

# ВЛИЯНИЕ НЕОДНОРОДНЫХ ПОЛЕЙ НАПРЯЖЕНИЙ НА ПРОЦЕССЫ МИГРАЦИИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

В. В. Кирсанов, С. Б. Кислицин, Е. М. Кислицина

Изменение механических свойств облучаемых металлов и сплавов в значительной степени определяется миграцией точечных дефектов и их поглощением на стоках. Некоторые стоки, например когерентные выделения вторичных фаз, могут обладать собственными полями напряжений и существенно влиять на процессы миграции вакансий и межузельных атомов.

В данном сообщении приводятся результаты исследования методом машинного моделирования [1] влияния неоднородных полей напряжений различного вида на характеристики миграции точечных дефектов — вакансий и межузельных атомов. В качестве неоднородных полей напряжений выбраны поле от точечной силы, приложенное перпендикулярно к поверхности упругого полупространства [2], и поле, создаваемое постоянным аксиально-симметричным градиентом напряжений [3]. Эти поля взяты с целью выявления общих закономер-

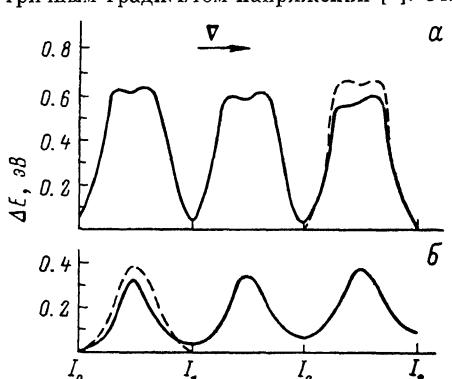


Рис. 1. Влияние неоднородного поля напряжений от точечной силы на энергетический рельеф миграции вакансии (а) и межузельного атома (б).

Штриховые линии — энергетические барьеры миграции дефектов в ненапряженном кристалле  $\alpha$ -Fe. Стрелкой показано направление увеличения уровня напряжений.  $I_0, I_1, I_2, I_3$  соответствуют положениям дефектов в узлах кристаллической решетки на пути миграции.

Высота барьеров миграции на участках  $I_0-I_1$ ,  $I_1-I_2$ ,  $I_2-I_3$  в направлении увеличения сжатия кристаллической решетки равна 0.59, 0.58 и 0.57 эВ соответственно. При миграции вакансии в область меньшего сжатия высота барьера миграции больше и примерно равна 0.60 эВ на всех указанных участках. Для межузельных атомов ситуация обратная. При миграции дефекта из положения  $I_0$  в положение  $I_3$  высота барьера равна соответственно 0.32, 0.31 и 0.30 эВ. При миграции в обратном направлении — из положения  $I_3$  в положение  $I_0$ , т. е. в область уменьшения сжатия, — высоты энергетических барьеров миграции равны 0.27, 0.28 и 0.29 эВ с общим уклоном рельефа миграции в сторону области понижения напряжений. Этот эффект складывается из: 1) понижения высоты энергетического барьера миграции по сравнению с его высотой в ненапряженном кристалле (наблюдается как для вакансий, так и для межузельных атомов); 2) зависимости энергии образования точечного дефекта от его положения в неоднородном поле напряжений. Причем наличие вакансии энергетически более выгодно именно в области с высоким уровнем деформаций, в то время как энергия образования межузельного атома уменьшается при его перемещении в область наименьшего сжатия. Именно наличие второго эффекта приводит к возникновению встречных потоков точечных дефектов.

Полученная закономерность справедлива и для поля напряжений аксиально-симметричного градиента [3], но соотношение между эффектом понижения высоты энергетического барьера миграции и изменением энергии образования точечного дефекта здесь несколько иное — энергия образования изменяется значительно сильнее (в 2–4 раза), а понижение энергетического барьера миграции практически такое же, поэтому и тенденция к возникновению встречных потоков дефектов выражена более ярко.

Вторым важным выводом данного исследования является то, что энергетические характеристики межузельных атомов более чувствительны к воздействию неоднородных полей напряжений, чем вакансии. Так, на рис. 1 приведены результаты расчетов  $E_F^*$  в интервале

нестей влияния неоднородных полей деформаций на характеристики миграции точечных дефектов и отличий, обусловленных особенностями, присущими конкретным полям деформаций. Отметим, что в первом случае компоненты вектора смещения обратно пропорциональны расстоянию от точки приложения нагрузки, а во втором квадратично зависят от координат.

Изменение энергетического рельефа миграции вакансии и межузельного атома в поле сосредоточенной нагрузки показано на рис. 1. Из этого рисунка видно, что для вакансии энергетически выгодна миграция в область сжатия. Высота барьеров миграции на участках  $I_0-I_1$ ,  $I_1-I_2$ ,  $I_2-I_3$  в направлении увеличения сжатия кристаллической решетки равна 0.59, 0.58 и 0.57 эВ соответственно. При миграции вакансии в область меньшего сжатия высота барьера миграции больше и примерно равна 0.60 эВ на всех указанных участках. Для межузельных атомов ситуация обратная. При миграции дефекта из положения  $I_0$  в положение  $I_3$  высота барьера равна соответственно 0.32, 0.31 и 0.30 эВ. При миграции в обратном направлении — из положения  $I_3$  в положение  $I_0$ , т. е. в область уменьшения сжатия, — высоты энергетических барьеров миграции равны 0.27, 0.28 и 0.29 эВ с общим уклоном рельефа миграции в сторону области понижения напряжений. Этот эффект складывается из: 1) понижения высоты энергетического барьера миграции по сравнению с его высотой в ненапряженном кристалле (наблюдается как для вакансий, так и для межузельных атомов); 2) зависимости энергии образования точечного дефекта от его положения в неоднородном поле напряжений. Причем наличие вакансии энергетически более выгодно именно в области с высоким уровнем деформаций, в то время как энергия образования межузельного атома уменьшается при его перемещении в область наименьшего сжатия. Именно наличие второго эффекта приводит к возникновению встречных потоков точечных дефектов.

Полученная закономерность справедлива и для поля напряжений аксиально-симметричного градиента [3], но соотношение между эффектом понижения высоты энергетического барьера миграции и изменением энергии образования точечного дефекта здесь несколько иное — энергия образования изменяется значительно сильнее (в 2–4 раза), а понижение энергетического барьера миграции практически такое же, поэтому и тенденция к возникновению встречных потоков дефектов выражена более ярко.

Вторым важным выводом данного исследования является то, что энергетические характеристики межузельных атомов более чувствительны к воздействию неоднородных полей напряжений, чем вакансии. Так, на рис. 1 приведены результаты расчетов  $E_F^*$  в интервале

локальных деформаций от 0.2 до 0.5 %, для  $E^{\ddagger}$  — для деформаций 0.6—1 %, а порядок изменения энергетических характеристик примерно одинаков.

Другим подтверждением этого вывода является полученный при высоких уровнях напряжений и их градиентов эффект выдавливания межузельных атомов в конфигурации краудион из области сжатия (уровень деформации  $\sim 2 \%$ ), показанный схематически на рис. 2.

Результаты этого машинного эксперимента хорошо согласуются с представлениями об усилении аннигиляции дефектов в теории ослабления радиационного распухания в распадающихся твердых растворах под облучением.

В работах [4—7] экспериментально и теоретически установлено, что в таких сплавах под облучением имеет место принудительная рекомбинация разноименных радиационных дефектов благодаря формированию неоднородных упругих полей, создаваемых когерентными выделениями в процессе распада. Для этого необходимо обеспечить в сплаве непрерывный однородный распад твердого раствора с длительным инкубационным периодом и доста-

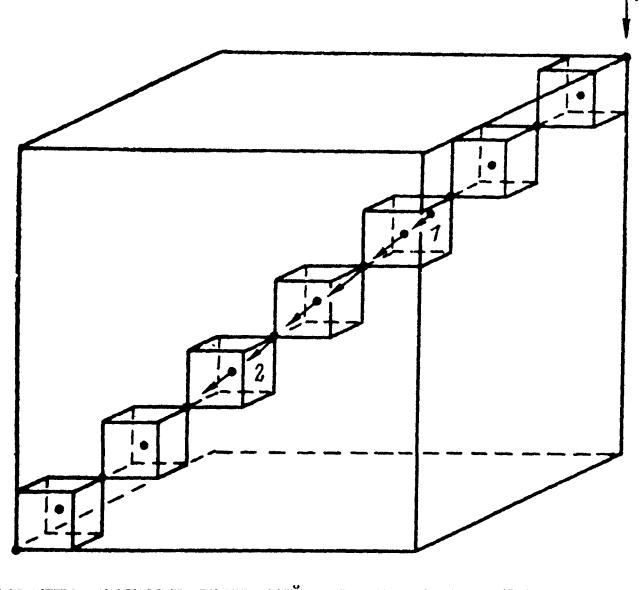


Рис. 2. Индуцированное полем напряжений движение межузельного атома в конфигурации краудион в поле действия точечной силы.

Стрелкой показано направление действия сосредоточенной силы  $F$ . 1 — начальное положение межузельного атома, 2 — конечное.

точно большой объемной дилатацией. Возникающие при этом поля внутренних напряжений перераспределяют потоки разноименных точечных дефектов, ослабляют или подавляют миграцию межузельных атомов к стокам (дислокациям, границам зерен, поверхности) и обеспечивают возможность их рекомбинации с вакансиями. Принудительная рекомбинация точечных дефектов обусловлена экранировкой стоков от поглощения на них межузельных атомов. Вследствие этого концентрация как одиночных, так и связанных в кластеры межузельных атомов в матрице повышается и вероятность встречи и рекомбинации с вакансиями возрастает.

Генерируемые облучением разноименные точечные дефекты по-разному ведут себя в сжатых выделениях и растянутой матрице. Полученные с помощью моделирования на ЭВМ результаты изменения энергетических характеристик миграции точечных дефектов в неоднородных полях напряжений позволяет заключить, что наличие в распадающемся сплаве упругих полей выделений приведет к появлению встречных потоков межузельных атомов и вакансий. Сжатые выделения способствуют оттоку межузельных атомов от выделений в матрицу, как это следует из рис. 1, б, и одновременно усиливают приток вакансий (рис. 1, а). Появление этих противоположных по направлению потоков будет способствовать более эффективной рекомбинации разноименных точечных дефектов, а перекрытие структурных стоков упругими полями выделений будет препятствовать уходу на них межузельных атомов. В итоге это приведет к снижению радиационного распухания в распадающихся сплавах.

## Литература

- [1] Агранович В. М., Кирсанов В. В. УФН, 1976, т. 118, № 1, с. 3—54.
- [2] Ландай Д. Л., Либшиц Е. М. Теория упругости. М.: Наука, 1965. 204 с.
- [3] Olander D. R. J. Nuclear Materials, 1980, v. 92, N 1—2, p. 163—183.
- [4] Паршин А. М. ВАНТ. Сер. физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение, 1978, в. 3 (8), с. 34—48.
- [5] Зеленский В. Ф., Неклюдов И. М., Матвиенко Б. В. и др. В кн.: Реакторное материаловедение. М., 1978, т. 2, с. 21—43.
- [6] Горынин И. В., Паршин А. М. Атомная энергия, 1981, т. 50, № 5, с. 319—324.
- [7] Орлов А. Н., Паршин А. М., Трушин Ю. В. ЖТФ, 1983, т. 53, № 12, с. 2362—2372.

Калининский  
политехнический институт

Поступило в Редакцию  
19 мая 1987 г.

Журнал технической физики, т. 58, в. 7, 1988

### ВЗАИМОВЛИЯНИЕ ЯЧЕЕК ИНТЕГРАЛЬНО-ОПТИЧЕСКОГО БРЭГГОВСКОГО ПРОЦЕССОРА

С. И. Божевольный, Е. М. Золотов, П. С. Радько

Интегрально-оптические устройства на основе индивидуально адресуемых электро-оптических брэгговских модуляторов (ячеек) являются перспективными для реализации целого ряда вычислительных операций: умножения векторов и матриц, цифроаналогового преобразования, цифрового корреляционного анализа и т. п. [1, 2]. Базовым элементом таких

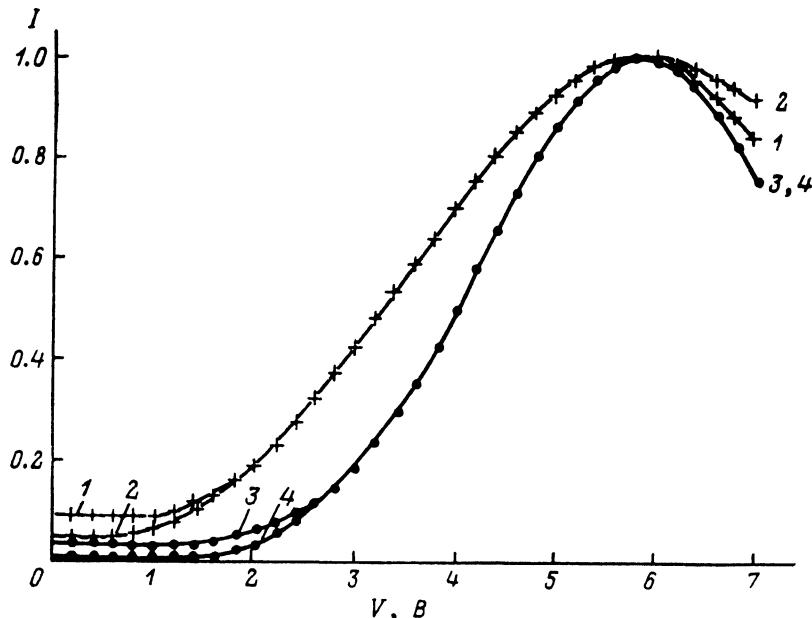


Рис. 1. Модуляционные характеристики первого ИОПМС (1), второго ИОПМС (2), всего устройства (3).

Кривая 4 представляет собой произведение характеристик 1 и 2.

устройств является интегрально-оптический пространственный модулятор света (ИОПМС), представляющий набор параллельно расположенных брэгговских ячеек, напряжение которых контролируется отдельным образом. Вследствие граничных эффектов интенсивность дифрагированного в ячейке излучения, вообще говоря, зависит от напряжения на электродах соседних ячеек, что ухудшает характеристики устройств на основе ИОПМС. Увеличение ширины ячеек уменьшает их взаимное влияние, однако при этом уменьшается число ячеек, их быстродействие и т. п.