

05

© 1991 г.

## ОЦЕНКА СТАЦИОНАРНОГО РАДИАЦИОННОГО РАСПУХАНИЯ ДВУХФАЗНОГО МАТЕРИАЛА

Ю. В. Трушин

Проведены оценки скорости радиационного распухания материала с различными типами стоков, исходя из стационарных потоков точечных дефектов. Рассмотрено влияние выпадающих преципитатов на снижение скорости радиационного распухания.

Теоретические расчеты и оценки радиационного распухания материалов выполнялись разными методами [1-12]. В качестве одного из основных механизмов, приводящих к радиационному распуханию, рассматривался и активно обсуждался [5, 6, 13-16] механизм преференса, т. е. предпочтительного поглощения краевыми дислокациями межузельных атомов по сравнению с вакансиями. Основные оценки сделаны, как правило, для одноатомных материалов.

Обширные экспериментальные данные свидетельствуют о существенной роли в явлении распухания гетерогенности состава материала, состояния формирующих выделений вторичных фаз и т. д. [17-22]. В аналитических расчетах [16, 23-27] показано влияние неоднородностей в распределении точечных радиационных дефектов на радиационное распухание, а также предложена модель аномальной рекомбинации разноименных дефектов в распадающихся под облучением твердых растворах.

Следует сразу же заметить, что под радиационным распуханием материала подразумевается увеличение его объема  $\Delta V$  при облучении, т. е.  $\Delta V = V - V_0$ , где  $V$  и  $V_0$  — новый и первоначальный объемы материала соответственно.

В настоящей работе предлагается сравнительно простая оценка скорости радиационного распухания материала (в том числе и двухфазного) в режиме установившихся стационарных потоков точечных дефектов. Результаты такого подхода позволяют выявить вклады разных стоков (дислокаций, пор, ловушек, преципитатов) в радиационное распухание и тем самым дают возможность качественно увидеть роль каждого из этих стоков.

Рассмотрим сначала баланс собственных точечных дефектов в простейшем случае одноатомного кристалла, в котором имеются следующие стоки: поры ( $q=V$ ) нейтральные, дислокации ( $q=D$ ) преференциальные, ловушки ( $q=Q$ ), которые могут быть либо нейтральные, либо преференциальные.

Поскольку в [28] показано, что при облучении материалов в реакторе средние концентрации  $\bar{C}_j(t)$  собственных точечных дефектов как функции времени  $t$  достаточно быстро выходят на свои стационарные значения (т. е.  $\partial \bar{C}_j(t)/\partial t = 0$ ), то будем в дальнейшем работать, как это делает большинство авторов в [1-10], только со средними стационарными концентрациями  $\bar{C}_j$  дефектов  $j$  ( $j=i$  — межузлия,  $j=v$  — вакансии). Здесь слово «средние» обозначает «средние по пространству». В таком случае запишем уравнения баланса для пере-  
сыщений  $C_j = \bar{C}_j - C_j^e$  в виде (рис. 1)

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = g_i - R_{i0} - G_{iV} - G_{iD} - G_{iQ} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = g_v - R_{i0} - G_{vV} - G_{vD} - G_{vQ} = 0, \quad (2)$$

где  $C_j^e$  — термодинамически равновесная концентрация дефектов  $j$ ,  $g_j$  — скорость генерации точечных дефектов типа  $j$ ,  $R_{i'}$  — скорость взаимной рекомбинации межузлий и вакансий,  $G_{j,q}$  — скорость ухода дефектов на стоки  $q$ .

Введем по аналогии с [10] величину эффективного дислокационного преференса

$$B_D = (G_{i,D} - G_{v,D})/G_{i,D}. \quad (3)$$

Можно показать [11, 12], что величина  $G_{j,D}$  имеет вид

$$G_{j,D} \simeq \alpha_D^j \rho_D D_j C_j, \quad (4)$$

где  $\alpha_D^j$  — преференциальный множитель для дислокации [13, 14],  $\rho_D$  — плотность дислокаций,  $D_j$  — коэффициент диффузии дефектов  $j$ .

Здесь намеренно для более простого сравнения с имеющимися оценками не учтен вклад неоднородного распределения дефектов  $j$  около дислокации [15, 16] в величину  $G_{j,D}$  в (4). Подставляя (4) в (3), имеем

$$B_D = \left[ \alpha_D^i - \alpha_D^v \frac{D_v C_v}{D_i C_i} \right] / \alpha_D^i. \quad (5)$$

Если  $D_v C_v = D_i C_i$  [10], то

$$B_D \approx (\alpha_D^i - \alpha_D^v) / \alpha_D^i. \quad (5a)$$

Определим величину скорости радиационного распухания в виде

$$\Delta \dot{V} = G_{v'v} - G_{i'v}. \quad (6)$$

Здесь не учитываются величины релаксации объемов точечных дефектов как в объеме материала, так и на стоках  $q$ . Детальнее об этом изложено в [11, 12]. Кроме того, в дальнейшем для однородного материала будем считать справедливым  $g_i \simeq g_v \simeq g$ .

Рассмотрим, как наличие ловушек ( $q=Q$ ) разных типов (нейтральные, преференциальные) или их отсутствие влияет на величину скорости радиационного распухания  $\Delta \dot{V}$ .

Пусть в материале отсутствуют стоки типа  $q=Q$  (случай I). Тогда уравнения (1), (2) принимают вид

$$g = R_{i'v}^I + G_{i'D}^I + G_{i'v}^I, \quad (7a)$$

$$g = R_{i'v}^I + G_{i'D}^I + G_{v'v}^I. \quad (7b)$$

Вычитая (7b) из (7a) и учитывая определения (3) и (6), запишем

$$\Delta \dot{V}^I = B_D G_{i'D}^I. \quad (8)$$

Складывая выражения (7) и подставляя в сумму (5), (6) и (8), имеем для скорости распухания одноатомного кристалла в случае I

$$\Delta \dot{V}^I = B_D (g - G_{i'v}^I - R_{i'v}^I). \quad (9)$$

Пусть теперь есть нейтральные ловушки  $q=Q$  (случай II). По определению нейтральности стока имеем

$$G_{i'Q}^{II} = G_{v'Q}^{II}. \quad (10)$$

Это означает, что ловушки фактически являются центрами рекомбинации межузлий и вакансий, т. е. происходит усиление рекомбинации по сравнению с обычной скоростью  $R_{i'}$ . Поэтому такое усиление можно записать в виде

$$G_{i'Q}^{II} = G_{v'Q}^{II} = \beta R_{i'}. \quad (10a)$$

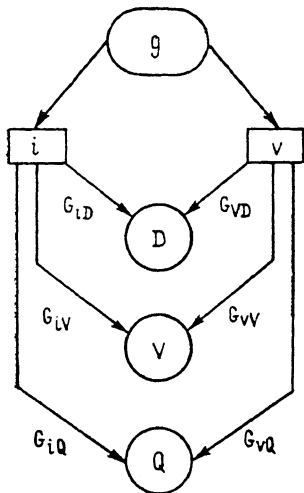


Рис. 1. Схема баланса потоков собственных точечных дефектов в одноатомном кристалле.

Приписывая верхний индекс II (см. (10)) величинам  $R_{i_v}$  и  $G_{i_q}$  в (1), (2) и (6), вычитая (2) из (1), а затем складывая их с учетом (3), (6), (10), получим для скорости распухания в случае II

$$\Delta \dot{V}^{II} = B_D [g - G_{i_v}^{II} - (1 + \beta) R_{i_v}^{II}]. \quad (11)$$

Из сравнения (9) и (11) уже видна роль нейтральных ловушек как центров рекомбинации в снижении скорости распухания.

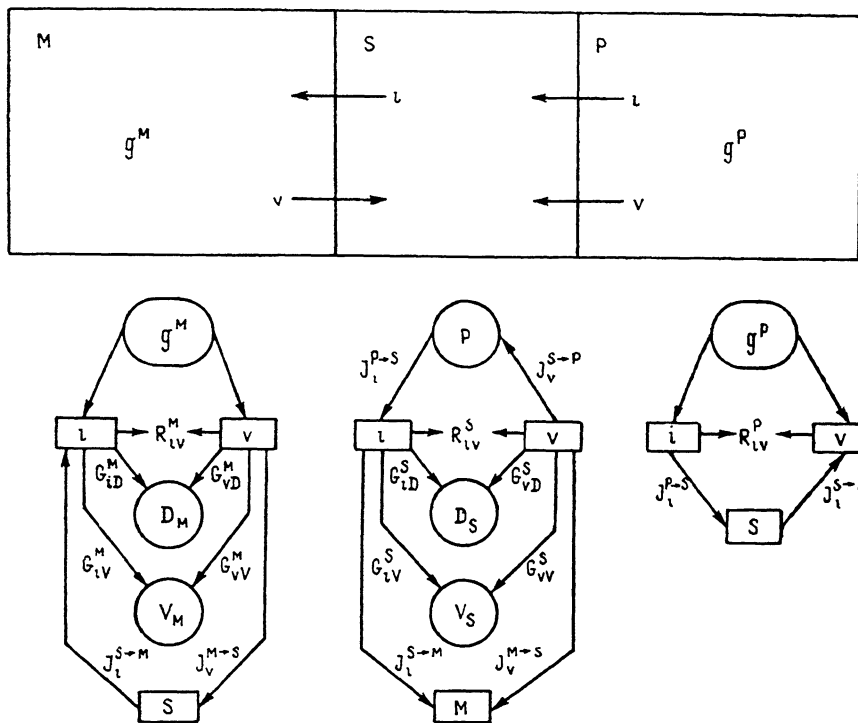


Рис. 2. Схема баланса потоков в разных фазах двухфазного материала, включая поверхность раздела  $S$  преципитат ( $P$ )—матрица ( $M$ ).

Пусть теперь ловушки — предпочтительные стоки (случай III). Тогда по аналогии с (3) определим их предпочтент в виде

$$B_Q = (G_{i_q}^{III} - G_{i_v}^{III}) / G_{i_q}^{III}. \quad (12)$$

Вычитая (2) из (1), учитывая (3), (6), (12) и подставляя в (1), имеем

$$\Delta \dot{V}^{III} = B_D (g - G_{i_v}^{III} - R_{i_v}^{III}) - (B_D - B_Q) G_{i_q}^{III}. \quad (13)$$

Величины  $B_D$  во всех трех случаях (I, II, III) будут одинаковы, если не учитывать неоднородности в распределении точечных дефектов около дислокаций и в приближении  $D_i C_i = D_v C_v$ .

Рассмотрим теперь материал, в котором помимо стоков в виде дислокаций и пор есть еще и преципитаты  $q=P$  с объемной долей  $v_P$ . Скорости генерации радиационных дефектов обозначим  $g^M$  в матрице и  $g^P$  в преципитате. Полагаем, что преципитаты малы по размерам и внутри них отсутствуют стоки в виде дислокаций и пор. Однако в преципитатах возможна рекомбинация вакансий и межузлий со скоростью  $R_{i_v}^P$  и выход на поверхность  $S$  преципитата с плотностью потоков  $J_j^{P \rightarrow S}$  дефектов.

Будем рассматривать поверхность  $S$  раздела преципитат ( $P$ )—матрица ( $M$ ) как отдельную фазу и запишем уравнения баланса для пересыщений  $C_j^F$  в трех фазах  $F=M, S, P$  (рис. 2) в матрице  $M$

$$\frac{\partial C_i^M}{\partial t} = (1 - v_P) g^M + \frac{S'}{a} J_i^{S \rightarrow M} - (1 - v_P) (G_{iD}^M + G_{iV}^M + R_{i\sigma}^M) = 0, \quad (14)$$

$$\frac{\partial C_a^M}{\partial t} = (1 - v_P) g^M - \frac{S'}{a} J_v^{M \rightarrow S} - (1 - v_P) (G_{\sigma D}^M + G_{\sigma V}^M + R_{i\sigma}^M) = 0, \quad (15)$$

на поверхности

$$\frac{\partial C_i^S}{\partial t} = \frac{S'}{a} (J_i^{P \rightarrow S} - J_i^{S \rightarrow M}) - S' (G_{iD}^S + G_{iV}^S + R_{i\sigma}^S) = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial C_a^S}{\partial t} = \frac{S'}{a} (J_v^{P \rightarrow S} + J_v^{M \rightarrow S}) - S' (G_{\sigma D}^S + G_{\sigma V}^S + R_{i\sigma}^S) = 0, \quad (17)$$

в преципитате  $P$

$$\frac{\partial C_i^P}{\partial t} = v_P g^P - \frac{S'}{a} J_i^{P \rightarrow S} - R_{i\sigma}^P = 0, \quad (18)$$

$$\frac{\partial C_a^P}{\partial t} = v_P g^P + \frac{S'}{a} J_v^{S \rightarrow R} - R_{i\sigma}^P = 0. \quad (19)$$

Здесь  $a$  — атомный параметр,  $S'$  — поверхностная доля границ раздела преципитат—матрица. Вычитая (19) из (18), получим, что

$$J_i^{P \rightarrow S} = -J_v^{S \rightarrow P}. \quad (20)$$

Однако

$$-J_v^{S \rightarrow P} = J_v^{P \rightarrow S}. \quad (20a)$$

Введем эффективный преференс дислокаций в поверхности по аналогии с (3) в виде

$$B_D^S = (G_{iD}^S - G_{\sigma D}^S) / G_{iD}^S, \quad (21)$$

а также скорость распухания за счет поверхности

$$\Delta \dot{V}_S = G_{\sigma V}^S - G_{iV}^S. \quad (22)$$

При этом для преференса дислокаций в матрице имеем выражение (3), а для скорости распухания за счет объема матрицы выражение (6), где вместо  $G_{i\sigma}$  запишем  $G_{i\sigma}^M$ .

Из (3), (6), (21) и (22) имеем

$$G_{iD}^F + G_{\sigma D}^F = (2 - B_D^F) G_{iD}^F, \quad (23)$$

$$G_{\sigma V}^F = G_{iV}^F + \Delta \dot{V}_F, \quad (24)$$

где  $F = M, S$ , а  $B_D^M = B_D$ .

По аналогии с (20) можно получить

$$J_i^{S \rightarrow M} = -J_v^{M \rightarrow S}. \quad (25)$$

Тогда из (16), (17) с учетом (20), (23)—(25) имеем

$$(1 - v_P) G_{iD}^M = (1 - v_P) (g^M - R_{i\sigma}^M - G_{iV}^M) + \frac{S'}{a} J_i^{P \rightarrow S} - S' (G_{iD}^S + R_{i\sigma}^S + G_{iV}^S). \quad (26)$$

Определим полную скорость распухания материала в виде

$$\Delta \dot{V} = (1 - v_P) \Delta \dot{V}_M + S' \Delta \dot{V}_S. \quad (27)$$

Тогда с учетом (6) и (22) имеем

$$\Delta \dot{V} = (1 - v_P) B_D G_{iD}^M + S' B_D^S G_{iD}^S. \quad (28)$$

Подстановка (26) в (28) с учетом (18) дает следующее выражение для скорости радиационного распухания двухфазного материала:

$$\Delta \dot{V} = (1 - \nu_p) B_D (g^M - G_{iD}^M - R_{iD}^M) - B_D (R_{iD}^P + S' R_{iD}^S - \nu_p g^P) + S' (B_D^S - B_D) G_{iD}^S - S' B_D G_{iD}^S. \quad (29)$$

Первое слагаемое в (29) описывает скорость распухания за счет изменения объема матрицы, так же как в (9), остальные слагаемые — за счет поверхности преципитатов. Причем во втором слагаемом в качестве генератора межузельных атомов и области их рекомбинации выступает объем преципитатов. Распухание за счет выхода межузельных атомов на дислокации поверхности описывает третье слагаемое. Последнее слагаемое дает вклад в снижение распухания за счет поглощения межузельных атомов поверхностными порами.

Знак третьего слагаемого в (29) определяется знаком разности  $B_D^S - B_D$ , которую можно записать в виде

$$B_D^S - B_D = \frac{G_{iD}^M}{G_{iD}^M} - \frac{G_{iD}^S}{G_{iD}^S}. \quad (30)$$

Из (30) видно, что знак  $B_D^S - B_D$  будет зависеть от дислокационной структуры в поверхности раздела. Например, если вектор Бюргерса дислокаций  $\mathbf{b}$

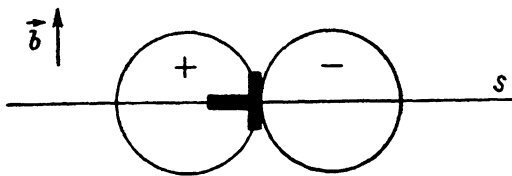


Рис. 3. Пример расположения дислокаций в поверхности раздела преципитат—матрица.

в поверхности ортогонален поверхности (рис. 3), то, используя (23), имеем  $G_{iD}^S/G_{iD}^S = 1 - B_D^S < 1$ , а  $G_{iD}^M/G_{iD}^M < 1$ . Следовательно, из (30) величина  $B_D^S - B_D < 0$ . Однако, как правило, вклад в  $\Delta \dot{V}$  третьего и четвертого слагаемых в (29) мал в силу малости  $S'$ .

Таким образом, сравнение полученных оценок (9), (11), (13), (29) для скорости распухания материала с разными стоками выявляет даже для средних стационарных концентраций без учета неоднородностей в распределении дефектов около стоков специфику воздействия на величину  $\Delta \dot{V}$  различных по своей природе стоков. Из полученных выражений для  $\Delta \dot{V}$  видна тенденция к снижению распухания при определенной структуре исследуемого материала. Учет эффектов неоднородного распределения точечных дефектов около стоков, как следует из [16, 23–27], может еще более усилить эту тенденцию.

### Список литературы

- [1] Harkness S. D., Che-Yu-Li // Proc. Symp. on Radiation Damage in Reactor Materials IAEA. Vienna, 1969. Vol. 2. P. 189.
- [2] Brailsford A. D., Bullough R. J. Nucl. Mater. 1972. Vol. 44. P. 121–138.
- [3] Bullough R., Nelson R. S. // Phys. Technol. 1974. Vol. 5. P. 29–67.
- [4] Koehler J. S. // J. Appl. Phys. 1975. Vol. 46. N 5. P. 2423–2429.
- [5] Heald P. T., Speigh H. V. // Acta Met. 1975. Vol. 29. P. 1389–1399.
- [6] Brailsford A. D., Bullough R., Hayns M. R. // J. Nucl. Mater. 1976. Vol. 60. P. 246–256.
- [7] Brailsford A. D., Bullough R. // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 69/70. P. 434–450.
- [8] Brailsford A. D. // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 78. P. 354–361.
- [9] Brailsford A. D. // J. Nucl. Mater. 1981. Vol. 102. P. 54–65.
- [10] Конобеев Ю. В. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика радиационных повреждений и рад. материаловедение. 1982. № 3 (22). С. 13–17.
- [11] Трушин Ю. В., Орлов А. Н. // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 7. С. 1302–1309.
- [12] Трушин Ю. В. // Вопросы теории дефектов в кристаллах. Л.: Наука, 1987. С. 133–144.
- [13] Маргвелашвили И. Г., Саралидзе З. К. // ФТТ. 1973. Т. 15. Вып. 9. С. 2665–2669.
- [14] Демин Н. А., Конобеев Ю. В., Толстикова О. В. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика рад. повреждений и рад. материаловедение. 1982. № 3 (22). С. 13–17.
- [15] Субботин А. В. // Атомная энергия. 1983. Т. 54. № 5. С. 342–346.
- [16] Самсонидзе Г. Г., Трушин Ю. В. // ЖТФ. 1988. Т. 58. Вып. 1. С. 42–51.
- [17] Bates Y. F., Powell R. M. // J. Nucl. Mater. 1981. Vol. 101. P. 200–213.
- [18] Brager H. R. // J. Nucl. Mater. 1973. Vol. 46. P. 134–154.

- [19] *Bramman J. I., Brown C.* // Proc. Int. Conf. «Irradiation Behaviour of Metallic Materials for Fast Reactor Core Componentes». France. 1979. P. 155.
- [20] *Little E. A.* // J. Nucl. Mater. 1979. Vol. 87. P. 25—39.
- [21] *Arkell D. R., Williams T. M.* // J. Nucl. Mater. 1978. Vol. 74. P. 144—150.
- [22] *Горьнин И. В., Паршин А. М.* // Атомная энергия. 1981. Т. 50. № 5. С. 319—324.
- [23] *Самсонидзе Г. Г., Орлов А. Н., Трушин Ю. В.* // ФММ. 1983. Т. 55. № 4. С. 676—684.
- [24] *Трушин Ю. В., Помпе В.* // Письма в ЖТФ. 1985. Т. 11. Вып. 7. С. 393—397.
- [25] *Orlov A. N., Samsonidze G. G., Trushin Yu. V.* // Rad. Effects. 1986. Vol. 97. P. 45—66.
- [26] *Орлов А. Н., Самсонидзе Г. Г., Трушин Ю. В.* // ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 7. С. 1311—1318.
- [27] *Трушин Ю. В.* ЖТФ. 1987. Т. 57. Вып. 2. С. 226—231.
- [28] *Печенкин В. А.* // ЖТФ. 1982. Т. 52. Вып. 9. С. 1712—1720.

Физико-технический институт  
им. А. Ф. Иоффе АН СССР  
Ленинград

Поступило в Редакцию  
20 февраля 1990 г.