УДК 539.219

К ТЕОРИИ ВАКАНСИОННОГО РАСПУХАНИЯ МЕТАЛЛОВ
II. ОБМЕННЫЕ ПОТОКИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ПОРУ И ДИСЛОКАЦИЮ

В. В. Слезов, П. Н. Остапчук

В рамках метода областей влияния вычислены потоки точечных дефектов на пору и дислокацию, обусловленные неоднородностью граничных условий на стоках. Полученные выражения сравниваются с аналогичными результатами в модели непосредственно внедренных стоков в скоростной теории распухания.

В предыдущей работе мы достаточно подробно изложили идейную сторону метода областей влияния [1, 2] применительно к теоретическому описанию вакансионного распухания чистых металлов и показали, как в рамках этого метода могут быть вычислены «радиационные» диффузионные потоки точечных дефектов (ТД) на поры и дислокации. При этом мы не учитываем эффект обмена ТД между различными макродефектами (МД), обусловленный неоднородными граничными условиями на стоках. Такое приближение справедливо при $T \leqslant T_{\max}$, где $T_{\max}$ — температура максимума распухания, и нарушается при более высоких температурах. Поэтому для полноты картины, а также для последующего сопоставления с аналогичными выражениями скоростной теории [3-5] представляется целесообразным учесть и «обменную» часть потоков ТД. В этом и состоит основная цель данной работы.

Итак, после усреднения микроскопического диффузионного уравнения в окрестности выделенного стока по объему, представляющему собой «физическую точку», и по положению и размерам всех МД, кроме выделенного, мы приходим к приближенному диффузионному уравнению вида

$$-\omega \operatorname{div} \mathbf{j}_m^s(\mathbf{r}) + K\Theta(\mathbf{R}_{0,m}^s - \mathbf{r}) - \left[\frac{d\bar{C}_m}{dt} - K(1-Q_0) + I_m(\mathbf{r})\right]\Theta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{0,m}^s) = 0,$$

$$C_m|_{\mathbf{r}\to\infty} = \bar{C}_m, \quad (\mathbf{j}_m^s \mathbf{n}^s)|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^s} = -\frac{\gamma_m^s}{\omega}(C_m(\mathbf{r}) - C_m^s)|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^s},$$

$$\mathbf{j}_m^s(\mathbf{r}) = -\frac{D_m}{\omega}\nabla C_m - \frac{D_m C_m}{\omega}\nabla V_m^s. \tag{1}$$

Все обозначения стандартные: K — мощность источника, отличная от нуля вне МД; ω — объем на атом матрицы; Q_0 — полная объемная доля МД; $\mathbf{R}_{0,m}^s$ — область влияния s-го стока для ТД m-го сорта ($m=i, v$; v — вакансия; i — собственный междоузельный атом — СМА); $\bar{C}_m$ — средняя по объему или по расположению и размерам всех без исключения МД концентрация ТД; $\mathbf{j}_m^s(\mathbf{r})$ — плотность потока ТД в точке $\mathbf{r}$ в окрестности выделенного стока s (точка $\mathbf{r}$ является микроскопической внутри области влияния данного стока и макроскопической вне ее, т. е. в эффективной среде); $I_m(\mathbf{r})$ — мощность любой точки эффективной среды как стока для ТД m-го сорта

$$I_m(\mathbf{r}) = -\omega \int\limits_0^\infty f(R,\ t)\, J^v_{R,\,m}(\mathbf{r})\, dR - \omega\rho_d J^d_{r_d,\,m}(\mathbf{r}), \tag{2}$$

$J^{v,\,d}_m$ (r) — полный поток ТД на пору «v» и дислокацию «d» в эффективной среде выделенного стока, т. е. усредненный по положению всех МД, кроме выделенного; $f\,(R,\ t)$ — функция распределения пор по размерам; ρ_d — плотность дислокаций; γ^s_m/ω — скорость перехода ТД через единицу поверхности s-го стока ($\mathbf{r}=\mathbf{r}^s$); $\mathbf{n}^s$ — нормаль к этой поверхности; C^s_m — равновесная концентрация ТД у поверхности s-го стока $C^s_m = C^{(e),\,s}_m \times \exp\{-V^s_m\}$; $C^{(e)}_m$ — она же в отсутствие упругого взаимодействия ТД со стоком V^s_m.

Разделяя далее «радиационную» $\mathbf{j}^{(1),\,s}_m$ и «обменную» $\mathbf{j}^{(0),\,s}_m$ части потока, а также учитывая, что $\mathbf{j}^{(1),\,s}_m$ отлична от нуля только в области влияния данного стока, для $\mathbf{j}^{(0),\,s}_m$ из (1) получаем

$$-\omega\,\mathrm{div}\,\mathbf{j}^{(0),\,s}_m(\mathbf{r}) - \left[\frac{d\bar{C}_m}{dt} - K\,(1-Q_0) + I_m\{\mathbf{j}^{(1),\,v,\,d}_m(\mathbf{r})\} + I_m\{\mathbf{j}^{(0),\,v,\,d}_m(\mathbf{r})\}\right]\Theta\,(\mathbf{r}-\mathbf{R}^s_{0,\,m}) = 0,$$

$$C^{(0)}_m\big|_{\mathbf{r}\to\infty} = \bar{C}_m - C^*_m,\quad (\mathbf{j}^{(0),\,s}_m\mathbf{n}^s)\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^s} = -\frac{\gamma^s_m}{\omega}\,(C^{(0)}_m(\mathbf{r}) - C^s_m)\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^s}. \tag{3}$$

В (1), (3) мы формально оставили плотность потока в векторной форме, учитывая, что упругое взаимодействие ТД с макродефектом в общем случае может быть неизотропным. А так как граница области влияния выделенного стока определяется, согласно [1, 2], уравнением

$$(\mathbf{j}^{(1),\,s}_m\mathbf{n}^s_{0,\,m})\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}^s_{0,\,m}} = 0$$

($\mathbf{n}^s_{0,\,m}$ — нормаль к границе области влияния выделенного стока), то, вообще говоря, ее форма не должна копировать границу стока. Это означает, что в общем случае диффузионная задача (1), (3) не может быть одномеризована. Для упрощения будем предполагать, что реальное взаимодействие все же можно заменить модельным изотропным. Тогда задача эффективно одномеризуется, а ее симметрия для хаотического распределения стоков в среднем определяется геометрией конкретного стока. Заметим также, что C^*_m, как и $\mathbf{R}^s_{0,\,m}$, полностью определяются по «радиационной» части потока, поэтому в данной задаче они считаются известными. Однако неизвестной является $I_m\,\{\mathbf{j}^{(0),\,v,\,d}_m(\mathbf{r})\}$. Дело в том, что в I_m (2) фигурируют величины, собственно, и подлежащие определению — $\mathbf{j}^{(0),\,v,\,d}_m$. Поэтому, чтобы замкнуть диффузионную задачу (3), надо, исходя из физических соображений, угадать качественный вид искомого потока, подставить в I_m, решить (3) и результат верифицировать. Все дальнейшие выкладки, как и для «радиационной» компоненты $\mathbf{j}^{(1),\,v,\,d}_m$, будем проводить в изотропном приближении. Поскольку «обменная» часть потока $j^{(0)}_m$, по определению, не зависит от источника K, то соответствующие потоки на стоки $j^{(0),\,v,\,d}_m(r)$ в эффективной среде выделенного МД можно искать в виде разложения по отклонению химического потенциала ТД в любой точке от его значения на границе стока s. Тогда с точностью до первого неисчезающего члена имеем

$$j^{(0),\,v,\,d}_m(r) = -\frac{D_m}{\omega}\,\varphi^{v,\,d}_m\left(C^{(0)}_m(r)\,e^{V^s_m(r)} - \left\{C^{(0)}_m(r)\,e^{V^{v,\,d}_m(r)}\right\}\Big|_{r=R,\,r_d}\right), \tag{4}$$

$\varphi^{v,\,d}_m$ — пока формальный коэффициент пропорциональности, который может зависеть от характеристик конкретного стока и подлежит самосогласованному определению. Напомним, что (4) — это плотность потока на сток в эффективной среде, усредненная по положению всех МД, кроме выделенного (отсюда кстати зависимость от r, т. е. расстояния от центра выделенного МД до «физической» точки, которой принадлежит сток s (4)).

Поэтому, доусреднив (4) по положению выделенного s-го МД (зависимость от r при этом исчезает), мы получим плотность потока на сток, не зависимую от его положения относительно других стоков, т. е. искомую величину

$$j_m^{(0),v,d} = -\frac{D_m}{\omega}\varphi_m^{v,d}\left(\left\{C_m^{(0)}(r)\,e^{V_m^s(r)}\right\}\Big|_{r\to\infty} - \left\{C_m^{(0)}(r)\,e^{V_m^{v,d}(r)}\right\}\Big|_{r=R,\,r_d}\right) =$$

$$= -\frac{D_m}{\omega}\varphi_m^{v,d}\left(\bar{C}_m - C_m^* - \left\{C_m^{(0)}(r)\,e^{V_m^{v,d}(r)}\right\}\Big|_{r=R,\,r_d}\right). \qquad (5)$$

Или с учетом граничного условия (3)

$$j_m^{(0),s} = -\frac{D_m}{\omega}\,\frac{\bar{C}_m - C_m^* - C_m^{(e),s}}{[\varphi_m^s]^{-1} + D_m \exp\{V_m^s(r^s)\}/\gamma_m^s}. \qquad (6)$$

Таким образом, нам остается указать процедуру определения φ_m^s и выписать окончательные выражения для $j_m^{(0),s}$. Для этого (4) с учетом (5) удобно представить в виде

$$j_m^{(0),v,d}(r) = j_m^{(0),v,d} - \frac{D_m}{\omega}\varphi_m^{v,d}\left(C_m^{(0)}(r)\,e^{V_m^s(r)} - \{\bar{C}_m - C_m^*\}\right).$$

Обратим внимание на следующий важный момент: во втором слагаемом выражение в круглых скобках одно и то же как для пор, так и для дислокаций в эффективной среде s-го стока. Это обстоятельство после подстановки $j_m^{(0),v,d}(r)$ в $I_m(r)$ дает возможность сформулировать замкнутую диффузионную задачу для $C_m^{(0)}$

$$-\omega\,\mathrm{div}\, j_m^{(0),s}(r) - D_m\frac{C_m^{(0)}(r)\,e^{V_m^s(r)} - \{\bar{C}_m - C_m^*\}}{l_m^2}\,\Theta(r - R_{0,m}^s) =$$

$$= \left[\frac{d\bar{C}_m}{dt} - K(1 - Q_0) + I_m\{j_m^{(1),v,d} + j_m^{(0),v,d}\}\right]\Theta(r - R_{0,m}^s), \qquad (7)$$

$$C_m^{(0)}\big|_{r\to\infty} = \bar{C}_m - C_m^*,\quad j_m^{(0),s}\big|_{r=r^s} = -\frac{\gamma_m^s}{\omega}(C_m^{(0)}(r) - C_m^s)\big|_{r=r^s},$$

$$l_m^{-2} = \left[4\pi\int_0^\infty R^2 f(R,\,t)\,\varphi_m^v(R)\,dR + 2\pi r_d\rho_d\varphi_m^d\right], \qquad (8)$$

решив которую, мы найдем явное выражение для $j_m^{(0),s}$ и, сравнив с (6), определим φ_m^s через l_m. Подставив далее φ_m^s в (8), получим уравнение для l_m и тем самым полностью решим поставленную задачу.

Прежде чем решать (7), сделаем несколько замечаний. Во-первых, обратим внимание, что (7) имеет стационарное решение только при занулении правой части, играющей роль источника в безграничной среде $r > R_{0,m}^s$

$$\frac{d\bar{C}_m}{dt} = K(1 - Q_0) - I_m\{j_m^{(1),v,d} + j_m^{(0),v,d}\}. \qquad (9)$$

Очевидно, (9) есть не что иное, как закон сохранения для ТД, получающийся в излагаемом методе автоматически, как требование существования решения диффузионной задачи (7). Во-вторых, вспоминая, что

$$j_m^{(1),v} = -\frac{K}{3\omega R^2}\{(R_{0,m}^v)^3 - R^3\},\quad j_m^{(1),d} = -\frac{K}{2\omega r_d}\{(R_{0,m}^d)^2 - r_d^2\},$$

$$\frac{4\pi}{3}\int_0^\infty f(R,\,t)\,(R_{0,m}^v)^3\,dR + \pi\rho_d(R_{0,m}^d)^2 = 1,$$

с учетом (2) из (9) получаем

$$d\bar{C}_m/dt = -I_m\{j_m^{(0),v,d}\},$$

а в квазистационарном приближении

$$I_m\{j_m^{(0),\,v,\,d}\}=0, \tag{10}$$

откуда, в частности, следует, что, пренебрегая тепловыми ТД ($C_m^{(0),\,v,\,d}\equiv 0$), $C_m^*=\bar{C}$, $C_m^{(0)}(r)=0$ является решением (7), т. е. обмен между стоками отсутствует. В общем случае отличие C_m^* от $\bar{C}_m$ пропорционально средней по всем стокам равновесной концентрации ТД m-го сорта. А теперь выпишем решения (7) для пор

$$j_m^{(0),\,v}=-\frac{D_m}{\omega R}\,\frac{\bar{C}_m-C_m^*-C_m^{(e),\,v}}{R\int\limits_R^{R_{0,m}^v} e^{V_m^v(r)}\frac{dr}{r^2}+\frac{D_m e^{V_m^v(R)}}{\gamma_m^v R}+R\Big/\int\limits_{R_{0,m}^v}^{\infty}\frac{r^2\psi_m^v(r)}{l_m^2}\,dr},$$

$$\varphi_m^v=\left\{R^2\int\limits_R^{R_{0,m}^v} e^{V_m^v(r)}\frac{dr}{r^2}+\frac{R^2}{\int\limits_{R_{0,m}^v}^{\infty}\frac{r^2\psi_m^v(r)}{l_m^2}\,dr}\right\}^{-1} \tag{11}$$

и дислокаций

$$j_m^{(0),\,d}=-\frac{D_m}{\omega r_d}\,\frac{\bar{C}_m-C_m^*-C_m^{(e),\,d}}{E_1\left(\frac{L_m}{R_{0,m}^d}\right)-E_1\left(\frac{L_m}{r_d}\right)+\frac{D_m e^{-L_m/r_d}}{\gamma_m^d r_d}+1\Big/\int\limits_{R_{0,m}^d}^{\infty}\frac{r\psi_m^d(r)}{l_m^2}\,dr},$$

$$\varphi_m^d=\frac{1}{r_d}\left\{E_1\left(\frac{L_m}{R_{0,m}^d}\right)-E_1\left(\frac{L_m}{r_d}\right)+\frac{1}{\int\limits_{R_{0,m}^d}^{\infty}\frac{r\psi_m^d(r)}{l_m^2}\,dr}\right\}^{-1}. \tag{12}$$

Здесь $E_1(x)$ — интегральная показательная функция; энергия упругого взаимодействия ТД с дислокацией взята в виде $V_m^d(r)=-L_m/r$ ($L_m=(1+\nu)\mu b|\Omega_m|/3\pi(1-\nu)k_\text{Б}T$); $\psi_m^{v,\,d}(r)$ удовлетворяет уравнению

$$\Delta\psi_m^{v,\,d}-e^{V_m^{v,\,d}(r)}\frac{\psi_m^{v,\,d}(r)}{l_m^2}-\nabla\psi_m^{v,\,d}\nabla V_m^{v,\,d}=0,$$

$$\psi_m^{v,\,d}\Big|_{r=R_{0,m}^{v,\,d}}=1,\quad \psi_m^{v,\,d}\Big|_{r\to\infty}=0 \tag{13}$$

в сферической для пор и цилиндрической для дислокаций симметрии. Подставляя теперь $\varphi_m^{v,\,d}$ в (8), получаем уравнение для l_m

$$\frac{1}{l_m^2}=4\pi\int\limits_0^{\infty}\frac{Rf(R,\,t)\,dR}{R\int\limits_R^{R_{0,m}^v} e^{V_m^v(r)}\frac{dr}{r^2}+R\Big/\int\limits_{R_{0,m}^v}^{\infty}\frac{r^2\psi_m^v(r)}{l_m^2}\,dr}+$$

$$+2\pi\rho_d\left\{E_1\left(\frac{L_m}{R_{0,m}^d}\right)-E_1\left(\frac{L_m}{r_d}\right)+\frac{1}{\int\limits_{R_{0,m}^d}^{\infty}\frac{r\psi_m^d(r)}{l_m^2}\,dr}\right\}^{-1} \tag{14}$$

и тем самым полностью решаем поставленную задачу. Окончательное выражение для полного потока легко получить, складывая его «радиационную» и «обменную» составляющие с учетом явного выражения для C_m^*. Однако ввиду громоздкости приводить их нецелесообразно. Вместо этого мы рассмотрим более простые предельные случаи и попытаемся сопоставить полученные результаты с аналогичными результатами скоростной теории. Во-первых, будем считать поры нейтральным стоком ($V_m^v(r)=0$, $\gamma_m^v \to \infty$). Тогда полный поток ТД на одиночную пору будет иметь вид

$$-\omega J_m^v(R) = D_m\bar{C}_m F^v(l_m)\left\{1 + \frac{K l_m^2}{D_m\bar{C}_m} g^v(l_m)\right\} - D_m C_m^{(e),v} F^v(l_m),$$

$$g^v(l_m) = \frac{R_{0,m}^v - R}{6 l_m^2 (1 + R_{0,m}^v/l_m)}\left\{(R_{0,m}^v + R)\left(3 + \frac{R_{0,m}^v}{l_m}\right) - 2\frac{R^2}{l_m}\right\},$$

$$F^v(l_m) = 4\pi R\,(1 + R_{0,m}^v/l_m)/(1 + (R_{0,m}^v - R)/l_m).$$

А теперь формально устремим $R_{0,m}^v \to R$, что соответствует «embedding model» в терминах скоростной теории распухания. В результате получаем

$$-\omega J_m^v(R) = D_m\bar{C}_m F^v(l_m) - D_m C_m^{(e),v} F^v(l_m), \quad F^v(l_m) = 4\pi R\,(1 + R/l_m).$$

Если к тому же поры являются единственным стоком для ТД ($\rho_d=0$), то l_m удовлетворяет уравнению

$$l_m^{-2} = \int_0^\infty 4\pi R\,(1 + R/l_m)\, f(R,\ t)\, dR,$$

и соответственно суммарный поток на все поры представим в виде

$$-\omega\int_0^\infty J_m^v(R)\, f(R,\ t)\, dR = D_m\bar{C}_m/l_m^2 - D_m C_m^{(e),v}/l_m^2.$$

Первое слагаемое — это то, что поглощается порами, т. е. $D_m\bar{C}_m (k_m^v)^2$ в терминах [3, 5], а второе — то, что испускается, т. е. K_v. Таким образом, в данном случае l_m^{-2} — мощность пор как стока для ТД в эффективной среде. Если, например, распределение пор по размерам отсутствует, то для $(k_m^v)^2 \equiv l_m^{-2}$ получаем обычное выражение [4]

$$(k_m^v)^2 = 4\pi N R\,(1 + k_m^v R).$$

Аналогично для дислокаций как единственного стока для ТД из (12)—(14) в предположении $L_m \to 0$, $R_{0,m}^d \to r_d$, $\gamma_m^d \to \infty$ легко получить [4]

$$(k_m^d)^2 \equiv l_m^{-2} \simeq \frac{2\pi\rho_d}{\ln(2/k_m^d r_d)} \sim \frac{2\pi\rho_d}{\ln(1/\rho_d^{1/2} r_d)}.$$

Формальная аналогия с «embedding model» сохраняется в диффузионном пределе ($\gamma_m^{v,d} \to \infty$) и для двух типов стоков. В этом случае уравнение для $k_m^2 \equiv l_m^{-2}$ имеет вид

$$k_m^2 = (k_m^v)^2 + (k_m^d)^2,$$

$$(k_m^v)^2 = 4\pi\int_0^\infty \frac{R f(R,\ t)\, dR}{R \Big/ \int_R^\infty k_m^2 r^2 \psi_m^v(k_m)\, dr},$$

$$(k_m^d)^2 = 2\pi\rho_d \int_{r_d}^\infty k_m^2 r \psi_m^d(k_m)\, dr,$$

а $\psi_m^{v,d}$ удовлетворяет уравнению (13). Однако с учетом граничной кинетики аналогия нарушается. И хотя по-прежнему полные потоки ТД на стоки могут быть представлены в виде двух слагаемых $D_m\bar{C}_m (k_m^{v,d})^2$, $D_m C_m^{(e),v,d} (k_m^{v,d})^2$, однако уравнение вида $k_m^2 = (k_m^v)^2 + (k_m^d)^2$ отсутствует. В данном случае $k_m^{v,d}$ параметризованы величиной l_m, для которой имеется свое уравнение (14). Она имеет смысл радиуса экранировки диффузионного взаимодействия (аналогично радиуса Дебая) и не зависит от граничной кинетики.

В заключение следует отметить, что рассмотренная выше аналогия между методом областей влияния и «embedding model» имеет чисто условный характер, поскольку предельный переход $R^{v;\,d}_{0,\,m} \to R,\ r_d$ является незаконной операцией с точки зрения излагаемого подхода. Он соответствует стремлению объемной доли МД к единице, что выводит нас за рамки применимости приближения среднего поля. В общем же случае $R^{v;\,d}_{0,\,m} \neq \neq R,\ r_d$ и, согласно предлагаемой процедуре, определяется размером содержащегося в ней стока и средними характеристиками всего ансамбля в целом.

Список литературы

[1] Косевич А. М., Саралидзе З. К., Слезов В. В. // ЖЭТФ. 1967. Т. 52. № 4. С. 1073—1080.
[2] Слезов В. В. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 8. С. 20—30.
[3] Brailsford A. D., Bullough R. // J. Nucl. Mater. 1972. V. 44. P. 121—135.
[4] Brailsford A. D., Bullough R., Hayns M. R. // J. Nucl. Mater. 1976. V. 60. P. 246—256.
[5] Brailsford A. D., Bullough R. // Phil. Trans. Roy. Soc. 1981. V. 302A. N 1465. P. 87—137.

Харьковский физико-технический институт
АН УССР

Поступило в Редакцию
24 апреля 1990 г.