB)_6$ olan tane-sınırı karbürler ile ilişkilendirilir. Denklemde M demir veya kromu belirtir, (CB) ise yer değiştirebilir bor veya karbon anlamına gelir. Bor tepkimesi sonucu oluşan helyumun tane-sınırına yakın olması sebebiyle bu bölgelerde en fazla oluşur.

Doğal bor %20 B^{10} içerir ve çoğu çelikte bulunan bor elementi, zarfta yakıt ömrünün erken dönemleri boyunca, denklem 5.13'de belirtilen tepkime sonucu yanar. Zarfta helyum miktarı nikel ve termal nötronlar sebebi ile aşağıdaki denklemleri takiben artmaya devam eder;



Bu tepkimeler için efektif tesir-kesiti sırasıyla 4,4 ve 13 barndır. Nükleer tepkimeler göz önüne alındığında östenitik çeliklerde bitmeyen nikel miktarından dolayı yakıt elemanının ömrü boyunca helyum üretimi nötron ve nikel ile iki adım tepkimede devam eder.

Hızlı üretken (*breeder*) reaktörlerde hızlı-nötron akısı termal nötron akısından üstel olarak dört kat yüksektir. Nötron akısının hızlı ve termal bileşenleri karşılaştırıldığında termal reaktörlerde bu oran birbirine neredeyse eşittir. Hızlı reaktörlerdeki zarf metal bileşenlerinde denklem 5.14 ve 5.15 denklemlerindeki tepkimelerle helyum üretilir. Hızlı nötron ışınlanması ayrıca neredeyse bütün çekirdeklerde (n, p) tepkimesi gerçekleştirir. Ancak, bu tepkimelerden üretilmiş hidrojen çelik içerisindeki hızlı difüzyonu nedeniyle gevrekliğe neden olmaz ve sonrasında zarf malzemesinden çıkar. Birss'in araştırmalarına göre reaktör malzemelerinde en önemli helyum üreticiler nikel ve demirdir. Çeliklerin bir diğer önemli bileşeni krom da kayda değer helyum üreticisidir. Nitrojen ve bor gibi safsızlıklar da hızlı nötronlarla indüklendiklerinde (n, α) tepkimeleri sonucu helyum açığa çıkarırlar. Metallerdeki ve çeliklerdeki hafif safsızlık elementleri için eşik enerji değeri geçerlidir. Bunun anlamı bu değer altında tesir-kesiti sıfırdır. Tepkimelerin endotermik olması ve nötronlardan kinetik enerji aktarılması gerekliliği sebebiyle eşik enerji meydana gelir. Eşik enerjisi 1 MeV ile 5 MeV aralığındadır [124].

6. SERPENT, SPECOMP VE SPECTER KODLARI

6.1. Monte Carlo Yöntemi

Monte Carlo Metodu kaba-kuvvet hesaplama tekniği olarak tanımlanabilir. Özellikle iyi tanımlanmış alt-görevler içeren karmaşık problemleri çözmek için uygundur. Metot basit ve temel haliyle çözmeye çalıştığı sorunla yakın ilişki içindedir. Günümüzde bu yöntem fizik, matematik, ekonomi ve mühendislik alanlarında çeşitli görevlerde yaygın olarak kullanılmaktadır. Metodun ilk pratik uygulamalarından biri karmaşık parçacık taşınım problemlerinin modellenmesidir.

Hesaplama tekniğine 1940'ların sonlarında Los Alamos'taki bilim insanları, Stanislav Ulam, John Von Neumann ve Nicholas Metropolis ilk olarak "Monte Carlo" metodu dediler. Metot nükleer silah araştırmalarında karşılaşılan parçacık transportu problemlerini çözmek için kullanıldı [141]. Tekniğin kökleri 19. yüzyılda, modern olasılık ve istatistik teorisinin gelişimine uzanır ve daha öncesinde benzer yöntemler incelenmiştir.

Bununla birlikte, Los Alamos'taki bilim insanları daha önce mevcut olmayan, makine-tabanlı ve otomatik sayısal hesaplama yöntemine eriştiler. Rasgele sayılardan oluşan uzun dizilerin üretilmesi her Monte Carlo uygulamasının temelini oluştursa da bilgisayar-tabanlı bir hesaplama rutini olmadan çok pratik değildir.

Parçacık taşınım problemlerinde Monte Carlo hesaplamasının temel prensibi oldukça basittir. Tek bir nötron, foton, elektron veya başka herhangi bir parçacık tipinin ömrü, yayılımından yutulma veya sistem sınırları dışına kaçma yoluyla yok olmasına kadar bilgisayar benzeşimi yapılır. Parçacığın ömrü boyunca oluşabilecek etkileşimlerin sıklığı ve sonuçları parçacık fiziğinden elde edilen etkileşim yasalarına göre rasgele örneklenir ve benzeştirilir. İşlem çok sayıda parçacık sayısı ile tekrarlanır ve ayrıntılı taşınım işlemleri sonuçlarına uzun süren hesaplama sürelerinde ulaşır [142].

6.2. SERPENT Kodu

SERPENT, Finlandiya'daki VTT Teknik Araştırma Merkezi'nde geliştirilen çok amaçlı, üç boyutlu, devamlı-enerjili Monte Carlo parçacık transport kodudur. Geliştirme 2004 yılında başladı ve kod OECD/NEA Veri Bankası ve RCICC (Radiation Safety Information Computational Center) tarafından 2009 yılından itibaren halka açık dağıtılmaktadır. Dünyada 28 ülkede, 100 organizasyon ve 250'den fazla kullanıcı topluluğuna ulaştı. Tipik SERPENT kullanıcılarını, akademik araştırmalar ve tezlerde kullanılmak üzere, yüksek lisans ve doktora öğrencileri oluşturmaktadır. Uygulamalar yakıt döngüsü çalışmalarından araştırma reaktörü modellemesine, grup sabitleri üretiminden birleşik çoklu-fizik hesaplamalarına değişmektedir. Bilgisayar belleği gerekliliğinden kaynaklanan sorunları gidermek amacıyla kaynak kodu bir kez daha yazmaya karar verildi. Çalışma Ekim 2010'da başladı ve 2015 yılında SERPENT 2'nin kullanımı halka açıldı [143].

SERPENT basitleştirilmiş bir reaktör fizik kodu olarak başladı, fakat mevcut geliştirilmiş sürüm olan SERPENT 2'nin yetenekleri reaktör modellemesinin çok ötesine uzanmaktadır. Uygulamalar kabaca üç kategoriye ayrılabilir; Birincisi uzaysal homojenizasyon, kritiklik hesaplamaları, yakıt çevrimi çalışmaları, araştırma reaktörü modellemesi, deterministik transport kodlarının tasdiklenmesini içeren geleneksel reaktör fizik uygulamaları. İkincisi; çok-fizikli benzeşimler, örnek olarak termal hidrolik, CFD ve yakıt performansı kodlarıyla birleştirilmiş hesaplamalar. Ve son olarak radyasyon doz oranı, koruma, füzyon araştırmaları ve medikal fizik hesaplamaları için nötron ve foton transport simülasyonları.

Diğer Monte Carlo kodlarına benzer şekilde SERPENT'teki temel geometri tanımı, pratik olarak herhangi bir iki veya üç boyutlu yakıt veya reaktör konfigürasyonunun tanımlanmasına izin veren, evren tabanlı, yapısal katı geometri (CSG) modeline dayanır. CSG geometrisi, boolean operatörleri kullanılarak birleştirilmiş yüzey tipleri ile tanımlanmış homojen malzeme hücrelerini içerir. SERPENT geleneksel kare ve altıgen kafesleri, CANDU ve rasgele-dağılmış parçacık yakıtları için özel geometri türleri sağlar. CSG tipi evrenlere ek olarak SERPENT 'in CAD ve yapılandırılmamış ağ (mesh)-tabanlı geometrileri tanımlama seçeneği de vardır.

SERPENT'te parçacık transportu geleneksel yüzey izleme ile Woodcock delta izleme yönteminin [144] kombinasyonuna dayanır. İzleme rutininin, nötron veya foton ortalama-serbest-yolunun boyutlara kıyasla uzun olduğu geometrilerde daha verimli olduğu kanıtlanmıştır. Bu durum tipik olarak yakıt demetlerini içeren reaktör fizik hesaplamaları ve özellikle Yüksek Sıcaklıkta Gaz Soğutmalı Reaktör (HTGR)'lerin mikro-parçacık yakıtlarındaki durumdur. Geleneksel delta izleme yönteminde, lokalize ağır yutuculardan kaynaklı verim problemleriyle karşılaşıldığında, SERPENT gerektiğinde yüzey izlemeye geçerek çözüm üretir.

Delta-izlemenin ana dezavantajı parçacık akısı için iz-uzunluğu tahmininin geçerli olmaması ve potansiyel olarak daha az verimli çarpışma tahmincisi kullanılarak tepkime oranlarının hesaplanması gerektiğidir. Tepkime hızları yüksek çarpışma yoğunluğu olan bölgelerde puanlanırken bu genellikle reaktör hesaplamalarında sorun değildir. Çarpışma oranı düşük olduğunda, tahmin edicinin verimliliği, parçacık yolu üzerinde ek sanal çarpışmalar getirilerek arttırılabilir. SERPENT ayrıca çarpışma tahmincisinin veriminin genellikle düşük olduğu, küçük veya optik olarak ince hacimlerde tepkime oranlarını hesaplamak için iz uzunluğu tahmincisine dayanan özel bir detektör tipi sağlar.

SERPENT, ACE formatındaki veri kitaplıklarından sürekli-enerji tesir-kesitlerini okur. Etkileşim fizikleri klasik çarpışma kinetiklerini temel alır ve çözülmemiş rezonans bölgesinde ENDF tepkime yasaları ve olasılık tablosunu örnekler.

ACE formatındaki tesir-kesiti kütüphaneleri JEF-2.2, JEFF-3.1, JEFF-3.1.1, ENDF/B-VI.8 ve ENDFB/B-VII'ye dayalıdır. Etkileşim dataları 432 izotop ve 300K-1800K aralığında 6 sıcaklık değeri için mevcuttur. Hafif ve ağır su ve grafit için termal bağlı-atom saçılma datasını da içerir [145].

SERPENT 1 ve SERPENT 2 arasındaki temel yapısal farklar tesir-kesiti verilerinin işlenmesi ve paralelleştirilmesinde bulunur. Kafes fizik hesaplamalarındaki performansı arttırmak için iyonize-olmamış enerji aralığı yaklaşımı geliştirildi ve geniş ve küçük yanma hesaplamaları için farklı optimizasyon modları tanıtıldı. Paralel hesaplama, MPI ve OpenMP'nin kombinasyonuna dayanmaktadır. Hafıza paylaşımli paralelleştirme tekniği, toplam belleği arttırmadan aynı hesaplama ünitesi içerisinde birden fazla iş parçacığına bölmeyi sağlar.

Monte Carlo kodları tam ölçekli LWR simülasyonları için tasarım ve analiz araçları olarak kabul edilmese bile, küçük araştırma reaktörlerini ve diğer yakın-birleştirilmiş sistemleri modellemek için yaygın olarak kullanılmaktadır. SERPENT, VTT'deki Triga Mark II tipi FiR-1 reaktörünü modellemek için kullanılmıştır (Barry,2012). Ayrıca Idaho Ulusal Laboratuvarında (INL)'ki Gelişmiş Test Reaktörü (ATR) ve Japon Atomik Enerji Ajansı tarafından işletilen Yüksek-sıcaklıklı Mühendislik Test Reaktörü'nün (HTTR) kıyaslama analizleri için iki araştırma grubu tarafından kullanılmıştır [146].

6.3 SPECOMP ve SPECTER Kodları

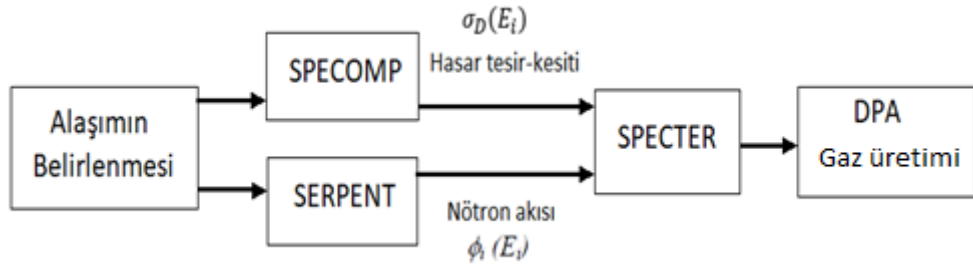
SPECTER kodu radyasyon hasarını ölçmek için yazılmıştır. Nötron enerji spektrumunu kullanarak, periyodik cetveldeki 38 element için spektral ortalama yer değiştirmeleri, geri tepme spektrumlarını, toplam hasar enerjisi (Kerma) ve gaz üretimini hesaplar. Hesaplamalar Dorion ve Odette [147]'nin geliştirdiği ve ENDF/B-V nötron tesir-kesitlerini kullanan metodlara dayanır. Enerjiye bağlı tesir-kesitleri ve geri tepme dağılımları ana data dosyalarını oluşturur ve kullanıcının programa sadece nötron akı spektrumunu ve ışınlama zamanını sağlaması gerekir. Bunun sonucunda kod spektral-ortalama hasar parametrelerini hesaplar.

SPECTER kodu, COMPOUND.DAT isimli yer değiştirme hasar tesir kesiti kütüphanesini içerir. SPECOMP kodu ise COMPOUND.DAT dosyasının içinde yer almayan bileşiklerin DPA tesir kesitlerinin üretmek üzere geliştirilmiştir. Program hesaplamaya bileşen içerisindeki her bir element için geri-tepen atom enerji dağılımlarını hesaplayarak başlar. Elastik saçılmalar için açılal dağılımlar ENDF data kütüphanesinde verilmiştir. Diğer tepkimeler için durum çoklu-gövde tepkimeleri olduğundan ardışık nötron yayılımını simüle etmek için Monte Carlo hesaplamaları uygulanır. Atomik geri-tepme dağılımları elde edildikten sonra toplam yer değiştirmeler, geri-tepme olasılıkları ve birincil yer değiştirmelerden kaynaklanan ikincil yer değiştirmelerin olasılıkları ile çarpımı üzerinden integral alınarak belirlenir. İkincil yer değiştirmeler Lindhard enerji bölme modeli ile belirlenir.

Bileşik malzemede, prosedür, biraz daha farklıdır. Birden fazla element atomunu içeren bu durumda geri-tepen ve matris atomunun her kombinasyonu için ikincil yer değiştirmelerin toplanması gerekir. Bu hesaplamalarda atomların bileşikler içerisinde düzgün (homojen) dağıldığı varsayılır [148]

7. RADYASYON HASARI HESAPLAMALARI

DPA ve oluşan tepkime gazlarının (helyum ve hidrojen) üretim miktarını hesaplamada literatürde farklı yöntemler ve kodlar olmakla beraber bu tez çalışmasında uygulanan ve nötronların alaşımlar üzerindeki radyasyon hasarı belirlemek için izlenen yöntem Şekil 7.1’de gösterilmiştir.

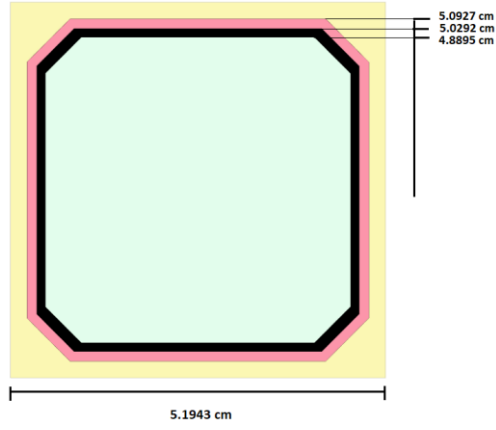


Şekil 7.1 Radyasyon hasarı hesaplamalarının akış şeması

7.1. TREAT SERPENT MODELİ

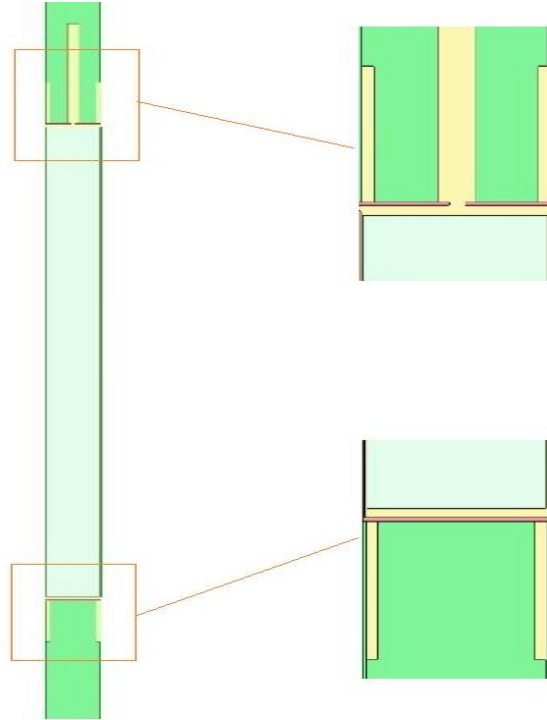
7.1.1 Yakıt ve Kontrol Çubukları

Soğutucu akışı için oluklu köşeli yakıt düzenekleri oluşturuldu. Bu yakıt düzenekleri, 2. Bölümde yer alan Şekil 2.7’deki ölçüler kullanılarak modellenmiştir ve Şekil 7.2’de 2 boyutlu üstten görünüşü gösterilmiştir. SERPENT kodunun “sekizgen” yüzey tanımı ile aynı yivli köşeli kare şeklini kullanarak, yakıt bölgeleri küçük vakum bölgeleri daha sonra da zarf bölgeleri ile çevrelenmiş ve düzeneğin etrafına soğutucu yerleştirilmiştir. Yakıt demetinin x-z eksenlerindeki görünüşü ve grafit ve yakıt bölgesi arasındaki bağlantı detayları Şekil 7.3’te gösterilmiştir.



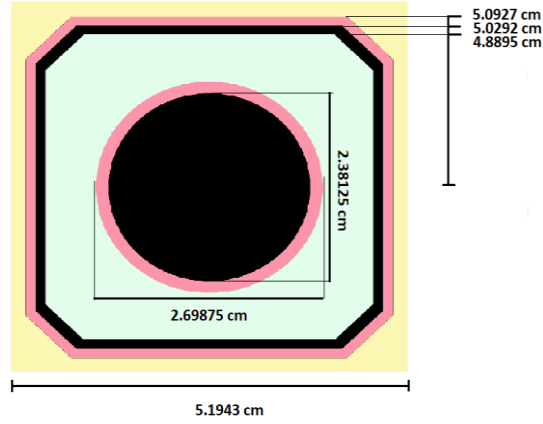
Şekil 7.2 Yakıt demetinin 2 boyutlu üst görünüşü

Kare yakıtın, boşluğun ve zarf bölgesinin yarı-uzunlukları sırasıyla 4,8895 cm, 5,0292 cm, 5,0927 cm'dir ve her bir yakıt düzeneğini çevreleyen soğutucu karenin yarı-uzunluğu 5,1943 cm'dir. Model yakıt bölgesinin üstündeki dış gaz tüpü dahil detaylar içermektedir.

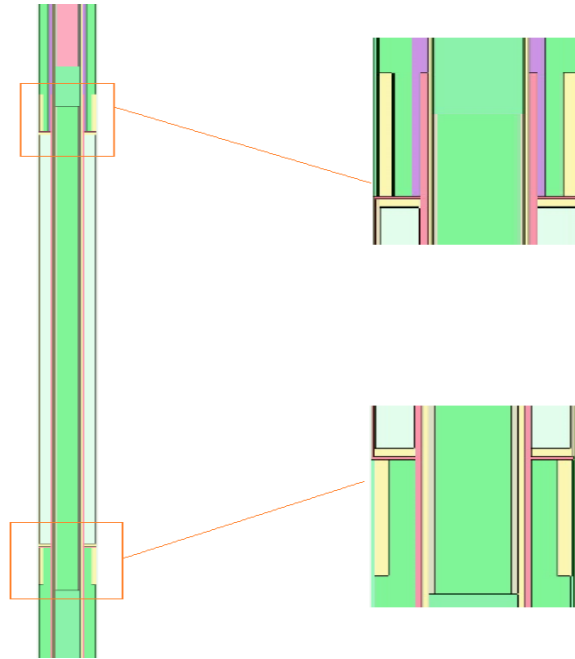


Şekil 7.3 Standard yakıt düzeneği modeli

Kontrol çubuğu düzenekleri standart yakıt düzeneklerine benzemektedir. B₄C içeren kontrol çubukları için 2,38125 cm yarıçaplı boşluk bölgesi, dış yarıçapı 2,69875 cm'lik çelik zarfla çevrelenmiştir. Kontrol düzeneğini çevreleyen soğutucu kare ölçüleri, yakıt düzeneğindeki soğutucu ile aynı ölçülerdedir. Kontrol çubuğunun iki boyutlu üst görünüşü ve x- z ekseni boyunca, grafit bölümü ve B₄C bölümü birleşim noktasının detayları Şekil 7.4 ve Şekil 7.5'de gösterilmiştir.

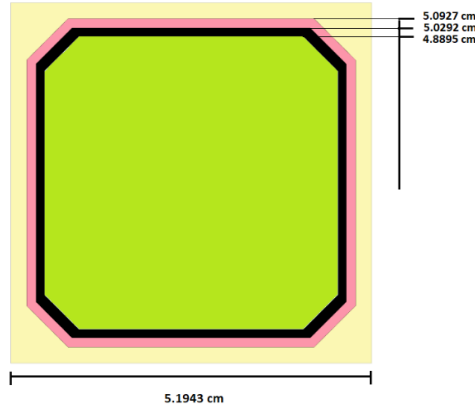


Şekil 7.4 Kontrol çubuğu düzeneklerinin iki boyutlu üst görünüşü



Şekil 7.5 Kontrol çubuğu düzeneklerinin modeli

Zircaloy-zarf işlevsiz düzenekleri Şekil 7.6'da gösterildiği gibi geometrisi standart yakıt düzeneğiyle türdeş fakat uranyum yakıt yerine grafit moderatör yerleştirilmiştir.



Şekil 7.6 Zircaloy-zarf işlevsiz düzeneğinin iki boyutlu üst görünüşü

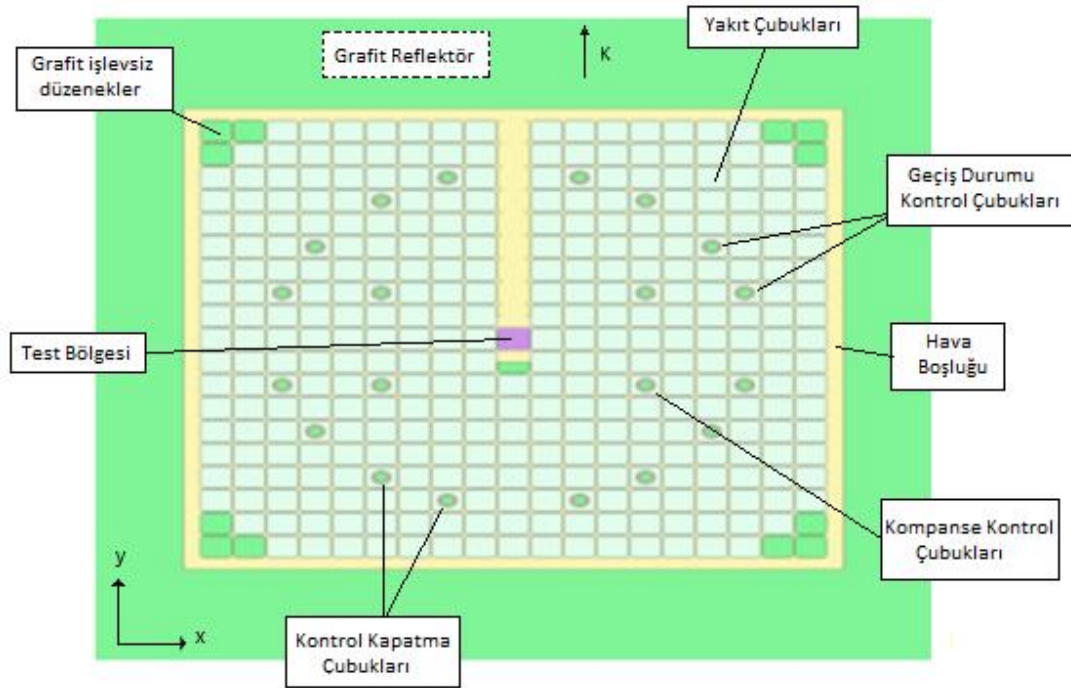
7.1.2. M8CAL kor modeli

TREAT'in hesaplamalı model ve simülasyonu SERPENT versiyon 2.1.30 kodu ile koşularak elde edildi. Programın detektör sayımları Hacettepe Üniversitesi Nükleer Enerji Mühendisliği Bölümündeki Yüksek Başarımlı Hesaplama Birimi (Formüla – High Performance Computational Unit) le uygulandı ve sonuçlar literatürdeki sayımlar ile karşılaştırıldı. Değerlendirilmiş nükleer data kütüphaneleri izotopların tesir-kesitlerini sağlamak amacıyla ENDF/B- VII kullanıldı. Tüm SERPENT hesaplamaları detektörlerden alınacak sayımlardaki göreceli hataları azaltmak amacıyla 250 aktif 150 pasif döngü ve her döngüde 2×10^6 parçacık ile koşuldu. İzotop atom yüzdeleri Şeker'in raporundan [15] elde edildi ve elementlerin 300 K sıcaklıktaki tesir-kesitleri malzeme kartına girildi. Malzeme yoğunlukları programa hesaplatıldı. Ayrıca karbon ve hidrojen izotopları için termal saçılma kütüphaneleri $S(\alpha, \beta)$ tanımlandı.

Bu tez çalışmasında orijinal yarım-oluklu M8CAL korundan farklı olarak test bölgesindeki test aracı hava ile değiştirildi ve böylece reaktörün bu bölgesinde ortalama nötron akı dağılımına ulaşılmış oldu. Hava ile doldurulan ve detektör sayımlarının alındığı bölge Şekil 7.7'de gösterilmiştir.

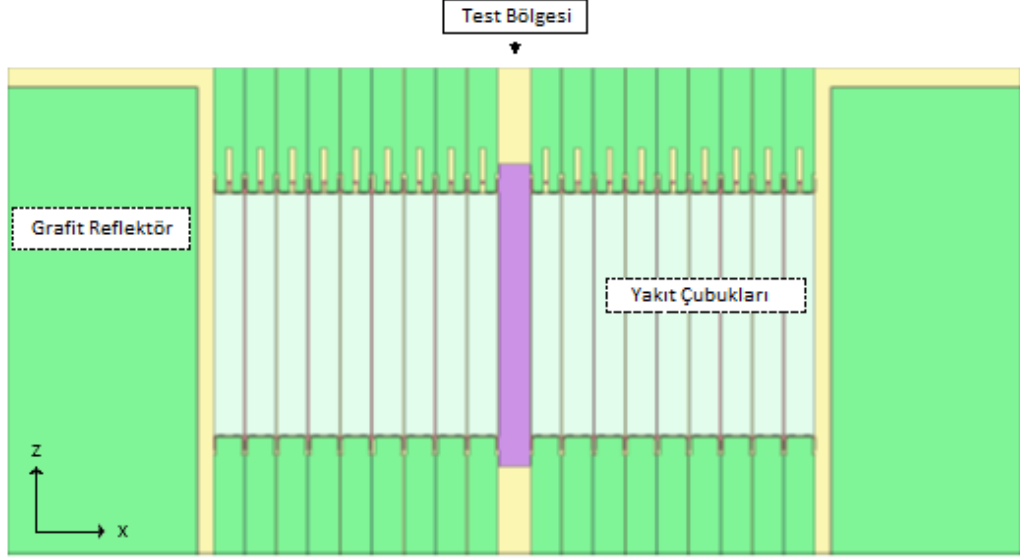
M8CAL kor konfigürasyonu korun merkezinden hodokopa erişime izin veren 9 adet oluklu (yakıt bölgeleri çıkarılmış) düzenele beraber 318 yakıt demeti, 20 kontrol çubuğu ve 1 tanesi yarım olmak üzere 13 adet zircaloy zarf ile kaplı işlevsiz grafit düzenele içerir. Reaktörün kesit görünümü ve bu elemanların yerleri Şekil 7.8'de gösterilmiştir. TREAT 19x19 elemanlı kor yüklemesinin etrafı hodoskop boşluğu içeren sabit grafit reflektör ile

çevrilidir. Kor ve sabit reflektör arasında 2 inç'lik hava boşluğu vardır. Aktif korun altında üstünde sabit reflektör bölgesi vardır. Kor'un yüksekliği 122,32 cm'dir ve her bir reflektör bölgesi 61,235 cm uzunluğundadır. Şekil 7.8'deki konfigürasyonda gri renkli elemanlar yakıt demetlerini, her köşede 3'er adet bulunan yeşil renkteki elemanlar ise işlevsiz grafit demetlerini belirtmektedir. Yakıt demetlerinin arası ile kor ve sabit reflektörün arasını dolduran soğutucu görevi üstlenen hava ise sarı renk ile belirtilmiştir. Kontrol çubukları ise yeşil dairelerle belirtilmiş ve reaktörün kararlı durum operasyonunda kritikliği elde edecek şekilde konumları kor içerisinde tanımlanmıştır.



Şekil 7.7 Yarı-oluklu M8CAL koru SERPENT modeli (XY- düzlemi) çizimi

Korun detaylı modeli oluşturulurken öncelikle ANL-6034 (Design Summary Report) raporundaki ölçüler referans olarak alınarak yüzeyler ve hücreler oluşturuldu. Yakıt çubukları, kontrol çubukları, zircaloy-zarflı işlevsiz elemanlar, erişim-boşluklu işlevsiz düzenekleri ayrı everenlerde tanımlanıp daha sonra kor 19x19 kafes geometrisinde oluşturuldu. Evren 0 ise sabit reflektör ve dış bölgeyi içermektedir.



Şekil 7.8 M8CAL koru ve test bölgesinin (XZ-düzlemi) çizimi

Yakıt çubukları, kontrol çubukları, zircaloy-zarflı işlevsiz elemanlar, erişim-boşluklu işlevsiz düzenekleri ayrı everenlerde tanımlanıp daha sonra kor 19x19 kafes geometrisinde oluşturuldu. Evren 0 ise sabit reflektör ve dış bölgeyi içermektedir.

Koru modelinde yer alan malzemeler yakıt, soğutucu(hava), zircaloy, alüminyum, zehir (B_4C), grafit ve çelik içermektedir. Malzeme kartında yer alan malzemelerin yoğunlukları program tarafından hesaplatıldı. M8 raporlarından farklı olarak test bölgesindeki ortalama nötron akısının hesaplanabilmesi amacıyla test aracı çıkarılmış ve kor geometrisinde yer alan diğer boşluklarla beraber test bölgesi de hava ile doldurulup sayım alınmıştır.

Yakıt içerisindeki Bor safsızlığı 7,53 ppm olarak tanımlandı. Yakıttaki karbon ve grafitin yüzdeleri ise sırasıyla %41 ve %59 olarak tanımlandı. Grafit yüzdesi programa iki farklı karbon kütüphanesi kullanılarak tanıtıldı.

Şekil 7.8'de şu renkteki bölgeler reflektör, şunlar yakıt ve şunlar da kontrol çubuğudur ve şu renkler ise soğutucudur.

7.2. DPA, Hidrojen ve Helyum Oluşumunun Hesaplanması

TREAT korunun test bölgesinde kararlı durum operasyonda ışınlanacak yüksek-entropi ve daha sonra karşılaştırılması yapılacak nükleer reaktörlerde kullanılan ticari alaşımların radyasyon hasarları hesaplanırken öncelikle alaşımların belirlenen enerji grupları için ortalama yer değiştirme tesir kesitlerinin (σ_D) belirlenmesi gerekmektedir. SPECOMP kodu ile element içerikleri ile alaşımlar, alaşımı oluşturan elementlerin (n , γ) ve β -bozunumu tepkimeleri sonucu geri tepme enerjileri, atom yüzdeleri, ortalama yer değiştirme eşik enerjileri, atom ve kütle numaraları giriş dosyasına yazılarak alaşımlar oluşturulmuştur. Ticari ve yüksek-entropi alaşımları oluşturan elementlerin atom yüzdeleri Ek B Tablo B.1'de gösterilmiştir. Programın çıktıları (belirlenen 100 enerji grubu için 100 ortalama yer değiştirme tesir kesiti) SPECTER kodunun alaşımlar bölümüne eklenmiştir. Tezde incelenecek yüksek-entropi alaşımların büyük çoğunluğu eşit mollere sahip elementler ile oluşturulmuştur. SERPENT kodu ile elde edilen 100 enerji grubuna bağlı nötron akısı SPECTER kodunun giriş dosyasına tanımlanmış ve saniye başına ve belirlenen süreler için DPA, helyum ve hidrojen üretimi hesaplanmıştır. Elde edilen bu değerler de literatürdeki DPA hesaplarıyla [10] yakın çıkmıştır.

Tezde nötron ışınlaması sonuçlarını incelemek için literatürdeki yüksek-entropi alaşımlar seçilirken özellikle kobalt (Co) elementini içermeyen alaşımlar tercih edilmiştir. Bunun sebebi kobalt (Co) elementinin nötron ile etkileşiminde (n , γ) tesir kesitinin yüksek olmasıdır. Kobalt içeren alaşımları elediğimizde seçilen yüksek-entropi alaşımlar büyük ölçüde refrakter metallere oluşmaktadır. Çalışma için belirlenmiş 24 adet yüksek-entropi alaşım Çizelge 7.1'de faz özellikleri değerlik elektron konsantrasyonları, karışım entalpi ve entropileri, erime sıcaklıkları, delta ve omega değerleri ve referansları ile birlikte listelenmiştir. Orijinal SPECOMP kodunun maksimum 5 elementli alaşımlar oluşturabilmesi nedeniyle, yüksek-entropi alaşımların genel tanımına da uygun şekilde 4 veya 5 element içeren alaşımlar seçilmiştir.

Çizelge 7.1 Seçilen Yüksek entropi alaşımların özellikleri

HEA	Fazlar	VEC	ΔH_{mix} [kJ/mol]	ΔS_{mix} [j/mol. K]	T_m (K)	Ω	δ [%]	Ref
AlCrFeNiMo	BCC+ σ	6.6	-10.72	13.38	-	-	-	[101]
Al_{1.5}CrFeMnTi	BCC+L2 ₁ +Laves	-	-17.98	13.25	1609.46	1.19	6.41	[102]
Al_{0.5}CrFeMnNi_{0.5}	BCC	7.0	-6.77	12.67	1711.17	3.20	4.03	[103]
NbTiMoV	BCC	5	-2.75	11.52	2448.25	10.256	3.42	[104]
AlNbTiMoV	BCC	4.6	-12.8	13.38	2145.3	2.242	3.14	[105]
AlNbTiV	BCC	4.25	-16.25	11.53	1678.87	1.38	3.30	[116]
NbTiVTa	BCC	4.75	-0.25	11.53	2548	117.46	3.34	[107]
NbTiVTaAl	BCC	4.40	-13.44	13.38	2225	2.22	3.16	[108]
NbTiVZr	BCC	-	-0.25	11.53	1977.50	103.76	6.03	[109]
AlNbTiVZr	BCC+Laves+Zr ₂ Al	4.2	-17.44	13.38	1714.09	1.52	5.53	[110]
CrCuFeNiZr	BCC+bileşikler	7.8	-14.40	13.38	1831.60	1.70	9.91	[111]
CrCuFeMnNi	BCC+FCC	8.4	2.72	13.38	1710	8.41	0.92	[111]
CrCuFeNiMo	FCC	8.2	4.64	13.38	1985	5.72	2.92	[111]
FeNiMnCr	-	-	-	-	-	-	-	[112]
CrNbTiZr	BCC+Laves	-	-5.0	11.53	1976.75	5.19	7.84	[113]
CrNbTiVZr	BCC+Laves	-	-4.64	13.38	1963.40	6.45	7.67	[113]
MoNbTaW	-	-	-	-	-	-	-	[114]
MoNbTaVW	BCC	-	-4.64	13.38	2962.95	8.54	3.21	[115]
MoNbTaTiV	BCC	5	-2.47	13.37	2341	14.1	3.36	[116]
MoNbCrVTi	BCC	5.2	-4.32	13.38	2390	7.40	5.54	[117]
MoNbCrZrTi	BCC	5	-5.76	13.38	2379	5.53	8.13	[117]
MoNbTiVZr	BCC+Laves	4.8	-2.45	13.4	-	13.0	6.78	[117]
NbTaTiVZr	BCC	-	0.45	13.4	-	73.1	6.47	[118]
WTaCrV	-	-	-	-	-	-	-	[119]

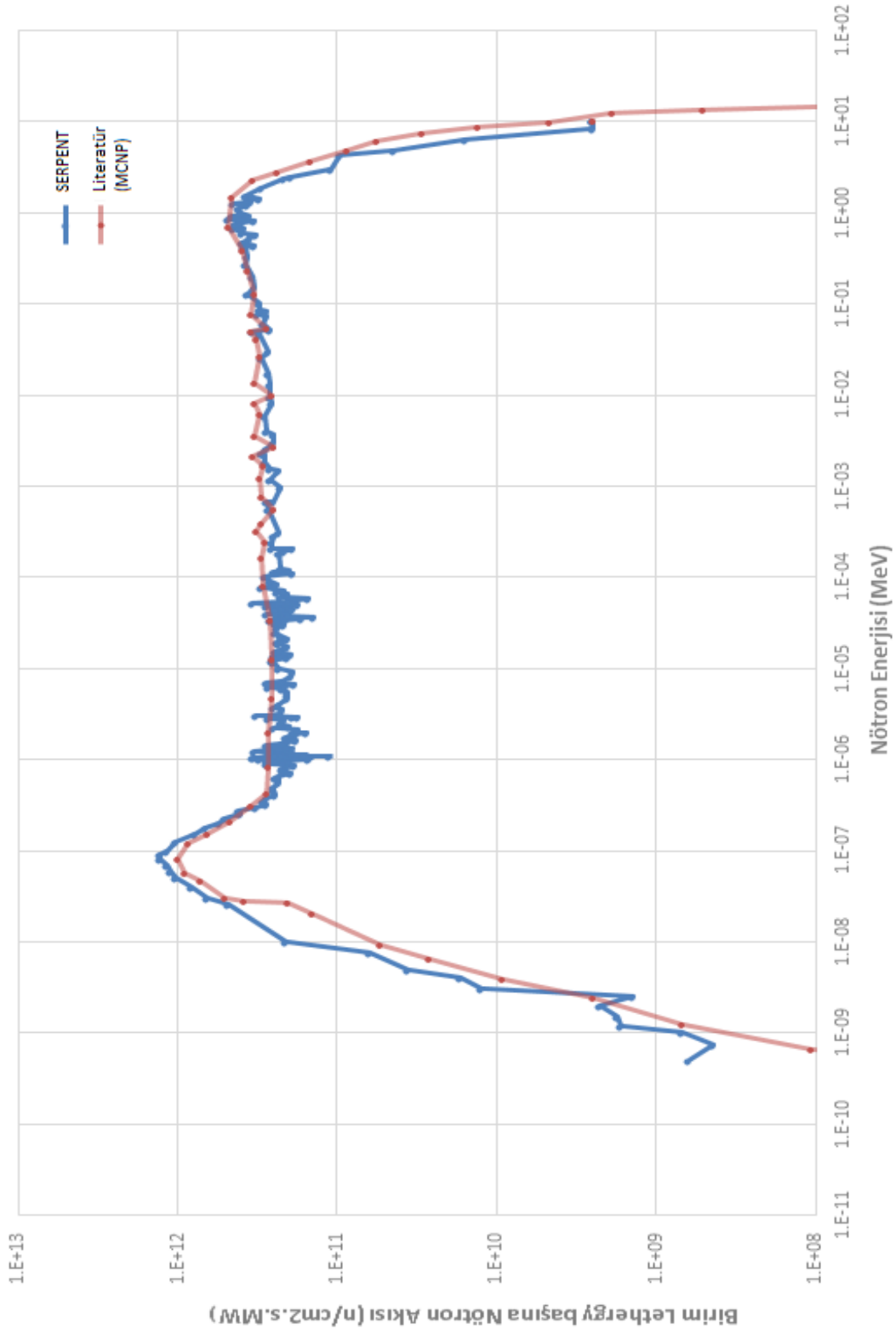
8. SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRME

8.1. TREAT Test Bölgesindeki Nötron Spektrumu

SERPENT kodu ile nötron spektrumu çıkarılırken detektör kartları kullanıldı. Belirlenen hacim içerisinde (TREAT test bölgesi) tanımlanan malzemede (hava) parçacık başına nötron akısı 'dm' komutu ile elde edildi ve hacme ve reaktörün kararlı durum operasyon gücüne göre normalize edildi. Nötron akısı için enerji grupları Scale-238 ve SPECTER kodunun örnek girdisinde yer alan 100 enerji grubu için ayrı akı verileri alındı ve Şekil 8.1'deki birim letarji ve birim MW başına nötron akıları çizildi. Ayrıca test bölgesi için elde edilen letarji başına 238-grup nötron akısı literatürdeki MCNP kodu ile elde edilmiş Şekil 8.2'de gösterilen spektrumla karşılaştırıldı. Şekil 7.7'de mor renk ile gösterilen (19x19'luk kafesin tam orta bölge sinde yer alan test bölgesi için, şu yükseklikler arasında) bölge için toplam ortalama nötron akısı 4×10^{13} hesaplanmıştır. Şekil 8.1'de hızlı nötronların sayısının 0,5 keV-10 MeV aralığında değiştiği görülmektedir. Hızlı bölgedeki yüksek enerjili nötronların etkisi

Şekil 8.2'de gösterilen TREAT test bölgesindeki enerjiye bağlı nötron akısı dağılımı INL'nin test aracıyla yaptığı MCNP modelinden elde edilmiştir ve farklı sıcaklık ve kor konfigürasyonları (yarım ve tam açık kor) için çizdirilmiştir. Çizimde Scale-252 grup yapısı kullanılmıştır. Test bölgesinin içerisindeki nötron akısını yaklaşık 30 % termal (<0,625 eV), 50% epitermal ve 20 % hızlı (>100 keV) oranındaki nötronlar oluşturmaktadır.

TREAT'de yapılan geçmiş nötron akı ölçümleri önemli ölçüde temin edilebilir değildir. Swanson'un raporunda [] merkezi boşluk için nötron akı değeri $5 \times 10^{12} n/cm^2/s/MW$ (birim bu çalışma ile karşılaştırılabilmesi için çevrilmiştir) olarak belirtilmiştir. Fakat raporda nötron akısının nasıl ölçüldüğü, kor konfigürasyonu ve test aracı bilinmemektedir. SERPENT ve MCNP kodlarıyla elde edilen sonuçlar karşılaştırıldığında grafik değerlerinin birbiri ile örtüştüğü gözlenmiştir.



Şekil 8.1 TREAT Test Bölgesindeki Nötron spektrumlarının karşılaştırılması

8.2. Metalik Alaşımlarda DPA, Hidrojen ve Helyum Gazı Üretim Hızı

Yüksek-entropi alaşımlarda DPA ve gaz oluşum miktarlarını hesaplamadan önce işletmedeki nükleer güç santrallerinde yapısal malzeme (zarf malzemesi, basınç kabı vb.) olarak kullanılan metal alaşımlarından ve yeni nesil reaktör ve füzyon uygulamalarında kullanılacak alaşım kompozisyonları oluşturularak elde edilen sonuçlar Çizelge 8.1’de listelenmiştir. Daha sonra ticari alaşımlar ile yüksek-entropi alaşımların sonuçları karşılaştırılmıştır.

Çizelge 8.1 Ticari alaşımlar için sonuçlar

Ticari metalik alaşımlar	σ_D (<i>barn</i>)	DPA/s	DPA (60y)	Helyum (appm/s)	Hidrojen (appm/s)
MA957	105,82	9,18E-11	0,174	1,08E-10	2,20E-09
12YTW	123,78	1,07E-10	0,202	1,04E-10	2,18E-09
9CRODS	106,08	9,20E-11	0,174	1,07E-10	2,23E-09
T91	107,10	9,29E-11	0,176	1,11E-10	2,21E-09
HT9	105,18	9,12E-11	0,173	1,11E-10	2,20E-09
ORNL 9Cr-2WVTa	113,26	9,82E-11	0,186	1,11E-10	2,25E-09
SS316	99,33	8,61E-11	0,163	3,20E-10	5,74E-09
INCONEL718	97,91	8,49E-11	0,161	1,03E-09	1,73E-08
AFA32	121,61	1,05E-10	0,199	4,52E-10	7,71E-09
ZR25NB	95,06	8,24E-11	0,156	1,05E-11	9,24E-11

Seçilen 10 ticari alaşım içerisinde zirkonyum alaşımı Zr25Nb en düşük hasar tesir kesitine ve DPA değerine sahiptir. Çalışmada basınçlı su reaktörlerinde zarf malzemesi olarak kullanılan zircaloy alaşımı yerine, ağır su reaktörlerinde basınç tüpünün yapısında kullanılan Zr25Nb alaşımının seçilmesinin nedeni SPECTER kodunun element kütüphanesinde zircaloy alaşımlarda az miktarda bulunan kalay elementinin yer almamasıdır. SS316 paslanmaz çelik alaşımı da bir diğer düşük DPA değerine sahip alaşımdır. Hidrojen ve helyum gazlarının üretimi göz önüne alındığında Inconel-718 içerdiği nikel (Ni) elementi yüzdesi sebebiyle diğer alaşımlara oranla en yüksek gaz üretimine sahiptir. Zr25Nb alaşımında ise gaz üretim miktarı en düşük seviyede gözlenmiştir. Seçilen diğer ODS ve ferritik/martensitik çeliklerde sonuçların birbirine yakın çıktığı gözlenmiştir.

Bu tez çalışması için, nükleer güç reaktörlerinde kullanıma uygun olabilecek, literatürde yer alan 25 yüksek-entropi alaşım seçildi. Alaşımın seçilirken nötronlarla etkileşime girebilecek kobalt (Co) ve hafniyum (Hf) elementlerini içermemeleri dikkate alındı. Çoğunluğu refrakter metallere oluşan bu yüksek entropi alaşımınla yapılan hesaplamalardan elde edilen DPA, helyum (He) gazı üretimi ve hidrojen gazı üretimi sonuçları sırası ile Çizelge 8.2, Çizelge 8.3 ve Çizelge 8.4'te listelenmiştir. Radyasyon hasarı sonuçlarına bakıldığında en düşük DPA ve gaz üretim miktarına sahip olan yüksek-entropi alaşımınlar MoNbTaW ve MoNbTaVW olmuştur. Yüksek hasar tesir-kesitine sahip alüminyum (Al) içeren $Al_{1,5}CrFeMnTi$ ise en yüksek DPA değeri ile sonuçlanmıştır. Yine 25% oranında nikel (Ni) içeren FeNiMnCr alaşımında ise en yüksek tepkime gazları üretimi gözlenmiştir.

Şekil 8.7 ve Şekil 8.8'de ise sırasıyla seçilen yüksek entropi alaşımınların ticari alaşımınlar ile radyasyon hasarı ve tepkime gazları üretim miktarları karşılaştırılmıştır. Inconel 718 başta olmak üzere, Nikel (Ni) yüzdesi yüksek ticari alaşımınlara oranla refrakter yüksek entropi alaşımınların tepkime gazı üretim miktarları daha düşük elde edilmiştir.

Çizelge 8.2 Yüksek-entropi alaşımınlar için radyasyon hasarı ve tepkime gazlarının üretim sonuçları

HEA	σ_D (barn)	DPA/s	Helyum (appm/s)	Hidrojen (appm/s)	Ref
AlCrFeNiMo	113,24	9,83E-11	4.75E-11	7.61E-10	[101]
AlCrFeMnTi	130,39	1,13E-10	1.64E-11	1.44E-10	[102]
AlCrFeMnNi	122,37	1,06E-10	3.07E-11	4.98E-10	[103]
NbTiMoV	105,29	9,14E-11	8.29E-12	4.00E-11	[104]
AlNbTiMoV	119,55	1,04E-10	1.16E-11	6.52E-11	[104]
AlNbTiV	130,15	1,13E-10	1.49E-11	8.39E-11	[105]
NbTiVTa	100,72	8,74E-11	8.29E-12	4.13E-11	[106]
NbTiVTaAl	165,67	1,44E-10	1.16E-11	6.62E-11	[107]
CrNbTiZr	102,83	8,92E-11	9.66E-12	7.64E-11	[108]
NbTiVZr	109,57	9,51E-11	8.45E-12	4.20E-11	[108]
CrNbTiVZr	109,61	9,51E-11	8.15E-12	6.68E-11	[108]
AlNbTiVZr	124,41	1,08E-10	1.23E-11	7.00E-11	[109]
CrCuFeNiMo	97,892	8,49E-11	4.44E-11	8.40E-10	[111]
CrCuFeNiZr	102,14	8,86E-11	4.46E-11	8.42E-10	[111]

CrCuFeMnNi	107,79	9,35E-11	4.54E-11	8.45E-10	[111]
FeNiMnCr	112,06	9,72E-11	6.00E-11	1.01E-09	[112]
MoNbTaW	65,488	5,68E-11	5.25E-13	6.19E-12	[113]
MoNbTaVW	78,564	6,82E-11	6.14E-13	8.79E-12	[114]
MoNbTaTiV	115,28	1,00E-10	6.14E-13	3.30E-11	[115]
MoNbCrZrTi	99,252	8,61E-11	7.68E-12	6.28E-11	[116]
MoNbCrVTi	105,22	9,13E-11	7.94E-12	6.30E-11	[116]
MoNbTiVZr	105,47	9,15E-11	6.84E-12	3.38E-11	[117]
NbTaTiVZr	97,65	8,47E-11	6,75E-12	3,43E-11	[118]
WTaCrV	109,28	9,48E-11	1.85E-12	4.65E-11	[119]

Çizelge 8.3 Yüksek-entropi alaşımlar için radyasyon hasarı ve tepkime gazlarının üretim sonuçları (DPA/s değerlerine göre göre sıralanmış)

HEA	σ_D (barn)	DPA/s	Helyum (appm/s)	Hidrojen (appm/s)	Ref
MoNbTaW	65,488	5,68E-11	5.25E-13	6.19E-12	[113]
MoNbTaVW	78,564	6,82E-11	6.14E-13	8.79E-12	[114]
CrCuFeNiMo	97,892	8,49E-11	4.44E-11	8.40E-10	[111]
MoNbCrZrTi	99,252	8,61E-11	7.68E-12	6.28E-11	[116]
NbTiVTa	100,72	8,74E-11	8.29E-12	4.13E-11	[106]
CrCuFeNiZr	102,14	8,86E-11	4.46E-11	8.42E-10	[111]
CrNbTiZr	102,83	8,92E-11	9.66E-12	7.64E-11	[108]
MoNbCrVTi	105,22	9,13E-11	7.94E-12	6.30E-11	[116]
NbTiMoV	105,29	9,14E-11	8.29E-12	4.00E-11	[104]
MoNbTiVZr	105,47	9,15E-11	6.84E-12	3.38E-11	[117]
CrCuFeMnNi	107,79	9,35E-11	4.54E-11	8.45E-10	[111]
WTaCrV	109,28	9,48E-11	1.85E-12	4.65E-11	[119]
NbTiVZr	109,57	9,51E-11	8.45E-12	4.20E-11	[108]
CrNbTiVZr	109,61	9,51E-11	8.15E-12	6.68E-11	[108]
FeNiMnCr	112,06	9,72E-11	6.00E-11	1.01E-09	[112]
AlCrFeNiMo	113,24	9,83E-11	4.75E-11	7.61E-10	[101]
MoNbTaTiV	115,28	1,00E-10	6.14E-13	3.30E-11	[115]
AlNbTiMoV	119,55	1,04E-10	1.16E-11	6.52E-11	[104]
AlCrFeMnNi	122,37	1,06E-10	3.07E-11	4.98E-10	[103]
AlNbTiVZr	124,41	1,08E-10	1.23E-11	7.00E-11	[109]
AlNbTiV	130,15	1,13E-10	1.49E-11	8.39E-11	[105]
AlCrFeMnTi	130,39	1,13E-10	1.64E-11	1.44E-10	[102]

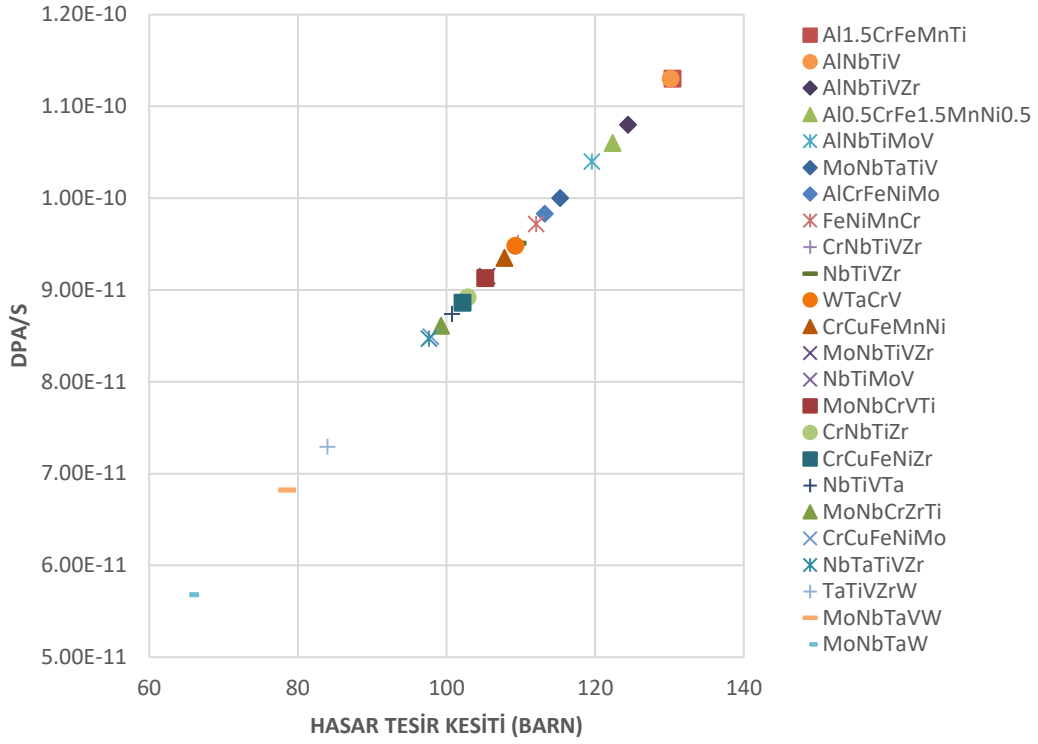
NbTiVTaAl	165,67	1,44E-10	1.16E-11	6.62E-11	[107]
NbTaTiVZr	97,65	8,47E-11	6,75E-12	3,43E-11	[118]

Çizelge 8.4 Yüksek-entropi alaşımlar için radyasyon hasarı ve tepkime gazlarının üretim sonuçları (Helyum (He) gazı üretim miktarına göre sıralanmış)

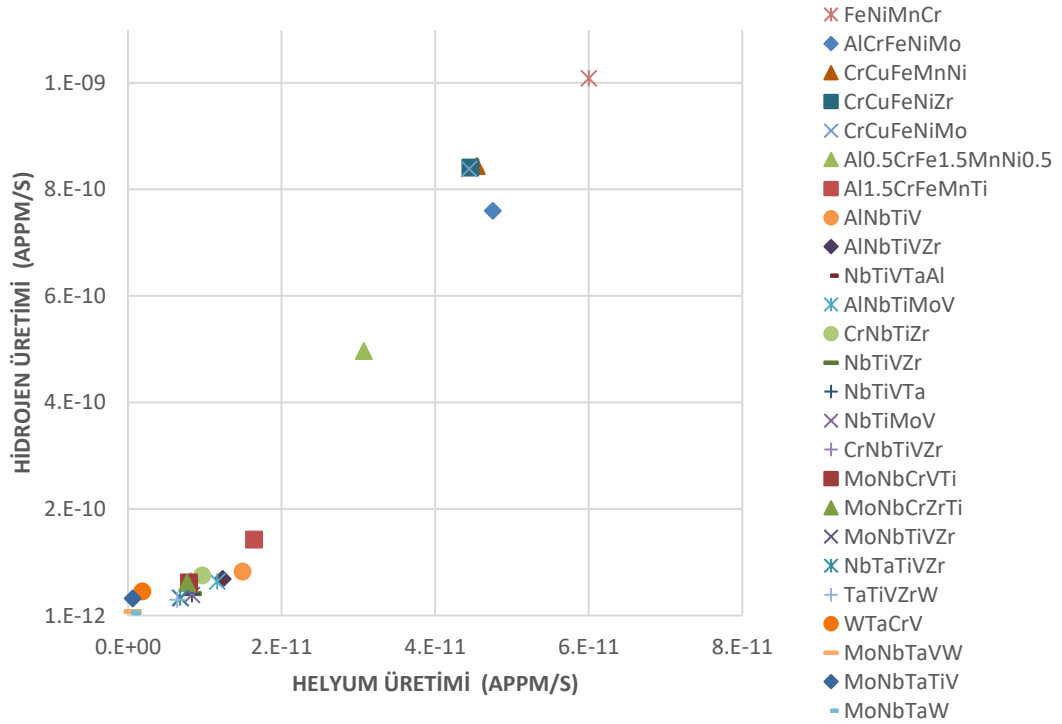
HEA	σ_D (barn)	DPA/s	Helyum (appm/s)	Hidrojen (appm/s)	Ref
MoNbTaW	65,488	5,68E-11	5.25E-13	6.19E-12	[113]
MoNbTaVW	78,564	6,82E-11	6.14E-13	8.79E-12	[114]
MoNbTaTiV	115,28	1,00E-10	6.14E-13	3.30E-11	[115]
WTaCrV	109,28	9,48E-11	1.85E-12	4.65E-11	[119]
MoNbTiVZr	105,47	9,15E-11	6.84E-12	3.38E-11	[117]
MoNbCrZrTi	99,252	8,61E-11	7.68E-12	6.28E-11	[116]
MoNbCrVTi	105,22	9,13E-11	7.94E-12	6.30E-11	[116]
CrNbTiVZr	109,61	9,51E-11	8.15E-12	6.68E-11	[108]
NbTiVTa	100,72	8,74E-11	8.29E-12	4.13E-11	[106]
NbTiMoV	105,29	9,14E-11	8.29E-12	4.00E-11	[104]
NbTiVZr	109,57	9,51E-11	8.45E-12	4.20E-11	[108]
CrNbTiZr	102,83	8,92E-11	9.66E-12	7.64E-11	[108]
AlNbTiMoV	119,55	1,04E-10	1.16E-11	6.52E-11	[104]
NbTiVTaAl	165,67	1,44E-10	1.16E-11	6.62E-11	[107]
AlNbTiVZr	124,41	1,08E-10	1.23E-11	7.00E-11	[109]
AlNbTiV	130,15	1,13E-10	1.49E-11	8.39E-11	[105]
AlCrFeMnTi	130,39	1,13E-10	1.64E-11	1.44E-10	[102]
AlCrFeMnNi	122,37	1,06E-10	3.07E-11	4.98E-10	[103]
CrCuFeNiMo	97,892	8,49E-11	4.44E-11	8.40E-10	[111]
CrCuFeNiZr	102,14	8,86E-11	4.46E-11	8.42E-10	[111]
CrCuFeMnNi	107,79	9,35E-11	4.54E-11	8.45E-10	[111]
AlCrFeNiMo	113,24	9,83E-11	4.75E-11	7.61E-10	[101]
FeNiMnCr	112,06	9,72E-11	6.00E-11	1.01E-09	[112]
NbTaTiVZr	97,65	8,47E-11	6,75E-12	3,43E-11	[118]

Çizelge 8.5 Yüksek-entropi alaşımlar için radyasyon hasarı ve tepkime gazlarının üretim sonuçları (Hidrojen (H) gazı üretim miktarına göre sıralanmış)

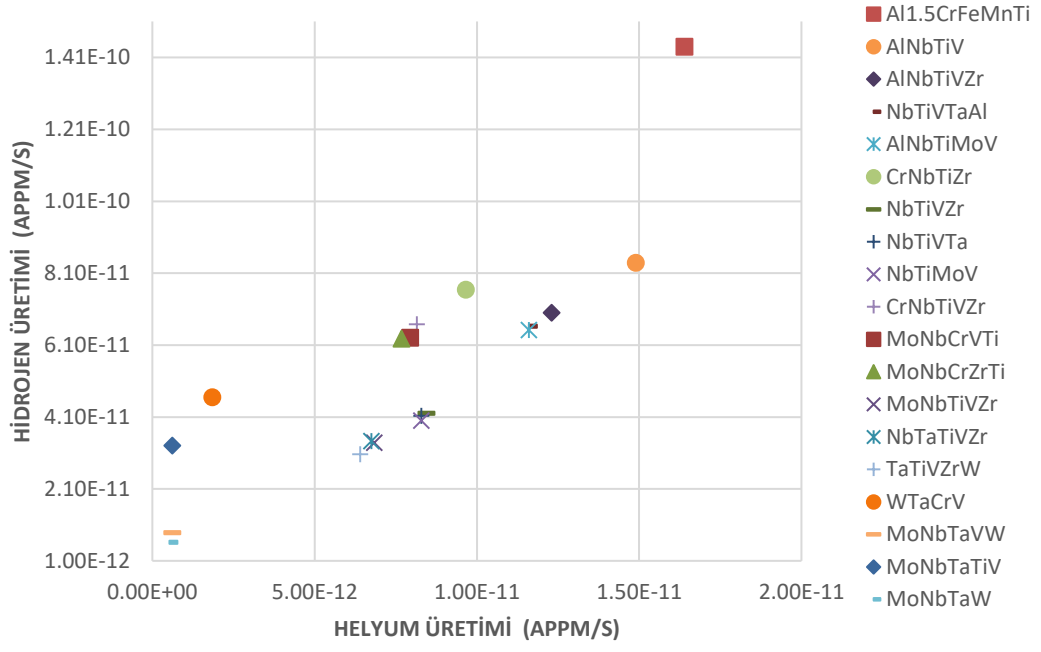
HEA	σ_D (barn)	DPA/s	Helyum (appm/s)	Hidrojen (appm/s)	Ref
MoNbTaW	65,488	5,68E-11	5.25E-13	6.19E-12	[113]
MoNbTaVW	78,564	6,82E-11	6.14E-13	8.79E-12	[114]
MoNbTaTiV	115,28	1,00E-10	6.14E-13	3.30E-11	[115]
MoNbTiVZr	105,47	9,15E-11	6.84E-12	3.38E-11	[117]
NbTiMoV	105,29	9,14E-11	8.29E-12	4.00E-11	[104]
NbTiVTa	100,72	8,74E-11	8.29E-12	4.13E-11	[106]
NbTiVZr	109,57	9,51E-11	8.45E-12	4.20E-11	[108]
WTaCrV	109,28	9,48E-11	1.85E-12	4.65E-11	[119]
MoNbCrZrTi	99,252	8,61E-11	7.68E-12	6.28E-11	[116]
MoNbCrVTi	105,22	9,13E-11	7.94E-12	6.30E-11	[116]
AlNbTiMoV	119,55	1,04E-10	1.16E-11	6.52E-11	[104]
NbTiVTaAl	165,67	1,44E-10	1.16E-11	6.62E-11	[107]
CrNbTiVZr	109,61	9,51E-11	8.15E-12	6.68E-11	[108]
AlNbTiVZr	124,41	1,08E-10	1.23E-11	7.00E-11	[109]
CrNbTiZr	102,83	8,92E-11	9.66E-12	7.64E-11	[108]
AlNbTiV	130,15	1,13E-10	1.49E-11	8.39E-11	[105]
AlCrFeMnTi	130,39	1,13E-10	1.64E-11	1.44E-10	[102]
AlCrFeMnNi	122,37	1,06E-10	3.07E-11	4.98E-10	[103]
AlCrFeNiMo	113,24	9,83E-11	4.75E-11	7.61E-10	[101]
CrCuFeNiMo	97,892	8,49E-11	4.44E-11	8.40E-10	[111]
CrCuFeNiZr	102,14	8,86E-11	4.46E-11	8.42E-10	[111]
CrCuFeMnNi	107,79	9,35E-11	4.54E-11	8.45E-10	[111]
FeNiMnCr	112,06	9,72E-11	6.00E-11	1.01E-09	[112]
NbTaTiVZr	97,65	8,47E-11	6,75E-12	3,43E-11	[118]



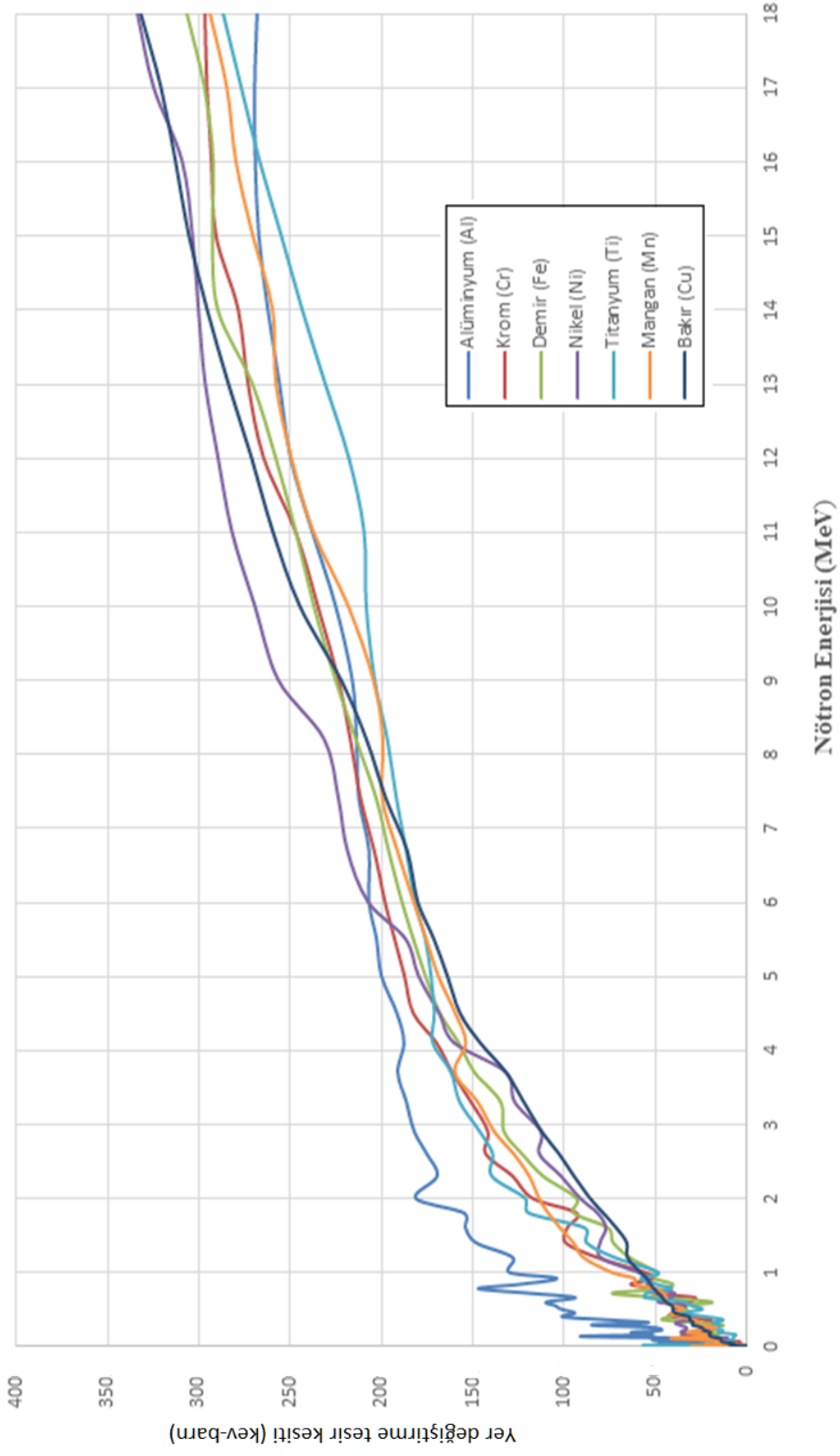
Şekil 8.2 Yüksek-entropi alaşımlarda DPA'nın hasar tesir-kesitine göre değişimi



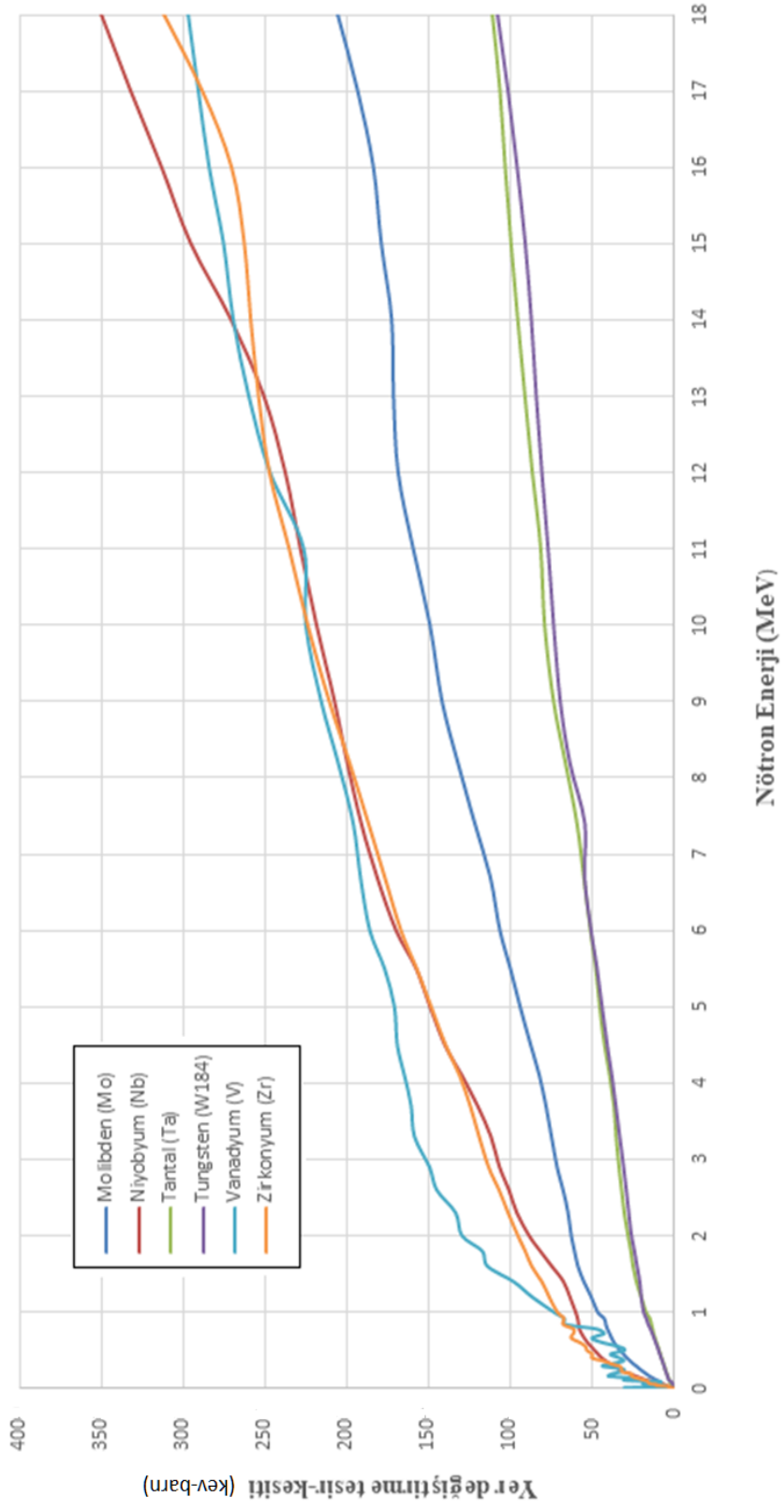
Şekil 8.3 Alaşımlar için tepkime gazlarının üretim miktarları- I



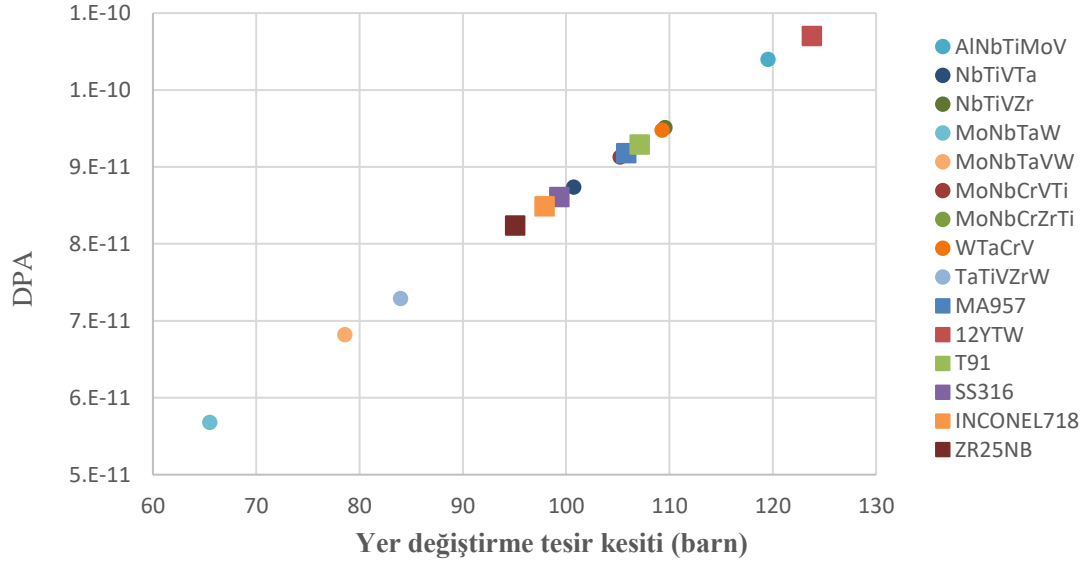
Şekil 8.4 Alaşımlar için tepkime gazlarının üretim miktarları -II



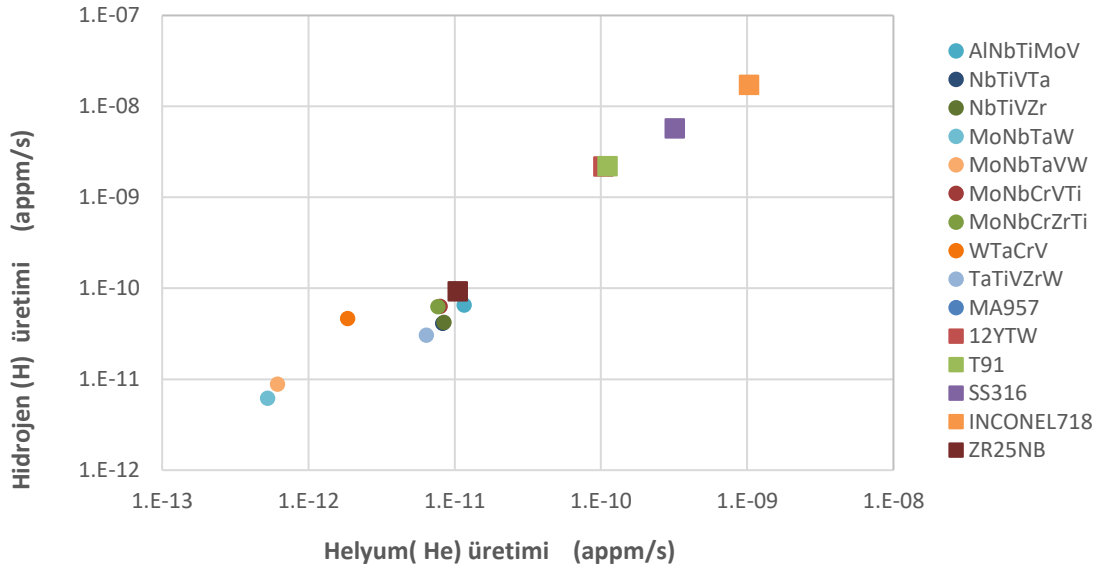
Şekil 8.5 Elementlerin yer değiştirme tesir kesitleri -I



Şekil 8.6 Elementlerin yer değiştirme tesir kesitleri -II



řekil 8.7 Yüksek-entropi alařımların DPA ve hasar tesit-kesitlerinin ticari alařımlarla karřılařtırması



řekil 8.8 Yüksek-entropi alařımların ve ticari alařımların tepkime gazı üretimlerinin karřılařtırması

8.3 Yüksek-entropi Alaşımaları Oluşturan Elementlerin DPA ve Gaz Üretimine Etkileri

Alaşımaların içerdiği elementler ayrı ayrı değerlendirildiğinde Çizelge 8.3'te listelenen sonuçlara ulaşılmıştır. Ayrıca Şekil 8.5 ve Şekil 8.6'te seçilen yüksek entropili alaşımaları oluşturan elementlerin nötron enerjisine bağlı yer değiştirme tesir kesitlerinin grafiği SPECTER kodunun çıktısından alınan verilerle çizilmiştir.

Çizelge 8.6 Yüksek-entropi alaşımaların içerdiği elementlerin radyasyon hasarı sonuçları

Element	σ_D (Barn)	DPA/s	He(appm/s)	H(appm/s)
Demir (Fe)	9.4140E+01	8.1688E-11	1.1177E-11	2.3597E-10
Nikel (Ni)	1.1004E+02	9.5481E-11	1.9465E-10	3.2393E-09
Krom (Cr)	1.0736E+02	9.3162E-11	6.6482E-12	1.6395E-10
Bakır (Cu)	1.2860E+02	1.1159E-10	9.4598E-12	5.6149E-10
Alüminyum (Al)	1.8825E+02	1.6335E-10	2.4911E-11	1.6569E-10
Niyobyum (Nb)	9.4615E+01	8.2100E-11	2.3001E-12	2.1787E-11
Titanyum (Ti)	1.1506E+02	9.9843E-11	3.0118E-11	1.2127E-10
Molibden (Mo)	7.7485E+01	6.7235E-11	0	0
Vanadyum (V)	1.3370E+02	1.1602E-10	7.6101E-13	1.7070E-11
Zirkonyum (Zr)	1.0451E+02	9.0690E-11	1.0215E-12	8.9191E-12
Tantal (Ta)	4.7246E+01	4.0996E-11	0	5.0715E-12
Tungsten (W)	2.5503E+01	2.3051E-11	9.7906E-15	2.5667E-14

Tungsten (W), Molibden (Mo) ve Tantal (Ta)

Tungsten (W) tipik reaktör kaplarında ve çoğu çelikte küçük derişimde, yüksek ergime noktası, yüksek ısı iletkenliđi ve aşınmaya karşı direnci nedeniyle ısı akısının yüksek olduđu bölgelerinde kullanılır. Tepkimelere bađlı helyum ve hidrojen gaz üretimi tungstende önemli derecede deđildir. Diđer bir yandan yapısal özelliklerde ihmal edilemeyecek deđişikliklere neden olabilecek renyum (Re) veya osmiyum (Os) gibi diđer elementlere dönüşümü olasıdır ve tungstenin bulunduđu bölgelerde gaz üretim miktarı önem taşımaktadır. Çizelge 8.3'te listelendiđi üzere molibden (Mo) tepkime gazı üretmemektedir. tantal (Ta) ise helyum (He) gazı üretmemekle birlikte az miktarda hidrojen gazı üretimine katkısı görülmektedir.

Vanadyum (V), Titanyum (Ti) ve Niyobyum (Nb)

Vanadyum Çizelge 8.6'te listelenen elementler arasında alüminyumdan sonra en yüksek hasar tesir kesitine ve buna bağlı DPA/s değerine sahip elementtir. Helyum (He) ve hidrojen (H) üretiminde ise titanyum (Ti) ve niyobyum (Nb) elementleri ile benzer ve düşük oranlardadır.

Demir (Fe), Krom (Cr), Alüminyum (Al) ve Bakır (Cu)

Çeliklerin ana bileşeni demir için gaz üretimi malzemelerin ömrünü belirleme açısından belirleyici faktördür ve özel dikkat gerektirir. Krom da demir ile çok benzer tepkime profiline sahiptir. Fe-56 (n, α) Cr-53 ve Fe-56 (n, p) Mn-56 tepkimeleri demir için helyum ve hidrojen üretiminden sorumlu tepkimeleridir ve yaklaşık 3,7 MeV ve 2,9 MeV'lik eşik enerjilerin üzerindeki nötronlar (n, α) ve (n, p) tepkimelerini gerçekleştirebilir. Alüminyum (Al), HEA'ların içerdiği elementler arasında yer değiştirme tesir kesiti en yüksek element olmuştur. Bununla birlikte alaşım içerisindeki Alüminyum (Al) yüzdesinin artışı DPA'nın da artışı ile sonuçlanmaktadır. Bakır (Cu) ise bir diğer yerdeğiştirme tesir kesiti yüksek elementler arasında yer almıştır.

Zirkonyum (Zr)

Zirkonyum elementinin nötronlarla etkileşiminde düşük tesir-kesitine sahip olması, yüksek entropi alaşımlarda da kullanımına avantaj sağlamaktadır. Hesaplamaların doğruladığı üzere NbTiVZr, TaTiVZrV alaşımlarının yer değiştirme tesir kesitine bağlı DPA değerlerinin düşük olması ile beraber dönüşüm gazları üretim miktarları da diğer alaşımlara oranlar daha az olmuştur.

HEA'ların kullanımının öngörüldüğü yüksek sıcaklıklı reaktörlerde, zirkonyumun su ile tepkimeye girme yatkınlığı sorunlara yol açmaktadır. Bu nedenle, zirkonyum içeren HEA'ların yüksek sıcaklıkta sulu ortamlarda kullanılması mümkün görünmemektedir.

Nikel (Ni)

Radyasyon hasarına bağlı hidrojen (H) ve helyum (He) gazlarının üretimi öncelikli olarak alaşım içerisinde bulunan nikel (Ni) oranına bağlıdır. Nikel derişimde artış olması tepkime gazlarının da artmasıyla sonuçlanmaktadır.

9. TARTIŞMA ve YORUM

Bu çalışmada nükleer güç reaktörlerinde yapısal malzeme olarak kullanılan ve kullanılması düşünülen ticari alaşımlara kıyasla mekanik ve yüksek sıcaklık özellikleri ile avantaj sağlayan yeni alaşım konsepti yüksek-entropi alaşımların yüksek enerjili nötron akısı altında ışınlanması sonucunda alaşımın yapısında meydana gelebilecek radyasyon hasarının ve oluşacak tepkime gazlarının birim zamandaki miktarları hesaplanmış ve yüksek-entropi alaşımların yeni nesil nükleer uygulamalarda kullanıma uygunluğu incelenmiştir.

Nötron akısının neden olduğu radyasyon hasarını öngörebilmek için test koşullarının oluşturulabilmesi amacıyla Geçiş Durumu Reaktör Test Tesisi (TREAT)'nin kuru SERPENT Monte Carlo kodu ile modellenmiştir. Birden fazla element içeren bu alaşımlar için hasar tesir kesitlerinin hesaplanması amacıyla öncelikle SPECOMP kodu kullanılmış ve her bir yüksek-entropi alaşım için SPECTER kodunun kütüphanesinde yer almayan ticari alaşımlar için elde edilen tesir kesitleri koda eklenmiştir. Ayrıca TREAT'in kararlı durum operasyonunda test bölgesindeki 100 enerji grubuna bağlı ortalama nötron akı değerleri ve enerji aralıkları SPECTER kodunun girdisine yazılarak alaşımları oluşturan her bir element için ve literatürde yapılan çalışmalardan seçilen alaşımlar için zamana bağlı DPA değerleri ve tepkime gazlarının üretim hızları hesaplanmıştır.

HEA'ların orijinal tanımı %5-35 arasında beş ve daha fazla element içeren (mikro yapı gözetilmeyen) herhangi bir alaşımdır. Ancak bu tanım, HEA'ların tek fazlı katı çözeltiler oluşturarak mekanik özelliklerini üstün hale getiren teknolojik özelliklerine vurgu yapmamaktadır. Tek fazlı katı çözeltiler oluşturma olasılığının daha yüksek olması nedeniyle dört element içeren alaşımlar da bu tanıma daha sonra dahil edilmiştir. Entalpi, entropi ve δ değerinin katkıları değerlendirilerek HEA sınıflandırmasının nicel ölçümü belirlenmeye çalışılmaktadır. İlk döküm (*As-cast*) durumunda tek fazlı BCC yapı gösteren, ayrıca DFT modellerinde elde edilen kafes parametrelerindeki uyumları ile MoNbTiV ve NbTiVZr refrakter sistemleri radyasyon hasarı hesaplamaları sonucunda DPA ve tepkime gazları üretimi açısından günümüz ticari alaşımlarından daha iyi sonuçlar vermiştir.

Düşük termal nötron tesir-kesiti, yüksek ergime sıcaklığı, BCC kafes yapısı göz önüne alındığında kor içi uygulamalarda zirkonyum en performansı göstermesi beklenmektedir. Sıcaklıkların daha yüksek olduğu yeni nesil reaktör tasarımlarında ise zirkonyumun kullanımı kısıtlıdır.

Mekanik özellikleri optimize etmek ve oksitlenmeye karşı direnci artırmak amacıyla alaşımlara alüminyum (Al) ve krom (Cr) elementleri eklenmektedir. Alüminyumun yüksek hasar tesir kesitine sahip olması nedeniyle alaşım içerisindeki konsantrasyon yüzdesinin artışı DPA değerinin de artışı ile sonuçlanmaktadır.

RHEA'lar için ise oda sıcaklığında gevreklik ve yüksek sıcaklıklarda yetersiz oksitlenme direnci gözlenmektedir. Bu sorun alaşımlama veya yüzey modifikasyonu uygulamaları ile çözülebilir. Uygun sementasyon parametreleri ile alüminize edilen RHEA'lar, nikel-bazlı süper alaşımlara kıyasla yüksek sıcaklıklarda daha üstün performans gösterebilir.

MoNbTaW ve MoNbTaVW refrakter yüksek entropi alaşımları hesaplamalar sonucunda nötronlardan kaynaklanan DPA ve tepkime gazları üretim miktarları yönüyle seçilen diğer yüksek entropi ve ticari alaşımlara kıyasla daha iyi sonuçlar vermiştir.

Akma dayanımı dikkate alındığında, RHEA'lar birçok refrakter alaşıma göre daha üstün özellikler göstermektedir. RHEA'lar ekseriyetle kırılmandır. Özkütleri alaşımda kullanılan elementlere bağlı büyük farklılıklar sergiler, fakat şimdiye dek üretilmiş refrakter alaşımlara oranla daha hafif RHEA'lar elde etmek mümkündür. MoNbTaVW tek faz BCC yapıda katı çözeltilidir ve oda sıcaklığındaki kırılma yüksek VEC değerine (5,4) bağlıdır. Günümüz ticari alaşımlarına kıyasla, özellikle nikel (Ni) elementi içermeyen yüksek entropi alaşımların yüksek sıcaklıkta reaktör uygulamalarında kullanımı tepkime gazları üretimini azaltacağından avantaj sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

- [1] Carmack, Jon. Future Transient Testing of Advanced Fuels (INL/EXT--09-16392). United States, **2009**.
- [2] Wolfensberger. Argonne National Laboratory, Treat reactor pictorial (DRZ0720-0424-EE-00), **1991**.
- [3] T. H. Bauer, A. E. Wright, W. R. Robinson, J. W. Holland, and E. A. Rhodes, "Behavior of Modern Metallic Fuel in TREAT Transient Overpower Tests," Nuclear Technology, Vol. 92, pp. 325–352, December **1990**.
- [4] R. Herbert, M. H. Wood, C. W. Hunter, J. M. Kramer, and A. E. Wright, "Fuel Pin Failure in the PFR/TREAT Experiments," published in Vol. 1 of "Science and Technology of Fast Reactor Safety" (proceedings of an international conference held in Guernsey, England, sponsored by the British Nuclear Energy Society), May 12–16, **1986**.
- [5] USNRC, "Advanced Reactor Research Program (Draft)", (ADAMS #ML070740576), March **2007**.
- [6] Weems Z, Goluoglu S, DeHart MD. Investigations of Rod Positions for Treat M8CAL Analyses. ASME. ASME J of Nuclear Rad Sci.;4(3):031017-031017-7, **2018**.
- [7] Woolstenhulme, N.E., Wachs, D.M., Beasley, A.B., 2014. Transient experiment design for accident tolerant fuels. Trans. Am. Nucl. Soc. 111, 604.
- [8] Bess, J.D., DeHart, M.D. "Baseline Assessment of TREAT for Modeling and Analysis Needs", INL/EXT-15-35372. National Laboratory, Idaho, **2015**.
- [9] DeHart, M.D. et al. "Research in Support of TREAT Kinetics Calculations Using Rattlesnake/BISON Coupling within MAMMOTH,". Proc. PHYSOR 2016, Sun Valley. ID (1-5 2016), **2016**.
- [10] John D. Bess, Nicolas E. Woolstenhulme, Colby B. Jensen, James R. Parry, Connie M. Hill, Nuclear characterization of a general-purpose instrumentation and materials testing location in TREAT, 124, 270-294, **2019**.
- [11] G A Freund; P Elias, D R MacFarlane; J D Geier, J F Boland, "Design summary report on the Transient Reactor Test Facility (TREAT)", ANL-6034, Argonne National Laboratory, **1960**.
- [12] Kontogeorgakos, D.C., Connaway, H. M., & Wright, A. E, TREAT Transient Analysis Benchmarking for the HEU Core (ANL/GTRI/TM--14/11). United States, May,**2014**.
- [13] R W Swanson, L J Harrison, "The Effect of Carbon Crystal Structure on TREAT Reactor Physics Calculations", 1988 International Reactor Physics Conference, Jackson Hole, Wyoming 18-21 September **1988**.
- [14] D Okrent, C E Dickerman, J Gasidlo, D N O'Shea, D F Schoeberle, "The Reactor Kinetics of the Transient Reactor Test Facility (TREAT)", ANL-6174, September **1960**.
- [15] Robinson, W. R., and Bauer, T. H., "The M8 Power Calibration Experiment (M8CAL)," Argonne National Laboratory, Argonne, IL, Report No. ANL-IFR-232,**1994**.

- [16] Idaho National Laboratory, Transient reactor test facility (TREAT) final safety analysis report (S3942-0001-YT), **2009**.
- [17] Kontogeorgakos, D., Derstine, K., Wright, A., Bauer, T., & Stevens, J, Initial Neutronics Analyses for HEU to LEU Fuel Conversion of the Transient Reactor Test Facility (TREAT) at the Idaho National Laboratory (ANL/GTRI/TM--13/4). United States, **2013**.
- [18] MacFarlane, D. R., Freund, G. A., & Boland, J. F. Argonne National Laboratory, Reactor Engineering Division. Hazards summary report on the transient reactor test facility (treat) (ANL-5923), **1958**.
- [19] J.H. Handwer and R.C. Lied, The Manufacture of the Graphite-Urania Fuel Matrix for TREAT, ANL-5963, Lemont, Ill: Argonne National Laboratory, **1960**.
- [20] Bradley K. Heath. Parametric Thermal Models of the Transient Reactor Test Facility (TREAT). United States, **2014**.
- [21] T. Downar, V. Seker, Benchmark Specifications for the TREAT Minimum Critical and M8CAL Cores, University of Michigan, **2016**.
- [22] J. W. Yeh, “Recent progress in high-entropy alloys,” *Ann. Chim. Sci. Des Mater.*, vol. 31, no. 6, pp. 633–648, **2006**.
- [23] Guo, S., Hu, Q., Ng, C., Liu, C.T., 2013a. More than entropy in high-entropy alloys: forming solid solutions or amorphous phase. *Intermetallics* 41, 96_103.
- [24] Nuclear Power Reactors in the World. Online, **2011**.
- [25] Y. Zhang *et al.*, “Microstructures and properties of high-entropy alloys,” *Prog. Mater. Sci.*, vol. 61, no. September 2013, pp. 1–93, **2014**.
- [26] Y. Zhang, Y. J. Zhou, J. P. Lin, G. L. Chen, and P. K. Liaw, “Solid-solution phase formation rules for multi-component alloys,” *Adv. Eng. Mater.*, vol. 10, no. 6, pp. 534–538, **2008**.
- [27] Fisher, S., J. Hardbottle and N. Aldridge, Radiation hardening in Magnox pressure-vessel steels. *Philosophical Transactions of the Royal Society A-Mathematical Physical and Engineering Sciences*: p. 301-332, **1985**.
- [28] Allen, T.R., P.J. King and L. Nelson. General corrosion properties of titanium based alloys for the fuel claddings in the supercritical water-cooled reactor. In *Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power System- Water Reactors*. Japan: The Minerals, Metals and Materials Society, **2005**.
- [29] Naslain, R., Design, preparation and properties of non-oxide CMCs for application in engines and nuclear reactors: an overview. *Composites Science and Technology*, 64(2), 155–170. doi:10.1016/s0266-3538(03)00230-6, **2004**.
- [30] Matsuo, Y., Y. Suda and N. Suda, Patent No: 4963323. Japan, **1990**.
- [31] Nanstad, R.K., *Encyclopedia of Materials Science and Engineering*. Bever, M. B.: New York. p. 3928, **1986**.
- [32] Olander, D., Nuclear fuels- Present and future. *Journal of Nuclear Materials*: p. 1-22., **2009**.
- [33] A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems. U.S. DOE Nuclear Energy Research Advisory Committee, **2002**.

- [34] Allen, T., J. Busby, M. Meyer and D. Petti, P, Material challenges for nuclear systems. *Materials Today*: p. 15-23, **2010**.
- [35] Yvon, P. and F. Carré, Structural materials challenges for advanced reactor systems. *Journal of Nuclear Materials*: p. 217-222, **2009**.
- [36] Speidel, M. and R. Magdowski, Stress corrosion cracking of nuclear reactor pressure vessel and piping steels. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*: p. 119-142, **1988**.
- [37] Lucas, G., The evolution of mechanical property change in irradiated austenitic stainless steels. *Journal of Nuclear Materials*, p. 287-305, **1993**.
- [38] Smith, C., *Nuclear Reactor Materials*. Detroit: Addison-Wesley, **1967**.
- [39] Urbanic, V. and T. Heidrick, High-temperature oxidation of Zircaloy-2 and Zircaloy-4 in steam. *Journal of Nuclear Materials*: p. 251-261, **1978**.
- [40] Bradbrook, J., G. Lorimaer and N. Ridley, The precipitation of zirconium hydride in zirconium and Zircaloy-2. *Journal of Nuclear Materials*, **1972**, p. 142-160.
- [41] Ursu, I., *Physics and Technology of Nuclear Materials*, Bucharest: Pergamon Press, **1985**.
- [42] Tanaka, S., Accident at the Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Stations of TEPCO -Outline & lessons learned-. *Proceedings of the Japan Academy*, **2012**, p. 471-484.
- [43] Whitmarsh, C., Review of Zircaloy-2 and Zircaloy-4 properties relevant to N.S. Savannah reactor design. **1962**, Oak Ridge National Laboratory: Tennessee.
- [44] Gibbs, J.W., On the Equilibrium of Heterogeneous Substances. *Transactions of the Connecticut Academy of Arts and Sciences*, 1874-1878. 3(108-248): p. 343-524.
- [45] Huang, K., A study on the multicomponent alloy systems containing equal-mole elements, in M.S. Thesis, Taiwan, **1996**.
- [46] Chen, T., Electrical properties of simple-phase high-entropy $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ ($0 \leq x \leq 2$) alloys, MS thesis, National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan ROC, **2012**.
- [47] Yeh, J., S. Chen, S. Lin, J. Gan, T. Chin, T. Shun, C. Tsau and S. Chang, Nanostructured High-Entropy Alloys with Multiple Principal Elements: Novel Alloy Design Concepts and Outcomes. *Advanced Engineering Materials*, **2004**: p. 299-303.
- [48] Cantor, B., I. Chang, P. Knight and A. Vincent, Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering A*, **2004**: p. 213–218.
- [49] MacDonald, B.E., et al., Recent Progress in High Entropy Alloy Research. *JOM*, **2017**.69(10): p. 2024-2031.
- [50] Lu, Y et al. A promising new class of high-temperature alloys. Eutectic high entropy alloys, *Sci. Rep.* 4, 6200. DOI:10.1038/srep06200, **2014**.
- [51] Ming-Hung Tsai and Jien-Wei Yeh, High-Entropy Alloys: A Critical Review, *Materials Research Letters*, 2:3, 107-123, DOI: 10.1080/21663831.2014.912690, **2014**.
- [52] Porter, D.A., K.E. Easterling, and M. Sherif, *Phase Transformations in Metals and Alloys*, (Revised Reprint)., CRC press, **2009**.

- [53] Miracle, D. and O. Senkov, A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Materialia*, **2017**. 122: p. 448-511.
- [54] Lucas, M.S., et al., Absence of long-range chemical ordering in equimolar FeCoCrNi. *Applied Physics Letters*, **2012**. 100(25): p. 251907.
- [55] Swalin, R.A., *Thermodynamics of Solids*, 2nd Ed., New York: Wiley, **1991**.
- [56] Gaskell, D.R., *Introduction to the Thermodynamics of Materials*, CRC Press, **2008**.
- [57] Miracle, D.B., et al., Exploration and development of high entropy alloys for structural applications. *Entropy*, **2014**. 16(1): p. 494-525.
- [58] Yeh, J.W., Alloy Design Strategies and Future Trends in High-Entropy Alloys. *Jom*, **2013**. 65(12): p. 1759-1771.
- [59] K. M. Youssef, A. J. Zaddach, C. Niu, et al., *Mater. Res. Lett.* 3, 95–99, **2014**.
- [60] O. Senkov, S. Senkova, C. Woodward, et al., *Acta Mater.* 61, 1545–1557, **2013**.
- [61] R. Kozak, A. Sologubenko, W. Steurer, *Zeitschrift für Krist. - Cryst. Mater.* 230, 55–68, **2015**.
- [62] Senkov, O.N., et al., Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys. *Intermetallics*, **2011**. 19(5): p. 698-706.
- [63] Senkov, O.N. and C.F. Woodward, Microstructure and properties of a refractory NbCrMo_{0.5}Ta_{0.5}TiZr alloy. *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, **2011**. 529: p. 311-320.
- [64] Guo, S., et al., Effect of valence electron concentration on stability of FCC or BCC phase in high entropy alloys. *Journal of Applied Physics*, **2011**. 109(10): p. 103505.
- [65] Guo, S. and C.T. Liu, Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid-solution phase or amorphous phase. *Progress in Natural Science: Materials International*, **2011**, 21(6): p. 433-446.
- [66] Zhang, Y., et al., Solid-solution phase formation rules for multi-component alloys. *Advanced Engineering Materials*, **2008**. 10(6): p. 534-538.
- [67] Zhang, Y., X. Yang, and P.K. Liaw, Alloy design and properties optimization of highentropy alloys. *JOM*, **2012**. 64(7): p. 830-838.
- [68] Yang, X. and Y. Zhang, Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multicomponent alloys. *Materials Chemistry and Physics*, **2012**. 132(2-3): p. 233-238.
- [69] S. Guo, C. Ng, J. Lu, et al., *J. Appl. Phys.* 109, 103505, **2011**.
- [70] M.C. Gao, J.W. Yeh, Peter K. Liaw, Y. Zhang, *High-Entropy Alloys Fundamentals and Applications*, Springer, **2016**.
- [71] Guo, S., et al., More than entropy in high-entropy alloys: Forming solid solutions or amorphous phase. *Intermetallics*, **2013**. 41: p. 96-103.
- [72] Davis, J.R., *ASM Specialty Handbook: Nickel, Cobalt, and Their Alloys.*, Materials Park, OH: ASM International, **2000**.

- [73] Wu, W.H., C.C. Yang, and J.W. Yeh, Industrial development of high-entropy alloys. *Annales De Chimie-Science Des Materiaux*, **2006**. 31(6): p. 737-747.
- [74] Takeuchi, A., Inoue, A., Calculations of mixing enthalpy and mismatch entropy for ternary amorphous alloys. *Mater. Trans.* 41, 1372-1378, **2000**.
- [75] Yeh, J.W., Future trends of high-entropy alloys. High-Value Metals Forum, MRS-T Annual Meeting-2013, Jhongli, Taiwan, **2013**.
- [76] Cullity, B.D., Stock, S.R., Elements of X-Ray Diffraction. Prentice Hall, New Jersey, USA, **2001**.
- [77] Reed-Hill, R.E., Abbaschian, R., Physical Metallurgy Principles. PWS Publishing, Boston, USA, **1994**.
- [78] B. S. Murphy, Jien-Wei Yeh, S. Ranganathan, High Entropy Alloys, Elsevier, Book, **2014**.
- [79] Porter, D.A., Easterling, K.E., Phase Transformations in Metals and Alloys. CRC Press, London, UK, **1992**.
- [80] Senkov, O.N., Wilks, G.B., Miracle, D.B., Chuang, C.P., Liaw, P.K., Refractory high- entropy alloys. *Intermetallics* 18, 1758-1765, **2010**.
- [81] Senkov ON, Scott JM, Senkova SV, Miracle DB, Wood- ward CF. Microstructure and room temperature prop- erties of a high-entropy TaNbHfZrTi alloy. *J Alloys Compd.* **2011**; 509:6043–6048.
- [82] Tsai, K.Y., Tsai, M.H., Yeh, J.W., Sluggish diffusion in CoCrFeMnNi highentropy alloys. *Acta Mater.* 61, **2013**.
- [83] Yeh JW, Chen SK, Lin SJ, Gan JY, Chin TS, Shun TT, Tsau CH, Chang SY. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes. *Adv Eng Mater.* **2004**; 6:299–303.
- [84] Chen YY, Duval T, Hong UT, Yeh JW, Shih HC, Wang LH, Oung JC. Corrosion properties of a novel bulk Cu_{0.5}NiAlCoCrFeSi glassy alloy in 288 C high-purity water. *Mater Lett* **2007**; 61:2692–2696.
- [85] Singh S, Wanderka N, Murty BS, Glatzel U, Ban- hart J. Decomposition in multicomponent AlCoCr- CuFeNi high-entropy alloy. *Acta Mater.* **2011**;59: 182–190.
- [86] Tsai MH, Wang CW, Tsai CW, Shen WJ, Yeh JW, Gan JY, Wu WW. Thermal Stability and performance of NbSiTa- TiZr high-entropy alloy barrier for copper metallization. *J Electrochem Soc.* **2011**;158:H1161–H1165.
- [87] Tsai CW, Chen YL, Tsai MH, Yeh JW, Shun TT, Chen SK. Deformation and Annealing behaviors of high-entropy alloy Al_{0.5}CoCrCuFeNi. *J Alloys Compd.* **2009**; 486:427–435.
- [88] Yeh, J.W., Recent progress in high-entropy alloys. *Ann. Chim. Sci. Mat.* 31, 633-648, **2006**.
- [89] Neuhäuser, H. and C. Schwink, Solid solution strengthening. *Materials science and technology*, **1993**.

- [90] Senkov, O.N., J.M. Scott, S.V. Senkova, D.B. Miracle and C.F. Woodward, Microstructure and room temperature properties of a high-entropy TaNbHfZrTi alloy. *Journal of Alloys and Compounds*, **2011**. 509(20): p. 6043-6048.
- [91] Sauthoff, G., Multiphase intermetallic alloys for structural applications. *Intermetallics*, **2000**. 8(9–11): p. 1101-1109.
- [92] Westbrook, J.H. and R.L. Fleischer, *Intermetallic Compounds, Basic Mechanical Properties and Lattice Defects of Intermetallic Compounds*, Wiley, **2000**.
- [93] Burkhanov, E.M.S.S., *Physical Metallurgy of Refractory Metals and Alloys*. Springer, Boston, MA, **1995**.
- [94] B.S. Murty, J.W. Yeh, S. Ranganathan, *High-Entropy Alloys*, Elsevier, **2014**.
- [95] Haynes-230 alaşımı, www.haynesintl.com/230HaynesAlloy.htm. (Erişim tarihi: Ağustos 2019).
- [96] Inconel-718 alaşımı, www.specialmetals.com/inconel-alloy-718 (Erişim tarihi: Ağustos 2019).
- [97] Senkov, O.N., et al., Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys. *Intermetallics*, **2011**. 19(5): p. 698-706.
- [98] Wu, Y.D., et al., A refractory Hf₂₅Nb₂₅Ti₂₅Zr₂₅ high-entropy alloy with excellent structural stability and tensile properties. *Materials Letters*, **2014**. 130: p. 277-280.
- [99] Huang, H., et al., Phase-Transformation Ductilization of Brittle High-Entropy Alloys via Metastability Engineering. *Advanced Materials*, **2017**. 29(30): p. 1701678-n/a.
- [100] Dirras, G., et al., Elastic and plastic properties of as-cast equimolar TiHfZrTaNb highentropy alloy. *Materials Science and Engineering A*, **2016**. 654: p. 30-38.
- [101] Y. Dong, Y. Lu, J. Kong, J. Zhang, T. Li, Microstructure and mechanical properties of multi-component AlCrFeNiMox high-entropy alloys, **2013**.
- [102] Design of Light-Weight High-Entropy Alloys, Rui Feng, Michael C. Gao, Chanhoo Lee, Michael Mathes, Tingting Zuo, Shuying Chen, Jeffrey A. Hawk, Yong Zhang and Peter K. Liaw
- [103] Yang X, Zhang Y, Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multicomponent alloys. *Mater Chem Phys* 132(2–3):233–238, **2012**. doi: 10.1016/j.matchemphys.2011.11.021
- [104] Microstructures and Crackling Noise of Al_xNbTiMoV High Entropy Alloys, Shu Ying Chen 1, Xiao Yang 1, Karin A. Dahmen 2, Peter K. Liaw 3, and Yong Zhang 1, doi:10.3390/e16020870
- [105] Design of Light-Weight High-Entropy Alloys Rui Feng, Michael C. Gao, Chanhoo Lee, Michael Mathes, Tingting Zuo, Shuying Chen, Jeffrey A. Hawk, Yong Zhang and Peter K. Liaw.
- [106] NbTaV- (Ti, W) Refractory High-entropy Alloys: Experiments and Modeling H.W. Yao, J.W. Qiao, M.C. Gao, J.A. Hawk, S.G. Mad, H.F. Zhou, Y. Zhang

- [107] Microstructure and Compressive Properties of NbTiVTaAl_x High Entropy Alloys X. Yanga, Y. Zhanga, and P.K. Liawb
- [108] Senkov, O.N.; Senkova, S.V.; Woodward, C.F.; Miracle, D.B. Low-density, refractory multi-principal element alloys of the Cr–Nb–Ti–V–Zr system: Microstructure and phase analysis. *Acta Mater.* **2013**, 61, 1545–1557
- [109] N. D. Stepanov, N. Yu. Yurchenko, D. G. Shaysultanov, G. A. Salishchev & M. A. Tikhonovsky, Effect of Al on structure and mechanical properties of Al_xNbTiVZr (x=0, 0.5, 1, 1.5) high entropy alloys, *Materials Science and Technology*, 31:10, 1184-1193, DOI: 10.1179/1743284715Y.0000000032, **2015**.
- [110] Zhang Y, Lu ZP, Ma SG, Liaw PK, Tang Z, Cheng YQ, Gao MC, Guidelines in predicting phase formation of high-entropy alloys. *MRS Commun* 4(2):57–62. doi:10.1557/mrc.2014.11, **2014**.
- [111] Yang X, Zhang Y, Prediction of high-entropy stabilized solid-solution in multicomponent alloys. *Mater Chem Phys* 132(2–3):233–238. doi: 10.1016/j.matchemphys.2011.11.021, **2012**.
- [112] Microstructural stability and mechanical behavior of FeNiMnCr high entropy alloy under ion irradiation S.J. Zinkle
- [113] Senkov, O.N.; Wilks, G.B.; Miracle, D.B.; Chuang, C.; Liaw, P.K. Refractory high-entropy alloys. *Intermetallics* **2010**, 18, 1758–1765
- [114] Senkov ON, Wilks GB, Scott JM, Miracle DB, Mechanical properties of Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ and V₂₀Nb₂₀Mo₂₀Ta₂₀W₂₀ refractory high entropy alloys. *Intermetallics* 19(5):698–706. doi: 10.1016/j.intermet.2011.01.004, **2011**.
- [115] Mechanical properties of refractory high-entropy alloys: Experiments and modeling H.W. Yao, J.W. Qiao, J.A. Hawk, H.F. Zhou, M.W. Chen, M.C. Gao
- [116] Design of single-phase high-entropy alloys composed of low thermal neutron absorption cross-section elements for nuclear power plant application C. Xianga, b, E.-H. Hanb, Z.M. Zhangb, H.M. Fuc, J.Q. Wangb, H.F. Zhanc, G.D. Huc
- [117] Tian F, Varga LK, Chen N, Shen J, Vitos L, Ab initio design of elastically isotropic TiZrNbMoV_x high-entropy alloys. *J Alloys Compd* 599:19–25. doi: 10.1016/j.jallcom.2014.01.237, **2014**.
- [118] Compositional effect on microstructure and properties of NbTiZr-based complex concentrated alloys O.N. Senkov, S. Rao, K.J. Chaput, C. Woodward *Acta Materialia* (IF 6.036), DOI: 10.1016/j.actamat.2018.03.065, **2018**.
- [119] Advanced Material Design for Fusion Applications O. El-Atwani, N. Li, E. Martinez, S. Maloy Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545, USA
- [120] Zinkle, S.J., B.N. Singh, “Analysis of displacement damage and defect production under cascade damage conditions”, *J. Nucl. Mater.*, 199 173-191, **1993**.
- [121] K. Linga Murty, Indrajit Charit, *An Introduction to Nuclear Materials*, Wiley-VCH, **2013**.
- [122] OECD/NEA, *Primary Radiation Damage in Materials*, NEA/NSC/DOC (2015)9.

- [123] D. R. Olender, Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements, ERDA Technical Information Center, Tennessee, **1976**.
- [124] Gary S. Was, Fundamentals of Radiation Materials Science Metals and Alloys, New York: Springer, **2007**.
- [125] J.O. Steigler, L. K. Mansur, Radiation Effects in Structural Materials, Annual Review of Materials Research 9, **1979**, 405-454.
- [126] Farrell, K., Byun, T.S., and Hashimoto, N. Deformation mode maps for tensile deformation of neutron irradiated structural alloys. Journal of Nuclear Materials, 335, 471–486, **2004**.
- [127] J. Koutsky, J. Kocik, Radiation Damage of Structural Materials, Elsevier, **1994**.
- [128] D. Olender, Arthur Motta, Light Water Reactor Materials, Draft, **2006**.
- [129] Kittel, Charles, Introduction to Solid state physics, John Wiley and Sons, New York, third edition, **1968**.
- [130] L. R. Greenwood, Neutron interactions and atomic recoil spectra, Journal of Nuclear Materials 216, **1994**, 29-44
- [131] J.A. Brinkman, “On the nature of radiation damage in metals”, J. Appl. Phys., 25:961, **1954**.
- [132] Kinchin, G.H. and R.S. Pease, X. Rep. Prog. Phys., 18:1, **1955**.
- [133] Lannoo, M. and J. Bourgoin, “Point Defects in Semiconductors”, Springer, Berlin, **1981**.
- [134] Ehrhart, P. , “Properties and interactions of atomic defects in metals and alloys”, Volume 25 of Landolt-Börnstein, New Series III, chapter 2, page 88, Springer, Berlin, **1991**.
- [135] Seeger, A., The Nature of Radiation Damage in Metals, Radiation Damage in Solids, IAEA, p. 1, **1962**.
- [136] Norgett, M.J., M.T. Robinson and I.M. Torrens , “A proposed method of calculating displacement dose rates”, Nucl. Engr. and Design, 33(1):50-54, **1975**.
- [137] Lindhard, J., M. Scharff, and H.E. Shiott, “Range concepts and heavy ion ranges”, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk., 33(14):1, **1963**.
- [138] Windl, W., T.J. Lenosky, J.D. Kress, and A.F. Voter , “First-principles investigation of radiation induced defects in si and sic”, Nucl. Instr. and Meth. B, 141:61-65, **1998**.
- [139] Karl Whittle, Nuclear Materials Science, IOP Publishing Ltd, **2016**.
- [140] Hj. Matzke, Radiation Damage in Nuclear Fuel Materials, Solid State Phenomena Vols. 30-31, **1992**, pp 355-366.
- [141] F. B. Brown, Fundamentals of Monte Carlo Particle Transport, LA-UR-05-4983, Los Alamos National Laboratory, **2005**.
- [142] J. Leppänen, Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code, **2007**.
- [143] J. Leppänen, Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code, VTT Technical Research Centre of Finland, **2013**.

- [144] Leppaenen, J., Development of a New Monte Carlo reactor physics code (VTT-TIED--640). Finland, **2007**.
- [145] J. Leppänen, M. Pusa, T. Viitanen, V. Valtavirta, and T. Kaltiaisaneho, “The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013,” *Annals of Nuclear Energy*, 82, 142 – 150, **2015**
- [146] Serpent, a Continuous-energy MonteCarlo Reactor Physics Burnup Calculation Code. <http://montecarlo.vtt.fi/>, (Erişim tarihi: Ağustos **2019**).
- [147] L. R. Greenwood, R. K. Smither, SPECTER-ANL Neutron Damage Calculations for Materials Irradiations, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, **1988**.
- [148] Greenwood, L.R., SPECOMP calculations of radiation damage in compounds, United States: ASTM, **1989**.