

01;05

Численный расчет скорости деформации твердых растворов внедрения под облучением.

I. Модель радиационной ползучести

© Ю.С. Пятилетов, А.Д. Лопуга

Национальный ядерный центр Республики Казахстан,
480082 Алма-Ата, Казахстан

(Поступило в Редакцию 8 июля 1996 г. В окончательной редакции 23 октября 1997 г.)

Разработана модель радиационной ползучести твердых растворов внедрения, основанная на комбинированном движении дислокаций, включающем их скольжение и переползание через препятствия. В качестве препятствий выступают дислокации "леса" и скопления точечных дефектов радиационного происхождения. Выведена расчетная формула для скорости деформации, позволяющая описывать ползучесть при высоких значениях напряжения, когда скользящие дислокации преодолевают часть барьеров силовым путем, и описан метод определения среднего расстояния, проходимого дислокацией в плоскости скольжения под действием напряжения до остановки на барьерах. Дана методика численного расчета потоков на дислокации собственных точечных дефектов и их комплексов с примесными атомами, позволяющая вычислить скорость переползания дислокаций через барьеры. Проведено сравнение с результатами других авторов. Показано, что из полученной формулы для скорости деформации как частные случаи получаются выражения, даваемые известными ранее моделями радиационной ползучести SIPA, Гиттуса–Мансура, скольжения–переползания.

Введение

При разработке радиационно стойких металлических материалов возникает проблема выбора оптимального элементного состава сплавов, ибо хорошо известно, что добавление даже небольшого количества примесей может привести к существенному изменению физико-механических свойств, в частности скорости радиационно стимулированной деформации [1–5]. Поэтому усилия многих исследователей направлены на выявление механизма влияния примесных атомов на протекание физических процессов в облучаемых материалах. Хотя на большое число вопросов пока не получено достоверных ответов, понимание ряда принципиальных сторон обсуждаемой проблемы уже достигнуто. В частности, выявлены и обсуждены [6–9] различные каналы влияния примесей на радиационную ползучесть и распухание. Отметим те из них, которые, на наш взгляд, представляют наибольший интерес.

Во-первых, примесные атомы могут служить ловушками для межузельных атомов и вакансий, образуя с ними устойчивые малоподвижные комплексы, являющиеся дополнительными центрами рекомбинации собственных точечных дефектов (СТД) и приводящие к снижению скорости радиационно стимулированной деформации. Во-вторых, сегрегация примесей на стоках (дислокациях, порах и др.) может изменить эффективность захвата СТД этими стоками, с которой непосредственно связана скорость деформации. В-третьих, примеси могут образовывать с вакансиями и межузельными атомами комплексы, характеризующиеся высокой подвижностью. Таким образом, для межузельных атомов и вакансий открывается дополнительный канал миграции к стокам в составе таких комплексов, что приводит к изменению

диффузионных потоков в целом и, следовательно, к изменению скорости деформации.

Как видим, влияние примесей на скорость радиационно стимулированной деформации облучаемых металлов носит многоплановый характер. Варьируя тип и концентрацию вводимых примесей, можно в принципе добиться замедления ползучести и распухания. Однако для того, чтобы предпринимать целенаправленные практические шаги в этом направлении, необходимо иметь развитую количественную теорию описанных выше процессов.

Следует подчеркнуть, что к настоящему времени наиболее впечатляющие успехи достигнуты в понимании процессов, связанных с поведением примесей в сплавах замещения [10]. Гораздо менее изученной и разработанной является проблема, связанная с влиянием примесей на скорость радиационно стимулированной деформации сплавов внедрения, ибо пока в мировой литературе имеется дефицит достоверных количественных данных о характеристиках, определяющих подвижность комплексов примесей–СТД в таких сплавах, и об энергиях связи примесей внедрения с СТД в подвижных и неподвижных комплексах, что существенно осложняет развитие теории. Были начаты лишь теоретические исследования одного из аспектов воздействия примесей на радиационно стимулированную деформацию твердых растворов внедрения — влияния на скорость радиационной ползучести и распухания примесных атмосфер вокруг дислокаций и пор [11].

В разработанных ранее моделях радиационной ползучести [12–20] в расчет принимаются только подвижные собственные точечные дефекты. Тем не менее, чтобы провести всесторонние исследования и выявить влияние примесей на скорость деформации сплавов внедрения под облучением с учетом всех вышеупомянутых каналов,

необходима прежде всего обобщенная теоретическая модель радиационной ползучести, которая бы явным образом учитывала возможность миграции к стокам межузельных атомов и вакансий в составе подвижных комплексов примесь–СТД. Этому вопросу и посвящена настоящая работа. Кроме того, в ней обсуждены методы численного расчета физических величин, определяющих скорость ползучести.

Модель радиационной ползучести

В качестве объекта исследований рассмотрим модельный металлический образец с кубической решеткой, содержащий краевые дислокации d , вакансионные поры h и примеси внедрения i , характеризующиеся средними по образцу плотностями ρ_d , N_h и концентрацией C_i соответственно. Считаем, что образец находится в условиях облучения интенсивностью G смещений на атом в секунду (сна/с) и подвержен растяжению вдоль оси x'_1 лабораторной декартовой системы координат. В этой системе координат тензор напряжений имеет единственную отличную от нуля компоненту σ'_{11} . Компоненты тензора напряжений в S -системе координат x_1, x_2, x_3 , связанной с кристаллографическими направлениями образца $[100]$, $[010]$, $[001]$, выражаются через σ'_{11} следующим образом:

$$\sigma_{kl} = T_{kl} T_{11} \sigma'_{11}, \quad (1)$$

где матричные элементы T_{j1} — направляющие косинусы между x_j ($j = 1, 2, 3$) и осью растяжения x'_1 .

Будем считать, что содержащиеся в образце дислокации прямолинейны, ориентированы по осям x_j и имеют векторы Бюргера вдоль этих осей. Дислокации подразделяются на три семейства с плотностями $\rho_d^{(j)}$, составляющими 1/3 полной плотности дислокаций ρ_d .

Сдвиговые компоненты тензора напряжений σ_{kl} ($k \neq 1$) (будем их обозначать τ_{kl}) приводят к тому, что дислокации, лежащие в плоскостях, нормалью к которым служит ось x_l , и имеющие векторы Бюргера, ориентированные вдоль x_k , скользят в направлении x_k вплоть до остановки на препятствиях. Диагональные компоненты σ_{kk} влияют на скорость переползания таких дислокаций $v_c^{(k)}$ благодаря индуцированному напряжением дислокационным преференсу [14,15].

При достаточно больших сдвиговых напряжениях τ_{kl} дислокация преодолевает силовым путем некоторое число барьеров-дефектов, включая скопления точечных дефектов радиационного происхождения, каковыми в рассматриваемом здесь случае являются вакансионные поры, и продвигается в плоскости скольжения на расстояние L , которое зависит от расположения барьеров, их мощности, а также величины внешнего напряжения. Поскольку напряжение τ_{kl} меньше, чем критическое напряжение сдвига $\tau^{(cr)}$, то дислокация не в состоянии преодолеть все барьеры, поэтому, пройдя расстояние L , оказывается закрепленной на них в некоторой устойчивой конфигурации и останавливается. В условиях облу-

чения она преодолевает эти барьеры за счет переползания, выходит в другую плоскость скольжения и снова скользит на расстояние L . Далее описанный процесс многократно повторяется. В результате образец деформируется, причем в общем случае вклад в деформацию вносят как скольжение, так и переползание дислокаций. Остановимся сначала на вкладе скольжения дислокаций в скорость ползучести.

Процессом, контролирующим скорость деформации в результате скольжения дислокаций является преодоление дислокацией препятствий путем переползания после остановки в устойчивой конфигурации. Поэтому средняя скорость движения дислокации в направлении оси x_k под действием напряжения τ_{kl} определяется из очевидного выражения

$$v = \frac{L(\tau_{kl})}{t}. \quad (2)$$

Здесь t — время преодоления дислокацией препятствия

$$t = \frac{\Lambda}{v_c^{(k)}}. \quad (3)$$

Через Λ обозначено среднее расстояние, которое необходимо пройти дислокации посредством переползания, чтобы преодолеть препятствие. В качестве Λ обычно выбирают либо средний размер препятствия λ [16,17], либо его половину $\lambda/2$ [18–20]. Через $v_c^{(k)}$ обозначена скорость переползания дислокаций с векторами Бюргера, ориентированными вдоль оси x_k . Согласно [14,16,20], для чистых металлов, в которых собственные точечные дефекты β ($\beta = I$ соответствуют межузельным атомам, $\beta = V$ — вакансиям) находятся лишь в свободном состоянии, а комплексы $i\beta$ (примесь–межузельный атом iI и примесь–вакансия iV) отсутствуют, $v_c^{(k)}$ определяется разностью чисел межузельных атомов и вакансий, достигающих единицы длины дислокации типа k за единицу времени, $I_I^{(k)} - I_V^{(k)}$. В нашем случае это выражение необходимо дополнить разностью потоков $I_{iI}^{(k)} - I_{iV}^{(k)}$ комплексов примесь–межузельный атом и примесь–вакансия, в составе которых СТД мигрирует к дислокации. Таким образом, выражение для $v_c^{(k)}$ приобретает вид

$$v_c^{(k)} = \frac{\Omega}{b} \left(I_I^{(k)} + I_{iI}^{(k)} - I_V^{(k)} - I_{iV}^{(k)} \right) = \quad (4)$$

$$= \frac{1}{b} \left[Z_I^{(k)} D_I C_I^0 + Z_{iI}^{(k)} D_{iI} C_{iI}^0 - Z_V^{(k)} D_V C_V^0 - Z_{iV}^{(k)} D_{iV} C_{iV}^0 \right], \quad (5)$$

где Ω — атомный объем, b — модуль вектор Бюргера.

При переходе от (4) к (5) для величин $I_{i\beta}^{(k)}$ и $I_{i\beta}^{(k)}$ принято выражение, впервые полученное Хэмом [21] при описании сегрегации примесных атомов на дислокациях в пересыщенных твердых растворах, а затем широко используемое в работах по теории распухания и радиационной ползучести для определения потоков на дислокации СТД [14,16,19,22] и подвижных комплексов примесь–СТД [23,24]. Через $Z_{i\beta}^{(k)}$ и $Z_{i\beta}^{(k)}$ обозначены

параметры, характеризующие эффективность поглощения дислокацией типа k точечных дефектов β и их комплексов с примесными атомами $Z_\beta^{(k)} = \Omega I_\beta^{(k)} / (D_\beta C_\beta^0)$, $Z_{i\beta}^{(k)} = \Omega I_{i\beta}^{(k)} / (D_{i\beta} C_{i\beta}^0)$; D_β и $D_{i\beta}$ — коэффициенты диффузии точечных дефектов β и комплексов $i\beta$; C_β^0 и $C_{i\beta}^0$ — их концентрация на половине расстояния между стоками. Поскольку $v_c^{(k)}$ зависит от растягивающей компоненты напряжений σ_{kk} , то скорость v , согласно (2) и (3), оказывается зависящей от τ_{kl} и σ_{kk} . Плотность дислокаций, движущихся в направлении x_k под действием сдвигового напряжения τ_{kl} , составляет $1/6\rho_d$, поэтому вклад этих дислокаций в компоненту скорости ползучести $\dot{\epsilon}_{kl}$ запишется в виде [25]

$$\dot{\epsilon}_{kl} = \frac{1}{6} b \rho_d v(\tau_{kl}, \sigma_{kk}). \quad (6)$$

Компонента скорости ползучести в направлении x_k за счет переползания дислокаций дается известной формулой [14]

$$\dot{\epsilon}_{kk} = \frac{1}{3} b \rho_d v_c^{(k)} - \frac{1}{9} b \rho_d \sum_k v_c^{(k)}. \quad (7)$$

Второй член в правой части (7) представляет собой вклад распухания.

Компоненты тензора деформаций преобразуются при переходе от одной системы координат к другой таким же образом, как компоненты тензора напряжений (см. (1)), следовательно, скорость ползучести $\dot{\epsilon}'_{11}$ вдоль оси внешней нагрузки вычисляется путем суммирования вкладов в нее от всех компонент $\dot{\epsilon}_{kl}$. С учетом сказанного, выбрав направление оси нагрузки x'_1 в первом квадранте S -системы координат (что не ограничивает общности выводов) и задав его с помощью углов Θ и ϕ сферической системы координат, связанной с S -системой (Θ — угол между осями x_3 и x'_1 , ϕ — угол между осью x_1 и проекцией x'_1 на плоскость $x_1 x_2$), получим выражение для скорости ползучести $\dot{\epsilon}'_{11}$ произвольно ориентированного в пространстве монокристаллического образца с кубической решеткой в условиях растяжения вдоль оси x'_1

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon}'_{11} &\equiv \dot{\epsilon} = \sum_{k,l} T_{k1} T_{l1} \dot{\epsilon}_{kl} \\ &= \frac{1}{6} b \rho_d \left[\frac{L(\tau_{12})}{\Lambda} (v_c^{(1)} + v_c^{(2)}) \sin^2 \Theta \sin \phi \cos \phi \right. \\ &\quad + \frac{L(\tau_{13})}{\Lambda} (v_c^{(1)} + v_c^{(3)}) \sin \Theta \cos \Theta \cos \phi \\ &\quad + \left. \frac{L(\tau_{23})}{\Lambda} (v_c^{(2)} + v_c^{(3)}) \sin \Theta \cos \Theta \cos \phi \right] \\ &\quad + \frac{1}{3} b \rho_d \left(v_c^{(1)} \sin^2 \Theta \cos^2 \phi + v_c^{(2)} \sin^2 \Theta \sin^2 \phi \right. \\ &\quad \left. + v_c^{(3)} \cos^2 \Theta - \frac{1}{3} \sum_j v_c^{(j)} \right). \quad (8) \end{aligned}$$

Первые две строчки в правой части (8) — это вклад в $\dot{\epsilon}$ скольжения дислокаций ($\dot{\epsilon}^{sl}$); последняя строчка — вклад переползания дислокаций ($\dot{\epsilon}^{cl}$), так что $\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^{sl} + \dot{\epsilon}^{cl}$. Их общего выражения (8) как частные случаи получаются формулы для скорости деформации чистых (беспримесных) металлов, даваемые известными моделями радиационной ползучести: SIPA [14,15], Гиттуса–Мансура [18,19], скольжения–переползания [26,27] (см. Приложение), что подтверждает справедливость описанной здесь модели ползучести.

При высоких значениях сдвигового напряжения ($\tau_{kl} \geq 0.3\tau^{(cr)}$) скользящие дислокации преодолевают часть барьеров силовым путем. В этом случае отношение L/Λ значительно превосходит единицу и основной вклад в скорость радиационной ползучести вносит скольжение дислокаций. Поэтому в правой части уравнения (8) следует оставить лишь те слагаемые, которые содержат множитель L/Λ , т.е. положить $\dot{\epsilon} \cong \dot{\epsilon}^{sl}$.

Дислокации разных ориентаций становятся равноправными (вносят одинаковый вклад в $\dot{\epsilon}$) в том случае, если выбрано самое симметричное направление оси нагрузки — вдоль $\langle 111 \rangle$. Тогда, согласно (1), все сдвиговые (τ_{kl}) и растягивающие (σ_{kk}) компоненты напряжений принимают значение $\sigma'_{11}/3 \equiv \sigma$. Кроме того, выполняются соотношения $v_c^{(1)} = v_c^{(2)} = v_c^{(3)} \equiv v_c$, $Z_\beta^{(1)} = Z_\beta^{(2)} = Z_\beta^{(3)} \equiv Z_\beta$, $Z_{i\beta}^{(1)} = Z_{i\beta}^{(2)} = Z_{i\beta}^{(3)} \equiv Z_{i\beta}$. В результате формула для скорости ползучести (8) существенно упрощается. В ней выражение в квадратных скобках, которое мы будем обозначать через $\tilde{v}(\sigma'_{11}, \Theta, \phi)$, заменяется на $2v(\sigma, \sigma)$, а вклад от переползания дислокаций обращается в нуль. С учетом сказанного, введя обозначение

$$\xi = \frac{\tilde{v}(\sigma'_{11}, \Theta, \phi)}{2v(\sigma, \sigma)}, \quad (9)$$

из (8) в общем случае произвольной ориентации нагрузки получим

$$\dot{\epsilon} = \frac{L(\sigma)}{6\Lambda} \rho_d \xi \left[Z_I D_I C_I^0 + Z_{II} D_{II} C_{II}^0 - Z_V D_V C_V^0 - Z_{IV} D_{IV} C_{IV}^0 \right]. \quad (10)$$

Параметр ξ может принимать значения от нуля (когда ось x'_1 совпадает с одной из осей x_j) до некоторой величины, зависящей от вида функции $L(\sigma)$. Воспользовавшись результатами вычисления $L(\sigma)$, приведенными в следующем разделе, и считая ориентацию внешней растягивающей нагрузки случайной относительно осей x_1, x_2, x_3 , нетрудно показать, что среднее значение ξ по порядку величины составляет единицу. Поэтому для оценок скорости радиационной ползучести можно использовать формулу (10) при $\xi = 1$.

Как видим, для проведения количественных расчетов по формуле (10) необходимо иметь алгоритмы вычисления $L(\sigma)$ и скорости переползания дислокаций v_c . Эти вопросы рассмотрены в следующих двух разделах.

Значения коэффициентов A и B для различных комбинаций $\psi_1^{(cr)}$ и $\psi_2^{(cr)}$ и при равенстве числа "сильных" барьеров числу "слабых"

$\psi_2^{(cr)}$	$\psi_1^{(cr)}$							
	1.4		1.6		1.8		2.0	
	A	B	A	B	A	B	A	B
2.2	0.3564	3.3188	0.3191	3.1125	0.2437	3.8750	0.1928	4.0875
2.4	0.3639	3.4192	0.2559	3.8063	0.1979	4.1063	0.1583	4.2625
2.6	0.4265	3.3206	0.5519	3.1813	0.2670	3.8313	0.1770	4.1188
2.8	0.5840	3.0375	0.3465	3.6500	0.3310	3.6063	0.2254	4.1938

Определение $L(\sigma)$ методом компьютерного моделирования и ее аппроксимация аналитическими функциями

Точный аналитический расчет $L(\sigma)$ в случае хаотического расположения в пространстве дефектов разного типа практически невозможен. Поэтому для вычисления $L(\sigma)$ используется расчетная схема, разработанная в [26], где $L(\sigma)$ определялась путем компьютерного моделирования движения дислокаций через сетку случайных препятствий разной мощности по методике, предложенной Форменом и Мейкиным [28]. Для рассматриваемого здесь модельного образца, содержащего дислокации и поры, эта расчетная схема реализуется следующим образом. Представляем дислокацию в виде гибкой нити постоянного натяжения, которая первоначально расположена в основании прямоугольной площадки моделирования и закреплена своими концами на противоположных гранях этой площадки. Размеры площадки выбираются из тех соображений, чтобы результаты моделирования не зависели от ее длины и высоты. Как оказалось, для этого достаточно, чтобы длина площадки была не менее $100l$ (l — среднее расстояние между барьерами в плоскости скольжения), а высота не менее $8l$. Мы в расчетах выбрали площадку моделирования размером $150l \times 10l$, на которой размещалось 1500 барьеров. Барьеры (дислокации леса и поры) считались точечными, жестко закрепленными, а их взаимодействие с дислокацией короткодействующим.

Сила, с которой дислокация действует на j -е препятствие, определяется углом ψ_j между соседними сегментами дислокации на j -м препятствии, поэтому мощность препятствия характеризуется значением критического угла $\psi_j^{(cr)}$, при котором дислокация преодолевает данное препятствие. В рассматриваемом нами модельном материале имеются препятствия двух сортов: сильные — поры, характеризующиеся значениями $\psi_1^{(cr)} < 2 \text{ grad}$, и слабые — дислокации леса с $\psi_2^{(cr)} > 2 \text{ grad}$ [29]. Пространственное расположение барьеров обоих типов на площадке моделирования задается генератором случайных чисел.

Под действием сдвигового напряжения $\tau_{kl} = \sigma$ дислокация перемещается в своей плоскости скольжения,

преодолевая силовым путем те барьеры, для которых угол ψ_j оказывается меньше, чем $\psi_j^{(cr)}$. Если напряжение σ меньше критического напряжения сдвига, то дислокация, пройдя расстояние $L(\sigma)$, принимает устойчивую конфигурацию, когда на всех барьерах ψ_j оказывается больше, чем $\psi_j^{(cr)}$, и останавливается. В результате проведения моделирующих расчетов по описанной схеме нами получены зависимости $L(\sigma)$ для различных комбинаций значений $\psi_1^{(cr)}$ и $\psi_2^{(cr)}$ и при равенстве числа "сильных" барьеров числу "слабых".

Ясно, однако, что проведение практических расчетов $L(\sigma)$ методом компьютерного моделирования для каждого материала с учетом имеющейся в нем конкретной дефектной структуры представляет для исследователей определенные сложности и неудобства [30–32]. Гораздо предпочтительней и проще было бы использование аналитических представлений $L(\sigma)$, если бы были найдены удачные аппроксимации $L(\sigma)$ аналитическими функциями. Анализ большого числа кривых $L(\sigma)$, полученных методом компьютерного моделирования, показал, что зависимость $L(\sigma)$ для самых разных случаев неплохо описывается экспонентами вида

$$L(\sigma) = A \exp\left(B \frac{\sigma}{\tau^{(cr)}}\right) \quad (11)$$

с двумя параметрами A и B , значения которых для различных конкретных ситуаций могут быть легко определены, что позволяет исследователям пользоваться аналитическим видом $L(\sigma)$, не прибегая к компьютерным экспериментам. В частности, зависимости $L(\sigma)$, полученные здесь методом компьютерного моделирования, с хорошей точностью аппроксимируются экспоненциальной функцией (11) с коэффициентами A и B , приведенными в таблице.

Численный метод расчета скорости переползания дислокаций

Как видно из формулы (5), скорость переползания дислокаций определяется потоками собственных точечных дефектов и подвижных комплексов примесь–СТД на дислокации. Эти потоки могут быть найдены численным методом, если известны стационарные распределения подвижных точечных дефектов в окрестности стоков.

Последние могут быть получены путем решения системы диффузионных уравнений для вакансий, межузельных атомов и комплексов примесь–вакансия, примесь–межузельных атомов с учетом реакций взаимодействия точечных дефектов между собой и взаимодействия их с упругими полями стоков. Для решения этой проблемы используются различные приближения и модели. Они подробно обсуждены в работе [33], из которой следует, что чаще всего применяются три модели: 1) модель поглощающей среды, согласно которой считается, что все стоки для точечных дефектов равномерно “размазаны” по кристаллу; 2) модель периодического расположения стоков, согласно которой кристалл разбивается на одинаковые ячейки, имеющие симметрию стока (для дислокаций это — цилиндры, для пор — сферы), причем в центре каждой из них находится сток; 3) гибридная модель, являющаяся комбинацией двух предыдущих.

Наиболее удачной принято считать модель поглощающей среды. Однако при ее использовании необходимо задавать граничные условия на бесконечно большом удалении от выбранного стока. По этой причине такая модель не может быть использована при численных расчетах, когда должна задаваться расчетная сетка с ячейками конечных размеров. С учетом сказанного мы здесь используем гибридную модель, согласно которой дислокация располагается в центре цилиндрической ячейки; в пространстве внутри ячейки поры считаются равномерно “размазанными”; за пределами ячейки кристалл представляет собой однородную поглощающую среду с равномерно “размазанными” дислокациями и порами.

В общем случае, когда наряду с СТД подвижными считаются комплексы примесь–межузельный атом и примесь–вакансия, для расчета стационарных концентраций этих точечных дефектов в ячейке в окрестности дислокации запишем следующие диффузионные уравнения:

$$\begin{aligned} D_V \nabla^2 C_V + \frac{D_V}{k_b T} \left(\nabla C_V \nabla E_V^{(d)} + C_V \nabla^2 E_V^{(d)} \right) \\ + G - D_V k_V^{(h)2} C_V - \alpha C_V C_I + \gamma_{iV} C_{iV} \\ - \mu_I C_V C_{iI} - \chi_V C_V \left(C_i^{(d)} - C_{iI} - C_{iV} \right) = 0, \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_I \nabla^2 C_I + \frac{D_I}{k_b T} \left(\nabla C_I \nabla E_I^{(d)} + C_I \nabla^2 E_I^{(d)} \right) \\ + G - D_I k_I^{(h)2} C_I - \alpha C_V C_I + \gamma_{iI} C_{iI} \\ - \mu_V C_I C_{iV} - \chi_I C_I \left(C_i^{(d)} - C_{iI} - C_{iV} \right) = 0, \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_{iV} \nabla^2 C_{iV} + \frac{D_{iV}}{k_b T} \left(\nabla C_{iV} \nabla E_{iV}^{(d)} + C_{iV} \nabla^2 E_{iV}^{(d)} \right) - D_{iV} k_{iV}^{(h)2} C_{iV} \\ - \alpha' C_{iV} C_{iI} + \chi_V C_V \left(C_i^{(d)} - C_{iI} - C_{iV} \right) \\ - \mu_I C_V C_{iI} - \gamma_{iV} C_{iV} = 0, \quad (14) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D_{iI} \nabla^2 C_{iI} + \frac{D_{iI}}{k_b T} \left(\nabla C_{iI} \nabla E_{iI}^{(d)} + C_{iI} \nabla^2 E_{iI}^{(d)} \right) - D_{iI} k_{iI}^{(h)2} C_{iI} \\ - \alpha' C_{iV} C_{iI} + \chi_I C_I \left(C_i^{(d)} - C_{iI} - C_{iV} \right) \\ - \mu_I C_V C_{iI} - \gamma_{iI} C_{iI} = 0. \quad (15) \end{aligned}$$

Здесь k_b — постоянная Больцмана; T — температура; $C_i^{(d)}$ — концентрация примесных атомов в примесной атмосфере вокруг дислокации [11]; $E_\beta^{(d)}(\mathbf{r})$ и $E_{i\beta}^{(d)}(\mathbf{r})$ — энергия упругого взаимодействия точечного дефекта β и комплекса $i\beta$ с дислокацией, окруженной примесной атмосферой [11]; $k_\beta^{(h)2}$ и $k_{i\beta}^{(h)2}$ — параметры, характеризующие эффективность поглощения порой точечных дефектов β и комплексов $i\beta$ соответственно; α — коэффициент взаимной рекомбинации межузельных атомов и вакансий; α' — коэффициент рекомбинации комплексов iI с комплексами iV ; μ_β — коэффициент рекомбинации свободных точечных дефектов β с захваченными примесями собственными точечными дефектами противоположного типа; χ_β — коэффициент захвата точечных дефектов β примесными атомами; $\gamma_{i\beta}$ — величина, обратная среднему времени удержания дефекта β примесью в комплексе $i\beta$. Эти коэффициенты задаются следующими формулами [6,34]:

$$\alpha = \frac{\omega \nu_D}{\Omega} \exp(-E_I^m / k_b T), \quad (16)$$

$$\alpha' = \frac{\omega \nu_D}{\Omega} \exp(-E_{iI}^m / k_b T), \quad (17)$$

$$\mu_I = 4\pi r_I D_V / \Omega, \quad (18)$$

$$\mu_V = 4\pi r_V D_I / \Omega, \quad (19)$$

$$\chi_\beta = 4\pi r_{i\beta} D_\beta / \Omega, \quad (20)$$

$$\gamma_{i\beta} = \frac{D_\beta}{b_0^2} \exp(-E_{i\beta}^b / k_b T), \quad (21)$$

$$k_\beta^{(h)2} = Y_\beta 4\pi r_h N_h, \quad k_{i\beta}^{(h)2} = Y_{i\beta} 4\pi r_h N_h, \quad (22)$$

где ω — объем зоны взаимной рекомбинации точечных дефектов; ν_D — частота порядка дебаевской; r_β — радиус объема, в котором дефект β рекомбинирует с захваченным в ловушку собственным точечным дефектом противоположного типа; $r_{i\beta}$ — радиус захвата точечного дефекта β примесным атомом; b_0 — величина порядка межатомного расстояния; $E_{i\beta}^b$ — энергия связи комплекса $i\beta$; E_I^m — энергия миграции межузельного атома; Y_β и $Y_{i\beta}$ — параметры, характеризующие эффективность поглощения порой точечных дефектов β и комплексов $i\beta$ соответственно; r_h — средний радиус пор.

Чтобы решить систему дифференциальных уравнений (12)–(15), необходимо задать граничные условия. Учтем, что, согласно результатам компьютерного моделирования [35], радиусы зон спонтанного захвата дислокацией вакансий r_{dV}^0 и межузельных атомов r_{dI}^0 отличаются друг от друга ($r_{dI}^0 > r_{dV}^0$), причем СТД, попавшие в свои зоны захвата, имеют положительную энергию связи с

дислокацией $E_{d\beta}^b$. Поэтому будем считать, что при $r = r_{d\beta}^0$ концентрация СТД типа β равна нулю

$$C_{\beta}(r_{d\beta}^0) = 0. \quad (23)$$

Поскольку $E_{d\beta}^b$ больше, чем энергия связи комплекса примесь–СТД типа β , на границе зон захвата (при $r = r_{d\beta}^0$) комплексы $i\beta$ разваливаются, причем СТД уходят на дислокацию, а примесные атомы возвращаются в раствор. Поэтому граничные условия для комплексов при $r = r_{d\beta}^0$ будут иметь вид

$$C_{i\beta}(r_{d\beta}^0) = 0. \quad (24)$$

На внешней границе ячейки (при $r = R_d$, где R_d — половина среднего расстояния между дислокациями) концентрации C_{β}^0 и $C_{i\beta}^0$ определяются из системы уравнений баланса для концентраций точечных дефектов β и $i\beta$ в поглощающей среде с равномерно "размазанными" дислокациями и порами и характеризуемой мощностями стоков

$$k_{\beta}^2 = k_{\beta}^{(d)2} + k_{\beta}^{(h)2}, \quad k_{i\beta}^2 = k_{i\beta}^{(d)2} + k_{i\beta}^{(h)2}, \quad (25)$$

где $k_{\beta}^{(d)2}$ и $k_{i\beta}^{(d)2}$ — мощности стоков дислокаций для дефектов β и $i\beta$ соответственно

$$k_{\beta}^{(d)2} = Z_{\beta}\rho_d, \quad k_{i\beta}^{(d)2} = Z_{i\beta}\rho_d. \quad (26)$$

Уравнения баланса получаются из (12)–(15), в которых приравнены нулю пространственные производные, $k_{\beta}^{(h)2}$ и $k_{i\beta}^{(h)2}$ заменены на k_{β}^2 и $k_{i\beta}^2$ соответственно, а $C_i^{(d)}(\mathbf{r})$ на C_i

$$G - D_V k_V^2 C_V^0 - \alpha C_V^0 C_I^0 + \gamma_{iV} C_{iV}^0 - \mu_I C_V^0 C_{iI}^0 - \chi_V C_V^0 (C_i - C_{iI}^0 - C_{iV}^0) = 0, \quad (27)$$

$$G - D_I k_I^2 C_I^0 - \alpha C_V^0 C_I^0 + \gamma_{iI} C_{iI}^0 - \mu_V C_I^0 C_{iV}^0 - \chi_I C_I^0 (C_i - C_{iI}^0 - C_{iV}^0) = 0, \quad (28)$$

$$\chi_V C_V^0 (C_i - C_{iI}^0 - C_{iV}^0) - D_{iV} k_{iV}^2 C_{iV}^0 - \mu_V C_I^0 C_{iV}^0 - \gamma_{iV} C_{iV}^0 - \alpha' C_{iV}^0 C_{iI}^0 = 0, \quad (29)$$

$$\chi_I C_I^0 (C_i - C_{iI}^0 - C_{iV}^0) - D_{iI} k_{iI}^2 C_{iI}^0 - \mu_I C_V^0 C_{iI}^0 - \gamma_{iI} C_{iI}^0 - \alpha' C_{iV}^0 C_{iI}^0 = 0. \quad (30)$$

Систему нелинейных алгебраических уравнений (27)–(30) решаем итерационным методом с использованием ЭВМ. В итоге определяем граничные условия на внешней границе

$$C_{\beta}(R_d) = C_{\beta}^0, \quad C_{i\beta}(R_d) = C_{i\beta}^0 \quad (31)$$

и, следовательно, можем приступить к решению системы уравнений (12)–(15).

Для численного интегрирования таких уравнений обычно применяют разностные схемы. Мы используем одну из таких схем, согласно которой, уравнения (12)–(15) записываем в цилиндрической системе координат, связанной с дислокацией, и задаем сетку для переменных r и Θ , характеризуемую величинами шага h_1 и h_2 и числом узлов N_1 и N_2 . Аппроксимируя дифференциальные операторы в (12)–(15) разностными отношениями в узлах сетки, приходим к уравнениям в конечных разностях, которые необходимо решить в $(N_1 - 2) \cdot N_2$ узлах сетки (значения C в $2N_2$ узлах сетки на внешней и внутренней границах расчетной ячейки представляют собой граничные условия). Отметим, что полученные уравнения представляют собой систему нелинейных уравнений. Она решается численно итерационным методом Ньютона (см., например, [36]). Описанный алгоритм позволяет получить решение исходной системы уравнений (12)–(15) с заданной точностью за приемлемое время.

Однако это еще не есть полное решение поставленной задачи. Дело в том, что в исходную систему уравнений (12)–(15) и в уравнения (27)–(30), используемые для определения концентраций C_{β}^0 и $C_{i\beta}^0$ на внешних границах расчетной ячейки, входят величины $k_{\beta}^{(h)2}$, $k_{i\beta}^{(h)2}$, $k_{\beta}^{(d)2}$, $k_{i\beta}^{(d)2}$, содержащие изначально неизвестные эффективности поглощения точечных дефектов дислокациями Z_{β} , $Z_{i\beta}$ и порами Y_{β} , $Y_{i\beta}$. Поэтому необходимо искать самосогласованное решение [8,9]. Процедура самосогласования при численном интегрировании уравнений (12)–(15) включает в себя следующие этапы.

1. Решаются уравнения (27)–(30) с использованием затравочных значений Y_{β} , $Y_{i\beta}$ и Z_{β} , $Z_{i\beta}$, определяемых с помощью аналитических формул из [14]. При этом вычисляются значения C_{β}^0 и $C_{i\beta}^0$, являющиеся граничными условиями для системы уравнений (12)–(15).

2. Интегрируется система уравнений (12)–(15), из которой сначала определяется стационарное распределение точечных дефектов β и комплексов $i\beta$ в окрестности дислокации, затем путем численного дифференцирования рассчитываются их потоки I_{β} и $I_{i\beta}$ на дислокацию позволяющие вычислить величины Z_{β} и $Z_{i\beta}$ на первом итерационном шаге.

3. По аналогии с (12)–(15) записывается система уравнений для расчета концентраций C_{β} , $C_{i\beta}$ в сферической ячейке вокруг поры. Величины $E_{\beta}^{(d)}$, $E_{i\beta}^{(d)}$ заменяются на $E_{\beta}^{(h)}$, $E_{i\beta}^{(h)}$ — энергии взаимодействия дефектов β и $i\beta$ с порой окруженной примесной атмосферой [11]. В пределах расчетной ячейки равномерно "размазанными" считаются дислокации, поэтому величины $k_{\beta}^{(h)2}$, $k_{i\beta}^{(h)2}$ заменяются на $k_{\beta}^{(d)2}$ и $k_{i\beta}^{(d)2}$ соответственно. За пределами ячейки кристалл моделируется поглощающей средой с равномерно "размазанными" дислокациями и порами. Граничные условия у поверхности поры задаются по аналогии с рассмотренным выше случаем для дислокации, ибо в работе [37] показано, что вблизи поры тоже имеются области спонтанного захвата СТД, разные для вакансий и межузельных атомов и характеризующиеся

радиусами $r_{h\beta}^0 > r_h$. Поэтому концентрации $C_\beta(r_{h\beta}^0)$ и $C_{i\beta}(r_{h\beta}^0)$ равны нулю. На внешней границе ячейки (при $r = R_h$, где R_h — половина среднего расстояния между порами) концентрации C_β^0 и $C_{i\beta}^0$ определяются из системы уравнений (27)–(30). Численное решение системы уравнений для C_β и $C_{i\beta}$ в сферической ячейке вокруг поры проводится с использованием сферической системы координат, связанной с порой, по той же расчетной схеме, которая была использована для случая дислокации. В результате определяется стационарное распределение дефектов β и $i\beta$ в окрестности поры, рассчитываются их потоки $I_\beta^{(l)}$ и $I_{i\beta}^{(h)}$ на пору, после чего по формулам

$$Y_\beta = \frac{I_\beta^{(h)} \Omega}{4\pi r_h D_\beta C_\beta^0}, \quad Y_{i\beta} = \frac{I_{i\beta}^{(h)} \Omega}{4\pi r_h D_{i\beta} C_{i\beta}^0} \quad (32)$$

вычисляются значения $Y_\beta^{(1)}$ и $Y_{i\beta}^{(1)}$ на первом итерационном шаге. После этого возвращаемся к пункту 1 и переходим ко второй итерации.

Описанный итерационный процесс повторяется до достижения заданной точности. В итоге получаем само согласованные значения интенсивностей стоков пор и дислокаций, параметров Z_β , $Z_{i\beta}$, Y_β , $Y_{i\beta}$, стационарных концентраций точечных дефектов в окрестности стоков (C_β , $C_{i\beta}$) и на границах ячеек (C_β^0 , $C_{i\beta}^0$). Используя эти данные, по формуле (5) определяем искомую скорость переползания дислокаций.

Заключение

Таким образом, в работе описана физическая модель радиационной ползучести твердых растворов внедрения и получена расчетная формула для определения скорости ползучести $\dot{\epsilon}$. Показано, что в общем случае вычислить $\dot{\epsilon}$ аналитически не представляется возможным. В связи с этим обсуждены численные методы расчета величин $L(\sigma)$ и v_c , определяющих скорость ползучести.

Чтобы вычислить скорость деформации для конкретных материалов с использованием описанной здесь модели ползучести, необходимо задать значения параметров, характеризующих данный материал, его дефектную структуру, условия облучения и испытания, а затем реализовать описанную в предыдущих разделах процедуру расчета $L(\sigma)$ и v_c . Такая работа нами проделана, и позднее мы сообщим результаты расчетов по выявлению влияния различных факторов на скорость деформации твердых растворов внедрения под облучением.

Приложение

Покажем, каким образом из выражения (8) как частные случаи получаются формулы для скорости радиационной ползучести, даваемые моделями SIPA [14,15], Гиттуса–Мансура [18,19], скольжения–переползания [26,27]. Будем считать, что комплексов $i\beta$

нет. Рассмотрим следующие ситуации: 1) растягивающее напряжение σ'_{11} направлено вдоль оси x_1 , совпадающей с кристаллографическим направлением $\langle 100 \rangle$; 2) ось напряжения σ'_{11} лежит вдоль $\langle 110 \rangle$.

Случай 1: ($\sigma'_{11} \parallel \langle 100 \rangle$; $\Theta = \pi/2$; $\phi = 0$). Как следует из (1), сдвиговые компоненты напряжения τ_{kl} равны нулю, поэтому ползучесть реализуется только за счет переползания дислокаций, как было принято в модели SIPA. Тогда из (8) с учетом (5) непосредственно получаем формулу скорости радиационной ползучести, даваемую моделью SIPA [14],

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_{\text{SIPA}} = \frac{2}{9} \rho_d \left[\Delta Z_I D_I C_I^0 - \Delta Z_V D_V C_V^0 \right], \quad (33)$$

где $\Delta Z_\beta = Z_\beta^{(1)} - Z_\beta^{(3)}$.

Случай 2: ($\sigma'_{11} \parallel \langle 110 \rangle$; $\Theta = \pi/2$; $\phi = \pi/4$). Согласно (1), компоненты напряжения τ_{12} , τ_{21} , σ_{11} , σ_{22} отличны от нуля, поэтому вклад в скорость ползучести вносят как переползание, так и скольжение дислокаций. Из (8) получим

$$\begin{aligned} \dot{\epsilon} &= \frac{\rho_d}{9} (\Delta Z_I D_I C_I^0 - \Delta Z_V D_V C_V^0) \\ &+ \frac{L}{6\Lambda} \rho_d \left(Z_I^{(1)} D_I C_I^0 - Z_V^{(1)} D_V C_V^0 \right) \\ &= \frac{1}{2} \dot{\epsilon}_{\text{SIPA}} + \frac{L}{2\Lambda} \left(\frac{1}{2} \dot{\epsilon}_{\text{SIPA}} + \frac{1}{3} \dot{S} \right), \end{aligned} \quad (34)$$

где \dot{S} — скорость распухания.

Слагаемые в правой части (34), содержащие множитель L/Λ , представляют собой вклад скольжения дислокаций в $\dot{\epsilon}$. Если значение напряжения σ'_{11} настолько низко, что дислокации при скольжении не могут преодолеть силовым путем ни одного барьера, а в качестве препятствий служат только дислокации леса (как в моделях Гиттуса [18] и Мансура [19]), то из (34) получаем вклад в скорость радиационной ползучести, даваемые моделью Гиттуса–Мансура. Действительно, в такой ситуации в качестве Λ выступает половина средней длины дислокационных сегментов ($\Lambda \simeq 1/(\sqrt{\pi\rho_d})$), а величина L получается из условия, что деформация $(1/6)b\rho_d L$ соответствует деформации упругого прогиба дислокационных сегментов ϵ_e . В результате вклад скольжения дислокаций в $\dot{\epsilon}$ запишется в виде

$$\dot{\epsilon}^{sl} = \frac{\sqrt{\pi}\epsilon_e}{d\sqrt{\rho_d}} \left(\dot{S} + \frac{3}{2} \dot{\epsilon}_{\text{SIPA}} \right), \quad (35)$$

с точностью до числовых коэффициентов совпадающем с формулами для скорости ползучести, даваемыми моделями Гиттуса (первое слагаемое в правой части (35)) и Мансура (второе слагаемое).

При высоких значениях напряжения скользят дислокации преодолевают часть барьеров силовым путем. В этом случае коэффициент L/Λ значительно превосходит единицу, следовательно, основной вклад в $\dot{\epsilon}$ вносит

скольжение дислокаций. Из (34) непосредственно получаем формулу для скорости радиационной ползучести

$$\dot{\epsilon} = \frac{L}{6\Lambda} \rho_d \left(Z_I^{(1)} D_I C_I^0 - Z_V^{(1)} D_V C_V^0 \right), \quad (36)$$

даваемую моделью скольжения–переползания [27].

Список литературы

- [1] *Williams T.M.* // J. Nucl. Mater. 1980. Vol. 88. P. 217–225.
- [2] *Платов Ю.М., Симаков С.В., Целевев А.Б.* // Физ. и хим. обраб. материалов. 1989. № 1. С. 11–13.
- [3] *Воеводин В.Н., Зеленский В.Ф., Зайдлиц М.П.* и др. Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1980. Вып. 1(12). С. 68–71.
- [4] *Medvedev O.A., Ryazanov A.I., Lyubimov A.N.* et al. // J. Nucl. Mater. 1996. Vol. 233–237. P. 460–465.
- [5] *Aitthozhin E.S., Chumakov E.V.* // J. Nucl. Mater. 1996. Vol. 233–237. P. 537–546.
- [6] *Mansur L.K., Yoo M.H.* // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 74. N 2. P. 228–241.
- [7] *Давыдов Л.Н., Кирюхин Н.М.* // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1980. Вып. 2(13). С. 10–12.
- [8] *Трушин Ю.В.* // ЖТФ. 1992. Т. 62. Вып. 4. С. 1–12.
- [9] *Трушин Ю.В.* // ЖТФ. 1992. Т. 62. Вып. 4. С. 13–22.
- [10] Фазовые превращения при облучении / Под ред. Ф.В. Нольфи. Пер. с англ. Челябинск: Металлургия, 1989. 312с.
- [11] *Пятилетов Ю.С., Едемский Н.И.* // ЖТФ. 1992. Т. 62. Вып. 11. С. 89–95.
- [12] *Саралидзе З.К.* // ФММ. 1996. Т. 81. Вып. 2. С. 159–161.
- [13] *Indenbon V.L., Saralidze Z.K.* // Modern Problems in Condensed Matter Sciences. Vol. 31. Elastic Strain Fields and Dislocation Mobility / Ed. V.L. Indenbon, J. Lothe. North Holland, 1992. Ch. 12. P. 699–744.
- [14] *Heald P.T., Speight M.V.* // Acta Met. 1975. Vol. 23. N 11. P. 1389–1399.
- [15] *Woo C.H., Garner F.A., Holt R.A.* // Effects of Radiation on Materials. 16th Intern. Symp. ASTM STP 1175. Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1993. P. 27–37.
- [16] *Wolfer W.G., Foster J.P., Garner F.A.* // Nuclear Technology. 1972. Vol. 16. N 1. P. 55–63.
- [17] *Harkness S.D., Tesk J.A., Li C.-Yu.* // Nuclear Applications and Technology. 1970. Vol. 9. N 1. P. 24–30.
- [18] *Gittus J.H.* // Phil. Mag. 1972. Vol. 25. N 2. P. 345–354.
- [19] *Mansur L.K.* // Phil. Mag. A. 1979. Vol. 39. N 4. P. 497–506.
- [20] *Heald P.T., Harbottle J.E.* // J. Nucl. Mater. 1977. Vol. 67. N 1–2. P. 229–233.
- [21] *Nam F.S.* // J. Appl. Phys. 1959. Vol. 30. N 6. P. 915–926.
- [22] *Маргвелашвили И.Г., Саралидзе З.К.* // ФТТ. 1973. Т. 15. Вып. 9. С. 2665–2668.
- [23] *Горбатов Г.З.* // ФММ. 1979. Т. 48. № 1. С. 100–106.
- [24] *Трушин Ю.В., Орлов А.Н.* // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 7. С. 1302–1310.
- [25] *Хирт Дж., Лоте И.* Теория дислокаций. М. 1972. 600 с.
- [26] *Кирсанов В.В., Пятилетов Ю.С., Тюпкина О.Г.* // Письма в ЖТФ. 1980. Т. 6. Вып. 19. С. 1183–1186.
- [27] *Пятилетов Ю.С.* // ФММ. 1982. Т. 54. № 6. С. 1080–1086.
- [28] *Foreman A.J.E., Makin M.J.* // Phil. Mag. 1966. Vol. 14. P. 911–924.
- [29] *Bement A.L., jr.* // Rev. Roum. Phys. 1972. Vol. 17. N 3. P. 360–380.
- [30] *Пятилетов Ю.С., Тюпкина О.Г.* // ФММ. 1983. Т. 55. № 4. С. 792–797.
- [31] *Пятилетов Ю.С., Ибрагимова Д.Ш.* // ФММ. 1992. № 1. С. 17–23.
- [32] *Ибрагимова Д.Ш., Карпиков А.Н., Назырова Д.А.* и др. Препринт ИФЭ НЯЦ РК. № 1-94. Алма-Ата, 1994. 32 с.
- [33] *Brailsford A.D., Bullough R.* // Phil. Trans. Roy. Soc. London. 1981. Vol. A302. N 1465. P. 87–137.
- [34] *Орлов А.Н., Трушин Ю.В.* // Радиационные дефекты в металлических кристаллах / Под ред. Ш.Ш. Ибрагимова. Алма-Ата: Наука КазССР, 1978. С. 30–40.
- [35] *Кирсанов В.В., Пятилетов Ю.С., Туркбаев Т.Э.* // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 4. С. 698–706.
- [36] *Бахвалов М.С.* Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1973. 632 с.
- [37] *Голубов С.И., Кауцекая Е.Н.* // ЭВМ и моделирование дефектов в кристаллах. Л., 1982. С. 76–77.