

ТЕОРИЯ ДИССИПАТИВНЫХ СТРУКТУР КИНЕТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ДЕФЕКТОВ НЕЛИНЕЙНОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ «МЕТАЛЛ+НАГРУЗКА+ОБЛУЧЕНИЕ».

ЧАСТЬ 3

В.А. Тарасов, Т.Л. Борилов, Т.В. Крыжановская, С.А. Чернеженко, В.Д. Русов
Одесский национальный политехнический университет, г. Одесса, Украина;
E-mail: siiis@te.net.ua, тел.(0482)64-16-72

Уточнена кинетическая система для дефектов физической нелинейной системы «металл + нагрузка + облучение» [1, 2, 3]. Развивая подходы, предложенные в [4], где формализованы различия механизмов радиационной ползучести и областей их применимости (в зависимости от внешних параметров) для топливных и конструкционных металлов, проводится разделение кинетических систем для дефектов конструкционных и топливных металлов. При этом делается акцент на автокаталитические особенности кинетической системы для дефектов реакторных топливных металлов, обусловленные экзотермическим автокаталитическим характером реакций ядерных делений, являющихся основным источником точечных дефектов для топливных металлов. В этой части статьи основное внимание уделено кинетике стоков для точечных дефектов. Для кинетических систем стоков-источников предложены новые подходы для задания граничных условий. Рассмотрена возможная структура компьютерной программы, моделирующей кинетическую систему для дефектов нелинейной физической системы «металл + нагрузка + облучение».

СТОКИ ДЛЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ, ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАДИАЦИОННОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Выделенная роль второго слагаемого в левой части уравнения (5) из части 1 статьи [9] (и аналогичного уравнения для вакансий) для всего радиационного металловедения состоит в том, что они связывают кинетическую систему точечных дефектов с системой других дефектов, например, таких, как система дислокаций и система пор, кинетика которых определяет радиационную ползучесть и распухание металла.

Отметим, что при написании кинетических уравнений для ТД, входящих в кинетическую систему ТД (21) из части 1 статьи, мы оставили некоторый произвол в задании поверхностей вокруг стоков-источников. Как мы покажем ниже, величина второго слагаемого уравнений (5) из [9] (и аналогичного уравнения для вакансий) сильным образом зависит от того, как выбирается поверхность возле стоков S_S , причем этот выбор крайне важен для всей кинетики ТД.

Отметим также, что для корректного учета вклада этих слагаемых в кинетические уравнения надо учитывать то, что дефекты могут перемещаться (например, движение дислокаций, ответственное за ползучесть), что могут изменяться их размеры (например, рост или растворение пор), что дефекты могут рождаться и исчезать.

Напомним, что в [9] статьи мы выразили вторые слагаемые левой части уравнений (5) (и аналогичного уравнения для вакансий) через плотности источника для ТД для стоков q_I^S и q_V^S ,

которые и фигурируют в окончательном виде кинетических уравнений для ТД (система кинетических уравнений (21) из [9]) и через которые осуществляется связь кинетической системы для ТД и кинетической системы для стоков, основными из которых являются дислокации и поры (здесь мы не рассматриваем другие возможные стоки, например, примесные атомы и включения, межзеренные поверхности и другие), т.е. кинетической системой для дислокаций и кинетической системой для пор.

В этом разделе уделим главное внимание кинетике системы дислокаций, ответственной за радиационную ползучесть металлов.

Начнем с выражений для q_I^S и q_V^S , но запишем их в следующем виде:

$$q_I^S(\vec{r}, t) = - \sum_i^{N_D(t)} \oint_{S_i^D} \vec{j}_I(\vec{r}, t) dS - \sum_i^{N_V(t)} \oint_{S_i^V} \vec{j}_I(\vec{r}, t) dS \quad (1)$$

$$\text{и } q_V^S(\vec{r}, t) = - \sum_i^{N_D(t)} \oint_{S_i^D} \vec{j}_V(\vec{r}, t) dS - \sum_i^{N_V(t)} \oint_{S_i^V} \vec{j}_V(\vec{r}, t) dS, \quad (2)$$

где i – индекс дефекта; $N_D(t)$ – число дефектов типа дислокация в объеме dV ; $N_V(t)$ – число дефектов типа пора в объеме dV . Таким образом, мы выделили вклады дислокаций и пор. И дальнейший анализ можем провести, рассматривая особенности вклада комплекса дислокаций и комплекса пор самостоятельно, а также рассматривая их взаимосвязь.

Приступим к рассмотрению кинетики комплекса дислокаций, ответственного за радиационную ползучесть, а следовательно, к анализу

теоретических моделей для радиационной ползучести.

Таким образом, первым слагаемым в (1) и (2), которые обозначим через q_I^{SD} и q_V^{SD} , с учетом дрейфового диффузионного члена согласно (11) [9] придадим следующий вид:

$$q_I^{SD}(\vec{r}, t) = - \sum_i^{N_D(t)} \oint_{S_i^D} \left[\frac{D_I \nabla C_I(\vec{r}, t) + D_I(T) C_I(\vec{r}, t) \nabla E_I(\vec{r}, t)}{kT} \right] dS \quad (3)$$

и

$$q_V^{SD}(\vec{r}, t) = - \sum_i^{N_D(t)} \oint_{S_i^D} \left[\frac{D_V \nabla C_V(\vec{r}, t) + D_V(T) C_V(\vec{r}, t) \nabla E_V(\vec{r}, t)}{kT} \right] \times dS. \quad (4)$$

Здесь, как уже кратко отмечалось [9], коэффициенты диффузии для междоузельных атомов $D_I(T)$ и для вакансий $D_V(T)$ для простоты предполагаются не зависящими от \vec{r} , а зависящими только от температуры T (хотя если в металле будут температурные неоднородности, это все равно приведет к зависимости от координаты $D_\alpha(\vec{r}, T)$), т.е. рассматривается изотропная среда.

$E_I(\vec{r}, t)$ и $E_V(\vec{r}, t)$ – энергии взаимодействия междоузельного атома и вакансии соответственно с суммарным полем упругих напряжений

$$\sigma_{ij}(\vec{r}, t) = \sigma_{ij}^{BH}(\vec{r}) + \sum_\alpha \sigma_{ij}^\alpha(\vec{r}, t), \quad (5)$$

создаваемым полем напряжений внешней нагрузки $\sigma_{ij}^{BH}(\vec{r})$ (рассматриваем случай постоянной внешней нагрузки, а при переменной нагрузке – $\sigma_{ij}^{BH}(\vec{r}, t)$) и локальными полями напряжений дефектов $\sigma_{ij}^\alpha(\vec{r}, t)$, где α – индекс типа дефекта (зависимость $\sigma_{ij}^\alpha(\vec{r}, t)$ от времени обусловлена возможным перемещением дефектов, например, скольжением дислокации под действием внешнего напряжения). Обычно пренебрегают полями напряжений мелких дефектов, например, самих ТД (вакансии и междоузельные атомы) и учитывают поля напряжений главных стоков для ТД, которыми являются здесь дислокации. В работе [8] представлено вычисление энергии взаимодействия ТД с полем напряжения с учетом размерного взаимодействия первого порядка и модульного взаимодействия. Здесь для того, чтобы не отвлекаться от важнейшего анализа, у нас нет возможности это подробно рассматривать, отметим лишь важность корректного описания энергии взаимодействия ТД для описания их потоков на стоки, в частности на дислокации, а следовательно, для теорий ползучести (например, модели SIPA

(Strength Induced Preference Absorption), Саралидзе-Слезова и [6]).

Приостановим наш анализ выражений (3) и (4) и напомним основные положения теоретических моделей для радиационной ползучести металлов.

Согласно [4, 6, 7] большое разнообразие теоретических моделей радиационной ползучести объединяет одно общее положение – наличие в облучаемом материале высокой концентрации ТД и стоков для них. Учет этого положения с привлечением дислокационных представлений позволяет объяснить особенности радиационной ползучести материалов под напряжением результатом скольжения и переползания дислокаций в поле распределенных препятствий. Аналитические теоретические модели, построенные на основе этих представлений, позволяют судить о характере влияния некоторых факторов на скорость радиационной ползучести. Однако выявление особенностей радиационной ползучести на основе модели движения гибких дислокаций в поле распределенных препятствий возможно лишь с привлечением методов математического моделирования на ЭВМ.

При выводе аналитического выражения для скорости радиационной ползучести обычно делается ряд упрощающих предположений, без которых получение такого выражения не возможно из-за сложности реального процесса.

Так, всю совокупность дислокаций заменяют упрощенной схемой распределения дислокаций, например, полагают, что она состоит из пространственной сетки прямолинейных краевых дислокаций, ориентированных параллельно координатным осям и имеющих векторы Бюргерса, направленные вдоль координатных осей, причем плотность дислокаций какой-либо из трех возможных ориентаций полагается равной $\rho/3$, где ρ – плотность дислокаций.

Так, от учета движения всей совокупности дислокаций с помощью выражения

$$\dot{\epsilon} = b \cdot \rho \cdot v, \quad (6)$$

где $\dot{\epsilon}$ – скорость ползучести; ρ – плотность дислокаций; v – скорость движения дислокации, и которое справедливо лишь в предположении, что все дислокации двигаются одинаково, переходят к описанию движения отдельной дислокации.

Далее полагается, что прямолинейная дислокация проскользила некоторое расстояние ℓ до ее остановки на препятствии и для преодоления препятствия дислокация должна переползти, поглощая ТД, на расстояние λ , которое обычно равняется размеру препятствия. Получив выражение для скорости переползания дислокации $v_{пер}$, можно записать приблизительное выражение (справедливое при $v_{ск} \gg v_{пер}$) для скорости движения дислокации:

$$v = \frac{\ell}{\lambda} \cdot v_{пер}, \quad (7)$$

а следовательно, и аналитическое выражение для скорости радиационной ползучести.

Таким образом, любая аналитическая модель оставляет за рамками рассмотрения член ℓ/λ , ибо движение гибкой дислокации, взаимодействующей с препятствиями, возможно лишь смоделировать на ЭВМ. Отметим, что параметры ℓ и λ становятся совершенно неопределенными, если дислокация становится гибкой, поэтому для количественной оценки вклада в ползучесть (пластическую деформацию) движения гибкой дислокации, моделируемого на ЭВМ, используется другая характеристика – скорость заметаемой дислокацией площади скольжения.

Скорость переползания дислокации получают, решив задачу об определении результирующего потока ТД (междоузельных атомов и вакансий) на дислокацию. Широко распространено определение потока ТД на дислокацию, например [8-16], на основе решения, предложенного в работе [10]. Это решение послужило для построения теоретических моделей радиационной ползучести металлов, таких как модели SIPA (Strength Induced Preference Absorption) [10], Саралидзе-Слезова [9,14,15]. Авторы [10], по-видимому, полагали из-за действия облучения малую пересыщенность ТД в материале $C_\alpha - C_\alpha^p \ll 1$, где C_α – концентрация ТД в материале,

$$C_\alpha^0 = C_\alpha^p \cdot \exp\left(\frac{\omega}{3kT} \cdot \sigma_{\ell\ell}^{ex}\right) - \quad (8)$$

– равновесная концентрация ТД типа α в материале под действием внешних напряжений; $\sigma_{\ell\ell}^{ex}$ – след тензора внешних напряжений; C_α^0 – термически равновесная концентрация ТД типа α в ненапряженном кристалле; ω – атомный объем. Тогда для нахождения потока ТД на сток достаточно решить, как показано в [17], стационарную диффузионную задачу. При наличии объемных источников ТД это означает, что стоки успевают поглощать все рождающиеся в объеме ТД, что позволяет вокруг каждого стока условно выделить область его влияния, определяемую тем, что все ТД, рожденные в данной области, поглощаются данным стоком. В этой области диффузионное уравнение имеет вид:

$$-\nabla \vec{J}_\alpha + K^\alpha = 0, \quad (9)$$

где K^α – средняя мощность объемных источников ТД типа α , т.е. скорость их образования в единице объема; \vec{J}_α – плотность потока ТД. Выражение для плотности потока ТД запишем в виде

$$\begin{aligned} \omega \vec{J}_\alpha(\vec{r}, t) = \\ = -D_\alpha \nabla C_\alpha(\vec{r}, t) - \frac{D_\alpha C_\alpha(\vec{r}, t)}{kT} \nabla E_\alpha(\vec{r}), \end{aligned} \quad (10)$$

где E_α – энергия взаимодействия ТД типа α с локальным полем напряжений, создаваемым стоком. Предполагается, что коэффициент диффузии D_α не зависит от пространственной переменной. Рассмотрим ТД в поле напряжений прямолинейной краевой дислокации, направленной вдоль оси Z и имеющей вектор Бюргерса $\vec{b} = (b, 0, 0)$. Свяжем с дислокацией цилиндрическую систему координат, тогда $E_\alpha(\vec{r})$ равно:

$$E_\alpha(r, \theta) = \frac{(1+\nu)\mu b \Delta V_\alpha \sin \theta}{3\pi(1-\nu)r}, \quad (11)$$

где μ – модуль сдвига; ν – коэффициент Пуассона; ΔV_α – релаксационный объем ТД типа α .

Допуская $K^\alpha = 0$, т.е. объемные источники отсутствуют, учитывая, что $\nabla^2 E_\alpha(r, \theta) = 0$ и подставив выражения (10), (11) в уравнение (9), получим

$$\nabla^2 C_\alpha(\vec{r}) + \frac{1}{kT} \nabla C_\alpha(\vec{r}) \nabla E_\alpha(\vec{r}) = 0. \quad (12)$$

Чтобы решить уравнение (12), необходимо задать граничные условия. Предполагается, что дислокация является идеальным стоком для ТД, следовательно, у ядра дислокации (при $r = r_0$, обычно допускается, что $r_0 \sim b$, где b – вектор Бюргерса дислокации) поддерживается концентрация

$$C_\alpha(r_0) = C_\alpha^p \cdot \exp(-E_\alpha(r_0, \theta)/kT), \quad (13)$$

где C_α^p – равновесная концентрация ТД типа α (8). Другое граничное условие получают из предположения, что на некотором расстоянии R $E_\alpha(R, \theta) = 0$, и тогда

$$C_\alpha(R) \approx C_\alpha. \quad (14)$$

Решение уравнения (12) с граничными условиями (13) и (14) получено в работе [8] и имеет вид:

$$\begin{aligned} C_\alpha(r, \theta) = C_\alpha^p \cdot \exp\left(-\frac{E_\alpha(r, \theta)}{kT}\right) + \\ + (C_\alpha - C_\alpha^p) \exp\left(-\frac{E_\alpha(r, \theta)}{2kT}\right) \cdot \psi_\alpha(r), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\text{где } \psi_\alpha(r) = \frac{K_0\left(\frac{L_\alpha}{2r}\right)I_0\left(\frac{L_\alpha}{2r_0}\right) - I_0\left(\frac{L_\alpha}{2r}\right)K_0\left(\frac{L_\alpha}{2r_0}\right)}{K_0\left(\frac{L_\alpha}{2R}\right)I_0\left(\frac{L_\alpha}{2r_0}\right) - I_0\left(\frac{L_\alpha}{2R}\right)K_0\left(\frac{L_\alpha}{2r_0}\right)}, \quad (16)$$

K_0 и I_0 – функции Бесселя чисто мнимого аргумента,

$$L_\alpha = \frac{\mu b(1+\nu)\omega^\alpha}{3\pi kT(1-\nu)}. \quad (17)$$

Теперь можно вычислить поток ТД на единицу длины дислокации:

$$I_{\alpha} = r_0 \int_0^{2\pi} |\bar{J}_{\alpha}(r_0, \theta)| d\theta, \quad (18)$$

где $|\bar{J}_{\alpha}|$ находится из уравнения (10) путем подстановки в него выражений (15) и (11).

В результате получается

$$I_{\alpha} = Z_{\alpha}^0 D_{\alpha} (C_{\alpha} - C_{\alpha}^d) / \omega, \quad (19)$$

где Z_{α}^0 – параметр, представляющий собой эффективность поглощения дислокацией ТД типа α :

$$Z_{\alpha}^0 = \frac{2\pi I_0 \left(\frac{L_{\alpha}}{2r_0}\right)}{K_0 \left(\frac{L_{\alpha}}{2R}\right) I_0 \left(\frac{L_{\alpha}}{2r_0}\right) - K_0 \left(\frac{L_{\alpha}}{2r_0}\right) I_0 \left(\frac{L_{\alpha}}{2R}\right)}. \quad (20)$$

Представленные выражения, полученные в [9], широко используются для получения аналитических выражений для скорости радиационной ползучести без учета предположений, при которых они получены.

Например, в работах [8, 11-13 и др.] считают всю модель [10] приемлемой за исключением второго граничного условия, которое вводится следующим образом: $C_{\alpha}(R_d) = C_{\alpha}^0$, где R_d – среднее расстояние между дислокациями; C_{α}^0 – некоторая средняя по образцу концентрация ТД, создаваемых облучением, которая находится из кинетических уравнений для точечных дефектов (3) из [9]. Тогда все решения (15)-(20), полученные в [10], сохраняют свой вид с заменой R на R_d и C_{α} на C_{α}^0 .

Однако выбор R_d на основе плотности дислокаций, очевидно, не выдерживает критики. Действительно, в работе [10] физической основой рассматриваемого распределения ТД у дислокации полагается поле напряжений, создаваемое дислокацией, что и отражено в решении (15), дающем граничную концентрацию C_{α} на расстоянии R , на котором E_{α} пренебрежимо мала. Так как в рассматриваемом случае R_d связано с плотностью дислокаций, то R_d может быть как больше R , так и

меньше

R .

Если

$R_d > R$, то совершенно не ясно с физической точки зрения, почему на расстояниях $r \geq R_d$ должна быть одна концентрация ТД, а на расстояниях $R_d > r \geq R$ – другая, если поле напряжений $E_{\alpha}(r, \theta)$ при этом пренебрежимо мало. Если же плотность дислокаций достаточно велика и $R_d < R$, то решение (15) перестает быть справедливым.

Остается без ответа и вопрос, почему в моделях, основанных на решении (15) [10], вдоль направлений $\theta = k\pi$, где $k=0,1$, задается изменение концентраций ТД, так как причина для изменения концентраций – поле напряжений, обуславливающее $E_{\alpha}(r, \theta)$, в этом случае равно нулю.

Таким образом, проявляется ряд физических неопределенностей и противоречий, которые как отмечалось в [6, 7], обусловлены самой физической моделью дислокации как стока, лежащей в основе решения (15) [10]. Модель дислокации как стока, заложенную в [10], мы называем моделью идеального стока [6, 7].

Действительно, дислокация в [10] рассматривается как бесструктурная линия радиуса $r_0 \sim b$, любая единица длины которой обладает поглощательной способностью, задаваемой выражением (19). Далее в соответствии с основными физическими положениями модели [10] концентрация зависит от пространственной переменной (от r) согласно (рис. 1).

Далее, для модели [10] характерна сильная зависимость потока ТД на дислокацию (а следовательно, и скорости переползания дислокации), задаваемого решением (19) от задаваемого значения R_d (рис. 2), причем при постоянном значении C_{α} (или C_{α}^0) I_{α} будет менять свою величину от некоторой конечной величины при R_d , достаточно большом по сравнению с r_0 до ∞ , при $R_d = r_0$ (отсюда и основание для возникновения понятия идеального стока [6, 7]).

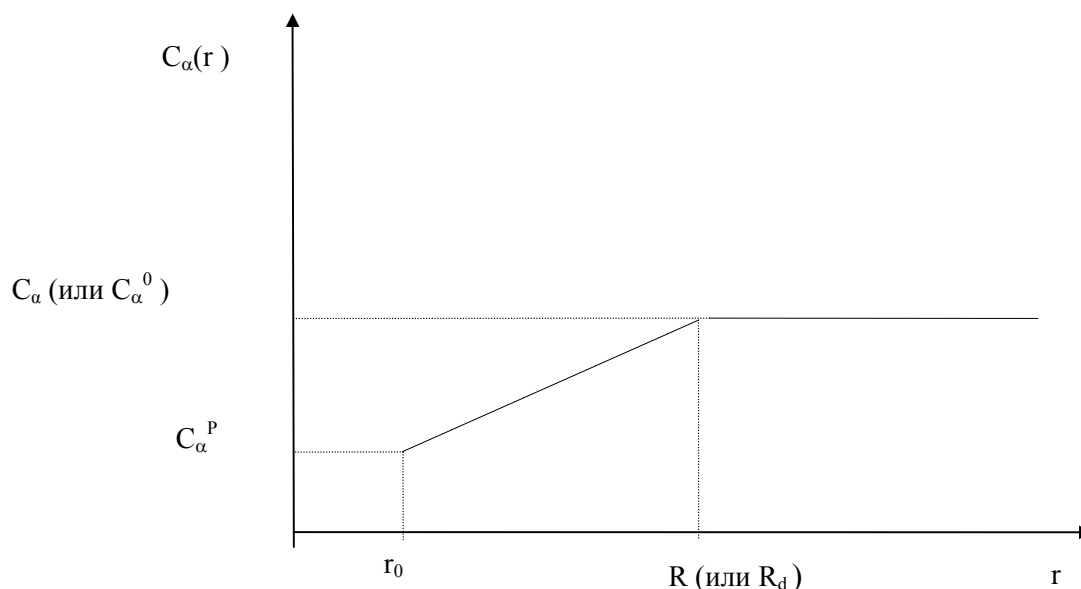


Рис. 1. Схема изменения концентрации ТД в образце под действием облучения в зависимости от расстояния r от дислокации для модели дислокации как идеального стока [9]

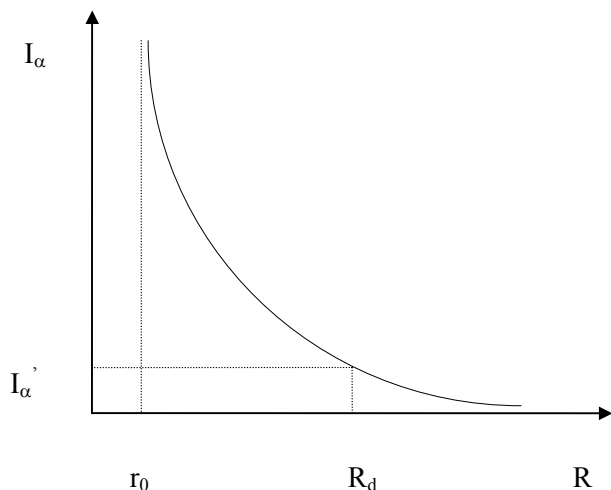


Рис. 2. Схема изменения потока ТД I_α в зависимости от расстояния от дислокации R , на котором задается второе граничное условие, для модели дислокации как идеального стока [10]

Таким образом, для моделей радиационной ползучести, использующих модель идеального стока для дислокации [10], физическая неопределенность в задании параметра R_d приводит к неопределенности поглощательной способности единицы длины дислокации и, как результат этого, – к неопределенности всего процесса кинетики ТД при облучении, а следовательно, и процесса радиационной ползучести. Это особенно наглядно просматривается в контексте анализа, проводимого в этой статье, так как физическая неопределенность в задании параметра R_d равнозначна физической неопределенности в задании поверхности S_i^D вокруг дислокации и, следовательно, в неопределенности q_I^{SD} и q_V^{SD} , задаваемых выражениями (3) и (4) и их влияния на систему

кинетических уравнений для точечных дефектов (21) из [9].

С физической точки зрения представляется корректным стремиться к уменьшению объема вокруг стока V_S^i , в том числе и для дислокации, а следовательно, и к уменьшению поверхности S_i^D , ибо в этом случае увеличивается объем для балансовых уравнений для ТД системы кинетических уравнений (21) [9] и из них не исключаются значительные объемы $\sim R$ вблизи дислокационных стоков.

Подчеркнем, что, как мы видели выше, в модели идеального стока для дислокации [10] эти области вблизи дислокации не содержат в себе источников, т.е. в них не учитывается действие радиации и процессов делений, не рассматривается взаимодействие точечных дефектов, т.е. не решаются корректно кинетические уравнения для ТД. Отметим, что результаты [10] были усовершенствованы в [15], где получено решение (9) без предположения ($K^\alpha = 0$), т.е. учтены источники в области $r_0 < r < R$. В [16] учитывалась взаимная рекомбинация ТД в области $r_0 < r < R$. Однако и в них определяющая неопределенность в задании параметра R_d сохраняется.

Если же поверхность S_i^D взять радиусом r_0 или близким к нему, то поглощательная способность, задаваемая моделью [10], становится бесконечной или стремящейся к бесконечности, что приводит к подавлению всех других членов левых частей кинетических уравнений для ТД (21) из [9].

Поэтому представляется обоснованным согласно [6, 7] принять, что дислокация не является идеальным стоком для ТД и вблизи дислокации так же, как и во всем образце устанавливается концентрация ТД в соответствии с кинетическими уравнениями для ТД

(21) из [9]. При этом поверхность S_i^D берется радиуса r_0 . На рис. 3 приведена схема изменения концентрации ТД в образце под действием облучения в зависимости от расстояния r от дислокации для модели дислокации как неидеального стока. При этом дислокация должна иметь конечный сток ТД (рис. 4).

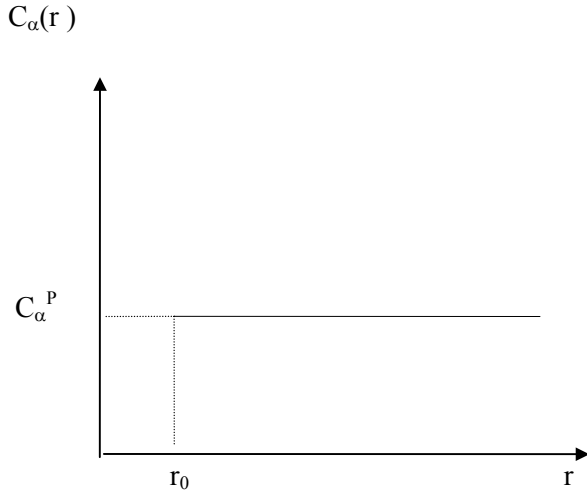


Рис. 3. Схема изменения концентрации ТД в образце под действием облучения в зависимости от расстояния r от дислокации для модели дислокации как неидеального стока

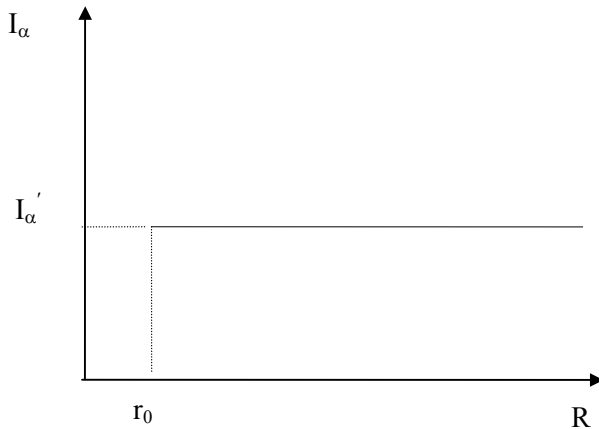


Рис. 4. Схема изменения потока ТД I_α в зависимости от расстояния от дислокации R , на котором задается второе граничное условие, для модели дислокации как неидеального стока

Отметим, что на рис. 4 показана условная схема, для наглядности совпадающая со схемой рис. 3, ибо в случае неидеального стока существует лишь одно граничное условие $C_\alpha(r_0) = C_\alpha^P$, которое находится из кинетических уравнений для ТД (21) [9]. Причем, $C_\alpha(r_0) = C_\alpha^P$ вычисляется с учетом суммарных упругих напряжений, действующих на поверхности дислокации, в том числе и с учетом напряжения, создаваемого дислокацией:

$$\sigma_{ii}(r, \theta) = \frac{-\mu b(1+\nu)\sin\theta}{\pi(1-\nu)r}. \quad (21)$$

Действительно, если рассматривать дислокацию как объект с некоторой внутренней структурой ядра, например, со ступеньками, термически равновесная концентрация которых согласно [18] задается выражением

$$C_{CT} = \frac{1}{a} \exp\left(-\frac{F_{CT}}{kT}\right), \quad (22)$$

где a – постоянная решетки; F_{CT} – энергия образования ступеньки ($F_{CT} \sim 0,62$ эВ), и лишь которые являются стоками для ТД, то дислокация из-за ограниченности концентрации ступенек перестает быть идеальным стоком для ТД, т.е. поток ТД, стекающих на дислокацию, конечен. Тогда вблизи дислокации может устанавливаться равновесная концентрация ТД, превышающая термически равновесную.

В модели дислокации как неидеального стока (как мы увидим несколько ниже), если у дислокации (при $r = r_0$) равновесная концентрация ТД превышает термически равновесную, то поток ТД на дислокацию определяется разностью между концентрацией ТД у дислокации и термически равновесной, т.е. дислокация как бы стремится восстановить термически равновесную концентрацию, но не может этого сделать при данных условиях.

Таким образом, используя физическую модель дислокации со ступеньками, мы можем рассматривать кинетику ТД в материалах под действием облучения, а следовательно, и радиационную ползучесть без тех противоречий и неопределенностей, которые характерны для других подходов.

В работе [19] Н. Моттом впервые было предложено выражение для скорости дрейфа дислокационной ступеньки, поглощающей и испускающей вакансии в кристалле под внешней нагрузкой (диффузионная ползучесть), причем выражение учитывало возможность пресыщения вакансиями через осмотическую силу (осмотическая сила обусловлена увеличением свободного потенциала системы с переменным числом частиц). При выводе этого выражения автор [19] полагал, что ступенька является точечным источником-стоком для вакансий и внутри поверхности радиуса $\sim b$ вокруг нее поддерживается квазиравновесное состояние. Тогда согласно [18] статическое поле диффузии вокруг ступеньки

$$C_\alpha - C_\alpha^0 = C_\alpha' \frac{b}{r} \quad (23)$$

(C_α – концентрация ТД типа α при $r_0 \sim b$, т.е. $C_\alpha = C_\alpha^D$; C_α^0 – термически равновесная концентрация ТД типа α) вызывает увеличение потока ТД типа α

$$I_{\alpha} = -4\pi r^2 D_{\alpha} \frac{\partial C}{\partial r} = 4\pi D_{\alpha} C'_{\alpha} b, \quad (24)$$

где избыточная концентрация ТД, находящихся в локальном равновесии со ступенькой, равна

$$C'_{\alpha} = C_{\alpha}^0 \left[\exp\left(\frac{F^{\alpha} v_a}{LbkT}\right) - 1 \right], \quad (25)$$

и скорость дрейфа ступеньки

$$v_{\text{ст}}^{\alpha} = I_{\alpha} a. \quad (26)$$

Мотт рассматривал лишь вакансии, а индекс α типа ТД введен в выражения авторами [6, 7] с целью облегчения обобщения этих выражений на случай радиационной ползучести, предусматривающий совместное рассмотрение вакансий и междоузельных атомов. Сила переползания F^{α}/L , действующая на дислокацию и входящая в выражение (25), задается выражением

$$\frac{F^{\alpha}}{L} = \frac{F_{\text{упр}}}{L} + \frac{F_{\text{осм}}^{\alpha}}{L}, \quad (27)$$

где $F_{\text{упр}}/L$ – сила переползания, обусловленная действием поля упругих напряжений и задаваемая выражением

$$\frac{F_{\text{упр}}}{L} = \frac{(\bar{b} \Sigma \times \bar{\xi})(\bar{b} \times \bar{\xi})}{|\bar{b} \times \bar{\xi}|}, \quad (28)$$

где Σ – полный (суммарный по всем напряжениям) тензор упругих напряжений; \bar{b} – вектор Бюргера; $\bar{\xi}$ – единичный вектор, задающий направление дислокационной линии, где $F_{\text{осм}}^{\alpha}/L$ – осмотические силы, обусловленные пересыщением ТД и задаваемые выражениями

$$\frac{F_{\text{осм}}^V}{L} = -\frac{kTb_{\text{кр}}}{V_a} \ln \frac{C_V}{C_V^0} \quad (29)$$

и

$$\frac{F_{\text{осм}}^I}{L} = \frac{kTb_{\text{кр}}}{V_a} \ln \frac{C_I}{C_I^0}. \quad (30)$$

В своей работе Н. Мотт разложил экспоненту, входящую в выражение (25), в предположении малости упругих напряжений и малых пересыщений вакансий, и привел окончательное выражение для скорости дрейфа ступеньки в следующем виде:

$$V_{\text{ст}}^V = 4\pi ab C_V^0 D_V \frac{F^V v_a}{LbkT} = \frac{4\pi D_S^V a F^V}{LkT}. \quad (31)$$

Авторы работы [17], используя выражение (31) и учитывая то, что диффузионная подвижность вакансий в ядре дислокации выше, чем в объеме, а также то, что концентрация дислокационных ступенек задается выражением (22), представили

следующее выражение для скорости переползания дислокации:

$$V_{\text{Пер}}^V = \frac{4\pi D_S^V v_a (F^V / L)}{abkT \ln(\bar{z}_V / b)} \exp\left(\frac{\Delta W_S^V - 2F_{\text{ст}}}{2kT}\right), \quad (32)$$

где \bar{z}_V – среднее квадратическое расстояние, на которое происходит диффузия вакансии ядра вдоль дислокации до того, как произойдет испарение вакансии в решетку; ΔW_S^V – разница между энергией активации самодиффузии в объеме и энергией активации самодиффузии в ядре; $F_{\text{ст}}$ – энергия образования ступеньки.

Отказавшись от разложения экспоненты, входящей в (25), ибо для радиационной ползучести нельзя делать предположения о малой пересыщенности ТД, и рассматривая вакансии и междоузельные атомы, авторы [6, 7] получили следующее выражение для скорости переползания дислокации:

$$V_{\text{Пер}} = V_{\text{Пер}}^I - V_{\text{Пер}}^V = \frac{4\pi D_S^I}{akT \ln(\bar{z}_I / b)} \times \left[\exp\left(\frac{F^I v_a}{LbkT}\right) - 1 \right] \exp\left(\frac{\Delta W_S^I - 2F_{\text{ст}}}{2kT}\right) - \frac{4\pi D_S^V}{akT \ln(\bar{z}_V / b)} \left[\exp\left(\frac{F^V v_a}{LbkT}\right) - 1 \right] \times \exp\left(\frac{\Delta W_S^V - 2F_{\text{ст}}}{2kT}\right). \quad (33)$$

Отметим, что преимущественное поглощение дислокацией междоузельных атомов по сравнению с вакансиями (преференс) в разработанной модели определяется не только различием в упругом взаимодействии дислокации с междоузельными атомами и вакансиями, как и в [10], причем это связано с зависимостями $C_{\alpha}(r_0) = C_{\alpha}^P$ от упругих напряжений, но и различием в пересыщении междоузельными атомами и вакансиями, которое обусловлено действием облучения и также аккумулируется посредством кинетических уравнений. Причем оба эти фактора учитываются через различие соответствующих осмотических сил. А различие преференса для разных типов стоков (при одинаковых пересыщениях междоузельными атомами и вакансиями), например, между дислокацией и порой, определяется их различием в упругом взаимодействии с междоузельными атомами и вакансиями.

Скорость скольжения дислокации с перегибами в рельефе Пайерлса согласно [18] задается выражением

$$V_{ск} = \frac{2F_{неп} h}{akT} D_K \exp\left(-\frac{F_K}{kT}\right), \quad (34)$$

где $F_{неп}$ – сила, обусловленная действием упругих напряжений на перегиб и задаваемая выражением

$$F_{неп} = h \cdot \frac{\left[\left(\vec{b} \cdot \Sigma \right) \times \vec{\xi} \right] \cdot \left[\vec{\xi} \times \left(\vec{b} \times \vec{\xi} \right) \right]}{\left| \vec{b} \times \vec{\xi} \right|}. \quad (35)$$

Здесь D_K – коэффициент диффузии перегибов; h – высота перегиба; F_K – энергия образования перегиба.

Выражения для скорости переползания дислокации (33) и для скорости скольжения (34) используются в [6, 7] при разработке программы для ЭВМ, моделирующей движение гибких дислокаций, а следовательно, и радиационной ползучести.

Так как предполагается, что C_α – концентрация ТД типа α при $r_0 \sim b$, т.е. $C_\alpha = C_\alpha^P$, будет находиться из системы кинетических уравнений для точечных дефектов, которые учитывают все поля упругих напряжений (12) [9], то $C_\alpha = C_\alpha^P$ не есть какая-то постоянная величина при $r_0 \sim b$ по всей дислокационной поверхности S_i^D , а будет зависеть от пространственной координаты $C_\alpha(\vec{r}, t) = C_\alpha^P(\vec{r}, t)$, потому что энергия взаимодействия ТД с дислокацией (11) или поле напряжений (21), создаваемых дислокацией, зависят от \vec{r} . Поэтому для отдельных ступенек может сложиться так, что они станут источником ТД.

Из настоящей статьи следует отметить, что так как при определенных условиях могут образовываться неоднородные структуры из ТД (диссипативные структуры), то может быть реализован новый механизм преимущественного поглощения дислокацией того или иного типа ТД, связанный с тем, что при своем движении дислокация или ее отдельные части могут попадать и находиться в этих неоднородных структурах ТД.

В работах [6, 7] представлена программа для ЭВМ, моделирующая движение гибких дислокаций. Эта программа реализована с помощью метода динамического моделирования скольжения и переползания гибких дислокаций, разработанного следующим образом.

Компьютерная программа моделирует радиационную ползучесть блока модельного кристалла, находящегося под действием растягивающей нагрузки методом динамического моделирования скольжения и переползания гибких дислокаций. Полагается, что в блоке модельного кристалла плоскости скольжения активных дислокаций ориентированы по отношению к приложенной внешней нагрузке в соответствии с рис. 5, причем $\lambda = 45^\circ$, а активные дислокации, движение которых моделируется и вызывает ползучесть, первоначально прямолинейны и параллельны оси OX_1 .

Согласно [20] скорость ползучести моделируемого блока кристалла

$$\dot{\epsilon} = b\rho u^*, \quad (36)$$

где

$$u^* = \frac{1}{\Delta\tau\rho V} \sum_i^N \Delta S_i. \quad (37)$$

Здесь ρ – плотность подвижных дислокаций; b – модуль вектора Бюргеса; ΔS_i – площадь, заметаемая i -й дислокацией за время $\Delta\tau$, V – объем кристалла; N – число дислокаций в объеме V . Поэтому предметом моделирования было выбрано скольжение и переползание гибкой дислокации, взаимодействующей с препятствиями, в условиях пересыщения кристалла ТД, создаваемыми облучением. Причем блок кристалла описывался в приближении упругоизотропного континуума с модулем сдвига μ и коэффициентом Пуассона ν .

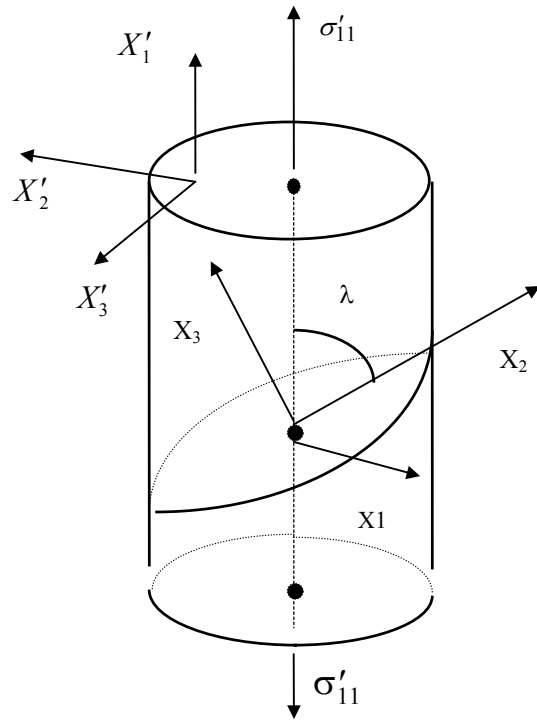


Рис. 5. Соотношение между плоскостью скольжения X_1OX_2 , направлением скольжения OX_2 и осью растяжения в моделируемом блоке кристалла

Математическая модель движения дислокации основывается на модели скольжения дислокации в рельефе Пайерлса, осуществляемого посредством движения перегибов (34), и на модели переползания дислокации, осуществляемого посредством движения ступенек дислокационной линии (33). Препятствия описываются своими полями напряжений, например, поры, сферические скопления точечных дефектов, сферические выделения в сплавах и при определенных условиях примесные атомы в твердых растворах замещения, а также внедренные осколки делящихся

материалов описываются полем напряжения сферически-симметричного центра расширения [21].

Математическое моделирование на ЭВМ движения гибкой дислокации осуществлялось следующим образом. На линии дислокации выбирается N опорных точек (каждой точке соответствует элементарный сегмент дислокационной линии), движение каждой из которых рассчитывается согласно уравнениям следующей системы:

$$\begin{aligned} (\vec{V}, \vec{\xi}) &= 0, \\ (\vec{V}, \vec{n}_{ck}) &= A_1 |d\vec{F}_y| \left(\text{sign} \left\{ d\vec{F}_{TP} - (d\vec{F}_y, \vec{n}_{ck}) \right\} - 1 \right), \\ (\vec{V}, \vec{n}_{nep}) &= A_2' (d\vec{F}_y + \vec{F}_K', \vec{n}_{nep}) - \\ &- A_2^V (d\vec{F}_y + \vec{F}_K^V, \vec{n}_{nep}), \end{aligned} \quad (38)$$

где \vec{V} – скорость движения опорной точки дислокации; $\vec{\xi}$ – единичный вектор касательной к линии дислокации; \vec{n}_{ck} – единичный вектор, определяющий направление скольжения; \vec{n}_{nep} – единичный вектор, определяющий направление переползания; $d\vec{F}_y$ – сила, обусловленная полями упругих напряжений: напряжение внешней нагрузки, напряжения препятствий, напряжение самодействия дислокации; $d\vec{F}_{TP}$ – сила трения, определяемая стартовым напряжением дислокации [22]; A_1 – коэффициент, значение для которого можно получить из выражения (34) для скорости скольжения дислокации; A_2^a – коэффициенты, значение которых можно получить из выражения (33) для скорости переползания дислокации; \vec{F}_K^a – осмотические силы (29), (30), обусловленные пересыщением кристалла ТД.

Система уравнений (38) привязана к локальной системе координат, образованной векторами $\vec{\xi}, \vec{n}_{ck}, \vec{n}_{nep}$, причем при движении гибкой дислокации эти векторы могут менять свое направление, поэтому в общей системе координат составляющие скорости движения опорной точки задаются следующим выражением:

$$V_i' = \ell_{ij} V_j, \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (39)$$

где V_j вычисляются по уравнениям (38); ℓ_{ij} – косинусы углов между осями локальной и общей систем координат. Положение опорной точки "n" в общей системе координат через k-шагов расчета задается выражением

$$(x_i^n)^k = (x_i^n)^{k-1} + (V_i'^n)^k \cdot \tau, \quad (40)$$

где $i = 1, 2, 3$.

Положение дислокационной линии определяется посредством аппроксимации положения опорных точек.

При проведении моделирующих расчетов полагалось, что в начальный момент времени дислокация прямолинейна, имеет краевой характер,

и граничные точки дислокационной линии настолько удалены от препятствий, что направление дислокационной линии в этих точках остается постоянным.

В качестве препятствий рассматривались сферические центры расширения и дислокационные петли краевого типа (моделируются призматические дислокационные петли как междуузельного, так и вакансионного типа, которые могут образовываться при определенных условиях в уране при облучении). Описание расчета напряжений (внешнее напряжение, напряжение сферического центра расширения, напряжение дислокационной петли, напряжение самодействия дислокации) опускаем из-за ограничения объема статьи. Описание расчета напряжений (за исключением напряжений дислокационной петли) приведено в работах [23, 24]. Особо отметим реализацию сложных процедур регуляризации расходимостей, разработанных на основе [25-31], при вычислении напряжений самодействия дислокаций. Напряжение, создаваемое дислокационной петлей, рассчитывалось с помощью выражения Пича-Келлера, как и в работе [31]. Были получены выражения для поля напряжений, создаваемых дислокационной петлей с любым вектором Бюргерса, выражающиеся через эллиптические интегралы первого и второго рода в виде, удобном для моделирования на ЭВМ.

Заметим, что в этой моделирующей программе как входные параметры задавались концентрации ТД из некоторых интервалов оценок, полученных из традиционной для радиационного металловедения кинетической системы для ТД (3) [9]. Однако в контексте настоящей статьи, так как программа моделирует движение дислокаций и при этом оценивает сток ТД на дислокацию, то она может быть использована для оценки членов (3) и (4) кинетической системы для ТД (21) из [9].

Что касается вторых слагаемых выражений (1) и (2), связанных с системой пор, то они также могут быть вычислены с помощью моделирования, причем выражения для потоков ТД на поры известны, например [8], и не вызывают проблем. Таким образом, математическое моделирование на ЭВМ радиационной ползучести (а вместе с ним и моделирование кинетики ТД) должно быть реализовано следующим образом. Выбирается моделируемый блок вещества, определенным образом ориентированный к внешней нагрузке (см., например, рис. 5).

В этом блоке с помощью генератора случайных чисел задается расположение дислокаций и пор (первоначальный тип дислокаций и начальный размер пор) и других препятствий движению дислокаций (например, дислокационных петель). Дается начальный момент времени t_0 и расчетный шаг по времени $\tau = \Delta t$ для моделирования.

Решается система кинетических уравнений для ТД ((21) из [9]) для начального положения дислокаций (для простоты в первом приближении будем полагать, что поры неподвижны и количество дислокаций и пор не меняется) и для начальных

концентраций ТД $C_I(\vec{r}, t = t_0)$ и $C_V(\vec{r}, t = t_0)$, вычисляются $C_I(\vec{r}, t = t_0 + \tau)$ и $C_V(\vec{r}, t = t_0 + \tau)$, а значит, определяются и концентрации на поверхностях вокруг дислокаций и пор, обозначаемые нами выше через $C_\alpha(\vec{r}, t = t_0 + \tau) = C_\alpha^P(\vec{r}, t = t_0 + \tau)$.

Зная $C_\alpha(\vec{r}, t = t_0 + \tau) = C_\alpha^P(\vec{r}, t = t_0 + \tau)$, с помощью программы, моделирующей движение дислокаций, рассчитываются потоки дефектов на дислокации и моделируется их перемещение за время τ . Тут же специализированный программный модуль осуществляет оценку потоков ТД на систему пор (вторые слагаемые в выражениях (1) и (2)).

Далее наращивается время на временной шаг τ и мы возвращаемся к решению системы кинетических уравнений ((21) из [9]) для ТД, но уже для нового положения дислокаций и распределения ТД $C_I(\vec{r}, t = t_0 + \tau)$ и $C_V(\vec{r}, t = t_0 + \tau)$ и находим следующее распределение ТД:

$$C_I(\vec{r}, t = t_0 + \tau + \tau) \text{ и } C_V(\vec{r}, t = t_0 + \tau + \tau).$$

И так далее, циклически продолжая вычисления. При такой реализации моделирования мы можем получать распределения ТД, а следовательно, отслеживать возможность образования неоднородных структур (диссипативных структур) и сложного поведения системы ТД. С другой стороны, мы корректно (без тех неопределенностей в моделях, которые обсуждались в этом разделе выше) моделируем кинетику подвижных гибких дислокаций и получаем оценки для скорости радиационной ползучести (36), (37), а также получаем возможность отслеживать кинетику пор, а следовательно, и распухание.

Так как кинетическая система (21) из [9] включает в себя кинетические уравнения реактора, то при моделировании мы учитываем влияние его кинетики на кинетику ТД, ползучесть и распухание; у нас появляется возможность учета и исследования влияния этих процессов на кинетику самого реактора.

В заключение отметим, что такое компьютерное моделирование сегодня уже возможно с помощью суперЭВМ.

ВЫВОДЫ

В частях 1 и 2 статьи [9, 35] в компактном виде сформулирована кинетическая система для дефектов нелинейной физической системы «металл+нагрузка+облучение». Показано, что система должна включать в себя кинетическую систему для точечных дефектов, кинетические системы для стоков-источников (главные из которых: система дислокаций и система пор), уравнение теплопереноса и кинетическую систему реактора, а также начальные и граничные условия для всех уравнений системы. Причем, все уравнения являются взаимосвязанными и все основные

уравнения являются диффузионными уравнениями с нелинейным источником.

Основными управляющими параметрами [33] кинетической системы для дефектов нелинейной физической системы «металл+нагрузка+облучение» являются плотность потока, температура и внешнее напряжение (нагрузка) в согласии с [34, 4]. Для кинетических систем стоков-источников предложены новые подходы для задания граничных условий.

Рассмотрена возможная структура компьютерной программы, моделирующей кинетическую систему для дефектов нелинейной физической системы «металл+нагрузка+облучение».

Отметим, что в работе уделено внимание описанию эволюции дислокационной структуры (радиационная ползучесть) и не рассматривалась эволюция системы пор (распухание). Включение описания эволюции системы пор и их учет при моделировании обязателен и будет рассматриваться в дальнейшем.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Gierer, H. Meinhardt. *Lectures on Mathematics in the Life Sciences*. Berlin: Springer. 1974, v. 7, p. 163–183.
2. H. Meinhardt. *Pattern formation in biology: a comparison of models and experiments* /UK: IOP Publishing Ltd. Reports On Progress In Physics, 1992, v. 55, p. 797–849.
3. В.Д. Русов, В.А. Тарасов и др. Моделирование диссипативных структур и волн концентраций точечных дефектов в открытой нелинейной физической системе «металл + нагрузка + облучение» // *Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (80). 2001, №4, с. 3–8.
4. В.Д. Русов, В.А. Тарасов и др. Механизмы радиационной ползучести металлического уранового топлива и ее температурные нелинейности // *Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (84). 2003, № 6, с. 20–23.
5. *Режимы с обострением. Эволюция идеи: законы коэволюции сложных структур*. М.: «Наука», 1998, 255 с.
6. В.А. Тарасов. Математическое моделирование радиационной ползучести реакторного топлива на примере урана и его сплавов // *Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (79). 2001, №2, с. 23–30.
7. В.А. Тарасов. Комп'ютерне моделювання радіаційної повзучості реакторного палива // *УФЖ*. 2000, № 10, с. 23–35.
8. Ш.Ш. Ибрагимов и др. *Радиационное повреждение металлов и сплавов* М.: «Энергоатомиздат», 1985, 239 с.
9. В.А. Тарасов, Т.Л. Бориков, Т.В. Крыжановская, С.А. Чернеженко, В.Д. Русов. Теория

- диссипативних структур кінетическої системи для дефектів нелінійної фізическої системи «металл + навантаження + облучення». Часть 1 // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (90). 2007, №2, с. 63–71.
10. И.Г. Маргвелашвили, З.К. Саралидзе. Влияние упругого поля дислокаций на стационарные диффузионные потоки точечных дефектов // *ФТТ*. 1973, №15, с. 2665–2668.
 11. P.T. Heald. The preferential trapping of interstitials at dislocations // *Philos. Mag.* 1975, v. 31, p. 551.
 12. Э.С. Айтхожин, Ш.Ш. Ибрагимов, С.К. Кусаинов, Ю.С. Пятилетов. Исследование радиационной ползучести альфа-урана // *Известия АН Каз. ССР. Серия физико-математическая*. 1981, №6, с. 42–46.
 13. Ю.С. Пятилетов. // *Физика металлов и металловедение*. 1982, т. 54, с. 783.
 14. П.А. Селищев, В.И. Сугаков. Влияние радиационной пористости на ползучесть облучаемых материалов // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (79). 2001, №2, с. 19–22.
 15. Г.З. Горбатов, А.Л. Ройтбурд, Д.Е. Темкин // *ФММ*. 1981, т. 52, в. 4, с. 790–799.
 16. В.И. Дубинко, В.В. Слезов // *ФММ*. 1982, т. 53, в. 3, с. 456–464.
 17. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика*. М.: «Наука», 1976, 583 с.
 18. Дж. Хирт, И. Лоте. *Теория дислокаций*. М.: «Атомиздат», 1972, 599 с.
 19. N.F. Mott // *Proc. Phys. Soc.* 1951, v. B64, p. 729.
 20. А.А. Предводителев. *Анализ возможностей построения теории упрочнения из опытов по дислокациям*. К.: «Наукова думка», 1972, с. 74–94.
 21. Дж. Эшелби. *Континуальная теория дислокаций*. М.: «Иностр. лит.», 1963, 248 с.
 22. А.А. Предводителев, Г.В. Бушуева, Г.И. Ничуговский. Моделирование процессов пластической деформации в кристаллах // *Известия вузов. Физика*. 1982, №6, с. 28.
 23. А.И. Дашковский, В.Н. Маскалец, В.А. Тарасов. Моделирование движения гибкой дислокации, взаимодействующей с препятствием в условиях пересыщения кристалла точечными дефектами // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (28). 1983, №5, с. 96–97.
 24. Моделирование движения дислокации в условиях пересыщения кристалла точечными дефектами: А.И. Дашковский, В.Н. Маскалец, В.А. Тарасов. Препринт. М.: МИФИ. 1987, 16 с.
 25. L.M. Brown // *Phil. Mag.* 1965, v. 15, p. 441.
 26. D.J. Bacon, N.F. Kocks, R.O. Scattergood // *Phil. Mag.* 1973, v. 28, p. 1241.
 27. D.J. Bacon // *Phys. Stat. Sol.* 1967, v. 23, p. 527.
 28. D.J. Bacon // *Phil. Mag.* 1974, v. 28, p. 1241.
 29. А.А. Предводителев, Г.В. Бушуева, Л.М. Полисар. *Методы моделирования процессов взаимодействия гибких дислокаций*. Дефекты в кристаллах и их моделирование на ЭВМ. Л.: «Наука», 1980, с. 192.
 30. Депонент ВИНТИ. *Некоторые методические особенности моделирования на ЭВМ взаимодействия и движения дислокаций* /Л.М. Полисар, Г.В. Бушуева, А.А. Предводителев. М., N2001-78, 1978, 39 с.
 31. Р.Д. Фролова, Г.В. Бушуева, А.А. Предводителев. Взаимодействие гибких скользящих дислокаций с призматическими дислокационными петлями // *Кристаллография*. 1982, т. 27, в. 2, с. 326.
 32. Депонент ВИНТИ. *Поле напряжения ансамбля призматических дислокационных петель* /В.В. Благовещенский, Н.А. Тяпунина. М., № 1031 – 82 ДСП, 1981, 18 с.
 33. А.И. Олемской, А.А. Кацнельсон. *Синергетика конденсированной среды*. М.: УРСС, 2003, 335 с.
 34. В.А. Тарасов. Обобщенная диаграмма ползучести открытой физической системы «металл (сплав) + нагрузка + облучение» // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (78). 2000, №4, с. 18–19.
 35. В.А. Тарасов, Т.Л. Бориков, Т.В. Крыжановская, С.А. Чернеженко, В.Д. Русов. Теория диссипативных структур кінетическої системи для дефектів нелінійної фізическої системи «металл + навантаження + облучення». Часть 2 // *Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (90). 2007, №2, с. 72–75.

ТЕОРІЯ ДИСИПАТИВНИХ СТРУКТУР КІНЕТИЧНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ ДЕФЕКТІВ НЕЛІНІЙНОЇ ФІЗИЧНОЇ СИСТЕМИ «МЕТАЛ+НАВАНТАЖЕННЯ+ОПРОМІНЕННЯ». ЧАСТИНА 3

В.О. Тарасов, Т.Л. Боріков, Т.В. Крижанівська, С.А. Чернеженко, В.Д. Русов

Уточнено кінетичну систему для дефектів фізичної нелінійної системи «метал + навантаження + опромінення» [1, 2, 3]. Розвиваючи підходи, запропоновані в [4], де формалізовані розходження механізмів радіаційної повзучості й областей їхньої застосовності (залежно від зовнішніх параметрів) для паливних і конструкційних металів, проводиться поділ кінетичних систем для дефектів конструкційних і паливних металів. При цьому робиться акцент на автокатолітичні особливості кінетичної системи для дефектів реакторних паливних металів, обумовлені екзотермічним автокатолітичним характером реакцій ядерних поділів, що є основним джерелом крапкових дефектів для паливних металів. У цій частині статті основна увага приділена кінетиці стоків для крапкових дефектів. Для кінетичних систем

стоків-джерел запропоновані нові підходи для завдання граничних умов. Розглянуто можливу структуру комп'ютерної програми, що моделює кінетичну систему для дефектів нелінійної фізичної системи «метал + навантаження + опромінення».

THE THEORY OF DISSIPATIVE STRUCTURES OF THE KINETIC SYSTEM FOR DEFECTS OF NONLINEAR PHYSICAL SYSTEM "METAL + LOADING + IRRADIATION". PART 3

V.A. Tarasov, T.L. Borikov, T.V. Kryzhanovskaja, S.A. Chernegenko, V.D. Rusov

The kinetic system for defects of physical nonlinear system "metal + load + irradiation" is specified [1, 2, 3]. Developing the approaches offered in [4], where distinctions of mechanisms of radiating creep and areas of their applicability are formalized (depending on external parameters) for fuel and constructional metals, division of kinetic systems for defects of constructional and fuel metals is carrying out. Thus the accent on the autocatalytic features of kinetic system for defects of reactor fuel metals, resulting from the exoenergetic autocatalytic character of nuclear fission reactions being the main point defect source is done. In this part of the article the basic attention is given to the kinetic of sink drains for point defects. For kinetic systems of sinks-sources new approaches for the task of boundary conditions are offered. The possible structure of the computer program modelling kinetic system for defects of nonlinear physical system "metal + load + irradiation" is considered.