

# Кинетика дислокационных ансамблей в деформируемых облученных материалах

© Н.В. Камышанченко, В.В. Красильников, Н.В. Неклюдов\*, А.А. Пархоменко\*

Белгородский государственный университет,  
308007 Белгород, Россия

\*Харьковский физико-технический институт,  
310108 Харьков, Украина

(Поступила в Редакцию 5 февраля 1998 г.)

Изучено развитие эффектов пластической неустойчивости на начальных стадиях деформации облученных материалов. Анализируется зависимость доли дислокаций, преодолевающих препятствия в динамическом режиме (дислокационное "каналирование"), от степени радиационного упрочнения (дозы облучения) и скорости дислокаций. Показана роль данного эффекта в радиационном охрупчивании реакторных материалов.

Исследование радиационного упрочнения и, как правило, связанного с ним охрупчивания является одним из наиболее актуальных направлений в реакторном материаловедении. Радиационное упрочнение материалов проявляется не только в увеличении предела текучести и снижении скорости упрочнения материалов, но и в образовании на кривых растяжения "зуба текучести" и площадки текучести типа Чернова–Людерса [1,2]. Наличие этих эффектов, по современным представлениям, свидетельствует о пластической неустойчивости в материалах, которая может явиться причиной резкого снижения пластичности.

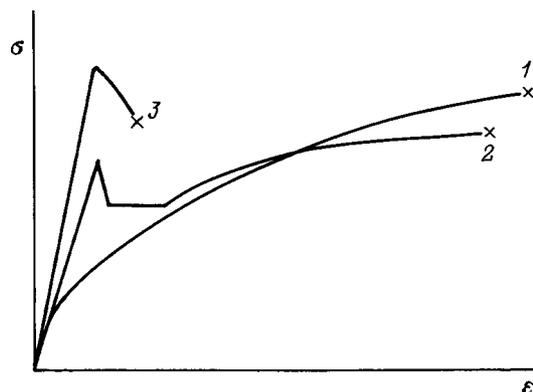
На рис. 1 представлены типичные кривые деформации реакторных сталей при температурах испытания ниже  $0.3T_m$  ( $T_m$  — температура плавления). Проведенный нами анализ [3] показал, что подобный тип кривых растяжения (кривая 2) наблюдается у многих материалов уже при дозах облучения  $\leq 10^{-2} - 10^{-1}$  дпа (displacement per atom). Минимум или "площадка" на кривой 2 связаны с проявлением эффектов пластической неустойчивости — дислокационным каналированием: разрушением препятствий движущимися дислокациями и локализацией скольжения в данных объемах материала при последующем деформировании [1]. Особенно важно для последующего рассмотрения, что выход материала из режима пластической неустойчивости осуществляется преимущественно за счет развития процессов поперечного скольжения винтовых дислокаций. При более высоких дозах облучения ( $\geq 1 - 10$  дпа, кривая 3) стадия, соответствующая "площадке" на кривой 2, непосредственно переходит в стадию разрушения материала.

Современный подход к пластической деформации, как к коллективному дислокационному процессу, предполагает описание эффектов локализации и самоорганизации дислокаций на основе изучения эволюции дислокационных ансамблей в деформируемых материалах. В работах [4–7] детально теоретически рассмотрены процессы кинетики дислокационного ансамбля в рамках синергетического подхода и предложены модели, позволяющие объяснить не только эволюцию локальной плотности дислокаций в необлученных кристаллах, но и образование бездефектных каналов и локализацию деформации в облученных материалах.

Существуют также модели [8], рассматривающие возникновение эффектов пластической неустойчивости и локализации пластической деформации на основе описания поведения одиночных дислокаций. Другие модели (см., например, [9]), исходят из ансамбля дислокаций, который характеризуется функцией распределения дислокаций, зависящей от радиуса-вектора  $\mathbf{r}$  и времени  $t$ .

Однако, поскольку пластическая деформация материала связана с подвижными дислокациями, естественно считать, что функция распределения дислокаций зависит не только от радиуса-вектора  $\mathbf{r}$ , времени  $t$ , но и от скорости дислокации  $\mathbf{v}$  и ее ориентации в пространстве. В данной работе изучаются функции распределения дислокаций, усредненные по ориентации дислокационных линий в пространстве. При этом сами дислокации, составляющие ансамбль, могут быть рассмотрены как совокупность сегментов дислокационных линий (см. [10]).

В настоящей работе нами исследовано развитие процессов пластической неустойчивости в облученном материале с учетом зависимости функции распределения дислокаций в ансамбле по скоростям.



**Рис. 1.** Типичные кривые растяжения ( $\sigma$  — нагрузка,  $\varepsilon$  — деформация) реакторных сталей при температурах испытания ниже  $0.3T_m$  ( $T_m$  — температура плавления). 1 — исходный (необлученный) материал, 2 — материал, облученный до "низких" ( $10^{-2} - 10^{-1}$  дпа) доз, 3 — материал, облученный до доз свыше 1 дпа.

## 1. Модель

Предметом описания являются подвижные дислокации, которые взаимодействуют с фиксированными препятствиями различной природы, но не задерживаются (не "зависают") на них; например, движутся в режиме каналирования [2]. Эта ситуация соответствует, например, типичному случаю начальных стадий деформации облученного материала, когда формирующиеся ансамбли дислокаций "перезадают" препятствия, представляющие собой малые кластеры, петли, микропоры. Ясно, что такая ситуация может иметь место как при наличии широкого спектра скоростей (энергий) дислокаций, так и при различных механизмах взаимодействия дислокаций с препятствиями.

Следует отметить еще два важных момента, касающихся: а) междислокационного взаимодействия, б) механизмов выхода дислокаций из рассматриваемого режима.

а) Согласно [11], оценку вклада междислокационного взаимодействия необходимо проводить, сравнивая его с величиной внешнего прикладываемого (и действующего на дислокацию) напряжения  $f_{\text{ext}}$ . В необлученном материале учет междислокационного взаимодействия должен проводиться, "начиная с конца участка деформационного наклепа" (упрочнения), когда плотность дислокаций в материале  $\rho(\varepsilon)$  велика, расстояния между ними ( $r \approx \rho^{-1/2}$ ) малы, силы междислокационного взаимодействия сравнимы с величиной внешнего прикладываемого напряжения.

В рассматриваемом нами случае облученного материала реализуются условия, когда величина внешнего напряжения, действующего на дислокацию, велика (практически максимально возможная), если учитывать резкое падение скорости деформационного упрочнения (рис. 1), а плотность дислокаций в ансамбле (начальные стадии образования локализованной деформации) еще не столь велика, чтобы выполнялось условие  $f \geq f_{\text{ext}} \approx (1/2\pi)Gb^2\rho(\varepsilon)^{1/2}$ , где  $f$  — сила междислокационного взаимодействия,  $G$  — модуль сдвига,  $b$  — вектор Бюргера. Это дает нам возможность пока не учитывать междислокационное взаимодействие в формирующемся ансамбле при рассмотрении взаимодействия с фиксированными препятствиями — радиационными дефектами — на начальных стадиях деформации.

б) При описании процесса взаимодействия ансамбля дислокаций с препятствиями мы рассматриваем наиболее вероятный случай, когда часть дислокаций будет проходить сквозь препятствия, не меняя своего направления движения, а часть дислокаций будет "рассеиваться", изменяя направление движения, как это может, например, иметь место при движении винтовых дислокаций. Как уже отмечалось выше, это соответствует случаю деформации облученного материала, когда выход из режима каналирования осуществляется за счет движения винтовых дислокаций и последующего развития процесса множественного скольжения.

Для количественной характеристики дислокационной структуры кристалла необходимо задать функцию распределения дислокаций  $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  по координатам  $\mathbf{r}$ , их скоростям  $\mathbf{v}$  и времени  $t$  так, что

$$\rho_{\text{total}} = \sum_i \int d\Omega n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (1)$$

есть полная плотность всех дислокаций с любыми ориентациями, движущихся со скоростью  $\mathbf{v}$ ,  $d\Omega$  — элемент телесного угла в координатном пространстве.

В случае, когда дислокации взаимодействуют с некоторыми фиксированными препятствиями, процессы развития пластической деформации будем исследовать на основе общего кинетического уравнения для  $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  следующего вида:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \frac{\partial n}{\partial \mathbf{v}} = \left( \frac{\hat{1}}{\tau} \right) n, \quad (2)$$

где  $\mathbf{a}$  — ускорение дислокации, сообщаемое ей внешней нагрузкой  $F$ ;  $\left( \frac{\hat{1}}{\tau} \right)$  — оператор, соответствующий обратному времени релаксации, который, по нашему предположению, определяется выражением

$$\left( \frac{\hat{1}}{\tau} \right) n = \frac{|\mathbf{v}|^m}{A} \left( \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{v}'} n(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) - n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \right). \quad (2a)$$

Здесь  $d\Omega_{\mathbf{v}'}$  — элемент телесного угла в пространстве скоростей. Предполагаемая структура оператора обратного времени релаксации (2a) означает, что частота столкновений с препятствиями для дислокации, движущейся со скоростью  $\mathbf{v}$ , равна  $\frac{|\mathbf{v}|^m}{A}$  (в дальнейшем будем считать, что  $m < -1$ ), где  $A$  — постоянная величина, учитывающая наличие стопоров различной природы и концентрации (заметим, что, очевидно, в зависимости от параметра  $m$  размерность величины  $A$  в различных случаях может быть различной). Выражение (2a) предполагает по аналогии с классической механикой, что дислокация, рассматриваемая как квазичастица, упруго рассеивается в потенциальном поле препятствия  $|\mathbf{r}|^{-k}$  ( $k > 0$ ). Известно, что в этом случае эффективное дифференциальное сечение упругого рассеяния (а следовательно, и частота столкновений) пропорционально  $|\mathbf{v}|^m$  при  $m = -4/k$  (см. [12]). С другой стороны, известно также, что движущиеся дислокации могут взаимодействовать с препятствиями согласно закону  $\sim 1/r$ , где  $r$  — расстояние от препятствия до оси дислокации [13], как это имеет место, например, для краевой дислокации в случае примесной атмосферы Катрелла [14]. При этом  $m = -4 < -1$ . Далее мы будем развивать данную модель для общего случая  $m < -1$ .

Отметим, что функция пространственно-временного распределения  $f(\mathbf{r}, t)$  дислокаций может быть выражена через  $n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  с помощью формулы

$$f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{v} n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t).$$

Из кинетического уравнения (2) следует условие баланса для  $f(\mathbf{r}, t)$ , которое в данной модели (в отсутствие взаимодействия дислокаций друг с другом) имеет вид

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \text{div} \mathbf{j} = 0,$$

где  $\mathbf{j} = \frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{v} \mathbf{v} n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ .

Будем рассматривать пространственно однородный случай

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{r}} = 0. \quad (3)$$

Последнее соотношение означает, что  $\Delta = n_1 - n_2 \ll \alpha d$  ( $d$  — среднее расстояние между стопорами,  $\alpha$  — коэффициент порядка единицы, имеющий размерность длины), т.е. функция распределения ансамбля дислокаций практически не меняется на длине порядка расстояния между препятствиями. Тогда кинетическое уравнение (2) будет иметь вид

$$\frac{\partial n(\mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{a} \frac{\partial n(\mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} = \left( \frac{\hat{1}}{\tau} \right) n(\mathbf{v}, t). \quad (4)$$

К уравнению (4) добавим начальное условие

$$n(\mathbf{v}, 0; \mathbf{v}_0) = \delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0), \quad (5)$$

означающее, что в момент времени  $t = 0$  все дислокации имеют скорость, близкую к  $\mathbf{v}_0$ .

Введем параметр  $\rho^*(\mathbf{v}_0, t; m) = \rho_{\text{act}} / \rho_{\text{total}}$ , где  $\rho_{\text{act}}$  — плотность дислокаций, прошедших "сквозь" препятствия. Параметр  $\rho^*(\mathbf{v}_0, t; m)$  обозначает относительную долю дислокаций в ансамбле, прошедших "сквозь" препятствия. Из физического смысла функции распределения  $n(\mathbf{v}, t; \mathbf{v}_0)$  как плотности вероятности дислокаций, движущихся со скоростью, можно установить интегральное уравнение вида

$$\begin{aligned} n(\mathbf{v}, t - t'; \mathbf{v}_0) &= \rho^*(\mathbf{v}_0, t; m) \delta(\mathbf{a}t + \mathbf{v}_0 - \mathbf{v}) \\ &- \int_0^t dt' \frac{\partial}{\partial t'} \rho^*(\mathbf{v}_0, t'; m) \\ &\times \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{w}} n(\mathbf{v}, t - t'; \mathbf{w}|\mathbf{a}t' + \mathbf{v}_0), \quad (6) \end{aligned}$$

где  $\mathbf{w}$  — единичный вектор ( $|\mathbf{w}| = 1$ ) произвольного направления. В уравнении (6) первое слагаемое представляет собой долю дислокаций, прошедших сквозь препятствия и за время  $t$  приобретших скорость  $\mathbf{a}t + \mathbf{v}_0$ . Второе слагаемое учитывает долю дислокаций, скорость которых изменилась по направлению в результате первых столкновений с препятствиями и приобрела произвольное направление  $\mathbf{w}$ . Естественно, эти направления выбывают из плотности вероятности  $n(\mathbf{v}, t; \mathbf{v}_0)$ , о чем и свидетельствует знак "—" перед вторым слагаемым.

## 2. Скольжение дислокаций

Подставив интегральное уравнение (6) в кинетическое уравнение (2), получим уравнение для  $\rho^*$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho^*(\mathbf{v}_0, t; m) + \frac{|\mathbf{a}t + \mathbf{v}_0|^m}{2A} \rho^*(\mathbf{v}_0, t; m) = 0. \quad (7)$$

При этом функция  $\rho^*$  должна удовлетворять соотношениям

$$0 \leq \rho^*(\mathbf{v}_0, t; m) \leq 1, \quad \rho^*(\mathbf{v}_0; m) = 1.$$

Будем считать, что направление начальной скорости  $\mathbf{v}_0$  совпадает с вектором приложенной нагрузки  $\sigma$ . Решение уравнения (7) имеет вид

$$\rho^*(\mathbf{v}_0, t; m) = \exp\left(\frac{|\mathbf{v}_0|^{m+1} - (|\mathbf{a}t + \mathbf{v}_0|)^{m+1}}{2|\mathbf{a}|A(m+1)}\right), \quad (8)$$

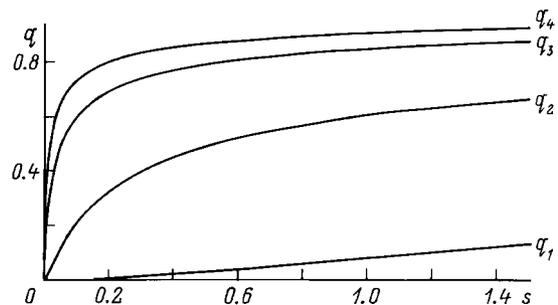
при  $m \neq -1$ . Для  $m < -1$  асимптотика решения (8) выражается формулой

$$q = \lim_{t \rightarrow \infty} \rho^*(\mathbf{v}_0, t; m+1) = \exp\left(-\frac{|\mathbf{v}_0|^{m+1}}{2|\mathbf{a}|A|m+1|}\right). \quad (9)$$

Это есть доля дислокаций, имеющих начальную скорость, которые проходят сквозь препятствия. При  $|\mathbf{v}_0| \rightarrow 0$  эта доля становится бесконечно малой. При  $|\mathbf{v}_0| \rightarrow \infty$  (или возрастании  $|\mathbf{a}|$ ) эта доля стремится к единице, т.е. с увеличением скорости (энергии) дислокаций последние начинают "проскакивать" препятствия без остановок.

Зависимость доли дислокаций, преодолевающих препятствия в динамическом режиме, от скорости дислокаций качественно проиллюстрируем рис. 2.

Для этого, например, положим  $m = -3/2$ , что соответствует закону взаимодействия дислокации с препятствием  $\sim r^{-8/3}$ . Чтобы сообщить дислокации ускорение  $a = |\mathbf{a}|$ , необходимо, согласно второму закону Ньютона  $a = F/m^*$ , приложить силу (в расчете на единицу длины дислокации)  $F > F_0/l$ , где  $F_0$  — максимальная сила, удерживающая дислокацию, создаваемая одним дефектом,  $l$  — расстояние между дефектами [15],



**Рис. 2.** Зависимость доли дислокаций, преодолевающих препятствия в динамическом режиме, от их начальной скорости.  $q_1, q_2, q_3, q_4$  соответствуют следующим значениям концентрации препятствий:  $p_1 = 10^{-4}\%$ ,  $p_2 = 10^{-3}\%$ ,  $p_3 = 10^{-2}\%$ ,  $p_4 = 10^{-1}\%$ , возрастающей в результате облучения.

$m^* = (db^2/4\pi) \ln(R/r_0)$  — известное выражение [16] для эффективной массы единицы длины дислокации,  $d$  — плотность массы металла,  $b$  — величина вектора Бюргерса. Полагая  $l = n_i^{-1/3}$  и  $|v_0| = us$ , где  $n_i$  — число дефектов в единице объема (в частности, создаваемых облучением),  $u$  — скорость звука, преобразуем формулу (9) к виду, удобному для графического изображения

$$q = \exp(-1/Q),$$

$$Q = 2A|m + 1|(F_0 4\pi n^{1/3}) / (db^2 \ln(R/r_0)) u^{|m+1|} p^{1/3} s^{|m+1|},$$

где  $p$  — концентрация дефектов,  $n$  — плотность атомов основного вещества. С целью наглядности изображения выберем следующие значения параметров:  $F_0 = 1.6 \cdot 10^{-4} \text{ din}$ ,  $u = 3.3 \cdot 10^4 \text{ cm/s}$ ,  $d = 8 \text{ g/cm}^3$ ,  $\ln(R/r_0) = 8$ ,  $n = 8 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ,  $b = 3 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$ ,  $A = 10^{-16} \text{ s}^{5/2} \cdot \text{cm}^{-3/2}$ . При этих значениях зависимость  $q(s)$  имеет вид, показанный на рис. 2. По оси абсцисс отложена величина  $s$ . Согласно полученным нами, а также проанализированным данным других авторов [17], относительное увеличение напряжения течения материала в 4–20 раз наблюдается в большинстве модельных и реакторных материалов уже при дозах  $10^{-2} - 10^{-1} \text{ dpa}$ . Кроме того, видно, что при прочих равных условиях в облученных материалах доля дислокаций, в динамическом режиме преодолевающих препятствия (согласно [8], критерием динамического или "псевдорелятивистского" режима является достижение дислокациями скоростей  $\sim 0.1$  скорости звука), становится уже существенной.

Рис. 2 также показывает, что в облученных материалах динамический (псевдорелятивистский) режим деформации достигается при более низких скоростях дислокаций.

Как показали исследования Попова [8], для плотностей дислокаций  $\approx 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  при описании эволюции дислокационных структур уже необходим учет псевдорелятивистских эффектов, т.е. скорость движения дислокаций может приближаться к околосвуковой ( $\geq 0.1u$ ). В случае, например, облученного никеля, корпусной стали, такая плотность дислокаций соответствует напряжению  $\geq 100 \text{ MPa}$ , а значит, подобные эффекты могут проявляться уже на начальных этапах деформации, соответствующих интервалу деформаций Чернова–Людерса. Как показали многочисленные эксперименты, высокие плотности дислокаций наблюдаются в деформационных каналах, образующихся в облученных материалах уже в районе предела текучести, что приводит к возникновению пластической нестабильности типа Чернова–Людерса [1,2].

Представленная в работе модель, по нашему мнению, может иметь прямое отношение, например, к проблеме хрупкости облученных материалов корпусных реакторов. Последние исследования [18] показывают, что процессы деформации и разрушения корпусных сталей сопровождаются динамическими процессами дислокационного каналирования и "разрушением" дислокациями мельчайших дефектов в виде микропор, петель и выделений

в корпусных сталях. Каналы локализованной деформации, встречаясь с поверхностями раздела, могут явиться причиной резкой концентрации напряжений, пропорциональной общей величине дислокационного "заряда", и способствовать образованию микротрещин.

Таким образом, в представленной модели рассмотрено развитие процессов пластической нестабильности в облученном деформируемом материале с учетом зависимости функций распределения дислокаций в ансамбле по скоростям. Показано, что в этих материалах может наблюдаться эффект резкого возрастания доли дислокаций, преодолевающих препятствия в динамическом режиме. При этом с увеличением степени упрочнения (концентрации дефектов, возникающих под облучением) данный эффект может достигаться при более низких скоростях деформации.

## Список литературы

- [1] И.М. Неклюдов, Н.В. Камышанченко. В кн.: Структура и радиационная повреждаемость конструкционных материалов. Металлургия, М. (1996). С. 168.
- [2] А.В. Волобуев, Л.С. Ожигов, А.А. Пархоменко. Вopr. атом. науки и техники. Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение, **1(64)**, 3 (1996).
- [3] И.М. Неклюдов, Л.С. Ожигов, А.А. Пархоменко, В.Д. Заболотный. Физические явления в твердых телах. Материалы Второй науч. конф. Харьк. ун-та, Харьков (1995). С. 132.
- [4] Г.А. Малыгин. ФТТ **33**, 4, 1069 (1991).
- [5] Г.А. Малыгин. ФТТ **33**, 6, 1855 (1991).
- [6] Г.А. Малыгин. ФТТ **34**, 11, 3605 (1992).
- [7] Г.А. Малыгин. ФТТ **37**, 1, 3 (1995).
- [8] Л.Е. Попов, Л.Я. Пудан, С.Н. Колупаева, В.С. Кобытев, В.А. Старенченко. Математическое моделирование пластической деформации. Изд-во Том. ун-та, Томск (1990). 184 с.
- [9] Ш.Х. Ханнанов. ФММ **78**, 2, 31 (1994).
- [10] Г.А. Малыгин. ФТТ **38**, 8, 2418 (1996).
- [11] В.В. Рыбин. Большие пластические деформации и разрушение металлов. Металлургия, М. (1986). 268 с.
- [12] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теоретическая физика. Т. 1. Механика. Наука, М. (1965). 204 с.
- [13] R.L. Fleischer. Acta Met. **10**, 835 (1962); J. Appl. Phys. **33**, 3504 (1962).
- [14] В.И. Владимиров. Физическая природа разрушения металлов. Металлургия, М. (1984).
- [15] О.А. Троицкий, В.Г. Штейнберг. Радиационная физика прочности металлических кристаллов. Атомиздат, М. (1969). 79 с.
- [16] Дж. Хирт, И. Лоте. Теория дислокаций. Атомиздат, М. (1972). 599 с.
- [17] В.Ф. Зеленский, И.М. Неклюдов, Л.С. Ожигов, Э.А. Резниченко, В.В. Рожков, Т.П. Черняева. Некоторые проблемы физики радиационных повреждений материалов. Наук. думка, Киев (1979). 330 с.
- [18] M. Große, J. Böhmert, H.W. Viehrig. J. Nucl. Mat. **211**, 177 (1994).