

УДК 539.3

## ВЛИЯНИЕ ПРЕЦИПИТАТОВ НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПОГЛОЩЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИЕЙ

Г. Г. Самсонидзе, Ю. В. Трушин

Рассмотрено влияние упругих полей сферически-симметричных предвыделений на концентрационные профили и стационарные диффузионные потоки собственных точечных дефектов в упругом поле краевой дислокации. Получены относительно простые аналитические выражения для эффективностей поглощения вакансий и межузельных атомов краевой дислокацией. Показано, что намечена тенденция к экранировке полями предвыделений потоков межузельных атомов к дислокации.

При облучении кристаллов быстрыми частицами образуются в большом количестве собственные точечные дефекты  $j$ : вакансии ( $j=v$ ) и межузельные атомы ( $j=i$ ), способные мигрировать по объему материала. В ходе эволюции дефектной структуры кристалла вакансии и межузельные атомы могут удаляться из него различными способами: взаимно рекомбинируя друг с другом, уходя на стоки или образуя новые структурные неоднородности (поры, дислокационные петли).

Поскольку вакансии и межузельные атомы создают различные упругие поля, то взаимодействие их со стоками также будет различным. В результате возникает предпочтение в поглощении точечного дефекта одного сорта по сравнению с другим на одном и том же стоке. Даже незначительное предпочтение (преференс порядка 1 %) для межузельных атомов по сравнению с вакансиями при поглощении их краевыми дислокациями может привести к значительной величине распухания (до нескольких десятков процентов) [1-3]. Это происходит потому, что краевые дислокации являются не насыщаемыми стоками для собственных точечных дефектов и всегда присутствуют в материале.

Исследования последних лет показали, что твердые растворы с развитым непрерывным однородным распадом практически не распухают [4-7]. Это связано с тем, что формирующиеся при таком распаде предвыделения создают вокруг себя упруго-искаженные области, в которых происходит перераспределение собственных точечных дефектов. Предвыделения влияют на их диффузионные потоки к краевым дислокациям, усиливая рекомбинацию разноименных точечных дефектов. Запертые в упруго-растянутых областях межузельные атомы образуют скопления (например, дислокационные межузельные петли), которые представляют собой менее опасные стоки, чем краевые дислокации, поскольку они легко достижимы для вакансий и являются дополнительными центрами рекомбинации разноименных точечных дефектов [8, 9].

Учет влияния упругих полей сферически-симметричных предвыделений на диффузионные потоки вакансий и межузельных атомов к краевой дислокации является сложной проблемой. К настоящему времени рассмотрены два связанных между собой комплекса задач: 1) в чистых кристаллах определены стационарные диффузионные потоки вакансий и межузельных атомов в упругом поле краевой дислокации [10-14], 2) в твердых растворах найдено влияние упругого поля преципитатов на концентрационные профили собственных точечных дефектов и их потоки к формирующимся предвыделениям [8, 9, 15-18].

Суперпозиция упругих полей краевой дислокации и формирующихся под облучением предвыделений до сих пор не рассматривалась.

Целью данной работы является расчет эффективностей поглощения вакансий и межузельных атомов краевой дислокацией в распадающемся под облучением твердом растворе при формировании сферических предвыделений второй фазы. Решение сформулированной задачи основано на поиске концентрационных профилей собственных точечных дефектов и их диффузионных потоков в упругом поле дислокации и предвыделений второй фазы.

## 1. Концентрационные профили собственных точечных дефектов в упругом поле краевой дислокации при наличии предвыделений второй фазы

При стационарном неоднородном распределении вакансий и межузельных атомов в объеме облучаемого материала кинетические уравнения баланса для собственных точечных дефектов в поле краевой дислокации  $(r, \theta_j)$  представимы в виде [10]

$$\frac{\partial C_j(r, \theta_j)}{\partial t} = g - \operatorname{div} \mathbf{J}_D^j(r, \theta_j) - D_j \kappa_j^2 C_j(r, \theta_j) - \mu D_i C_j(r, \theta_j) C_n(r, \theta_j) = 0, \quad (1.1)$$

где  $C_j(r, \theta_j)$ ,  $C_n(r, \theta_j)$  — концентрации собственных точечных дефектов типа  $j$  и  $n$  ( $j=v, i, n=v, i$ , но  $j \neq n$ );  $g$  — их скорость генерации в материале,

$$D_j = a_0^2 \nu_0 \exp\{-\varepsilon_j^m/kT\}$$

— коэффициент диффузии точечного дефекта типа  $j$ ;  $\varepsilon_j^m$  — его энергия миграции;  $k$  — константа Больцмана;  $T$  — абсолютная температура;  $\nu_0$  — частота колебаний точечного дефекта;  $a_0$  — межатомное расстояние в объеме материала;  $\mu = 4\pi r_R$  — коэффициент рекомбинации разноименных точечных дефектов;  $r_R$  —

радиус зоны рекомбинации;  $\kappa_j^2 = \sum_{q=1}^{n_j} S_q^j$  — сумма сил стоков  $S_q^j$  типа  $q$  для дефекта типа  $j$ ;  $n_j$  — количество сортов стоков для дефектов  $j$ ,

$$\mathbf{J}_D^j(r, \theta_j) = D_j \left\{ \nabla C_j(r, \theta_j) + \frac{C_j(r, \theta_j)}{kT} \nabla E_D^j(r, \theta_j) \right\} \quad (1.2)$$

— плотность потока точечных дефектов типа  $j$  к дислокации ( $q=D$ ),

$$E_D^j(r, \theta_j) = \frac{a_0 G |\Delta \Omega_j|}{2\pi} \left( \frac{1-2\nu}{1-\nu} \right) \frac{\sin \theta_j}{r} \equiv A_D^j \frac{\sin \theta_j}{r} \quad (1.3)$$

— энергия дилатационного взаимодействия точечного дефекта типа  $j$  с краевой дислокацией;  $G$  — модуль сдвига;  $\nu$  — коэффициент Пуассона;  $\Delta \Omega_j$  — локальное изменение объема, связанное с точечным дефектом типа  $j$ ,

$$\theta_j = \theta_n \pm \pi, \quad (1.4)$$

поскольку  $\Delta \Omega_v$  и  $\Delta \Omega_i$  имеют различный знак. Упругое поле сферически-симметричных предвыделений явно в уравнение баланса (1.1) не входит, поскольку энергия взаимодействия вакансий и межузельных атомов с преципитатами в изотропном приближении теории упругости постоянна в объеме твердого раствора и терпит разрыв на границе раздела фаз [19, 20]. Влияние упругого поля предвыделений на концентрационные профили собственных точечных дефектов определяется через граничные условия.

Для нахождения распределения вакансий и межузельных атомов вблизи краевой дислокации воспользуемся методом эффективного пространства (см., например, [8, 21]). Разделим объем материала, приходящийся на одну дислокацию, на три коаксиально цилиндрические области  $F=I, II, III$ .

Область  $F=I$ . Здесь 1) отсутствуют все стоки кроме самой дислокации ( $\kappa_j^I=0$ ); 2) радиус  $R$  области  $I$  полагаем равным половине расстояния между

преципитатами, окружающими данную краевую дислокацию (т. е.  $4\pi R^3/3 \approx C_p^{-1}$ , где  $C_p$  — абсолютная концентрация преципитатов в объеме твердого раствора); 3) считается, что

$$\frac{|E_D^j(R, \theta_j)|_{\max}}{kT} = \frac{A_D^j}{kTR} \equiv \frac{R_0^j}{R} < 1. \quad (1.5)$$

Область  $F=II$ . Здесь 4) существуют другие стоки для собственных точечных дефектов (например, преципитаты, петли, поры), 5) размеры области II равны

$$R \leq r \leq r_c, \quad (1.6)$$

где  $r_c$  определяется из условия

$$\frac{|E_D^j(r_c, \theta_j)|_{\max}}{kT} = \frac{R_0^j}{r_c} \ll 1. \quad (1.7)$$

Область  $F=III$ . Здесь 6) можно пренебречь упругим полем краевой дислокации в уравнении баланса (1. 4), 7) размеры области III равны

$$r_c \leq r \leq L, \quad (1.8)$$

где  $2L$  — среднее расстояние между дислокациями ( $2L \approx \rho_D^{-1/2}$ ,  $\rho_D$  — плотность дислокаций). Кроме того, 8) во всех трех областях пренебрегается рекомбинацией вакансий и межузельных атомов, 9) суммы сил стоков в II и III удовлетворяют соотношениям

$$k_j^{II}R \gg 1, \quad k_j^{III}R \gg 1. \quad (1.9)$$

Граничные условия для концентраций собственных точечных дефектов в областях I и III (концентрации  $C_j^I(r, \theta_j)$  и  $C_j^{III}(r, \theta_j)$  соответственно) определим, как и в [10, 13]. Будем считать, что вблизи ядра дислокации (радиуса  $r=r_0$ ) поддерживается термодинамически равновесная концентрация точечных дефектов, а на половине расстояния между дислокациями ( $r=L$ ) диффузионные потоки точечных дефектов в силу симметрии равны нулю и, следовательно,  $C_j^{III}(r, \theta_j)$  достигает своего экстремального значения

$$C_j^I(r_0, \theta_j) = \bar{C}_j^e \exp[-E_D^j(r_0, \theta_j)/kT], \quad (1.10)$$

$$C_j^{III}(L, \theta_j) = C_j^+ = \text{const}, \quad (1.11)$$

$$\bar{C}_j^e = C_j^e \exp\{-E_j^e/kT\}. \quad (1.12)$$

Здесь  $C_j^e$  — термодинамически равновесная концентрация собственных точечных дефектов типа  $j$  вдали от дислокации в беспримесном кристалле,

$$E_p^j = 2E\Delta\Omega_j v_p \frac{\epsilon_p - \epsilon}{1 - \nu} \quad (1.13)$$

— их энергия взаимодействия с сферически-симметричным предвыделением второй фазы (см., например, [16]);  $E$  — модуль Юнга;  $v_p = \bar{V}C_p$  — объемная доля преципитатов;  $\bar{V}$  — их средний объем;  $\epsilon_p, \epsilon$  — относительные деформации в преципитате и твердом растворе соответственно. Стационарная концентрация дефектов  $C_j^+$  сорта  $j$ , как и в [11], равна

$$C_j^+ = \frac{D_n A_n^2}{2\mu D_i} \left\{ \sqrt{1 + \frac{4g^{III}\mu}{D_p A_n^2 k^2}} - 1 \right\} + \bar{C}_j^e, \quad (1.14)$$

где  $g^{III}$  — скорость генерации вакансий и межузельных атомов в области III.

Для полного определения концентрационных профилей собственных точечных дефектов вблизи краевой дислокации необходимо ввести условия их сливки на коаксиальных цилиндрических поверхностях радиуса  $R$  и  $r_c$

$$C_j^I(R, \theta_j) = C_j^{II}(R, \theta_j), \quad (1.15)$$

$$\left. \frac{\partial C_j^I(r, \theta_j)}{\partial r} \right|_{r=R} = \left. \frac{\partial C_j^{II}(r, \theta_j)}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad (1.16)$$

$$C_j^{II}(r_c, \theta_j) = C_j^{III}(r_c, \theta_j), \quad (1.17)$$

$$\left. \frac{\partial C_j^{II}(r, \theta_j)}{\partial r} \right|_{r=r_c} = \left. \frac{\partial C_j^{III}(r, \theta_j)}{\partial r} \right|_{r=r_c}. \quad (1.18)$$

Переходя к безразмерным переменным

$$\frac{R_0^j}{2r} = x, \quad \frac{E_D^j(r, \theta_j)}{kT} = U_D^j(r, \theta_j) = \frac{R_0^j}{r} \sin \theta_j \quad (1.19)$$

и вводя подстановку, как и в [10]

$$C_j(r, \theta_j) = \tilde{C}_j^e e^{-U_D^j(r, \theta_j)} + \Phi_j(r, \theta_j) e^{-U_D^j(r, \theta_j)/2}, \quad (1.20)$$

после несложных преобразований получим из (1.1) следующее уравнение:

$$\Delta_x \Phi_j(x, \theta_j) - \left\{ 1 + \left( \frac{\kappa_j R_0^j}{2x^2} \right)^2 \right\} \Phi_j(x, \theta_j) + \left( \frac{\kappa_j R_0^j}{2x^2} \right)^2 \left\{ \frac{g}{D_j \kappa_j^2} e^{x \sin \theta_j} - \tilde{C}_j^e e^{-x \sin \theta_j} \right\} = 0, \quad (1.21)$$

где на основании предположений «8» мы пренебрегли в уравнении баланса (1.1) рекомбинационным членом, а оператор Лапласа имеет вид

$$\Delta_x \Phi_j(x, \theta_j) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ x \frac{\partial \Phi_j(x, \theta_j)}{\partial x} \right\} + \frac{1}{x^2} \frac{\partial^2 \Phi_j(x, \theta_j)}{\partial \theta_j^2}$$

и в соответствии с (1.19) удовлетворяет соотношению

$$r^2 \Delta \Phi_j(r, \theta_j) = x^2 \Delta_x \Phi_j(x, \theta_j). \quad (1.22)$$

На основании введенных нами выше предположений «1»—«9» найдем конкретный вид общего дифференциального уравнения (1.21) в каждой из трех областей (для функций  $\Phi_j^I(z^I, \theta_j)$ , где  $z^I = x$ ,  $z^{II} = \kappa_j^{II} r$ ,  $z^{III} = \kappa_j^{III} r$ ).

В области I ( $r_0 \leq r \leq R$ ) в соответствии с предположением «1» уравнение (1.21) значительно упрощается и принимает вид

$$\Delta_{z^I} \Phi_j^I(z^I, \theta_j) - \Phi_j^I(z^I, \theta_j) + \frac{g^I R_0^{j2}}{4D_j} \frac{e^{x \sin \theta_j}}{x^4} = 0. \quad (1.23)$$

Здесь  $g^I$  — скорость генерации вакансий и межузельных атомов в I.

В области II ( $R \leq r \leq r_c$ ) на основании предположений «3»—«5» и «9» справедливо неравенство

$$(\kappa_j^{II} R_0^j / 2x^2)^2 \gg 1, \quad (1.24)$$

и, следовательно, в соответствии с предположением «5» и соотношением (1.22) дифференциальное уравнение (1.21) преобразуется к виду

$$\Delta_{z^{II}} \Phi_j^{II}(z^{II}, \theta_j) - \Phi_j^{II}(z^{II}, \theta_j) + \left\{ \frac{g^{II}}{D_j \kappa_j^{II2}} e^{x \sin \theta_j} - \tilde{C}_j^e e^{-x \sin \theta_j} \right\} = 0, \quad (1.25)$$

где  $g^{II}$  — скорость генерации собственных точечных дефектов в области II.

В области III ( $r_c \leq r \leq L$ ) в соответствии с предположениями «3», «5», «7» и «9»

$$(\kappa_j^{III} R_0^j / 2x^2)^2 \gg 1. \quad (1.26)$$

Пренебрегая в (1.24) упругим полем краевой дислокации (см. предположение «6»), а также воспользовавшись неравенством (1.26) и соотношением (1.22), имеем

$$\Delta_{z^{III}} \Phi_j^{III}(z^{III}, \theta_j) - \Phi_j^{III}(z^{III}, \theta_j) + \left\{ \frac{g^{III}}{D_j \kappa_j^{III2}} - \tilde{C}_j^e \right\} = 0. \quad (1.27)$$

Дифференциальные уравнения (1.23), (1.25), (1.27) структурно похожи друг на друга. Запишем их в общем виде

$$\Delta_{z^F} \Phi_j^F(z^F, \theta_j) - \Phi_j^F(z^F, \theta_j) + \Psi_j^F(x, \theta_j) = 0 \quad (F = I, II, III), \quad (1.28)$$

где

$$\begin{aligned} \Psi_j^I(x, \theta_j) &= \frac{g^I R_0^2}{4D_j} e^{x \sin \theta_j} \frac{1}{x^4}, \\ \Psi_j^{II}(x, \theta_j) &= \frac{g^{II}}{D_j k_j^{II2}} e^{x \sin \theta_j} - \tilde{C}_j^e e^{-x \sin \theta_j}, \\ \Psi_j^{III}(x, \theta_j) &= \Psi_j^{III} = \frac{g^{III}}{D_j k_j^{III2}} - \tilde{C}_j^e = \text{const.} \end{aligned} \quad (1.29)$$

Граничные условия для  $\Phi_j^F(z^F, \theta_j)$  и условия их сшивки определяются из (1.10), (1.11), (1.15)–(1.18) и (1.20)

$$\Phi_j^I(x_D, \theta_j) = 0, \quad (1.30)$$

$$\Phi_j^I(x_R, \theta_j) = \Phi_j^{II}(k_j^{II} R, \theta_j), \quad (1.31)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi_j^I(x, \theta_j)}{\partial r} \right|_{r=R} = \left. \frac{\partial \Phi_j^{II}(k_j^{II} r, \theta_j)}{\partial r} \right|_{r=R}, \quad (1.32)$$

$$\Phi_j^{II}(k_j^{II} r_c, \theta_j) = \Phi_j^{III}(k_j^{III} r_c, \theta_j), \quad (1.33)$$

$$\left. \frac{\partial \Phi_j^{II}(k_j^{II} r, \theta_j)}{\partial r} \right|_{r=r_c} = \left. \frac{\partial \Phi_j^{III}(k_j^{III} r, \theta_j)}{\partial r} \right|_{r=r_c}, \quad (1.34)$$

$$\Phi_j^{III}(k_j^{III} L, \theta_j) = C_j^{III}(L, \theta_j) - \tilde{C}_j^e = C_j^{\pm}(g^{III}). \quad (1.35)$$

Здесь в соответствии с (1.19)

$$x_D = R_0^2 / 2r_0, \quad x_R = R_0^2 / 2R. \quad (1.36)$$

Представляя  $\exp(\pm x \sin \theta_j)$  в виде ряда по модифицированным функциям Бесселя  $I_n(x)$  (см., например, [22])

$$\begin{aligned} \exp(\pm x \sin \theta_j) &= I_0(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \{I_{2n}(x) \cos 2n\theta_j \mp \\ &\mp I_{2n-1}(x) \sin(2n-1)\theta_j\}, \end{aligned} \quad (1.37)$$

найдем решение уравнения (1.28) также в виде ряда, аналогичного (1.37)

$$\begin{aligned} \Phi_j^F(z^F, \theta_j) &= \varphi_0^F(z^F) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \{\varphi_{2n}^F(z^F) \cos 2n\theta_j - \\ &- \varphi_{2n-1}^F(z^F) \sin(2n-1)\theta_j\}. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Здесь для функций  $\varphi_n^F(z^F)$  найдено выражение

$$\varphi_n^F(z^F) = A_n^F I_n(z^F) + B_n^F K_n(z^F) - \alpha_n^F P_n^F(z^F), \quad (1.39)$$

где  $A_n^F, B_n^F$  — константы интегрирования;  $I_n(z^F), K_n(z^F)$  — цилиндрические функции чисто мнимого аргумента [22], причем

$$\begin{aligned} P_n^F(z^F) &= K_n(z^F) \int_{z^F}^{z_0^F} Q_{n1}^F(z') dz' - I_n(z^F) \int_{z^F}^{z_0^F} Q_{n2}^F(z') dz', \\ z_0^I &= x_D, \quad z_0^{II} = k_j^{II} R, \quad z_0^{III} = k_j^{III} r_c, \end{aligned} \quad (1.40)$$

$$\begin{aligned} Q_{n1}^I(z^I) &= I_n^2(z^I) / z^{I^2}, \quad Q_{n2}^I(z^I) = I_n(z^I) K_n(z^I) / z^{I^2}, \\ Q_{n1}^{II}(z^{II}) &= I_n(z^I) I_n(z^{II}) z^{II}, \quad Q_{n2}^{II}(z^{II}) = I_n(z^I) K_n(z^{II}) z^{II}, \\ Q_{n1}^{III}(z^{III}) &= I_n(0) I_n(z^{III}) z^{III}, \quad Q_{n2}^{III}(z^{III}) = I_n(0) K_n(z^{III}) z^{III}, \end{aligned} \quad (1.41)$$

$$\alpha_n^F = \begin{cases} g^F R_0^j / 4D_j & \text{при } F = \text{I}, \\ \frac{g^F}{D_j k_j^{k_j^2}} - (-1)^n \bar{C}_j^e & \text{при } F = \text{II}, \text{ III}. \end{cases} \quad (1.42)$$

Воспользовавшись свойством ортогональности тригонометрических функций, найдем из (1.39) и (1.30)–(1.35) граничные условия и условия сшивки для функций  $\varphi_n^F(z^F)$

$$\varphi_n^{\text{I}}(x_D) = 0, \quad (1.43)$$

$$\varphi_n^{\text{I}}(x_R) = \varphi_n^{\text{II}}(k_j^{\text{II}} R), \quad (1.44)$$

$$\left. \frac{d\varphi_n^{\text{I}}(x)}{dr} \right|_{r=R} = \left. \frac{d\varphi_n^{\text{II}}(k_j^{\text{II}} r)}{dr} \right|_{r=R}, \quad (1.45)$$

$$\varphi_n^{\text{II}}(k_j^{\text{II}} r_c) = \varphi_n^{\text{III}}(k_j^{\text{III}} r_c), \quad (1.46)$$

$$\left. \frac{d\varphi_n^{\text{II}}(k_j^{\text{II}} r)}{dr} \right|_{r=r_c} = \left. \frac{d\varphi_n^{\text{III}}(k_j^{\text{III}} r)}{dr} \right|_{r=r_c}, \quad (1.47)$$

$$\varphi_n^{\text{III}}(k_j^{\text{III}} L) = \alpha_n C_j^+(g^{\text{III}}), \quad (1.48)$$

где

$$\alpha_n = \begin{cases} 1 & \text{при } n = 0, \\ 0 & \text{при } n > 0. \end{cases} \quad (1.49)$$

Последовательно подставляя (1.39) в (1.43)–(1.48), определим константы интегрирования  $A_n^F$ ,  $B_n^F$ . Поскольку в дальнейшем нас будет интересовать распределение собственных точечных дефектов вблизи краевой дислокации (т. е. в области I), приведем окончательное выражение только для  $C_j^{\text{I}}(r, \theta_j)$

$$C_j^{\text{I}}(r, \theta_j) = \bar{C}_j^e e^{-U_D^j(x, \theta_j)} + e^{-U_D^j(x, \theta_j)/2} \times \\ \times \left\{ \varphi_0^{\text{I}}(x) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n [\varphi_{2n}^{\text{I}}(x) \cos 2n\theta_j - \varphi_{2n-1}^{\text{I}}(x) \sin (2n-1)\theta_j] \right\}, \quad (1.50)$$

где вместо выражения (1.39) имеем

$$\varphi_n^{\text{I}}(x) = (\eta_{n1} + \eta_{n2}) V_n(x) - \alpha_n^{\text{I}} P_n^{\text{I}}(x). \quad (1.51)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$V_n(x) = \frac{I_n(x) K_n(x_D) - I_n(x_D) K_n(x)}{I_n(x_R) K_n(x_D) - I_n(x_D) K_n(x_R)}, \quad (1.52)$$

$$\eta_{n1} = \frac{\alpha_n C_j^+(g^{\text{III}}) + \alpha_n^{\text{III}} P_n^{\text{III}}(k_j^{\text{III}} L) + T_{n3}}{\left\{ 1 - \frac{T_{n1}}{T_{n2}} \frac{dV_n(x)}{dx} \Big|_{x_R} \right\} T_{n2}}, \quad (1.53)$$

$$\eta_{n2} = \alpha_n^{\text{I}} P_n^{\text{I}}(x_R) \left\{ \frac{1 - \frac{T_{n1}}{T_{n2}} \frac{dP_n^{\text{I}}(x)}{dx} \Big|_{x_R}}{1 - \frac{T_{n1}}{T_{n2}} \frac{dV_n(x)}{dx} \Big|_{x_R}} \right\}, \quad (1.54)$$

а величины  $T_{n1}$ ,  $T_{n2}$ ,  $T_{n3}$  имеют вид

$$T_{n1} = z_1^{\text{I}} z_0^{\text{III}} \left\{ U_{n2}(z_0^{\text{II}}) \frac{dU_{n3}(z^{\text{III}})}{dz^{\text{III}}} \Big|_{z_0^{\text{III}}} - \frac{k_j^{\text{II}}}{k_j^{\text{III}}} U_{n1}(z_0^{\text{II}}) U_{n3}(z_0^{\text{III}}) \right\}, \quad (1.55)$$

$$T_{n2} = z_0^{\text{II}} z_0^{\text{III}} \left\{ \frac{k_j^{\text{II}}}{k_j^{\text{III}}} U_{n3}(z_0^{\text{III}}) \frac{dU_{n1}(z^{\text{II}})}{dz^{\text{II}}} \Big|_{z_0^{\text{II}}} - \frac{dU_{n2}(z^{\text{II}})}{dz^{\text{II}}} \Big|_{z_0^{\text{II}}} \frac{dU_{n3}(z^{\text{III}})}{dz^{\text{III}}} \Big|_{z_0^{\text{III}}} \right\}, \quad (1.56)$$

$$T_{n3} = \alpha_n^{\text{II}} z_0^{\text{III}} \left\{ \frac{k_j^{\text{II}}}{k_j^{\text{III}}} U_{n3}(z_0^{\text{III}}) \frac{dP_n^{\text{II}}(z^{\text{II}})}{dz^{\text{II}}} \Big|_{z_1^{\text{II}}} - P_n^{\text{II}}(z_1^{\text{II}}) \frac{dU_{n3}(z^{\text{III}})}{dz^{\text{III}}} \Big|_{z_0^{\text{III}}} \right\}, \quad (1.57)$$

где

$$U_{n1}(z^{II}) = I_n(z^{II}) \frac{dK_n(z^{II})}{dz^{II}} \Big|_{z_1^{II}} - K_n(z^{II}) \frac{dI_n(z^{II})}{dz^{II}} \Big|_{z_1^{II}}, \quad (1.58)$$

$$U_{n2}(z^{II}) = I_n(z^{II}) K_n(z_1^{II}) - K_n(z^{II}) I_n(z_1^{II}), \quad (1.59)$$

$$U_{n3}(z^{III}) = K_n(z^{III}) I_n(z_1^{III}) - I_n(z^{III}) K_n(z_1^{III}), \quad (1.60)$$

$$z_1^I = x_R, \quad z_1^{II} = \kappa_j^I r_c, \quad z_1^{III} = \kappa_j^{III} L.$$

Выражение (1.50) в соответствии с (1.20) является точным решением дифференциального уравнения (1.23). Однако напомним, что (1.23), (1.25) и (1.27) получены из (1.21) в предположениях «1»—«9», поэтому и формула (1.50) справедлива лишь при выполнении тех же условий. Воспользовавшись соотношениями (1.5)—(1.9) и асимптотическим разложением модифицированных функций Бесселя [23], из (1.53)—(1.60) получим после простых, но громоздких преобразований следующее приближенное выражение для концентрационных профилей собственных точечных дефектов  $j$  вблизи краевой дислокации в области I

$$C_j^I(r, \theta_j) \simeq \tilde{C}_j^e e^{-\nu_D^j(x, \theta_j)} + \Phi_j^I(x) e^{-\nu_D^j(x, \theta_j)/2}, \quad (1.61)$$

где

$$\Phi_j^I(x) = \varphi_0^I(x) \equiv \{\eta_{01} + \eta_{02}\} V_0(x) - \alpha_0^I P_0^I(x). \quad (1.62)$$

Здесь

$$\eta_{01} = \frac{C_j^+(g^{III}) + \alpha_0^{III} \{\sqrt{r_c/L} \operatorname{ch}[\kappa_j^{III}(L-r_c)] - 1\}}{\sqrt{R/L} \omega \gamma_2} + \alpha_0^{II} \frac{\gamma_3}{\omega \gamma_2}, \quad (1.63)$$

$$\eta_{02} = \frac{\alpha_0^I}{\omega} \left\{ P_0^I(x_R) - \frac{x_R \gamma_1}{\kappa_j^{II} R \gamma_2} \frac{dP_0^I(x)}{dx} \Big|_{x_R} \right\}, \quad (1.64)$$

$$\begin{aligned} \gamma_1 = & \left\{ \frac{\kappa_j^{II}}{\kappa_j^{III}} \operatorname{ch}[\kappa_j^{II}(r_c - R)] \operatorname{sh}[\kappa_j^{III}(L - r_c)] + \right. \\ & \left. + \operatorname{sh}[\kappa_j^{II}(r_c - R)] \operatorname{ch}[\kappa_j^{III}(L - r_c)] \right\}, \quad (1.65) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_2 = & \left\{ \frac{\kappa_j^{II}}{\kappa_j^{III}} \operatorname{sh}[\kappa_j^{II}(r_c - R)] \operatorname{sh}[\kappa_j^{III}(L - r_c)] + \right. \\ & \left. + \operatorname{ch}[\kappa_j^{II}(r_c - R)] \operatorname{ch}[\kappa_j^{III}(L - r_c)] \right\}, \quad (1.66) \end{aligned}$$

$$\gamma_3 = \gamma_2 - \sqrt{r_c/R} \operatorname{ch}[\kappa_j^{III}(L - r_c)], \quad (1.67)$$

$$\omega = 1 + \frac{\gamma_3}{\kappa_j^{III} R \gamma_2 \ln(2R/R_0^j)}. \quad (1.68)$$

Из (1.12), (1.62)—(1.68) видно, что в предельном случае беспримесного кристалла ( $g^I = 0$ ,  $E_p^j = 0$ ,  $L = r_c = R$ ) выражение (1.61) переходит в известное соотношение для концентрационных профилей собственных точечных дефектов в упругом поле краевой дислокации, полученное в работе [10].

## 2. Эффективность поглощения собственных точечных дефектов краевой дислокацией

Зная функцию  $\Phi_j^I(R_0^j/2r)$ , из (1.2) можно найти плотности потоков вакансий и межузельных атомов к краевой дислокации

$$\mathbf{J}_D^j(r, \theta_j) = -D_j e^{-\nu_D^j(r, \theta_j)/2} \left\{ \nabla \Phi_j^I \left( \frac{R_0^j}{2r} \right) + \frac{1}{2} \Phi_j^I \left( \frac{R_0^j}{2r} \right) \nabla U_D^j(r, \theta_j) \right\}. \quad (2.1)$$

Эффективность поглощения точечных дефектов единицей длины дислокации связана с  $\mathbf{J}_D^j(r, \theta_j)$  простым соотношением (см., например, [10])

$$K_D^j(r) = r \int_a^{2\pi+a} |J_D^j(r, \theta_j)| d\theta_j, \quad (2.2)$$

где в соответствии с (1.3), (1.4)  $a=0$  при  $\Delta\Omega_j > 0$  и  $a=\pi$  при  $\Delta\Omega_j < 0$ . Подставив (2.1) в (2.2), с учетом (1.30) найдем (см., например, [23, 24])

$$K_D^j(r_0) = K_D^{jI}(r_0) + K_D^{jII}(r_0) + K_D^{jIII}(r_0) + K_{D_0}^j(r_0), \quad (2.3)$$

где

$$K_D^{jI}(r_0) = \chi(r_0) \frac{a_0^I}{\omega} \left\{ P_0^I(x_R) - \frac{x_R \gamma_1}{k_j^{II} R \gamma_2} \frac{dP_0^I(x)}{dx} \Big|_{x=x_R} \right\}, \quad (2.4)$$

$$K_D^{jII}(r_0) = \chi(r_0) \frac{a_0^{II} \gamma_3}{\omega \gamma_2}, \quad (2.5)$$

$$K_D^{jIII}(r_0) = \chi(r_0) \sqrt{\frac{L}{R}} \frac{a_0^{III}}{\omega \gamma_2} \left\{ \sqrt{\frac{r_c}{L}} \operatorname{ch} [k_j^{III} (L - r_c)] - 1 \right\}, \quad (2.6)$$

$$K_{D_0}^j(r_0) = \chi(r_0) \sqrt{\frac{L}{R}} \frac{C_j^+(g^{III})}{\omega \gamma_2}, \quad (2.7)$$

$$\chi(r_0) = \frac{2\pi D_j I_0(R_0^j/2r_0)}{I_0(R_0^j/2r_0) K_0(R_0^j/2R) - I_0(R_0^j/2R) K_0(R_0^j/2r_0)}. \quad (2.8)$$

Здесь (2.4)–(2.6) — вклад в эффективность поглощения собственных точечных дефектов краевой дислокацией областей  $F=I, II, III$  соответственно, а (2.7) — вклад в  $K_{D_0}^j(r_0)$  внешней поверхности радиуса  $r=R$ .

При взаимоделиствии точечных дефектов с краевой дислокацией ( $R_0^j/2r_0 > 1$ ) и с учетом (1.5) выражение (2.8) значительно упрощается

$$\chi(r_0) = \chi_R = \frac{2\pi D_j}{\ln(2R/R_0^j)}. \quad (2.9)$$

Для рассматриваемого твердого раствора, т. е. когда  $k_j^{II}(r_c - R) \gg 1$ ,  $k_j^{III}(L - r_c) \gg 1$ , что означает  $L > r_c > R$ , постоянные  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  оказываются примерно одинаковыми

$$\gamma_1 \simeq \gamma_2 \simeq \gamma_3 \simeq \frac{1}{4} (k_j^{II}/k_j^{III} + 1) \exp \{k_j^{II}(r_c - R) + k_j^{III}(L - r_c)\} \equiv \gamma, \quad (2.10)$$

а  $\omega \simeq 1$ . Тогда в соответствии с (1.5)–(1.9) и (1.42) из (2.4)–(2.7) имеем

$$K_D^{jI}(r_0) = K_D^{jI} \simeq \chi_R \frac{g^I R_0^{j2}}{4D_j} \left\{ P_0^I(x_R) - \frac{x_R}{k_j^{II} R} \frac{dP_0^I(x)}{dx} \Big|_{x=x_R} \right\}, \quad (2.11)$$

$$K_D^{jII}(r_0) = K_D^{jII} \simeq \chi_R \left\{ \frac{g^{II}}{D_j k_j^{II2}} - \bar{C}_j^e \right\}, \quad (2.12)$$

$$K_D^{jIII}(r_0) = K_D^{jIII} \simeq \chi_R \sqrt{\frac{r_c}{R}} \left\{ \frac{g^{III}}{D_j k_j^{III2}} - \bar{C}_j^e \right\} \frac{e^{k_j^{III}(L - r_c)}}{2\gamma}, \quad (2.13)$$

$$K_{D_0}^j(r_0) = K_{D_0}^j \simeq \chi_R \sqrt{\frac{L}{R}} \frac{C_j^+(g^{III})}{\gamma}. \quad (2.14)$$

Из сравнения (2.11)–(2.14) видно, что основной вклад в (2.3) вносят слагаемые  $K_D^{jI}(r_0)$  и  $K_D^{jII}(r_0)$ , в то время как  $K_D^{jIII}(r_0)$  и  $K_{D_0}^j(r_0)$  экспоненциально малы (см. (2.10)). Таким образом, окончательно имеем

$$K_D^j(r_0) \simeq K_D^{jI}(r_0) + K_D^{jII}(r_0) \simeq \chi_R \left\{ \frac{g^I R_0^{j2}}{4D_j} \left[ P_0^I(x_R) - \frac{x_R}{k_j^{II} R} \frac{dP_0^I(x)}{dx} \Big|_{x=x_R} \right] + \left[ \frac{g^{II}}{D_j k_j^{II2}} - \bar{C}_j^e \right] \right\} \quad (2.15)$$



Поскольку вклад третьей области ( $F=III$ ) в эффективности поглощения собственных точечных дефектов краевой дислокацией экспоненциально мал по сравнению с  $K_D^{jI}(r_0)$  и  $K_D^{jII}(r_0)$ , то можно считать, что при  $r_c \ll r \leq L$  распределение вакансий и межузельных атомов приблизительно однородное. Это позволяет учесть рекомбинационный член в уравнениях баланса (1. 1) в большей части твердого раствора ( $F=III$ ) и оправдывает представление  $C_j^+$  в виде (1. 14).

В предельном случае беспримесного кристалла ( $E_p^j=0$ ) и при отсутствии стоков в областях  $F=II, III$  ( $L=r_c=R$ ) постоянные  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  и  $\omega$  значительно упрощаются

$$\gamma_1 = \gamma_3 = 0, \quad \gamma_2 = 1, \quad \omega = 1, \quad (2.16)$$

а выражение (2. 3) представимо в виде (см. [14])

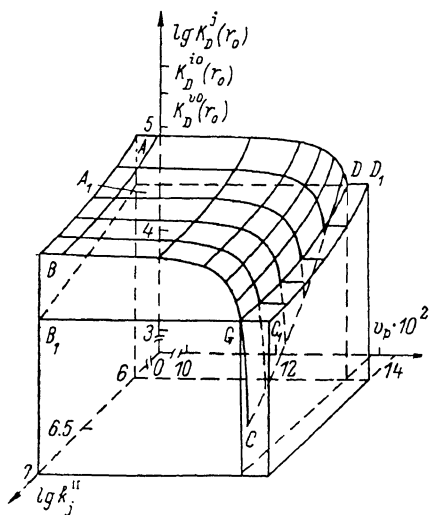
$$K_D^{j0}(r_0) = K_D^{j0} \simeq \chi_L \left\{ (C_j^+ - C_j^j) + \frac{g^I R_0^j}{4D_j} P_0^I(x_R) \right\}, \quad (2.17)$$

где

$$\chi_L \simeq \frac{2\pi D_j}{\ln(2L/R_0^j)}. \quad (2.18)$$

В соответствии с (2. 15), (1. 12) и (1. 13) упругое поле precipитатов в зависимости от типа точечного дефекта и выделения (т. е. знаков  $\Delta\Omega_j$  и  $\epsilon_p$ ) может существенно изменить эффективность поглощения собственных точечных дефектов  $K_D^j(r_0)$ .

Так, если относительная деформация внутри предвыделения  $\epsilon_p < 0$ , а в твердом растворе  $\epsilon > 0$ , то из (2. 15) и (1. 12) видно, что эффективность  $K_D^j(r_0)$  для межузельных атомов уменьшается. Происходит выравнивание



Зависимости эффективностей поглощения точечных дефектов краевой дислокацией  $K_D^j(r_0)$  как функций объемной доли предвыделений  $v_p$  и суммы сил стоков  $k_j^I$ , рассчитанные по (2. 15).

$K_D^j(r_0)$  — поверхность  $ABCD$ ,  $K_D^{j0}(r_0)$  — поверхность  $A_1B_1C_1D_1$ . Значения  $K_D^{j0}(r_0)$  рассчитаны по (2. 17) для беспримесного кристалла ( $E_p^j=0$ ) в отсутствие стоков ( $k_j^I=0$ ) в областях между дислокациями ( $L=r_c=R$ )

потоков вакансий и межузельных атомов на краевую дислокацию, что должно привести к снижению дислокационного преференса, а следовательно, и распухания распадающихся твердых растворов под облучением.

В качестве примера приведем численную оценку  $K_D^j(r_0)$  по (2. 15) и  $K_D^{j0}(r_0)$  по (2. 17) для параметров металла, близких к никелю:  $\nu=1/3$ ,  $G=7.1 \cdot 10^{11}$  дин/см<sup>2</sup>,  $\Delta\Omega_i=1.6 \Omega$ ,  $\Delta\Omega_p=-0.23 \Omega$ , атомный объем  $\Omega=1.56 \cdot 10^{-23}$  см<sup>3</sup>, энергии образования вакансий и межузельных атомов  $\epsilon_v^j=1.4$  эВ,  $\epsilon_i^j=3$  эВ, а  $\epsilon_p^m=1.4$  эВ,  $\epsilon_p^m=0.2$  эВ. Относительные деформации в precipитате и твердом растворе выбираем  $\epsilon_p = -\epsilon = -0.05$ . Считая, что диффузионные длины пробегов равнозначных точечных дефектов в области  $F=II$  примерно одинаковы ( $k_p^{II} \simeq k_i^{II}$ ), а  $r_0=1.5a_0$  и  $\rho_D=10^{10}$  см<sup>-2</sup>, находим из (2. 15) искомые эффективности  $K_D^j(r_0)$  при температуре облучения  $T=600$  К и скорости генерации собственных точечных дефектов  $g^k=10^{16}$  см<sup>-3</sup>·с<sup>-1</sup> для различных значений  $k_j^I$  и объемной доли выделений  $v_p$ .

Результаты численного расчета  $K_D^j(r_0)$  по формулам (2. 15) и (2. 17) (см. рисунок) показывают, что в случае беспримесного кристалла ( $E_p^j=0$ ) и  $k_j^{R2}=0$  эффективности поглощения точечных дефектов  $K_D^{j0}(r_0)$  в упругом поле краевой

дислокации значительно больше, чем  $K_D^j(r_0)$  (кривые  $AB$ ,  $A_1B_1$ ) при  $\epsilon_j^{II} > 0$ . С ростом  $\epsilon_j^{II}$  величины  $K_D^j(r_0)$  плавно спадают. В распадающемся под облучением твердом растворе эффективность поглощения вакансий краевой дислокацией не зависит от объемной доли предвыделений (поверхность  $A_1B_1C_1D_1$ ), в то время как  $K_D^j(r_0)$  уменьшается с ростом  $v_p$  (поверхность  $ABCD$ ) и при определенных значениях  $v_p$  (кривая  $DG$ ) может сравниться с  $K_D^j(r_0)$ . Это приводит к снижению до нуля предпочтения в поглощении дислокацией межузлий по сравнению с вакансиями (дислокационный преференс). Намечается тенденция даже изменения знака преференса, что немедленно должно сказаться на величине скорости радиационного распухания твердого раствора.

Таким образом, при определенных параметрах потока межузельных атомов к краевой дислокации могут экранироваться упругими полями предвыделений.

## Выводы

1. Аналитически рассчитаны неоднородные стационарные концентрации собственных точечных дефектов (1. 61) в прилегающей к дислокации области твердого раствора при учете суперпозиции упругих полей краевой дислокации и сферических когерентных предвыделений второй фазы.

2. Получены аналитические выражения для эффективностей поглощения точечных дефектов краевой дислокацией (2. 3) и (2. 15), которые для межузельных атомов уменьшаются с ростом объемной доли предвыделений и могут сравниться со значениями для вакансий. Это снижает дислокационный преференс и даже может изменить его знак.

Авторы благодарят А. Н. Орлова за постоянные обсуждения и полезные замечания.

## Литература

- [1] Конобеев Ю. В., Коровин Ю. А. Влияние облучения на материалы ядерной техники (конспект лекций). Обнинск, 1981. 125 с.
- [2] Некоторые проблемы физики радиационных повреждений материалов / Под ред. Иванова В. Е. Киев: Наукова думка, 1979. 140 с.
- [3] Ибрагимов Ш. Ш., Кирсанов В. В., Пятилетов Ю. С. Радиационные повреждения металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 240 с.
- [4] Паршин А. М. ВАНТ, 1978, в. 3 (8), с. 34—48.
- [5] Горынин И. В., Паршин А. М. Атомная энергия, 1981, т. 50, с. 319—324.
- [6] Паршин А. М. Сб. «ЭВМ и моделирование дефектов в кристаллах». Л., 1982, с. 25—50.
- [7] Паршин А. М. Структура и радиационное распухание сталей и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1983. 56 с.
- [8] Паршин А. М., Трушин Ю. В. Письма ЖТФ, 1983, т. 9, № 9, с. 561—564.
- [9] Орлов А. Н., Паршин А. М., Трушин Ю. В. ЖТФ, 1983, т. 53, № 12, с. 2367—2372.
- [10] Маргвелашвили И. Г., Саралидзе З. К. ФТТ, 1973, т. 15, № 9, с. 2665—2668.
- [11] Heald P. T., Speight M. V. Acta Met., 1975, v. 23, N 11, p. 1389—1399.
- [12] Турчин С. И. Препринт ИАЭ-3326/11, 1980. 13 с.
- [13] Rawh H., Bullough R. Phil. Mag., 1985, v. A52, N 3, p. 333—356.
- [14] Самсонидзе Г. Г. ЖТФ, 1986, т. 57, № 2, с. 232—236.
- [15] Orlov A. N., Pompe W., Trushin Yu. V. In: Proc. Int. Conf. «Energy Pulse Modification of Semiconductors and Related Materials». Dresden, GDR, 1984, p. 635—639.
- [16] Трушин Ю. В., Помпе В. Письма ЖТФ, 1985, т. 11, № 7, с. 393—397.
- [17] Орлов А. Н., Самсонидзе Г. Г., Трушин Ю. В. Препринт ФТИ, № 1018. Л., 1986. 30 с.
- [18] Орлов А. Н., Самсонидзе Г. Г., Трушин Ю. В. ЖТФ, 1986, т. 56, № 7, с. 1311—1318.
- [19] Теодосиу К. Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. 352 с.
- [20] Pompe W., Bahr H.-A., Gille G. et al. Modern Theories and Experimental Evidence. Amsterdam, 1985, v. 12, p. 205.
- [21] Brailsford A. D., Bullough R. Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1981, v. 302, N 1465, p. 87—137.
- [22] Арфкен Г. Математические методы в физике. М.: Атомиздат, 1970. 712 с.
- [23] Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. Специальные функции. М.: Наука, 1977. 342 с.
- [24] Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев А. И. Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981. 800 с.