

01;05
©1992 г.

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТМОСФЕР ВОКРУГ ДИСЛОКАЦИЙ И ПОР НА СКОРОСТЬ РАСПУХАНИЯ И РАДИАЦИОННОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ВНЕДРЕНИЯ

Ю.С.Пятилетов, Н.И.Едемский

Рассчитано распределение примесных атомов внедрения вокруг дислокаций и пор. Вычислены потоки междоузельных атомов и вакансий на дислокации и поры, окруженные примесными атмосферами, эффективности захвата стоками точечных дефектов. На основе этого найдены скорости радиационно-стимулированной деформации (распухания и радиационной ползучести) в зависимости от концентрации примесей, плотности дислокаций и пор при учете взаимного влияния стоков друг на друга.

Введение

Согласно современным представлениям, скорость деформации металлических материалов, находящихся под воздействием облучения и механической нагрузки, в значительной мере определяется эффективностью поглощения собственных точечных дефектов (междоузельных атомов и вакансий) стоками, основными из которых являются дислокации и вакансионные поры. В твердых растворах внедрения вокруг стоков образуются примесные атмосферы, обладающие концентрационными упругими полями, которые частично экранируют собственные поля напряжений стоков. Вследствие этого силы стоков изменяются, что влечет за собой уменьшение потоков междоузельных атомов и вакансий на дислокации и поры и в конечном счете уменьшение скорости деформации. Ряд результатов по этой проблеме, касающийся эффектов, связанных только с атмосферами у дислокаций, был получен в предыдущих работах [1,2]. Настоящая работа посвящена исследованию совместного влияния примесных атмосфер вокруг дислокаций и пор на скорость распухания и радиационной ползучести твердых растворов внедрения.

Основные соотношения

В качестве объекта исследования рассмотрим модельный кристалл с ОЦК решеткой, содержащий равномерно распределенные, параллельные друг другу прямолинейные краевые дислокации с плотностью ρ_d , вакансионные поры сферической формы со средним радиусом r_v и плотностью

N_V , примесные атомы внедрения со средней концентрацией C_0 . Согласно [3,4], такие примеси являются точечными дефектами дипольного типа.

Используя полученные в [2-5] формулы для энергии взаимодействия примесного атома с дислокацией w^{id} , порой w^{iv} , другим примесным атомом (w^{ii}), по методике, изложенной в [1,2], найдем равновесное распределение примесей в атмосферах вокруг дислокаций ($s = d$) и пор ($s = v$)

$$C^s(\mathbf{r}) = \left\{ 1 + \frac{1 - C_0}{C_0} \times \right. \\ \left. \times \exp \left[\frac{w^{is}(\mathbf{r})}{kT} + \frac{1}{kT} \sum_{\mathbf{r}'} (w^{ii}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - w^{ii}(\mathbf{r}_k^s - \mathbf{r}')) C(\mathbf{r}') \right] \right\}^{-1}, \quad (1)$$

где k — постоянная Больцмана; T — температура; r_k^s — расстояние, на котором взаимодействием примеси со стоком s можно пренебречь.

Зная $C^s(\mathbf{r})$, нетрудно определить энергию упругого взаимодействия собственных точечных дефектов типа α ($\alpha = I$ соответствует междоузельным атомам, $\alpha = V$ — вакансиям) с дислокациями и порами, окруженными примесными атмосферами [2,5],

$$E_\alpha^s(\mathbf{r}) = E_\alpha^{0s}(\mathbf{r}) - \\ - \sum_{\mathbf{r}'} \frac{(1 + \nu)\Omega_1\mu\Delta V_\alpha}{18\pi(1 - \nu)(1 - 2\nu)|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \left(1 - \frac{3(z - z')^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2} \right) C^s(\mathbf{r}'), \quad (2)$$

где первое слагаемое представляет собой энергию взаимодействия точечного дефекта типа α со стоком s

$$E_\alpha^d(r, \vartheta) = \frac{\mu b(1 + \nu)}{3\pi(1 - \nu)} \Delta V_\alpha \frac{\sin \vartheta}{r}, \quad (3)$$

$$E_\alpha^{0V}(r, \vartheta) = -\frac{1}{3} \sigma_{zz}^0 \Delta V_\alpha \left[1 + (r_v/r)^3 (1 - 3 \cos^2 \vartheta) \frac{5(1 + \nu)}{7 - 5\nu} \right], \quad (4)$$

ΔV_α — релаксационный объем точечного дефекта типа α ; ν — коэффициент Пуассона; μ — модуль сдвига; Ω_1 — девиаторная часть тензора, которым характеризуется упругий диполь, моделирующий примесный атом; b — модуль вектора Бюргерса; r, ϑ, z — цилиндрические координаты; σ_{zz}^0 — внешнее растягивающее напряжение; второе слагаемое в (2) — энергия взаимодействия точечного дефекта α с упругим полем, создаваемым примесной атмосферой.

Выражение (2) необходимо для записи дрейфового члена в уравнениях диффузии точечных дефектов α , из которых вычисляются стационарные концентрации междоузельных атомов и вакансий и их потоки J_α^s на стоки s . В свою очередь через J_α^s выражаются эффективности поглощения точечных дефектов дислокациями (Z_α) и порами (Y_α)

$$Z_\alpha = \frac{J_\alpha^d \Omega}{D_\alpha (C_\alpha^{00} - C_\alpha^{eq})}, \quad (5)$$

$$Y_\alpha = \frac{J_\alpha^V \Omega}{4\pi D_\alpha (C_\alpha^0 - C_\alpha^{eq})}, \quad (6)$$

где Ω — атомный объем; D_α , C_α^{eq} — коэффициент диффузии точечных дефектов α и их термически равновесная концентрация соответственно; C_α^0 — концентрация на середине расстояния между стоками, определяемая интенсивностью облучения.

Таким образом, задача нахождения Z_α и Y_α сводится к решению диффузионных уравнений для точечных дефектов α с учетом упругих полей дислокаций и пор, окруженных примесными атмосферами. При строгом подходе к этой проблеме следует принимать во внимание влияние стоков разного типа в ансамбле (см., например, [6]). В настоящей работе такой учет проведен по следующей схеме: при расчете силы стока дислокации объем материала разбивается на одинаковые цилиндрические ячейки, в центре каждой из которых находится дислокация, а поры считаются равномерно распределенными (“размазанными”) в пространстве; при расчете силы стока поры материал рассматривается состоящим из одинаковых сферических ячеек с порами в их центрах и “размазанными” вокруг них дислокациями.

Для первого и второго из названных случаев можно записать следующие диффузионные уравнения:

$$D_\alpha \nabla^2 C_\alpha(\mathbf{r}) + \frac{D_\alpha}{kT} (\nabla C_\alpha(\mathbf{r}) \nabla E_\alpha^d(\mathbf{r}) + C_\alpha(\mathbf{r}) \nabla^2 E_\alpha^d(\mathbf{r})) + G - D_\alpha k_{\alpha V}^2 C_\alpha = 0, \quad (7)$$

$$D_\alpha \nabla^2 C_\alpha(\mathbf{r}) + \frac{D_\alpha}{kT} (\nabla C_\alpha(\mathbf{r}) \nabla E_\alpha^V(\mathbf{r}) + C_\alpha(\mathbf{r}) \nabla^2 E_\alpha^V(\mathbf{r})) + G - D_\alpha k_{\alpha d}^2 C_\alpha = 0, \quad (8)$$

где G — скорость образования собственных точечных дефектов при облучении, $k_{\alpha s}^2$ — эффективность поглощения точечных дефектов α всеми стоками s ,

$$k_{\alpha V}^2 = 4\pi Y_\alpha r_V N_V \quad (9)$$

$$k_{\alpha d}^2 = Z_\alpha \rho_d. \quad (10)$$

В качестве граничных условий используем следующие: на ядре дислокации и поверхности поры задаем термически равновесные концентрации точечных дефектов

$$C_\alpha(r_s) = C_\alpha^{eq} \exp(-E_\alpha(r_s)/kT), \quad (11)$$

а на внешних границах ячеек C_α считаем равной C_α^0 :

$$C_\alpha^0 = \frac{G}{D_\alpha k_\alpha^2}, \quad (12)$$

где

$$k_\alpha^2 = k_{\alpha d}^2 + k_{\alpha p}^2. \quad (13)$$

Систему уравнений (7), (8) с заданными граничными условиями (11), (12) решаем численно методом итераций. Начальные значения Z_α^0 и Y_α^0 получаем на основе уравнений (7), (8), в которых приравнены нулю два

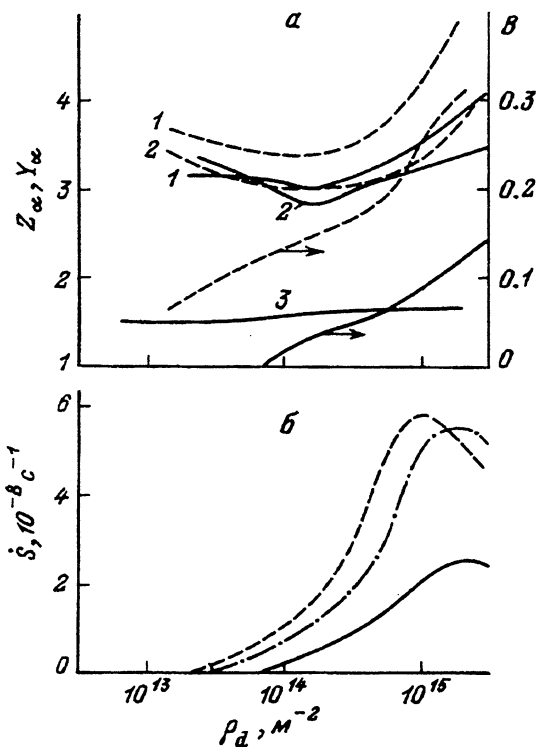


Рис. 1. Параметры Z_I (1), Z_V (2), Y_α (3), фактор предпочтения B (а) и скорость распухания \dot{S} (б), рассчитанные для разных значений плотности дислокаций при $C_0 = 10^{-3}$ (сплошные линии) и $C_0 = 0$ (штриховые).

Для Y_α обе линии сливаются. Штрихпунктир (б) — без учета взаимного влияния стоков. $N_V = 3.16 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $r_V = 5 \text{ нм}$, $\sigma_{zz}^0 = 0$.

последние слагаемые в левой части. Итерационный процесс продолжаем до достижения заданной точности.

При расчетах использовался пакет программ GEAR [7] для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, к каким относятся (7), (8). Расчеты проводились на ЭВМ ЕС-1066.

Вычислив Z_α и Y_α , можно приступить непосредственно к изучению влияния примесных атмосфер вокруг дислокаций и пор на скорости распухания \dot{S} и радиационной ползучести $\dot{\epsilon}$, используя известные формулы [8,9],

$$\dot{S} = \frac{4\pi r_V N_V \rho_d G (Z_I Y_V - Z_V Y_I)}{k_I^2 k_V^2}, \quad (14)$$

$$\dot{\epsilon} = \frac{L}{3\lambda} \rho_d [Z_I D_I C_I^0 - Z_V D_V (C_V^0 - C_V^{eg})], \quad (15)$$

где L — среднее расстояние, проходимое дислокацией в плоскости скольжения от одной устойчивой конфигурации до другой; λ — средний размер барьеров, преодолеваемых дислокацией посредством переползания.

Результаты расчетов и обсуждение

Используя вычислительную схему, изложенную в предыдущем разделе, выясним, каким образом на параметры Z_α , Y_α , фактор предпочтения $B = Z_I/Z_V - Y_I/Y_V$ и скорость деформации (\dot{S} и $\dot{\epsilon}$) влияют примесные атмосферы вокруг дислокаций и пор в твердых растворах внедрения при

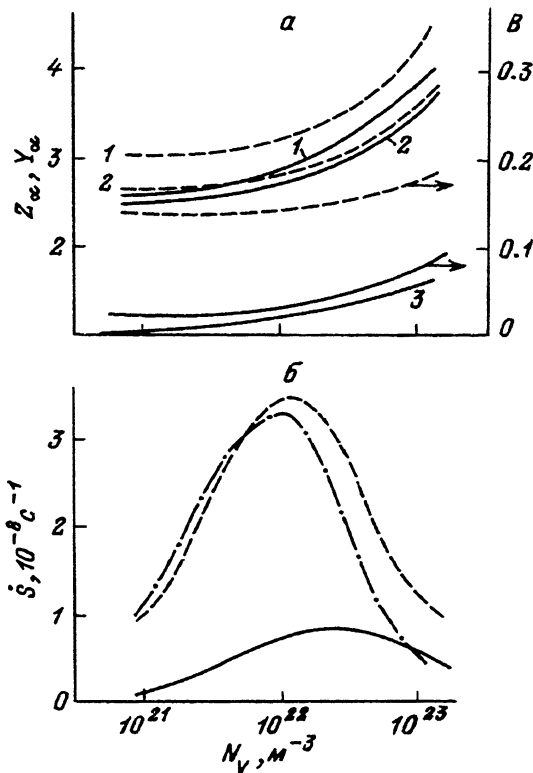


Рис. 2. То же, что и на рис. 1.
 $\rho = 3.16 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$.

разных значениях концентрации примесей C_0 , плотностей дислокаций ρ_d и пор N_V . С этой целью рассчитаем, как изменяются Z_α , Y_α , B и \dot{S} с увеличением ρ_d и N_V для случаев $C_0 = 0$ и $C_0 = 10^{-3}$, а также найдем зависимости указанных величин и скорости ползучести $\dot{\epsilon}$ от C_0 при фиксированных ρ_d и N_V . Расчеты проведем как с учетом, так и без учета влияния стоков друг на друга. При этом будем использовать следующие параметры материала, отвечающие углеродистому мартенситу: $b = 2.48 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $\mu = 8 \cdot 10^4 \text{ МПа}$, $\nu = 0.3$, $\Omega = 1.2 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$, $\tau_d = 3 \cdot b$, $\Omega_1 = 0.712\Omega$. Кроме того, положим $G = 10^{-6} \text{ см}^{-3}/\text{с}^{-1}$; $T = 540 \text{ К}$.

На рис. 1,а приведены результаты расчета Z_α , Y_α и B для разных значений ρ_d и фиксированных N_V и C_0 (сплошные линии). Как видим, величины Y_α практически не изменяются с ростом ρ_d , тогда как Z_I и Z_V обнаруживают немонотонное поведение: при увеличении ρ_d от 10^{13} до $\approx 10^{14} \text{ м}^{-2}$ они незначительно уменьшаются, а с дальнейшим ростом ρ_d заметно возрастают. Фактор предпочтения B монотонно увеличивается во всем интервале изменения ρ_d . В отсутствие примесей ($C_0 = 0$) Z_α , Y_α и B ведут себя качественно таким же образом, однако соответствующие кривые лежат выше. Как следствие этого, выше лежат значения скорости распухания \dot{S} в случае $C_0 = 0$ (рис. 1,б). Величина эффекта, связанного с учетом взаимного влияния стоков друг на друга, видна из сравнения штриховой и штрихпунктирной кривых на рис. 1,б. Для типичных значений плотностей дислокаций ($\rho_d \leq 10^{15} \text{ м}^{-2}$) кривая $\dot{S}(\rho_d)$, рассчитанная с учетом взаимного влияния стоков, лежит несколько выше, чем найденная

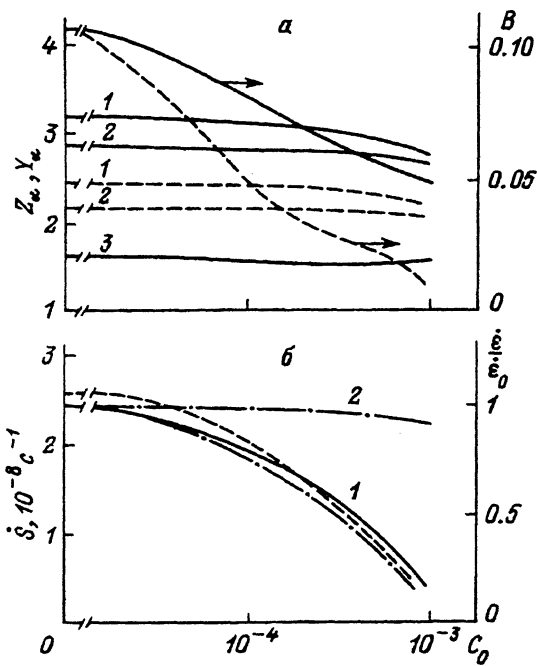


Рис. 3. Зависимости Z_I (1), Z_V (2), Y_α (3), фактора предпочтения B (а), скоростей распухания и радиационной ползучести (б) от концентрации примесей, рассчитанные с учетом (сплошные линии) и без учета (штриховые) взаимного влияния стоков.

Штрихпунктир 1 и 2 — случаи, когда учтены примесные атмосферы только вокруг дислокаций и только вокруг пор соответственно. $N_V = 3.16 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $\rho_d = 3.16 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-3}$, $r_V = 5 \text{ нм}$, $\sigma_{zz}^0 = 300 \text{ МПа}$.

без такого учета. Из рис. 1,б следует также, что скорость распухания принимает максимальное значение при $\rho_d \approx 10^{15} \text{ м}^{-2}$. Отклонение ρ_d как в сторону уменьшения, так и в сторону увеличения приводит к снижению \dot{S} . Такое поведение $\dot{S}(\rho_d)$ согласуется с результатами, полученными в работе [10], причем, так же как и в [10], максимум на кривой имеет место при таких ρ_d , при которых эффективности поглощения точечных дефектов дислокациями и порами становятся примерно равными, т.е. выполняется соотношение $k_{\alpha d}^2 \approx k_{\alpha v}^2$. Результаты расчета Z_α , Y_α , B и \dot{S} при разных значениях плотности пор приведены на рис. 2. Как видно из рис. 2,а, Z_α , Y_α и B ведут себя однотипно: монотонно возрастают при увеличении N_V . На зависимости скорости распухания от N_V наблюдается максимум при $N_V \approx 3 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$. Влияние примесных атмосфер сводится к уменьшению Z_α , B и \dot{S} по сравнению со случаем $C_0 = 0$ и к сдвигу максимума на кривой $\dot{S}(N_V)$ в сторону больших значений N_V . Эффект, связанный с учетом влияния стоков друг на друга, выражается в незначительном уменьшении \dot{S} при относительно низких значениях плотности пор ($N_V \leq 10^{22} \text{ м}^{-3}$) и несколько большем увеличении \dot{S} при $N_V \geq 10^{22} \text{ м}^{-3}$, как это следует из рис. 2,а.

На рис. 3 представлены зависимости Z_α , Y_α , B , \dot{S} и скорости ползучести, отнесенной к величине $\dot{\epsilon}_0$ ($\dot{\epsilon}_0$ — скорость ползучести для случая $C_0 = 0$), от концентрации примесей, рассчитанные с учетом (сплошные линии) и без учета (штриховые) взаимного влияния стоков друг на друга. Характер поведения всех названных величин качественно одинаков: они монотонно уменьшаются с ростом C_0 . Хотя сплошная линия для B лежит выше штриховой при всех значениях C_0 , соответствующие кри-

вые для \dot{S} и $\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0$ пересекаются при некотором значении концентрации примесей (при $C_0 \approx 3 \cdot 10^{-4}$), причем, как видно из рис. 3,б, относительное расхождение этих линий мало в области низких концентраций C_0 и увеличивается с ростом C_0 . Чтобы выявить влияние на \dot{S} и $\dot{\epsilon}/\dot{\epsilon}_0$ примесных атмосфер вокруг дислокаций и вокруг пор по отдельности, на рис. 3,б нанесены штрихпунктирные линии 1 и 2, отвечающие случаям, когда учтены примесные атмосферы только вокруг дислокаций и только вокруг пор соответственно. Из сравнения этих кривых между собой, а также со сплошной линией на рис. 3,б следует, что основное влияние на скорость деформации оказывают атмосферы вокруг дислокаций; наличие атмосфер вокруг пор приводит лишь к незначительному уменьшению скоростей распухания и радиационной ползучести. Последнее объясняется тем, что атмосферы вокруг дислокаций гораздо плотнее и протяженнее, чем вокруг пор, поэтому они сильнее влияют на потоки собственных точечных дефектов к стокам. Лишь при довольно высоких концентрациях примесей, когда вследствие экранировки эффективности поглощения дислокацией вакансий и междоузельных атомов становятся почти равными, учет примесных атмосфер вокруг пор дает заметную поправку к скорости радиационной деформации материала.

Список литературы

- [1] Едемский Н.И., Кислицин С.Б., Пятилетов Ю.С. // Письма в ЖТФ. 1988. Т. 14. Вып. 24. С. 2264–2267.
- [2] Едемский Н.И., Кислицин С.Б., Пятилетов Ю.С. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1990. № 3 (54). С. 35–43.
- [3] Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: ИЛ, 1963. 247 с.
- [4] Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова Думка, 1981. 328 с.
- [5] Пятилетов Ю.С., Кислицин С.Б., Едемский Н.И. // ФММ. 1991. № 2. С. 72–78.
- [6] Слезов В.В. Препринт. М.: ПНИИАтоминформ, 1988. 14 с.
- [7] Hindmarsh A.C. Ordinary Differential Equations System Solve. Lawrence Livermore Laboratory Report UCID-30001. Rev. 2. 1974. 39 p.
- [8] Mansur L.K. // J. Nucl. Mater. 1979. Vol. 83. P. 109–127.
- [9] Ибрагимов Ш.Ш., Курсанов В.В., Пятилетов Ю.С. Радиационные повреждения металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 240 с.
- [10] Курсанов В.В., Пятилетов Ю.С., Туркбаев Т.Э. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 4. С. 698–706.

Институт ядерной физики
Алма-Ата

Поступило в Редакцию
31 января 1992 г.