

01; 05

© 1992

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОТЖИГА ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ  
В НИКЕЛЕ ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

А.В. Волобуев, В.В. Ганн

Рассмотрим предварительно облученный материал при низких температурах ( $T < 300$  К), когда образовавшиеся вакансии неподвижны. Материал содержит внутренние стоки плотностью  $S_d$  и примесь замещения концентрации  $C_p$ . Собственные межузельные атомы ( $i$ ) взаимодействуют с вакансиями ( $V$ ), атомами примеси ( $p$ ) и между собой, образуя малые комплексы дефектов: див- ( $2i$ ) и тримежузелия ( $3i$ ), а также комплексы „атом примеси - 1 собственный межузельный атом“ ( $ip$ ) и „атом примеси - 2 собственных межузельных атома“ ( $2ip$ ). Стабильность комплексов определяется соответствующими энергиями связи  $F_{\alpha\beta}^{\delta}$  ( $\alpha$  и  $\beta$  могут принимать значения  $i, 2i, p$ ). Подвижные дефекты ( $i$  и  $2i$  с коэффициентами диффузии  $D_i$  и  $D_{2i}$ ) могут также рекомбинировать с вакансиями и уходить на внутренние стоки. Система уравнений, описывающая эволюцию концентраций дефектов в массивном материале со временем, такова:

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{1}{\tau_{i,p}} C_{ip} + \frac{2}{\tau_{i,i}} C_{2i} + \frac{1}{\tau_{i,ip}} C_{2ip} + \frac{1}{\tau_{2i,i}} C_{3i} +$$

$$+ K_{2i}^V C_{2i} C_V - K_{iV} C_i C_V - K_i^{2i} C_i C_{2i} - K_i^{ip} C_i C_{ip} - K_i^i C_i^2 -$$

$$- K_i^p C_i (C_p - C_{ip} - C_{2ip}) - K_i^d S_d C_i; \quad (1)$$

$$\frac{dC_V}{dt} = -K_{iV} C_i C_V - K_{2i}^V C_{2i} C_V; \quad (2)$$

$$\frac{dC_{2i}}{dt} = \frac{1}{\tau_{2i,p}} C_{2ip} + \frac{1}{\tau_{2i,i}} C_{3i} - \frac{1}{\tau_{i,i}} C_{2i} + K_i^i C_i^2 -$$

$$- K_{2i}^V C_{2i} C_V - K_i^{2i} C_i C_{2i} - K_{2i}^p C_{2i} (C_p - C_{ip} - C_{2ip}) - K_{2i}^d S_d C_{2i}; \quad (3)$$

$$\frac{dC_{2ip}}{dt} = K_i^{ip} C_i C_{ip} + K_{2i}^p C_{2i} (C_p - C_{ip} - C_{2ip}) - \left( \frac{1}{\tau_{i,ip}} + \frac{1}{\tau_{2i,p}} \right) C_{2ip}; \quad (4)$$

$$\frac{dC_{3i}}{dt} = K_i^{2i} C_i C_{2i} - \frac{1}{\tau_{2i,i}} C_{3i}; \quad (5)$$

$$\frac{dC_{ip}}{dt} = \frac{1}{\tau_{i,ip}} C_{2ip} - \frac{1}{\tau_{i,p}} C_{ip} + K_i^p C_i (C_p - C_{ip} - C_{2ip}) - K_i^{ip} C_i C_{ip}. \quad (6)$$

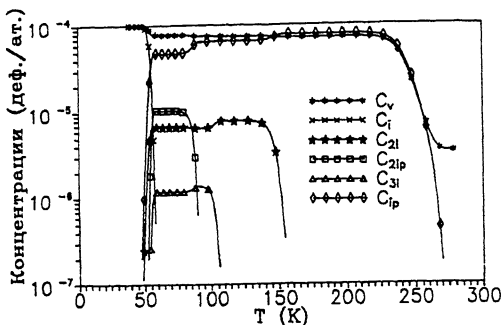


Рис. 1. Температурные зависимости концентраций точечных дефектов и их комплексов при изохронном нагреве для сплава  $Ni + 0.044 \text{ ат.} \% Sc$ , облученного до дозы  $10^{-4}$  сна.

Здесь  $\tau_{\alpha, \beta} = b^2 / (D_{\alpha} + D_{\beta}) \exp(E_{\alpha\beta}^b / kT)$  – среднее время жизни комплекса  $\alpha\beta$ ,  $b$  – вектор Бюргера,  $kT$  имеет обычный смысл;  $K_{iv}$  – константа взаимной рекомбинации;  $K_{\alpha}^{\beta}$  – константа взаимодействия между дефектами  $\alpha$  и  $\beta$ ;  $K_{\alpha}^d$  – константа взаимодействия между подвижным дефектом типа  $\alpha$  и внутренними стоками. Эти константы являются функциями температуры, которая, в свою очередь, зависит от времени:

$$T = f(t). \quad (7)$$

Система уравнений (1)–(7) с соответствующими эксперименту начальными условиями решалась на ПЭВМ с использованием комбинации численных методов [1]. Температурным зависимостям концентраций точечных дефектов и их комплексов (рис. 1) было поставлено в соответствие изменение электросопротивления и построены теоретические спектры изохронного отжига электросопротивления, которые моделируют основные экспериментально наблюдаемые пики на первой и второй стадиях отжига и характер изменения пиков в зависимости от концентрации примеси. На первой стадии был смоделирован только основной пик при 56 К, определяемый хаотичной диффузией и отжигом собственных межузельных атомов, так как коррелированная рекомбинация, с которой связаны остальные пики первой стадии, находится вне пределов применимости системы уравнений скоростной теории (1)–(6). В эксперименте вторая стадия в никеле характеризуется четырьмя подстадиями [2]. Введение примеси скандия приводит к изменению спектра отжига: подавляются пики 2<sub>2</sub> и 2<sub>3</sub>, увеличиваются пики 2<sub>1</sub> и 2<sub>4</sub>, причем пик 2<sub>4</sub> смещается приблизительно на 10 К в область более высоких температур. Наблюдаемое влияние скандия на субструктуру второй стадии дает основание полагать, что чистому никелю свойственны по крайней мере два пика – 2<sub>2</sub> и 2<sub>3</sub>. Подстадии с пиками 2<sub>1</sub> и 2<sub>4</sub> зависят от наличия атомов примеси. Количественное согласие

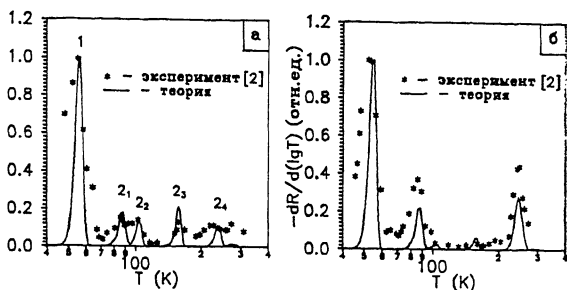


Рис. 2. Спектры изохронного отжига  $Ni$  чистотой 99.992 ат.% - (а) и сплава  $Ni + 0.044$  ат.%  $Sc$  - (б).

теоретических и экспериментальных результатов (рис. 2) позволяет интерпретировать пики отжига в никеле с примесью скандия следующим образом:

1. Пик  $2_1$  (88 K) - диссоциация комплекса „атом примеси - 2 собственных межузельных атома“ (энергия связи  $E_{i-i\rho}^b = 0.12$  эВ).
2. Пик  $2_2$  (104 K) - диссоциация комплекса „3 собственных межузельных атома“ (энергия связи  $E_{2i-i}^b = 0.18$  эВ).
3. Пик  $2_3$  (160 K) - диссоциация комплекса „2 собственных межузельных атома“ (энергия связи  $E_{2i}^b = 0.36$  эВ).
4. Пик  $2_4$  (240-250 K) - диссоциация комплекса „атом примеси - собственный межузельный атом“ (энергия связи  $E_{i\rho}^b = 0.61$  эВ).

Смещение пика  $2_4$  объясняется изменением соотношения количества радиационных и примесных дефектов при увеличении концентрации примеси, которое определяет количество освобождающихся межузельных атомов, рекомбинирующих с неподвижными при этих температурах вакансиями.

Решение данной системы уравнений позволило также описать влияние каждого типа комплексов дефектов и изменения микроструктуры материала (плотности внутренних стоков) на изменение спектров отжига электросопротивления, что может быть проверено при дополнительных экспериментальных исследованиях.

Возможность сохранения вакансий при температурах выше 300 K определяется соотношением плотности внутренних стоков, поглощающих межузельные атомы, и концентрации примесных атомов, которые могут задерживать межузельные атомы, отдавая их при повышении температуры, после чего межузельные атомы рекомбинируют с вакансиями. Сохранение некоторой части вакансий, наблюдавшееся в эксперименте при  $T > 430$  K, указывает на то, что в исследованных образцах была достаточно высокая плотность внутренних стоков, которая привела к дисбалансу количества введенных в материал при предварительном облучении вакансий и межузельных атомов.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] В о л о б у е в А.В. Моделирование на ЭВМ радиационных дефектов в металлах. Л.: 1990. С. 20-37.
- [2] В о л о б у е в А.В., Г а н н В.В., Н е к л ю д о в И.М. и др. Тр. междунар. конф. по радиационному материаловедению, Алушта, 22-25 мая 1990 г. Харьков, 1990. Т. 2. С. 58-69.

Харьковский физико-технический  
институт АН Украины

Поступило в Редакцию  
7 сентября 1992 г.