

05;10

Особенности влияния надразмерных примесей на баллистические процессы в α -сплавах железа, содержащих специальные карбиды

© В.В. Рыбин, Ю.В. Трушин, Ф.Ю. Фёдоров, В.С. Харламов

ЦНИИ КМ "Прометей"

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, С.-Петербург

С.-Петербургский государственный технический университет

Поступило в Редакцию 8 июня 2000 г.

Рассматривается поведение α -сплава железа, содержащего специальные карбиды (молибдена и вольфрама), а также надразмерные примеси (W и Mo) в твердом растворе. С помощью компьютерного моделирования исследуется влияние молибдена и вольфрама на развитие баллистических (каскадных) процессов при реакторном облучении с целью возможности замены в сплавах Mo на W для создания малоактивируемых сталей.

Для создания малоактивируемых сталей, используемых в различных узлах облучательных установок, возникает необходимость замены легирующих элементов, образующих долгоживущие радиоактивные изотопы Mo (с периодом полураспада больше, чем у изотопов железа), на такие же по размеру атомы вольфрама (для Mo атомный радиус $R_{Mo} = 1.245 \text{ \AA}$, для W атомный радиус $R_W = 1.255 \text{ \AA}$), но создающие в тех же условиях облучения изотопы с периодом полураспада меньше, чем у атома железа. В работе [1] рассмотрено влияние надразмерных примесей на радиационное упрочнение α -сплавов железа. При изучении различных стадий радиационной повреждаемости α -сплавов железа возникла необходимость более детального исследования баллистической (или каскадной) стадии и влияния Mo и W на развитие этой стадии, а также последствий взаимодействия каскадов атомных столкновений с карбидами молибдена и вольфрама.

Несмотря на то, что атомы тугоплавких металлов W и Mo обладают почти одинаковыми атомными размерами, их атомные массы ($m_W = 183.8$, $m_{Mo} = 95.94$) отличаются в $m_W/m_{Mo} = 1.916$ раза,

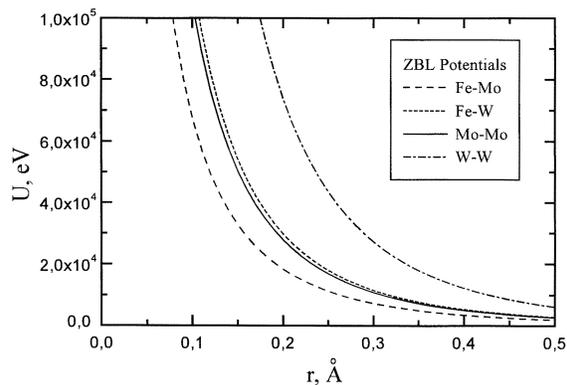


Рис. 1. ZBL-потенциалы для взаимодействий Fe–Mo, Fe–W, Mo–Mo и W–W.

что приводит к существенно различным (почти в 2 раза) переданным энергиям в процессах столкновений атомов Fe или нейтронов при реакторном облучении сталей, содержащих примеси вольфрама или молибдена.

Существует, однако, еще одна физическая особенность для названных металлов. Как известно, сечение взаимодействия сталкивающихся частиц связано с зависимостью потенциала межатомного взаимодействия от расстояния между ними [2]. Для проведения расчетов можно воспользоваться так называемым универсальным, или ZBL-потенциалом (потенциал, который создали Ziegler, Biersack, Littmark) [3]. На рис. 1 представлены зависимости от расстояния парных ZBL-потенциалов взаимодействий Fe–Mo, Fe–W, Mo–Mo и W–W, позволяющие оценить различные радиусы ($r_{\text{Fe,K}}$) взаимодействия железа с атомами молибдена ($K = \text{Mo}$) или вольфрама ($K = \text{W}$) в каскаде соударений. Из рис. 1 видно, что для разных энергий величина такого радиуса, определяющего сечение взаимодействия $\sigma_{\text{Fe,K}} = \pi r_{\text{Fe,K}}^2$, всегда больше для взаимодействия железа с вольфрамом, чем с молибденом.

Следовательно, эффективность процессов дефектообразования на каскадной стадии сплавов железа с W или Mo будет определяться двумя, действующими в разные стороны тенденциями: 1) большей массой вольфрама по сравнению с молибденом, а значит затрудненной передачей энергии, и 2) большим сечением взаимодействия с атомами

железа для вольфрама, чем для молибдена, т. е. большей вероятностью (сечением) взаимодействия W по сравнению с Mo .

Оценим число дефектов $N^K(KC)$ в единице объема карбида (KC), созданных в стали атомами типа $K = W, Mo$:

$$N^K(KC) = \rho_{nc}^K(KC) \varphi_{Fe}(E_{Fe}) (\pi r_{Fe,K}^2) \nu_K(E_K), \quad (1)$$

где $\rho_{nc}^K(KC)$ — ядерная плотность металла K в карбиде состава KC , $\varphi_{Fe}(E_{Fe})$ — доза атомов железа с энергией E_{Fe} , ν_K — каскадная функция для атомов металла типа K в карбиде с переданной атому K кинетической энергией E_K . Оценим каскадную функцию по формуле Кинчина–Пизе [4]

$$\nu_K(E_K) = \frac{E_K}{2\varepsilon_d^K}, \quad (2)$$

где ε_d^K — пороговая энергия смещения атома типа K в карбиде. Величина энергии E_K может быть оценена как максимальная энергия [2], переданная атому типа K при столкновении с атомом Fe , имеющим кинетическую энергию E_{Fe} :

$$E_K = \frac{4m_{Fe}m_K}{(m_{Fe} + m_K)} E_{Fe} = \lambda_K E_{Fe}. \quad (3)$$

Составим по (1) отношение числа дефектов, образованных в карбиде с вольфрамом $N^W(WC)$ к числу дефектов, созданных в карбиде с молибденом $N^{Mo}(MoC)$ движущимися атомами железа с одинаковой энергией E_{Fe} :

$$\frac{N^W(WC)}{N^{Mo}(MoC)} = \frac{\rho_{nc}^W(WC)}{\rho_{nc}^{Mo}(MoC)} \cdot \frac{\varepsilon_d^{Mo}}{\varepsilon_d^W} \cdot \frac{r_{Fe,W}^2}{r_{Fe,Mo}^2} \cdot \frac{\lambda_W}{\lambda_{Mo}}. \quad (4)$$

Отношение $\lambda_W/\lambda_{Mo} = 0.714$. Введем обозначение $\beta = (r_{Fe,W}^2/r_{Fe,Mo}^2)(\lambda_W/\lambda_{Mo})$. Воспользуемся значениями радиусов взаимодействия Fe с атомами W и Mo из рис. 1 для разных энергий. Тогда получим, например, для трех энергий E_{Fe} (см. табл. 1).

Полагая, что отношения ядерных плотностей и пороговых энергий смещения порядка 1, полученные значения для β демонстрируют превалирование в дефектообразовании в сталях, содержащих вольфрам.

Для исследования особенностей влияния Mo и W на свойства стали под облучением было проведено компьютерное моделирование каскадов

Таблица 1. Значение отношения β для разных энергий атомов Fe

E_{Fe} , keV	β
20	1.136
60	1.321
100	1.421

Таблица 2. Отношение концентраций вакансий вольфрама и молибдена в карбидном слое на разных глубинах

Глубина, А	$C_v^{\text{W}}/C_v^{\text{Mo}}$
1500	1.16
1750	1.15
2000	1.31

атомных соударений, создаваемых первично выбитыми атомами (ПВА) железа с энергией 1 МэВ в следующих мишенях:

- 1) однородная мишень $\text{Fe}_{0.9}\text{Mo}_{0.1}$ или $\text{Fe}_{0.9}\text{W}_{0.1}$;
- 2) 3-слойная мишень, представляющая собой железо с карбидным слоем (MoC или WC) толщиной 500 Å.

Моделирование проводилось с помощью компьютерной программы TRIRS [5,6], предназначенной для расчета распределений точечных дефектов в каскаде атомных столкновений в многослойных мишенях методом Монте-Карло в приближении парных соударений. Результаты расчетов представлены на рис. 2.

На рис. 2, *a* приведены профили залегания вакансий молибдена (или вольфрама), созданных каскадом в однородной мишени. Полученные распределения показывают, что в подсистеме вольфрама (в сравнении с молибденом) каскад соударений создает значительно большее количество точечных дефектов.

На рис. 2, *b* представлены аналогичные профили вакансий Mo и W для трехслойной мишени Fe/карбид/Fe. Из рис. 2, *b* также видно, что в случае слоя карбида вольфрама количество вакансий вольфрама в карбиде оказывается больше, чем вакансий молибдена в случае карбида молибдена. Если сравнить отношение концентрации вакансий вольфрама

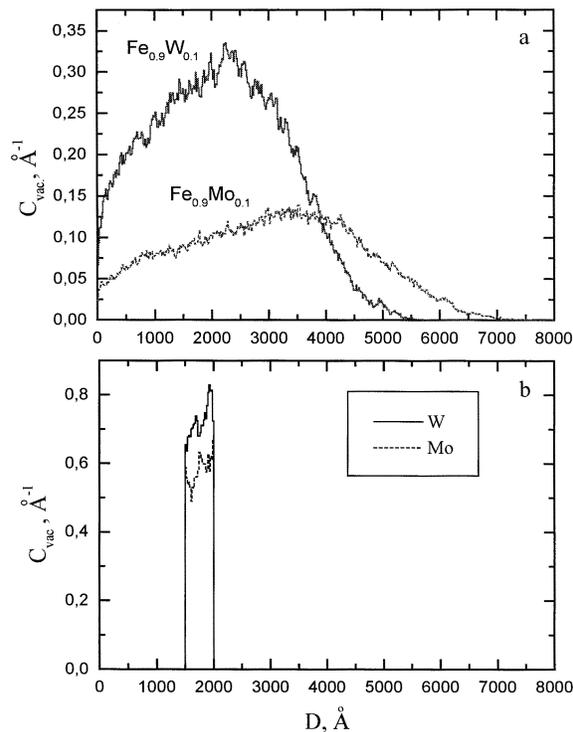


Рис. 2. Распределения вакансий W и Mo созданных каскадом соударений в однородных мишенях $\text{Fe}_{0.9}\text{Mo}_{0.1}$ и $\text{Fe}_{0.9}\text{W}_{0.1}$ (a) и в мишенях Fe/MoC/Fe и Fe/WC/Fe (b).

в карбиде вольфрама C_v^W к концентрации вакансий молибдена в карбиде молибдена C_v^{Mo} для разных глубин, то получим следующие соотношения:

Сравнивая данные табл. 1 и 2, видим, что оценки по эффективности каскадов (см. табл. 2) и по общему числу дефектов, создаваемых движущимися матричными атомами, демонстрируют одну и ту же тенденцию.

Обе пары представленных расчетов демонстрируют, что присутствие вольфрама приводит к большей эффективности развития каскадов в материале с точки зрения их повреждающей способности. Такая ситуация объясняется как большей массой атомов вольфрама ($m_W = 1.916m_{Mo}$),

так и большим сечением взаимодействия (рассеяния) атомов железа с атомами вольфрама в сравнении с атомами молибдена.

Особенности влияния атомов вольфрама и молибдена на развитие каскадов атомных столкновений позволяют сделать вывод, что под облучением приповерхностные области карбида вольфрама будут повреждаться сильнее вследствие создания в них большего числа радиационных дефектов. В свою очередь, баллистическое разрушение приповерхностных областей карбидов в совокупности с диффузионными процессами приводит к постепенному растворению преципитатов. При этом можно предположить, что размеры вольфрамовых карбидов, быстрее разрушающихся под воздействием каскадов атомных соударений, могут попадать в область докритических значений, поэтому карбиды с W могут растворяться, а с Mo — выживать.

Расчеты каскадов атомных столкновений с энергией ПВА атомов железа в 350 keV сохраняют те же зависимости от вида надразмерной примеси (W или Mo). Выявлена также зависимость уровня дефектности по вакансиям в карбидах Mo и W от размера карбида (толщины карбидного слоя). Оказалось, например, что при толщинах карбидного слоя примерно до 200 Å, повреждаемость (уровень дефектности по вакансиям) карбида с Mo выше, чем с W. Однако при больших толщинах карбидного слоя повреждаемость в вольфрамовых карбидах начинает преобладать, как описано выше. Этот эффект можно объяснить большим количеством атомов вольфрама в толстых карбидных слоях. При этом большее количество атомов W участвуют в каскадных процессах, чем в тонких карбидных слоях. А поскольку атомы W имеют большее сечение взаимодействия, чем атомы Mo, они, как это показано выше (рис. 1), создают и большее количество дефектов в карбидном слое, что и может приводить его более быстрому разрушению, чем для слоя MoC.

Таким образом, компьютерное исследование влияния каскадов атомных столкновений, инициированных реакторным облучением, показывает, что на баллистической стадии радиационного повреждения, в силу особенностей потенциала взаимодействия W с атомами вещества (железом и вольфрамом, рис. 1), карбиды вольфрама могут разрушаться эффективнее, чем карбиды молибдена. Тем самым карбиды вольфрама могут попадать в область докритических размеров, и, значит, растворяться, а карбиды молибдена выживать.

Авторы благодарят А.А. Васильева за плодотворные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты № 98–02–18369 и № 99–02–17990).

Список литературы

- [1] Рыбин В.В., Трушин Ю.В. // Письма в ЖТФ. 1977. Т. 23. В. 8. С. 77–84.
- [2] Томпсон М. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. М.: Мир, 1971. 368 с.
- [3] Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U. The Stopping and Range of Ions in Solids. New York: Pergamon, 1985. 321 p.
- [4] Kinchin G.A., Pease R.S. // Rep. Progr. Phys. 1955. V. 18. P. 1–51.
- [5] Бер Б.Я., Журкин Е.Е., Меркулов А.В., Трушин Ю.В., Харламов В.С. // ЖТФ. 1996. Т. 66. № 36. С. 54–66.
- [6] Trushin Yu.V., Ber B.J., Kharlamov V.S., Zhurkin E.E. // J. Nucl. Mater. 1996. V. 233–237. P. 991–995.