

01;05

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ СКОРОСТИ РАДИАЦИОННОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ МЕТАЛЛОВ С УЧЕТОМ РЕКОМБИНАЦИИ

© Ю.С.Пятилетов, А.Д.Лопуза

Институт атомной энергии, Национальный ядерный центр РК,
Алма-Атинское отделение,
480082 Алма-Ата, Казахстан
(Поступило в Редакцию 23 ноября 1994 г.
В окончательной редакции 27 марта 1995 г.)

С использованием численных методов проведен самосогласованный расчет системы уравнений диффузии для междоузельных атомов и вакансий с учетом рекомбинации для металлических образцов, подверженных воздействию облучения и внешнего напряжения. Найдены концентрационные профили точечных дефектов вокруг дислокаций и пор, с использованием которых численно рассчитаны потоки междоузельных атомов и вакансий на стоки. Для разных значений температуры и сил стоков вычислена скорость деформации с использованием дислокационной модели радиационной ползучести, учитывающей скольжение и переползание дислокаций через препятствия. На диаграмме в координатах плотность дислокаций-температура построены три области, в одной из которых при расчете скорости ползучести рекомбинацией можно пренебречь, в другой влияние рекомбинации превалирует над влиянием стоков, в третьей необходимо учитывать как уход точечных дефектов на стоки, так и их гибель за счет рекомбинации. Проведено сравнение результатов с данными других авторов.

Введение

Как известно [1], скорость деформации металлов и сплавов при облучении определяется потоками междоузельных атомов и вакансий на стоки (дислокации и вакансионные поры), а величина потоков зависит от вида концентрационных профилей собственных точечных дефектов вокруг стоков. В свою очередь стационарное распределение точечных дефектов в облучаемом образце определяется интенсивностью облучения, задающей скорость производства радиационных точечных дефектов, уходом точечных дефектов на стоки и их исчезновением в объеме образца за счет взаимной рекомбинации. Поэтому задача корректного учета рекомбинации при проведении теоретических оценок скорости радиационной ползучести весьма актуальна. Тем более что пока нет прямых экспериментальных методов выявления роли рекомбинации в таких процессах.

Проблемой учета рекомбинации при вычислении скорости радиационно-индуцированной деформации металлов начали заниматься довольно давно [2], и к настоящему времени имеется около десятка теоретических работ, посвященных этому вопросу [2-10]. Тем не менее общего решения пока не получено, ибо в каждой из упомянутых работ рассмотрены либо предельные случаи очень слабой или очень сильной рекомбинации, либо использованы неоправданные предположения. Прежде чем перейти к формулировке задачи, решаемой в настоящей работе, кратко проанализируем результаты предыдущих исследований [2-10].

В [2] рекомбинация учитывалась при расчете усредненных концентраций междоузельных атомов C_I^0 и вакансий C_V^0 в стационарном состоянии. С этой целью были записаны и решены уравнения баланса для C_I^0 и C_V^0 , в которые был включен член $\alpha C_I^0 C_V^0$, учитывающий рекомбинацию

$$G - D_I C_I^0 k_I^2 - \alpha C_I^0 C_V^0 = 0, \quad (1)$$

$$G' - D_V C_V^0 k_V^2 - \alpha C_I^0 C_V^0 = 0. \quad (2)$$

Здесь G — скорость образования междоузельных атомов за счет облучения; G' — скорость образования вакансий при облучении с учетом термической эмиссии вакансий от всех стоков; D_β — коэффициент диффузии точечных дефектов β ($\beta = I$ соответствует междоузельным атомам, $\beta = V$ — вакансиям); k_β^2 — суммарная интенсивность стоков дислокаций ($k_\beta^{(d)2} = Z_\beta \rho_d$) и пор ($k_\beta^{(v)2} = 4\pi Y_\beta r_v N_v$) для точечных дефектов β

$$k_\beta^2 = Z_\beta \rho_d + 4\pi Y_\beta r_v N_v, \quad (3)$$

где Z_β и Y_β — параметры, характеризующие эффективность поглощения точечных дефектов β дислокацией и порой соответственно; r_v — средний радиус поры; N_v — их плотность; ρ_d — плотность дислокаций.

Уравнения (1) и (2) алгебраические. Они решаются точно. Решение имеет вид

$$C_\beta^0 = \frac{G}{D_\beta k_\beta^2} F_\beta(\eta, \zeta), \quad (4)$$

где

$$F_I(\eta, \zeta) = \frac{2}{\eta} \left\{ [(1 + \zeta)^2 + \eta]^{1/2} - (1 + \zeta) \right\}, \quad (5)$$

$$F_V(\eta, \zeta) = \frac{2}{\eta} \left\{ [(1 + \zeta)^2 + \eta]^{1/2} - (1 - \zeta) \right\}, \quad (6)$$

$$\eta = \frac{4\alpha G}{k_I^2 k_V^2 D_I D_V}, \quad (7)$$

$$\zeta = \frac{(G - G')\eta}{4G}. \quad (8)$$

Из (4)–(8) видно, что $F(\eta) < 1$, следовательно, за счет рекомбинации концентрация C_β^0 понижается, что по мнению авторов [2] должно

было приводить к уменьшению скорости радиационной ползучести и распухания.

Однако ясно, что принятый в [2] подход односторонен: он не учитывает влияния рекомбинации на изменение концентрации собственных точечных дефектов (СТД) вблизи стоков и, следовательно, на эффективности поглощения стоками СТД. Первый шаг в указанном направлении был сделан в работах [3,4]. В [3] разработана методика расчета сил стоков дислокаций и пор с учетом рекомбинации по теории возмущений. Рекомбинация считается малым возмущением. Концентрации СТД с учетом рекомбинации записываются в виде

$$C_{\beta} = C_{\beta}^{(0)} + C_{\beta}^{(1)}, \quad (9)$$

где $C_{\beta}^{(0)}$ — концентрация точечных дефектов β в отсутствие рекомбинации, а поправка $C_{\beta}^{(1)}$ пропорциональна α .

Членами более высокого порядка по α пренебрегают. Записываются и решаются диффузионные уравнения для поправок $C_{\beta}^{(1)}$ в модели эффективной среды, когда выбранный сток внедряется в среду, содержащую все типы стоков, равномерно “размазанные” в пространстве. В итоге получены поправки, пропорциональные α , к силе стоков и к скорости распухания. На основании полученных результатов сделан вывод, что учет рекомбинации дает поправку к скорости распухания \dot{S} не более 5%, поэтому в рутинных расчетах рекомбинацией можно пренебречь.

Другой путь учета рекомбинации при расчете сил стоков дислокаций и пор и скорости распухания избрал Хейнс [4]. Он не стал использовать теорию возмущений, а включил рекомбинацию в расчетную схему сил стоков по методу, детально разработанному ранее в [11] при учете поправок от влияния других стоков. Решались диффузионные уравнения для СТД в модели поглощающей среды без учета дрейфовых членов

$$D_V \nabla^2 C_V + G' - D_V k_V^2 C_V - \alpha C_I C_V = 0, \quad (10)$$

$$D_I \nabla^2 C_I + G - D_I k_I^2 C_I - \alpha C_I C_V = 0. \quad (11)$$

Основное приближение, использованное Хейнсом, заключается в том, что при решении уравнения (10) для вакансий он пренебрегает пространственным изменением концентрации междоузельных атомов, положив $C_I = \text{const}$, а при решении уравнения (11) для междоузельных атомов полагает $C_V = \text{const}$. Каких-либо обоснований этого предположения Хейнс не приводит, а возражения возникают серьезные, ибо силы стоков определяются потоками СТД на границах стоков, т.е. как раз пространственной неоднородностью концентрационного профиля СТД, которая вблизи границ стоков весьма значительна. В итоге в [4] получены выражения для сил стоков, которые годятся для описания как слабой, так и сильной рекомбинации. Расчет скорости распухания с учетом и без учета рекомбинации показал, что эффект от рекомбинации весьма мал — составляет несколько процентов.

Численный расчет влияния рекомбинации на силы стоков дислокаций и пор был проделан в работах [5,6], однако в них было использовано необоснованное предположение о том, что силы стоков выражаются через средние значения концентраций C_β и произведений концентраций $C_I C_V$ точечных дефектов в ячейке, приходящейся на выбранный сток, а не через потоки СТД на стоки, поэтому справедливость результатов расчетов вызывает сомнение. Положительным моментом в этих работах является то, что авторы ввели понятие о средней длине свободного пробега СТД относительно рекомбинации и на основании сравнения этой величины с размером расчетной ячейки, определяемым плотностью стоков, выделили области, в которых гибель СТД происходит преимущественно или за счет рекомбинации, или на стоках.

В работе [7] наряду с изученным ранее [2] случаем слабой рекомбинации рассмотрен случай предельно сильной рекомбинации, и получены приближенные аналитические решения уравнений диффузии СТД с дрейфовым членом

$$D_\beta \left(\nabla^2 C_\beta + \frac{1}{k_b T} \nabla C_\beta \nabla E_\beta^{(d)} \right) - \alpha C_I C_V + G = 0, \quad (12)$$

где k_b — постоянная Больцмана, T — температура, $E_\beta^{(d)}$ — энергия упругого взаимодействия точечного дефекта β с дислокацией

$$E_\beta^{(d)} = \frac{\mu b(1+\nu)\Omega_\beta}{3\pi(1-\nu)} \frac{\sin \vartheta}{r}. \quad (13)$$

Здесь b — модуль вектора Бюргера, μ — модуль сдвига, r и ϑ — цилиндрические координаты, связанные с дислокацией, ν — коэффициент Пуассона, Ω_β — релаксационный объем точечного дефекта β . Были использованы граничные условия, принятые в работе [12]: на ядре дислокации поддерживается равновесная концентрация СТД, а на половине расстояния между дислокациями C_β определяется интенсивностью облучения и силой стоков. Показано, что в случае сильной рекомбинации, когда влиянием стоков можно пренебречь, в выражении для эффективности поглощения СТД дислокацией Z_β среднее расстояние между дислокациями заменяется на эффективную длину свободного пробега СТД относительно рекомбинации. Сделаны количественные оценки, из которых следует, что случай сильной рекомбинации может иметь место при низких температурах и малых плотностях дислокаций. На основании этих оценок в работе [8] приведена диаграмма в координатах интенсивность стоков–температура, на которой отмечены области температур и интенсивностей стоков, в которых основными процессами гибели СТД являются их рекомбинация или захват различными стоками. В работе [10] обращено внимание на то, что вакансионное распухание определяется не абсолютными величинами потоков междоузельных атомов и вакансий на стоки, а их разностями, и предложен метод приближенного аналитического определения этих разностей с учетом рекомбинации. Показано, что в предельном случае сильной рекомбинации решение для Z_β сводится к известному ранее [7].

Отметим также работы [13-15], в которых подчеркнута необходимость самосогласованного подхода к решению задачи определения концентрационных профилей СТД вблизи стоков разного типа, потоков на стоки и скорости радиационного распухания с учетом рекомбинации; сформулирована система согласованных уравнений и обсуждены физические допущения, использование которых позволяет получить приближенное аналитическое решение проблемы; приведены результаты аналитических расчетов потоков СТД на дислокацию, выполненных в условиях, приближающихся к самосогласованным.

Подводя итоги обсуждения цитированных работ, подчеркнем, что решение задачи учета рекомбинации при расчете скоростей радиационной ползучести и распухания далеко от завершения. Основная сложность состоит в том, что диффузионные уравнения для СТД, включающие в себя рекомбинационный член $\alpha C_I C_V$, становятся нелинейными и в общем случае не имеют аналитических решений. Поэтому неудивительно, что корректное решение задачи было получено лишь в предельных случаях слабой и сильной рекомбинации, когда можно использовать методы теории возмущений [2,7]. Ясно, что в общем случае произвольной рекомбинации задача может быть решена лишь численными методами, позволяющими рассчитывать как концентрационные профили СТД вблизи стоков, так и потоки СТД через поверхность стоков, через которые непосредственно выражаются параметры Z_β, Y_β , а также скорость радиационно-стимулированной деформации (радиационной ползучести и распухания). И наконец, численные методы дают возможность провести самосогласованный расчет концентраций СТД и параметров Z_β, Y_β , изначально входящих в решаемую систему уравнений диффузии СТД и в граничные условия. С учетом сказанного в настоящей работе с использованием численных методов проведен самосогласованный расчет концентрационных профилей СТД вблизи дислокаций и пор, потоков СТД на стоки, параметров Z_β, Y_β и скорости радиационной ползучести в общем случае произвольной рекомбинации.

Основные соотношения

Рассмотрим модельный металлический образец с кубической решеткой, подверженный воздействию облучения интенсивностью G (смещений на атом в секунду) и растягивающего напряжения σ . Будем считать, что в нем содержатся прямолинейные краевые дислокации плотностью ρ_d , ориентированные вдоль осей x_i , связанных с кристаллографическими направлениями $\langle 100 \rangle$, а также вакансионные поры сферической формы со средним радиусом r_v и плотностью N_v . Под воздействием сдвиговых компонент напряжения $\tau_{kl} \equiv \tau$ соответствующим образом ориентированные дислокации скользят на некоторое расстояние $L(\tau)$ вплоть до остановки на препятствиях. Затем они преодолевают эти препятствия за счет переползания, поглощая точечные дефекты, выходят в новую плоскость скольжения и снова продвигаются на расстояние $L(\tau)$. Таким образом осуществляется процесс ползучести со скоростью, даваемой формулой [13]

$$\dot{\epsilon} = \frac{L(\tau)}{3\lambda} \rho_d \left[Z_I D_I C_I^0 - Z_V D_V (C_V^0 - C_V^{eq}) \right], \quad (14)$$

где λ — средний размер дефектов-барьеров, преодолеваемых дислокациями; выражение для параметра Z_β имеет вид

$$Z_\beta = \frac{J_\beta^{(d)} \Omega}{D_\beta (C_\beta^0 - C_\beta^{eq})}, \quad (15)$$

$J_\beta^{(d)}$ — поток точечных дефектов на дислокацию, Ω — атомный объем, C_β^{eq} — термически равновесная концентрация точечных дефектов β (величиной C_I^{eq} обычно пренебрегают по сравнению с C_I^0).

Как видно из (14), скорость ползучести определяется отношением L/λ , плотностью дислокаций и разностью потоков междоузельных атомов и вакансий на дислокации (выражение в квадратных скобках). Величины ρ_d и λ задаются дефектной структурой исследуемого материала; параметр L рассчитывается методом компьютерного моделирования по схеме, описанной в [14], или вычисляется по формуле

$$L(\tau) = A \exp\left(B \frac{\tau}{\tau_{cr}}\right), \quad (16)$$

где τ_{cr} — критическое напряжение сдвига; A и B — коэффициенты, значения которых для различных конкретных ситуаций определены в [14] на основании моделирующих расчетов и сведены в таблицу.

Таким образом, центральной проблемой при расчете скорости радиационной ползучести является определение потоков СТД на дислокацию. Эти потоки могут быть вычислены численным методом, если известны стационарные распределения СТД вокруг дислокаций. Последние находятся путем решения системы диффузионных уравнений для СТД с учетом их рекомбинации и взаимодействия с упругими полями стоков. Для решения этой проблемы используются различные приближения и модели. Они подробно обсуждены в работе [15], 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 образцу; 2) модель периодического расположения стоков, согласно которой образец 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 в 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; размер ячейки определяется средним расстоянием между дислокациями.

Исходная система уравнений диффузии для СТД имеет вид

$$D_I \nabla^2 C_I + \frac{D_I}{k_b T} \nabla C_I \nabla E_I^d + G - D_I k_I^{(v)2} C_I - \alpha C_I C_V = 0, \quad (17)$$

$$D_V \nabla^2 C_V + \frac{D_V}{k_b T} \nabla C_V \nabla E_V^d + G' - D_V k_V^{(v)2} C_V - \alpha C_I C_V = 0. \quad (18)$$

Чтобы ее решить, необходимо задать граничные условия. Будем считать, что на ядре дислокации (при $r = r_c$) поддерживается равновесная концентрация СТД

$$C_\beta(r_c) = C_\beta^{eq} \exp\left(-\frac{E_\beta^{(d)}(r_c)}{k_b T}\right), \quad (19)$$

а на внешней границе ячейки (при $r = R_d$, где R_d — половина среднего расстояния между дислокациями) концентрация $C_\beta(R_d)$ равна значению C_β^0 (см. формулу (4)), определяемому из системы уравнений баланса (1), (2) для СТД в поглощающей среде с равномерно “размазанными” дислокациями и порами.

Для численного интегрирования уравнений (17), (18) используем разностную схему. В цилиндрической системе координат, связанной с дислокацией 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 (17), (18) разностными отношениями в узлах сетки, приходим к уравнениям в конечных разностях, которые необходимо решить в $(N_1 - 2)N_2$ узлах сетки (значения C_β в $2N_2$ узлах сетки на внешней и внутренней границах расчетной ячейки представляют собой граничные условия). Отметим, что полученные уравнения представляют систему нелинейных уравнений. Она решается численно итерационным методом Ньютона (см., например, [16]). Описанный алгоритм позволяет получить решения исходной системы уравнений (17), (18) с заданной точностью за приемлемое время.

Однако это не есть полное решение поставленной задачи. Дело в том, что в исходную систему уравнений (17), (18) и в уравнения баланса (1), (2) входят величины $k_\beta^{(d)2}$, $k_\beta^{(v)2}$, содержащие изначально неизвестные эффективности поглощения точечных дефектов дислокациями Z_β и порами Y_β . Поэтому необходимо искать самосогласованное решение. Процедура самосогласования при численном интегрировании уравнений (17), (18) включает в себя следующие этапы.

1. Решаются уравнения (1), (2) с использованием затравочных значений Z_β и Y_β . При этом вычисляются концентрации C_β^0 , являющиеся граничными условиями для системы уравнений (17), (18).

2. Интегрируется система уравнений (17), (18) из которых сначала определяются стационарные распределения точечных дефектов β в окрестности дислокации, затем путем численного дифференцирования рассчитываются их потоки J_β на дислокацию, позволяющие вычислить величины Z_β на первом итерационном шаге.

3. По аналогии с (17), (18) записывается система уравнений для расчета концентраций C_β в сферической ячейке вокруг поры.

Величины $E_\beta^{(d)}$ заменяются на $E_\beta^{(v)}$ — обусловленную внешней нагрузкой энергию взаимодействия дефектов β с порой. В пределах расчетной ячейки равномерно “размазанными” считаются дислокации, поэтому величины $k_\beta^{(v)2}$ заменяются на $k_\beta^{(d)2}$. За пределами ячейки кристалл моделируется поглощающей средой с равномерно “размазанными” дислокациями и порами. Граничные условия задаются по аналогии с рассмотренным выше случаем для дислокации: на поверхности поры ($r = r_v$) поддерживается равновесная концентрация собственных точечных дефектов β , на внешней границе ячейки (при $r = R_v$, где R_v — половина среднего расстояния между порами) концентрации C_β^0 определяются из уравнений (1), (2). Численное решение системы уравнений для C_β в сферической ячейке вокруг поры проводится с использованием сферической системы координат, связанный с порой, по той же расчетной схеме, которая была использована для случая дислокации. В результате определяется стационарное распределение дефектов β в окрестности поры, рассчитываются их потоки $J_\beta^{(v)}$ на пору, после чего по формуле

$$Y_\beta = \frac{J_\beta^{(v)} \Omega}{4\pi r_v D_\beta (C_\beta^0 - C_\beta^{eq})} \quad (20)$$

вычисляются значения $Y_\beta^{(1)}$ 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 самосогласованные значения интенсивностей стоков пор и дислокаций, параметров Z_β , Y_β , стационарных концентраций точечных дефектов в окрестности стоков C_β и на границах ячеек C_β^0 . Используя эти данные, по формуле (14) определяем искомую скорость радиационной ползучести.

Результаты расчетов и обсуждение

Используя вычислительную схему, изложенную в предыдущем разделе, прежде всего выясним, каким образом рекомбинация междоузельных атомов и вакансий сказывается на их концентрационном профиле вокруг дислокаций и пор при разных значениях температуры и сил стоков. В расчетах будем использовать параметры материала, отвечающего сталям и сплавам на основе железа: $b = 2.48 \cdot 10^{-10}$ м, $\mu = 8 \cdot 10^4$ МПа, $\nu = 0.3$, $\Omega = 1.2 \cdot 10^{-29}$ м³, $r_c = 3b$, $\Omega_I = 1.1 \cdot \Omega$, $\Omega_V = -0.5 \Omega$, $D_I^0 = 10^{-7}$ м²/с, $D_V^0 = 0.58 \cdot 10^{-4}$ м²/с, $E_I^f = 3$ эВ, $E_V^f = 1.6$ эВ, $E_I^m = 0.2$ эВ, $E_V^m = 1.3$ эВ (D_β^0 — предэкспоненциальные множители у коэффициентов диффузии D_β , E_β^f и E_β^m — энергии образования и миграции точечных дефектов β). Кроме того, положим $G = 10^{-3}$ смещений на атом в секунду, $N_0 = 3.16 \cdot 10^{21}$ м⁻³, $r_v = 5 \cdot 10^{-9}$ м. Температуру будем менять в интервале от 540 до 900 К (или от 0.3 до 0.5 $T_{пл}$), плотность дислокаций от $3.16 \cdot 10^{13}$ до $3.16 \cdot 10^{15}$ м⁻².

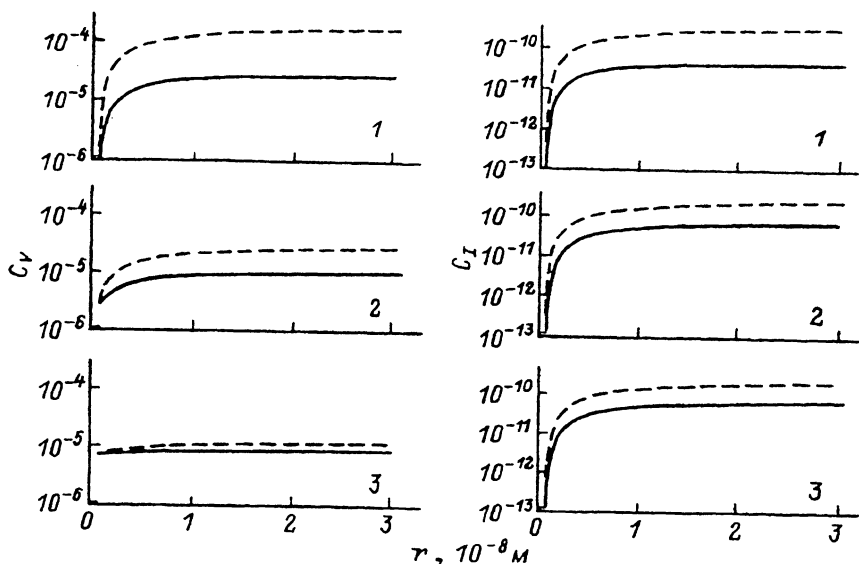


Рис. 1. Зависимость концентрации вакансий и междоузельных атомов от расстояния до дислокации, рассчитанная с учетом (сплошные линии) и без учета рекомбинации (штриховые линии) для фиксированной плотности дислокаций $\rho_d = 3.16 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ и различных температур $T = 660$ (1), 720 (2), 780 К (3).

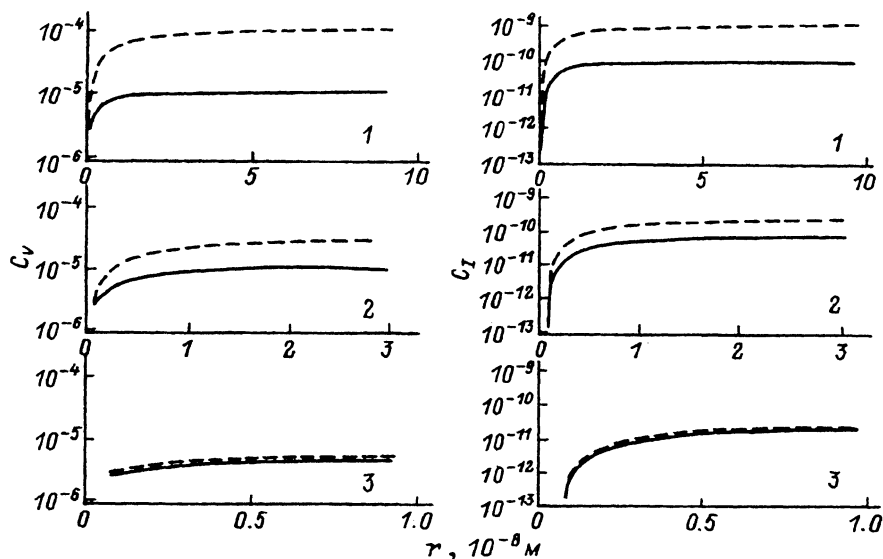


Рис. 2. Зависимость концентрации вакансий и междоузельных атомов от расстояния до дислокации, рассчитанная с учетом (сплошные линии) и без учета рекомбинации (штриховые линии) для фиксированной температуры $T = 720$ К и различной плотности дислокаций $\rho_d = 3.16 \cdot 10^{13}$ (1), $3.16 \cdot 10^{14}$ (2), $3.16 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-2}$ (3).

На рис. 1 приведены типичные зависимости концентрации междуузельных атомов и вакансий от расстояния до ядра дислокаций (для $\vartheta = 0^0$) при фиксированных плотностях дислокаций и разных температурах, а на рис. 2 — те же зависимости, но при фиксированной температуре и разных значениях ρ_d . Соответствующие кривые, описывающие концентрационные профили СТД вокруг пор, выглядят подобным образом, поэтому мы их здесь не приводим.

Как видно из рис. 1 и 2, учет рекомбинации приводит к двум эффектам. Во-первых, снижается концентрация СТД в объеме образца (в том числе C_β^0), а во-вторых, уменьшается наклон кривых $C_\beta(r)$ на поверхности стока, т.е. уменьшаются потоки СТД на стоки. Причем тот и другой эффекты усиливаются с понижением температуры и плотности дислокаций.

Поскольку поток точечных дефектов $J_\beta^{(d)}$ входит в числитель выражения для Z_β , а концентрация — в знаменатель и обе эти величины уменьшаются при учете рекомбинации, то нельзя сказать заранее, уменьшатся или увеличатся Z_I и Z_V благодаря рекомбинации. Необходим численный расчет. Мы его проделали для разных значений ρ_d и T . Как оказалось, Z_I и Z_V во всех случаях увеличиваются при учете рекомбинации. Этот вывод качественно согласуется с результатами исследований других авторов [3-5].

Что касается влияния рекомбинации на скорость радиационной ползучести $\dot{\epsilon}$, то из формул (14), (15) следует, что $\dot{\epsilon}$ зависит лишь от разности потоков ($J_I^{(d)} - J_V^{(d)}$), так как члены $D_\beta(C_\beta^0 - C_\beta^{eq})$ в квадратных скобках (14) сокращаются при подстановке выражений для Z_I и Z_V в формулу (14). Поэтому существенным является то, в каком направлении изменяется разность ($J_I^{(d)} - J_V^{(d)}$) при учете рекомбинации. Чтобы выяснить этот вопрос, был проделан численный расчет потоков $J_I^{(d)}$ и $J_V^{(d)}$ с использованием данных о концентрационных профилях СТД вокруг дислокаций. Как оказалось, при учете рекомбинации поток междуузельных атомов на дислокации уменьшается сильнее, чем поток вакансий, в результате чего скорость радиационной ползучести падает.

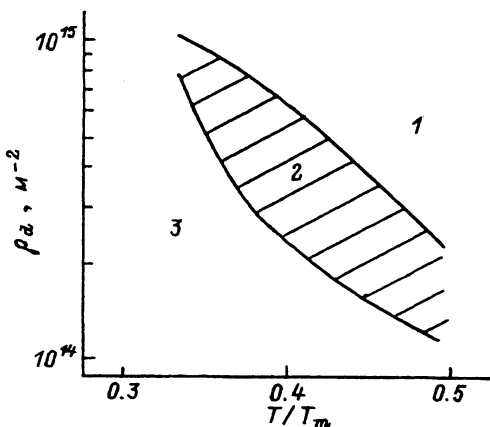


Рис. 3. Области плотностей дислокаций и температур, в которых при вычислении скорости радиационной ползучести можно пренебречь влиянием рекомбинации (поле 1), необходимо учитывать как уход СТД на стоки, так и их гибель за счет рекомбинации (поле 2); определяющую роль в гибели СТД играет рекомбинация (поле 3) ($T_{пл}$ — температура плавления).

Величина эффекта падения скорости радиационной ползучести за счет рекомбинации зависит от температуры и суммарной силы стоков СТД, а именно роль рекомбинации возрастает с понижением температуры и уменьшением силы стоков. Чтобы оценить величину эффекта количественно, были проделаны численные расчеты скорости радиационной ползучести как с учетом, так и без учета рекомбинации в широком интервале температур и сил стоков, при фиксированном $k_{\beta}^{(v)2}$, когда, согласно (3), изменение суммарной силы стоков k_{β}^2 определяется изменением плотности дислокаций. С учетом сказанного была построена диаграмма в координатах $\rho_d - T$, на которой выделены три области, в одной из которых (верхнее поле 1 на рис. 3) при расчете скорости ползучести влиянием рекомбинации можно пренебречь; в другой (заштрихованная область 2) необходимо учитывать как уход СТД на стоки, так и их гибель за счет рекомбинации; в третьей (нижнее поле 3) определяющую роль играет рекомбинация. Границы между областями определены из следующих соображений: если через $\dot{\epsilon}_0$ обозначить скорость радиационной ползучести, рассчитанную без учета рекомбинации, то при выполнении неравенства $(\dot{\epsilon}_0 - \dot{\epsilon}) \ll \dot{\epsilon}_0$ рекомбинацией можно пренебречь, а при $\dot{\epsilon} \ll \dot{\epsilon}_0$ доминирует эффект рекомбинации. Исходя из этого были определены границы между областями 1 и 2, 2 и 3.

Ясно, что использование аналитических оценок Z_{β} и $\dot{\epsilon}$ на основе приближенных решений диффузионных уравнений для СТД с учетом рекомбинации, полученных в работах [3,7], может быть оправдано лишь в точках на рис. 3, попадающих в области 1 и 3, причем с тем большей степенью точности, чем дальше они лежат от области 2. Что касается области 2, то здесь аналитические решения не проходят и необходимо использовать численные методы расчета потоков СТД на стоки, параметров Z_{β} и Y_{β} и скорости радиационной ползучести.

Согласно [17], плотность дислокаций в реакторных сталях при облучении флюенсом выше $5 \cdot 10^{26}$ н/м² ($E > 0.1$ МэВ) выходит на уровень $6 \cdot 10^{14}$ м⁻² независимо от исходного состояния материала (холоднодеформированный образец или отожженный). Поэтому значение $\rho_d = 6 \cdot 10^{14}$ м⁻² можно считать типичным. Из рис. 3 следует, что для такой величины ρ_d и принятого в данной работе значения силы стоков пор эффектом рекомбинации в расчетах скорости радиационной ползучести можно пренебречь для температуры выше $0.40 T_{пл}$. В температурном интервале $(0.35 - 0.40) T_{пл}$ необходимо учитывать как уход СТД на стоки, так и их гибель при рекомбинации. Наконец, при более низких температурах превалирует влияние рекомбинации.

Список литературы

- [1] *Ибрагимов Ш.Ш., Курсанов В.В., Пятилетов Ю.С.* Радиационные повреждения металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 240 с.
- [2] *Brailsford A.D., Bullough R.* // *Phil. Mag.* 1973. Vol. 27. N 1. P. 49-64.
- [3] *Brailsford A.D., Matthews J.R., Bullough R.* // *J. Nucl. Mater.* 1979. Vol. 79. N 1. P. 1-13.
- [4] *Hayns M.R.* // *J. Nucl. Mater.* 1979. Vol. 79. N 3. P. 323-337.
- [5] *White R.J., Fisher S.B.* // *Rad. Eff.* 1979. Vol. 41. N 1. P. 25-31.
- [6] *White R.J., Fisher S.B., Miller K.M.* // *Rad. Eff.* 1979. Vol. 42. N 1. P. 145-152.
- [7] *Горбатов Г.З.* // *ФММ.* 1982. № 53. Вып. 6. С. 1058-1064.

- [8] Конобеев Ю.В. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. 1984. Вып. 1 (29), 2 (30). С. 172-186.
- [9] Голубов С.И. // ФММ. 1987. Т. 64. № 5. С. 879-885.
- [10] Голубов С.И. // ФММ. 1989. Т. 67. № 1. С. 36-43.
- [11] Brailsford A.D., Bullough R., Hauns M.R. // J. Nucl. Mater. 1976. Vol. 60. N 2-3. P. 246-256.
- [12] Маргвелашвили И.Г., Саралидзе З.К. // ФТТ. 1973. Т. 15. Вып. 9. С. 2665-2668.
- [13] Самсонидзе Г.Г., Трушин Ю.В. // ЖТФ. 1988. Т. 58. Вып. 1. С. 42-51.
- [14] Трушин Ю.В. // ЖТФ. 1992. Т. 62. Вып. 4. С. 1-12.
- [15] Трушин Ю.В. // ЖТФ. 1992. Т. 62. Вып. 4. С. 13-22.
- [16] Пятилетов Ю.С. // Изв. АН КазССР. Сер. физ.-мат. 1989. № 2. С. 8-12.
- [17] Ибрагимова Д.Ш., Карпиков А.Н., Назырова Д.А., Пятилетов Ю.С., Сушкова Н.С., Тюпкина О.Г. // Препринт ИАЭ. № 1-94. Алма-Ата, 1994. 32 с.
- [18] Brailsford A.D., Bullough R. // Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1981. Vol. A302. N 1465. P. 87-137.
- [19] Базвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука. 1973. 632 с.
- [20] Brager H.R., Garner F.A., Gilbert E.R., Flinn J.E., Wolfer W.G. // Proc. Intern. Conf. on Radiation Effects in Breeder Reactor Structural Materials. Scottsdale. 1977. P. 727-755.
-