

01; 05

© 1992 г.

Памяти Алексея Николаевича Орлова посвящается

ВЛИЯНИЕ ПРЕДВЫДЕЛЕНИЙ ВТОРИЧНОЙ ФАЗЫ
НА РАДИАЦИОННОЕ РАСПУХАНИЕ
РАСПАДАЮЩИХСЯ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ
I. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ

Ю. В. Трушин

Построена общая теория радиационного набухания гетерогенного материала. Рассмотрено влияние на набухание распадающегося под облучением твердого раствора выпадающих выделений вторичной фазы, находящихся в когерентном состоянии.

Введение

Изучение радиационного набухания материалов как экспериментально (например, в работах [1–10]), так и теоретически [11–18] ведется уже достаточно давно. Получен обширный фактический материал, разработаны отдельные модели описания этого явления, построены основы теории. Однако ключевые вопросы теории радиационного набухания требуют еще дальнейших исследований. Теоретическое изучение радиационного набухания в основном касалось однородных материалов. Экспериментально же известно [2, 3, 5–7], что наличие примесей и выделений вторичных фаз на различных стадиях их формирования и эволюции может приводить к снижению набухания материалов.

Вакансии и межузельные атомы создают различные упругие поля, поэтому их упругое взаимодействие со стоками также различно. В результате возникает предпочтение в поглощении подвижных дефектов одного сорта по сравнению с другим на одном и том же стоке. Так, в беспримесных кристаллах поглощение межузельных атомов краевой дислокацией происходит интенсивнее, чем поглощение вакансий [12, 19]. Кроме того, поскольку энергия миграции вакансий больше энергии миграции межузельных атомов [20], то последние быстрее диффундируют в объеме материала, уходя на стоки или образуя новые структурные неоднородности (например, межузельные петли). Это приводит к затруднению взаимной рекомбинации разноименных собственных точечных дефектов, в результате чего менее подвижные вакансии также успевают либо уйти на стоки, либо образовать скопления, разрастающиеся в поры.

Микроструктурные изменения, которые имеют место при непрерывной генерации точечных дефектов (например, в виде образования межузельных петель и вакансионных пор) и при их миграции на существующие стоки, были подробно изучены в ряде работ [12–14, 16, 18, 21–23] в связи с проблемой радиационной стойкости металлов.

В твердых растворах ситуация усложняется, поскольку эволюция их дефектной структуры определяется диффузией как собственных точечных дефектов, так и атомов примеси. В пересыщенном твердом растворе формирующиеся в процессе

облучения предвыделения вторичной фазы и одиночные атомы примеси изменяют его радиационное распухание и радиационную ползучесть (см., например, [6, 7, 24—29]).

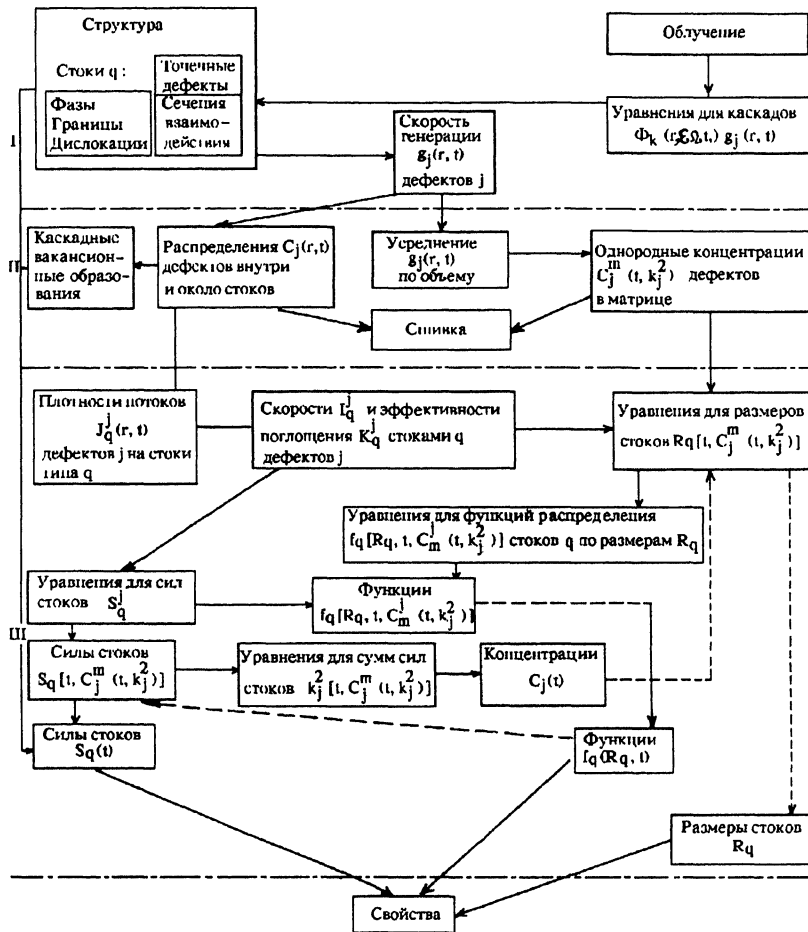


Схема самосогласованных уравнений для расчетов свойств облученных материалов.

Исследования последних лет [6, 30] показали, что при оценке скорости радиационного распухания необходимо учитывать поля когерентных предвыделений. В работах [3, 6, 7] было установлено, что в многокомпонентных хромоникелевых сплавах с развитым однородным распадом можно практически подавить радиационное распухание. В этих работах экспериментально показано, что определяющее влияние на повышение способности твердых тел к рекомбинации разноименных точечных радиационных дефектов оказывают не концентрационные и размерные несоответствия, создающиеся в объемах исходных твердых растворов при определенном их легировании (твердорастворное упрочнение), а несоответствия, возникающие при распаде пересыщенных (метастабильных) твердых растворов, и также интенсивность распада. Следовательно, для подавления радиационного распухания необходимо в сталях и сплавах определенным легированием обеспечить развитый непрерывный однородный распад твердого раствора с сильно выраженным инкубационным периодом.

Таким образом, возникает задача теоретически осмыслить, рассчитать радиа-

дионные распухание гетерогенного материала и выявлять физические механизмы, приводящие к усилению рекомбинации разноименных радиационных дефектов в распадающихся твердых растворах под облучением.

Самосогласованная система уравнений для описания радиационных процессов в сплавах

Приведенный краткий обзор экспериментальных и теоретических данных по изучению физических процессов в облученных материалах позволяет разбить процесс радиационной повреждаемости на три стадии (см. рисунок): динамическую (I), диффузионную (II) и стадию эволюции стоков (III).

Динамическая стадия описывается [31] уравнениями для функций распределения движущихся атомов $\Phi_k(r, \varepsilon, \Omega, t)$ типа k , скоростей генерации $g_j(r, t)$ дефектов j и условиями локального сохранения числа частиц

$$\rho_{\text{nuc}} = \sum C_j(r, t), \quad (1)$$

где r — радиус-вектор, t — время, Ω — единичный вектор направления движения атома отдачи, ε — его кинетическая энергия, ρ_{nuc} — ядерная плотность вещества, C_j — концентрация дефектов типа j .

Схематические процессы, описываемые этими уравнениями, приведены на рисунке (уровень I).

Диффузионная стадия в твердых растворах замещения описывается (см., например, [32]) системой нелинейных дифференциальных уравнений для концентраций $C_j(r, t)$ точечных дефектов j . Соответствующие процессы, описываемые этими уравнениями, представлены на рисунке (уровень II). Во всех имеющихся теоретических исследованиях проблемы радиационной повреждаемости, перечисленных выше, делается фактически одно основное предположение о том, что рост скоплений дефектов (стоков q) происходит медленнее, чем диффузия точечных дефектов j к этим стокам. Такое адиабатическое предположение позволяет не расписывать систему уравнений для концентраций дефектов до высокой кратности кластеров, а ввести их размер (в случае сферических скоплений радиус) $R_q(t)$ и функцию распределения по размерам $f_q(R_q, t)$ (размерность см^{-4}), которые описываются следующими уравнениями (см. рисунок, уровень III):

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{4}{3} \frac{\pi}{\Omega_q} R_q^3(t) \right] = \sum_{j^+=1}^{n_{j^+}} I_q^+(R_q, t, k_j^2) - \sum_{j^-=1}^{n_{j^-}} I_q^-(R_q, t, k_j^2), \quad (2)$$

$$\frac{\partial f_q(R_q, t, k_j^2)}{\partial t} = W_q(R_q) - \frac{\partial}{\partial R_q} \left[f_q(R_q, t, k_j^2) \frac{dR_q}{dt} \right]. \quad (3)$$

Здесь W_q — скорость зарождения кластеров q данного размера R_q ; Ω_q — атомный объем в стоке q ; j^+ и j^- — типы дефектов j , приводящие к росту стока q или его уменьшению соответственно; I_q^j — скорость поглощения дефектов типа j стоком q ; k_j^2 — сумма сил стоков для дефектов типа j . В случае плоских стоков размера R_q левая часть уравнения (2) примет вид $d[\pi R_q^3(t)/\Omega_q^{3/2}]/dt$.

В дополнение к уравнениям (2) и (3) имеются выражения для скоростей I_q^j и эффективностей $K_D^j(r_*)$ поглощения дефектов j стоками q и дислокациями D в виде [19, 33, 34]

$$I_q^j(R_q) = 2^n \pi R_q^2 |J_q^j(r)|_{r=R_q} \quad (4)$$

$$K_D^j(r_*) = r_* \int_0^{2\pi} |J_D^j(r_*, \vartheta_j)| d\vartheta_j \quad (5)$$

где $J_q^j(r)$ — плотность потока подвижных точечных дефектов типа j на сток типа q , $n = 2$ для сферических и $n = 1$ для плоских стоков, r_* — радиус ядра дислокации, ν_j — полярный угол при взаимодействии дислокации с дефектом типа j .

Необходимо также определить силы стоков S_q^j , которые входят в выражение для суммы стоков

$$k_j^2 = \sum_{q=1}^{n_j} S_q^j(t, k_j^2). \quad (6)$$

Определение величины S_q^j наиболее просто возможно провести, пользуясь методом эффективной среды [14, 16, 19]. При этом однородную концентрацию дефектов j в матрице обозначим C_j^M , а величины $I_q^j(R_q, t)$ и $K_D^j(r_*)$ будем искать по (4), (5), пользуясь неоднородными решениями для концентраций $C_j(r, t)$ внутри области размера r_q около стоков q для определения плотностей потоков J_q^j на стоки q . Тогда, исходя из физического смысла, можно записать

$$D_j C_j^M(t, k_j^2) S_q^j(t, k_j^2) = \int I_q^j(R_q, t) f_q(R_q, t, k_j^2) dR_q, \quad (7)$$

$$D_j C_j^M(t, k_j^2) S_D^j(t, k_j^2) = \rho_D k_D^j(t, k_j^2), \quad (8)$$

где ρ_D — плотность дислокаций, D_j — коэффициент диффузии дефектов j . Подставляя $S_q^j(t, k_j^2)$ и $S_D^j(t, k_j^2)$ из (7), (8) в выражение (6), получим

$$k_j^2 = \rho_D \frac{k_D^j(t, k_j^2)}{D_j C_j^M(t, k_j^2)} + \frac{I_q(R_q^j, t) f_q(R_q, t, k_j^2) dR_q}{D_j C_j^M(t, k_j^2)}. \quad (9)$$

По существу уравнение (6) или (9) является замыкающим для всей системы упомянутых выше уравнений (см. рисунок) и делающим ее самосогласованной, поскольку концентрации $C_j^M(t, k_j^2)$ зависят от k_j^2 .

При изучении эволюции дефектной структуры монокристаллов под облучением необходимо учитывать влияние различных структурных неоднородностей друг на друга, т.е. решить вместе целый комплекс взаимосвязанных задач.

Эволюция дефектной структуры монокристалла приводит к изменению входящих в уравнения для концентраций дефектов сумм сил стоков k_j^2 (см. (9)). Определение k_j^2 является громоздкой задачей, поскольку требует знания не только диффузионных потоков вакансий и межузельных атомов к своим стокам (дислокациям, петлям, порам и т.п.), но и функций распределения скоплений собственных точечных дефектов $f_q(R_q)$ по размерам R_q . К настоящему времени эта задача еще не решена.

В концентрированных твердых растворах возможны два типа превращений по Гиббсу [35], т.е. распад твердого раствора может происходить двумя путями. Во-первых, зарождение и рост выделений вторичной фазы. Второй способ — это флуктуации состава. В отличие от первого способа (гетерогенного) в последнем изменения ограничены по величине, но не локализованы в пространстве. Это спинодальный распад. Когда же твердый раствор распадается по первому типу (зарождение и рост), то необходимо выделить две основные стадии: стадию формирования когерентных предвыделений и стадию обособившихся выделений вторичной фазы.

Для малых несоответствий между атомными параметрами в матрице и формирующемся выделении различие в атомных расстояниях может компенсироваться упругой деформацией двух фаз, но при больших размерах выделений система

может понижать свою энергию деформацией, например, в поперечной сетке краевых дислокаций [35]. Для малых выделений, когда диаметр зародыша меньше расстояния между дислокациями, следует ожидать, что зародыш останется когерентным, но будет упруго деформированным, поскольку упругая энергия повышает энергию выделяющейся фазы. Существуют два различных типа деформаций, которые могут вызываться образованием новой фазы в материале [35]. Первый тип связан с несоответствием двух когерентных фаз, т. е. на стадии когерентных предвыделений. Деформация в окрестности предвыделения может достигать уровня, достаточного для образования структурных дефектов (дислокаций, микротрещин), снимающих искажения решетки. При втором типе деформаций новая фаза занимает объем, отличающийся от объема той части матрицы, который она должна была бы занимать.

Если положить, что когерентные предвыделения сферические с радиусом R_P , то по изотропной теории упругости они создают однородные упругие поля напряжений, диагональные компоненты тензора напряжений которых имеют вид [36, 37].

$$\begin{aligned}\sigma_P^{rI} &= \sigma_P^{\varphi\varphi I} = \sigma_P^{\theta\theta I} = -\frac{2E}{3(1-\nu)}(1-\nu_P)(\epsilon_I - \epsilon_{II}), \\ \sigma_P^{rII} &= -\frac{2E}{3(1-\nu)}\left[\left(\frac{R_P}{r}\right)^3 - \nu_P\right](\epsilon_I - \epsilon_{II}), \\ \sigma_P^{\varphi\varphi II} &= \sigma_P^{\theta\theta II} = -\frac{2E}{3(1-\nu)}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{R_P}{r}\right)^3 + \nu_P\right](\epsilon_I - \epsilon_{II}),\end{aligned}\quad (10)$$

где r, ϑ, φ — сферические координаты дефекта относительно центра предвыделения; $F = I, II$ — области предвыделения (I) и матрицы (II); E — модуль Юнга; ν — коэффициент Пуассона; ϵ_I и ϵ_{II} — относительные деформации внутри и вне предвыделения, а объемная доля ν_P областей I , т. е. самих предвыделений, выражается в виде

$$\nu_P = \int V_P(R_P) f_P(R_P) dR_P. \quad (11)$$

Здесь $V_P(R_P)$ — объем, а $f_P(R_P)$ — функция распределения предвыделений по размерам R_P . Компоненты тензора напряжений (10) во всем объеме кристалла удовлетворяют уравнению равновесия

$$\text{Sp}\sigma_P = \nu_P \text{Sp}\sigma_P^I + (1 - \nu_P) \text{Sp}\sigma_P^{II} = 0, \quad (12)$$

где

$$\text{Sp}\sigma_P^I = \frac{2E}{1-\nu}(1-\nu_P)(\epsilon_I - \epsilon_{II}) \equiv \sigma_0^I; \quad \text{Sp}\sigma_P^{II} = -\frac{2E}{1-\nu}\nu_P(\epsilon_I - \epsilon_{II}) \equiv \sigma_0^{II}.$$

Энергия взаимодействия точечного дефекта типа j с предвыделением P имеет вид (см., например, [33, 34])

$$E_P^{jF} = \Delta\Omega_j^F \text{Sp}\sigma_P^F, \quad (13)$$

где $\Delta\Omega_j^F$ — релаксация объема дефекта типа j в области F материала.

Из (10) следует, что $\text{Sp}\sigma_P(r)$ постоянен в объеме материала и терпит разрыв на поверхности предвыделений. В этом случае упругое поле когерентных предвыделений явно в уравнения баланса для концентраций дефектов $C_j(r, t)$ не входят, поскольку энергии взаимодействия вакансий и межузельных атомов с предвыделением (13) так же, как и $\text{Sp}\sigma_P$, постоянны в объеме твердого

$$E_P^I = -\frac{2E}{1-\nu} \Delta\Omega_j^I (1-\nu_P)(\epsilon_I - \epsilon_{II}); \quad E_P^{II} = \frac{2E}{1-\nu} \Delta\Omega_j^{II} \nu_P (\epsilon_I - \epsilon_{II}), \quad (14)$$

т.е. $E_P^{IF}(r)$ — ступенчатая функция.

Влияние упругого поля сферических когерентных предвыделений на концентрационные профили дефектов сказывается лишь через граничные условия. В соответствии с (13) учет упругих напряжений (10) в уравнениях баланса для концентраций $C_j(r, t)$ приводит лишь к перенормировке термодинамически равновесных концентраций подвижных точечных дефектов на поверхности стоков q (при $r = R_q$) в виде (см., например, [19])

$$\tilde{C}_j^{eF} = C_j^{eF} \exp \left[-E_P^{jF}(R_P) / kT \right], \quad (15)$$

где C_j^{eF} — термодинамически равновесная концентрация дефектов j в области F .

На стадии обособления выделений вторичной фазы упругие напряжения снимаются за счет формирования границы преципитата.

Для корректного расчета различных радиационных изменений свойств материалов (см. рисунок) необходимо самосогласованным образом решать всю названную выше систему уравнений. Причем уравнение (9) (а точнее, это столько уравнений, сколько есть сортов подвижных дефектов j) является уравнением для определения концентраций $C_j^M(t)$, уже не зависящих от k_j^2 [17, 18]. Дальнейшая подстановка вычисленных таким образом концентраций $C_j^M(t)$ в выражения для $f_q(R_q, t)$ и S_q^j позволит получить выражения для функций распределения $f_q(R_q, t)$ размеров $R_q(t)$ и сил стоков $S_q^j(R_q, t)$, не зависящих от k_j^2 . В свою очередь знание перечисленных характеристик дает возможность вычислить изменения под облучением таких свойств материалов, как распухание, упрочнение, ползучесть.

Расчет скорости радиационного распухания гетерогенного материала

Образующиеся в материалах под облучением вакансии и межузельные атомы в результате миграции исчезают на стоках типа q , изменяя их, т.е. достраивая или уменьшая соответствующие атомные плоскости кристаллического материала.

Радиационное распухание материалов обусловлено поступлением на структурные и формирующиеся стоки выбитых облучением межузельных атомов, которые увеличивают объем материала на ΔV . Радиационное порообразование развивается в материале, когда имеется избыточная концентрация нескомпенсированных вакансий, поскольку межузельные атомы в силу их большой подвижности уходят на стоки быстрее, чем вакансии.

Под радиационным распуханием материала понимается изменение объема в результате образования и эволюции структурных дефектов типа q , создающих излишки либо недостатки объема по сравнению с первоначальной структурой. Относительное распухание оценивается в виде

$$\gamma = \frac{\Delta V}{V_0} = \sum_q \gamma_q, \quad (16)$$

где V_0 — первоначальный объем, γ_q — вклад в распухание стоков типа q .

При этом предполагается, что структурные дефекты q не взаимодействуют между собой. В дальнейшем полагаем, что V_0 — единица объема материала. Чаще бывает удобнее вычислять не распухание γ , а скорость распухания

$$\dot{\gamma} = \sum_q \dot{\gamma}_q. \quad (17)$$

Если бы в облучаемом материале образующиеся межузельные атомы и вакансии полностью аннигилировали бы как при встрече, так и на кластерах дефектов противоположного знака, то не происходило бы никаких радиационных изменений, кроме накопления продуктов ядерных реакций и их следствий. Поэтому формирование благоприятных условий для рекомбинационных процессов должно сопровождаться снижением радиационного набухания материалов. Значит, для подавления или ослабления набухания необходимо материал приготовить таким образом, чтобы в нем либо были сформированы дополнительные стоки, на которые попадали бы межузельные атомы при диффузии и там исчезали, либо созданы «препятствия» для стока межузлий на структурные стоки материалов.

Поскольку дислокации, границы зерен являются хорошими структурными стоками для межузлий, а условия работы (рабочая температура, флюэнс облучающих частиц) обычно заданы, то регулировать поступление межузлий на эти «опасные» стоки можно лишь специальным легированием, создающим определенную структуру в пространстве между такими стоками. Процессы распада твердых растворов с выпадением вторичных фаз и являются способом, позволяющим создать такую специальную структуру.

Рассмотрим вклады в радиационное набухание (16) различных структурных дефектов q , как уже имеющих в материале, так и возникающих в результате облучения или других воздействий [18, 38, 39]. Пусть в материале имеются дислокации ($q = D$), внутренние поверхности раздела ($q = \Lambda$), формируются выделения вторичной фазы, преимущественно поглощающие либо межузельные атомы ($q_j = P_j$), либо вакансии ($q = P_v$), образуются скопления собственных точечных дефектов: межузельных атомов — мелкие кластеры ($q = Q$) и дислокационные межузельные петли ($q = L_j$); вакансий — поры ($q = V$) и дислокационные вакансионные петли ($q = L_v$).

Пусть v_{P_j} — объемная доля формирующихся выделений типа P_j (j — тип поглощаемого выделением дефекта), а ξ_j^{jF} — число дефектов j , генерированных в единицу времени в единице объема фазы $F = P_v, P_j$ и M (M — матрица). Тогда, обозначив через ξ_g^{jF} полное число дефектов типа j , попавших в единицу времени на все стоки типа q в единице объема фазы F , запишем для матрицы ($F = M$)

$$\xi_g^{jM} = \dot{\xi}_j + \sum_{q_j=1}^{n_j} \dot{\xi}_{q_j}^j, \quad (18)$$

где $q_j = D, \Lambda, P_j, Q, L_j, V$; n_j — число сортов стоков q дефектов типа j ; величина $\dot{\xi}_j$ — число свободных дефектов типа j , генерированных в матрице в единице объема в единицу времени.

Аналогичное выражение для выделения $F = P_j$ будет иметь вид

$$\dot{\xi}_{jg}^{P_j} = g_j^{P_j}, \quad (19)$$

где $g_j^{P_j}$ — скорость генерации дефектов j в выделении P_j .

Баланс частиц — вакансий и межузлий, которые возникают в равных количествах при облучении во всем объеме материала, дает

$$\begin{aligned}
& v_{P_i} g_v^{P_i} + v_{P_v} g_v^{P_i} + (1 - v_{P_i} - v_{P_v}) \left(\sum_{q_v} \dot{\xi}_{q_v}^v + \dot{\xi}_v \right) = \\
& = v_{P_i} g_i^{P_i} + v_{P_v} g_i^{P_v} + (1 - v_{P_i} - v_{P_v}) \left(\dot{\xi}_i + \sum_{q_i} \dot{\xi}_{q_i}^i \right). \quad (20)
\end{aligned}$$

Поскольку на один и тот же сток q могут оседать как межузельные атомы, так и вакансии, то удобно работать с выражениями

$$\dot{\xi}_q^j = \dot{\xi}_q^j - \dot{\xi}_q^k, \quad (21)$$

где $j \neq k$ и $j, k = i, v$; $\dot{\xi}_q^j$ представляет собой результирующее (с учетом рекомбинации на стоке) число дефектов j , осевших на стоках q в единице объема в единицу времени.

Пользуясь (21), перепишем условие баланса (20) в виде

$$\begin{aligned}
& v_{P_i} g_v^{P_i} + v_{P_v} g_v^{P_v} + (1 - v_{P_i} - v_{P_v}) \left(\dot{\xi}_v + \dot{\xi}_v^v + \dot{\xi}_L^v + \dot{\xi}_{P_v}^v \right) = \\
& = v_{P_i} g_i^{P_i} + v_{P_v} g_i^{P_v} + (1 - v_{P_i} - v_{P_v}) \left(\dot{\xi}_D^i + \dot{\xi}_\Lambda^i + \dot{\xi}_Q^i + \dot{\xi}_{L_i}^i + \dot{\xi}_{P_i}^i \right). \quad (22)
\end{aligned}$$

Здесь учтено, что количество свободных межузлий в материале ничтожно мало, т.е. $\xi_i = 0$, а $\xi_v = \dot{\xi}_v$. Кроме того, принято во внимание предпочтение в поглощении дефектов j разными стоками q (см., например, [14, 19, 40–44]). Скорость распухания для гетерогенного материала можно представить в виде

$$\dot{\gamma} = v_{P_v} \dot{\gamma}_{P_v} + v_{P_i} \dot{\gamma}_{P_i} + (1 - v_{P_i} - v_{P_v}) \dot{\gamma}_M. \quad (23)$$

Если предположить, что в формирующихся выделениях вторичной фазы дефекты j не образуют кластеров, то можно записать

$$\begin{aligned}
v_{P_v} \dot{\gamma}_{P_v} &= -\Delta \Omega_v^{P_v} \left[v_{P_v} g_v^{P_v} + (1 - v_{P_i} - v_{P_v}) \dot{\xi}_{P_v}^v \right] + \left(\Omega + \Delta \Omega_i^{P_v} \right) v_{P_v} g_i^{P_v}, \\
v_{P_v} \dot{\gamma}_{P_v} &= \left(\Omega + \Delta \Omega_i^{P_i} \right) \left[v_{P_i} g_i^{P_i} + (1 - v_{P_i} - v_{P_v}) \dot{\xi}_{P_i}^i \right] - \Delta \Omega_v^{P_i} v_{P_i} g_v^{P_i}, \quad (24)
\end{aligned}$$

где $\Delta \Omega_j^{P_j}$ и $\Delta \Omega_k^{P_j}$ — изменения объема дефекта типа j или k в выделении P_j .

Для величины $\dot{\gamma}_M$ будем пользоваться определением (17).

Рассмотрим разные вклады $\dot{\gamma}_{Mq}$ в величину $\dot{\gamma}_M$. При поглощении дислокациями межузельных атомов и вакансий происходит следующее изменение объема:

$$\dot{\gamma}_{MD} = \Omega \dot{\xi}_D^i \text{ или } \dot{\gamma}_{MD} = \Omega \dot{\xi}_D^i, \quad (25)$$

а из (21) можно записать

$$\dot{\xi}_D^i = \rho_D (K_D^i - K_D^v), \quad (26)$$

где K_D^j определено в (5).

Для внутренних поверхностей выражение $jM\Lambda$ будет иметь вид, аналогичный (25).

Если рассмотреть сток q_i радиуса R_{q_i} , формирующийся из межузельных атомов (например Q, L_i, P_i), в котором атомный объем $\Omega_i^{q_i}(R_{q_i}) = \Omega + \Delta \Omega_i^{q_i}(R_{q_i})$, то каждый новый приходящий межузельный атом увеличивает его на величину $\Omega_i^{q_i}(R_{q_i})$. Каждая приходящая вакансия приводит к уменьшению на одну частицу этого стока q_i . С учетом того что стоки типа q_i могут быть разных размеров

и распределены по размерам с функцией $f_{q_i}(R_{q_i})$, а также пользуясь величиной скорости поглощения $I_{q_i}^i(R_{q_i})$ (см. (4)), запишем вклад стоков q_i в скорость распухания матрицы в виде

$$\dot{\gamma}_{Mq_i} = \int \Omega_i^{q_i}(R_{q_i}) [I_{q_i}^i(R_{q_i}) - I_{q_i}^v(R_{q_i})] f_{q_i}(R_{q_i}) dR_{q_i}. \quad (27)$$

Для стоков q_v размера R_{q_v} , формируемых из вакансий (например, поры, вакансионные дислокационные петли, выделения, поглощающие вакансии), релаксация объема складывается из релаксации объема вакансий $\Delta\Omega_v^{q_v}(R_{q_v})$, их составляющих. Значит, приходящие междузельные атомы уменьшают эту релаксацию. Следовательно, пользуясь функцией распределения таких стоков по размерам $f_{q_v}(R_{q_v})$ и выражением (4) для скорости поглощения дефектов $I_{q_v}^j(R_{q_v})$, запишем вклад таких стоков в скорость распухания

$$\dot{\gamma}_{Mq_v} = - \int \Delta\Omega_v^{q_v}(R_{q_v}) [I_{q_v}^v(R_{q_v}) - I_{q_v}^i(R_{q_v})] f_{q_v}(R_{q_v}) dR_{q_v}. \quad (28)$$

Если положить, что в среднем $\Omega_i^{q_i}(R_{q_i})$ и $\Delta\Omega_v^{q_v}$ не зависят от размеров стоков R_{q_j} , то вместо (27) и (28) получим, используя (21),

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_{Mq_i} &= \Omega_i^{q_i} \int [I_{q_i}^i(R_{q_i}) - I_{q_i}^v(R_{q_i})] f_{q_i}(R_{q_i}) dR_{q_i} = \Omega_i^{q_i} \dot{\xi}_{q_i}^i, \\ \dot{\gamma}_{Mq_v} &= -\Delta\Omega_v^{q_v} \int [I_{q_v}^v(R_{q_v}) - I_{q_v}^i(R_{q_v})] f_{q_v}(R_{q_v}) dR_{q_v} = -\Delta\Omega_v^{q_v} \dot{\xi}_{q_v}^v, \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$\dot{\xi}_{q_j}^i = \int [I_{q_j}^j(R_{q_j}) - I_{q_j}^k(R_{q_j})] f_{q_j}(R_{q_j}) dR_{q_j}, \quad j \neq k. \quad (30)$$

Вклад свободных вакансий, исходя из (31), имеет вид

$$\dot{\gamma}_{Mv} = -\Delta\Omega_v \dot{\xi}_v. \quad (31)$$

Собирая вклады от разных фаз (23) и стоков (25), (28)–(31) в выражение (23) с учетом того, что в (24) учтены дефекты j , попавшие из матрицы на формирующиеся выделения P_j , получим

$$\begin{aligned} \dot{\gamma} &= v_{P_v} \left\{ -\Delta\Omega_v^{P_v} \left[g_v^{P_v} + \frac{1 - v_{P_i} - v_{P_v}}{v_{P_v}} \dot{\xi}_{P_v}^v \right] + \left(\Omega + \Delta\Omega_i^{P_v} \right) g_i^{P_v} \right\} + \\ &+ v_{P_i} \left\{ \left(\Omega + \Delta\Omega_i^{P_v} \right) \left[g_i^{P_i} + \frac{1 - v_{P_i} - v_{P_v}}{v_{P_i}} \dot{\xi}_{P_i}^i \right] - \Delta\Omega_v^{P_i} g_v^{P_i} \right\} + \\ &+ (1 - v_{P_i} - v_{P_i}) \left[\Omega \left(\dot{\xi}_D^i + \dot{\xi}_\Lambda^i \right) + \left(\Omega + \Delta\Omega_i^Q \right) \dot{\xi}_Q^i + \right. \\ &\left. + \left(\Omega + \Delta\Omega_i^{L_i} \right) \dot{\xi}_{L_i}^i - \Delta\Omega_v \dot{\xi}_v - \Delta\Omega_v^v \dot{\xi}_v^v - \Delta\Omega_v^{L_v} \dot{\xi}_{L_v}^v \right]. \end{aligned} \quad (32)$$

Воспользуемся балансным соотношением (22), откуда получим выражение

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_v &= \dot{\xi}_D^i + \dot{\xi}_\Lambda^i + \dot{\xi}_Q^i + \dot{\xi}_{L_i}^i + \dot{\xi}_{P_i}^i - \dot{\xi}_v^v - \dot{\xi}_{L_v}^v - \dot{\xi}_{P_v}^v - \\ &- \frac{v_{P_v} \left(g_v^{P_v} - g_i^{P_v} \right) + v_{P_i} \left(g_v^{P_i} - g_i^{P_i} \right)}{1 - v_{P_i} - v_{P_v}}. \end{aligned} \quad (33)$$

Подставив (33) в (32), имеем следующее выражение для скорости распухания гетерогенного материала:

$$\begin{aligned}
\dot{\gamma} = (1 - \nu_{P_1} - \nu_{P_v}) & \left\{ (\Omega - \Delta\Omega_v) (\dot{\xi}_D^i + \dot{\xi}_\Lambda^i) + (\Omega + \Delta\Omega_i^Q - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_Q^i + \right. \\
& + (\Omega + \Delta\Omega_i^{L_i} - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_{L_i}^i + (\Omega + \Delta\Omega_i^{P_i} - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_{P_i}^i - \\
& (\Delta\Omega_v^V - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_V^v - (\Delta\Omega_v^{L_v} - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_{L_v}^v - (\Delta\Omega_v^{P_v} - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_{P_v}^v - \\
& \frac{\nu_{P_v}}{1 - \nu_{P_1} - \nu_{P_v}} \left[g_v^{P_v} (\Delta\Omega_v^{P_v} - \Delta\Omega_v) - g_i^{P_v} (\Omega - \Delta\Omega_v + \Delta\Omega_i^{P_v}) \right] + \\
& \left. + \frac{\nu_{P_v}}{1 - \nu_{P_1} - \nu_{P_v}} \left[g_i^{P_i} (\Omega + \Delta\Omega_i^{P_i} - \Delta\Omega_v) - g_v^{P_i} (\Delta\Omega_v^{P_i} - \Delta\Omega_v) \right] \right\}. \quad (34)
\end{aligned}$$

В случае, если в материале формируются только когерентные предвыделения, адсорбирующие вакансии ($\nu_{P_v} = P$, $\nu_{P_1} = 0$, $\nu_{P_v} = \nu_P$ и $g_i^{P_v} = g_v^{P_v} = g^P$), т.е. выделения P сжаты, то выражение (34) принимает вид

$$\begin{aligned}
\dot{\gamma} = (1 - \nu_P) & \left\{ (\Omega - \Delta\Omega_v) (\dot{\xi}_D^i + \dot{\xi}_\Lambda^i) + (\Omega + \Delta\Omega_i^Q - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_Q^i + \right. \\
& + (\Omega + \Delta\Omega_i^{L_i} - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_{L_i}^i - (\Delta\Omega_v^V - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_V^v - \\
& (\Delta\Omega_v^{L_v} - \Delta\Omega_v) \dot{\xi}_{L_v}^v - (\Delta\Omega_v^P - \Delta\Omega_v) \left(\frac{\nu_P}{1 - \nu_P} g^P + \dot{\xi}_P^v \right) + \\
& \left. + \frac{\nu_P}{1 - \nu_P} g^P (\Omega + \Delta\Omega_i^P - \Delta\Omega_v) \right\}. \quad (35)
\end{aligned}$$

Последнее слагаемое в (35) описывает эффект выхода межузлий из сжатого предвыделения P в твердый раствор. Если к тому же 1) пренебречь релаксациями $\Delta\Omega_i^Q$ по сравнению с атомным объемом Ω и 2) положить одинаковыми релаксации объемов вакансий в порах, петлях и в свободном состоянии $\Delta\Omega_v^V \simeq \Delta\Omega_v^{L_v} \approx \Delta\Omega_v$, то получим

$$\begin{aligned}
\dot{\gamma} \simeq (1 - \nu_P) \Omega & \left[\dot{\xi}_D^i + \dot{\xi}_\Lambda^i + \dot{\xi}_Q^i + \dot{\xi}_{L_i}^i + \nu_P g^P (1 - \nu_P)^{-1} \right] - \\
& (\Delta\Omega_v^P - \Delta\Omega_v) \left[\nu_P g^P (1 - \nu_P) \dot{\xi}_P^v \right]. \quad (36)
\end{aligned}$$

Подставляя в (36) выражения (26) и (30) и не учитывая роль стоков $q = \Lambda$ (поверхностей), имеем

$$\begin{aligned}
\dot{\gamma} = (1 - \nu_P) \Omega \rho_D & (K_D^i - K_D^v) + \int [I_Q^i(R_Q) - I_Q^v(R_Q)] f_Q(R_Q) dR_Q \\
& + \int [I_{L_i}^i(R_{L_i}) - I_{L_i}^v(R_{L_i})] f_{L_i}(R_{L_i}) dR_{L_i} \\
& + \nu_P g^P \Omega - (\Delta\Omega_v^P - \Delta\Omega_v) \left[\nu_P g^P + (1 - \nu_P) \int I_P^v(R_P) f_P(R_P) dR_P \right].
\end{aligned}$$

Заключение

Из формул (36)–(38) видно следующее: 1) влияние на скорость распухания материала формирующихся в процессе распада выделений вторичной фазы; 2) связь процесса распухания с такими характеристиками стоков, как их плотность (ρ_D), распределения по размерам $f_q(R_q)$, скорости $I_q^j(R_q)$ и эффектив-

ности $K_D^j(\gamma^*)$ поглощения точечных дефектов.

В частности, предпочтительные множители α_D^j или $\alpha_{D_0}^j$ (для материала без предвыделений) обратно пропорциональны $\ln(2R/R_0^j)$. Причем величины $R_0^j \sim |\Delta\Omega_j|$, т.е. релаксациям объема дефектов j . Величины $\Delta\Omega_j$ тем больше, чем плотнее упаковка атомов в кристаллической решетке. Следовательно, снижение $\Delta\Omega_j$ приведет к понижению R_0^j и α_D^j , а значит, в соответствии с выражением (37) к уменьшению как скорости набухания $\dot{\gamma}$, так и величины $\dot{\gamma}_0$. Поскольку известно (см., например, [1–5]), что материалы с ОЦК решеткой (более рыхлые) набухают меньше, чем с ГЦК решеткой (более плотные), т.е. когда $\Delta\Omega_j^{\text{ГЦК}} > \Delta\Omega_j^{\text{ОЦК}}$, то, вероятно, правильный учет релаксаций дефектов $\Delta\Omega_j$ в этих решетках даст более точные оценки для величин их набухания.

Кроме того, формула (37) в сочетании с уравнениями (2), (3) и выражениями (4), (5) показывает тесную связь расчетов $\dot{\gamma}$ с расчетами величин K_D^j , $I_D^j(R_0^j)$, $\rho_q(R_q)$ и $R_q(t)$. Самосогласованная процедура такого расчета представлена на схеме рисунка (уровень III), где в блоке «свойство» может подразумеваться $\dot{\gamma}$ в виде (37).

Список литературы

- [1] Реакторное материаловедение. М.: ЦНИИ Атоминформ, 1978. Т. 1–6.
- [2] Некоторые проблемы физики радиационных повреждений материалов. Киев: Наукова думка, 1979. 240 с.
- [3] Паршин А.М. Структура и радиационное набухание сталей и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1983. 56 с.
- [4] Ибрагимов Ш.Ш., Кирсанов В.В., Пятилетов Ю.С. Радиационные повреждения металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 240 с.
- [5] Зеленский В.Ф., Неклюдов Н.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и набухание металлов. Киев: Наукова думка, 1988. 294 с.
- [6] Горынин И.В., Паршин А.М. // Атомная энергия. 1981. Т. 50. № 5. С. 319–324.
- [7] Горынин И.В., Зеленский В.Ф., Паршин А.М. и др. // Радиационные дефекты в металлах. Алма-Ата: Наука, 1981. С. 265–272.
- [8] Glowinski L.D. // J. Nucl. Mater. 1976. Vol. 61. N 1. P. 8–12.
- [9] Norris D.I.R. // Rad. Effects. 1972. Vol. 14. N 1. P. 1–7.
- [10] Little E.A., Buiiough R., Wood M.H. // Proc. Roy. Soc. London. 1980. Vol. A372. N 4. P. 565–572.
- [11] Konobeev Yu.V., Subbotin A.V., Golubov S.I. // Rad. Effects. 1973. Vol. 20. N 1/2. P. 265–271.
- [12] Heald P.T., Speight M.V. // Phil. Mag. 1974. Vol. 30. N 4. P. 869–875.
- [13] Koehler J.S. // J. Appl. Phys. 1975. Vol. 46. N 8. P. 2423–2430.
- [14] Brailsford A.D., Bullough R., Hayns M.R. // J. Nucl. Mater. 1976. Vol. 60. N 2. P. 246–251.
- [15] Russe K.C. // Acta Met. 1978. Vol. 26. N 5. P. 1615–1620.
- [16] Brailsford A.D., Bullough R. // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 69/70. N 3. P. 434–439.
- [17] Трушин Ю.В., Орлов А.Н. // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 7. С. 1302–1310.
- [18] Трушин Ю.В. // Вопросы теории дефектов в кристаллах. Л.: Наука, 1987. С. 133–144.
- [19] Маргвелашвили Н.Г., Саралидзе З.К. // ФТТ. 1973. Т. 15. Вып. 5. С. 2665–2671.
- [20] Орлов А.Н., Трушин Ю.В. Энергии точечных дефектов в металлах. М.: Энергоатомиздат, 1983. 82 с.
- [21] Саралидзе З.К. // ЭВМ и моделирование дефектов в кристаллах. Л., 1982. С. 5–24.
- [22] Саралидзе З.К. // Вопросы атомной науки и техники (ВАНТ). Сер. ФРПРМ. Харьков, 1984. Вып. 1(29)/2(30). С. 142–153.
- [23] Wolfer W.G., Glasgow V.W. // Acta Met. 1985. Vol. 33. N 5. P. 1997–2003.
- [24] Саралидзе З.К., Качантырадзе Г.Г. // ВАНТ. Сер. ФРПРМ. 1982. Вып. 1(20). С. 27–33.
- [25] Mansur L.K. // J. Nucl. Mater. 1979. Vol. 83. N 1/2. P. 109–112.
- [26] Carpenter R.W., Yoo M.H. // Metall. Trans. 1978. Vol. 9A. N 4. P. 1739–1743.
- [27] Baron M. // J. Nucl. Mater. 1979. Vol. 83. N 1/2. P. 128–133.

- [28] *Williams T.M.* // *J. Nucl. Mater.* 1982. Vol. 107. N 1/2. P. 222–229.
- [29] *Орлов А.Н., Паршин А.М., Трушин Ю.В.* // *Физ. ХОМ.* 1987. № 3. С. 22–29.
- [30] *Слезов В.В., Сагалович В.В.* // *УФН.* 1987. Т. 151. № 1. С. 67–83.
- [31] *Кирсанов В.В., Суворов А.Л., Трушин Ю.В.* Процессы радиационного дефектообразования в металлах. М.: Энергоатомиздат, 1985. 272 с.
- [32] *Трушин Ю.В.* // Моделирование на ЭВМ дефектов в металлах. Л.: Наука, 1982. С. 121–145.
- [33] *Любов Б.Я.* Диффузионные процессы в неоднородных твердых телах. М.: Наука, 1981. 295 с.
- [34] *Любов Б.Я.* Кинетическая теория фазовых превращений. М.: Metallurgia, 1969. 263 с.
- [35] *Физическое металловедение / Под ред. Н.У.Кана, П.Хаазена.* М.: Metallurgia, 1987. Т. 1–3.
- [36] *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. 352 с.
- [37] *Potpe W., Bahr H.-A., Gille G. et al.* // *Modern Theories and Experimental Evidence.* Amsterdam, 1985. Vol. 12. P. 213–241.
- [38] *Паршин А.М., Трушин Ю.В.* // Письма в ЖТФ. 1983. Т. 9. Вып. 9. С. 561–564.
- [39] *Орлов А.Н., Паршин А.М., Трушин Ю.В.* // ЖТФ. 1983. Т. 53. Вып. 12. С. 2367–2372.
- [40] *Brailsford A.D.* // *J. Nucl. Mater.* 1981. Vol. 102. N 1/2. P. 77–82.
- [41] *Brailsford A.D., Bullough R.* // *Phil. Trans. Roy. Soc. London.* 1981. Vol. 302. N 1. P. 87–92.
- [42] *Brailsford A.D.* // *J. Nucl. Mater.* 1986. Vol. 139. N 1/2. P. 163–171.
- [43] *Трушин Ю.В.* // ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 2. С. 226–231.
- [44] *Трушин Ю.В.* // ФММ. 1991. № 7. С. 101–104.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Санкт-Петербург

Поступило в Редакцию
17 апреля 1991 г.