

ОБОБЩЕННЫЙ ФОРМАЛИЗМ КОАЛЕСЦЕНЦИИ В ТЕОРИИ ВАКАНСИОННОГО РАСПУХАНИЯ МЕТАЛЛОВ

П.Н. Остапчук

Институт электрофизики и радиационных технологий НАН Украины,
Харьков, Украина

E-mail: ostapchuk@kipt.kharkov.ua

Описывается поздняя стадия эволюции ансамбля пор в металлах под облучением. Это описание основано на механизме радиационно-индуцированной коалесценции (РИК), как следствии обратной пропорциональной зависимости предпочтения пор к СМА от их размера. В результате мелкие поры поглощают больше СМА и растворяются, тогда как крупные поглощают избыток вакансий и растут. Внешне РИК подобна классическому механизму остальдовского созревания, основанному на термическом испарении вакансий из пор, однако при типичных условиях облучения скорость РИК превышает скорость термического созревания на несколько порядков величины. Для различных режимов РИК получены аналитические выражения функции распределения пор по размерам, а также дозные зависимости средних характеристик ансамбля пор (плотности пор, их среднего радиуса и их суммарного объема).

PACS 62.20.Dc; 62.20.Fe

ВВЕДЕНИЕ

Данная работа имеет два аспекта. Первый связан с обобщением формализма описания так называемой поздней стадии диффузионной эволюции ансамбля вакансионных пор в кристаллах. Чаще ее называют стадией коалесценции или созревания. Характерная особенность этой стадии – конкуренция пор разных размеров в борьбе за вакансии, в результате чего формируются универсальная, не зависящая от начальных условий, функция распределения пор по размерам и универсальные степенные законы поведения со временем ее первых моментов (плотности пор и среднего радиуса).

Последовательная теория коалесценции изложена в работах [1-3]. Физический механизм, лежащий в основе конкуренции, – термоактивированное испарение вакансий порами: мелкие поры испаряют интенсивнее, чем крупные и растворяются. Скорость «забывания» начальных условий по этому механизму зависит от констант поверхностной энергии и диффузии, т. е. от температуры. Механизм тепловой коалесценции хорошо описывает позднюю стадию процесса диффузионного распада твердых растворов при высоких температурах. Однако в условиях реакторного и имитационного облучений объяснить уменьшение плотности пор с дозой теплоиндуцированной коалесценции (ТИК) не получалось (слишком низкие температуры). Тогда в работе [4] был предложен механизм радиационно-индуцированной коалесценции (РИК), который в отличие от ТИК не связан с испарением вакансий, а является следствием предпочтения (преференса) пор к поглощению собственных межузельных атомов (СМА), создаваемых облучением, по сравнению с вакансиями. Причина преференса – более сильное упругое взаимодействие поры с СМА, чем с вакансией. Оказалось, что он обратно пропорционален радиусу, поэтому мелкие поры в конкурентной борьбе, но уже за СМА, выигрывают и растворяются. Соответственно более крупные

поры поглощают избыток вакансий и растут. В смысле внешнего проявления (падения плотности пор и роста среднего размера) оба механизма действуют в одну сторону, но, как показано в [5], при типичных условиях облучения скорость РИК на 2...4 порядка больше скорости ТИК. И определяется она не только интенсивностью облучения и константой упругого взаимодействия пор с точечными дефектами (ТД), но и суммарной мощностью пор как стока для ТД, т. е. искомыми, зависящими от времени, средними характеристиками ансамбля пор. Поэтому первый аспект данной работы – это обобщение формализма классической теории Лифшица–Слезова (ЛС-теория) [1-3] на случай действия механизма РИК. Второй – связан с построением в рамках этого механизма теории вакансионного набухания металлов. Она в отличие от стандартной «скоростной» теории должна давать дозную зависимость набухания, а не мгновенную скорость изменения его величины.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Будем рассматривать две системы стоков: поры с функцией распределения по размерам $f(R, t)$ и краевые дислокации с плотностью $\rho^D(t)$. Как известно, потоки ТД на эти стоки записываются в виде:

$$\omega J_{v,i}^V(R) = 4\pi R Z_{v,i}^V(R) D_{v,i} (\bar{c}_{v,i} - c_{v,i}^{eq,V}), \quad (1)$$

$$\omega J_{v,i}^D = 2\pi Z_{v,i}^D D_{v,i} (\bar{c}_{v,i} - c_{v,i}^{eq,D}). \quad (2)$$

Верхние индексы указывают тип стока, нижние – тип ТД. Обозначения стандартные: $D_{v,i}$ – коэффициент объемной диффузии; $c_{v,i}^{eq,Y}$ – равновесная концентрация ТД у поверхности стока Y-типа: $c_{v,i}^{eq,D} = c_{v,i}^0$, $c_{v,i}^{eq,V} = c_{v,i}^0 (1 \pm \alpha / R)$, $\alpha = 2\sigma\omega / k_B T$, $\alpha / R \ll 1$, σ – поверхностная

энергия, ω – объем на атом решетки; $Z_{v,i}^Y$ – эффективность поглощения ТД стоком Y-типа, обусловленная их упругим взаимодействием; $\bar{c}_{v,i}$ – концентрации ТД вдали от стоков, определяемые уравнениями баланса в стационарном приближении:

$$K_{FP} - \beta D_i \bar{c}_i D_v \bar{c}_v - \int_0^{\infty} dR f(R,t) \omega J_v^V(R) - \rho^D \omega J_v^D = 0, \quad (3)$$

$$K_{FP} - \beta D_i \bar{c}_i D_v \bar{c}_v - \int_0^{\infty} dR f(R,t) \omega J_i^V(R) - \rho^D \omega J_i^D = 0, \quad (4)$$

где K_{FP} – скорость генерации френкелевских пар;

$$\beta = \beta_r \frac{D_i + D_v}{D_i D_v}, \quad \beta_r = \frac{4\pi r_c}{\omega}, \quad \text{а } r_c \text{ – радиус}$$

рекомбинации. Что касается эффективностей поглощения $Z_{v,i}^Y$, то для пор согласно [4] примем

$$Z_{v,i}^V(R) = 1 + \alpha_{v,i}^{im} / R, \quad \text{где } \alpha_{v,i}^{im} / R \ll 1, \text{ а сами}$$

величины $\alpha_{v,i}^{im}$ определяются взаимодействием изображения ТД с границей раздела пустота–матрица. Для них имеет место неравенство $\alpha^{im} \equiv \alpha_i^{im} - \alpha_v^{im} > 0$. Явный вид $Z_{v,i}^D$ для дислокаций не важен. Достаточно выполнения условия $B^D \equiv (Z_i^D - Z_v^D) / Z_i^D > 0$, отражающего суть концепции дислокационного предпочтения (преференса) к СМА по сравнению с вакансиями.

Функция распределения пор по размерам удовлетворяет уравнению непрерывности:

$$\frac{\partial}{\partial t} f(R,t) + \frac{\partial}{\partial R} [V(R,t) f(R,t)] = 0;$$

$$f(R,0) = f_0(R);$$

$$V(R,t) \equiv \frac{dR}{dt} = \frac{\omega}{4\pi R^2} (J_v^V(R) - J_i^V(R)). \quad (5)$$

Если ввести формальные определения [6]

$$\langle \Pi \rangle = \int_0^{\infty} dR f(R,t) 4\pi R + 2\pi \rho^D = 4\pi N^V \bar{R} + 2\pi \rho^D; \quad (6)$$

$$\langle Z_{v,i} \rangle = \frac{1}{\langle \Pi \rangle} \left(\int_0^{\infty} dR f(R,t) 4\pi R Z_{v,i}^V(R) + 2\pi \rho^D Z_{v,i}^D \right); \quad (7)$$

$$\langle c_{v,i}^{eq} \rangle = \frac{1}{\langle \Pi \rangle \langle Z_{v,i} \rangle} \left(\int_0^{\infty} dR f(R,t) 4\pi R Z_{v,i}^V(R) c_{v,i}^{eq,V} + 2\pi \rho^D Z_{v,i}^D c_{v,i}^{eq,D} \right), \quad (8)$$

то вместо уравнений баланса (3), (4) можно написать:

$$K_{FP} - \beta D_i \bar{c}_i D_v \bar{c}_v - \langle \Pi \rangle \Psi = 0, \quad (9)$$

$$D_{v,i} \bar{c}_{v,i} = \frac{1}{\langle Z_{v,i} \rangle} \Psi + D_{v,i} \langle c_{v,i}^{eq} \rangle. \quad (10)$$

Подставляя (10) в (9), получаем квадратное уравнение для определения Ψ :

$$\frac{\beta}{\langle Z_i \rangle \langle Z_v \rangle} \Psi^2 + \left[\langle \Pi \rangle + \beta \left(\frac{D_v \langle c_v^{eq} \rangle}{\langle Z_i \rangle} + \frac{D_i \langle c_i^{eq} \rangle}{\langle Z_v \rangle} \right) \right] \Psi - \left[K_{FP} - \beta D_i D_v \langle c_i^{eq} \rangle \langle c_v^{eq} \rangle \right] = 0.$$

Поскольку в уравнениях баланса имеется два физически разных канала гибели ТД: рекомбинация и уход на стоки, то имеем два режима эволюции системы – рекомбинационный и режим развитых стоков (далее просто стоковый). Наконец, разность уравнений (4) и (3) с учетом (5) дает скорость роста суммарного объема пор или скорость распухания:

$$\int_0^{\infty} dR f(R,t) \omega (J_v^V(R) - J_i^V(R)) = \frac{dS}{dt} = \rho^D \omega (J_i^D - J_v^D). \quad (11)$$

Легко видеть, что в нашем случае

$$\langle c_{v,i}^{eq} \rangle \approx c_{v,i}^0 \left(1 \pm \frac{4\pi N^V \bar{R} \alpha}{k_{v,i}^2 \bar{R}} \right); \quad \langle Z_{v,i} \rangle = \frac{k_{v,i}^2}{\langle \Pi \rangle}. \quad (12)$$

Здесь использовано стандартное для скоростной теории распухания обозначение:

$$k_{v,i}^2 = 4\pi N^V \bar{R} Z_{v,i}^V(\bar{R}) + 2\pi \rho^D Z_{v,i}^D \quad (13)$$

и отброшены слагаемые, пропорциональные

$$\frac{\alpha_{v,i}^{im} \alpha}{R} \ll 1. \quad \text{Тогда вместо (10) имеем}$$

$$D_{v,i} (\bar{c}_{v,i} - c_{v,i}^0) \equiv \Delta_{v,i}^* = \frac{\Psi}{\langle Z_{v,i} \rangle} \pm \frac{4\pi N^V \bar{R}}{k_{v,i}^2} D_{v,i} c_{v,i}^0 \frac{\alpha}{\bar{R}}, \quad (14)$$

откуда следует соотношение, связывающее Δ_i^* с

Δ_v^* :

$$k_i^2 \Delta_i^* = k_v^2 \Delta_v^* - 4\pi N^V \bar{R} D^* \frac{\alpha}{\bar{R}}, \quad D^* \equiv D_v c_v^0 + D_i c_i^0. \quad (15)$$

Для скорости распухания (11) при этом имеем:

$$\frac{dS}{dt} = 2\pi \rho^D Z_i^D B^D \Delta_v^* \frac{4\pi N \bar{R}}{k_i^2} \left(1 - \frac{R^*}{\bar{R}} \right), \quad R^* = \frac{\Delta_v^* (\alpha_i^{im} Z_v^D - \alpha_v^{im} Z_i^D) + Z_i^D D^* \alpha}{Z_i^D B^D \Delta_v^*} = \left(\frac{\Delta_v^* \alpha^{im} + D^* \alpha}{\Delta_v^* B^D} \right) - \alpha_i^{im}. \quad (16)$$

Однако получить явную зависимость S от дозы облучения из соотношения (16) не представляется возможным, поскольку не известны $N(t)$, $\bar{R}(t)$ и $\rho^D(t)$. Можно лишь в фиксированные моменты

времени брать эти величины из эксперимента и по соотношению (16) проверять наличие стационарной стадии распухания [6]. По-видимому, единственным математическим аппаратом, позволяющим что-то сказать о функции распределения пор по размерам, является формализм теории коалесценции, требующий в данном случае некоторого обобщения. Следует помнить, что эта теория описывает так называемую позднюю стадию эволюции ансамбля макродефектов, когда зарождение давно завершено, и для $f(R, t)$ можно писать уравнение непрерывности в пространстве размеров (5). При этом плотность пор $N(t)$ может только убывать либо выходить на стационарное значение.

Фигурирующая в (5) скорость роста одиночной поры представима в виде:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{R^2} (\Delta_v^* \alpha^{im} + D^* \alpha) \frac{4\pi N \bar{R}}{k_i^2} \left(1 + \frac{R^*}{\bar{R}} \frac{N^D}{N} \right) \left[\frac{R}{R_c} - 1 \right], \quad (17)$$

где $N^D = \frac{\rho^D Z_i^D}{2} \frac{\Delta_v^* B^D}{\Delta_v^* \alpha^{im} + D^* \alpha}$, а

$$R_c = \bar{R} \left(1 + \frac{R^*}{\bar{R}} \frac{N^D}{N} \right) \left(1 + \frac{N^D}{N} \right)^{-1}. \quad \text{Из последнего}$$

соотношения следует подстройка плотности пор N под дислокационную структуру:

$$N = N^D \left(\frac{\bar{R}}{R_c} - 1 \right)^{-1} \left(1 - \frac{R^*}{R_c} \right). \quad (18)$$

Эта же подстройка – прямое следствие уравнения (11). Действительно, подставляя (17) в левую часть (11), с учетом равенства

$$\left(1 - \frac{R^*}{R_c} \right) \left(1 + \frac{R^*}{\bar{R}} \frac{N^D}{N} \right) = \left(1 - \frac{R^*}{\bar{R}} \right)$$

снова приходим к (18).

Если $\rho^D = 0$, имеем механизмы РИК и ТИК [4] в чистом виде (при этом $N^D = 0$; $R_c = \bar{R}$; $k_v^2 = k_i^2 = 4\pi N \bar{R}$). Скорость РИК определяется величиной $\Delta_v^* \alpha^{im}$, скорость ТИК – соответственно – $D^* \alpha$. В [4] показано, что в условиях как реакторного, так и имитационного облучения имеет место неравенство $\Delta_v^* \alpha^{im} \gg D^* \alpha$, поэтому в дальнейшем тепловыми ТД будем пренебрегать ($c_{v,i}^0 = 0$):

$$N^D = \frac{\rho^D Z_i^D}{2} \frac{B^D}{\alpha^{im}}, \quad R^* = \frac{\alpha^{im}}{B^D} - \alpha_i^{im}. \quad (19)$$

Важный элемент ЛС-теории – это переход к автомодельным переменным $u = R / R_c$ и $\tau = \ln(R_c / R_{c,0})^3$. Последняя играет роль безразмерного времени, поэтому условие

монотонного роста $R_c(t)$ на поздней стадии (РИК) является необходимым. В этих переменных скорость роста поры принимает стандартный вид:

$$\frac{du^3}{d\tau} = \gamma(\tau)(u-1) - u^3. \quad (20)$$

Функция распределения $\varphi(u, \tau)$ в силу нормировки $\varphi(u, \tau) du = f(R, t) dR$, так же как и $f(R, t)$ удовлетворяет уравнению непрерывности только в пространстве (u, τ) , а для моментов имеет место очевидная связь $\bar{R}^k = R_c^k \bar{u}^k$. Как известно, поздняя стадия характеризуется появлением на оси размеров $(u, 0)$ так называемой запирающей точки $u_0 = 3/2$. При этом уравнение непрерывности допускает решение с разделяющимися переменными $\varphi(u, \tau) \rightarrow N(\tau) P_n(u)$, а закон сохранения «формирует» в области слева от u_0 универсальный (не зависящий от начальных условий) вид функции $P_n(u)$. Вклад в закон сохранения области справа от u_0 становится бесконечно малым, и им пренебрегают. Следствием разделения переменных (u, τ) есть выход моментов \bar{u}^k на постоянные значения ($\bar{u}^k \rightarrow const$) и монотонный рост \bar{R}^k со временем. Поскольку в приближении $c_{v,i}^0 = 0$

величина $R^* = const$, то $\frac{R^*}{R_c} \rightarrow 0$ и из (18)

следует:

$$N^D / N \rightarrow (\bar{u} - 1) = const, \quad (21)$$

а коэффициент γ в (20) удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\gamma(\tau) R_{c,0}^3 d e^\tau = \gamma(\tau) d R_c^3 = 3 \Delta_v^* \alpha^{im} dt, \quad (22)$$

связывающему переменную τ с реальным временем t .

Здесь следует сделать несколько замечаний. Во-первых, соотношения (19) и (21) ограничивают поведение плотности дислокаций со временем. Так как $N(t)$ убывает либо выходит на константу, то и $\rho^D(t)$ не должна нарастать. Во-вторых,

$$k_i^2 = 4\pi N \bar{R} \left(1 + \frac{N^D}{N} \frac{R^* + \alpha_i^{im}}{\bar{R}} \right) \rightarrow 4\pi N \bar{R},$$

поэтому $\frac{4\pi N \bar{R}}{k_i^2} \rightarrow 1$ и $4\pi N \bar{R} \gg 2\pi \rho^D Z_i^D$.

Аналогично $k_v^2 \rightarrow 4\pi N \bar{R}$, $4\pi N \bar{R} \gg 2\pi \rho^D Z_v^D$, т. е. мощность пор как стока для ТД на поздней стадии значительно превосходит дислокационную.

Отсюда имеем $k_v^2 \square k_i^2 \approx 4\pi N\bar{R}$ и соответственно $\Delta_i^* = D_i \bar{c}_i \square \Delta_v^* = D_v \bar{c}_v \approx \Delta^*$.

Нестандартность уравнения (22) связана с тем, что вместо константы $D^* \alpha$ в ЛС-теории в нем фигурирует неявная функция времени: $\Delta_v^* \approx \Delta^* = \langle \Pi \rangle \Psi / 4\pi N\bar{R}$, которую находим, решая простое квадратное уравнение:

$$K_{FP} - \beta \Delta^{*2} - 4\pi N\bar{R} \Delta^* = 0. \quad (23)$$

Наконец, центральный элемент ЛС-теории – это уравнение баланса между производством ТД и их гибелью в объеме или на стоках. В нашем случае оно имеет вид:

$$S(t) = S_0 + 2\pi Z_i^D B^D \int_{t_0}^t \rho^D \Delta^* dt. \quad (24)$$

Относительно плотности дислокаций предполагается монотонность поведения со временем. Такие функции обычно мажорируются полиномами, поэтому, не теряя общности, будем считать, что $\rho^D(t) = \rho_0^D (t/t_0)^{n-1}$, где $0 < n < 1$. Случай $n \leq 0$ сводится к классическому варианту теории коалесценции, поэтому не рассматривается, случай $n \geq 1$ требует отдельного рассмотрения.

РЕКОМБИНАЦИОННЫЙ РЕЖИМ

Этот режим реализуется, когда основным каналом гибели ТД является их рекомбинация в объеме $K_{FP} \gg 4\pi N\bar{R} \Delta^*$, $\Delta^* \square (K_{FP} / \beta)^{1/2} \approx \approx (K_{FP} D_v / \beta_r)^{1/2}$. Поскольку $\Delta^* = const$, то, применяя асимптотический анализ ЛС-теории, можно показать, что стадия РИК действительно имеет место и найти все характеристики ансамбля пор в рамках стандартного формализма. Мы же поступим проще. Непосредственно из (24) и (21) следует:

$$S(t) \rightarrow 2\pi Z_i^D B^D \Delta^* \frac{\rho_0^D t}{n} \square t^n, \\ N(t) \rightarrow \frac{N^D(t)}{\bar{u}-1} = \frac{\rho^D Z_i^D B^D}{2\alpha^{im}} \frac{1}{\bar{u}-1} \square t^{n-1}, \quad (25)$$

а асимптотику среднего радиуса легко найти, принимая во внимание очевидную связь

$$S(t) = \frac{4\pi}{3} N^V \bar{R}^3 \left(\bar{u}^3 / \bar{u}^3 \right). \quad \text{В результате} \\ \bar{R}(t) \rightarrow \left[\frac{\bar{u}-1}{\bar{u}^3} \bar{u}^3 \frac{3\alpha^{im} \Delta^*}{n} t \right]^{1/3} \square t^{1/3}. \quad \text{Однако,}$$

чтобы определить константы \bar{u} и \bar{u}^3 , без формализма ЛС-теории не обойтись. Как известно, на стадии коалесценции $\gamma(\tau) = \gamma_0 (1 - \varepsilon^2(\tau))$, где $\gamma_0 = 27/4$, $\varepsilon^2(\tau) \square 1/\tau^2$, а все результаты формулируются в нулевом приближении по ε^2 , т. е.

для $\tau^2 \rightarrow \infty$. При этом из (22) следует связь $\gamma_0 R_{c,0}^3 e^\tau \square 3\alpha^{im} \Delta^* t$, а с учетом этой связи из (20) и (22) следует универсальная асимптотика для функции распределения: $\varphi(u, \tau) \rightarrow N(\tau) P_n(u)$, где

$$P_n(u) = \left(\frac{3^3 e}{2^{5/3}} \right)^{1-n} \frac{(1-n) 3u^2}{\left(\frac{3}{2} - u \right)^{\frac{11-5n}{3}} (u+3)^{\frac{7-4n}{3}}} \exp \left(- \frac{1-n}{1 - \frac{2}{3}u} \right), \\ 0 \leq u \leq 3/2; \quad (26)$$

$$\int_0^{3/2} P_n(u) du = 1; \quad \overline{u(n)^k} = \int_0^{3/2} u^k P_n(u) du;$$

$$N(\tau) = \frac{\rho^D(\tau) Z_i^D B^D}{2\alpha^{im}} \frac{\gamma_0}{n} \frac{1}{\bar{u}^3} = N^D(\tau) \frac{\gamma_0}{n} \frac{1}{\bar{u}^3}. \quad (27)$$

Сравнивая (25) и (27), заключаем, что должно выполняться равенство $n \bar{u}^3 = \gamma_0 (\bar{u} - 1)$. И это действительно так. Умножим (20) на $\varphi(u, \tau)$ и проинтегрируем по u . С учетом того, что $\varphi(u, \tau)$ удовлетворяет уравнению непрерывности, получаем:

$$\bar{u}^3 \frac{dN(\tau)}{d\tau} = N(\tau) \left[\gamma_0 (\bar{u} - 1) - \bar{u}^3 \right], \quad (28)$$

а так как $\frac{1}{N(\tau)} \frac{dN(\tau)}{d\tau} = n - 1$, то справедливость упомянутого равенства доказана. И теперь асимптотика для среднего радиуса принимает стандартный вид:

$$\bar{R}(t) \rightarrow \bar{u}(n) \left[\frac{4}{9} \alpha^{im} \Delta^* t \right]^{1/3}. \quad (29)$$

Обратим внимание на поведение со временем мощности пор как стока для ТД: $4\pi N(t) \bar{R}(t) \square t^{n-2/3}$. При $0 < n \leq 2/3$ эта величина убывает либо остается постоянной, и рекомбинационный предел будет сохраняться во времени, поскольку неравенство $K_{FP} \gg 4\pi N\bar{R} \Delta^*$ не нарушится. При $n > 2/3$ мощность стоков растет, это неравенство нарушается и происходит смена режимов, т. е. в этом случае рекомбинационный режим может быть только промежуточным.

РЕЖИМ РАЗВИТЫХ СТОКОВ

Этот режим реализуется, когда основным каналом гибели ТД является их уход на внутренние протяженные стоки (в нашем случае это поры, поскольку $k_{v,i}^2 \square 4\pi N\bar{R}$): $K_{FP} \gg \beta \Delta^{*2}$, $\Delta^* \approx K_{FP} / 4\pi N\bar{R}$. Поскольку Δ^* сама зависит от искомым параметров пор, непосредственно использовать асимптотический анализ ЛС-теории не представляется возможным. Поэтому поступим иначе. Предположим, что стадия РИК существует и

воспользуемся тем обстоятельством, что все моменты $\bar{u}(n)^k$ выходят на постоянные значения.

Если результаты окажутся не противоречивыми, то цель можно считать достигнутой. Итак, поскольку $\bar{R} = \bar{u} R_{c,0}$, то из (22) с учетом (21) сразу получаем уравнение для среднего радиуса:

$$\frac{\gamma(\tau) d\bar{R}^4}{\bar{u}^3 (\bar{u} - 1)} = \frac{(2\alpha^{im})^2 K_{FP}}{2\pi Z_i^D B^D \rho^D} dt. \quad (30)$$

Отсюда с учетом $\gamma(\tau) \rightarrow \gamma_0 = 27/4$ на стадии РИК имеем асимптотику:

$$\bar{R}(t) \rightarrow \tilde{R} \cdot \left(\frac{t}{t_0}\right)^{\frac{2-n}{4}},$$

$$\tilde{R} = \left[\frac{\bar{u}^3 (\bar{u} - 1) (2\alpha^{im})^2 K_{FP}}{\gamma_0 (2-n) 2\pi Z_i^D B^D \rho_0^D} t_0 \right]^{1/4}. \quad (31)$$

Зная $\bar{R}(t)$ и $N(t)$, легко написать асимптотику для распухания $S(t) = \frac{4\pi}{3} N \bar{R}^3 \left(\bar{R}^3 / \bar{R}^3 \right)$:

$$P_n(u) = \frac{4(1-n)}{2-n} \left(\frac{3^3 e}{2^{5/3}} \right)^{\frac{4(1-n)}{3(2-n)}} \frac{u^2}{\left(\frac{3}{2} - u \right)^{\frac{56-38n}{9(2-n)}} (u+3)^{\frac{34-25n}{9(2-n)}}} \times \exp \left(- \frac{4(1-n)}{3(2-n)} \frac{1}{1 - \frac{2}{3}u} \right), \quad 0 \leq u \leq 3/2; \quad (35)$$

$$N(\tau) \rightarrow \frac{3(\bar{u} - 1) \alpha^{im} K_{FP} t_0}{4\pi R_{c,0}^3 \bar{u}^3 \tilde{R}} \times \frac{4}{n+2} \left[\frac{\tilde{R}}{\bar{u} R_{c,0}} \right]^{\frac{n+2}{2-n}} e^{-\frac{4(1-n)}{3(2-n)} \tau}. \quad (36)$$

Чтобы вернуться к реальному времени, снова используем (34). Тогда

$$N(t) \rightarrow \frac{3\gamma_0}{u^3} \frac{2-n}{n+2} \frac{Z_i^D B^D \rho^D(t)}{2\alpha^{im}}. \quad (37)$$

Но по-прежнему справедливо соотношение (21). Отсюда следует, что должно выполняться равенство

$$\frac{3\gamma_0}{u^3} \frac{2-n}{n+2} = \frac{1}{\bar{u} - 1}. \quad (38)$$

И оно действительно выполняется, поскольку согласно (36) имеет место соотношение

$$\frac{1}{N(\tau)} \frac{dN(\tau)}{d\tau} = \frac{4(n-1)}{3(2-4)},$$

и его подстановка в (28) приводит к (38). Остается проверить, согласуются ли асимптотики для распухания (32) и (33), ведь левая часть (33) и есть $S(t)$. Интегрирование правой части (33) дает

$$S(t) \rightarrow 4\pi \frac{\gamma_0 (2-n)}{\bar{u}(n)^3 (n+2)} \frac{\rho_D(t) Z_i^D B^D}{2\alpha^{im}} \bar{R}(t)^3, \quad (39)$$

и с учетом равенства (38) приходим к (32). Таким

$$S(t) \rightarrow \frac{4\pi}{3} \frac{\bar{u}^3}{\bar{u}^3} \frac{1}{\bar{u} - 1} \frac{Z_i^D B^D \rho_D(t)}{2\alpha^{im}} \bar{R}(t)^3 \propto t^{\frac{n+2}{4}}. \quad (32)$$

Чтобы найти \bar{u} и \bar{u}^3 , нужна функция $P_n(u)$, поэтому вернемся к уравнению (24) на стадии РИК:

$$\frac{4\pi}{3} R_{c,0}^3 e^{\tau} \int_0^{\infty} u^3 \varphi(u, \tau) du = (\bar{u} - 1) \alpha^{im} K_{FP} \int_{t_0}^{\tau} \frac{dt}{\bar{R}(t)}. \quad (33)$$

Связь безразмерного времени τ с реальным t находим из (31) с учетом определения $\bar{R} = \bar{u} R_{c,0} \exp(\tau/3)$:

$$e^{\frac{4}{3(2-n)} \tau} \rightarrow A \frac{t}{t_0}, \quad A = \left[\frac{\tilde{R}}{\bar{u}(n) R_{c,0}} \right]^{\frac{4}{2-n}}. \quad (34)$$

Дальнейшая последовательность действий такова: в правую часть (33) подставляем явное выражение для среднего радиуса (31) и интегрируем по времени; затем используем (34), а $\varphi(u, \tau)$ ищем в виде $\varphi(u, \tau) = N(\tau) P_n(u)$. В результате получаем:

образом, все формулы согласованы и не противоречивы. Обратим внимание, что при $n = 2/3$ формулы (26) и (35) для $P_n(u)$ совпадают, естественно, что совпадают также равенства $n \bar{u}^3 = \gamma_0 (\bar{u} - 1)$ и (38). Временные зависимости средних характеристик ансамбля пор в обоих режимах тоже одинаковы: $\bar{R} \propto t^{1/3}$; $N \propto \rho^D(t)$; $S \propto t \cdot \rho^D(t)$, однако коэффициенты у \bar{R} , а значит, и $S(t)$ разные; мощность пор как стоков при этом константа, но тоже разная. Поскольку в этом режиме $4\pi N \bar{R} \propto t^{3/4(n-2/3)}$, то при $0 < n < 2/3$ эта величина убывает, Δ^* нарастает, и неравенство $K_{FP} \gg \beta \Delta^{*2}$ со временем нарушается. Это означает, что режим развитой пористости может быть только промежуточным, сменяясь рекомбинационным. При $n > 2/3$ мощность стоков растет, Δ^* уменьшается, а данный режим будет сохраняться во времени, поскольку неравенство $K_{FP} \gg \beta \Delta^{*2}$ только усиливается.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Итак, показано, что формализм ЛС-теории, созданный для описания оствальдовского созревания ансамбля макродефектов, хорошо работает и в случае радиационно-индуцированного созревания. При этом в рекомбинационном режиме, когда $\Delta^* = const$, изменения, по сравнению с классикой, минимальны и сводятся просто к замене одних физических констант другими. В стоковом режиме, когда Δ^* зависит от времени через искомые средние характеристики стоков, изменения хотя и более существенны, однако катастрофичны. Структура асимптотического метода ЛС-теории сохраняется и позволяет в обоих режимах найти не только дозные зависимости средних характеристик ансамбля пор, но и асимптотический (по времени) вид функции распределения пор в пространстве относительных размеров. Управляющими параметрами теории являются плотность дислокаций $\rho^D(t)$ и эффективности $Z_{v,i}^Y$ упругого взаимодействия стоков с ТД, определяющие их предпочтительные свойства. Здесь рассмотрен простейший случай, когда дислокации одного типа однородно распределены в объеме кристалла и обладают одинаковым B^D , не зависящим от времени, предпочтением к СМА. Центральным моментом теории следует считать подстройку плотности пор под дислокационную структуру, т. е. соотношения (18), (19). Именно она дает дополнительную связь N с ρ^D и возможность выразить асимптотики всех средних характеристик пор только через $\rho^D(t)$. Так, из (31) в стоковом режиме следует:

$$\bar{R}^4(t) \rightarrow \frac{\bar{u}^3(\bar{u}-1)}{\gamma_0(2-n)} \frac{(2\alpha^{im})^2}{2\pi Z_i^D B^D} \frac{K_{FP} t}{\rho^D(t)},$$

а из (32) –
$$S(t) \rightarrow \frac{4}{3} \frac{\bar{u}^3}{\gamma_0(2-n)} \alpha^{im} \frac{K_{FP} t}{\bar{R}(t)}.$$

Последнее выражение может быть однозначно проверено экспериментально по дозной зависимости набухания и среднего радиуса пор.

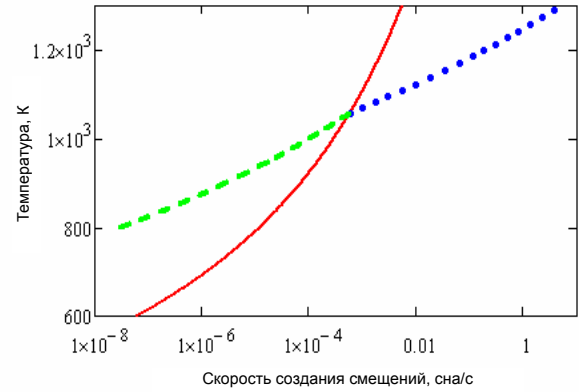
Следует отметить, что предпочтительность пор рассматривалась и другими авторами [7, 8], которые, однако, пришли к выводу, что он не может оказывать существенного влияния на их эволюцию. Дело в том, что эволюция пор зависит не от абсолютной величины их предпочтительности (которая действительно мала), а от соотношения между суммарным предпочтением пор $4\pi N\alpha^{im}$ и дислокаций $2\pi\rho^D Z_i^D B^D$. Если

$4\pi N\alpha^{im} \gg 2\pi\rho^D Z_i^D B^D$, то влияние дислокаций мало и плотность пор быстро падает по механизму РИК. В обратном случае все поры растут, не конкурируя между собой, и учет их предпочтительности дает лишь малую поправку к скорости роста. Так вот подстройка (19) есть не что иное, как паритет

предпочтительности
$$\frac{\rho^D Z_i^D B^D}{2N\alpha^{im}} = \bar{u} - 1 = const < 1/2,$$

когда влияние дислокаций хоть и значительно, но не достаточно, чтобы подавить конкуренцию пор.

В заключение приведем рисунок, показывающий на плоскости температура–скорость создания смещений положение областей и режимов коалесценции.



Сплошная линия $K_{FP} = \frac{D_v}{\beta_r} (4\pi N\bar{R})^2$ разделяет

режимы развитых стоков (выше кривой) и рекомбинационный (ниже кривой). Штриховая

линия $K_{FP} = D_v C_v^0 \frac{\alpha}{\alpha^{im}} 4\pi N\bar{R}$ разделяет ТИК

(выше кривой) и РИК (ниже кривой) в режиме развитой пористости (т. е. в области выше сплошной линии). Наконец, пунктирная линия

$K_{FP} = \frac{\beta_r}{D_v} \left(D_v C_v^0 \frac{\alpha}{\alpha^{im}} \right)^2$ разделяет ТИК (выше

кривой) и РИК (ниже кривой) в рекомбинационном режиме (т. е. в области ниже сплошной линии). Уравнения штриховой и пунктирной линий следуют из условия равенства скоростей РИК и ТИК:

$\Delta_v^* \alpha^{im} = D^* \alpha \approx D_v C_v^0 \alpha$ в соответствующем режиме. Значения материальных констант примерно соответствуют никелю: $\omega = m / \rho$; $\rho = 8,9 \text{ г/см}^3$;

$$m = 97,4 \cdot 10^{-24} \text{ г}; \quad \sigma = 1,7 \cdot 10^3 \text{ эрг/см}^2;$$

$$D_v^0 = 10^{-1} \text{ см}^2/\text{с}, \quad E_v^m = 1,1 \text{ эВ}; \quad C_v^0 = \exp(-E_v^f / k_B T),$$

$$E_v^f = 1,74 \text{ эВ}; \quad \beta_r = 10^{17} \text{ см}^2;$$

$$\alpha_{v,i}^{im} = \left[\frac{(1+\nu)^2}{1-\nu} \frac{\mu}{36\pi} \frac{\Omega_{v,i}^2}{k_B T} \right]^{1/3}; \quad \nu = 1/3;$$

$$\Omega_i = 1,2\omega; \quad \Omega_v = -0,5\omega; \quad \mu = 10^{12} \text{ эрг/см}^3;$$

$$k^2 = 4\pi N\bar{R} = 10^{10} \text{ см}^{-2}.$$

Из рисунка видно, что параметры реакторного облучения $K_{FP} \square 10^{-8} \dots 10^{-6} \text{ сна/с}$ и $T \square 600 \dots 800 \text{ К}$ соответствуют режиму развитой пористости, а имитационного облучения $K_{FP} \square 10^{-4} \dots 10^{-2} \text{ сна/с}$, $T > 800 \text{ К}$ – рекомбинационному режиму РИК. С

увеличением мощности стоков k^2 ($n > 2/3$) сплошная линия сдвигается вправо. При этом область стокового режима РИК расширяется, постепенно «захватывая» пространство, ранее занятое рекомбинационным режимом. Одновременно усиливается роль ТИК, поскольку $\Delta^* \approx K_{FP} / k^2$ уменьшается, и неравенство $\Delta^* \alpha^{im} \gg D^* \alpha$ нарушается. С уменьшением мощности стоков k^2 ($n < 2/3$) картина обратная – рекомбинационный режим РИК, являясь асимптотическим, «захватывает» область параметров реакторного облучения.

Автор выражает благодарность В.И. Дубинко за полезные советы и дискуссию при обсуждении результатов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. И.М. Лифшиц, В.В. Слезов // *ЖЭТФ*. 1958, т. 35, с. 479.
2. В.В. Слезов, В.Б. Шикин // *ФТТ*. 1964, т. 6, №1, с. 7–15.
3. В.В. Слезов, В.В. Сагалович // *УФН*. 1987, т. 151, в. 1, с. 67–104.
4. В.И. Дубинко, П.Н. Остапчук, В.В. Слезов // *ФММ*. 1988, т. 65, в. 1, с. 32–43.
5. V.I. Dubinko, P.N. Ostapchuk, V.V. Slezov // *J. Nucl. Mater.* 1989, v. 161, p. 239–260.
6. T. Okita, W.G. Wolfer // *J. Nucl. Mater.* 2004, v. 327, p. 130–139.
7. W.G. Wolfer // *J. Nucl. Mater.* 1984, v. 122/123, p. 459–471.
8. R. Bullough, S.M. Murphy, T.M. Qwigley, M.H. Wood // *J. Nucl. Mater.* 1983, v. 117, p. 78–88.

Статья поступила в редакцию 14.03.2012 г.

УЗАГАЛЬНЕНИЙ ФОРМАЛІЗМ КОАЛЕСЦЕНЦІЇ В ТЕОРІЇ ВАКАНСІЙНОГО РОЗПУХАННЯ МЕТАЛІВ

П.М. Остапчук

Описується пізня стадія еволюції ансамблю пор у металах під опроміненням. Цей опис базується на механізмі радіаційно-індукованої коалесценції (РІК), як наслідку обернено пропорційної залежності преференсу пор до ВМА від їх розміру. В результаті дрібні пори поглинають більше ВМА і розчиняються, тоді як великі поглинають надлишок вакансій і ростуть. Зовні РІК подібен до класичного механізму оствальдовського дозрівання, що базується на термічному випаровуванні вакансій з пор, але при типових умовах опромінення швидкість РІК перевищує швидкість термічного дозрівання на декілька порядків величини. Для різних режимів РІК одержано аналітичні вирази функції розподілу пор по розмірам, а також дозні залежності середніх характеристик ансамблю пор (щільності пор, їх середнього радіуса та їх сумарного об'єму).

GENERALIZED FORMALISM OF THE VOID COARSENING IN THEORY OF THE VACANCY SWELLING OF METALS

P.N. Ostapchuk

The present paper describes a late stage of the void ensemble evolution in metals under irradiation. The description is based on the radiation-induced coarsening (RIC) mechanism resulting from the void bias for self-interstitial atom (SIAs) absorption being inversely proportional to their size. Due to this bias dependence small voids absorb extra SIAs and consequently shrink, whereas large voids absorb extra vacancies and grow. This mechanism is included in the theory together with a classical mechanism of Ostwald coarsening based on the thermal emission of vacancies from voids. It is demonstrated that under typical radiation conditions the RIC rate exceeds that of the Ostwald coarsening by several orders of magnitude. Analytical expressions for the void distribution function are derived for different coarsening regimes, and the void swelling evolution with increasing irradiation dose is described.