

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ

PACS numbers: 02.30.Hq, 02.30.Oz, 05.65.+b, 61.72.Bb, 61.72.Cc, 61.80.Az, 62.20.Hg

Динамика развития радиационной ползучести при генерации вакансий скользящими дислокациями

П. А. Селищев, Т. П. Диденко

*Киевский национальный университет им. Тараса Шевченко,
физический факультет,
просп. Акад. Глушкова, 4,
03680, ГСП, Киев, Украина*

В рамках механизма «скольжения–переползания» дислокаций изучено влияние генерации вакансий скользящими дислокациями на изменение концентрации точечных дефектов в облучаемом материале. Получены стационарные распределения для концентраций междуузельных атомов и вакансий, исследована их устойчивость, построены фазовые портреты для изменения концентрации точечных дефектов. Найдено установившееся значение скорости ползучести и изменение скорости ползучести в нестационарном режиме.

В межах механізму «ковзання–переповзання» дислокацій вивчено вплив генерації вакансій ковзними дислокаціями на зміну концентрації точкових дефектів в опромінені матеріалі. Одержано стаціонарні розподіли для концентрацій міжвузловинних атомів і вакансій, досліджено їх стійкість, побудовано фазові портрети для зміни концентрації точкових дефектів. Знайдено усталене значення швидкості плазучості і зміну швидкості плазучості в нестационарному режимі.

Within the scope of the dislocations' 'glide-climb' model, the effect of generation of vacancies by gliding dislocations on the change in the concentration of point defects in irradiated material is studied. The stationary distributions for the concentrations of interstitial atoms and vacancies are obtained, their stability is investigated, phase portraits for a change of the concentration of point defects are plotted. A steady value of creep rate and the change of creep rate during the transient mode are determined.

Ключевые слова: облучение, вакансии, междуузельные атомы, дислокации, ползучесть.

(Получено 12 мая 2010 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Пластическая деформация металлов и сплавов в значительной степени обусловлена наличием в материале дефектов кристаллической решетки и их нелинейным взаимодействием. В условиях облучения вид, количество и распределение радиационных дефектов существенно изменяется, а именно происходит увеличение числа дислокаций, увеличивается число стопоров дислокаций, а с другой стороны увеличивается и число точечных дефектов, которые способствуют преодолению этих стопоров.

В рассматриваемой модели учитывается, что дислокация, в процессе своего движения не только поглощает, но и генерирует собственные точечные дефекты. Согласно [1] наиболее вероятным механизмом образования дефектов является консервативное движение ступеньки на чисто винтовой дислокации. В соответствии с традиционными представлениями, дефекты будут генерироваться в виде одномерных цепочек: ступенька может порождать либо междоузельные атомы, либо вакансии. Для удобства ограничимся случаем, при котором генерируются вакансии. Тогда наиболее вероятным их источником будут единичные ступеньки 30- и 60-градусной дислокаций, при каждом элементарном переползании которых генерируется по две пары вакансий [2].

Представляет интерес выяснить, как влияет генерация вакансий скользящими дислокациями на радиационную ползучесть и на динамику изменения плотности междоузельных атомов и вакансий.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Ползучесть материалов под облучением связана с наличием дополнительных точечных дефектов. Стоками для точечных дефектов являются дислокации, в том числе и те которые обеспечивают ползучесть. Нелинейные взаимосвязи между точечными дефектами и дислокациями непосредственно сказываются на радиационной ползучести, поскольку она обусловлена движением дислокаций, которое контролируется потоками точечных дефектов. Согласно механизму «скольжения–переползания» причиной ползучести нагруженного материала является скольжение дислокаций, вызванное приложенным внешним напряжением. Стопоры, препятствующие скольжению (дислокации леса, поры, кластеры и т.д.), дислокация переползает за счет поглощения междоузельных атомов и вакансий, благодаря чему переходит в другие плоскости скольжения.

Скорость ползучести облучаемого образца описывается уравнением:

$$\dot{\epsilon} = v |(J_i - J_v)|, \quad (1)$$

где $J_i = \alpha_i n_i$ и $J_v = \alpha_v n_v$ — плотности потоков междоузельных атомов и вакансий на дислокации с вектором Бюргерса, параллельным приложенной нагрузке, $\alpha_i = z_d \rho_d D_i / 3$, $\alpha_v = \rho_d D_v / 3$, ρ_d — полная плотность дислокаций в кристалле. Полагалось, что в среднем одна треть дислокаций имеет вектор Бюргерса параллельный приложенной нагрузке.

Параметр v можно представить в виде: $v = L(\sigma) / l$, где L — средняя длина скольжения дислокаций, которая является функцией приложенного напряжения σ , l — средний размер барьера [3].

Выражение под модулем в уравнении (1) положительное в том случае, когда поток на дислокацию междоузельных атомов преобладает над потоком вакансий, ползучесть происходит по вакансионному механизму, в противном случае оно будет отрицательно, ползучесть происходит по междоузельному механизму. Если потоки вакансий и междоузельных атомов, которые обеспечивают ползучесть, равны, то средняя скорость переползания стопоров будет равна нулю.

Рассмотрим образец на начальной стадии облучения, когда в материале присутствуют только легко преодолимые препятствия, а уменьшение количества дислокаций за счет их выхода на поверхность компенсируется ростом дислокационных петель.

Изменение концентрации точечных дефектов найдем из следующих уравнений:

$$\frac{dn_i}{dt} = K - (z_d \rho_d + \rho) D_i n_i - \gamma n_i n_v, \quad (2)$$

$$\frac{dn_v}{dt} = K - (\rho_d + \rho) D_v n_v + \xi |D_v n_v - D_i z_d n_i| \rho_d - \gamma n_i n_v; \quad (3)$$

здесь n_i , n_v — концентрации междоузельных атомов и вакансий, K — скорость создания дефектов внешним облучением, ρ — плотность недислокационных стоков, z_d — фактор предпочтительного поглощения точечных дефектов дислокациями, ξ — количество вакансий, генерируемых скользящей дислокацией при ее перемещении на единицу длины, $D_i = D_i^0 \exp(-E_m^i / kT)$ и $D_v = D_v^0 \exp(-E_m^v / kT)$ — коэффициенты диффузии междоузельных атомов и вакансий, а E_m^i и E_m^v — соответствующие энергии миграции, γ — коэффициент рекомбинации дефектов, T — температура образца, k — постоянная Больцмана.

Полученная система уравнений является нелинейной. Чтобы проследить эволюцию системы (2)–(3), а соответственно и динамику развития ползучести облучаемого образца, построим фазовые портреты системы.

Для начала, чтобы понять физику происходящих процессов, рассмотрим упрощенную модель, когда рекомбинацией точечных де-

фектов можно пренебречь. Она справедлива, для случаев, при которых производство дефектов мало, или когда дефектов одного типа намного больше, чем другого.

2.1. Модель без учета рекомбинации точечных дефектов

В пренебрежении рекомбинацией изменение концентрации точечных дефектов описывается системой уравнений (2), (3), в которых нужно положить равными нулю в первом уравнении третье слагаемое, во втором — четвертое.

В зависимости от значений параметров, например, скорости генерации точечных дефектов, система может иметь либо одно, либо два стационарных решения.

Первое стационарное решение соответствует случаю, при котором $D_v n_v < D_i z_d n_i$, и имеет вид:

$$n_i^{st} = \frac{K}{(z_d \rho_d + \rho) D_i}, \quad (4)$$

$$n_v^{st} = \frac{K}{D_v} \frac{(z_d \rho_d (\xi + 1) + \rho)}{(z_d \rho_d + \rho)(\rho_d (\xi + 1) + \rho)}; \quad (5)$$

тогда для стационарного значения скорости ползучести получаем:

$$\dot{\epsilon}^{st} = v \left| \frac{K}{z_d \rho_d + \rho} \left(z_d \rho_d - \rho_d \frac{(z_d \rho_d (\xi + 1) + \rho)}{\rho_d (\xi + 1) + \rho} \right) \right|. \quad (6)$$

Оно реализуется для всех значений параметров.

Во втором случае $D_v n_v > D_i z_d n_i$ (т.е. доминирует поток вакансий), и стационарное состояние описывается следующими выражениями:

$$n_i^{st} = \frac{K}{(z_d \rho_d + \rho) D_i}, \quad (7)$$

$$n_v^{st} = \frac{K}{D_v} \frac{((\xi - 1) z_d \rho_d - \rho)}{(z_d \rho_d + \rho)((\xi - 1) \rho_d - \rho)}, \quad (8)$$

$$\dot{\epsilon}^{st} = v \left| \frac{K}{z_d \rho_d + \rho} \left(z_d \rho_d - \rho_d \frac{(z_d \rho_d (\xi - 1) + \rho)}{\rho_d (\xi - 1) + \rho} \right) \right|. \quad (9)$$

Это решение реализуется при условии $\xi > 1 + \rho/\rho_d$ и появляется при

$$\xi_{\text{буф}} = 1 + \rho/\rho_d. \quad (10)$$

Для исследования устойчивости стационарных состояний рассмотрим эволюцию их малых возмущений δn_i и δn_v , которые будем искать в виде $\delta n_i, \delta n_v \propto \exp(\lambda t)$.

Декремент затухания λ малой флуктуации удовлетворяет уравнению

$$\lambda^2 + p\lambda + q = 0. \quad (11)$$

Для первого стационарного решения имеем:

$$p = \rho_d D_v (1 + \xi) + \rho (D_v + D_i), \quad (12)$$

$$q = D_i D_v (\rho_d (1 + \xi) + \rho) (z_d \rho_d + \rho). \quad (13)$$

Величины p и q положительны при любых физически допустимых значениях параметров; следовательно, $\lambda < 0$, и первое стационарное решение будет устойчиво. Его топологический тип — устойчивый «узел» (фокус).

Для второго стационарного решения p и q принимают вид:

$$p = \rho_d D_v (1 - \xi) + \rho (D_v + D_i), \quad (14)$$

$$q = D_i D_v (\rho_d (1 - \xi) + \rho) (z_d \rho_d + \rho). \quad (15)$$

С возрастанием ξ , условие $q > 0$ нарушается, q становится отрицательным, а стационарное решение — неустойчивым, его топологический тип — неустойчивое «седло».

2.1.1. Главные изоклины и фазовые портреты

Фазовые портреты динамики изменения вакансий и междоузельных атомов для различных плотностей дислокаций представлены на рис. 1. Они построены методом изоклин.

Главная изоклина $\frac{dn_v}{dn_i} = \infty$ (n_i^1) определяется из условия $\frac{dn_i}{dt} = 0$

и имеет вид

$$n_i^1 = \frac{K}{(z_d \rho_d + \rho) D_i}. \quad (16)$$

Вторая главная изоклина $\frac{dn_v}{dn_i} = 0$ определяется из условия

$\frac{dn_v}{dt} = 0$ и задается кривой n_i^2 . Она имеет две ветви в зависимости от

знака выражения под модулем в уравнении (3):

1) $D_v n_v > D_i z_d n_i$,

$$n_i^2 = \frac{K + ((\xi - 1)\rho_d - \rho) D_v n_v}{\xi \rho_d z_d D_i}, \tag{17}$$

а) если $(\xi - 1)\rho_d - \rho = 0 \Rightarrow n_i^{2a} = \frac{K}{(z_d \rho_d + z_d \rho) D_i} < n_i^1$ при $z_d > 1$,

б) если $(\xi - 1)\rho_d - \rho > 0 \Rightarrow n_i^{2б} < n_i^{2a} < n_i^1$,

в) если $(\xi - 1)\rho_d - \rho \leq 0$, то стационарного решения нет;

2) $D_v n_v < D_i z_d n_i$,

$$n_i^2 = \frac{-K + ((\xi + 1)\rho_d + \rho) D_v n_v}{\xi \rho_d z_d D_i}. \tag{18}$$

Из рисунка 1 видно, что любая фазовая траектория пересекает пунктирную линию (на рис. 1 это прямая (19)) только раз, поэтому в процессе своего изменения скорость ползучести либо принимает нулевое значение только один раз, это происходит при выполнении равенства

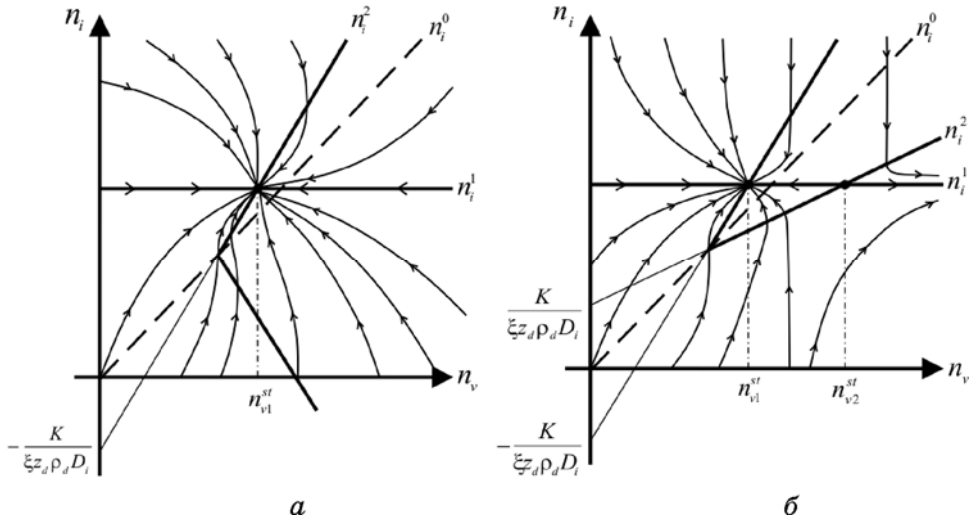


Рис. 1. Фазовые портреты системы уравнений (2), (3) для различных плотностей дислокаций. Пунктирную линию (---) образуют состояния, для которых $|D_v n_v - z_d D_i n_i| = 0$. Сплошной толстой линией обозначены главные изоклины. $\rho_d > \frac{\rho}{\xi - 1}$ (а); $\rho_d \leq \frac{\rho}{\xi - 1}$ (б).

$$n_i^0 = \frac{D_v n_v}{z_d D_i} (z_d = 1) \quad (19)$$

или остается всегда положительной.

Первый фазовый портрет (рис. 1, а) отвечает случаю, при котором реализуется единственное стационарное состояние (главные изоклины имеют одно пересечение). Второй фазовый портрет (рис. 1, б) отвечает случаю существования двух особых точек (n_i^2 дважды пересекает n_i^1).

2.2. Учет рекомбинации точечных дефектов

Учет рекомбинации меняет стационарные решения, но не меняет их число.

При $D_v n_v < D_i z_d n_i$ для любых значений параметров имеем:

$$n_i^{st} = \frac{K}{(z_d \rho_d + \rho) D_i + \gamma n_v}, \quad (20)$$

$$n_v^{st} = \frac{-A + \sqrt{A^2 - B}}{2\gamma(\rho_d + \rho + \xi \rho_d)}, \quad (21)$$

$$\dot{\varepsilon}^{st} = v \left| \rho_d \left(\frac{z_d K}{z_d \rho_d + \rho + \gamma n_v / D_i} - D_v \left(\frac{-A + \sqrt{A^2 - B}}{2\gamma(\rho_d + \rho + \xi \rho_d)} \right) \right) \right|, \quad (22)$$

где $A = D_i (\rho_d (\rho_d z_d (1 + \xi) + \xi + \rho + \rho z_d) + \rho^2)$,

$$B = \frac{4}{D_v^2} (D_v \gamma (\rho_d + \rho + \xi \rho_d)) (-K D_i (z_d \rho_d (\xi + 1) - \rho)).$$

При $D_v n_v > D_i z_d n_i$ и при (10) получаем:

$$n_i^{st} = \frac{K}{(z_d \rho_d + \rho) D_i + \gamma n_v}, \quad (23)$$

$$n_v^{st} = \frac{-A + \sqrt{A^2 - B}}{2\gamma(\rho_d + \rho - \xi \rho_d)}, \quad (24)$$

$$\dot{\varepsilon}^{st} = v \left| \rho_d \left(\frac{z_d K}{z_d \rho_d + \rho + \gamma n_v / D_i} - D_v \left(\frac{-A + \sqrt{A^2 - B}}{2\gamma(\rho_d + \rho - \xi \rho_d)} \right) \right) \right|, \quad (25)$$

где

$$A = D_i (\rho_d (z_d (1 - \xi) - \xi + \rho + \rho z_d) + \rho^2),$$

$$B = \frac{4}{D_v^2} (D_v \gamma (\rho_d + \rho - \xi \rho_d)) (K D_i (z_d \rho_d (\xi - 1) - \rho)).$$

Исследуя стационарные решения на устойчивость, для декремента затухания малой флуктуации λ получаем:

$$\lambda^2 + p\lambda + q = 0. \quad (26)$$

Для первого стационарного значения имеем:

$$p = (z_d \rho_d + \rho) D_i + \gamma n_v + (\rho_d + \rho) D_v + \xi D_v \rho_d + \gamma n_i, \quad (27)$$

$$q = ((z_d \rho_d + \rho) D_i + \gamma n_v) ((\rho_d + \rho) D_v + \xi D_v \rho_d + \gamma n_i) - \gamma n_i (\gamma n_v - \xi z_d D_i \rho_d). \quad (28)$$

Стационарное состояние будет устойчиво, так как $p > 0$ и $q > 0$. Его топологический тип — устойчивый «узел».

Для второго стационарного решения p и q принимают вид:

$$p = (z_d \rho_d + \rho) D_i + \gamma n_v + (\rho_d + \rho) D_v - \xi D_v \rho_d + \gamma n_i, \quad (29)$$

$$q = ((z_d \rho_d + \rho) D_i + \gamma n_v) (\rho_d + \rho) D_v - \xi D_v \rho_d + \gamma n_i - \gamma n_i (\xi z_d D_i \rho_d + \gamma n_v). \quad (30)$$

Стационарное значение является неустойчивым, его топологический тип — неустойчивое «седло».

2.2.1. Главные изоклины и фазовые портреты

С учетом рекомбинации точечных дефектов, главная изоклина n_i^1 имеет вид:

$$n_i^1 = \frac{K}{(z_d \rho_d + \rho) D_i + \gamma n_v}. \quad (31)$$

Вторая главная изоклина задается кривой n_i^2 ; она имеет две ветви:

1) при $D_v n_v > D_i z_d n_i$

$$n_i^2 = \frac{K + (\xi \rho_d - \rho_d - \rho) D_v n_v}{\xi z_d D_i \rho_d + \gamma n_v}; \quad (32)$$

2) при $D_v n_v < D_i z_d n_i$

$$n_i^2 = \frac{K - (\xi \rho_d + \rho_d + \rho) D_v n_v}{\gamma n_v - \xi z_d D_i \rho_d}. \quad (33)$$

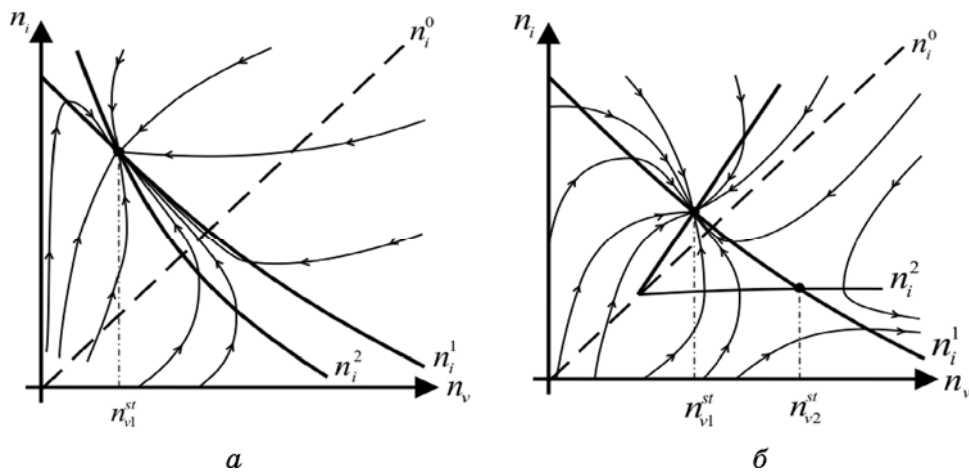


Рис. 2. Фазовый портрет системы (20), (21). Пунктирную линию (---) образуют состояния, для которых $|D_v n_v - z_d D_i n_i| = 0$. Сплошной толстой линией обозначены главные изоклины. $\rho_d > \frac{\rho}{\xi - 1}$ (а); $\rho_d < \frac{\rho}{\xi - 1}$ (б).

Главные изоклины имеют вид гипербол и в зависимости от значений параметров пересекаются или один раз, или два.

Фазовые портреты динамики изменения концентрации вакансий и междоузельных атомов для различных плотностей дислокаций с учетом рекомбинации точечных дефектов представлены на рис. 2.

Здесь так же, как и без учета рекомбинации, любая фазовая траектория пересекает пунктирную линию (см. условие (19)) только раз; поэтому в процессе своего изменения скорость ползучести остается всегда положительной или может равняться нулю только в одной точке.

Первый фазовый портрет (рис. 2, а) отвечает случаю, при котором реализуется единственное стационарное состояние.

Второй фазовый портрет (рис. 2, б) отвечает случаю существования двух особых точек.

3. ВЫВОДЫ

Генерация вакансий скользящими дислокациями приводит к появлению второго стационарного состояния, которое имеет топологический тип «седло». Вследствие этого появляется область начальных состояний системы, эволюция которых не приводит к стационарному состоянию. В этом случае скорость пластической деформации будет нарастать вплоть до разрушения материала.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Дж. Хирт, И. Лоте, *Теория дислокаций* (Москва: Атомиздат: 1972).
2. Н. И. Тарбаев, Г. А. Шепельский, Е. А. Сальков, *Письма в ЖЭТФ*, **66**, № 10: 639 (1997).
3. П. А. Селищев, *Самоорганизация в радиационной физике* (Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»–Институт компьютерных исследований: 2008).
4. В. И. Сугаков, *Введение в синергетику* (Киев: ИЦП «Киевский университет»: 1992).