07,10

Фактор предпочтения базисной краевой дислокационной петли в цирконии. Численный анализ

© *А.В. Бабич, В.Ф. Клепиков, П.Н. Остапчук*

Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,
Харьков, Украина

E-mail: ostapchuk@kipt.kharkov.ua

Поступила в Редакцию 8 августа 2020 г.
В окончательной редакции 8 августа 2020 г.
Принята к печати 18 августа 2020 г.

Недавние численные расчеты коэффициентов диффузии радиационных точечных дефектов в гексагональных кристаллах показали, что основное предположение теории радиационного роста циркония (DAD — diffusional anisotropy difference) не выполняется. Таким образом, упругая идеология (EID — elastic interaction difference), основанная на концепции фактора предпочтения стока остается актуальной. В этой связи численно (методом конечных разностей) посчитан фактор предпочтения базисной краевой петли циркония в тороидальном резервуаре с учетом упругой анизотропии гексагонального кристалла. Тороидальная геометрия резервуара позволяет провести расчеты для петли любого размера и без какой-либо коррекции упругого поля в ее области влияния. Получены зависимости фактора предпочтения петли от ее радиуса и природы при различных плотностях стоков. Показана существенная роль формы граничного условия на внешней поверхности резервуара. Обозначены перспективы дальнейших исследований в построении теории радиационного роста циркония на основе упругой идеологии.

Ключевые слова: точечный дефект, базисная дислокационная петля, фактор предпочтения, цирконий, радиационный рост.

DOI: 10.21883/FTT.2020.12.50212.165

1. Введение

Как известно, концепция предпочтительного поглощения внутренними протяженными дефектами кристалла (стоками) радиационных точечных дефектов (ТД) определенного сорта (вакансий или собственных междоузельных атомов — СМА) считается центральным элементом теории радиационно-индуцированной деформации. Такая особенность стоков (пор, дислокационных петель, сетки дислокаций) обуславливает некоторую ассиметрию диффузионных потоков ТД на них и ведет к эволюции микроструктуры материала и его макроскопической деформации (например, радиационному распуханию и росту). Исторически, теория радиационной деформации строилась главным образом для объяснения явления вакансионного распухания кубических металлов и сплавов [1–3]. Они, как правило, моделируются упруго- и диффузионно-изотропной средой, а причиной разделения потоков ТД считается более сильное упругое взаимодействие междоузлий с краевыми компонентами дислокаций по сравнению с вакансиями. Говорят, что дислокации эффективнее поглощают СМА (имеют к ним предпочтение — „bias", „преференс"), а остающиеся в избытке вакансии поглощаются порами, обуславливая их рост, что в конечном итоге приводит к увеличению объема облучаемого материала. Однако попытки применить упругую идеологию к ГПУ-металлам, в частности для объяснения радиационного роста (РР) циркония, успеха пока не имели. Явление РР сопровождается изменением формы материала без приложения внешней нагрузки и без заметного изменения объема. Цирконий в процессе роста расширяется в $\langle a\rangle$-направлении и сужается вдоль $\langle c\rangle$-оси [4,5]. Такое возможно, если, например, на базисных плоскостях зарождаются и растут вакансионные петли, „съедающие" кристалл вдоль $\langle c\rangle$-оси, а на призматических — междоузельные, образуя дополнительные экстраплоскости в $\langle a\rangle$-направлении [6]. Однако механизм роста вакансионных петель пока не ясен. Согласно классической упругой идеологии [7] „bias"-фактор петли не зависит от ее природы. В таком случае зарождение, а тем более рост вакансионных петель труднообъясним. В литературе имеется альтернативный вариант упругой идеологии (EID — elastic interaction difference). Это идеология анизотропной диффузии ТД, характерная для ГПУ-кристаллов (DAD — diffusional anisotropy difference) [8,9]. Основное предположение соответствующей теории следующее $D_i^a/D_i^c > D_v^a/D_v^c$, где $D_{m,}^a$ — коэффициент диффузии ТД m-го сорта в базисной плоскости циркония, D_m^c — аналогичная величина в $\langle c\rangle$-направлении индексы v, i относятся к вакансиям и СМА соответственно). Тогда оказывается, что прямолинейные дислокации в базисной и призматической плоскостях переползают в противоположных направлениях, т.е. имеет место разделение диффузионных потоков ТД между этими плоскостями: вакансии преимущественно идут в базисную плоскость циркония, а междоузлия в призматическую. Тем самым возникает принципиальная возможность роста базисных вакансионных петель. Однако экспериментальных подтверждений этого неравенства на сегодняшний день нет. Более того, недавние численные расчеты [10] показали следующее. Вакансии и СМА действительно показывают анизотропную диффузию преимущественно параллельно базисной плоскости ($D^a_{i,v}/D^c_{i,v} > 1$), однако неравенство в области реакторных температур $T < 800\,\mathrm{K}$ как раз обратное $D^a_i/D^c_i < D^a_v/D^c_v$, и авторы [10] сомневаются в возможности объяснения наблюдаемого роста циркония теорией анизотропной диффузии DAD. Поэтому остается только концепция упругого „bias"-фактора. В этой связи в работе численно рассчитывается фактор предпочтения базисной краевой петли разной природы и обсуждается возможность дальнейшего применения упругой идеологии для объяснения РР циркония.

Если известно фиктивное распределение объемных сил f^S_i, создающих в упругой среде такие же напряжения, как и реальный источник S, то энергию взаимодействия между двумя системами внутренних напряжений $S(\mathbf{u}^S, u^S_{ij}, \sigma^S_{ij})$ и $T(\mathbf{u}^T, u^T_{ij}, \sigma^T_{ij})$, согласно Эшелби [11], можно представить интегралом вида

$$E_{\mathrm{int}}(S, T) = -\int f^S_i u^T_i dV, \qquad (1)$$

который берется по области, содержащей только источник системы S. Пусть это точечный дефект (ТД) дипольного типа, описываемый в теории упругости объемным распределением дипольных сил без момента

$$f^S_i(\mathbf{r}) = -P_{ij}\nabla_j\delta(\mathbf{r}-\mathbf{a}), \quad P_{ij} = P_{ji}. \qquad (2)$$

Тогда для энергии упругого взаимодействия между ТД и системой напряжений T имеем

$$E_{\mathrm{int}}(\mathbf{r}) = -\int f_i(\mathbf{r}')u^T_i(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = -P_{ij}u^T_{ij}(\mathbf{r}), \qquad (3)$$

где $u^T_{ij}(\mathbf{r})$ — поле деформаций, вызванное системой T в точке $\mathbf{r} = \mathbf{a}$ нахождения ТД. Система координат при этом связана с источником внутренних напряжений T. Обратим внимание, что он никак не конкретизирован. Это может быть другой ТД либо дислокационная петля. Но в любом случае надо уметь вычислять поле деформаций, создаваемое этим источником в среде, моделирующей кристалл конкретной сингонии. Если упругий диполь обладает осевой симметрией, то он характеризуется тензором вида

$$P_{ij} = P_0\delta_{ij} + P_1(l_i l_j - 1/3\delta_{ij}), \qquad (4)$$

где $\mathbf{l}$ — единичный вектор оси диполя [12]. Будем считать, что для ГПУ-сингонии она совпадает с $\langle c\rangle$-осью кристалла. Тогда в декартовой систе координат с осью z вдоль $\langle c\rangle$-оси ГПУ-кристалла тензор P_{ij} имеет только диагональные компоненты, которые в сокращенном описании можно представить в виде $P_i = P(1, 1, \varepsilon)$, $P = P_a$, $\varepsilon = P_c/P_a$, где P_a и P_c — мощности силовых диполей в $\langle a\rangle$- и $\langle c\rangle$-направлениях соответственно. Значение параметра $\varepsilon = 1$ соответствует центру дилатации ($P_1 = 0$). Отметим, что для дефекта, описываемого плотностью сил (2), в кристалле с не кубической симметрией величины P_0 и P_1 простого физического смысла не имеют. Поэтому в работах [13,14] по аналогии с $P_i = P(1, 1, \varepsilon)$ были введены диполи смещений $Q_i = Q(1, 1, \delta)$, $Q = Q_a$, $\delta = Q_c/Q_a$, связанные с силовыми диполями соотношением $P_i = C_{ij}Q_j$. Здесь C_{ijk} — упругие модули кристалла. При этом считалось, что изменение объема конечного кристалла ΔV, обусловленное точечным дефектом, связано с диполями смещений соотношением $\Delta V = Q(2+\delta)$. Тогда для ГПУ-кристалла имеем

$$E_{\mathrm{int}}(\mathbf{r}) = -\Delta V\,\frac{C_{11}+C_{12}+\delta(\varepsilon)C_{13}}{2+\delta(\varepsilon)} \times \left[Spu^T_{ij}(\mathbf{r}) - (1-\varepsilon)u^T_{33}(\mathbf{r})\right];$$

$$\delta(\varepsilon) = \frac{\varepsilon(C_{112}+C_{12}) - 2C_{13}}{C_{33}-\varepsilon C_{13}}. \qquad (5)$$

В случае центра дилатации ($\varepsilon = 1$) и упруго изотропной среды ($C_{11} = C_{22} = C_{33} = \lambda + 2\mu$; $C_{12} = C_{13} = \lambda$) получаем: $\delta = 1$;

$$E_{\mathrm{int}}(\mathbf{r}) = -\Delta V\,\frac{3\lambda+2\mu}{3}\,Spu^T_{ij}(\mathbf{r}) = -\Delta VKSpu^T_{ij}(\mathbf{r}),$$

где K — модуль всестороннего сжатия. Таким образом, остается конкретизировать источник внутренних напряжений T и рассчитать поле деформаций, создаваемое этим источником в данной упругой среде.

2. Упругое поле деформаций базисной дислокационной петли гексагонального кристалла

В качестве источника напряжений T рассмотрим краевую вакансионную петлю радиуса R, лежащую в плоскости $z = 0$ (базисная плоскость) цилиндрической системы координатах (r, φ, z), вектор Бюргерса которой перпендикулярен плоскости петли и имеет только z-компоненту $(0, 0, b)$ (рис. 1). Вектор нормали к плоскости петли совпадает с положительным направлением оси z, являющейся также осью симметрии кристалла. В работах [15,16] методом функций Грина в подходе И.М. Лифшица, Л.Н. Розенцвейга для искомых выше величин были получены следующие аналитические выражения

$$Spu^D_{ij}(\mathbf{r}) = -\frac{b}{4\pi}\int\limits_{S_D}\frac{d^2r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} \times\left[(1-3\tau_3^2)Q(\tau_3^2) + 2\tau_3^2(1-\tau_3^2)\,\frac{dQ}{d\tau_3^2}\right],$$

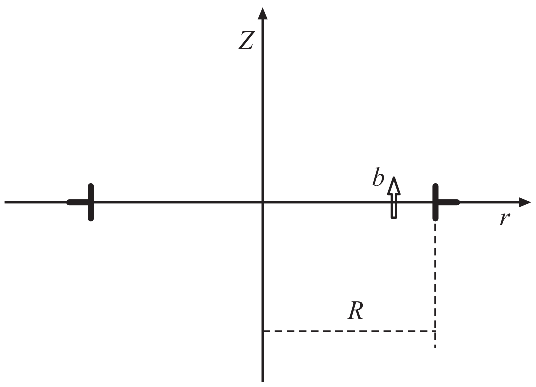

Рис. 1. Вакансионная петля радиуса R, лежащая в плоскости $x = 0$ цилиндрической системы координатах (r, φ, z) с вектором Бюргерса b вдоль оси z.

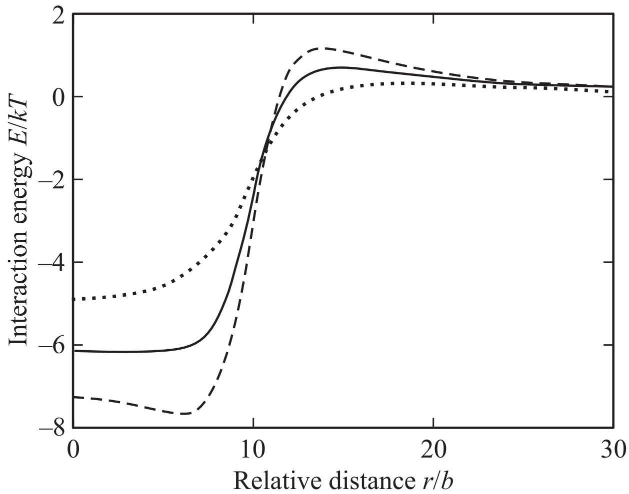

Рис. 2. Зависимость энергии упругого взаимодействия (5) СМА с вакансионной петлей радиуса $R = 10b$ в цирконии от расстояния $\rho = r/b$ в плоскости $z = 5b$ и разных значений параметра ε: $\varepsilon = 0.8$ (точки), $\varepsilon = 1$ (сплошная линия), $\varepsilon = 1.2$ (пунктир).

$$u_{33}^D(\mathbf{r}) = -\frac{b}{4\pi}\int\limits_{S_D}\frac{d^2r'}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}$$

$$\times\left[(1-3\tau_3^2)\Psi(\tau_3^2) + 2\tau_3^2(1-\tau_3^2)\frac{d\Psi}{d\tau_3^2}\right], \quad (6)$$

$$\Psi(\tau_3^2) = C_{13}V(\tau_3^2) + C_{33}W(\tau_3^2),$$

$$Q(\tau_3^2) = C_{13}K(\tau_3^2) + C_{33}W(\tau_3^2) + (C_{13}+C_{33})V(\tau_3^2),$$

$$\tau_3^2 = z^2/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2.$$

Функции $K(\tau_3^2)$, $W(\tau_3^2)$, $V(\tau_3^2)$ достаточно громоздкие, поэтому вынесены в Приложение. Интеграл берется по произвольной поверхности S_D, опирающейся на дислокационную линию (площадь петли). Все дальнейшие расчеты будем проводить в безразмерных координатах $r \to r/b$, $z \to z/d$, $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2 = r^2 + z^2 - 2rr'\cos(\varphi-\varphi') + r'^2$. В силу изотропии в базисной плоскости кристалла зависимость от азимутального угла φ в (6) отсутствует, поэтому для определенности положим его равным нулю. Характер зависимости безразмерной (E_{int}/kT) энергии взаимодействия СМА с вакансионной петлей радиуса $R = 10b$ в цирконии от расстояния r показан на рис. 2 для плоскости $z = 5b$ и разных значений параметра ε. Экспериментальные значения упругих модулей циркония согласно [17] следующие (Mbar): $C_{11} = 1.554$; $C_{12} = 0.672$; $C_{13} = 0.646$; $C_{33} = 1.725$; $C_{55} = C_{44} = 0.363$. Остальные величины: $T = 573\,\text{K}$, $\Delta V = 1.2\omega$, $\omega = 2.36\cdot10^{-29}\,\text{m}^3$. Видно, что междоузельный атом в виде вытянутого (вдоль $\langle c\rangle$-оси) эллипсоида вращения ($\varepsilon = 1.2$) притягивается (внутренняя область петли) и отталкивается (внешняя) сильнее, чем центр дилатации ($\varepsilon = 1$) и тем более чем сплюснутый сфероид ($\varepsilon = 0.8$). Аналогичным образом взаимодействует с петлей и вакансия, но с поправкой на знак ($\Delta V = -0.6\omega$).

3. Фактор предпочтения петли. Постановка задачи

В случае диффузионной изотропии среды $D_{ik} = D\delta_{ik}$ поток точечных дефектов на дислокационную петлю J находится, путем решения в ее области влияния следующей диффузионной задачи в квазистационарном приближении:

$$\omega\,\text{div}\,\mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0,\ \ \omega\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -DC(\mathbf{r})\beta\nabla\mu(\mathbf{r}),\ \ \beta \equiv 1/k_BT,$$

$$\beta\mu(\mathbf{r}) = \ln\left(\frac{C(\mathbf{r})}{C^e}\exp(\beta E_{\text{int}}(\mathbf{r}))\right),\ \ J = \iint\limits_S[\mathbf{nj}(\mathbf{r})]d\sigma. \quad (7)$$

Здесь $C(\mathbf{r})$ — концентрация мигрирующих ТД; $\mathbf{j}(\mathbf{r})$, $\mu(\mathbf{r})$ — их плотность потока и химпотенциал соответственно; $E_{\text{int}}(\mathbf{r})$ — полученная выше (5), (6) их энергия взаимодействия с петлей; C^e — равновесная тепловая концентрация ТД в кристалле в отсутствие поля напряжений E_{int}; интеграл берется по произвольной поверхности, содержащей петлю, $\mathbf{n}$ — внешняя нормаль к ней. Уравнение (7) следует дополнить граничными условиями. Внутренняя поверхность S_c, как правило, выбирается в виде тороида, содержащего линию дислокации, радиус образующей окружности которого r_c имеет смысл радиуса ядра дислокации. Граничное условие на ней имеет вид

$$C(\mathbf{r})\exp\big(E_{\text{int}}(\mathbf{r})\big)|_{S_c} = C_R. \quad (8)$$

Оно стандартное и соответствует значению химпотенциала ТД на ядре дислокации $\mu|_{S_c} = \frac{\omega}{b}P(r_c, R)$, где P — сила, приложенная к единице длины петли и действующая нормально к линии дислокации в ее плоскости. Она определяется линейным натяжением дислокационной линии и обуславливает эффект коалесценции петель одной природы при отжиге [18]. Внешняя поверхность

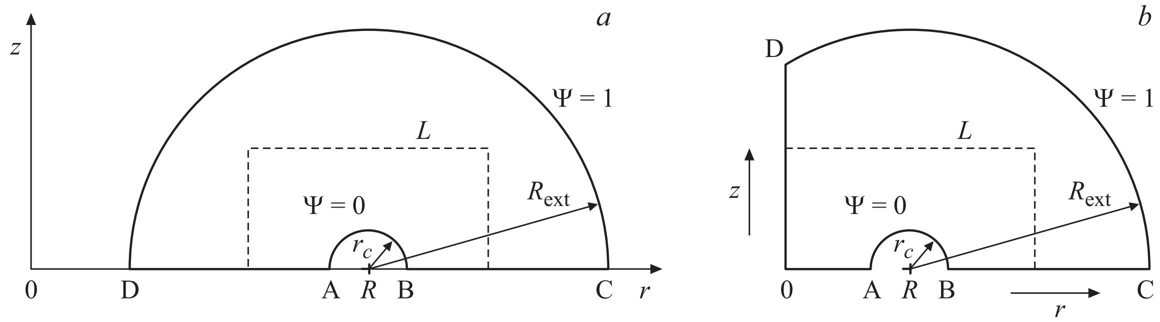

Рис. 3. Система координат для тороидального резервуара: $R > R_{ext}$ (a), $R < R_{ext}$ (b).

S_{ext}, выбирается по-разному. Это либо окружность, либо цилиндр, либо соосный с S_c тороид S_{ext}, радиус образующей окружности которого R_{ext} имеет смысл радиуса области влияния петли. Граничное условие на ней обычно [7] формулируется в виде $C(\mathbf{r})|_{S_{ext}} = \bar{C}$, где $\bar{C}$ — средняя концентрация ТД в эффективной среде, моделирующей влияние всего ансамбля стоков. В данной работе точка зрения иная. Мы предлагаем формулировать его для химпотенциала в виде $\beta\mu|_{S_{ext}} = \ln(\bar{C}/C^e)$. Это стандартный вид химпотенциала ТД в эффективной среде, где влияние конкретного стока нивелируется всем ансамблем. Тогда

$$C(\mathbf{r})\exp\big(E_{\text{int}}(\mathbf{r})\big)|_{S_{ext}} = \bar{C}. \tag{9}$$

В терминах новой переменной

$$\psi(r,z) = [C(r,z)\exp E_{\text{int}}(r,z) - C_R]/[\bar{C} - C_R]$$

квазистационарное уравнение диффузии в безразмерных цилиндрических координатах с учетом изотропии в базисной плоскости имеет вид

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{\partial E_{\text{int}}}{\partial r}\right)\frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{\partial E_{\text{int}}}{\partial z}\frac{\partial\psi}{\partial z} = 0 \tag{10}$$

с граничными условиями на внутренней и внешней тороидальных поверхностях

$$\psi(r,z) = 0 \ \text{ на } \ (r^2 + z^2 + R^2 - r_c^2)^2 = 4R^2r^2$$

$$R - r_c \le r \le R + r_c; \tag{11}$$

$$\psi(r,z) = 1 \ \text{ на } \ (r^2 + z^2 + R^2 - R_{ext}^2)^2 = 4R^2r^2$$

$$R - R_{ext} \le r \le R + R_{ext} \text{ для } R > R_{ext};$$

$$0 \le r \le R + R_{ext} \text{ для } R < R_{ext}.$$

Для искомого потока тогда имеем:

$$J = 2\pi R\,\frac{D}{\omega}\,Z(r_c, R, R_{ext})[\bar{C} - C_R],$$

$$Z(r_c, R, R_{ext}) = \frac{1}{2\pi R}\iint\limits_S \exp\big(-E_{\text{int}}(r,z)\big)[\mathbf{n}\nabla\psi(r,z)]d\sigma. \tag{12}$$

Безразмерную величину $Z(r_c, R, R_{ext})$ называют эффективностью поглощения ТД дислокационной петлей, а величину $B = 1 - Z_v/Z_i$ — ее фактором предпочтения (bias), где индексами v, i обозначены вакансии и СМА соответственно. Если $B > 0$, говорят, что петля имеет предпочтение к междоузлиям. Диффузионная задача (10), (11) решалась численно методом конечных разностей [7,19]. На рис. 3 показано сечение тороидального резервуара, содержащего петлю, с учетом симметрии отражения в плоскости $x = 0$ и симметрии относительно поворота вокруг оси oz. Для радиуса $R > R_{ext}$ диффузионное поле рассчитывалось в области, ограниченной поверхностями DA, AB, BC, CD, для $R < R_{ext}$ — поверхностями OA, AB, BC, CD, DO. Указанная симметрия накладывает дополнительные граничные условия: $\partial\psi/\partial z = 0$ на DA, BC, OA, соответствующее нулевому потоку через плоскость $z = 0$, и $\partial\psi/\partial r = 0$ на DO (ось симметрии). После этого по формуле (12) вычислялась эффективность поглощения ТД α-го сорта и фактор предпочтения B. Внутренняя произвольная поверхность S в (12) для удобства вычислений выбрана в виде прямоугольника вращения. На рис. 3 это контур L. Расчеты выполнены для циркония, материальные параметры которого приведены выше. Точечный дефект моделируется центром дилатации.

4. Результаты и их обсуждение

На рис. 4 представлена зависимость bias-фактора дислокационных петель разной природы от их радиуса в единицах b (+ — вакансионная петля, $\circ$ — междоузельная петля; $r_c = 3b$). Для упрощения вычислений радиус сечения внешнего тора R_{ext} задавался одинаковым для вакансий и СМА, что соответствует приближению $\rho \approx 1/\pi R_{ext}^2$ (где ρ — плотность стоков). Если доминирующим стоком в системе являются дислокации, то значение $R_{ext} = 125b$ — соответствует плотности дислокаций $\rho \approx 2 \cdot 10^{10}\,\text{cm}^{-2}$ рис. 4, a, а $R_{ext} = 55b$ — плотности дислокаций рис. 4, b. Штриховая линия соответствует пределу прямолинейной дислокации B_{str}. Надо сказать, что аналогичная задача решалась многими авторами, правда в приближении упруго изотропной

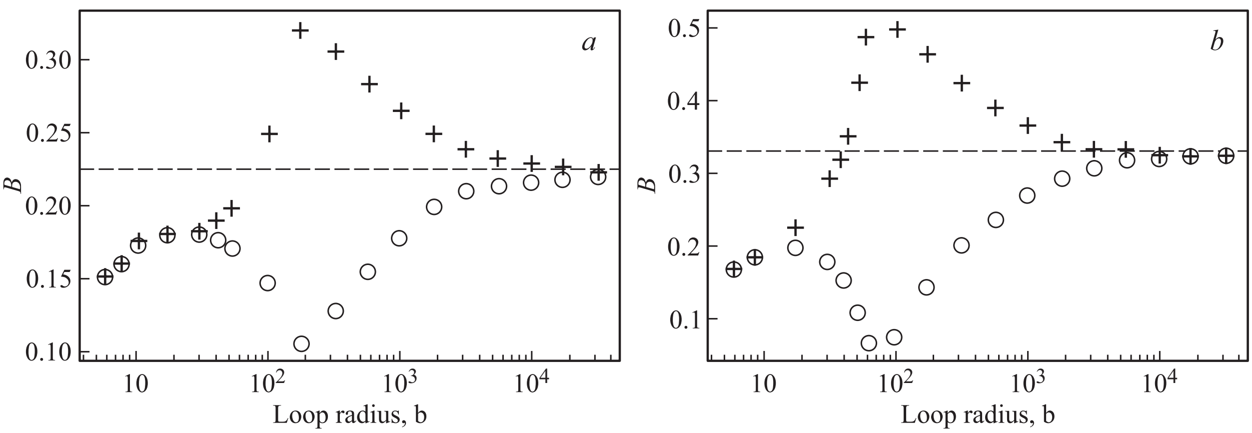

Рис. 4. Зависимость bias-фактора B от радиуса петли для $R_{ext} = 125b$ (a) и $R_{ext} = 55b$ (b) ($\circ$ — междоузельная петля, $+$ — вакансионная).

среды, а также в цилиндрическом или сферическом резервуаре. Основные результаты этих исследований сформулированы в [7]. Естественно сравнить их с нашими. Во-первых, отмечается, что дислокационные петли являются „biased"-стоками, которые эффективнее поглощают СМА, чем вакансии. Этот вывод подтверждается и нашими расчетами, поскольку $B > 0$ для обоих видов петель. Во-вторых, что фактор предпочтения зависит от радиуса петли и плотности стоков. И это абсолютно верно. Однако далее следует важный вывод о том, что фактор предпочтения не зависит от природы петли, причем для любого вида резервуара. В нашем случае „традиционная" симметрия в поглощении ТД петлями разной природы нарушается: bias-фактор междоузельной петли при фиксированном внешнем радиусе тора R_{ext} имеет минимум с выходом на соответствующие значения прямолинейной дислокации. Кстати, последнее обстоятельство характерно именно для тороидального резервуара, в случае сферы или цилиндра B монотонно растет. Аналогичная зависимость для вакансионной петли демонстрируют наличие максимума. Положения минимума и максимума смещаются в область меньших размеров петель с увеличением плотности стоков или с уменьшением R_{ext}. Обратим внимание, что фактор предпочтения петель разной природы с ростом их размера выходит на одно и то же значение, как по идее и должно быть. Формальная причина нарушения указанной симметрии связана с граничным условием на внешнем радиусе тора R_{ext} (11), поскольку численный анализ уравнений (10)–(12) показал, что учет упругой анизотропии кристалла (5), (6) для базисных краевых петель существенной роли не играет. В нашем случае на границе области влияния стока и эффективной среды предполагается равенство химпотенциалов ТД. В результате мы имеем одну эффективность поглощения $Z(r_c, R, R_{ext})$, поток на петлю, пропорциональный разности $[\bar{C} - C_R]$, и граничное условие (11) ($\psi = 1$), не чувствительное к типу петли. В работах других авторов (см. например [7]) традиционно предполагается равенство концентраций ТД ($C(\bar{r}]_{r=R_{ext}} = \bar{C}$). Тогда возникают две эффективности: поглощения и испускания, соответственно два потока, граничное условие для расчета потока поглощения принимает вид $\psi = \bar{C}\exp(E(R_{ext}))$, и как результат — независимость bias-фактора поглощения от природы петли. Ответить однозначно на вопрос, какой подход правильный, пока не удается. Обнадеживающим является то обстоятельство, что в нашем варианте, базисные междоузельные петли, обладающие наименьшим фактором предпочтения, можно считать основным стоком для вакансий. Поэтому они не имеют шансов на выживание, что и наблюдается экспериментально. Судьба вакансионных петель неоднозначна. Большие петли не могут выживать из-за их большего bias-фактора по сравнению с прямолинейной дислокацией, однако именно они и наблюдаются в процессе радиационного роста циркония. Их „точкой накопления" можно считать размер, когда $B = B_{str}$. Однако, если в процессе эволюции микроструктуры кристалла средний bias-фактор системы стоков в целом станет больше, чем у прямолинейной дислокации и будет расти, то „точка накопления" может смещаться в сторону увеличения размеров выживающих вакансионных петель. Другими словами необходим „внешний" источник вакансий в базисную плоскость. Таковым могут быть междоузельные петли, зарождающиеся на призматических плоскостях при радиационном росте циркония. Однако аналогичный анализ их фактора предпочтения это предмет будущих исследований.

Финансирование работы

Работа выполнена за счет средств бюджетной программы Украины „Поддержка развития приоритетных направлений научных исследований" (КПВК 6541230).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Приложение

$$V(\tau_3^2) \equiv (1-3\tau_3^2)\Phi(\tau_3^2) + 2\tau_3^2(1-\tau_3^2)\,\frac{d\Phi}{d\tau_3^2};$$

$$W(\tau_3^2) \equiv F(\tau_3^2) - 2(1-\tau_3^2)\,\frac{dF}{d\tau_3^2};$$

$$\Phi(\tau_3^2) \equiv \frac{2i}{(z_1+z_2)}\,\frac{a+b+\chi+\rho}{A(\tau_3^2)};$$

$$F(\tau_3^2) \equiv \frac{2i}{(z_1+z_2)A(\tau_3^2)} \times \left((b+\rho)+(a+b-\rho)\tau_3^2 - \frac{a+2b}{z_1z_2}\right);$$

$$\mathrm{K}(\tau_3^2) \equiv \mathrm{N}(\tau_3^2) - 2\tau_3^2\,\frac{d\mathrm{N}}{d\tau_3^2} - 3\tau_3^2\mathrm{M}(\tau_3^2) + 2\tau_3^2(1-\tau_3^2)\,\frac{d\mathrm{M}}{d\tau_3^2};$$

$$\mathrm{N}(\tau_3^2) \equiv \frac{2i}{(z_1+z_2)}\,\frac{R(\tau_3^2)}{bA(\tau_3^2)} - \frac{b\tau_3^2}{\sqrt{bP(\tau_3^2)}(b+\rho)(1-\tau_3^2)};$$

$$\mathrm{M}(\tau_3^2) \equiv \frac{2i}{(z_1+z_2)}\,\frac{S(\tau_3^2)}{(1-\tau_3^2)bA(\tau_3^2)} - \frac{P(\tau_3^2)+b\tau_3^2}{\sqrt{bP(\tau_3^2)}(b+\rho)(1-\tau_3^2)^2}.$$

$$R(\tau_3^2) = \frac{(a+b)(b+\rho)}{z_1z_2} - \frac{A(\tau_3^2)P(\tau_3^2)}{2(b+\rho)(1-\tau_3^2)} \times \left(z_1z_2 - \frac{b}{P(\tau_3^2)}\right);$$

$$S(\tau_3^2) = (a+b)(b+\rho)\left[\frac{1}{z_1z_2}+\tau_3^2\right] - \frac{A(\tau_3^2)P(\tau_3^2)}{2(b+\rho)(1-\tau_3^2)} \times \left[\left(z_1z_2 - \frac{b}{P}\right) + \left(z_1^2z_2^2 + \frac{b}{P}\left[z_1z_2 - \frac{2B}{A}\right]\right)\tau_3^2\right].$$

$$A(\tau_3^2) = 2\left[k + l(1-\tau_3^2) - m(1-\tau_3^2)^2\right];$$

$$B(\tau_3^2) = 2k + l(1-\tau_3^2);$$

$$P(\tau_3^2) = b + \rho(1-\tau_3^2).$$

$$k = (a+2b)(b+\rho);$$

$$l = (a+2b)\gamma + (2b-\chi)(\chi+2\rho);$$

$$a = C_{12};$$

$$b = \frac{1}{2}\,(C_{11}-C_{12}) = C_{66};$$

$$\chi = C_{13} - C_{12};\ \gamma = C_{11} + C_{33} - 4C_{44} - 2C_{13};$$

$$\rho = C_{44} - \frac{1}{2}\,(C_{11}-C_{12});$$

$$z_1z_2 = -\sqrt{\frac{2k}{A(\tau_3^2)}};$$

$$z_1+z_2 = i\sqrt{2}\left(\sqrt{\frac{2k}{A(\tau_3^2)}} + \frac{B(\tau_3^2)}{A(\tau_3^2)}\right)^{1/2}.$$

Список литературы

[1] A.D. Brailsford, R. Bullougb. J. Nucl. Mater. **44**, 121 (1972).
[2] A.D. Brailsford, R. Bullougb , M.R. Hayns. J. Nucl. Mater. **60**, 246 (1976).
[3] V.A. Borodin, A.E. Volkov, A.I. Ryazanov. J. Nucl. Mater. **307–311**, 862 (2002).
[4] M. Griffiths. J. Nucl. Mater. **159**, 190 (1988).
[5] C.H. Woo. J. Nucl. Mater. **276**, 90 (2000).
[6] S.N. Buckley. Properties of Reactor Materials and Effects of Irradiation Damage. Butterworths, London (1962). 413 p.
[7] V.I. Dubinko, A.S. Abyzov, A.A. Turkin. J. Nucl. Mater. **336**, 11 (2005).
[8] C.H. Woo, U. Gosele. J. Nucl. Mater. **119**, 219 (1983).
[9] C.H. Woo. J. Nucl. Mater. **159**, 237 (1988).
[10] G.D. Samolyuk, A.V. Barashev, S.I. Golubov, Y.N. Osetsky, R.E. Stoller. Acta Mater. **78**, 173 (2014).
[11] Дж. Эшелби. Континуальная теория дислокаций. Наука, М. (1963). 215 с.
[12] А.М. Косевич. Физическая механика реальных кристаллов. Наук. думка, Киев. (1981). 328 с.
[13] E. Kröner. Z. Phyz. **136**, 402 (1953).
[14] M.H. Yoo. Phys. Status Solidi B **61**, 411 (1974).
[15] П.Н. Остапчук, О.Г. Троценко. ФТТ **58**, 1749 (2016).
[16] П.Н. Остапчук, О.Г. Троценко. ФТТ **59**, 912 (2017).
[17] L. Fast, J.M. Wills, B. Johansson, O. Eriksson. Phys. Rev. B **51**, 17431 (1995).
[18] А.М. Косевич, З.К. Саралидзе, В.В. Слезов. ФТТ **6**, 3383 (1964).
[19] C.H. Woo, W.S. Liu, M.S. Wuschke. AECL-6441 (1979).

Редактор Т.Н. Василевская