

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТМОСФЕР НА СКОРОСТЬ РАДИАЦИОННОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ ВНЕДРЕНИЯ

Н.И. Едемский, С.Б. Кислицин,
Ю.С. Пятипетов

Согласно современным представлениям [1, 2], скорость радиационной ползучести металлов определяется диффузионными потоками межузельных атомов и вакансий на краевые дислокации. В твердых растворах внедрения вокруг дислокаций образуются атмосферы из взаимодействующих друг с другом примесей дипольного типа. Атмосферы служат источниками полей напряжения, экранирующих упругие поля дислокаций, за счет чего изменяются потоки собственных точечных дефектов на дислокации и скорость деформации.

Для выяснения вопроса о влиянии примесных атмосфер на скорость радиационной ползучести твердых растворов внедрения в настоящей работе сделано следующее: рассчитана равновесная примесная атмосфера вокруг дислокации; в условиях непрерывной генерации собственных точечных дефектов (в результате облучения) найдены концентрационные профили межузельных атомов и вакансий в упругом поле краевой дислокации, окруженной примесной атмосферой; вычислены потоки межузельных атомов и вакансий на такую дислокацию и определены зависимости параметров Z_{α} , характеризующих эффективность захвата ею собственных точечных дефектов, от средней по образцу концентрации примесей C_0 ; по модели, учитывающей скольжение дислокаций [3, 4], рассчитана зависимость скорости радиационной ползучести от C_0 .

1. Расчет равновесной примесной атмосферы. Рассмотрим металл с ОЦК-решеткой, в котором имеются примеси внедрения с относительной концентрацией C_0 и прямолинейные краевые дислокации с плотностью ρ_n . Принимая во внимание, что между растворенными примесными атомами имеется деформационное взаимодействие, способствующее их упорядоченному расположению [5], считаем, что примеси находятся в серединах ребер кристаллической решетки, ориентированных вдоль оси тетрагональности.

Согласно [6, 7], примеси внедрения, переводящие ОЦК решетку в тетрагональную, в теории упругости описываются плотностью сил

$$f_j(\vec{r} - \vec{r}') = -K\Omega_{jm} \nabla_m \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (1)$$

$$\Omega_{jm} = \Omega_0 \delta_{jm} + \Omega_1 (l_j l_m - \frac{1}{3} \delta_{jm}), \quad (2)$$

где K - модуль всестороннего сжатия; Ω_0 - дилатационная часть тензора Ω_{jm} , имеющая один порядок величины с атомным объемом

матрицы Ω ; Ω_1 - девиаторная часть Ω_{jm} , характеризующая степень отклонения формы примесного дефекта от сферической; l_j и l_m - компоненты единичного вектора оси дипольного дефекта. Используя (1), (2), по методике, изложенной в [7], нетрудно получить выражения для энергии взаимодействия примесного атома, расположенного в точке \vec{r} , с дислокацией ($\omega^{di}(\vec{r})$) и с другим примесным атомом, расположенным в точке \vec{r}' , ($\omega^{ii}(\vec{r}-\vec{r}')$).

Зная $\omega^{di}(\vec{r})$ и $\omega^{ii}(\vec{r}-\vec{r}')$, находим выражения для химпотенциала примесного атома, расположенного в произвольной точке \vec{r} , где концентрация примесей равна $c(\vec{r})$, и находящегося на достаточно большом удалении от дислокации (при $r = r_s = \sqrt{x\rho_n}$), где влиянием ее упругого поля на примесь можно пренебречь, а концентрация примесей остается равной c_0 . После завершения диффузионных перемещений примесей химпотенциал становится постоянным по всему объему кристалла, следовательно, приравняв выражения для химпотенциала примесных атомов, находящихся на расстояниях r и r_s от дислокации, как это сделано, например, в [8], получим равновесное распределение примесей вокруг дислокации

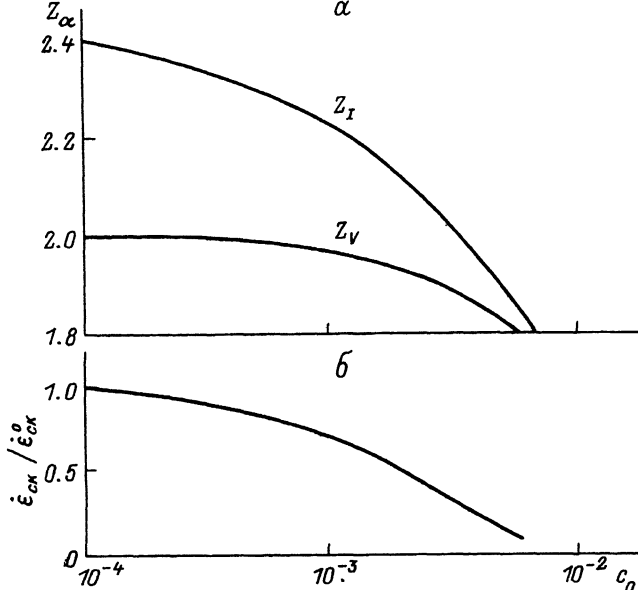
$$c(\vec{r}) = \left\{ 1 + \frac{1-c_0}{c_0} \exp \left[\frac{\omega^{di}(\vec{r})}{kT} + \frac{1}{kT} \sum_{\vec{r}'} \left(\omega^{ii}(\vec{r}-\vec{r}') - \omega^{ii}(\vec{r}_s-\vec{r}') \right) c(\vec{r}') \right] \right\}^{-1}. \quad (3)$$

Вычисление $c(r)$ по формуле (3) проведено численно с использованием параметров углеродистого мартенсита: $\Omega = 1.2 \times 10^{-29} \text{ м}^3$; $\Omega_0 = 0.662 \Omega$, $\Omega_1 = 0.712 \Omega$, $\beta = 2.48 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $\mu = 8 \cdot 10^4 \text{ МПа}$, $\nu = 0.3$, где b , μ и ν - модуль вектора Бюргера, модуль сдвига и коэффициент Пуассона соответственно. В результате получен концентрационный профиль примесей углерода, знание которого необходимо для расчета потоков собственных точечных дефектов на дислокацию.

2. Расчет скорости радиационной ползучести проведем для стационарных концентраций радиационных точечных дефектов по формуле [3, 4, 9]

$$\dot{\epsilon}_{ск} \approx \frac{L}{3\lambda} \rho_n \left[Z_I D_I C_I^o - Z_V D_V (C_V^o - C_V^e) \right], \quad (4)$$

где L - расстояние, проходимое дислокацией под действием сдвигового напряжения в плоскости скольжения до остановки на барьерах; λ - средний размер этих барьеров; ρ_n - плотность дислокаций; параметры Z_α характеризуют эффективности поглощения дислокаций межузельных атомов ($\alpha = I$) и вакансий ($\alpha = V$); D_α - коэффициент диффузии точечных дефектов α ; C_α^o - их стационарная концентрация на половине среднего расстояния между стоками; C_V^e - термически равновесная концентрация вакансий. Влияние примесных атмосфер на $\dot{\epsilon}_{ск}$ осуществляется благодаря их воздействию на параметры Z_α , выражающиеся через потоки I_α межузельных атомов и вакансий на дислокацию



Зависимость параметров Z_I и Z_V (а) и скорости радиационной ползучести (б) от концентрации примесей.

$$Z_{\alpha} = \frac{\Omega I_{\alpha}}{D_{\alpha}(C_{\alpha}^0 - C_{\alpha}^e)}. \quad (5)$$

Для нахождения I_{α} необходимо решить уравнение диффузии собственных точечных дефектов

$$\nabla^2 c_{\alpha}(\vec{r}) + \frac{1}{kT} \left[\nabla c_{\alpha}(\vec{r}) \nabla E_{\alpha}(\vec{r}) + c_{\alpha}(\vec{r}) \nabla^2 E_{\alpha}(\vec{r}) \right] = 0 \quad (6)$$

с граничными условиями

$$c_{\alpha}(\vec{r}_s) = C_{\alpha}^0; \quad c_{\alpha}(\vec{r}_d) = C_{\alpha}^e \cdot \exp \left[-\frac{E_{\alpha}(\vec{r}_d)}{kT} \right], \quad (7)$$

где $c_{\alpha}(\vec{r})$ — концентрация точечных дефектов α ; $E_{\alpha}(\vec{r})$ — энергия их взаимодействия с дислокацией и с примесной атмосферой, рассчитываемая по аналогии с w^{di} и w^{ii} с учетом того, что межузельные атомы и вакансии рассматриваются как центры дилатации; r_d — радиус ядра дислокации.

Уравнение (6) решено численно с помощью метода предиктор-корректор [10] при использовании параметров углеродистого мартенсита, приведенных в п. 1. Найдя стационарное распределение концентраций $c_{\alpha}(\vec{r})$, вычисляем потоки I_{α} и параметры Z_{α} . Результат расчета Z_{α} как функции c_0 для $T = 0.4$ Тпл представлен

на рисунке, а. Как видим, при увеличении концентрации c_0 от 10^{-4} до $\sim 10^{-2}$ параметры Z_α уменьшаются, причем Z_I уменьшается сильнее, чем Z_V .

Воспользовавшись этим результатом и обозначив через $\dot{\epsilon}_{ск}^0$ скорость ползучести, рассчитанную при фиксированной концентрации примесей ($c_0 = 10^{-4}$), найдем зависимость отношения $\dot{\epsilon}_{ск} / \dot{\epsilon}_{ск}^0$ от c_0 (см. рисунок, б). Из рисунка, б видно, что скорость ползучести понижается с ростом концентрации примесей, причем наибольший эффект имеет место в области высоких значений c_0 от 10^{-3} до $\sim 10^{-2}$, при которых вокруг дислокаций создаются весьма плотные примесные атмосферы. Последние эффективно экранируют упругие поля дислокаций и приводят к уменьшению фактора дислокационного предпочтения $B = (Z_I - Z_V) / Z_I$, определяющего скорость радиационно-стимулированной деформации.

Л и т е р а т у р а

- [1] Slyozov V.V., Bereznyak P.A. In: Phys. Radiat. Eff. Cryst. Amsterdam e.a., 1986, p. 575-620.
- [2] Ибрагимов Ш.Ш., Кирсанов В.В., Пятилетов Ю.С. Радиационные повреждения металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1985. 240 с.
- [3] Кирсанов В.В., Пятилетов Ю.С., Тюпкина О.Г. - Письма в ЖТФ, 1980, т. 6, в. 19, с. 1183-1186.
- [4] Пятилетов Ю.С. - ФММ, 1982, т. 54, с. 1080-1087.
- [5] Смирнов А.А. Теория сплавов внедрения. М.: Наука, 1979. 368 с.
- [6] Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. М.: ИИЛ, 1963, 247 с.
- [7] Косевич А.М. Физическая механика реальных кристаллов. Киев: Наукова думка, 1981. 328 с.
- [8] Любов Б.Я. В кн.: Физика кристаллов с дефектами, том II, Тбилиси, Институт физики АН ГССР, 1966, с. 209-235.
- [9] Heald P.T., Sreight M.V. - Acta Met., 1975, v. 23, p. 1389-1399.
- [10] Кирсанов В.В., Кислицин С.Б. В сб.: ЭВМ и моделирование дефектов в кристаллах. Л., ФТИ АН СССР, 1982, с. 193-194.

Институт ядерной физики
АН Казахской ССР,
Алма-Ата

Поступило в Редакцию
22 июня 1988 г.