

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ

PACS numbers: 28.52.Fa, 61.72.Cc, 61.72.J-, 61.72.S-, 66.30.Lw, 61.80.Az

Некоторые вопросы кинетической теории радиационно-ускоренной граничной диффузии в поликристаллических материалах с примесями

Е. А. Смирнов

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
кафедра физических проблем материаловедения,
Каширское шоссе, 31,
115409 Москва, Россия*

Выполнен систематический анализ возможности описания процесса отжига радиационных дефектов в системах с границами зёрен и с учётом влияния примесных комплексов в границе на ускорение радиационно-стимулированной граничной диффузии (РСГД). Подтверждена возможность сведения обобщённой системы кинетических уравнений к простейшим классическим уравнениям для чистых металлов путём введения эффективного значения константы скорости рекомбинации $K_{iv}^{эф}$. Представлены решения кинетических уравнений отжига для квазистационарного и стационарного процессов. Получены выражения для концентраций радиационных дефектов и их комплексов, коэффициентов РСГД с учётом влияния примесных комплексов и коэффициентов примесного ускорения РСГД.

Виконано систематичний аналіз можливості опису процесу відпалу радіаційних дефектів у системах з межами зерен і з урахуванням впливу домішкових комплексів у межі на прискорення радіаційно-стимульованої межової дифузії (РСМД). Підтверджено можливість зведення узагальненої системи кінетичних рівнянь до найпростіших класичних рівнянь для чистих металів шляхом введення ефективного значення константи швидкості рекомбінації $K_{iv}^{еф}$. Представлено розв'язки кінетичних рівнянь відпалу для квазістаціонарного та стаціонарного процесів. Одержано вирази для концентрацій радіаційних дефектів та їх комплексів, коефіцієнтів РСМД з урахуванням впливу домішкових комплексів і коефіцієнтів домішкового прискорення РСМД.

The systematic analysis of both the description possibility for the radiation-defects' annealing process in systems with grain boundaries and the consideration of influence of impurity complexes in the grain boundary on acceleration of radiation-induced boundary diffusion is carried out. The possibility of reduction of generalized system of kinetic equations to simplest classic equa-

tions for pure metals due to introduction of the effective constant of recombination velocity, K_{iv}^{ef} , is confirmed. The solution of kinetic equations of annealing for stationary and quasi-stationary processes is presented. The expressions for concentrations of radiation defects and its complexes, coefficients of radiation-induced boundary diffusion with regard for influence of impurity complexes in the grain boundary on acceleration of radiation-induced grain-boundary diffusion are obtained.

Ключевые слова: радиационные дефекты, примесные комплексы, радиационно-стимулированная зернограничная диффузия, поликристаллические материалы.

(Получено 26 июня 2013 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Многие важнейшие эксплуатационные характеристики поликристаллических материалов определяются наличием примесей в межзеренной границе. При этом установлено, что массоперенос примеси может происходить быстрее в составе комплекса с точечным дефектом, а не в свободном состоянии [1]. Указанная ситуация еще более усиливается в условиях облучения. Наличие примесей и их комплексов в поликристаллических материалах существенно влияет на характеристики радиационной повреждаемости, в особенности таких процессов как радиационно-индуцированная сегрегация (РИС) на границах зерен, радиационно-индуцированное образование пор и набухание, радиационное охрупчивание, ползучесть и рост и т.д. [2–4]. Для большинства перечисленных процессов полностью или частично контролирующим процессом является радиационно-стимулированная диффузия (РСД), в особенности, с учетом вкладов РСД по границам зерен в поликристаллических материалах.

Несмотря на значительный прогресс в понимании механизмов и проведении анализа кинетики процессов РСД в металлах и сплавах [3–6], большое количество фундаментальных проблем остаются нерешенными. К их числу относится отсутствие законченной модели радиационно-стимулированной граничной диффузии (РСГД) в поликристаллах на всех стадиях отжига радиационных дефектов с учетом влияния поведения широкого спектра примесных комплексов. Развитие представлений о процессах РСГД в поликристаллах сдерживается непроработанностью доказательных представлений об атомных механизмах зернограничной диффузии (ЗГД), отсутствием достоверных согласующихся данных по характеристикам точечных дефектов в границе зерен, в том числе по энергии связи комплексов точечных дефектов с атомами примесей, практическим отсутствием прямых экспериментальных измерений и теоретических оценок коэффициентов и параметров РСГД в поликристаллах (единственным

экспериментальным исследованием являются оценки, проведенные авторами настоящей работы [7]). Впервые приближенные модельные решения систем кинетических уравнений для квазистационарного режима отжига радиационных дефектов и оценки ускорения процессов РСГД в поликристаллах с использованием представлений о вакансионном механизме ЗГД и с учетом образования комплексов вакансия–примесь представлены в работе [8]. В настоящей работе приводятся результаты систематического анализа влияния вакансионных и междоузельных примесных комплексов на ускорение процессов РСГД для различных предполагаемых механизмов ЗГД и широкого интервала временных режимов отжига.

2. ОБОСНОВАНИЕ И ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ МОДЕЛИ

Создание модели и прогнозирование характеристик РСГД с неизбежностью должно опираться на представления об атомных механизмах ЗГД, которые до сих пор до конца не поняты и детально не разработаны [9]. В ранних обзорах, посвященных исследованию механизмов ЗГД, приводились наиболее прямые и веские доводы в пользу вакансионного механизма [10–14]. При этом отмечалось, что:

1. энергия образования вакансий E_v^f в границе зерна различна в разных местах и меньше, чем в решетке;
2. миграция вакансий происходит преимущественно вдоль оси ориентации;
3. выше $0,5T_{пл}$ наблюдается спонтанное образование пар Френкеля;
4. подвижность двух типов точечных дефектов существенно различается, при этом подвижность вакансий много больше, чем междоузельных атомов.

Однако, как отмечается в работе [9], предположения о преимущественно вакансионном характере миграции атомов в границах зерен должны быть пересмотрены с учетом последних результатов моделирования ЗГД, которые свидетельствуют о возможной роли междоузлий наряду с вакансиями. Энергетические характеристики обоих типов дефектов возможно близки между собой, что делает их одинаково важными для ЗГД. В работе [9] предполагается, что атомные механизмы диффузии в границах зерен отличаются от объемной диффузии. Это, по-видимому, относится и к соотношениям между подвижностями вакансий D_v и междоузельных атомов D_i в объеме кристалла и в границе зерна. Указанные предположения делают необходимым при анализе процессов РСГД учитывать возможность различных механизмов. Основные положения модели РСГД, принятой в настоящей работе, соответствуют принципам, рассматриваемым в [4, 5]. Однако необходимо подчеркнуть различия между моделью РСГД и объемной РСД, а также реальными системами.

Модель РСГД, предложенная в настоящей работе, основана на

следующих допущениях:

1. $D_v^{\text{гр}} \cong D_i^{\text{гр}}$, т.е. оба дефекта подвижны (здесь и далее индексы «гр» относятся к характеристикам процесса в границе зерна);
2. предполагая значительную сегрегацию примесей в границе [1, 9, 15], в модели рассматривается возможность влияния примесных комплексов с радиационными дефектами на ускорение процессов РСГД;
3. предполагая, что структура границ зерен в целом является дислокационной [9–14], считается, что стоками радиационных дефектов в границе являются дислокации; стоки предполагаются фиксированными и ненасыщаемыми, а их плотность относительно низкая [4–6];
4. при низких температурах и относительно низкой плотности стоков предполагается возможным анализировать процесс РСГД в квазистационарном и стационарном режимах отжига;
5. факторы предпочтения (преференс) при диффузии дефектов к стокам не учитываются;
6. боковым отсосом диффундирующего вещества из границы зерна в объем пренебрегается.

3. КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ

В рамках сделанных предположений, не учитывая на первой стадии анализа процесса РСГД влияния примесей, можно описать процесс отжига радиационных дефектов простейшей системой кинетических уравнений [4–6]:

$$\begin{aligned} \dot{C}_v^{\text{гр}} &= K_0 - K_{iv}^{\text{гр}} C_v^{\text{гр}} C_i^{\text{гр}} - K_{vs}^{\text{гр}} C_v^{\text{гр}} C_s^{\text{гр}}, \\ \dot{C}_i^{\text{гр}} &= K_0 - K_{iv}^{\text{гр}} C_i^{\text{гр}} C_v^{\text{гр}} - K_{is}^{\text{гр}} C_i^{\text{гр}} C_s^{\text{гр}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где $C^{\text{гр}}$ с индексами v , i и s — концентрации вакансий, междоузельных атомов и стоков соответственно, K_0 — скорость генерации точечных дефектов, $K_{iv}^{\text{гр}}$ — константа скорости взаимной рекомбинации, $K_{vs}^{\text{гр}}$ и $K_{is}^{\text{гр}}$ — константы скорости процессов аннигиляции соответственно вакансий и междоузельных атомов на стоках.

В рамках сделанных предположений и пренебрегая концентрацией стоков, т.е. считая, что доминирующим процессом отжига является рекомбинация, процесс РСГД можно описать наиболее простой системой кинетических уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{C}_v^{\text{гр}} &= K_0 - K_{iv}^{\text{гр}} C_v^{\text{гр}} C_i^{\text{гр}}, \\ \dot{C}_i^{\text{гр}} &= K_0 - K_{iv}^{\text{гр}} C_i^{\text{гр}} C_v^{\text{гр}}. \end{aligned} \quad (1a)$$

С учетом сделанных предположений, т.е. для вакансионно-междоузельного механизма ЗГД, можно записать:

$$K_{iv}^{rp} = 4\pi r_{iv} \Omega^{-1} (D_i^{rp} + D_v^{rp}) = W_{iv} (D_i^{rp} + D_v^{rp}), \quad (2)$$

где r_{iv} — радиус объема рекомбинации, Ω — атомный объем,

$$K_{vs}^{rp} = 4\pi r_{vs} \Omega^{-1} D_v^{rp} = W_{vs} D_v^{rp}, \quad K_{is}^{rp} = 4\pi r_{is} \Omega^{-1} D_i^{rp} = W_{is} D_i^{rp}, \quad (3)$$

где r_{vs} и r_{is} — радиусы аннигиляционных сфер точечных дефектов.

Естественным обобщением простейшей системы кинетических уравнений (1), учитывающим наличие примеси I и комплексов vI и iI , являются следующие уравнения, приведенные для процессов радиационно-индуцированного распухания и ползучести, а также для объемной РСД в работах [2, 16, 17]:

$$\begin{aligned} \dot{C}_v^{rp} &= K_0 - K_{iv}^{rp} C_v^{rp} C_i^{rp} - K_{3v}^{rp} C_v^{rp} C_i^{rp} + K_{4v}^{rp} C_{vI}^{rp} - K_{5v}^{rp} C_v^{rp} C_{iI}^{rp}, \\ \dot{C}_i^{rp} &= K_0 - K_{iv}^{rp} C_i^{rp} C_v^{rp} - K_{3v}^{rp} C_i^{rp} C_I^{rp} + K_{4v}^{rp} C_{iI}^{rp} - K_{5i}^{rp} C_i^{rp} C_{vI}^{rp}, \\ \dot{C}_I^{rp} &= K_{4i}^{rp} C_{iI}^{rp} + K_{4v}^{rp} C_{vI}^{rp} - K_{3i}^{rp} C_I^{rp} C_i^{rp} - K_{3v}^{rp} C_v^{rp} C_I^{rp} + K_{5i}^{rp} C_{vI}^{rp} C_i^{rp} + K_{5v}^{rp} C_v^{rp} C_{iI}^{rp}, \\ \dot{C}_{vI}^{rp} &= K_{3v}^{rp} C_v^{rp} C_I^{rp} - K_{4v}^{rp} C_{vI}^{rp} - K_{5i}^{rp} C_{vI}^{rp} C_i^{rp}, \\ \dot{C}_{iI}^{rp} &= K_{3i}^{rp} C_i^{rp} C_I^{rp} - K_{4i}^{rp} C_{iI}^{rp} - K_{5v}^{rp} C_v^{rp} C_{iI}^{rp}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь K_3 и K_4 — константы скорости образования и распада соответствующих комплексов, K_5 характеризует рекомбинацию дефекта на комплексе ($i + vI \rightarrow I, v + iI \rightarrow I$). Ввиду предполагаемой низкой плотности стоков, члены, содержащие C_s , в систему (4) не включены. Коэффициенты, входящие в систему уравнений (4), имеют следующий вид [2, 16]:

$$\begin{aligned} K_{iv}^{rp} &= 4\pi r_{iv} \Omega^{-1} (D_i^{rp} + D_v^{rp}) = W_{iv} (D_i^{rp} + D_v^{rp}), \\ K_{3v,3i}^{rp} &= 4\pi r_{vI,iI} \Omega^{-1} D_{v,i}^{rp} = W_{vI,iI} D_{v,i}^{rp}, \\ K_{4v,4i}^{rp} &= D_{v,i}^{rp} a_{v,i}^{-2} \exp[-E_{vI,iI}^b / (kT)], \\ K_{5v,5i}^{rp} &= 4\pi r_{vI,iI} \Omega^{-1} D_{v,i}^{rp} = W_{vI,iI} D_{v,i}^{rp}, \end{aligned} \quad (5)$$

где r_{iv} , r_{vI} , r_{iI} — соответствующие радиусы рекомбинации, a_v , a_i — величины порядка атомных размеров, $E_{vI,iI}^b$ — энергия связи комплексов. Для дальнейших приближенных оценок полагаем $W_{vs} \cong W_{is} \cong W_{vI} \cong W_{iI} \cong W = 6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$, $a^2 W \cong z$, где z — координационное число.

Как показано в работе [2], существует ситуация при которой уравнения (4) для кинетики отжига дефектов в металле с примесью сводятся к уравнениям (1а) для чистого металла с эффективным значением константы скорости рекомбинации K_{iv}^{sp} . Это возможно в случае, когда время жизни комплекса невелико и распад комплекса может произойти раньше, чем произойдет рекомбинация на ком-

плексе захваченного примесью точечного дефекта с дефектом противоположного типа, т.е.

$$C_v^{\text{гп}} K_{5v}^{\text{гп}} / K_{4i}^{\text{гп}} \ll 1, \quad C_i^{\text{гп}} K_{5i}^{\text{гп}} / K_{4v}^{\text{гп}} \ll 1. \quad (6)$$

Отсюда следует, что концентрации комплексов, определяемые уравнениями (4) с учетом (6), в квазистационарном и стационарном случаях пропорциональны концентрациям соответствующих точечных дефектов:

$$\begin{aligned} C_{vI}^{\text{гп}} &= C_v^{\text{гп}} C_I^{\text{гп}} K_{3v}^{\text{гп}} / K_{4i}^{\text{гп}} = z C_v^{\text{гп}} C_I^{\text{гп}} \exp[E_{vI}^b / (kT)], \\ C_{iI}^{\text{гп}} &= C_i^{\text{гп}} C_I^{\text{гп}} K_{3i}^{\text{гп}} / K_{4i}^{\text{гп}} = z C_i^{\text{гп}} C_I^{\text{гп}} \exp[E_{iI}^b / (kT)]. \end{aligned} \quad (7)$$

Подставляя (7) в (4), получаем систему уравнений типа (1):

$$\begin{aligned} C_v^{\text{гп}} &= K_0 - K_{iv}^{\text{эф}} C_v^{\text{гп}} C_i^{\text{гп}} - K_{vs}^{\text{гп}} C_v^{\text{гп}} C_s^{\text{гп}}, \\ C_i^{\text{гп}} &= K_0 - K_{iv}^{\text{эф}} C_v^{\text{гп}} C_i^{\text{гп}} - K_{is}^{\text{гп}} C_i^{\text{гп}} C_s^{\text{гп}}, \end{aligned} \quad (8)$$

для случая пренебрежения концентрацией стоков, или типа (1а):

$$\begin{aligned} C_v^{\text{гп}} &= K_0 - K_{iv}^{\text{эф}} C_v^{\text{гп}} C_i^{\text{гп}}, \\ C_i^{\text{гп}} &= K_0 - K_{iv}^{\text{эф}} C_i^{\text{гп}} C_v^{\text{гп}}, \end{aligned} \quad (8a)$$

где в качестве константы скорости рекомбинации используется величина $K_{iv}^{\text{эф}}$ [2, 16]:

$$K_{iv}^{\text{эф}} = K_{iv}^{\text{гп}} + \left(K_{5v}^{\text{гп}} K_{3i}^{\text{гп}} / K_{4i}^{\text{гп}} + K_{5i}^{\text{гп}} K_{3v}^{\text{гп}} / K_{4v}^{\text{гп}} \right) C_I^{\text{гп}}. \quad (9)$$

Таким образом, наличие примеси сказывается в эффективном изменении скорости взаимной рекомбинации точечных дефектов, что особенно существенно для процесса РСГД в связи со значительным содержанием примесей в границах зерен, являющихся стоками для объемной РСД.

Подставляя в выражение (9) значения констант из (5) и значения $K_{iv}^{\text{гп}}$ для предполагаемого вакансионно-междоузельного механизма ЗГД из (2) получаем с учетом условия (2) для вакансионно-междоузельного механизма

$$(K_{iv}^{\text{эф}})' \cong W \left(D_v^{\text{гп}} \{1 + z C_I \exp[E_{iI}^b / (kT)]\} + D_i^{\text{гп}} \{1 + z C_I \exp[E_{vI}^b / (kT)]\} \right). \quad (10)$$

Как следует из (10), предположение о том, что в условиях РСГД оба типа радиационных дефектов подвижны, приводит к увеличению эффективной скорости рекомбинации по сравнению с вариантом доминирующей подвижности одного из дефектов. Это увеличение выражается в виде:

$$\frac{(K_{iv}^{\text{эф}})'}{(K_{iv}^{\text{эф}})''} \cong 1 + \frac{D_i^{\text{гп}} \{1 + zC_I^{\text{гп}} \exp[E_{vI}^b / (kT)]\}}{D_v^{\text{гп}} \{1 + zC_I^{\text{гп}} \exp[E_{iI}^b / (kT)]\}}. \quad (11)$$

Численные оценки этого эффекта затруднены отсутствием данных по величинам подвижностей радиационных дефектов в границе зерна, энергий связи различных примесей с дефектами, а также необходимостью суммирования по всем примесям во всех членах, входящих в уравнения (4)–(11) и содержащих концентрации различных комплексов с многочисленными естественными примесями, по их количеству [8]. Обнаруженный эффект согласуется с результатами компьютерного моделирования процесса рекомбинации вакансий и междоузельных атомов [18].

4. РЕШЕНИЕ И АНАЛИЗ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ СТАДИЙ ОТЖИГА В ПРОЦЕССЕ РСГД

Решение кинетических уравнений (8) и (8а) и расчет концентрации дефектов $C_v^{\text{гп}}$ и $C_i^{\text{гп}}$ позволяет оценить коэффициент РСГД с учетом влияния примесных комплексов $D_{\text{РСГД}}^{\text{прим}}$ и примесное ускорение РСГД $R_{\text{РСГД}}^{\text{прим}}$:

$$D_{\text{РСГД}}^{\text{прим}} = D_v^{\text{гп}} (C_v^{\text{гп}} + C_{vI}^{\text{гп}}) + D_i^{\text{гп}} (C_i^{\text{гп}} + C_{iI}^{\text{гп}}), \quad (12)$$

$$R_{\text{РСГД}}^{\text{прим}} = D_{\text{РСГД}}^{\text{прим}} / D_{\text{РСГД}}. \quad (13)$$

Описание изменения концентрации радиационных дефектов для различных температур, величин плотности стоков и скорости генерации дефектов на различных стадиях отжига приведены в [4–6]. В настоящей работе предполагается возможность проведения аналогичного анализа РСГД с учетом различных механизмов ЗГД.

Основной случай, реализуемый при анализе РСГД в чистых металлах — это отжиг радиационных дефектов при низких температурах и низкой плотности стоков. Если предположить, что процесс отжига дефектов в границе зерна происходит аналогично объемному, то в соответствии с анализом [4–6] в момент времени $t = \tau_1 = (K_0 K_{iv}^{\text{эф}})^{-1/2}$ заканчивается накопление дефектов, связанное с процессом взаимной рекомбинации. В интервале времён (τ_1, τ_2) , где $\tau_2 = (K_{is}^{\text{гп}} C_s^{\text{гп}})^{-1}$ существует квазистационарное состояние, для которого решение уравнений (8а) имеет вид:

$$C_v^{\text{гп}} = C_i^{\text{гп}} = \sqrt{K_0 / K_{iv}^{\text{эф}}}. \quad (14)$$

С учетом условий (2) и (10) решение для вакансионно-междоузельного механизма ЗГД (когда оба дефекта подвижны) имеет вид:

$$C_v^{\text{rp}} = C_i^{\text{rp}} = \sqrt{K_0/W} [D_v^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT}) + D_i^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})]^{-1/2}, \quad (15)$$

а коэффициент РСГД с учетом примесного ускорения в соответствии с (12) можно записать в виде

$$D_{\text{РСГД}}^{\text{прим}} = \frac{\sqrt{K_0/W} [D_v^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT}) + D_i^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})]}{[D_v^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT}) + D_i^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})]^{1/2}}. \quad (16)$$

Коэффициент примесного ускорения РСГД в соответствии с (13) имеет вид:

$$R_{\text{РСГД}}^{\text{прим}} = \frac{[D_v^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT}) + D_i^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})]}{[(D_v^{\text{rp}} + D_i^{\text{rp}}) \{D_v^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT}) + D_i^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})\}]^{1/2}}, \quad (17)$$

с учетом того, что решение уравнений (1а) представлено в виде

$$C_v^{\text{rp}} = C_i^{\text{rp}} = \sqrt{K_0/K_{iv}^{\text{эф}}} = \sqrt{K_0/[W(D_v^{\text{rp}} + D_i^{\text{rp}})]}. \quad (18)$$

В последующий момент времени C_v^{rp} растет, а C_i^{rp} убывает пропорционально $t^{1/2}$, и с момента времени $t = \tau_3 = (K_{vs}^{\text{rp}} C_s^{\text{rp}})^{-1}$ имеет место стационарный режим отжига, для которого решения уравнений (8) для низкой концентрации стоков имеют вид [4–6]:

$$C_v^{\text{rp}} = \sqrt{K_0 K_{is}^{\text{rp}} / (K_{iv}^{\text{эф}} K_{vs}^{\text{rp}})}, \quad C_i^{\text{rp}} = \sqrt{K_0 K_{vs}^{\text{rp}} / (K_{iv}^{\text{эф}} K_{is}^{\text{rp}})}, \quad (19)$$

и для вакансионно-междоузельного механизма ЗГД с учетом (2) и (10) получаем:

$$C_v^{\text{rp}} = \sqrt{K_0 D_i^{\text{rp}} / (W D_v^{\text{rp}})} [D_v^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT}) + D_i^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})]^{-1/2}, \quad (20)$$

$$C_i^{\text{rp}} = \sqrt{K_0 D_v^{\text{rp}} / (W D_i^{\text{rp}})} [D_v^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT}) + D_i^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})]^{-1/2}.$$

Коэффициент РСГД с учетом примесного ускорения и (12) имеет вид:

$$D_{\text{РСГД}}^{\text{прим}} = \sqrt{\frac{K_0 D_v^{\text{rp}} D_i^{\text{rp}}}{W}} [D_v^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT}) + D_i^{\text{rp}} (1 + zC_I^{\text{rp}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})]^{-1/2} \times \\ \times [2 + zC_I^{\text{rp}} (\exp \frac{E_{vI}^b}{kT} + \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})]. \quad (21)$$

Для этого случая коэффициент примесного ускорения РСГД имеет вид:

$$R_{\text{РСГД}}^{\text{прим}} = \sqrt{\frac{D_v^{\text{гп}} + D_i^{\text{гп}}}{4}} [D_v^{\text{гп}}(1 + zC_I^{\text{гп}} \exp \frac{E_{iI}^b}{kT}) + D_i^{\text{гп}}(1 + zC_I^{\text{гп}} \exp \frac{E_{vI}^b}{kT})]^{-1/2} \times \\ \times [2 + zC_I^{\text{гп}} (\exp \frac{E_{vI}^b}{kT} + \exp \frac{E_{iI}^b}{kT})], \quad (22)$$

с учетом того, что

$$D_{\text{РСГД}} = 2\sqrt{K_0 D_v^{\text{гп}} D_i^{\text{гп}} / [W(D_v^{\text{гп}} + D_i^{\text{гп}})]}.$$

Численные оценки с помощью полученных в настоящей работе выражений для коэффициентов РСГД и примесного ускорения РСГД в рамках рассматриваемых механизмов и стадий отжига затруднены отсутствием граничных характеристик подвижности дефектов и данных по энергиям связи их примесных комплексов. Если в соответствии с проведенным в [4] анализом полагать, что энергии связи стабильных междоузельных комплексов с подразмерными примесями и вакансионных комплексов с надразмерными примесями находятся в совпадающих интервалах значений, можно упростить полученные для $R_{\text{РСГД}}^{\text{прим}}$ выражения, условно предполагая, что $E_{vI}^b \cong E_{iI}^b = E_k^b$, где E_k^b — энергия связи произвольного комплекса. В этом случае, для всех рассмотренных случаев получаем из (17) и (22) упрощенное соотношение вида:

$$R_{\text{РСГД}}^{\text{прим}} \cong \sqrt{1 + zC_I^{\text{гп}} \exp[E_k^b/(kT)]}, \quad (23)$$

совпадающее по форме с выражением, приведенным в [8] для случая образования только вакансионных комплексов. Полученное выражение согласуется с оценками для экспериментальных данных по РСГД, приведенными в [7]. Соотношение (23) определяет температурную и концентрационную зависимости $R_{\text{РСГД}}^{\text{прим}}$. Как можно видеть, при увеличении концентрации примеси и понижении температуры коэффициент примесного ускорения возрастает.

Для реальных систем, содержащих значительное количество ускоряющих процесс РСГД сертификатных примесей, следует во всех выражениях, включающих C_I и E_k^b , проводить суммирование по всем примесям и их комплексам [8].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках модельных представлений проведен систематический анализ возможности описания процесса отжига радиационных де-

фектов в системах с границами зерен и с учетом влияния примесных комплексов в границе на ускорение РСГД. Проанализирована возможность использования обобщенной системы кинетических уравнений, учитывающих наличие примеси и комплексов вакансионного и междоузельного типа для процессов РСГД. Подтверждена возможность сведения обобщенной системы кинетических уравнений к простейшим классическим уравнениям для чистых металлов путем введения эффективного значения константы скорости рекомбинации $K_{iv}^{эф}$. Получены выражения $K_{iv}^{эф}$ для предполагаемого вакансионно-междоузельного механизма ЗГД и для увеличения эффективной скорости рекомбинации в условиях, когда оба типа радиационных дефектов в границе подвижны.

Представлены решения кинетических уравнений отжига для квазистационарного и стационарного процессов. Получены выражения для концентраций радиационных дефектов и их комплексов, коэффициентов РСГД с учетом влияния примесных комплексов и коэффициентов примесного ускорения РСГД в рамках вышеуказанных предполагаемых механизмов РСГД.

В рамках условно предполагаемого приближенного равенства значений энергии связи вакансионных и междоузельных примесных комплексов получено упрощенное выражение для оценки величины коэффициента примесного ускорения РСГД, описывающее температурные и концентрационные зависимости $R_{РСГД}^{прим}$. Показано, что при увеличении концентрации примеси и понижении температуры коэффициент примесного ускорения возрастает.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. В. В. Слезов, О. А. Осмаев, В. В. Рогожкин, *Физика низких температур*, **23**, № 2: 218 (1997).
2. И. А. Ахиезер, Л. Н. Давыдов, *Введение в теоретическую радиационную физику металлов и сплавов* (Киев: Наукова думка: 1985).
3. Л. И. Иванов, Ю. М. Платов, *Радиационная физика металлов и ее приложения* (Москва: Интерконтакт Наука: 2002).
4. Gary S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science* (Berlin–Heidelberg: Springer: 2007).
5. С. Дж. Ротман, *Фазовые превращения при облучении* (Ред. Ф. В. Нолфи) (Челябинск: Металлургия: 1989), с. 151.
6. R. Sizmann, *J. Nucl. Mater.*, **69–70**: 386 (1978).
7. Е. А. Смирнов, А. К. Спиридонов, А. А. Шмаков, *Физика и химия обработки материалов*, **3**: 18 (2010).
8. Е. А. Смирнов, *Материаловедение и новые материалы*, **2** (63): 36 (2004).
9. Х. Мерер, *Диффузия в твердых телах* (Долгопрудный: Изд. дом «Интеллект»: 2011).
10. R. W. Balluffi, *Metallurgical Transactions*, **13A**, No. 12: 2069 (1982).
11. N. L. Peterson, *Intern. Metals Rev.*, **28**, No. 2: 65 (1983); N. L. Peterson, *Diffu-*

- sion in Metals and Alloys* (Eds. F. J. Kedves and D. L. Beke) (Aedermannsdorf, Switzerland: Trans. Tech. Publ.: 1983), vol. 7, p. 145.
12. Дж. Бокэ, Г. Бребек, И. Лимож, *Диффузия в металлах и сплавах* (Москва: Металлургия: 1987).
 13. И. Каур, В. Густ, *Диффузия по границам зерен и фаз* (Москва: Машиностроение: 1991).
 14. Б. С. Бокштейн, Ч. В. Копецкий, Л. С. Швиндлерман, *Термодинамика и кинетика границ зерен в металлах* (Москва: Металлургия: 1986).
 15. В. А. Печенкин, *О сегрегации на границах зерен при облучении многокомпонентных сплавов* (Обнинск: 1999) (Препр./ФЭИ-2788).
 16. L. K. Mansur and M. H. Yoo, *J. Nucl. Mater.*, **74**: 228 (1978).
 17. R. A. Johnson and N. Q. Lam, *Phys. Rev. B*, **13**, No. 10: 4364 (1976).
 18. T. Leffers and B. N. Singh, *J. Nucl. Mater.*, **91**: No. 2-3: 336 (1980).