

PACS numbers: 05.40.Ca, 05.65.+b, 61.72.Bb, 61.72.Lk, 61.80.Az, 62.20.D-, 62.20.F-

## **Моделирование радиационного воздействия на деформацию бинарных сплавов**

Д. О. Харченко, О. М. Щёктова, И. О. Лысенко

*Институт прикладной физики НАН Украины,  
ул. Петропавловская, 58,  
40000 Сумы, Украина*

Рассмотрен механизм пластического течения в бинарных сплавах, подверженных радиационному воздействию. На основе модели фазового поля проведено численное моделирование формирования и эволюции дислокаций и пластических деформаций с учётом дополнительного атермического перемешивания атомов, вызванного радиационно-индуцированной баллистической диффузией. В данной модели в рамках нелинейной теории упругости плотность упругой энергии является периодической функцией тетрагональной и сдвиговой деформаций и содержит связь поля композиции с упругими полями. Модель облучения представляется баллистическим потоком со случайной компонентой, имитирующей формирование структурного беспорядка. Изучено влияние облучения на динамику напряжённо-деформированного состояния сплава при наличии внешней механической нагрузки в виде одноосного растяжения. Проанализировано поведение свободной энергии бинарного сплава при одноосном растяжении и в отсутствие внешней механической нагрузки.

Розглянуто механізм пластичної течії у бінарних стопах, підданих радіаційному впливу. На основі моделі фазового поля проведено чисельне моделювання формування та еволюції дислокацій і пластичних деформацій з урахуванням додаткового атермічного перемішування атомів, викликаного радіаційно-індукованою балістичною дифузією. У даній моделі в рамках нелінійної теорії пружности густина пружної енергії є періодичною функцією тетрагональної та зсувної деформацій і містить зв'язок поля композиції з пружними полями. Модель опромінення представлено балістичним потоком з випадковою компонентою, що імітує формування структурного безладу. Вивчено вплив опромінення на динаміку напружено-деформованого стану стопу за наявності зовнішнього механічного навантаження у вигляді одноосного розтягу. Проаналізовано поведінку вільної енергії бінарного стопу при одноосному розтягу та за відсутності зовнішнього механічного навантаження.

The mechanism of plastic flow in binary alloys subjected to radiation influence is

considered. Using the phase field model, formation and evolution of dislocations and plastic deformations is simulated with taking into account the additional athermal mixing of atoms caused by radiation-induced ballistic diffusion. In this model within the scope of the nonlinear elasticity theory, the elastic energy density is a periodic function of the tetragonal and shear strains and contains the coupling between the composition field and the elastic fields. The model of irradiation is represented by ballistic flow with random component that simulates the formation of structural disorder. The radiation influence on the dynamics of the alloy stress-strain state under the external mechanical load in the uniaxial stretching form is studied. We analyse the behaviour of free energy of a binary alloy both under stretching and in the absence of external mechanical load.

**Ключевые слова:** бинарный сплав, дислокации, деформация, облучение, шум.

*(Получено 14 октября 2013 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение влияния облучения на физико-механические свойства металлов и сплавов представляет собой актуальную задачу не только в области физики радиационных повреждений, но и для современной теоретической физики конденсированного состояния в целом. Для прогнозирования надёжности и долговечности конструкционных материалов, работающих в условиях радиационного облучения и механической нагрузки, важным является исследование процессов формирования и эволюции дефектов в структуре материала.

Накопление дефектов и их пространственная организация в процессе облучения нейтронами и тяжёлыми ионами существенно сказывается на изменении физико-механических свойств конструкционных материалов [1]. В последнее время выяснено, что в ходе такой самоорганизации дефектной структуры важную роль играют не только характеристики облучения, сводящиеся к скорости набора дозы и температуре [2, 3], но и статистические свойства процессов перераспределения точечных дефектов [4–8]. Кроме того, известно, что в процессе облучения помимо объёмных эффектов наблюдаются процессы изменения морфологии поверхности, например, при низких энергиях бомбардирующих тяжёлых частиц [9, 10]. Исследование таких процессов показало, что на поверхности облучаемого материала могут формироваться пространственные структуры разной конфигурации в зависимости от статистических характеристик пучка налетающих ионов и угла их падения на поверхность [11–13].

Известно, что при облучении и внешнем механическом воздействии в материале происходит накопление внутренних напряжений и деформаций, что, в свою очередь, приводит к микроструктурным изменениям, принципиально ухудшающим свойства используемо-

го материала [1]. Особую роль в изменении упруго-пластических и прочностных характеристик конструкционных материалов при облучении играют дислокации. Поэтому для установления общих закономерностей радиационно-индуцированных изменений микроструктуры и механических свойств материалов важным является изучение поведения соответствующей дислокационной структуры.

За последние десятилетия накоплен большой экспериментальный опыт в изучении влияния облучения на механические свойства металлов и сплавов (см., например, [14–16]). Однако, исследования физических механизмов, описывающих радиационное воздействие на деформационные характеристики с теоретической точки зрения, как выяснилось за последнее время, требует использования численных процедур, основанных на многоуровневом представлении физической системы. Оказалось, что теоретические представления о поведении дислокационного ансамбля, приводящего к изменению деформационных характеристик материалов при радиационном воздействии, требуют существенного развития с целью установления полной информации о физических механизмах упрочнения, охрупчивания и разрушения материалов. Это приводит к использованию, так называемых, гибридных подходов, учитывающих эволюцию физической системы совместно на нескольких иерархических уровнях описания. Типичным подходом является метод фазового поля и его расширение для описания поведения кристаллических систем, известное как метод фазового поля кристалла [17]. Основываясь на использовании теории функционала плотности, данный подход получил своё применение в задачах исследования микроструктуры облучаемых кристаллических материалов [18, 19]. Использование метода фазового поля в теории распада твёрдых растворов и выделении фаз при облучении позволило установить особенности прохождения процессов упорядочения при флуктуационном воздействии потоков облучения [20–23]. Развитие данного подхода, учитывающего перераспределение композитного состава материала при совместном воздействии облучения, приводящего к структурному беспорядку (атомному перемешиванию), и внешних нагрузок, позволяет установить физическую картину не только локального перераспределения полей деформаций и напряжений, но и выяснить характер влияния облучения на упругие, пластические и прочностные свойства материалов. При этом важным является тот факт, что характерные времена релаксации полей композиции  $\tau_\psi$  и деформации  $\tau_\epsilon$  соотносятся как  $\tau_\psi / \tau_\epsilon \geq 10^3$ , где  $\tau_\psi$  имеет порядок диффузионных времён. Именно последнее обстоятельство относит данный подход к гибридным.

Среди подобных гибридных подходов, используемых для представления кристаллических систем, находящихся под облучением, наиболее широкое распространение в последнее время получил метод фазового поля. Для теоретического изучения радиационного

воздействия впервые Мартаном было предложено использовать дополнительный (баллистический) диффузионный поток атермического атомного перемешивания для поля композиции  $\psi$  в стандартном виде  $\mathbf{J}_e = -D_e^0 \nabla \psi$ , индуцированного протеканием процессов столкновений высокоэнергетических частиц с атомами среды [24]. Выяснилось, что такой поток приводит к повышению эффективной температуры системы. Впоследствии эта теория была проверена методами Монте-Карло [25–27]. Этот подход широко используется для описания влияния облучения на протекание фазового расслоения бинарных систем [28–30], а также на изменения микроструктуры облучаемых материалов [18, 19]. Особенность данной процедуры состоит во введении представления о стохастичности атомного перемешивания вследствие развития каскадов и температурных флуктуаций [31]. Считается, что коэффициент баллистической диффузии  $D_e^0$  состоит из регулярной и случайной компонент, т.е.  $D_e^0 \rightarrow D_e^0(\mathbf{r}, t) = D_e + \zeta(\mathbf{r}, t)$ . Это позволяет учесть возмущения атомной конфигурации при образовании структурного беспорядка под влиянием облучения. При этом данный диффузионный процесс кардинально отличается от обычного, так как случайный характер коэффициента баллистической диффузии в условиях облучения приводит к возможности прыжков атомов на расстояния, которые превышают размеры первых нескольких координационных сфер.

В данной работе, в рамках использования данного гибридного подхода, проводится изучение пластического течения в бинарных сплавах в сильнонеравновесных условиях, вызванных облучением. Здесь на основе модели фазового поля с учётом радиационно-стимулированного атомного перемешивания проведено численное моделирование процессов формирования и динамики дислокаций и пластических деформаций в бинарных сплавах, подверженных внешней механической нагрузке. Цель данного исследования состоит в изучении влияния облучения на динамику напряжённо-деформированного состояния бинарного сплава при одноосном растяжении с использованием фазово-полевого подхода.

## 2. МОДЕЛЬ И ОСНОВНЫЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Рассмотрим простейшую модель бинарного сплава, состоящего из компонентов  $A$  и  $B$ . Предполагается, что сплав не содержит точечных дефектов. Соответствующие композиции  $c_A$  и  $c_B$  удовлетворяют условию сохранения массы  $c_A + c_B = 1$ . Для определения процессов пластического деформирования используется подход, развитый в работах [32–34], позволяющий описать эволюцию микроструктуры материала и упругих полей в нем. Параметром порядка в данной модели выступает разность композиций  $\psi = c_A - c_B$  ( $-1 \leq \psi \leq 1$ ), а

сама система определяется свободной энергией  $F = \int f(\psi, \mathbf{u}) d\mathbf{r}$  с вектором упругих перемещений  $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ .

Плотность свободной энергии  $f$  записывается в форме

$$f = f_{BW}(\psi) + \frac{1}{2} C |\nabla \psi|^2 + \alpha e_1 \psi + f_{el}(\mathbf{u}, \psi), \quad (1)$$

где  $C > 0$  — константа, пропорциональная квадрату длины когерентности,  $\alpha > 0$  — константа связи разности композиций  $\psi$  с деформацией растяжения  $e_1 = \nabla \mathbf{u}$ . Отмеченная связь определяется появлением некогерентных включений типа  $\gamma'$ -преципитатов в структуре  $L1_2$  с формированием атмосферы Коттрелла.

Локальная плотность свободной энергии  $f_{BW}(\psi)$  в выражении (1) выбрана в форме Брэгга–Вильямса [35] и имеет следующий вид:

$$f_{BW}(\psi) = \frac{k_B T}{\Omega_0} \left[ \frac{1 + \psi}{2} \ln(1 + \psi) + \frac{1 - \psi}{2} \ln(1 - \psi) \right] - \frac{k_B T_0}{2\Omega_0} \psi^2, \quad (2)$$

где  $\Omega_0$  — атомный объем,  $T_0$  — среднеполевая критическая температура, которая измеряется в случае отсутствия связи с упругими полями.

В двумерной системе плотность упругой энергии из (1) имеет вид

$$f_{el}(\mathbf{u}, \psi) = \frac{1}{2} K e_1^2 + \Phi(\psi, e_2, e_3) \quad (3)$$

и зависит от следующих деформаций:

$$e_1 = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}, \quad e_2 = \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}, \quad e_3 = 2\varepsilon_{xy}, \quad (4)$$

где  $e_2$  — тетрагональная деформация,  $e_3$  — деформация сдвига, компоненты деформаций  $\varepsilon_{ij}$  выражаются через перемещения соотношениями Коши  $\varepsilon_{ij} = (\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i) / 2$ . Первое слагаемое в (3) с объёмным модулем упругости  $K$  определяет упругую энергию растяжения, второе слагаемое определяет упругую энергию сдвига. Плотность упругой энергии сдвиговой деформации  $\Phi(\psi, e_2, e_3)$  в случае структуры с кубической решёткой имеет вид [32]

$$\Phi(\psi, e_2, e_3) = \frac{\mu_2}{4\pi^2} [1 - \cos(2\pi e_2)] + \frac{\mu_3}{4\pi^2} [1 - \cos(2\pi e_3)]. \quad (5)$$

Здесь  $\mu_2, \mu_3$  — продольный модуль упругости и модуль сдвига соответственно, зависящие от разности композиций [35–37]:

$$\mu_2 = \mu_{20} + \mu_{21} \psi, \quad \mu_3 = \mu_{30} + \mu_{31} \psi. \quad (6)$$

При этом области с большим (меньшим) значением разности компо-

зиций  $\psi$  жёстче (мягче) областей с меньшим (большим) значением  $\psi$ . Такая упругая неоднородность приводит к асимметричности упругих деформаций.

Динамика упругих перемещений  $\mathbf{u}$  описывается следующим уравнением:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = - \frac{\delta F}{\delta \mathbf{u}} + \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v}, \quad (7)$$

где  $\rho$  — массовая плотность,  $\mathbf{v} = \partial \mathbf{u} / \partial t$  — скорость упругого поля,  $\eta_0$  — сдвиговая вязкость. Здесь имеет место соотношение

$$\frac{\delta F}{\delta \mathbf{u}} = -\nabla \bar{\sigma}, \quad (8)$$

где разность композиций  $\psi$  фиксирована в функциональной производной  $\delta F / \delta \mathbf{u}$ ;  $\bar{\sigma} = \{\sigma_{ij}\}$  — тензор упругих напряжений, компоненты которого задаются в виде ( $\sigma_{ij} = \partial f / \partial \varepsilon_{ij}$ )

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= K e_1 + \alpha \psi + \mu_2 \sin(2\pi e_2) / 2\pi, \quad \sigma_{yy} = K e_1 + \alpha \psi - \mu_2 \sin(2\pi e_2) / 2\pi, \\ \sigma_{xy} &= \sigma_{yx} = \mu_3 \sin(2\pi e_3) / 2\pi. \end{aligned} \quad (9)$$

Эволюция сохраняющегося поля композиции  $\psi(\mathbf{r}, t)$  подчиняется уравнению непрерывности  $\frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla(\mathbf{J}_{th} + \mathbf{J}_e) = 0$ , где  $\mathbf{J}_{th} = -\lambda(\psi) \nabla \frac{\delta F}{\delta \psi}$ , поток  $\mathbf{J}_e$  определён выше. С учётом флуктуирующего потока облучения динамика поля концентрации задаётся уравнением Ланжевена

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \nabla \lambda(\psi) \left[ \nabla \frac{\delta F}{\delta \psi} + \frac{D_e}{\lambda(\psi)} \nabla \psi \right] + \nabla \zeta(\mathbf{r}, t) \nabla \psi. \quad (10)$$

Зависимость кинетического коэффициента  $\lambda$  от  $\psi$  примем в простейшей форме

$$\lambda(\psi) = \lambda_0 (1 - \psi^2), \quad (11)$$

где  $\lambda_0$  — постоянная величина. Вектор упругих перемещений  $\mathbf{u}$  считается фиксированным в химическом потенциале

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{\delta \psi} &= \frac{k_B}{\Omega_0} \left[ \frac{T}{2} \ln \left( \frac{1 + \psi}{1 - \psi} \right) - T_0 \psi \right] - C \nabla^2 \psi + \alpha e_1 + \\ &+ \frac{\mu_{21}}{4\pi^2} [1 - \cos(2\pi e_2)] + \frac{\mu_{31}}{4\pi^2} [1 - \cos(2\pi e_3)]. \end{aligned} \quad (12)$$

В уравнении (10) облучение задаётся двумя связанными между собой величинами, а именно коэффициентом баллистической диффузии  $D_e$  и его стохастической составляющей  $\zeta(\mathbf{r}, t)$ . В рамках стандартного формализма величина баллистической диффузии пропорциональна потоку бомбардирующих частиц  $\phi$ , сечению дефектообразования  $\sigma_r$  (определяет число атомов, которые изменили свои позиции при единице дозы облучения) и квадрату средней длины прыжка  $\langle R \rangle^2$  выбитых атомов,  $D_e = \phi \sigma_r \langle R \rangle^2$  [24, 28]. Стоит отметить, что вследствие быстротечности каскадов по сравнению с любыми другими процессами в системе, стохастическая компонента является нескоррелированной во времени, однако, вследствие скоррелированности среды (кристалл) пространственная корреляция имеет место. В таком случае в гауссовом приближении можно положить:

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D_e \sigma_e^2 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (13)$$

где  $\sigma_e^2$  — интенсивность внешнего шума,  $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  — пространственная корреляционная функция, которую без потери общности можно представить в виде:

$$C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\sqrt{2\pi}r_c)^{-d} \exp\{-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 / (2r_c^2)\}, \quad d = 2, \quad (14)$$

где  $r_c$  — радиус корреляции флуктуаций. Наличие множителя  $D_e$  в корреляторе (13) свидетельствует о том, что соответствующие флуктуации могут быть вызваны только облучением. Поскольку величина  $D_e$  зависит от средней длины прыжка выбитых атомов, то очевидно, что интенсивность флуктуаций  $\sigma_e^2$  связана с дисперсией длин атомных прыжков, т.е.  $\sigma_e^2 = \langle (\delta R)^2 \rangle / \langle R \rangle^2$  и определяется исключительно условиями облучения (средней энергией частиц, соответствующим разбросом энергий, фокусировкой пучка, температурой облучения). Необходимо отметить, что в данной стохастической модели ланжевеновский источник интерпретируется в смысле Стратоновича. Как было показано ранее [31], это приводит к появлению потока вещества, направленного противоположно диффузионному. Этот поток является проявлением корреляционного эффекта, обусловленного пространственной корреляцией атомных прыжков, индуцированных прохождением каскадов в скоррелированной среде (кристалле) и сохраняющейся динамикой поля композиции. Характерно, что появление такого потока приводит к понижению эффективной температуры и способствует процессам самоорганизации в процессах микроструктурных превращений в облучаемых материалах [18, 19]. Как будет выяснено ниже, действие такого пространственно-коррелированного источника флуктуаций приводит к эффективному снижению предела прочности.

Исследование поведения такой системы, заданной уравнениями

(7), (10), основывается на численном моделировании с учётом методики Монте-Карло, поскольку динамические уравнения содержат случайный источник. Для этого проводится дискретизация системы уравнений. Численная реализация проводилась на двумерной квадратной решётке размером  $N \times N$ , где  $N = 128$  — число узлов,  $L = Na$  — линейный размер системы,  $a$  — шаг решётки. В случае отсутствия внешней механической нагрузки граничные условия выбираются периодическими. При наличии приложенных одноосной  $\varepsilon$  и сдвиговой  $\gamma$  деформаций граничные условия для  $y = 0$  записываются в виде  $u_x = u_y = 0$ , для  $y = N - u_x = -u_y = \varepsilon N/2$  при одноосном растяжении и  $u_x = \gamma N$ ,  $u_y = 0$  при сдвиговой нагрузке. В направлении  $x$  налагаются периодические граничные условия  $\mathbf{u}(x + N, y, t) = \mathbf{u}(x, y, t)$ . При интегрировании динамических уравнений используется метод смещённой решётки [32]. Векторные величины  $\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}$  определяются в узлах основной решётки  $(n, m)$ , а деформации, тензоры и композиция — в точках смещённой решётки  $(n + 1/2, m + 1/2)$ . Такая пространственная дискретизация необходима для адекватной численной реализации микроскопических упругих деформаций.

Для дальнейшего рассмотрения осуществляется переход к безразмерным величинам:  $\mathbf{r}' = a^{-1}\mathbf{r}$ ,  $t' = \tau_0^{-1}t$ ,  $\mathbf{u}' = a^{-1}\mathbf{u}$ ,  $\mathbf{v}' = a^{-1}\tau_0\mathbf{v}$ , где  $\tau_0 = (\rho/\mu_{20})^{1/2}a$ . Далее для удобства штрихи опускаем. Свободные энергии и плотности свободных энергий измеряются соответственно в единицах  $\mu_{20}a^2$  и  $\mu_{20}$ . Безразмерные кинетический коэффициент и сдвиговая вязкость выражаются следующим образом:  $\tilde{\lambda}_0 = \lambda_0\tau_0\mu_{20}a^{-2}$ ,  $\tilde{\eta}_0 = \eta_0/\tau_0\mu_{20}$ . Параметры системы выбираются такими:

$$\begin{aligned} k_B T_0 / \Omega_0 \mu_{20} &= 0,05, \quad \alpha / \mu_{20} = 0,6, \quad K / \mu_{20} = 4,5, \\ C / a^2 \mu_{20} &= 0,05, \quad \tilde{\lambda}_0 = 10^{-4}, \quad \tilde{\eta}_0 = 0,1. \end{aligned} \quad (15)$$

Кроме того, упругая неоднородность системы задаётся соотношением  $\mu_{21} = \mu_{31} = 0,6\mu_{20}$ , а слабая кубическая анизотропия — соотношением  $\mu_{30}/\mu_{20} = 1,1$ .

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

#### 3.1. Линии скольжения

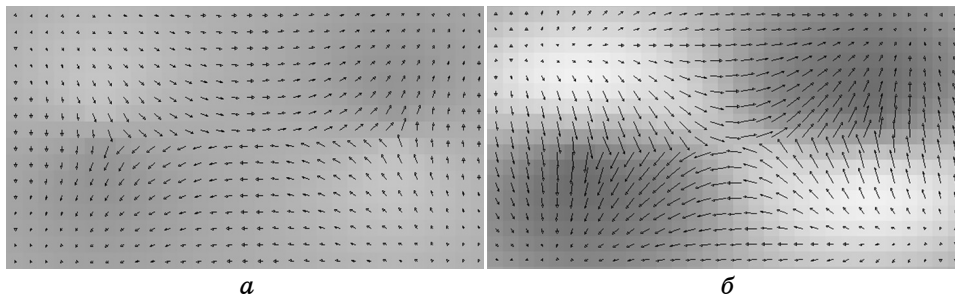
Одним из основных механизмов пластической деформации считается скольжение, т.е. сдвиговое смещение одной части кристалла относительно другой. Элементарными единицами процесса скольжения являются линии скольжения Чернова–Людерса, состоящие из пары краевых дислокаций с противоположными векторами Бюргерса (дислокационные диполи). Края линии скольжения располагаются в дислокационных ядрах. При растяжении и сжатии



линии скольжения обычно ориентированы примерно под углом  $45^\circ$  к направлению нормальных напряжений. Несколько близко расположенных линий скольжения образуют полосу скольжения.

Проведём моделирование линий скольжения и композиционных изменений. С использованием линейной теории упругости [32] изначально подготавливается одна линия скольжения длины  $18a$  с направлением смещения по часовой стрелке, т.е. линия скольжения типа *C* (clockwise). Начальное условие для разности композиций задаётся таким:  $\langle \psi(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$ . Внешние воздействия на систему, такие как облучение и механические нагрузки, в данном случае не учитываются. На рисунке 1, *a* представлены разность композиций  $\psi$  и поле упругих перемещений  $\mathbf{u}$  вблизи линии скольжения в устойчивом состоянии при относительной температуре  $T/T_0 = 2,5$ . Стрелочки, демонстрирующие векторы упругих перемещений, исходят из начальной позиции в недеформированной среде и заканчиваются в деформированной позиции. Как видно, вокруг дислокационных ядер образуются атмосферы Коттрелла, однако разделения на фазы, обогащённые содержанием какого-либо компонента, не происходит. При этом максимум и минимум композиции  $\psi$  соответственно равны  $\pm 0,3$ . С понижением относительной температуры до  $T/T_0 = 1,7$ , при использовании конфигурации, представленной на рис. 1, *a*, хорошо просматривается рост атмосфер Коттрелла и образование доменов отдельных компонент сплава (рис. 1, *б*). В этом случае максимум и минимум композиции  $\psi$  соответственно равны  $\pm 0,9$ .

Далее рассмотрим простейшую модель динамики дислокаций в однофазной среде при наложении внешней механической нагрузки в виде сдвига. Изначально в систему помещаются две линии скольжения длины  $28a$  с противоположными направлениями смещения: по часовой стрелке (тип *C*) и против часовой стрелки (тип *CC* (counter clockwise)). Затем система подвергается сдвиговой деформации



**Рис. 1.** Разность композиций  $\psi$  и вектор перемещений  $\mathbf{u}$  для линии скольжения: *a* — однофазное состояние при  $T/T_0 = 2,5$ , *б* — двухфазное состояние при  $T/T_0 = 1,7$ .

$\gamma = \dot{\gamma}t$ , скорость  $\dot{\gamma}$  которой постоянна и равна  $10^{-3}$ . Начальное условие для разности композиций задаётся таким:  $\langle \psi(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$ .

Эволюция отклонения сдвиговой деформации  $\delta e_3 = e_3 - \gamma$ , отклонения плотности упругой энергии  $\delta f_{el} = f_{el} - \langle f_{el} \rangle$  и разности композиций  $\psi$  при относительной температуре  $T/T_0 = 2$  показана на рис. 2. Стрелочками на первом снимке для  $\delta e_3$  показано направление сдвига. Черные точки в плотности упругой энергии  $\delta f_{el}$  указывают на положение дислокационных ядер, вокруг которых на снимках для  $\psi$  наблюдаются атмосферы Коттрелла. Из рисунка 2 видно, что линия скольжения типа  $CC$  удлиняется, так как её направление смещения совпадает с направлением приложенной сдвиговой де-

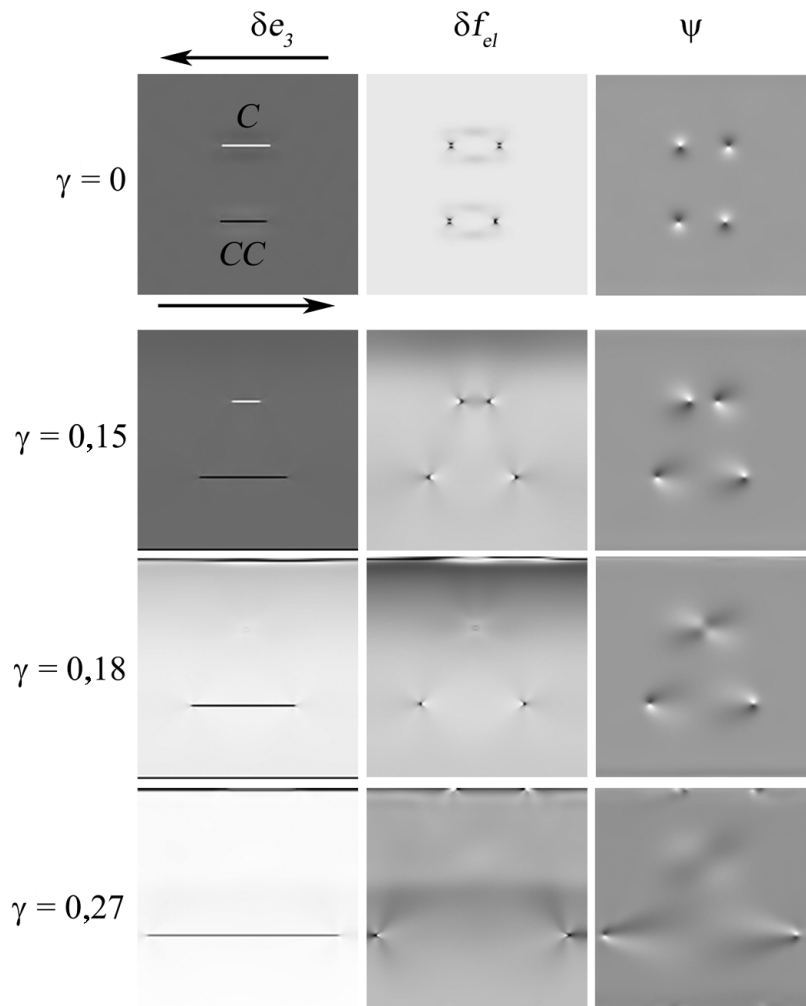


Рис. 2. Снимки эволюции  $\delta e_3$ ,  $\delta f_{el}$  и  $\psi$  при сдвиге для двух линий скольжения.

формации, а линия скольжения типа  $C$  укорачивается и исчезает, поскольку её направление смещения противоположно направлению сдвига. Следует отметить, что атмосферы Коттрелла следуют за ядрами дислокаций. Таким образом, представленная модель полностью согласуется с известными экспериментальными и теоретическими представлениями о процессах дислокационной динамики.

Для рассмотренной модели двух линий скольжения с противоположными направлениями смещения также были вычислены упругие поля нормальных  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и касательных  $\sigma_{xy}$  напряжений по формулам (9), распределение которых при  $\gamma=0$  представлено на рис. 3. Как известно [38], дислокации создают в кристалле поле упругих напряжений с большей энергией деформации, а наибольшие абсолютные значения напряжений наблюдаются в ядрах дислокаций, где имеют место наибольшие смещения атомов. Полученное распределение упругих напряжений (рис. 3) демонстрирует, что максимальные по модулю значения напряжений расположены на краях линий скольжения, т.е. в дислокационных ядрах. Как видно, поле нормальных напряжений краевых дислокаций таково, что с одной стороны от ядра дислокации напряжения положительны, а с

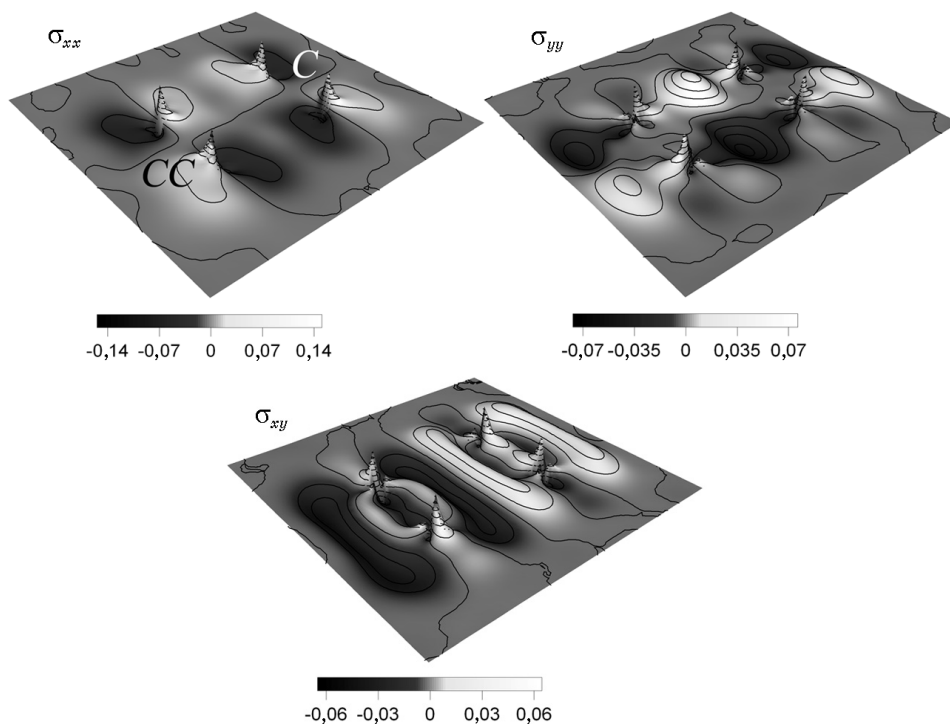
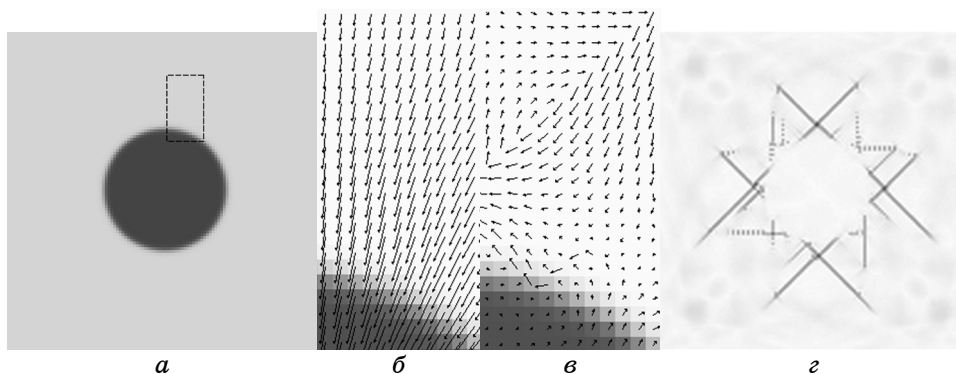


Рис. 3. Распределение напряжений  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  и  $\sigma_{xy}$ .

противоположной — отрицательные. Таким образом, с одной стороны от дислокации происходит растяжение, а с другой — сжатие. Полученное распределение касательных напряжений  $\sigma_{xy}$  показывает, что значения напряжений вблизи линий скольжения зависят от направления смещения. В частности, в окрестности линии скольжения типа *C* с направлением смещения по часовой стрелке преимущественно наблюдаются положительные значения касательных напряжений, а в окрестности линии скольжения типа *CC* с направлением смещения против часовой стрелки — преимущественно отрицательные значения.

### 3.2. Спонтанное формирование дислокаций

Рассмотрим простейшую модель формирования дислокаций в двухфазной среде в отсутствии внешних механических и радиационных воздействий на систему. На рисунке 4, *a* приведена изначально подготовленная конфигурация, где жёсткое включение расположено в центре мягкой среды при относительной температуре  $T/T_0 = 2$ . Значение разности композиций  $\psi$  внутри жёсткого включения равно 0,9, а в мягкой среде — -0,9. Далее с понижением относительной температуры до  $T/T_0 = 1$  в мягкой среде формируются дислокации. Рисунок 4, *б* демонстрирует распределение когерентных упругих перемещений  $\mathbf{u}_{coh}$  в выделенной области на рис. 4, *a*, имеющих место до появления дислокаций. Последующее некогерентное отклонение упругих перемещений  $\delta\mathbf{u} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_{coh}$  представлено на рис. 4, *в*. Как видно, в мягкой среде сформировались линии скольжения, образующие дислокации. Соответствующая некогерентному состоянию (рис. 4, *в*) деформация  $e = (e_2^2 + e_3^2)^{1/2}$  показана



**Рис. 4.** Жёсткое включение в мягкой среде (*a*); упругие перемещения  $\mathbf{u}_{coh}$  в когерентном состоянии при  $T/T_0 = 2$  (*б*); упругие перемещения  $\delta\mathbf{u} = \mathbf{u} - \mathbf{u}_{coh}$  в некогерентном состоянии при  $T/T_0 = 1$  (*в*); снимок деформации  $e$  (*г*).

на рис. 4, *г*. Края линии скольжения указывают на ядра дислокаций. Таким образом, часть дислокационных ядер распределена на межфазной границе, а остальные — в мягкой среде.

### 3.3. Одноосное растяжение бинарного сплава

Изначально подготавливается конфигурация бинарного сплава без учёта упругих полей и облучения ( $D_e^0 = 0$ ) [35]. Интегрируется динамическое уравнение (10) в случае, когда кинетический коэффициент  $\lambda$  не зависит от  $\psi$  и в безразмерном виде  $\lambda\tau_0\mu_{20}a^{-2} = 1$ , а остальные параметры задаются такими:  $k_B T_0 / \Omega_0 \mu_{20} = 1$ ,  $C/a^2 \mu_{20} = 1$ ,  $T/T_0 = 2$ . Таким образом, полученная композиция сплава показана на рис. 5, где жёсткие включения округлой формы распределены в мягкой среде (средняя разность композиций  $\langle \psi \rangle = -0,4$ ).

Приготовленная система подвергается одноосной деформации  $\varepsilon = \dot{\varepsilon}t$ , скорость  $\dot{\varepsilon}$  которой постоянна и равна  $10^{-3}$ . Динамика системы моделируется уравнениями (7), (10). При  $t = 0$  задаётся  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ . На рисунке 6 представлена эволюция отклонения тетрагональной деформации  $\delta e_2 = e_2 - \varepsilon$ , отклонения упругих перемещений  $\delta \mathbf{u} = \mathbf{u} - (\varepsilon x/2, -\varepsilon y/2)$ , плотности упругой энергии  $\Phi(\psi, e_2, e_3)$  и плотности свободной энергии  $f(\psi, \mathbf{u})$  в условии отсутствия облучения при трёх значениях приложенной одноосной деформации  $\varepsilon = 0,15, 0,2, 0,3$ , которые соответствуют временным меткам  $t = 150, 200, 300$ . Стрелочками на первом снимке для  $\delta e_2$  показано направление приложенной деформации, т.е. по вертикали происходит растяжение образца, а по горизонтали — сжатие. Снимки для  $\delta \mathbf{u}$  демонстрируют распределение упругих перемещений в выделенных фрагментах на снимках для  $\delta e_2$ . Пики в плотности упругой

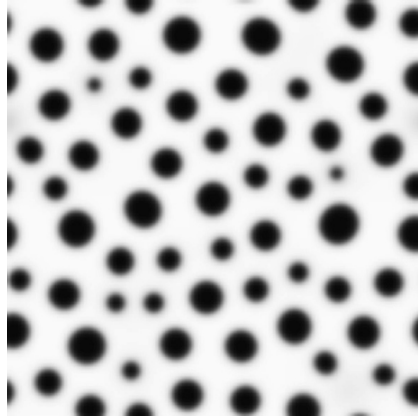
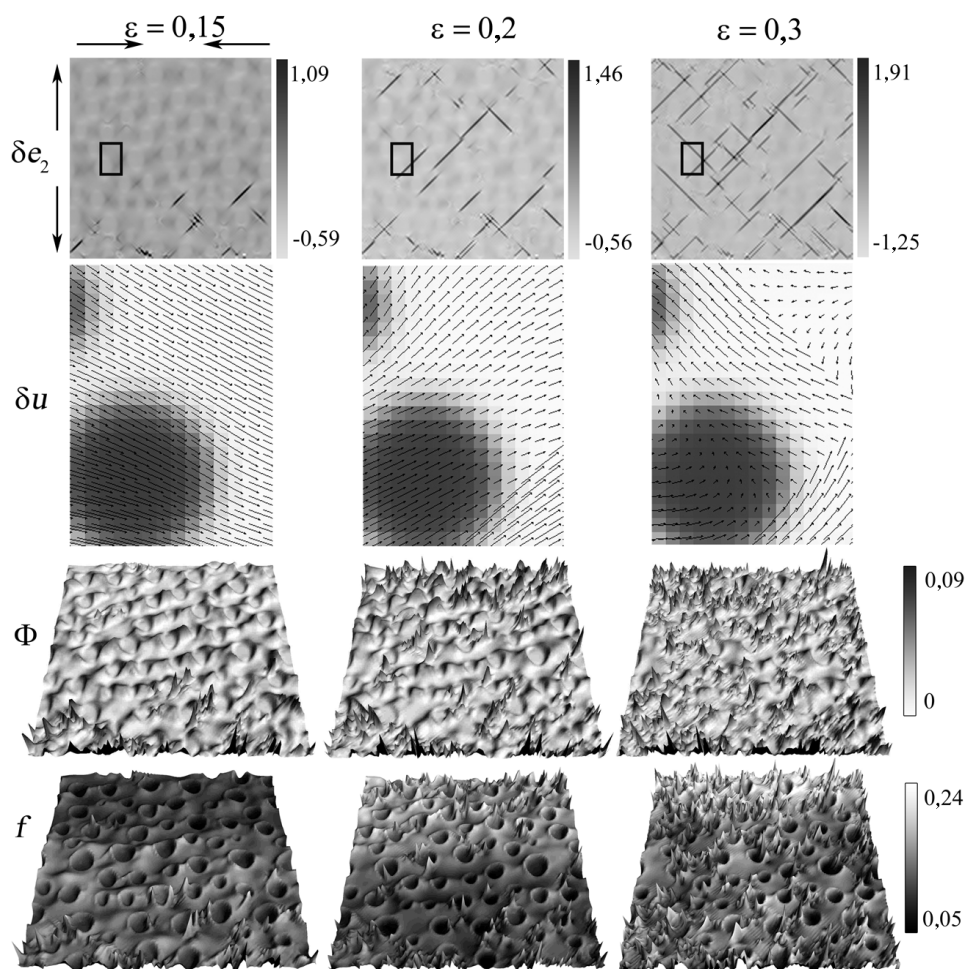


Рис. 5. Разность композиций  $\psi$  бинарного сплава.

энергии  $\Phi$  и в плотности свободной энергии  $f$  соответствуют краям линий скольжения на снимках для  $\delta e_2$ , т.е. указывают на расположение дислокационных ядер.

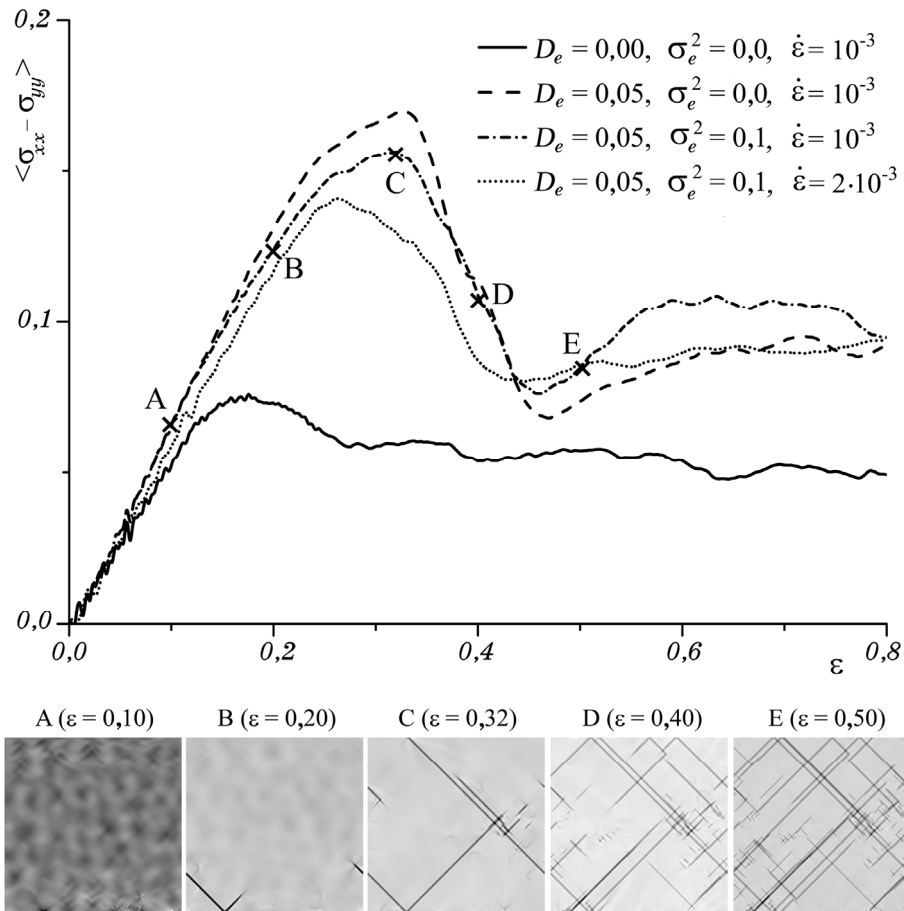
Далее рассмотрим влияние радиационного облучения на процесс одноосного растяжения бинарного сплава при следующих значениях параметров облучения:  $D_e = 0,05$ ,  $\sigma_e^2 = 0,1$  и  $r_c = 1$ , а также при условии отсутствия флуктуаций потока облучения (интенсивность внешнего шума  $\sigma_e^2 = 0$ ). Диаграмма растяжения, приведённая на рис. 7, показывает зависимость разности нормальных напряжений  $\langle \sigma_{xx} - \sigma_{yy} \rangle = \langle \mu_2 \sin(2\pi e_2) \rangle / \pi$  от приложенной одноосной деформации



**Рис. 6.** Снимки эволюции  $\delta e_2$ ,  $\delta u$ ,  $\Phi$  и  $f$  при одноосном растяжении для бинарного сплава.

$\epsilon$ . Сплошная кривая отвечает одноосному растяжению бинарного сплава без облучения с постоянной скоростью деформации  $\dot{\epsilon} = 10^{-3}$ , штрихпунктирная и пунктирная — одноосному растяжению ( $\dot{\epsilon} = 10^{-3}$ ) под влиянием флуктуирующего потока облучения, и в условиях отсутствия флуктуаций, соответственно.

Точечная кривая соответствует одноосному растяжению с постоянной скоростью деформации  $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^{-3}$  под влиянием флуктуирующего потока облучения. Сравнение деформационных кривых показывает, что облучение приводит к повышению сопротивляемости сплава пластическому течению, так как возрастает предел текучести, т.е. отклонение от закона Гука происходит при больших деформациях  $\epsilon$ . Также наблюдается повышение предела прочности,



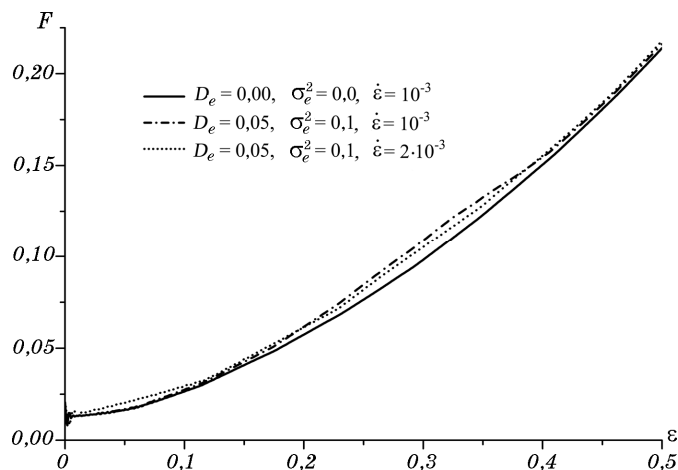
**Рис. 7.** Диаграмма растяжения при различных значениях параметров  $D_e$ ,  $\sigma_e^2$  ( $r_c = 1$ ) и снимки  $\delta\epsilon_2$  для штрихпунктирной кривой. Снимки  $\delta\epsilon_2$  для сплошной кривой показаны на рис. 6.

т.е. максимального значения напряжений, которое сплав выдерживает без разрушения. Таким образом, при радиационном облучении материал упрочняется, но при этом становится менее пластичным, так как значительно сокращается участок пластического течения на диаграмме «напряжение–деформация», что свидетельствует о радиационном охрупчивании. Кроме того, с повышением скорости деформации (точечная кривая) наблюдается снижение предела прочности.

Следует отметить, что при включении шума пик полученной деформационной кривой (штрихпунктирная кривая) немного снижается в сравнении со случаем отсутствия флуктуаций (пунктирная кривая). Это свидетельствует о том, что флуктуации потока облучения приводят к понижению предела прочности. Таким образом, как было показано ранее [18, 19, 30], наблюдается конкуренция вкладов регулярной и случайной компонент потока облучения.

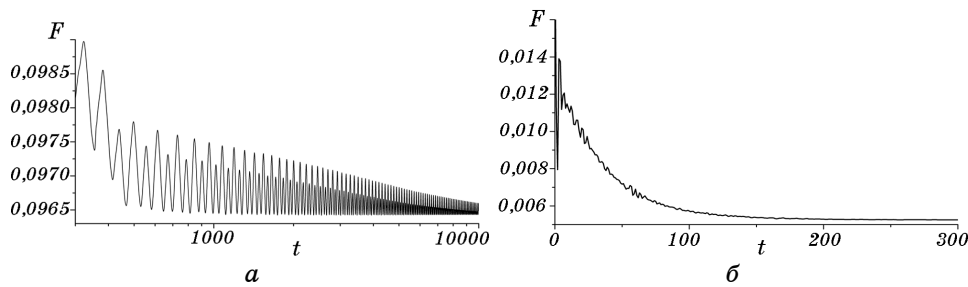
Приведённые на рис. 7 снимки отклонения тетрагональной деформации  $\delta\epsilon_2$  при  $D_e = 0,05$ ,  $\sigma_e^2 = 0,1$  и  $r_c = 1$  показывают, что в облучаемом сплаве уже при  $\epsilon = 0,32$  происходит образование перколяционных кластеров, т.е. соединение линиями скольжения двух противоположных берегов системы. Таким образом, происходит критический фазовый переход (перколяционный), свидетельствующий о разрушении материала.

Проанализируем поведение свободной энергии  $F = \int f dr$  системы при одноосном растяжении. Зависимость  $F$  от приложенной одноосной деформации  $\epsilon$  показана на рис. 8. Сплошная кривая соответствует свободной энергии системы при отсутствии облучения ( $D_e =$



**Рис. 8.** Зависимость свободной энергии  $F$  от деформации  $\epsilon$  при одноосном растяжении.





**Рис. 9.** Эволюция свободной энергии  $F$  системы: *a* — после остановки одноосного растяжения; *б* — в отсутствии внешней нагрузки.

$= 0$ ,  $\sigma_e^2 = 0$ ) и скорости деформации  $\dot{\epsilon} = 10^{-3}$ , штрихпунктирная и точечная кривые — свободной энергии системы при облучении с параметрами  $D_e = 0,05$ ,  $\sigma_e^2 = 0,1$  и скорости деформации  $\dot{\epsilon} = 10^{-3}$  и  $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^{-3}$  соответственно. Как видно, свободная энергия бинарного сплава возрастает с ростом приложенной деформации  $\epsilon$ . При облучении системы (штрихпунктирная кривая) наблюдается увеличение значений свободной энергии, в сравнении со случаем без облучения, преимущественно в области деформаций  $0,2 < \epsilon < 0,4$ , которая отвечает участку наивысших напряжений (рис. 7, штрихпунктирная кривая). Также следует отметить, что при большей скорости деформации ( $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^{-3}$ , точечная кривая) наблюдается незначительное снижение значений свободной энергии в области деформаций  $0,2 < \epsilon < 0,4$ , а в области  $0,2 < \epsilon < 0,1$  — увеличение значений свободной энергии.

Далее рассмотрим случай, когда бинарный сплав подвергается одноосному растяжению в отсутствии облучения со скоростью деформации  $\dot{\epsilon} = 10^{-3}$  на временах  $0 < t < t_s$  ( $t_s = 300$ ), что соответствует сплошной кривой на рис. 8 при  $0 < \epsilon < 0,3$ , а при  $t = t_s$  растяжение останавливается, и система релаксирует. На рисунке 9, *a* показана эволюция свободной энергии  $F$  системы после остановки растяжения ( $t > t_s$ ), осциллирующий характер которой обуславливается наличием в системе дефектов, образованных при растяжении. Поведение свободной энергии  $F$  бинарного сплава в отсутствии внешней механической нагрузки представлено на рис. 9, *б*, из которого следует, что свободная энергия системы в таком случае убывает и выходит на стационарное значение 0,0053.

#### 4. ВЫВОДЫ

На основе численного моделирования с использованием модели фа-

зового поля исследованы процессы формирования и динамики дислокационной структуры и пластических деформаций в бинарных сплавах, подверженных облучению высокоэнергетическими частицами и механической нагрузке. Получены деформационные кривые для одноосного растяжения сплава. Проанализировано влияние облучения на динамику напряжённо-деформированного состояния сплава. Путём численного моделирования показано, что при облучении происходит упрочнение сплава, однако снижается его пластичность, т.е. происходит радиационное охрупчивание. Полученные в работе результаты согласуются с известными экспериментальными данными по радиационному облучению металлов и сплавов [38].

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В. Н. Воеводин, И. М. Неклюдов, *Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов* (Киев: Наукова думка: 2006).
2. P. A. Selischev and V. I. Sugakov, *Rad. Effects*, **133**: 237 (1995).
3. L. A. Maksimov and A. I. Ryazanov, *Sov. Phys. JETP*, **52**, No. 6: 1170 (1980).
4. M. Kiritani, *J. Nucl. Mater.*, **216**: 220 (1994).
5. M. Kiritani, *Mat. Chem. Phys.*, **50**: 133 (1997).
6. V. O. Kharchenko and D. O. Kharchenko, *Eur. Phys. Jour. B*, **85**: 383 (2012).
7. V. O. Kharchenko and D. O. Kharchenko, *Cond. Mat. Phys.*, **16**, No. 3: 33001 (2013).
8. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, and A. I. Bashtova, *Ukr. Jour. Phys.*, **58**, No. 10: 993 (2013).
9. R. Cuerno and A.-L. Barabasi, *Phys. Rev. Lett.*, **74**: 4746 (1995).
10. M. A. Makeev and A.-L. Barabasi, *Nucl. Instrum. Meth. B*, **222**: 316 (2004).
11. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, I. O. Lysenko, and S. V. Kokhan, *Phys. Rev. E*, **82**: 061108 (2010).
12. V. O. Kharchenko and D. O. Kharchenko, *Cond. Mat. Phys.*, **14**, No. 2: 23602 (2011).
13. I. O. Lysenko, V. O. Kharchenko, S. V. Kokhan, and A. V. Dvornichenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 6: 763 (2013).
14. С. Т. Конобеевский, *Действие облучения на материалы* (Москва: Атомиздат: 1967).
15. *Физика радиационных явлений и радиационное материаловедение* (Ред. А. М. Паршина, И. М. Неклюдова, Н. В. Камышанченко) (Белгород: Изд-во БелГУ: 1998).
16. *Радиационная повреждаемость конструкционных материалов* (Ред. А. М. Паршин, А. Н. Тихонов) (Санкт-Петербург: Изд-во СПбГТУ: 2000).
17. K. R. Elder, N. Provatas, J. Berry, P. Stefanovich, and M. Grant, *Phys. Rev. B*, **75**: 064107 (2007).
18. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, and I. O. Lysenko, *Cent. Eur. J. Phys.*, **9**, No. 3: 698 (2011).
19. Д. О. Харченко, В. О. Харченко, С. В. Кохан, И. О. Лисенко, *Укр. физ. журн.*,

- 57, № 10: 1069 (2012).
20. Д. О. Харченко, І. О. Лисенко, В. О. Харченко, *Укр. физ. журн.*, **55**, № 11: 1226 (2010).
  21. Д. О. Харченко, І. О. Лисенко, В. О. Харченко, *Металлофиз. новейшие технол.*, **32**, № 6: 783 (2010).
  22. D. Kharchenko, I. Lysenko, and V. Kharchenko, *Physica A*, **389**: 3356 (2010).
  23. P. K. Galenko, D. O. Kharchenko, and I. O. Lysenko, *Physica A*, **389**: 3443 (2010).
  24. G. Martin, *Phys. Rev. B*, **30**: 1424 (1984).
  25. K. C. Russell, *Prog. Mater. Sci.*, **28**: 229 (1984).
  26. R. A. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **63**: 134111 (2001).
  27. J. Ye and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **70**: 094104 (2004).
  28. S. Matsumura, Y. Tanaka, S. Miller, and C. Abromeit, *J. Nucl. Instr.*, **239**: 42 (1996).
  29. R. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **60**: 14649 (1999).
  30. D. O. Kharchenko, I. O. Lysenko, and S. V. Kokhan, *Eur. Phys. J. B*, **76**: 37 (2010).
  31. V. I. Dubinko, A. V. Tur, and V. V. Yanovsky, *Radiat. Eff.*, **112**: 233 (1990).
  32. A. Onuki, *Phys. Rev. E*, **68**: 061502 (2003).
  33. A. Minami and A. Onuki, *Phys. Rev. B*, **70**: 184114 (2004).
  34. A. Onuki, A. Furukawa, and A. Minami, *Pramana J. Phys.*, **64**, No. 5: 661 (2005).
  35. A. Onuki, *Phase Transition Dynamics* (Cambridge: Cambridge University Press: 2002).
  36. H. Nishimori and A. Onuki, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **60**: 1208 (1991).
  37. A. Onuki and A. Furukawa, *Phys. Rev. Lett.*, **86**: 452 (2001).
  38. И. М. Неклюдов, Н. В. Камышанченко, *Основы физики прочности и пластичности металлов* (Белгород: Изд-во БелГУ: 2003).