

## ДВИЖЕНИЕ ПОР В МАТЕРИАЛЕ С ИСТОЧНИКАМИ АТОМОВ ГАЗА

*В.В. Слезов<sup>1</sup>, О.А. Осмаев<sup>2</sup>, Р.В. Шаповалов<sup>1</sup>*

<sup>1</sup> *Институт теоретической физики*

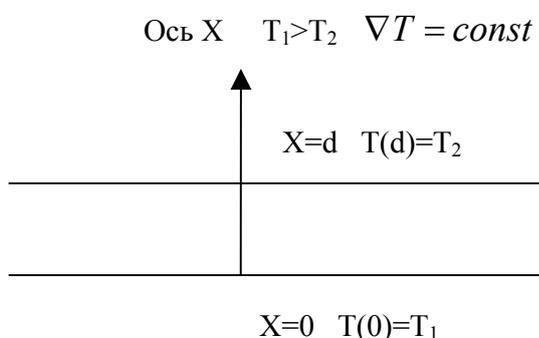
*ННЦ «Харьковский физико-технический институт», г. Харьков;*

<sup>2</sup> *Украинская государственная академия железнодорожного транспорта,  
г. Харьков, Украина*

Рассмотрено стационарное движение ансамбля пор в ограниченном в направлении градиента температуры изотропном материале с источниками междуузельных атомов, вакансий и атомов газа. Найдены функция распределения пор в пространстве размеров, зависимость размера поры, количества газа в поре и в материале от пространственной координаты в предельных случаях малых и больших пор. Получены критерии, ограничивающие мощность источников газа и критическое давление идеального газа в поре до начала пластической деформации образца.

### ВВЕДЕНИЕ

В данной работе рассматривается движение ансамбля пор в ограниченном в направлении градиента температуры изотропном материале с источниками междуузельных атомов, вакансий и атомов газа. Заданы следующие характеристики облучения: число рождающихся в единицу времени в единице объема вакансий  $I^v$ , междуузельных атомов  $I^i$ , атомов газа  $I^g$ , пор  $W$  и дислокационных петель  $Q$ . Размерность величин  $I^v, I^i, I^g - \text{см}^{-3} \text{с}^{-1}$ , а величин  $W, Q - \text{см}^{-4} \text{с}^{-1}$ .



*Облучаемый материал с градиентом температуры*

Для простоты рассмотрим материал в виде плоскопараллельной пластины, бесконечной в направлениях  $y, z$  и толщины  $d$  в направлении оси  $x$  (рисунок). Очевидно, такое упрощение можно сделать и в случае, если материал представляет собой цилиндр с аксиальным отверстием радиуса  $r \gg d$ . Как показано в [2], для движения поры, обусловленного градиентом температуры, её скорость в общем случае можно представить так:

$$V_x = -\beta_k R^k.$$

Согласно [2] существует три механизма движения поры. Первый – движение поры, вызванное диффузией атомов матрицы по поверхности поры. Перемещаясь с горячей стороны поры на холодную, атомы матрицы двигают пору к горячей грани  $x = 0$ . В этом случае

$$k = -1 \quad \beta \approx 2a \frac{\mathcal{E}}{T_2} D^* \nabla T,$$

где  $\mathcal{E}$  – термодиффузионное отношение для поверхностных атомов матрицы. Второй механизм обусловлен возможностью испарения атомов газа с горячей части поры с последующим осаждением на холодной. Этот механизм существует для легко сублимирующихся веществ при высоких температурах, возможны случаи  $k=0, k=1$ . Третий – это перемещение поры в результате движения вакансий и междуузлий в объеме материала. Этот механизм не может вносить существенный вклад в движение поры, поскольку постоянно действующие объемные источники пар Френкеля приведут к тому, что градиенты соответствующих химических потенциалов окажутся пренебрежимо малыми в масштабе  $x \approx L$ , где  $L^{-3}$  – объемная плотность источников. Потоки, пропорциональные градиентам химических потенциалов, в этом масштабе практически отсутствуют. Экспериментальные данные свидетельствуют [6-10], что в практически важных случаях поры двигаются по первому механизму.

Известно, что радиационное воздействие на кристалл приводит к появлению добавочных точечных и макроскопических дефектов: вакансий, междуузельных атомов, пор, дислокаций. Наличие этих дефектов существенно влияет практически на все важнейшие свойства кристалла: прочность, электропроводность и т.д. Следовательно, для прогнозирования изменения этих свойств кристалла под облучением необходимо найти функцию распределения пор  $f_b(R, x, t)$  (с размерностью

$см^{-4}$ ) по размерам  $R$  в данной точке  $x$  в момент времени  $t$ , плотность газа в материале  $n^g(x)$ , пересыщенность вакансий  $\Delta^v(x) = c^v - c_0^v$  и междуузельных атомов  $\Delta^i(x) = c^i - c_0^i$ , где  $c_0^v, c_0^i$  – равновесие концентрации соответствующих точечных дефектов (концентрации дефектов – безразмерные величины, плотность газа имеет обычную размерность  $см^{-3}$ ).

## ОСНОВНАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ

Кинетическое уравнение для функции распределения пор:

$$\frac{\partial f_b}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f_b V_x) + \frac{\partial}{\partial R}(f_b V_R^b) = W^b(R), \quad (1)$$

где  $V_R^b$  – скорость изменения размеров поры;  $W^b(R)$  – число пор размера  $R$ , рождающихся в единичном объеме в единицу времени.  $W^b(R) = w^b \delta(R - R_{cr})$ . Уравнение баланса атомов газа:

$$\frac{\partial n^g}{\partial t} + \text{div} j^g + \int_0^\infty f_b \frac{dN^g}{dt} dR = I^g. \quad (2)$$

Здесь  $N^g(R, x, t)$  – число атомов газа в поре размера  $R$  находящейся в точке  $x$ ;  $j^g(x, t)$  – плотность диффузионного потока атомов газа. В силу того, что и характерное время изменения положения поры  $\tau_x \approx \frac{R}{V_x}$ , и характерное время изменения размеров

поры  $\tau_g \approx \frac{R^3}{D^* \sigma}$  значительно больше как времени установления стационарных диффузионных потоков вакансий и междуузлий  $\tau^* \approx \frac{R^2}{D^*}$ , так и времени установления стационарного диффузионного потока атомов газа  $\tau^g \approx \frac{R^2}{D^g}$ , для  $V_R^b$  и  $\frac{dN^g}{dt}$  можно пользоваться выражениями, полученными в [3]:

$$V_R^b = \frac{D^*}{R} \left( \Delta^* + \frac{3N^g \omega}{4\pi R^3} - \frac{\sigma}{R} \right); \quad (3)$$

$$\frac{dN^g}{dt} = 4\pi D^g R \left( n^g - \delta \frac{3N^g}{4\pi R^3} \right), \quad (4)$$

где  $D^v, D^i, D^g$  – коэффициенты диффузии вакансий, междуузельных атомов и атомов газа;

$$\delta = \frac{W}{\omega} \exp\left(-\frac{\varphi}{kT}\right), \quad W = \left( \frac{2\pi \hbar^2}{m_g kT} \right)^{\frac{3}{2}}; \quad \sigma = \frac{2\gamma\omega}{kT};$$

$\gamma$  – поверхностная энергия;  $\omega = a^3$ ,  $a$  – постоянная решетки;  $\Delta^* = \frac{D^v \Delta^v - D^i \Delta^i}{D^*}$ ;  $D^* = c_0^v D^v + c_0^i D^i$  – коэффициент самодиффузии атомов. Характерное время изменения размеров поры  $\tau_g \approx \frac{R^3}{D^* \sigma}$ , а характерное время наполнения поры газом  $\tau_0 \approx \frac{R^2}{D^g \delta}$ . Рассмотрим только крайние случаи «малых» пор  $\tau_g \ll \tau_0$  и «больших» пор  $\tau_g \gg \tau_0$ . Будем считать, что тип пор во время их движения не меняется. Слагаемым  $\frac{\sigma}{R}$  можно пренебречь даже для «малых» пор, поскольку поры всё время растут. В стационарном случае, как показано в [1],  $\Delta^* = -\left| \Delta^* \right|$ . Так как обычно растворимость газа  $\delta$  очень мала, то в присутствии постоянно действующих источников атомов газа, создаваемая ими плотность атомов газа  $n^g$  будет значительно больше равновесной плотности. Поэтому в формулах (5), (6), (9) можно пренебречь вторым членом в скобках по сравнению с первым. Для «малых» пор:

$$V_R^b = \frac{D^g \omega}{R \left| \Delta^* \right|} \left( n^g - \delta \frac{\left| \Delta^* \right|}{\omega} \right); \quad (5)$$

$$\frac{dN^g}{dt} = 4\pi D^g R \left( n^g - \delta \frac{\left| \Delta^* \right|}{\omega} \right); \quad (6)$$

$$N^g = \frac{4}{3} \pi R^3 \frac{\left| \Delta^* \right|}{\omega}. \quad (7)$$

Для «больших» пор:

$$N^g = \frac{4}{3} \pi R^3 \frac{n^g}{\delta}; \quad (8)$$

$$V_R^b = \frac{D^* \omega}{R \delta} \left( n^g - \delta \frac{\left| \Delta^* \right|}{\omega} \right). \quad (9)$$

Уравнение для функции распределения междуузельных дислокационных петель:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} [f_i(r, t) V_r^i] = Q(V_r^i, r), \quad (10)$$

где, согласно [4],  $V_r^i = -\frac{D^* A}{a} \left( \Delta^* + \frac{\chi}{r} \right)$  – скорость роста междуузельной дислокационной петли;  $A = 2\pi / \ln \frac{8r}{a}$ ,  $\chi = \frac{aG\omega}{2\pi(1-\nu)kT} \ln \frac{r}{a}$ ,  $G$  – модуль сдвига;  $\nu$  – коэффициент Пуассона;  $Q(V_r^i, r)$  – число петель размера  $r$ , рождающихся в единицу времени. Как показано в работе [5],  $Q = \frac{\rho}{\tau}$ , где  $\rho = \rho(r)$  – объемная плотность дислокационных сегментов

длины  $r$ , способных образовывать дислокации (т.е. плотность источников);  $\tau = \frac{r}{V_r^i}$  – время рождения одной петли радиуса  $r$ .

Два уравнения баланса, для вакансий и для междоузельных атомов, в стационарном случае можно скомбинировать в следующее уравнение:

$$4\pi D^* AF^i |\Delta^*| + (I^v - I^i)\omega = \int_0^\infty f_b 4\pi R^2 V_R^b dR, \quad (11)$$

$$F^i = 2\pi \int_0^\infty f_i r dr - \text{сумма периметров междоузельных}$$

петель в единице объема.

### ПОЛНАЯ СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ

Выпишем теперь полную систему уравнений, описывающих эволюцию ансамбля движущихся пор в ограниченном в направлении градиента температуры материале.

$$\frac{\partial f_b}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(f_b V_x) + \frac{\partial}{\partial R}(f_b V_R^b) = W^b(R), \text{ см. формулу (1);}$$

$$\frac{\partial n^g}{\partial t} + \text{div} j^g + \int_0^\infty f_b \frac{dN^g}{dt} dR = I^g, \quad \text{см. формулу (2);}$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r}[f_i(r,t)V_r^i] = Q(V_r^i, r), \quad \text{см. формулу (10);}$$

$$4\pi D^* AF^i |\Delta^*| + (I^v - I^i)\omega = \int_0^\infty f_b 4\pi R^2 V_R^b dR, \text{ см. формулу (11).}$$

Для скорости роста поры  $V_R^b$  и скорости наполнения этой поры газом  $\frac{dN^g}{dt}$  необходимо пользоваться соответствующими выражениями для малых и больших пор, к детальному изучению которых мы переходим.

### «МАЛЫЕ» ПОРЫ $\tau_g / \tau_0 \ll 1$

В каждой точке  $x$  существует максимальный радиус, которого могут достигать находящиеся там поры. Очевидно, он равен величине, которой достигли поры, образовавшиеся раньше прочих, т.е. родившихся в точке  $x=d$ :

$$[R_{\max}(x)]^{k+2} = \frac{(k+2)D^g \omega}{\beta |\Delta^*|} \int_x^d n^g dx. \quad (12)$$

Функция распределения пор

$$f_b = \begin{cases} \frac{\alpha |\Delta^*|}{D^g \omega} \Big|_{x=x_0} \times R & \text{при } R_{cr} \leq R \leq R_{\max} \\ 0 & \text{при } R > R_{\max}(x) \end{cases}, \quad (13)$$

где  $\alpha = const$ , главный член разложения  $W^b$  по  $n^g$  т.е.  $w^b(n^g) = \alpha n^g$ . Решение уравнения (10), не зависящее от размера пор, было найдено в работе [5]:

$$f_i = \int_{r_c}^{r_0^i} \rho(r') \frac{dr'}{r'} \quad \text{при } r_c \leq r \leq r_0^i. \quad (14)$$

Если плотность источников  $\rho = w^i \delta(r-l)$ , то

$$f_i = \frac{w^i}{l}; \quad (15)$$

$$|\Delta^*| = \left( \frac{I^g \omega}{4\pi D^* AF^i} \right)^{1/2}; \quad (16)$$

$$n^g(x) = \left( \frac{3I^g}{4\pi\alpha} \right)^{\frac{k+2}{k+5}} \left[ \frac{\beta |\Delta^*|^{\frac{1-k}{3}}}{(k+5)D^g d \omega^{\frac{1-k}{3}}} \right]^{\frac{3}{k+5}} \left( 1 - \frac{x}{d} \right)^{-\frac{3}{k+5}}. \quad (17)$$

### «БОЛЬШИЕ» ПОРЫ $\tau_g / \tau_0 \gg 1$

Решения (10) – (14), как легко видеть, не изменяются. Решая уравнение (1) методом характеристик, найдем:

$$f_b = \begin{cases} \frac{\alpha \delta}{D^* \omega} & \text{для } R \leq R_{\max} \\ 0 & \text{для } R \geq R_{\max} \end{cases}; \quad (18)$$

$$[R_{\max}(x)]^{k+2} = \frac{(k+2)D^* \omega}{\beta \delta} \int_x^d n^g dx; \quad (19)$$

$$n^g(x) = \left[ \frac{3(k+5)I^g \delta}{2(2k+7)\pi\alpha} \right]^{\frac{k+2}{2k+7}} \left[ \frac{2\beta \delta}{(2k+7)D^* d \omega} \right]^{\frac{3}{2k+7}} \left( 1 - \frac{x}{d} \right)^{\frac{3}{2k+7}}; \quad (20)$$

$$|\Delta^*| = \frac{\delta I^g}{n^g(x) 2\pi D^* AF^i}. \quad (21)$$

Подробное решение уравнения (1) для случая малых и больших пор с обоснованием соотношений (12) – (13) и (18) – (19) приведено в работе [11]. Используя полученные результаты, найдем число атомов газа, выносимых порами на единичную

поверхность  $x=0$  в единицу времени  $\dot{N}$ . Очевидно, в единицу времени будет вынесен весь газ, находящийся в приповерхностном слое толщины  $|V_x|$ . Следовательно:

$$\dot{N} = \int_0^\infty f_b(R, x=0) N^g |V_x| \frac{4\pi R^3}{3} dR = I^g d \quad (22)$$

в стационарном случае выноситься будет столько газа, сколько его рождается внутри образца.

Стационарный режим установится в системе за время

$$t \gg \max \left\{ \frac{r_{\max}^i}{V_r^i}, \frac{R_{\max}(0)}{V_R^b} \right\}. \quad (23)$$

### ОГРАНИЧЕНИЯ

Как упоминалось ранее, давление газа в поре не должно превышать критического значения, выше которого начинается пластическое течение материала. Считая для оценок, что газ в поре идеальный, легко получить критерий, ограничивающий мощность источников газа:

$$\frac{3N^g}{4\pi R^3} < \frac{\rho_{cr}}{kT}, \quad \text{где } N^g \text{ через } |\Delta^*| \text{ зависит от } I^g.$$

Пренебрежение интегралом столкновений  $J$  в уравнении (1) возможно, если  $|J| \ll \left| \frac{f_b V_x}{d} \right|$ . Так как

максимальное значение интеграла столкновений  $J \sim \left[ R^3 V_x f_b^2 \right]_{R=R_{\max}(0)}$ , где  $V_x f_b$  – плотность

потока, а  $R^3 f_b$  – размер мишени, то это неравенство эквивалентно следующему:

$$\left( \frac{f_b}{R} \right) R_{\max}^4(0) d \ll 1. \quad (24)$$

### ДОПОЛНЕНИЕ. ОБРАЗОВАНИЕ ПОРЫ С ГАЗОМ В СЛУЧАЕ $D^g = 0$

Скорость роста вакансионной поры запишем обычным образом:

$$\frac{dR}{dt} = D \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad (д1)$$

где  $R$  – текущий радиус сферической поры;  $D$  – коэффициент диффузии вакансий;  $t$  – время;  $r$  – текущая координата;  $c$  – концентрация вакансий. Последняя величина находится из решения стационарного уравнения диффузии в приближении неподвижной границы:

$$\Delta c = 0; \quad c(r=R) = c_R; \quad c(r=\infty) = c_\infty. \quad (д2)$$

Здесь  $c_R$  – концентрация вакансий вблизи поверхности поры, где соблюдается локальное термодинамическое равновесие. Термодинамический потенциал поры, наполненной идеальным одноатомным газом, хорошо известен:

$$\Phi_b = NkT \ln \frac{NW}{Ve} + 4\pi R^2 \gamma. \quad (д3)$$

Здесь  $N$  – число атомов газа в поре;  $W = \left( \frac{2\pi \hbar^2}{m_g kT} \right)^{3/2}$ ;

$\hbar$  – приведенная постоянная Планка;  $m_g$  – масса

атома газа;  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – абсолютная температура;  $e$  – основание натурального логарифма;  $\gamma \sim 1 \text{ Дж/м}^2$  – поверхностное натяжение на границе металл/пора;  $V = M\omega$  – объем поры;  $M$  – число вакансий, составляющих пору;  $\omega \sim 10^{-29} - 10^{-30} \text{ м}^3$  – объем, приходящийся на атом. Термодинамический потенциал твердого раствора вакансий и атомов газа в металле:

$$\Phi_s = N_s (\varphi_g + kT \ln n_g \omega) + M_s (\varphi + kT \ln c_R), \quad (д4)$$

где  $N_s$  – число атомов газа в твердом растворе;  $\varphi_g$  – энергия атома газа в металле;  $n_0$  – объемная доля атомов газа в металле при парциальном давлении в  $10^5 \text{ Па}$  (1 атм);  $n_g \gg n_0$  – объемная доля атомов газа в металле под облучением;  $M_s$  – число вакансий в металле;  $\varphi = -kT \ln c_0$  – энергия вакансии в металле;  $c_0$  – равновесная концентрация вакансий в металле.

Механизм диффузии вакансий – решеточный, тогда как атомы газа занимают позиции в междоузлиях кристаллической решетки. Диффузия вакансий не затрагивает атомов газа, следовательно, при расширении поры неподвижные атомы газа будут захватываться порой. Исходя из этого, напишем изменения числа атомов газа в поре при переходе вакансий из твердого раствора в пору:

$$dN = n_g dV = n_g \omega dM. \quad (д5)$$

Равенства  $dN_s = -dN$  и  $dM_s = -dM$  очевидны. Из (д5) следует, что  $N = n_g \omega M + N_0$ , где  $N_0$  зависит от числа атомов газа, оказавшихся в поре при возникновении ее вследствие флуктуации. Локальное равновесие означает, что

$$\frac{\partial(\Phi_b + \Phi_s)}{\partial M} = 0. \quad (д6)$$

Из (д6), используя (д3) – (д5), получим условие локального равновесия:

$$\frac{c_R - c_0}{c_0} = n_g \omega \left( \ln \delta + \ln \left( 1 + \frac{N_0}{M n_g \omega} \right) - \left( 1 + \frac{N_0}{M n_g \omega} \right) \right) + \frac{2\gamma \omega}{kTR}. \quad (д7)$$

Решение уравнения (д2):

$$c(r) = c_\infty + \frac{c_R - c_\infty}{r} R. \quad (д8)$$

Комбинируя две последние формулы с (д1), получим:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{Dc_0}{R} \left( \frac{\Delta}{c_0} - n_g \omega \left( \ln \delta + \ln \left( 1 + \frac{N_0}{M n_g \omega} \right) - \left( 1 + \frac{N_0}{M n_g \omega} \right) \right) - \frac{2\gamma \omega}{kTR} \right) \quad (д9)$$

Здесь  $\Delta = c_\infty - c_0$  – пересыщенность вакансий;  $\delta = \frac{W}{\omega} \exp \left( -\frac{\varphi}{kT} \right)$  – постоянная, характеризующая

растворимость газа в решетке. Пренебрегая быстро убывающими с ростом поры слагаемыми, получим:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{Dc_0}{R} \left( \frac{\Delta}{c_0} + n_g \omega \ln \frac{e}{\delta} \right). \quad (\text{д10})$$

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. В.В. Слёзов //УФЖ. 1968, в. 13, №9.
2. Я.Е. Гегузин, М.А. Кривоглаз. *Движение макроскопических включений в твердых телах*. М.: «Металлургия», 1971.
3. З.К. Саралидзе, В.В. Слёзов //ФТТ. 1965, т. 7, в. 6, с. 1605.
4. А.М. Косевич, З.А. Саралидзе, В.В. Слёзов //ФТТ. 1964, 6, 3383.
5. А.М. Косевич, З.К. Саралидзе, В.В. Слёзов //ЖЭТФ. 1966, т. 50, с. 958.
6. R.S. Barnes, D.J. Mazey //J. Nucl. Mat. 1963, v. A275, № 1360, p. 47.
7. J.K. Williamson, R.M. Cornell //J. Nucl. Mat. 1967, v. 13, p. 278.
8. J.J. Taylor //J. Nucl. Mat. 1967, v. 13, p. 301.
9. I.Y. Choi, P.G. Shewmon //Trans. AIME. 1962, v. 224, N3, p. 589.
10. I.Y. Choi, P.G. Shewmon //Trans. AIME, 1964, v. 230, № 2, p. 123.
11. В.В. Слезов, О.А. Осмаев, Р.В. Шаповалов МФиНТ. В печати.

### РУХ ПОР У МАТЕРІАЛІ З ДЖЕРЕЛАМИ АТОМІВ ГАЗУ

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

Розглянуто стаціонарний рух ансамблю пор у обмеженому у напрямку градієнту температури ізотропному матеріалі з джерелами міжвузлових атомів, вакансій та атомів газу. Знайдені функція розподілу пор у просторі розмірів, залежність розміру від пори, кількості газу у порі та у матеріалі від просторової координати у граничних випадках великих та малих пор. Одержані критерії, що обмежують потужність джерел газу та критичний тиск ідеального газу у порі до початку пластичної деформації зразку.

### BULBS MOVING IN A MATERIAL WITH GAS ATOM SOURCES

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

The bulbs ensemble stationary movement in an isotropic material finite at temperature gradient is considered. There are sources of interstitial atom, vacancies and gas atoms in the material. The bulbs distributions function in sizes continuum, a bulb size and gas density in a bulb and in the material dependence on space location is found in the extreme case of big or small bulbs. Criteria define the material plastic deformation initial are received. These criteria confine the gas atom sources power and gas density in a bulb.