# Раздел первый ФИЗИКА РАДИАЦИОННЫХ ПОВРЕЖДЕНИЙ И ЯВЛЕНИЙ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

УДК 539.2:539.12.04

# ИЗМЕНЕНИЕ ДИСЛОКАЦИОННОЙ СТРУКТУРЫ ОБЛУЧАЕМЫХ МЕТАЛЛОВ В ПРОЦЕССЕ ИХ ДЕФОРМАЦИИ

# П.А. Селищев<sup>1</sup>, В.В. Москаленко<sup>2</sup> <sup>1</sup>КНУ им. Тараса Шевченко, Киев, Украина, E-mail: selyshchev@mail.univ.kiev.ua; <sup>2</sup>ИПЭ АЭС, Киев, Украина, E-mail: v\_mosk@ukr.net

Изучается динамика изменения плотности дислокаций в облучаемых нагруженных металлах и ее проявление в их ползучести. В рамках механизма скольжения дислокаций, лимитированного переползанием, исследуется появление качественно различных режимов неустановившейся ползучести облучаемых металлов. Рассмотрены уравнения баланса для плотности дислокаций и точечных дефектов. Учтено, что плотность дислокаций возрастает вследствие их генерации в объеме зерен и уменьшается за счет выхода на их поверхность. Принята во внимание способность скользящей дислокации захватывать точечные дефекты и их малые скопления. Показано, как влияют на переходную ползучесть условия облучения, свойства облучаемого образца и его исходное состояние.

#### введение

Одним из существенных факторов, определяющих ползучесть напряженного металла, является изменение его дислокационной структуры. Под действием напряжения дислокации размножаются, начинают скользить, выходить на поверхность зерен и аннигилировать [1, 2].

В условиях облучения значение различных процессов, приводящих к изменению дислокационной структуры напряженного металла, изменяется. Прежде всего это связано с генерацией радиационных дефектов: вакансий и межузельных атомов. Теперь за то же время дислокация поглощает большее количество точечных дефектов, в результате скорость переползания различных несовершенств кристаллической решетки, которые препятствуют её скольжению, увеличивается. В итоге дислокации становятся более подвижными, чаще выходят на поверхность зерен [3-5].

Обычно при теоретических оценках роли ползучести используются характеристики установившейся ползучести [3-5], когда концентрации радиационных дефектов можно считать стационарными или квазистационарными. При этом предполагается, что квазистационарное состояние достигается достаточно быстро, деформация образца, которая накапливается на переходной стадии, невелика, а установившееся значение скорости ползучести является единственно возможным.

Вместе с тем показано, что, как правило, большая часть деформации накапливается на переходной, неустановившейся стадии [6]. Насыщение ползучести с дозой может достигаться достаточно долго (в ряде случаев насыщение ползучести не наблюдалось при дозах, достигающих сотни смещений на атом, или наблюдались устойчивые осцилляции скорости ползучести [6,7]), а в зависимости от состояния образца непосредственно перед началом облучения скорость его ползучести будет стремиться к различным величинам [8]. То есть под облучением существует несколько установившихся режимов деформации. Вместе с тем, экспериментально установлено, что для дозовой зависимости ползучести облучаемых металлов характерно сложное поведение, она часто имеет изломы или перегибы [5, 9-11].

В этой связи представляет интерес исследование динамики изменения плотности точечных дефектов и дислокаций вместе с временной (дозовой) зависимостью скорости ползучести облучаемых металлов, которая связана с ними и, следовательно, является функцией условий облучения и свойств облучаемого образца.

В настоящей работе изучаются процессы в нагруженных облучаемых металлах, которые влияют на изменения дислокационной структуры и тем самым на деформацию. Качественные изменения временных зависимостей деформации и скорости ползучести, которые происходят при изменении условий облучения для различных начальных состояний облучаемого образца, исследуются путем построения всех качественно различных фазовых портретов системы и анализа условий переходов одного портрета в другой.

# МОДЕЛЬ РАДИАЦИОННОЙ ПОЛЗУЧЕСТИ

Приложенное к образцу внешнее напряжение делает более подвижными краевые дислокации, чем собственно и обусловлено явление ползучести. Под действием приложенного напряжения дислокации скользят, пока на их пути не встретятся препятствия (различные несовершенства кристаллической структуры, дислокации леса и т.д.). Препятствия дислокация переползает, поглощая вакансии и межузельные атомы, при этом она переходит в новую плоскость скольжения, и процесс повторяется. Выражения для скорости пластической деформации металла определяются плотностью подвижных дислокаций  $\rho_d$  и их средней скоростью движения V:

$$\mathscr{E} = b\rho_d V \,, \tag{1}$$

где *b* – вектор Бюргерса дислокаций.

Поскольку время переползания препятствия намного больше времени скольжения, а расстояние между препятствиями много больше их характерного размера, среднюю скорость движения дислокаций можно представить в виде:

$$V = \frac{L}{\tau} \,. \tag{2}$$

А скорость ползучести приобретает вид:

$$\mathscr{E} = b \rho_d \frac{L}{l} v_{np} , \qquad (3)$$

где L – среднее расстояние между стопорами; l – размер стопора;  $\tau$  – время, за которое дислокация переползает через барьер со скоростью  $v_{np}$ .

Скорость переползания дислокаций [3] определяется разностью потоков межузельных атомов и вакансий на единицу длины дислокаций:

$$v_{np} = \frac{1}{b} \left| z_i D_i n_i - D_v n_v \right|, \tag{4}$$

где  $n_i, n_v$  – концентрации межузельных атомов и вакансий соответственно;  $z_d$  – фактор предпочтительного поглощения межузельных атомов дислокациями;  $D_i = D_i^0 \exp(-\frac{E_m^i}{kT})$  и  $D_v = D_v^0 \exp(-\frac{E_m^v}{kT})$  – коэффициенты диффузии межузельных атомов и вакансий;  $E_m^i, E_m^v$  – соответственно энергии миграции; T – температура образца; k – постоянная Больцмана. Для продолжения скольжения дислокации не имеет значения, каким образом преодолевается препятствие - наращиванием или растворением экстраплоскости, поэтому в выражении (4) стоит модуль.

Используя соотношения (1), (4), для определения скорости ползучести имеем:

где через параметр v обозначена величина  $v=L(\sigma)/l$  [12].

Таким образом, для определения скорости ползучести необходимо иметь представление о динамике изменения точечных дефектов и плотности дислокаций.

#### ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим образец с малой начальной плотностью дислокаций (например, после отжига). В этом случае процессами размножения дислокаций на «дислокациях леса» можно пренебречь. Предполагается, что металл не содержит преград нерадиационных происхождений, что исключает размножения и иммобилизацию дислокаций на этих препятствиях.

В модели учитывается возможность захвата точечных дефектов и их малых кластеров ядром скользящей дислокации (эффект «заметания») [13,14]. Этот процесс может существенно изменить концентрацию точечных дефектов, так как скорость скольжения дислокаций превышает скорость диффузии как вакансий, так и межузельных атомов.

Пусть облучение проводится при высоких температурах, поэтому аннигиляция точечных дефектов не существенна по сравнению с их миграцией на стоки (дислокации).

# ДИНАМИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ПЛОТНОСТИ ВАКАНСИЙ И ДИСЛОКАЦИЙ

Процессы изменения плотности дислокации ( $\rho_d$ ) и концентраций точечных дефектов ( $n_i$ ,  $n_v$ ) оказываются взаимосвязанными и описываются системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dn_i}{dt} = K - D_i n_i (z_d \rho_d + z_k \rho_k); \tag{6}$$

$$\frac{dn_{v}}{dt} = K - D_{v}n_{v}(\rho_{d} + \rho_{k}) + D_{v}n_{v}^{e}(\rho_{d} + \rho_{k}) - (7)$$
$$-\nu\mu n_{v}\rho_{d}|z_{d}D_{i}n_{i} - D_{v}n_{v}|;$$

$$\frac{d\rho_d}{dt} = k_f - \frac{\nu\rho_d}{Rb} \left| z_d D_i n_i - D_\nu n_\nu \right|.$$
(8)

Здесь K – скорость создания дефектов внешним облучением;  $n_v^e$  – концентрация термических вакансий;  $z_k$  – фактор предпочтительного поглощения межузельных атомов недислокационными стоками;  $\rho_k$  – плотность недислокационных стоков.

Второе и третье слагаемые в первых двух уравнениях системы (6)-(8) описывают уход точечных дефектов на дислокации и недислокационные стоки соответственно. Последнее слагаемое во втором уравнении системы (6)-(8) характеризует «заметание» дефектов скользящей дислокацией (захват скользящей дислокацией межузельных атомов незначителен в силу их малой концентрации).

Коэффициент  $\mu$  является функцией приложенного напряжения и свойств образца.

В уравнении (8)  $k_f = n_0 u$ , где  $n_0$  – объемная плотность дислокационных источников, возникающих в результате преобразования петель Франка и тетраэдров дефектов упаковки в скользящие дисло-кации; u – средняя скорость движения дислокаций в кристалле; R - средний радиус зерна.

Поскольку изменение концентрации межузельных атомов происходит намного быстрее изменения плотности дислокаций и вакансий и выполняются условия теоремы Тихонова [15], то можно положить  $dn_i/dt \equiv 0$ . В этом случае вместо системы трех дифференциальных уравнений (6)-(8) получаем систему одного алгебраического и двух дифференциальных уравнений. Выражая из полученного алгебраического уравнения  $n_i$  и подставляя в (7)-(8), получаем динамическую систему на плоскости для переменных  $n_v$  и  $\rho_d$ :

$$\frac{dn_{\nu}}{dt} = K - D_{\nu}n_{\nu}(\rho_d + \rho_k) + D_{\nu}n_{\nu}^{e}(\rho_d + \rho_k) - \nu\mu n_{\nu}\rho_d \left| \frac{z_d K}{z_d \rho_d + z_k \rho_k} - D_{\nu}n_{\nu} \right|;$$
(9)

$$\frac{d\rho_d}{dt} = k_f - \frac{\nu\rho_d}{Rb} \left| \frac{z_d K}{z_d \rho_d + z_k \rho_k} - D_\nu n_\nu \right|.$$
(10)

Выражение для скорости ползучести принимает вид:

$$\mathscr{E} = v\rho_d \left| \frac{z_d K}{z_d \rho_d + z_k \rho_k} - D_v n_v \right|.$$
(11)

## СТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ДИАГРАММА СОСТОЯНИЙ

Установившееся состояние характеризуется стационарными значениями плотности дислокаций, концентраций точечных дефектов и скорости ползучести.

Система уравнений (9)-(10) может иметь одно, два или три стационарных решения в зависимости от значений параметров. Это обстоятельство отражает диаграмма состояния напряженного материала под облучением, которая получается путем разбиения пространства управляющих параметров K и Rна соответствующие области (рис. 1).

Для определения значений параметров из области, которая находится ниже бифуркационной кривой (ниже кривой 1 при T=750 K, либо кривой 2 при T=850 K на рис. 1), существует единственное стационарное решение ( $\rho_{d,1}$ ), его топологический тип

- устойчивый «узел».

Для определения значений параметров из области, которая находится выше бифуркационной кривой (выше кривой 1 при T=750 K, либо кривой 2 при T=850 K на рис. 1), существуют три  $(\rho_{d,1} > \rho_{d,2} > \rho_{d,3})$  стационарных решения. Одно из них  $(\rho_{d,2})$  является неустойчивым и имеет топологический тип – «седло», два других – устойчивые «узлы».



Рис. 1. Диаграмма состояний: разбиение пространства управляющих параметров К и R на области с параметрами, характерными для никеля ( $z_d$ =1,08;  $z_k$ =1; u=10<sup>-3</sup> M/c; b=0,26 нм;  $\rho_k$ =2·10<sup>12</sup>  $M^{-2}$ ; v=50;  $\mu$ =1;  $n_0$ =5,6·10<sup>16</sup>  $M^{-3}$ ); кривая 1 – T=750 K; кривая 2 – T=850 K

Области разделяет критическая кривая  $K_{kp}(R)$ (кривая 1 при T=750 К, либо кривая 2 при T=850 К на рис. 1), на которой существует два стационарных решения – устойчивое и неустойчивое («седло» и один из устойчивых «узлов» совпадают ( $\rho_{d,2} = \rho_{d,3}$ )):

$$K_{kp}(R) = \frac{R^2 b^2 k_f^2 z_d \mu + Rb k_f \rho_k D_v (z_d + z_k) + v D_v^2 \rho_k^2 z_k n_v^e}{v (z_d k_f \mu Rb + D_v \rho_k (z_d - z_k))}.$$
(12)

При больших значениях радиуса зерна зависимость  $K_{kp}(R)$  принимает более простой вид:

$$K_{kp}(R) \rightarrow \frac{k_f b}{v} R + 2 \frac{D_v z_k \rho_k}{v \mu z_d}.$$

С уменьшением температуры, плотности недислокационных стоков, скорости генерации скользящих дислокаций область существования единственного стационарного решения уменьшается.

#### ФАЗОВЫЕ ПОРТРЕТЫ

В зависимости от условий облучения и начального состояния облучаемого образца динамика его деформации будет различной, скорость ползучести будет стремиться к различным стационарным состояниям. При стремлении к стационарному значению скорость ползучести остается положительной, но может принимать нулевое значение. Это происходит при выполнении равенства:

$$n_{\nu,0}(\rho_d) = \frac{K}{D_\nu} \frac{z_d}{z_d \rho_d + z_k \rho_k} \,. \tag{13}$$

При увеличении скорости генерации точечных дефектов *К*, либо с понижением температуры облучения *T* скорость ползучести будет достигать нулевого значения при больших значениях концентрации вакансий.

Динамику изменения плотности дислокаций и точечных дефектов, которая описывается системой уравнений (9) – (10), адекватно отображает ее фазовый портрет.

Фазовый портрет системы, прежде всего, определяется положением ее главных изоклин и их пересечением, т.е. количеством и расположением особых точек (стационарных решений). Следует отметить, что физически допустимые значения переменных лежат в области  $\rho_d > 0$ ,  $n_v > 0$ , следователь-

но, ограничимся рассмотрением только этой области фазового пространства.

Главная изоклина  $\frac{dn_v}{d\rho_d} = 0$  определяется условием  $dn_v/dt=0$  и имеет вид:

$$n_{\nu,1} = \begin{cases} \frac{n_{\nu,0}}{2} - \frac{1}{2\nu\mu} \left(1 + \frac{\rho_k}{\rho_d}\right) + \sqrt{\left(\frac{n_{\nu,0}}{2} - \frac{1}{2\nu\mu} \left(1 + \frac{\rho_k}{\rho_d}\right)\right)^2 + \frac{4}{\nu\mu} \left(\frac{K}{D_\nu \rho_d} + n_\nu^e \left(1 + \frac{\rho_k}{\rho_d}\right)\right)}, & n_\nu \ge n_{\nu,0} \\ \frac{n_{\nu,0}}{2} + \frac{1}{2\nu\mu} \left(1 + \frac{\rho_k}{\rho_d}\right) - \sqrt{\left(\frac{n_{\nu,0}}{2} + \frac{1}{2\nu\mu} \left(1 + \frac{\rho_k}{\rho_d}\right)\right)^2 - \frac{4}{\nu\mu} \left(\frac{K}{D_\nu \rho_d} + n_\nu^e \left(1 + \frac{\rho_k}{\rho_d}\right)\right)}, & n_\nu < n_{\nu,0} \end{cases}$$
(14)

Она имеет излом при пересечении кривой  $n_v = n_{v,0}(\rho_d)$ , на которой скорость ползучести равняется нулю (вследствие обращения в нуль выражения под модулем в (9)).

Вторая главная изоклина ( $\frac{dn_v}{d\rho_d} = \infty$ ) состоит из двух ветвей. Первая лежит в области  $n_v > n_{v,0}$  и описывается выражением:

$$n_{\nu,2} = n_{\nu,0} + \frac{k_f R b}{\nu D_{\nu}} \frac{1}{\rho_d}.$$
 (15)

Вторая ветвь изоклины  $\frac{dn_v}{d\rho_d} = \infty$  лежит в облас-

ти  $n_{v} < n_{v,0}$ , ее вид

$$n_{\nu,3} = n_{\nu,0} - \frac{k_f R b}{\nu D_{\nu}} \frac{1}{\rho_d} \,. \tag{16}$$

В зависимости от параметров она пересекается или не пересекается с главной изоклиной  $\frac{dn_v}{d\rho_d} = 0$ .

Случаю касания соответствует условие  $K = K_{kp}(R)$  (бифуркационная кривая на диаграмме состояний).

Для значений параметров из области существования единственного стационарного значения все фазовые траектории стремятся к единственному стационарному режиму. Фазовый портрет для этого случая изображен на рис. 2.

Пересечение фазовых траекторий с пунктирной кривой (скорость ползучести равняется нулю) на фазовом портрете соответствует излому дозовой (временной) зависимости скорости ползучести и перегибу дозовой зависимости деформации.

При значениях параметров из области существования трех стационарных значений часть фазовых траекторий будет стремиться к одному стационарному значению, а часть – к другому, образуя их области притяжения (рис. 3).



Рис. 2. Фазовые портреты для параметров внутри области существования единственного стационарного значения диаграммы состояния. Пунктирную кривую образуют состояния, для которых &= 0.

Сплошные толстые линии – главные изоклины



Рис. 3. Фазовые портреты для параметров внутри области существования трех стационарных значений диаграммы состояния. Пунктирную кривую образуют состояния, для которых &= 0. Сплошные толстые линии – главные изоклины



Рис. 4. Фазовые портреты для параметров на бифуркационной кривой диаграммы состояния. Пунктирную кривую образуют состояния, для которых &= 0. Сплошные толстые линии – главные изоклины

При переходе через бифуркационную кривую меньшее стационарное значение плотности дислокации (устойчивый «узел») совпадает со вторым стационарным значением (неустойчивое «седло»), образуя сложную особую точку «седло-узел» (рис. 4). Большее стационарное состояние качественно не меняется. Для значений параметров ниже бифуркационной кривой сложная точка «седлоузел» исчезает и остается единственное стационарное решение - устойчивый «узел».

#### выводы

В рамках модели радиационной ползучести «скольжение – переползание» при учете нелинейных взаимосвязей между точечными дефектами и дислокациями установлено, что в зависимости от выбора начальных условий и характеристик материала может быть реализован или один, или два, или три стационарных режима ползучести.

Один стационарный режим скорости ползучести существует всегда и описывает радиационностимулированную ползучесть материала под облучением. Если интенсивность облучения стремится к нулю, то данный режим ползучести переходит в термическую ползучесть.

Появление двух других стационарных режимов ползучести связано с воздействием облучения, они описывают радиационно-индуцированную ползучесть.

#### ЛИТЕРАТУРА

- Г.А. Малыгин. Карты дислокационной структуры в облученных нейтронами металлах и сплавах //Физика твердого тела. 2006, № 3(48), с. 455–462.
- Г.А. Малыгин. Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов //Успехи физических наук. 1999, №9(169), с. 979–1010.

- Ш.Ш. Ибрагимов, В.В. Кирсанов, Ю.С. Пятилетов. *Радиационные повреждения металлов и* сплавов. М.: «Энергоатомиздат», 1985, 240 с.
- Л.Н. Быстров, Л.И. Иванов, А.Б. Цепелев. Механизмы радиационной ползучести //Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение». 1985, №2(35), с. 54–68.
- F.A. Garner, D.S. Gelles. Irradiation creep mechanism: an experimental perspective //Journal of Nuclear Materials. 1988, v. 159, p. 286–309.
- В.С. Карасев. Деформация аустенитной стали ОХ18Н10Т при циклическом действии нейтронного облучения // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение». 1981, №5(19), с. 84–87.
- W. Schule, H. Hausen. Neutron irradiation creep in stainless steel alloys //Journal of Nuclear Materials. 1994, v. 212-215, p. 388–392.
- 8. П.А. Селищев. Самоорганизация в радиационной физике. Киев: «Аспект полиграф», 2004, 240 с.
- В.С. Карасев, А.Ю. Тоцкий. Смена механизма переходной ползучести в металлах под облучением//Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение». 1990, №1(52), с. 37– 40.
- 10. В.С. Карасев, А.Ю. Тоцкий, Л.С. Ожигов. Влияние примеси на переходную радиационную ползучесть никеля // Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение». 1994, №1(61), с. 3–8.
- E.S. Aitkhozhin, E.V. Chumakov. Radiationinduced creep of copper, aluminium and their alloys //Journal of Nuclear Materials. 1996, v. 233-237, p. 537–541.
- 12. А.Н. Карпиков, В.В. Кирсанов, Ю.С. Пятилетов, О.Г. Тюпкина. О зависимости скорости ползучес-ти от дозы облучения //Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреж-дений и радиационное материаловедение». 1985, №2(35), с. 69–73.
- А.С. Бакенов, В.В. Кирсанов. Атомные механизмы взаимодействия скользящих дислокаций //Вопросы атомной науки и техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение». 1986, №1(38), с. 41–48.
- 14. C. Dimitrov, O. Dimitrov. Elimination of defants ponctuels par deformation a 78 K dans l'aluminium irradie aux neutrons //*Rad. Effects.* 1970, v. 1.2, p. 81–91.
- 15. В.И. Сугаков. Введение в синергетику. Киев: «ИПЦ Киевский университет», 1992, 180 с.

Статья поступила в редакцию 10.09.2008 г.

# ЗМІНА ДИСЛОКАЦІЙНОЇ СТРУКТУРИ ОПРОМІНЕНИХ МЕТАЛІВ У ПРОЦЕСІ ЇХ ДЕФОРМАЦІЇ

#### П.О. Селищев, В.В. Москаленко

Вивчається динаміка зміни густини дислокацій в навантажених металах під опроміненням і її прояв в повзучості. В рамках механізму ковзання дислокацій, що лімітоване їх переповзанням, досліджується поява якісно різних режимів невстановленої повзучості металів під опроміненням. Розглянуто рівняння балансу для густини дислокацій і точкових дефектів. Враховано, що густина дислокацій збільшується внаслідок їх генерації в об'ємі зерен і зменшується за рахунок виходу на їх поверхню. Приймається до уваги здатність ковзаючої дислокації захоплювати точкові дефекти і їх малі скупчення. Показано, як впливають на перехідну повзучість умови опромінення, властивості опромінюваного зразка і його початковий стан.

## DISLOCATION STRUCTURE MODIFICATION OF METALLS UNDER IRRADIATION IN THE PROCESS OF ITS DEFORMATION

#### P.O. Selyshchev, V.V. Moskalenko

Dynamic of dislocation density changes of metals under stress and irradiation together with its expression at creep were studied. Within the framework of the dislocation climb-glide model, appearance of qualitative different unsteady creep modes of metals under irradiation was investigated. Balance equations of dislocation density and point defects concentration were considered. It takes into account that dislocation density increased in case of their generation into grains volume and decreased in case of their going to grains boundaries. It's accounted that glide dislocation can capture point defects and their small clusters. The influence of radiation conditions, characteristic of irradiated material and initial state to unsteady creep was analyzed.