

ЗЕРНОГРАНИЧНАЯ СЕГРЕГАЦИЯ ПРИМЕСИ В ОБЛУЧАЕМОМ МАТЕРИАЛЕ

В.В. Слезов¹, О.А. Осмаев², Р.В. Шаповалов¹

¹ИТФ ННЦ ХФТИ, г. Харьков, Украина;

E-mail: r_v_shapo@kipt.kharkov.ua; тел. (057)7006257;

²УГАЖТ, г. Харьков, Украина;

E-mail: osmayev@kart.edu.ua; тел. (057)7301037

Проведено теоретическое исследование выделения газообразных продуктов деления на границах зерен двуокиси урана по механизму сегрегации. Построена замкнутая система уравнений, описывающая зернограничную сегрегацию под облучением. Найдена зависимость от времени концентрации газообразного продукта деления в границе зерна диоксида урана в предположении слабого раствора. Для концентрированного раствора данной примеси в границе зерна получено и проанализировано трансцендентное уравнение.

1. ВВЕДЕНИЕ

Многие свойства поликристаллических материалов, к которым, безусловно, относится и UO_2 , определяются наличием примеси в межзеренной границе и ее возможностью скапливаться там, диффундируя из тела зерна. В результате сегрегации атомная концентрация примеси в границе может во много раз превышать ее же концентрацию в теле зерна. В случае инертных газов в двуокиси урана характерной чертой процесса является изначальное отсутствие сегрегирующей компоненты в теле зерна. В большинстве моделей, которые тем или иным методом анализируют поведение газообразных продуктов деления, учитывается, что границы зерен работают как эффективные ловушки для газов. Известно также, что [1] на границах зерен в диоксиде урана могут скапливаться газовые пузырьки, превышающие размеры 0,1 мкм.

Первая серьезная работа по теории сегрегации связана с именем Мак-Лина [2]. Эта работа, как и многие последующие, строилась по аналогии с теорией поверхностной адсорбции Ленгмюра. Как и Ленгмюр, Мак-Лин использовал следующие основные предположения:

- имеется фиксированное число адсорбционных центров с идентичным потенциалом адсорбции;
- заполнение такого центра не влияет на заполнение его соседей (невзаимодействующий адсорбат).

Теоретические работы по сегрегации в керамике [3] ограничиваются, как правило, применением изотермы Мак-Лина. Экспериментальные работы посвящены в основном выяснению роли сегрегации в процессе спекания или точнее, ее роли в ограничении непрерывного роста зерна.

Изучение свойств межзеренных границ и зернограничной сегрегации мотивируется, прежде всего, стремлением устранить или уменьшить деградацию

механических свойств материалов из-за сегрегации (в частности, отпускную хрупкость). В этой связи представляют интерес работы по влиянию сегрегации на прочность или когезию границы [4, 5].

До сих пор речь шла о равновесной изотермической сегрегации. Нередко приходится сталкиваться с сегрегацией, идущей в неравновесных условиях. Примером такой сегрегации может быть сегрегация в облучаемом металле. Под облучением диффузия может резко возрасти (радиационно-стимулированная диффузия) и, как следствие, ускориться сегрегация. Интересно, что потоки рождающихся под облучением точечных дефектов к границам зерен (являющихся для них стоками) создают дополнительные потоки атомов примеси и матрицы. Это связано с обратным эффектом Киркендалла и образованием комплексов из точечного дефекта и атома примеси. В принципе эти явления могут не только ускорить сегрегацию, но и привести к оттоку от границы атомов, который не наблюдался бы в равновесных условиях. Движущей силой для радиационно-стимулированной сегрегации могут служить не только градиенты концентраций точечных дефектов, но и неоднородности упругих и температурных полей. В модели, представленной в [6], предполагается, что границы зерен накапливают газ путем адсорбции отдельных атомов, диффундирующих из матрицы UO_2 . Считается, что ни внутризеренные, ни межзеренные пузырьки не перемещаются. Что касается газа, диффундирующего в зерне к его границе, то утверждается, что не весь газ содержится во внутризеренных пузырьках. Постулируется высасывание из внутризеренных пузырьков, вызванное делением, в качестве механизма, поддерживающего газ в атомарной форме в твердом теле. Вследствие этого появляется макроскопический градиент концентрации в зерне, под воздействием которого атомы газа диффундируют к стокам на границах зерен. В нашей модели существование газовых пузырьков

на границах зерен может быть учтено путем выбора химического потенциала газового атома в границе. Дальнейший сценарий эволюции материала, находящегося под облучением, с преобладающей сегрегацией над другими механизмами газовой выделенности, может происходить в основном по двум путям. Во-первых, если происходит образование и обширное слияние зернограничных пузырьков газа, то для газа может открыться путь к разломам (например, трещинам), соединенным со свободным объемом газа. Газ с границ зерен просто потечет по этому пути. Во-вторых, в результате напряжений в топливе, обусловленных термоциклированием, термическим расширением или сдерживающим влиянием оболочки при распухании, топливо может потрескаться. При этом наиболее вероятно именно зернограничное растрескивание, поскольку сегрегация любой примеси, в том числе газовой, ухудшает прочностные свойства границ зерен. При наличии зернограничных пузырьков дополнительным фактором будет уменьшение площади межзеренного контакта.

Обратим внимание, что в случае мелкозернистой структуры вещества (т.е. в мелкодисперсных материалах) или высокой подвижности примесей (например, в условиях облучения или при высокой температуре), а также если время эксплуатации материала достаточно велико, то диффузионная длина примеси может оказаться сравнимой или много больше характерных размеров зерна. Естественно, что при таких условиях (большие времена сегрегации примесей, высокие температуры) теория Мак-Лина не применима, потому что в ней диффузионная длина примеси много меньше характерных размеров зерна (т.е. зерно можно аппроксимировать полубесконечной средой). В случае бесконечно большого зерна (когда применима теория Мак-Лина), являющегося источником примеси неограниченной мощности, равновесная или асимптотическая (на больших временах) концентрация примеси в нем будет той же, что и в начале процесса.

Поэтому для того, чтобы получить более корректное описание реального поликристалла, необходимо рассмотреть сегрегацию из зерна конечного размера в межзеренную границу. Впервые этот подход был применен в работе [7]. В настоящем исследовании будет изучена равновесная сегрегация примеси в облучаемом поликристалле. Данная модель может использоваться для описания диффузии газобразных продуктов деления в границы зерен поликристаллической двуокиси урана.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Во многих случаях можно считать, что кристаллиты, которые с «макроскопической» точки зрения расположены рядом, находятся приблизительно в одинаковых условиях. Если при этом размер отдельного кристаллита не слишком отличается от среднего, то с достаточной точностью можно использовать приближение «изолированного» зерна. Поскольку диффузионные процессы в межзеренной границе идут значительно быстрее, чем в самом кристаллите

[8], границу зерна можно характеризовать двумя параметрами: общим объемом как стока для сегрегирующей компоненты и химическим потенциалом примеси. Межкристаллитную границу и область самого зерна мы рассматриваем как две отдельные среды, или фазы, в том смысле, которое придавал этим понятиям Гиббс. Обозначим концентрацию примеси в границе зерна в данный момент времени t через $c(r, t)$, где r – радиус-вектор физически бесконечно малого элемента объема кристаллита в какой-либо подходящей системе координат. Уравнение, описывающее изменение концентрации в пространстве и времени, является обычным уравнением диффузии с постоянным диффузионным коэффициентом при наличии источника:

$$\frac{\partial c(r, t)}{\partial t} = D_s \Delta c(r, t) + I(t), \quad (1)$$

где $I(t)$ – мощность источника сегрегирующей компоненты, который предполагается однородным и изотропным; D_s – ее коэффициент диффузии. Простейшая модель источника сегрегирующей компоненты описывается соотношением:

$$I = c_1(0) \gamma \exp(-\gamma t). \quad (2)$$

Здесь $c_1(0)$ – исходная концентрация однородно распределенной затравочной примеси, которая под действием облучения превращается в сегрегирующую компоненту. В нашей модели предполагается, что, во-первых, затравочная примесь распределена в зерне однородно; во-вторых, эта примесь имеет существенно меньшую подвижность, нежели ее трансмутант, поэтому ее сегрегацией на межзеренную границу можно пренебречь; а в-третьих, наличием затравочной примеси в границе зерна мы пренебрежем. Последнее предположение равносильно тому, что затравочная примесь в границе зерна успеет практически полностью трансформироваться в сегрегирующую компоненту к тому моменту, как процесс зернограничной сегрегации заметным образом изменит распределение этой компоненты в самом зерне. Приведенное утверждение очевидно в случае слабого раствора затравочной примеси в границе зерна. Величина $(\gamma / \ln 2)^{-1}$ – время полураспада исходной примеси. Значение γ зависит от характера облучения материала.

Граничное условие для уравнения (1) зависит от соотношения между характерным временем изменения распределения сегрегирующей компоненты в теле зерна и временем встраивания ее в границу. В данной работе предполагается, что это соотношение обеспечивает локальное термодинамическое равновесие на границе раздела кристаллит-межкристаллитная область по отношению к сегрегирующей компоненте:

$$\mu_s|_r = \mu_s^b|_r. \quad (3)$$

Здесь μ_s – химический потенциал сегрегирующей компоненты в кристаллите; μ_s^b – химический потенциал этого же вещества в межзеренной границе. Поскольку концентрация исходной примеси c_1 предполагалась слабой, то и раствор ее трансмутанта также будет слабым. Соответственно имеем:

$$\mu_s = \varphi_s + T \ln c. \quad (4)$$

Здесь φ_s – энергия растворения одного атома примеси, а температура T выражена в энергетических единицах. Поскольку объем межзеренной границы, как стока для сегрегирующей примеси обычно существенно меньше объема самого зерна, то в общем случае раствор примеси в границе является концентрированным. Явный вид величины μ_s^b будет выписан позже. Для химического потенциала примеси в границе зерна справедливо следующее:

$$\mu_s^b = \mu_s^b(t). \quad (5)$$

Данное утверждение следует из того факта, что межзеренные границы общего вида являются зонами ускоренной диффузии [8]. В силу той же причины концентрация примеси в границе c^b является функцией только времени $c^b = c^b(t)$.

Полная система уравнений включает в себя закон сохранения вещества:

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{V_g} c dV + \int_{V_g^b} c^b dV \right) = IV_g. \quad (6)$$

Здесь V_g^b – объем межзеренной области; V_g – объем самого зерна.

С учетом соотношений (3)-(5) выпишем полную систему уравнений, описывающих сегрегацию примеси, наработанной под действием облучения из исходной компоненты. В этой системе для функции источника предполагается только его независимость от координат:

$$\begin{cases} \frac{\partial c(r,t)}{\partial t} = D_s \Delta c(r,t) + I(t); \\ c(r,t)|_{\Gamma} = \exp\left(\frac{\mu_s^b\{c^b(t)\} - \varphi_s}{T}\right), \\ c(r,0) = c_0, \\ \int_{V_g} [c(r,t) - c(r,0)] dV + [c^b(t) - c_0^b] V_g^b = V_g \int_0^t I(\tau) d\tau. \end{cases} \quad (7)$$

Значения концентраций примеси в зерне $c(r,t)$ и в границе $c^b(t)$ являются решениями данной системы. Величины c_0 и c_0^b – начальные концентрации сегрегирующей компоненты материала соответственно в зерне и в границе. Зависимость $\mu_s^b\{c^b(t)\}$, как уже было сказано, определяется конкретной моделью зернограницного раствора.

3. ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ ДЛЯ СЕГРЕГАЦИИ

Поскольку граничное условие к уравнению диффузии зависит только от времени, то для его решения можно использовать метод разделения переменных.

Введением переменной $\tilde{c}(\vec{r}, t) = c(\vec{r}, t) - \exp\left(\frac{\mu_s^b\{c^b(t)\} - \varphi_s}{T}\right)$ преобразуем диффузионное уравнение к виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{c}(\vec{r}, t)}{\partial t} = D_s \Delta \tilde{c}(\vec{r}, t) - \\ - \frac{d}{dt} \left\{ - \int_0^t I(\tau) d\tau + \exp\left(\frac{\mu_s^b\{c^b(t)\} - \varphi_s}{T}\right) \right\}, \\ \tilde{c}(\vec{r}, t)|_{\Gamma} = 0 \\ \tilde{c}(\vec{r}, 0) = c_0 - \exp\left(\frac{\mu_s^b\{c_0^b\} - \varphi_s}{T}\right). \end{cases} \quad (8)$$

Предположим, что для зерна данной формы известно решение задачи Штурма-Лиувилля:

$$\begin{cases} \Delta R_n = -k_n^2 R_n; \\ R_n|_{\Gamma} = 0; \\ \int_{V_g} R_n(\vec{r}) R_m(\vec{r}) dV = \delta_{nm}. \end{cases} \quad (9)$$

Установим величины u_n , которые являются коэффициентами разложения единицы в ортонормированном базисе $R_n(\vec{r})$, $u_n = \int_{V_g} R_n(\vec{r}) dV$.

Введя обозначения

$$\begin{cases} \exp\left(\frac{\mu_s^b\{c^b(t)\} - \varphi_s}{T}\right) - \int_0^t I(\tau) d\tau = h(t); \\ \exp\left(\frac{\mu_s^b\{c^b(0)\} - \varphi_s}{T}\right) = h_0, \end{cases} \quad (10)$$

получим, что

$$\begin{aligned} c(r,t) = & h(t) + c_1(0)[1 - \exp(-\gamma t)] + \\ & + \sum_n R_n(\vec{r}) u_n (c_0 - h_0) \exp(-D_s k_n^2 t) - \\ & - \sum_n R_n(\vec{r}) u_n \int_0^t d\tau \left[\exp(D_s k_n^2(\tau - t)) \frac{d}{d\tau} h(\tau) \right]. \end{aligned}$$

Подставляя полученное выражение в закон сохранения, имеем:

$$[c^b(t) - c_0^b] \varepsilon = (c_0 - h_0) S(t) - \int_0^t d\tau S(t - \tau) \frac{dh(\tau)}{d\tau}$$

или в развернутом виде

$$\begin{aligned}
& [c^b(t) - c_0^b] \varepsilon = \\
& = (c_0 - h_0) S(t) - \\
& - \int_0^t d\tau S(t - \tau) \cdot \frac{d}{d\tau} \left[\exp\left(\frac{\mu_s^b \{c^b(\tau)\} - \varphi_s}{T}\right) - \int_0^\tau I(\tau') d\tau' \right], \quad (11)
\end{aligned}$$

где

$$S(t) = \frac{1}{V_g} \sum_n u_n^2 (1 - \exp(-D_s k_n^2 t)), \quad (12)$$

$$\varepsilon = V_g^b / V_g. \quad (13)$$

Величина ε в общем случае должна быть малой по сравнению с единицей. При выводе формулы (11) были использованы соотношения:

$$1 = \sum_n R_n(r) u_n;$$

$$u_n = \int_{V_g} R_n(r) dV; \quad \sum_n u_n^2 = V_g.$$

В отсутствие трансмутации соотношение (11) имеет точно такой же вид, который, как будет показано далее, совпадает с полученными ранее соотношениями [7]. Уравнение (11) необходимо разрешить относительно неизвестной функции $c^b(t)$. Для этого при малых временах воспользуемся рассуждениями, которые впервые приведены в работе [7]. В уравнении (7), в общем случае, $c_0 \neq h_0$, поэтому в момент времени $\tau = 0$ величина $\left. \frac{dh}{d\tau} \right|_{\tau=0} \rightarrow \infty$. Функция $S(t - \tau)$, очевидно, удовлетворяет соотношению $S(t - \tau) < S(t)$. Следовательно, можно утверждать, что при малых временах с достаточной точностью выполняется следующее соотношение:

$$\begin{aligned}
& \int_0^t d\tau S(t - \tau) \frac{dh(\tau)}{d\tau} \approx \int_0^t d\tau S(t) \frac{dh(\tau)}{d\tau} = \\
& = S(t)(h(t) - h(0)). \quad (14)
\end{aligned}$$

Подставляя (14) в (11), получим:

$$[c^b(t) - c_0^b] \varepsilon = (c_0 - h(t)) S(t). \quad (15)$$

Для исследования (13) при больших временах используем следующее преобразование:

$$\int_0^t d\tau S(t - \tau) \frac{dh(\tau)}{d\tau} = -h(0) S(t) - \int_0^t h(\tau) dS(t - \tau).$$

И поскольку

$$\begin{aligned}
& \int_0^t d\tau \frac{dS(t - \tau)}{d\tau} h(\tau) = \\
& = - \frac{d}{dt} \int_0^t d\tau S(t - \tau) h(\tau) + S(t - \tau) h(\tau) \Big|_{\tau=t} = \\
& = - \frac{d}{dt} \int_0^t d\tau S(t - \tau) h(\tau),
\end{aligned}$$

то

$$c_0 S(t) - \frac{d}{dt} \int_0^t d\tau S(t - \tau) h(\tau) = [c^b(t) - c_0^b] \varepsilon. \quad (16)$$

Соотношение (16) представляет собой *точное* описание процесса сегрегации. Дальнейшее приближение можно сделать, основываясь на качественном поведении функции $S(t)$. Очевидно, что при больших временах t замена $S(t - \tau) \approx 1$ не приводит к существенной ошибке. После такой замены (16) очевидным образом преобразуется в (15).

Таким образом, соотношение (15) описывает зернограничную сегрегацию примеси при любых временах.

4. АНАЛИЗ РЕШЕНИЯ

На этом этапе становится необходимой явная форма химического потенциала сегрегирующей компоненты в межзеренной границе $\mu_s^b \{c^b(t)\}$. В случае слабого раствора

$$\mu_s^b \{c^b(t)\} = \varphi^b + T \ln c^b(t), \quad (17)$$

следовательно

$$h(t) = c^b(t) \exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s}{T}\right) - \int_0^t I(\tau) d\tau$$

и

$$c^b(t) = \frac{c_0^b \varepsilon + \left(c_0 + \int_0^t I(\tau) d\tau\right) S(t)}{\varepsilon + S(t) \exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s}{T}\right)}. \quad (18)$$

Полученное соотношение описывает концентрацию примеси в границе зерна в приближении слабого раствора во всем интервале времени. Функция $S(t)$ дается соотношением (12).

Проанализируем соотношение (18) в предельных случаях. В начальный момент времени $t = 0$ получим, что концентрация примеси в границе соответствует начальной. При $t \rightarrow \infty$ $S(t) = 1$, следовательно:

$$c^b(\infty) = \frac{c_0^b \varepsilon + c_0 + \int_0^\infty I(\tau) d\tau}{\varepsilon + \exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s}{T}\right)}. \quad (19)$$

Граничное условие в (7) дает $c(r, \infty)|_{\Gamma} = c^b(\infty) \exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s}{T}\right)$. Очевидно, что в пределе $t \rightarrow \infty$ $c(r, \infty) = c_{\infty} = const$ и соотношение (19) можно записать в виде

$$(c^b(\infty) - c_0^b)\varepsilon = c_0 + \int_0^{\infty} I(\tau) d\tau - c_{\infty}. \quad (20)$$

Используя (13), легко видеть, что (20) представляет собой точный закон сохранения количества вещества:

$$c^b(\infty) V_g^b + c_{\infty} V_g = \left[c_0 + \int_0^{\infty} I(\tau) d\tau \right] V_g + c_0^b V_g^b. \quad (21)$$

Справедливость соотношения (18) в предельных случаях служит дополнительным аргументом в пользу его пригодности для произвольного момента времени.

Если воспользоваться простейшей моделью источника (2), то можно дополнительно выделить характерные временные масштабы в задаче. Подставляя (2) в (18), получаем, что

$$c^b(t) = \frac{c_0^b \varepsilon + (c_0 + c_1(0)[1 - \exp(-\gamma t)]) S(t)}{\varepsilon + S(t) \exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s}{T}\right)}. \quad (22)$$

Соотношение (22) позволяет ввести два характерных времени задачи: диффузионное время $t_{dif} \approx (D_s k_0^2)^{-1}$ и радиационное время $t_{rad} \approx \gamma^{-1}$. В случае $t_{dif} \ll t_{rad}$ при временах, больше некоторого t' , зависящего от начального условия и такого, что $t_{dif} < t' < t_{rad}$, $S(t) \approx 1$, и зависимость от времени выглядит следующим образом:

$$c^b(t) = \frac{c_0^b \varepsilon + (\bar{c}_0 + c_1(0)[1 - \exp(-\gamma t)])}{\varepsilon + \exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s}{T}\right)}. \quad (23)$$

Этот случай можно назвать «радиационно-контролируемая сегрегация».

Возможен также противоположный случай $t_{dif} \gg t_{rad}$, когда зависимость от времени концентрации примеси в границе при временах, больших некоторого $t_{rad} \approx \gamma^{-1}$, определяется соотношением

$$c^b(t) = \frac{c_0^b \varepsilon + (c_0 + c_1(0)) S(t)}{\varepsilon + S(t) \exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s}{T}\right)}. \quad (24)$$

Такой случай может быть назван «диффузионно-контролируемая сегрегация». Очевидно, что тот или иной характер временной зависимости определяется отношением двух характерных времен задачи t_{dif} и t_{rad} . Диффузионно-контролируемая сегрегация описывается соотношением (24), которое полностью

совпадает с соотношениями, полученными в работе [7], с учетом того, что к начальной концентрации примеси в зерне добавится вся примесь, нарабатанная в ходе облучения.

В том случае, когда концентрация примеси в границе не позволяет воспользоваться приближением (17) для слабого раствора, можно использовать более общее соотношение для химического потенциала:

$$\mu_s^b \{ c^b(t) \} = \varphi^b + \beta c^b(t) + T \ln \frac{c^b(t)}{1 - c^b(t)}. \quad (25)$$

Здесь β определяется энергией взаимодействия между атомами примеси. Концентрация примеси в границе, как легко видеть, подчиняется трансцендентному уравнению:

$$c^b(t) \varepsilon + \frac{c^b(t) S(t)}{1 - c^b(t)} \exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s + \beta c^b(t)}{T}\right) = \left(c_0 + \int_0^t I(\tau) d\tau \right) S(t) + c_0^b \varepsilon. \quad (26)$$

Анализ соотношения (26) показывает, что концентрация примеси в границе тем больше, чем меньше значение множителя $\exp\left(\frac{\varphi^b - \varphi_s}{T}\right)$, а зависимость от величины соотношения β/T вносит лишь небольшую поправку.

5. ВЫВОДЫ

1. Получено алгебраическое уравнение, определяющее концентрацию примеси в границе зерна.
2. В приближении слабого раствора примеси в границе зерна полученное уравнение решено точно.
3. В зависимости от соотношения характерных времен задачи выделены два предельных случая: диффузионно-контролируемая и радиационно-контролируемая сегрегации.

Работа выполнена в рамках Государственной программы фундаментальных и прикладных исследований по проблемам использования ядерных материалов и ядерных и радиационных технологий в сфере развития отраслей экономики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Donald R. Olander. *Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements*. Department of Nuclear Engineering University of California, Berkeley, 1976.
2. D. McLean. *Grain Boundaries in Metals*. Clarendon Press, Oxford, 1957, p. 118–119.
3. W.C. Johnson. Grain boundary segregation in ceramics // *Metal. Trans.* 1977, v. 8A, N 9, p. 1413–1422.
4. M. Guttman. Thermochemical interactions versus site competition in grain boundary segregation and

- embrittlement in multicomponent systems // *J. de Physique IV*. 1995, v. 5, c. 7-85—C7-96.
5. J.P. Stark and H.L. Marcus. The influence of segregation on grain boundary cohesion // *Metal. Trans.* 1977, v. 8A, N 9, p. 1423–1429.
 6. R.M. Cornell, M.V. Speigt, B.C. Masters // *Journal of Nuclear Material*. 1969, v. 30, N 1-2, p. 170–181.
 7. В.В. Слезов, Л.Н. Давыдов, В.В. Рогожкин. Кинетика сегрегации примеси на границах зерен в поликристаллах. I. Слабый раствор // *Физика твердого тела*. 1995, т. 37, № 12, с. 3565–3579.
 8. Б.С. Бокштейн, Ч.В. Копецкий, Л.С. Швинд-лерман. *Термодинамика и кинетика границ зерен в металлах*. М.: «Металлургия», 1986.

ЗЕРНОГРАНИЧНА СЕГРЕГАЦІЯ ДОМІШКИ У МАТЕРІАЛІ, ЩО ОПРОМІНЮЄТЬСЯ

В.В. Сльозов, О.А. Осмаєв, Р.В. Шаповалов

Проведено теоретичне дослідження виділення газоподібних продуктів розподілу на границях зерен двоокису урану по механізму сегрегації. Побудована замкнута система рівнянь, що описує зернограничну сегрегацію під опроміненням. Знайдено залежність від часу концентрації газоподібного продукту розподілу у границі зерна двоокису урану у припущенні слабкого розчину. Для концентрованого розчину даної домішки у границі зерна отримано та проаналізовано трансцендентне рівняння.

A SOLUTE GRAIN BOUNDARY SEGREGATION IN AN IRRADIATED MATERIAL

V.V. Slezov, O.A. Osmayev, R.V. Shapovalov

It was carried out a theoretical investigation of gasiform fission products release into uranium dioxide grain boundary according to a segregation mechanism. A complete equations system was built out that describe a grain boundary segregation under irradiation. A time dependence of a gasiform fission product concentration in a grain boundary of uranium dioxide was found with the assumption of a weak solution. It was obtained and analyzed a transcendental equation for the admixture grain boundary strong solution.