

01; 05.3

© 1991

ФЛУКТУАЦИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ ДЕФЕКТОВ И ПЛАВЛЕНИЕ ОБЛУЧАЕМОГО МЕТАЛЛА

Ю.Н. Девятко, С.В. Рогожкин

Облучение металлов приводит к различным макроскопическим изменениям, в том числе фазовым превращениям (образованию включений, разупорядочению, аморфизации, плавлению, см. например, [1]). С микроскопической точки зрения отличительной особенностью радиационных воздействий является образование неравновесных дефектов, таких как вакансии, межузлия и др. При исследовании термодинамических свойств, изучении фазовых превращений систем под облучением необходимо учитывать взаимодействие систем с полем неравновесных дефектов. В работе этот вопрос исследуется для случая плавления облучаемого металла.

Фазовые превращения осуществляются флуктуационным образом. Поэтому определяющим является вопрос об усреднении термодинамических функций по флуктуациям плотности. При рассмотрении радиационных воздействий значительную сложность представляет учет флуктуирующего поля дефектов. Здесь возможны два различных случая, вытекающих из возможных реализаций экспериментов по изучению влияния облучения на фазовые переходы. Так, возможна ситуация, когда неравновесной является лишь концентрация дефектов, а флуктуации можно рассматривать как равновесные, температурные. Именно такой случай рассматривается в большинстве существующих теоретических подходов (см., например, [2]). Отметим, что такого рода систему можно реализовать при отжиге облученного образца, создавая однородное распределение дефектов повышенной концентрации. Изменяя затем температуру, можно изучать фазовые превращения. Другая ситуация возникает в условиях облучения, когда радиационные дефекты образуются неоднородно в каскадах атомных соударений. Тогда металл характеризуется как неравновесной концентрацией дефектов, так и их неравновесными флуктуациями, которыми являются каскады. Влияние каскадных флуктуаций на фазовые переходы порядок-беспорядок в сплавах исследовалось в [3].

Дефекты можно рассматривать как внешнее поле U по отношению к атомам металла. Это позволяет провести последовательную процедуру усреднения статической суммы Z металла в поле дефектов по флуктуациям плотности дефектов:

$$Z = \langle \int \exp(-\hat{H}/T) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N \rangle, \quad (1)$$

где $\hat{H} = H + \sum_K U(\vec{r}_K)$ — гамильтониан атомов металла в поле дефектов, T — температура, \vec{r}_K — координаты атомов металла, а усреднение $\langle \dots \rangle$ ведется по флуктуациям плотности дефектов.

Вероятность W распределения полей дефектов $n_d(\vec{r})$ может быть представлена в виде (для простоты будем рассматривать один сорт дефектов):

$$W \sim \exp\left(-\frac{1}{2T} \iint K(\vec{r} - \vec{r}') (n_d(\vec{r}) - n_d) (n_d(\vec{r}') - n_d) d\vec{r} d\vec{r}'\right), \quad (2)$$

где n_d — квазистационарные средние значения концентраций дефектов. Функция K определяется взаимодействием дефектов друг с другом и их неравновесным рождением в каскадах. Физический смысл K вытекает из ее связи с парно-корреляционной функцией, либо функцией отклика системы дефектов [4]. Для квазиравновесных систем дефектов, когда неравновесной является лишь концентрация дефектов, а флуктуации дефектов можно считать равновесными, величина K может быть определена, исходя из потенциалов парного взаимодействия дефектов φ_d :

$$K(\vec{q}) = \varphi_d(\vec{q}) + T/n_d, \quad (3)$$

где \vec{q} — волновые вектора. В используемых обозначениях аргумент \vec{q} означает Фурье-компоненты соответствующих величин.

В случае каскадообразующих излучений, основными флуктуациями, определяющими величину K , являются каскады атом-атомных соударений, в результате которых образуются области с высокой концентрацией дефектов. В этом случае определение корреляторов плотности дефектов и, соответственно, величины K может быть проведено численно [5], а в модельных случаях аналитически [6].

Флуктуирующее поле дефектов приводит к эффективному изменению межатомных взаимодействий Φ . В результате усреднения статической суммы (1) металла в поле дефектов найдено это эффективное изменение $\Delta\Phi$:

$$\Delta\Phi(\vec{q}) = |U(\vec{q})|^2 / K(\vec{q}) T. \quad (4)$$

Волновые вектора обратной решетки \vec{q}_i соответствуют минимумам потенциала $\Phi(\vec{q})$ [7, 8]. В результате ренормировки межатомных взаимодействий (4) происходит изменение векторов \vec{q}_i :

$$\Delta\vec{q}_i = \hat{\Omega}^{-1} \vec{A}, \quad \text{где } \vec{A} = \left. \frac{\partial G}{\partial \vec{q}} \right|_{\vec{q}_i}; \quad G \equiv \Delta\Phi(\vec{q}); \quad \Omega_{em} = \left. \frac{\partial^2 \Phi(\vec{q})}{\partial q_e \partial q_m} \right|_{\vec{q}_i}. \quad (5)$$

В результате радиационных воздействий возникает деформация решетки. Статической ее части отвечает величина $\Delta\vec{q}_i$ (5).

Ренормировка межатомных взаимодействий приводит к сдвигу температуры плавления [8]. Вклад во взаимодействия от

полей дефектов (4) изменяет температуру плавления T_c на величину

$$\Delta T_c = T_c \cdot \left(\frac{\partial^2 G}{\partial q^2} / \frac{\partial^2 \varphi}{\partial q^2} \right) \Big|_{\vec{q}_i} \cdot \vec{q}_i \quad (6)$$

При воздействии на металл излучения, не вносящего примесь (e , γ , n излучения), основной вклад в величины Δq_i , ΔT_c дает поле вакансий. В условиях квазиравновесия (4) сдвиг температуры плавления (6) пропорционален концентрации вакансий, и соответственно интенсивности Ω источника облучения: $\Delta T_c \sim \Omega$. Аналогичная зависимость ΔT_c от интенсивности Ω наблюдалась экспериментально [9] при γ -облучении алюминия вплоть до $\Omega \simeq 2 \cdot 10^3$ P/c.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Schullson E.M. // J. of Nucl. Mater. 1979. V. 83. P. 239.
- [2] М о л е к о L.K., G l y d e H.R. // Phys. Rev. B. 1984. V. 30. P. 4215.
- [3] B e l l o n P., M a r t i n G. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 2403.
- [4] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статическая физика, Ч. 1, М.: Наука, 1976.
- [5] Девятко Ю.Н., Маклецов А.А., Тронин В.Н. // Изв. Латв. АН 1990. Т. 4. С. 11.
- [6] M a n s u r L.K., B r a i l s f o r d A.D., S o g n l a n W.A. // Acta metall. 1985. V. 33. P. 1407.
- [7] Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974.
- [8] Девятко Ю.Н., Рогожкин С.В. // Журнал физической химии. 1989. Т. LXIII, С. 2954.
- [9] Данильченко Б.А., Круликовская М.П., Чирко Л.И. // Украинский физический журнал. 1971. Т. 15. С. 1914.

Московский
инженерно-физический
институт

Поступило в Редакцию
24 апреля 1991 г.
В окончательной редакции
9 августа 1991 г.