

1. РАДИАЦИОННОЙ ПОВРЕЖДАЕМОСТИ МАТЕРИАЛОВ

С точки зрения структурно-фазовых изменений, имеющих место в процессе облучения, можно выделить следующие процессы, которые отвечают за деградацию первоначальных физико-механических характеристик **материалов** [1]:

- непрерывная генерация неравновесной концентрации точечных дефектов;
- образование каскадных и субкаскадных дефектных зон;
- зарождение и рост вакансионных, межузельных, вакансионно-межузельно-примесных комплексов;
- образование, эволюция частичных и совершенных дислокационных петель, формирование дислокационной сетки;
- радиационно-индуцированная сегрегация, распад твердого раствора и фазовые превращения;
- атомное перемешивание;
- зарождение пор и эволюция поровой структуры;
- локальное и объемное изменение химического состава материала за счет протекания ядерных реакций и эффектов трансмутации.

Схема основных стадий радиационной повреждаемости материалов представлена на рис. 1.1.

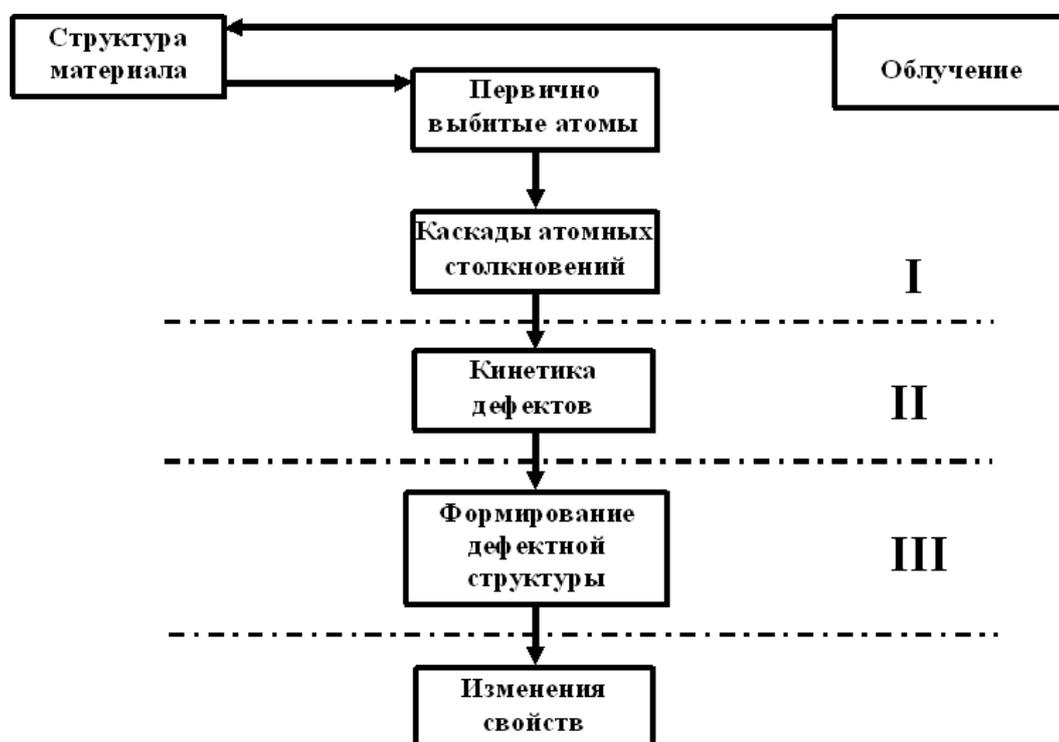


Рис. 1.1. Схема основных стадий радиационной повреждаемости материалов. I-динамическая стадия, II-диффузионная стадия, III- стадия эволюции стоков [2].

Большинство описанных выше процессов, которые реализуются в экспериментальных условиях, действует одновременно, оказывая существенное влияние друг на друга.

Первичные акты радиационной повреждаемости облучаемых материалов связаны с возбуждением их электронной и атомной подсистем, с протеканием ядерных реакций и со смещением атомов кристаллической решетки из первоначальных равновесных положений [3, 4]. Эффективность ядерных и атомных процессов при этом зависит от типа и параметров излучений и природы облучаемых материалов.

Возбуждение электронной и атомной подсистем играет особую роль в образовании радиационных дефектов в ионных кристаллах и в полупроводниках.

В результате ядерных реакций в облученных твердых телах образуются новые атомы примеси - трансмутанты, изменяющие их композиционный состав. Особо существенное значение в изменении структуры и свойств материалов при этом играют атомы инертных газов, особенно гелия и водорода. В последнее время уделяется большое внимание влиянию и твердых трансмутантов на эволюцию структуры и состава облучаемых материалов.

Развитие процесса радиационного повреждения определяется дефектной структурой материала и условиями облучения. Под условиями облучения понимают следующие факторы:

- 1) тип, энергия и спектр бомбардирующих частиц,
- 2) плотность потока частиц,
- 3) продолжительность облучения (нейтронный поток, доза, флюенс),
- 4) температура облучения,
- 5) иные внешние воздействия.

В основном условия облучения определяются типом облучательной установки.

Введём понятие характеристик облучения, которые определяют степень воздействия на твёрдое тело

1) Поток частиц (флакс) ϕ - количество частиц, падающих в единицу времени на единицу площади облучаемого материала, нейтрон/см²сек.

2) Интегральный поток или флюенс- $\Phi = \phi t \rightarrow$ нейтрон/см²

3) Сечение взаимодействия - процесс взаимодействия многочастичен. В основе статистического подхода лежит вероятность протекания процесса взаимодействия. За меру плотности вероятности событий при взаимодействии пучков частиц с твёрдым телом принято сечение реакции $\sigma = m/\phi$, где m - число взаимодействий в единицу времени, ϕ - поток частиц, $[\sigma] = \text{см}^{-2}$

1.1. Пары Френкеля

Основную роль во всех явлениях радиационной повреждаемости играют смещения атомов кристаллической решетки за счет процессов упругого или неупругого взаимодействия налетающих частиц (нейтронов, ионов, электронов) с атомом мишени.

При этом одновременно создается вакансия и собственный междузельный атом (СМА), которые получили название пары Френкеля. Естественно, что вакансии и междузельные атомы всегда создаются в равных количествах при формировании пар Френкеля.

В зависимости от величины полученной энергии атом мишени может отклониться от своего первоначального положения и передать избыток энергии решетке, либо сместиться на малое расстояние и образовать неустойчивую пару Френкеля, либо сместиться на расстояние, превышающее радиус зоны спонтанной аннигиляции и образовать устойчивую пару Френкеля (рис 1.2)

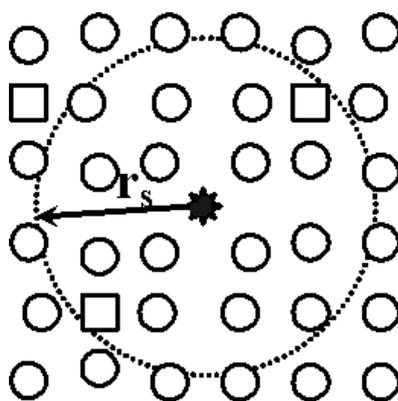


Рис.1.2. Формирование пар Френкеля в материале при облучении. \circ – атом кристаллической решетки; \star – междузельный атом; \square – вакансия, r_s - радиус спонтанной рекомбинации

Главным требованием для формирования стабильной пары Френкеля является передача атому решетки кинетической энергии, превышающей некую пороговую энергию смещения E_d .

Эта величина пороговой энергии для различных металлов и кристаллографических направлений для одного и того же кристалла неодинакова. Для большинства металлов эта величина порядка 20- 50 эВ [5].

Атомы решетки, непосредственно смещенные налетающими частицами, определяются как первично-выбитый атом (ПВА). ПВА имеют энергетический спектр даже в случае монохроматического облучения, их энергия изменяется от нуля до определенного значения максимума T_{max} . Попадая в твердое тело, быстрая частица вовлекается в сложный процесс взаимодействия с электронами и ядрами атомов в кристаллической решетке. В основе статистического подхода лежит определение вероятности протекания процесса взаимодействия. За меру плотности вероятности событий при взаимодействии пучков частиц с твердым телом принято сечение реакции:

$$\sigma = m / \varphi \quad (1.1)$$

где- m -число взаимодействий в единицу времени, φ -поток частиц,

Размерность сечения взаимодействия $[\sigma]=10^{-24}\text{см}^2$.

Различные типы облучения отличаются количеством и энергетическим спектром ПВА, который характеризуется дифференциальным сечением $K_p(E, T)dT$, используемым для подсчета ПВА с энергией T , когда энергия налетающей частицы E .

Скорость образования ПВА с энергией T определяется следующим образом:

$$P = \varphi \int_{E_d}^{T_{\max}} dTK_p(E, T), \quad (1.2)$$

где φ - плотность потока налетающих частиц.

Здесь учитываются только те ПВА, которые получили энергию, превышающую пороговую энергию E_d , необходимую для смещения.

В случае классического упругого соударения величина энергии T , переданной налетающей частицей атому мишени, равна

$$T = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_0 \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.3)$$

где

M_1, E_0 - масса и энергия налетающей частицы;

M_2 - масса атома мишени;

θ - угол рассеяния частиц.

Интеграл от правой части уравнения 1.3 представляет собой поперечное сечение ПВА σ_p (значения σ_p для некоторых типов облучения в меди приведены в табл. 1.1). Известно, что налетающие частицы диссипируют свою первоначальную энергию при движении через кристалл. Следовательно, район диссипации ограничен (см. табл. 1.1), и ПВА с поперечным сечением σ_p , соответствующим энергии налетающей частицы, образуются вдоль всего этого района.

Таблица 1.1

Некоторые параметры ПВА для различных видов облучения в меди [5]

Частица /Энергия	$\sigma_p / 10^{-24} \text{ см}^2$	$\sigma_d / 10^{-24} \text{ см}^2$	Средний диапазон, нм
e^- 2МэВ	70	70	$> 10^5$
H ⁻ 1 МэВ	$3.5 \cdot 10^4$	$9.5 \cdot 10^4$	$6.8 \cdot 10^3$
He ⁺ 2 МэВ	$2.6 \cdot 10^5$	$8.5 \cdot 10^5$	$3.5 \cdot 10^3$
Cu ⁻ 3 МэВ	$5.4 \cdot 10^7$	$7.2 \cdot 10^8$	$9.6 \cdot 10^2$
Cu ⁺ 300 КэВ	$1.6 \cdot 10^8$	$3.2 \cdot 10^9$	83
нейтроны деления (EBR - II)	6	650	$> 10^7$
нейтроны синтеза (14 МэВ)	3	$5.5 \cdot 10^3$	$> 10^7$

Эксплуатируемые в настоящее время реакторы на тепловых и быстрых нейтронах имеют разные спектральные и энергетические параметры, аналогичные различия будут иметь место и в разрабатываемых реакторах новых поколений.

В связи с этим важнейшим практическим вопросом является подсчет количества радиационных повреждений, которое в последнее время выражается в количестве атомных смещений, создаваемых на атом решетки. Смещение на атом (сна) в настоящее время рассматривается мировым сообществом как единица дозы облучения, являющаяся физическим базисом для сравнения уровня повреждений в реакторах с различным нейтронным спектром и при облучении различными частицами.

Среди существующих моделей подсчета ПВА наиболее известна сравнительно простая модель Кинчина - Пиза, в которой количество смещенных атомов ($N_d(P)$) определяется следующим образом [6].

$$N_d(P) = \begin{cases} = 0 & \left\{ \begin{array}{l} 0 < P < E_d \\ E_d < P < 2,5 E_d \\ 2,5 E_d < P < P_{\max} \end{array} \right. \\ = 1 & \\ = 0,8E_d(P)/(2E_d) & \end{cases} \quad (1.4)$$

где E_d - средняя пороговая энергия смещения,

$$P_{\max} = \frac{E(4m_1m_2)}{(m_1 + m_2)} - \text{максимальная энергия,}$$

которая может быть передана налетающей частицей с энергией E и массой m_1 атомам мишени с массой m_2 :

$E_d(P)$ - энергия повреждения, т.е. энергия, диссипируемая в ядерных столкновениях.

При энергиях выше $2,5E_d$ потери энергии происходят только за счет эмиссии электронов, а при энергии ниже $2,5E_d$ потери энергии происходят за счет рассеяния на ядрах атомов как на твердых шарах. Атом, получивший энергию выше пороговой, смещается за пределы зоны спонтанной рекомбинации, в то время как атомы, получившие энергию меньше пороговой, будут возвращаться на свои места в решетке. (Рис 1.3)

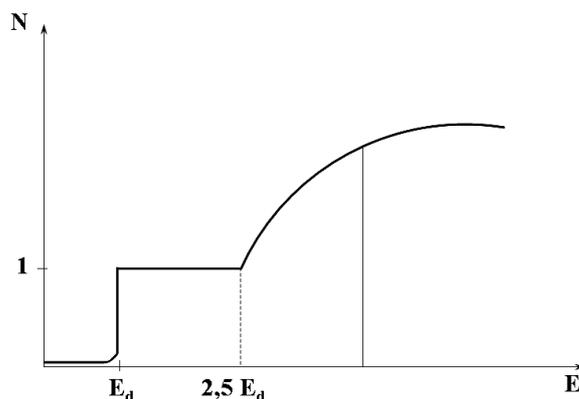


Рис.1.3. Модель Кинчина-Пиза для подсчета количества смещенных атомов. [6].

Приведенные на рис. 1.4 спектры сечений образования ПВА в никеле демонстрируют определенные различия между спектрами нейтронов и заряженных частиц [7]. Разница в

энергетических спектрах ПВА приводит к последующему различию в процессах радиационного повреждения.

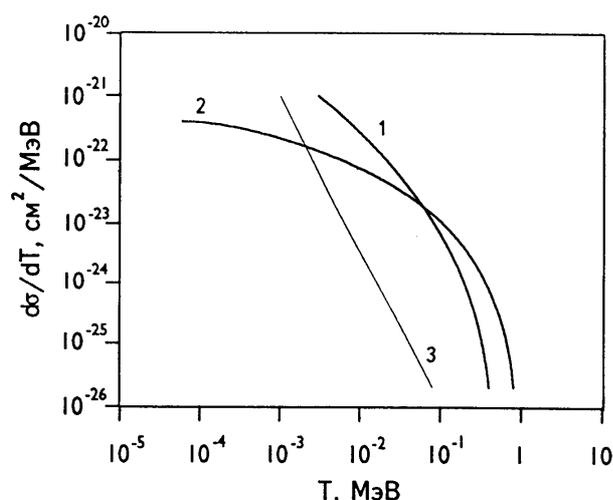


Рис.1.4 Спектры сечений образования ПВА в никеле при облучении: 1-ионы Ni ($E=300$ кэВ), 2-нейтроны ($E>0,1$ МэВ), 3-электроны ($E=200$ МэВ) [7].

Главным эффектом влияния спектра ПВА на микроструктурную эволюцию является начальное распределение дефектов. Количество дефектов увеличивается с повышением энергии ПВА: район энергий ПВА может достигать до сотен килоэлектронвольт, но в общем случае только упругие столкновения смещают атомы в металлах.

Линдхард с соавторами [8] предложили одно из наиболее полных описаний процессов столкновений ПВА, которое учитывает как атомные потенциалы, так и распределение энергий между процессами ядерного и электронного торможения

$$\hat{E} = \frac{E}{[1 + kg(\epsilon)]} \quad (1.5)$$

где $g(\epsilon) = 34008\epsilon^{1/6} + 0,40244\epsilon^{2/3} + \epsilon$

$$k = 0,1337 Z_1^{1/6} (Z_1/A_1)^{1/2}$$

$$\epsilon^{-1} = [A_2/A_1 + A_2][a / Z_1 Z_2 e^2]$$

a - боровский радиус;

e - заряд электрона;

A_1, A_2 - массовые числа двух атомов;

Z_1, Z_2 - атомные номера мишени.

Число дефектов в зависимости от повреждающей дозы определяется как

$$N_d = 10E_d \quad (1.6)$$

где E_d измеряется в КэВ.

Дефекты структуры

Зарождение и рост дефектов и их кластеров являются ключевыми факторами, определяющими микроструктурную эволюцию. Определяющим как на стадии зарождения, так и на стадиях роста является поведение точечных дефектов - вакансий и межузлий, их геометрические и энергетические характеристики [48]. В отличие от многочисленных

исследований роста дефектов при высоких дозах облучения, стадии зарождения кластеров дефектов изучены довольно слабо из-за экспериментальных трудностей.

В кристаллической структуре существуют различные типы дефектов. Их целесообразно классифицировать по характеру их измерения в пространстве.

1. Точечные дефекты (0D), для которых искажения во всех трех измерениях незначительны. К таким дефектам относятся вакансии в решетке, атомы в междоузлиях, чужеродные атомы в позициях замещения и внедрения.
2. Линейные дефекты (1D), имеющие макроскопические размеры в одном измерении. К ним относятся цепочки вакансий и внедренных атомов; важным и отличным от упомянутых видом линейных дефектов являются дислокации.
3. Планарные или двумерные дефекты (2D), которые имеют макроскопические размеры в двух направлениях; это дислокационные петли, границы зерен, субзерен, двойников, фаз.
4. Объемные дефекты (3D) - поры, тетраэдры дефектов упаковки, пузырьки газа, Вакансия – не занятый атомом узел кристаллической решетки и является простейшим точечным дефектом в решетке металла. Все компьютерные расчёты показывают, что структура одиночной вакансии представляет собой отсутствие атома решетки с ближайшими соседями, релаксирующими по направлению к центру вакансии.
Концентрация вакансий

Образование вакансий означает разрыв связей и, следовательно, требует затраты энергии.

Простое приближение состоит в том, что атомы полагают связанными парным взаимодействием только с ближайшими соседями. Тогда энергия связи или теплота сублимации выразится соотношением $E_{св} = 1/2 \cdot z w$ (z - число ближайших соседей, w - энергия парного взаимодействия). Вакансия образуется в результате разрыва z связей и восстановления в среднем $z/2$ связей при попадании атома на поверхность.

$\mathcal{E}_v^f = \frac{z}{2} v_a$ - энергия формирования вакансии, \mathcal{E}_v^f - вакансии в металлах обычно имеют значения ~ 1 эВ.

В условиях термодинамического равновесия концентрация вакансий определяется:

$$C_v^e = e^{-\mathcal{E}_v^f / T}, \text{ где}$$

Равновесная концентрация $C_v^e \sim 10^{-17}$ в случае 1 эВ, ТД равновесные вакансии играют большую роль в диффузии и связанных с ней процессах.

Дилатационный объем точечного дефекта (в частности вакансии) δV

$$\delta V = \frac{V_0 - V}{V_0}$$

характеризует обусловленное точечным дефектом (вакансией) изменение объема образца. Обычно: $\delta V \sim 0,1 V_0$, V_0 - атомный объем.

Энергия миграции вакансий e_v^m , характеризует высоту потенциального барьера, который должна преодолеть вакансия, чтобы переместиться в соседний узел решетки. Энергия миграции вакансий в кристаллах также кА кправило ~ 1 эВ.

При образовании вакансии атомы ее окружения вследствие упругой релаксации испытывают некоторое смещение. Упругие деформации пропорциональны $1/R^3$ (R - расстояние от вакансии. Поэтому заметное смещение испытывают только ближайшие соседние атомы. Сама энергия упругой деформации невелика и не превосходит нескольких десятых электрон-вольта. При образовании межузельного атома искажение решетки велико: смещение близлежащих ионов может достигать $1/5$ периода решетки, а энергия деформации – нескольких электрон-вольт.(таблица)

Numerical values, compiled from different sources for some quantities characterizing properties of radiation-induced point defects in metals (from [1])

	Symbol	Unit	Al	Cu	Pt	Mo	W
Interstitials							
Relaxation volume	V_{relax}^i	Atomic vol.	1.9	1.4	2.0	1.1	
Formation energy	E_f^i	eV	3.2	2.2	3.5		
Equilibrium concentration at T_m^*	$C_i(T_m)$	–	10^{-18}	10^{-7}	10^{-6}		
Migration energy	E_m^i	eV	0.12	0.12	0.06		0.054
Vacancies							
Relaxation volume	V_{relax}^v	Atomic vol.	0.05	–0.2	–0.4		
Formation energy	E_f^v	eV	0.66	1.27	1.51	3.2	3.8
Formation entropy	S_f^v	k	0.7	2.4			2
Equilibrium concentration at T_m^*	$C_v(T_m)$	–	9×10^{-6}	2×10^{-6}			4×10^{-5}
Migration energy	E_m^v	eV	0.62	0.8	1.43	1.3	1.8
Activation energy for self-diffusion	Q_{vSD}	eV Qa	1.28	2.07	2.9	4.5	5.7
Frenkel pairs							
Formation energy	E_f^{FP}	eV	3.9	3.5	5		

1.2. Каскады атомных столкновений и их влияние на микроструктурную эволюцию

В том случае, если ПВА способен передать другому атому решетки энергию $E \gg E_d$, образуется второй выбитый атом, который при том же условии может создать третий выбитый атом и т.д., т.е. высокоэнергетичные частицы могут создавать целый каскад атом-атомных столкновений. Другими словами, в каскаде атомы отдачи, которые могут иметь энергию десятки

килоэлектронвольт, теряют эту энергию в районе нескольких десятков нанометров в диаметре, создавая локально высокую концентрацию смещенных атомов, т.н. «обедненную зону» (рис.1.5). В общем случае образование каскадов имеет место, если энергия ПВА превышает 10 пороговых энергий.

При энергиях пучка электронов около 1 МэВ (т.е. энергий, характерных для ВВЭМ) расчет скорости образования смещений наиболее прост, так как средняя энергия ПВА обеспечивает только создание пар Френкеля и недостаточна для развития каскада столкновений в облучаемых материалах.

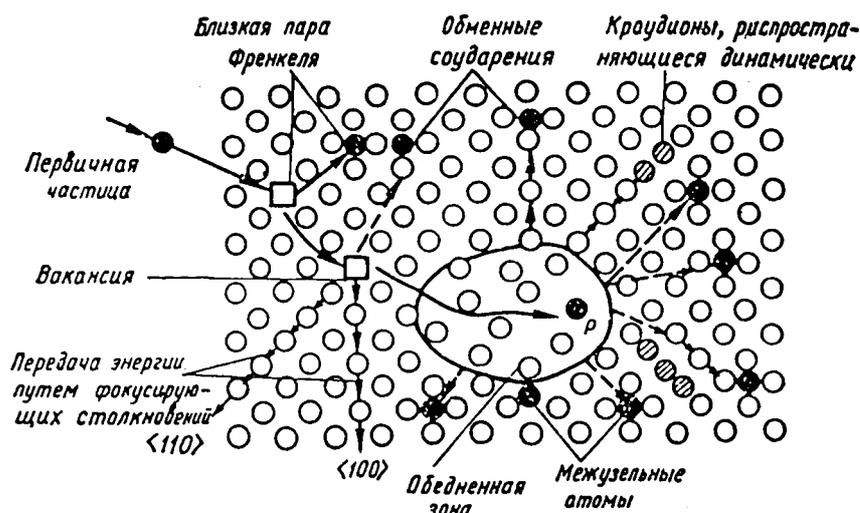


Рис. 1.5. Модель радиационных повреждений, производимых при соударении одного нейтрона с атомами решетки [9]

Эволюция повреждения, вызванного энергетичными нейтронами или ионами, предполагает несколько стадий, характеризующихся сильно различающимися временными интервалами (табл. 1.2) [9].

Таблица 1.2

Стадии образования дефектной структуры в облученных металлах [10]

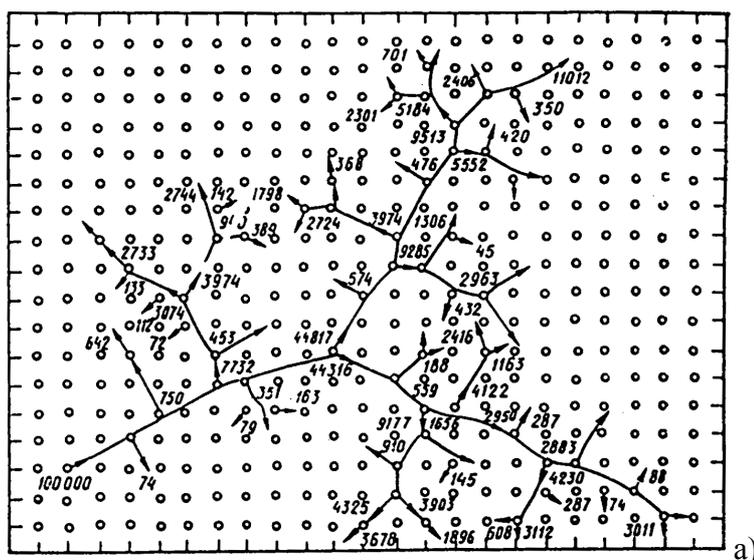
Время, (с)	Событие	Результат	Характеристический параметр
10^{-18}	Передача энергии налетающей частицей	ПВА	$T, d\sigma/dT(E, T)$
10^{-13}	Смещение атома решетки	Каскад смещений	$T_d, \nu(T)$
10^{-11}	Диссипация энергии и спонтанная рекомбинация	Стабильные пары Френкеля	$\nu(T)$ пространственное распределение

10 ⁻⁸	Реакции дефектов при термической миграции	Рекомбинации вакансий и межузлий кластеризация и захват	E_I^m , E_V^m , T^I и т.д.
------------------	---	---	----------------------------------

В результате передачи атому решетки энергии, значительно превышающей E_d , энергия, освобождающаяся в каскаде столкновений, трансформируется главным образом в тепловую, которая диссипирует по прилегающему объему материала. В этом временном интервале имеет место интенсивное атомное перемешивание. При этом 70% - 80% образовавшихся дефектов - вакансий и межузлий - рекомбинируют путем взаимной аннигиляции, а на месте прохождения каскада менее чем через 100 пикосекунд формируется обедненная зона - "вакансионное ядро", окруженное межузельной "шубой". Дефекты, избежавшие внутрикаскадной рекомбинации, могут вступать в реакцию с дефектами, выжившими в других каскадах.

Как типичное значение, можно считать, что ПВА с энергией 50 кэВ формируют каскад диаметром около 7 нм. Облучение тяжелыми ионами и нейтронами дает значительную часть ПВА еще с большими энергиями отдачи.

Методами высокоразрешающей электронной микроскопии и автоионной микроскопии установлено, что при соответствующих энергиях каскадные области атомных столкновений состоят из отдельных субкаскадов (рис. 1.6). Считается, что причиной образования субкаскадов являются процессы каналирования отдельных выбитых атомов [10, 11, 12].



а)

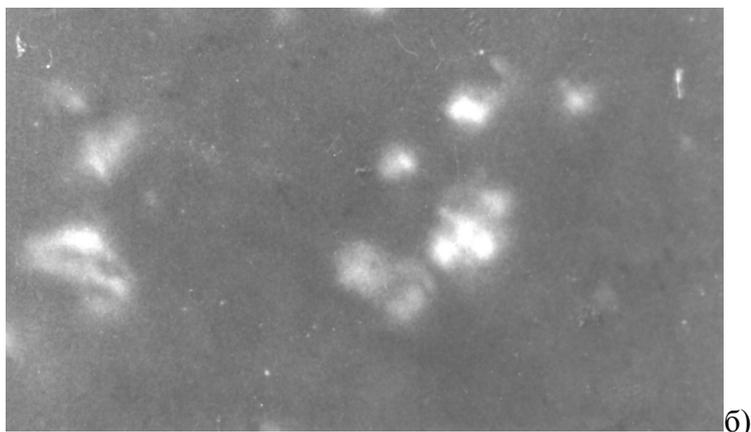


Рис. 1.6. Субкаскады в облученных металлах:

- а) структура высокоэнергетичных ветвей 100 кэВ каскада в α -Fe, полученная динамическим методом; числа - энергия выбитых атомов, эВ; \rightarrow - направление их движения; [12]
- б) электронномикроскопическое изображение субкаскада в Cu, облученной ионами Ag ($E=443$ МэВ) [12].

Тип кристаллической решетки облучаемого материала не оказывает заметного влияния на характеристики субкаскадной структуры. Количество субкаскадов на единицу уменьшения энергии ПВА приблизительно одинаково для всех металлов с различными кристаллическими решетками. Среднее расстояние между субкаскадами составляет около 40 параметров решетки в Cu Au (ГЦК), Fe и W (ОЦК), облученных 300 кэВными ионами Ni [13]. Конфигурация субкаскадов при данных условиях облучения зависит только от энергетического спектра ПВА, создаваемого налетающими частицами.

Каскадная функция-среднее число пар Френкеля, образующихся в каскаде соударений- $\nu(T)$

Расчет количества смещений в каскадах является сложной математической задачей, так как многие физические аспекты формирования каскадов и точечных дефектов еще не достигли удовлетворительного понимания. Предложены различные модели расчета повреждений в каскадах [5]. В качестве международного стандарта для подсчета числа смещений в каскадах в настоящее время обычно используется модель Торренса-Робинсона-Норретта (TRN-стандарт) [14], которая использует более реалистичский вариант атомного рассеяния, описываемый уравнением:

$$\nu = \frac{k(E-Q)}{2E_d} = \frac{k\hat{E}}{2E_d} \quad (1.7)$$

$$\hat{E} > 2E_d/k$$

где ν - число пар Френкеля в каскаде;

k - эффективность смещений (0,8 для всех значений первично выбитых атомов);

E_d - энергия смещения, обычно принимает значения от 25 до 60 эВ,

типичные значения для сталей типа AISI-316, ЭИ-847 – она составляет 30-40 эВ

(добавить таблицу Вога)

Знание величины ν и дифференциального сечения взаимодействия $d\sigma(T, E)$ для энергии, передаваемой ПВА, позволяет подсчитать скорость образования смещений K , которая является

одним из ключевых параметров, характеризующих явление радиационного повреждения. Она определяется следующим образом:

$$K = \int_0^{E_{\max}} \int_0^{T_{\max}} v^*(T) \frac{d\sigma(T, E)}{dT} \frac{d\Phi(E)}{dE} dT dE = \sigma_d \Phi \quad (1.8)$$

где $d\Phi$ - поток налетающих частиц в энергетическом интервале dE ;

σ_d - поперечное сечение смещения;

Φ - суммарный поток частиц.

Для определения скорости образования смещений при реакторном облучении материалов необходимо знать реальный энергетический спектр нейтронов. Обычно оценка повреждающей способности реакторного облучения сводится к расчету скорости образования смещений для нейтронов средней энергии. Одно смещение на атом достигается, например, при облучении в реакторе БОР-60 при флюенсе $1,8 \cdot 10^{25}$ н/м², в реакторе EBR-II при $2 \cdot 10^{25}$ н/м², в реакторе HFIR при $7 \cdot 10^{24}$ н/м². В таблице 1.3 приведены значения дозы, выраженной в количестве смещений на атом, в стали X18H8, достигнутой при облучении в различных реакторах до флюенса 10^{26} н/м².

Сечения процессов взаимодействия нейтронов реакторного спектра с веществом для большинства материалов известны и расчет скорости образования смещений при нейтронном облучении не вызывает принципиальных затруднений.

Таблица 1.3.

Число смещений на атом в нержавеющей стали X18H8, облученной в различных реакторах до флюенса 10^{26} н/м² [15].

Реактор	E > 0	E > 0,1 МэВ	E > 0,4 МэВ
БОР-60 (ц.а.з)	4,84	5,43	8,14
БН-600 (з.б.о)	3,03	4,50	8,96
БН-1600 (з.б.о)	2,45	4,30	9,90
EBR-II (ц.а.з)	4,81	5,45	8,19
ETR	-	7,01	9,36
GTR	-	7,61	9,51
ВВЭР-440	-	6,50	9,66
МР	-	5,65-7,1	8,45-9,0
РБМК	-	5,0-7,1	8,3-8,5
Внутренняя стенка ВВЭР	-	6,63	9,45

Примечание. Здесь ц.а.з – центр активной зоны; з.б.о.- зона большого обогащения.

Каскады существенно влияют на микроструктурную эволюцию при облучении тяжелыми энергетическими частицами, поскольку:

- каскадная структура модифицирует эффективность выживания точечных дефектов и, следовательно, изменяет эффективное количество смещений;

- каскады формируют высокую локальную плотность, что существенно изменяет вероятность кластеризации вакансий либо атермическим захлопыванием вакансионного ядра,

либо перестройкой атомов в ядре термически, механически или термодинамически и влияют на изменение кинетики дефектов - как межузлий, так и вакансий;

- каскады способствуют атомному перемешиванию, растворению и образованию новых частиц выделений [16].

Очень важно, что при различных видах облучения и, соответственно, при различных спектрах ПВА наблюдается неодинаковое пространственное распределение дефектов, сформированных каскадами.

В работе [11] показано, что эффективность выживания точечных дефектов определяется результирующим распределением кластеров по размерам, возникающим при облучении, так как рекомбинация внутри каскадов будет резко возрастать с увеличением размера кластеров.

Предполагается, что вероятность выживания дефектов $P(N)$ при рекомбинации внутри кластера спадает примерно экспоненциально с размером кластера

$$P(N) = (1 - P_\infty) \exp[-(N - 1) / N_d] + P_\infty \quad (1.9)$$

где N - количество пар Френкеля, создаваемых в кластере;

P_∞ - доля дефектов, выживающих в большом кластере (обычно таких размеров как средний субкаскад);

N_d - расстояние, на котором происходит распад кластера.

Снижение вероятности $P(N)$ до конечной величины связано с увеличением количества пар Френкеля, рожденных в тесной близости, и отражает тот факт, что каскады от высокоэнергетичных ПВА преобразуются в некоторое количество пространственно распределенных субкаскадов. Этот распад происходит, если размер кластера превышает приблизительно от 100 до 200 пар Френкеля.

Компьютерное моделирование на атомном уровне с использованием метода молекулярной динамики (МД) показало, что существенная часть дефектов, сформировавшихся в ходе высокоэнергетичных каскадов смещений, существует в форме скоплений [17, 18]. Свойства скоплений вакансий и собственных межузельных атомов оказывают чрезвычайно важное влияние на дальнейшее развитие дефектной микроструктуры в том смысле, что они являются в высшей мере стабильными [19, 20] и обнаруживают быстрое движение путем термо-активированного одномерного скольжения [21, 22].

К настоящему времени смоделированы каскады первично выбитых атомов (ПВА) с энергией $E_{ПВА}$ до 50 кэВ в различных ОЦК, ГЦК и ГПУ металлах в широком температурном интервале [23, 24].

Прямое формирование скоплений межузельных атомов каскадом было предсказано как МД моделированием каскадов смещений [25], так и вычислениями на базе диффузионной теории [26] в начале 1990 годов, а затем это было подтверждено ПЭМ [27]. С тех пор внутрикаскадное

образование скоплений вакансий и межузельных атомов было обосновано в целом ряде металлов, используя МД моделирование.

Фракция межузлий в скоплениях, ϵ_i , была определена равной 50-60%. Большинство скоплений межузлий имеет форму скользящих идеальных дислокационных петель. Скопления в скользящей конфигурации, также наблюдались в МД моделировании, в зависящем от металла объеме. Их фракция наименьшая (всего несколько процентов) в ОЦК металлах и состоит из метастабильных трех мерных скоплений, и наибольшая, до $\sim 30-40\%$ в ГЦК металлах с низкой энергией дефектов упаковки и включает стабильные дефектные дислокационные петли Франка [28]. Между этими крайними величинами располагается сидячая фракция в ГПУ металлах.

Образование скоплений вакансий сильно зависит от структуры кристалла. Например, крупные компактные скопления наблюдаются только при моделировании ГЦК и ГПУ металлов. В ГЦК меди они представляют собой идеальные или усеченные SFT (тетраэдры дефектов упаковки) [29, 30, 31], тогда как в ГПУ цирконии – это плоскостные дефекты, подобные призматическим или базисным дислокационным петлям [32, 33]. В ОЦК металлах не наблюдалось ни крупных компактных плоскостных, ни трёхмерных скоплений вакансий.

Стабильность скоплений вакансий сильно зависит от кристаллической структуры. Наиболее стабильные вакансионные скопления в ГЦК меди имеют форму тетраэдров дефектов упаковки [34], которые при МД моделировании стабильны до 1000К в течение по меньшей мере нескольких наносекунд. Пример стабильности скоплений вакансий в меди из работы [34] представлен на рисунке 1.7

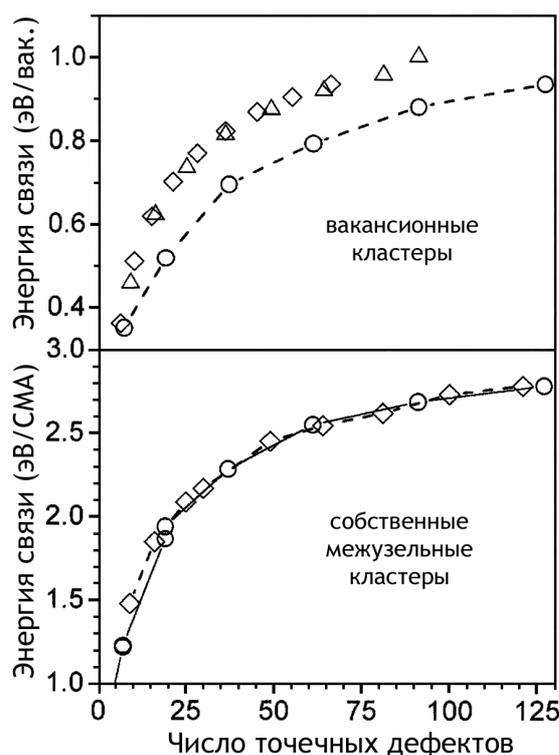


Рис.1.7 Энергия связи собственных межузельных и вакансионных кластеров в меди [34].

○ – дефектные $\frac{1}{3}\langle 111 \rangle$ Петли Франка, ◇ - $\langle 111 \rangle$ идеальные петли, △ - четырехгранные дефекты упаковки.

Скопления межузельных атомов в ОЦК, ГЦК и ГПУ структурах широко изучались на протяжении последних десяти лет. Были исследованы структура и энергия $1/2\langle 110 \rangle$ совершенной и $1/3\langle 111 \rangle$ дефектной дислокационной петли в меди, и $1/2\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ идеальных петель в железе, а также $1/2\langle 1120 \rangle$ идеальные петли в цирконии [35, 36, 37, 38]. Наблюдалось термически активированное одномерное скольжение всех этих идеальных дислокационных петель, содержащих до нескольких сотен межузельных атомов, т.е. до нескольких нанометров в диаметре были сделаны следующие выводы:

(а) Все типы скоплений СМА во всех металлических структурах имеют очень высокую энергию связи, порядка 2-3 эВ/СМА (Рис.1.7). Они не могут разлагаться термически, но могут превращаться из метастабильной в стабильную конфигурацию.

(б) Наиболее стабильными скоплениями являются зародыши идеальных дислокационных петель, с вектором Бюргера $1/2\langle 110 \rangle$ в ГЦК (Cu), $1/2\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в ОЦК (Fe) и $1/2\langle 1120 \rangle$ в ГПУ (Zr) структурах. Эти скопления могут быть описаны как компактные плоские наборы краудионов; их оси располагаются вдоль направления вектора Бюргера [39, 40] и являются, в основном, скользящими.

(в) Сидячие стабильные петли формируются в ГЦК ($1/3\langle 111 \rangle$ дефектные петли Франка) и ГПУ ($1/2\langle 0001 \rangle$ дефектные базисные петли) металлах, но не формируются в ОЦК кристаллах, в которых все стабильные скопления являются собственно скользящими. Крупные скопления ромбовидной формы (стороны вдоль $\langle 112 \rangle$) в меди могут разлагаться вдоль направления скольжения. Такие скопления становятся сидячими вследствие формирования ступенек дислокаций по углам [20].

(г) Мелкие идеальные дислокационные петли выполняют быстрое, термически активируемое одномерное движение. Подвижность уменьшается с увеличением размера, но энергия активации не зависит от размера и близка к подвижности отдельного краудиона соответствующего типа, например, $\sim 0.02-0.05$ эВ [22]. Термически активированное движение скоплений подавляется при большом размере, например, выше ~ 300 СМА для $1/2\langle 111 \rangle$ скоплений в железе и ~ 120 СМА для $1/2\langle 110 \rangle$ скоплений в меди [41].

Для того, чтобы сравнить структуру повреждений, т.е. распределение каскадов по размерам, создаваемое при облучении различными частицами в материале сразу после зарождения каскада до наступления периода термической миграции, предложено [42] введение нормированной функции $W(T)$, определяющей долю пар Френкеля, образующихся в каскадах, инициированных ПВА с энергией меньше T , которая описывается следующим выражением:

$$W(T) = 1 / \nu \int_0^E dE / S(E) \int_0^T dT' \frac{d\sigma(E, T')}{dT} \nu(T') \quad (1.10)$$

Здесь $d\sigma(E, T_0')/dT'$ - соответствующее поперечное сечение образования ПВА с энергией T' частицей с энергией E ;

$\nu(T')$ - количество пар Френкеля, образуемых ПВА с энергией T' ;

$S(E)$ - энергия, выделяющаяся при торможении;

ν' - общее количество пар Френкеля, образованных налетающей частицей.

Рис. 1.8. иллюстрирует поведение функции $W(T')$ для разных видов облучаемых частиц. Очевидно, что при соответствующей селекции энергии и масс ионов доминирующая энергия каскадов при облучении может варьироваться от десятков электронвольт до сотен килоэлектронвольт. Образование дефектов для случая собственных энергетических ионов имеет достаточно хорошее подобие с образованием дефектов при облучении быстрыми нейтронами, что очень важно для имитационных экспериментов. Соответствующим параметром для характеристик облучения является энергия $T_{1/2}$, для которой $W(T) = 0,5$. Часть пар Френкеля образуется первично- выбитыми атомами с энергией меньше, чем $T_{1/2}$, а часть - ПВА с энергией больше, чем $T_{1/2}$.

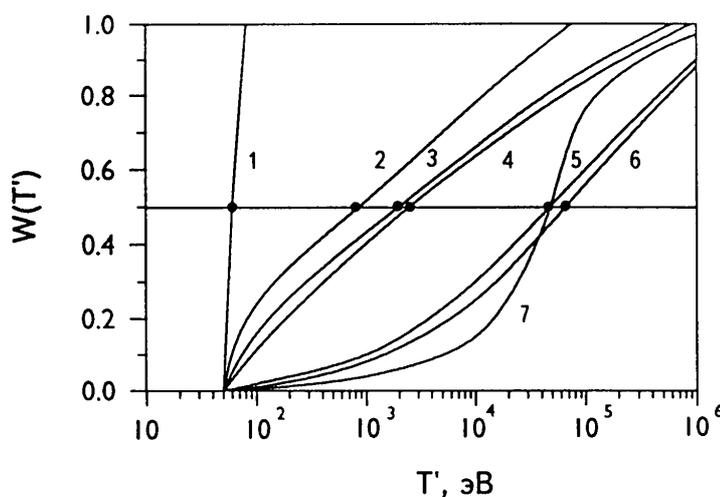


Рис. 1.8. Посчитанная доля дефектов, образованных первичными атомами с энергией менее T' для различных видов облучения [42]: 1 – 1 МэВ электроны; 2 – 1 МэВ H; 3 – 2 МэВ He; 4 – 2 МэВ Li; 5 – 3 МэВ Ni; 6-3,25 МэВ Kг; 7 - нейтроны ($E > 0,1$ МэВ).

С увеличением массы бомбардирующего иона соответствие увеличивается, спектр ПВА становится жестче, образуется большее количество дефектов, увеличивая пространственную корреляцию среди дефектов.

В связи с тем, что в больших каскадах межузлия и вакансии перемешиваются, а их локальная концентрация очень высока, значительная часть пар Френкеля, генерированных в каскадах, исчезает при спонтанной рекомбинации, временной фактор которой около 10^{-11} с.

Таким образом, количество стабильных дефектов ν которые выживают, меньше, чем количество первоначально смещенных атомов, ν^* на фактор β , называемый эффективностью каскада, который имеет значение $\sim 0,5$ (рис.1.9).

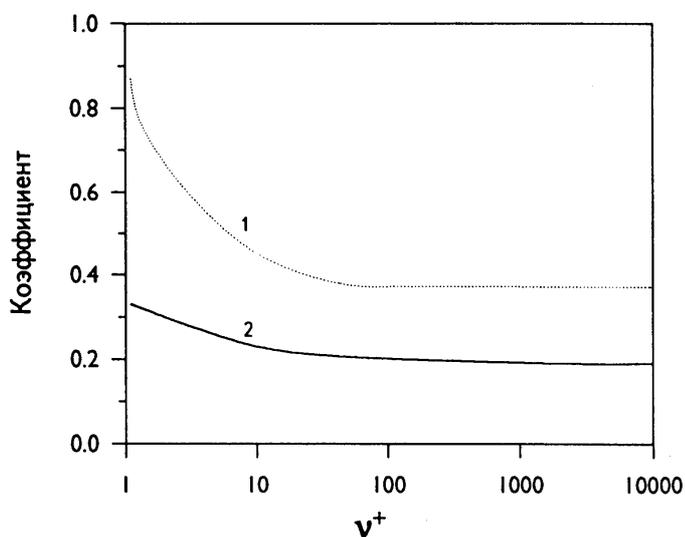


Рис. 1.9 Подсчет коэффициента β (1) и коэффициента повреждений ξ (2) как функция смещений на ПВА для Cu [42].

Каскадный коэффициент (пунктирная кривая) указывает лишь спонтанную рекомбинацию внутри каскада, тогда как коэффициент повреждений (сплошная линия) также включает процесс термического отжига.

Резюмируя, можно сказать, что значительная часть дефектов, образованных в каскадах, исчезает за счет внутрикаскадной спонтанной рекомбинации, формирования неподвижных кластеров и аннигиляции на стоках, существующих в облучаемом материале.

Именно часть выживших, так называемых свободно мигрирующих дефектов, ответственна за всю дальнейшую эволюцию микроструктуры в каскадной области. На рис. 1.10 схематически иллюстрирована кинетика эволюции каскада при облучении нейтронами или тяжелыми ионами при высоких температурах. В процессе облучения образуются мобильные моновакансии (V) и мономежузлия (i), также как и малые кластеры дефектов (V_n, i_n). Реакции между мобильными дефектами и между дефектами и стоками показывают, что существует поток радиационно-индуцированных дефектов на постоянные стоки, а часть дефектов участвует в реакциях рекомбинации. В процессе облучения имеет место и распад кластеров на точечные дефекты [43].

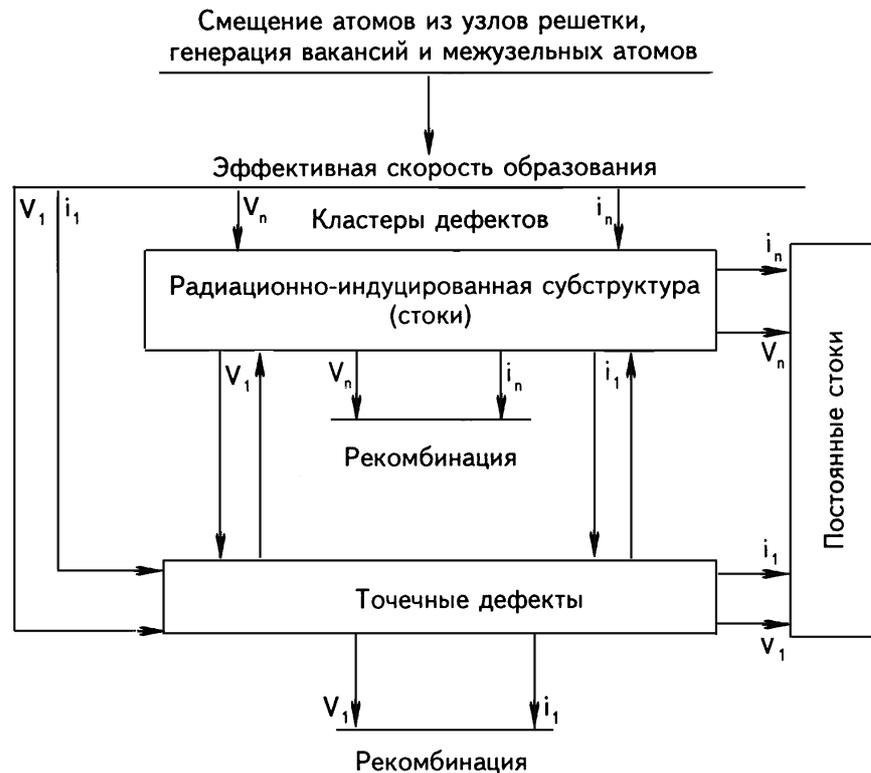


Рис. 1.10 Схема эволюции каскада повреждений при высоких температурах [43].

Авторы работы [44] предположили, что доля выживших дефектов (ДВД) делится на две компоненты: доля изолированных дефектов (ДИД_{i,v}), которая состоит из моновакансий и мономежузлий, и доля кластеризованных дефектов (ДКД_{i,v}) вакансионного и межузельного типа, которые могут мигрировать скольжением в одном направлении.

Предполагается, что

$$\text{ДВД} = \text{ДКД}_i + \text{ДИД}_i + \text{ДКД}_v + \text{ДИД}_v \quad (1.11)$$

Как ДВД, так доли кластеризованных и изолированных точечных дефектов определяются соответствующим образом относительно TRN-подсчета и являются как функцией температуры, так и энергии ПВА.

В настоящее время существует достаточно большое количество мнений по поводу того, каким образом использовать количество смещений, посчитанное в соответствии с TRN-стандартом, как репер для подсчета количества дефектов.

Доля дефектов, избежавших рекомбинации во время и после схлопывания каскада по отношению к количеству, посчитанному в соответствии с TRN-стандартом ("эффективность образования дефектов") и доля дефектов, которые могут участвовать в межкаскадных реакциях, оцениваются различными авторами по-разному.

Измерения электросопротивления после низкотемпературного облучения тяжелыми ионами [45] и исследования по молекулярной динамике [46] показали, что количество выживших дефектов в Cu и Ni находится между 20 и 30% значения TRN. Эксперименты по диффузии

примесей [47] подтвердили, что при температуре около $0,4 T_{пл}$ почти половина этих дефектов избегает внутрикаскадной рекомбинации.

Естественно, что этот вопрос требует дальнейшей концептуальной проработки.

1.3. Точечные дефекты в ГЦК, ОЦК, ГПУ структурах и реакции между ними

Зарождение и рост кластеров дефектов являются ключевыми факторами, определяющими микроструктурную эволюцию. В отличие от многочисленных исследований роста дефектов при высоких дозах облучения, стадии зарождения кластеров дефектов изучены довольно слабо из-за экспериментальных трудностей.

Определяющим как на стадии зарождения, так и на стадиях роста является поведение точечных дефектов - вакансий и межузлий, их геометрические и энергетические характеристики [48]. Рассмотрение возможных конфигураций собственных межузельных атомов в ГЦК-решетке (рис.1.11) показало, что расщепленная гантель с осью, расположенной вдоль $\langle 100 \rangle$, является единственно стабильной конфигурацией в ГЦК решетке, когда два межузлия связаны с одним узлом решетки. Дальнейшее поле смещений гантели $\langle 100 \rangle$ имеет тетрагональную симметрию.

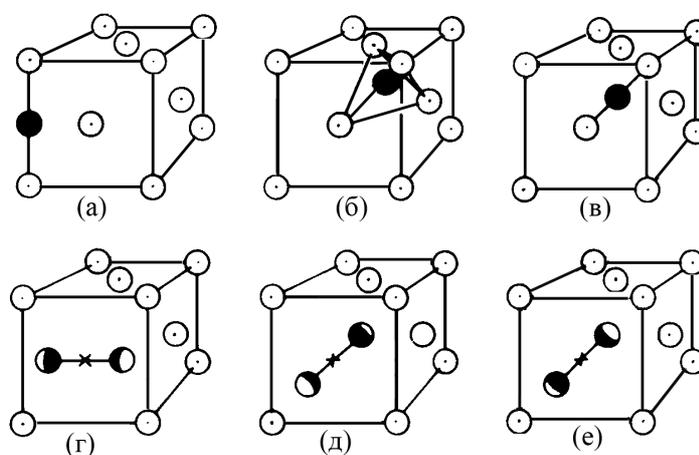


Рис. 1.11 Конфигурация собственных межузлий в ГЦК решетке: а) октаэдрическая; б) тетрагональная; в) краудион; г) (100)-расщепление (гантель); д) (111)-расщепление; е) (110)-расщепление [49].

В ОЦК решетке, являющейся более рыхлой по сравнению с ГЦК структурой, симметричной конфигурацией СМА также является гантель, но с осью зоны $\langle 110 \rangle$ (рис.1.12).

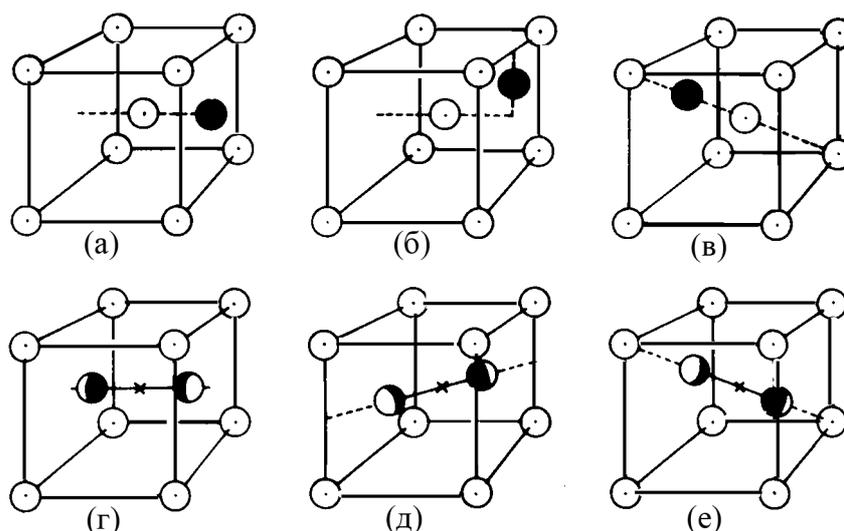


Рис.1.12 Конфигурация собственных межузлий в ОЦК решетке: а) октаэдрическая; б) тетрагональная; в) краудион; г) (100)-расщепление (гантель); д) (110)-расщепление; е) (111)-расщепление [49].

Гантель в ГЦК решетке мигрирует путем перескока одного из составляющих ее атома в соседнее место и формированием гантели другой ориентировки (рис.1.13а). Этот процесс имеет очень малую энергию активации $E^m \sim 0,1$ эВ.

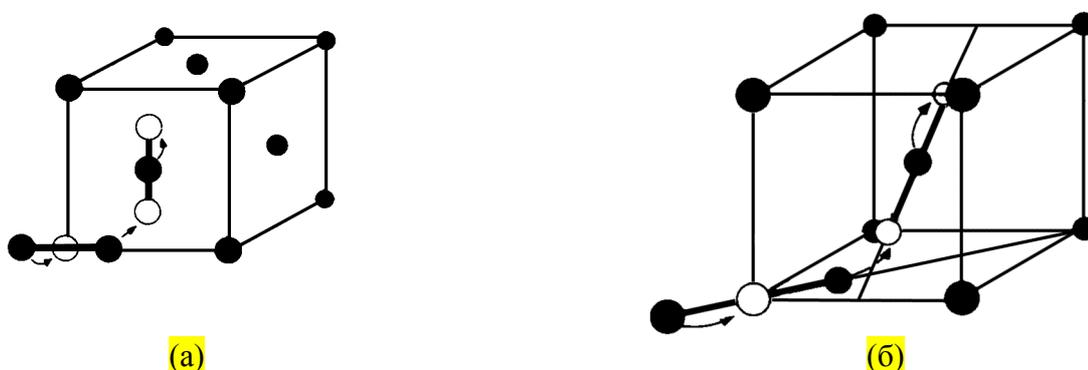


Рис. 1.13 Миграция межузлий: а) гантель (100) в ГЦК решетке; б) гантель (110) в ОЦК решетке [49].

В отличие от гантели (100) в ГЦК решетке гантель (110) в ОЦК структуре имеет очень близкие значения энергии активации для миграции и переориентировки ($E^m \sim 0,21$ эВ, $E^R \sim 0,25$ эВ). Миграция путем перескока включает в себя также и реориентировку и показана схематически на рис. 1.13б.

Наиболее стабильное межузлие в ГЦК решетке состоит из двух параллельных гантелей (100) в узлах ближайших соседей (рис.1.14). Энергия миграции димежузлия близка к таковой для мономерулия. Предполагается два механизма их миграции. Оба включают переориентировку

димерузия в процессе миграции. Иногда обе гантели могут располагаться под небольшим углом к направлению $\langle 001 \rangle$.

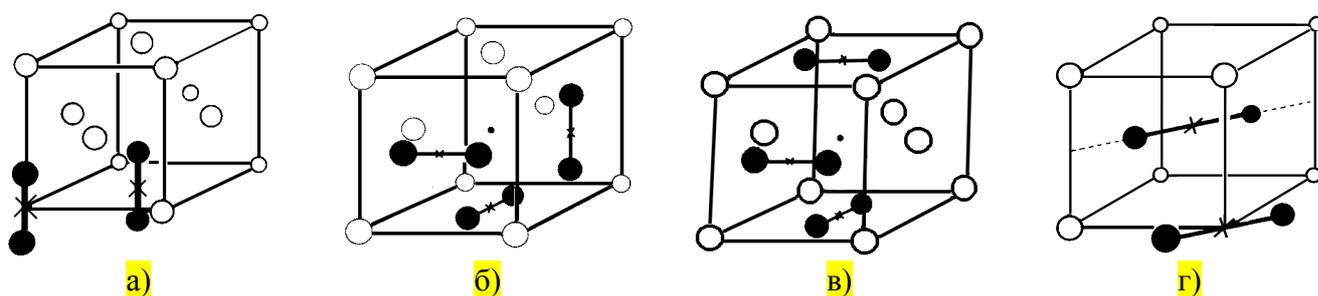


Рис. 1.14 Ди-и три-межузельные конфигурация в ГЦК - решетке а), б), в) и ОЦК -решетки г) [49].

Стабильное тримерузлие состоит из трех общих ортогональных гантелей в позициях ближайших узлов решетки (рис. 1.14б). На этом рисунке представлена и другая стабильная конфигурация, энергетически тесно примыкающая к предыдущей.

Перескоком из конфигурации рис. 1.14б в конфигурацию на рис.1.14в тримерузлие может переориентироваться без миграции. Энергия активации для такой переориентировки очень мала $E_{3i}^R \sim 0,1$ эВ, в то время как энергия миграции E_{3i}^m несколько выше $\sim 0,2$ эВ.

В ОЦК кристаллах энергия связи для наиболее стабильного димерузия, состоящего из двух параллельных гантелей (110) (рис.1.14 г), также, как и в случае ГЦК решетки, очень высока и составляет $E_{2i}^b \sim 0,9$ эВ. Миграция димерузия требует энергии активации $E_{2i}^m \sim 0,18$ эВ, т.е. несколько меньше, чем для мономерузия в ОЦК решетке, что может обусловить его более высокую подвижность [50].

Возможные конфигурации моновакансий и вакансионных комплексов в ГЦК и ОЦК структуре представлены на рис.1.15, 1.16. Расчетная энергия миграции вакансий в Cu, Ni, Fe, Cr довольно высока и составляет величину от 0,8 до 1,3 эВ [48, 49].

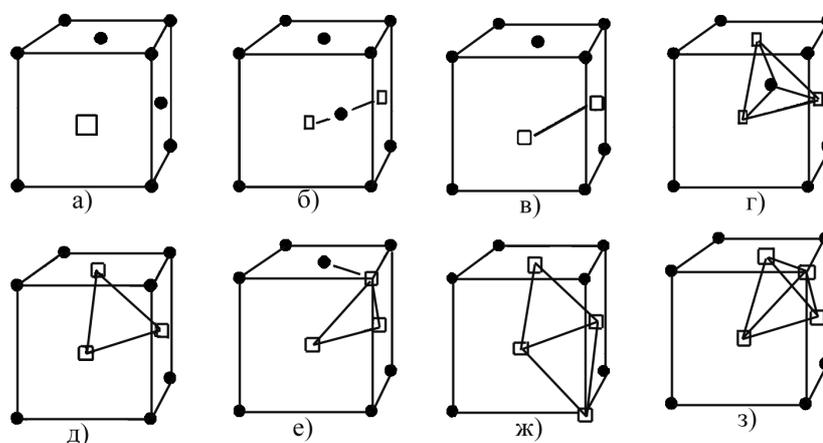


Рис. 1.15 Вакансии в ГЦК решетке: (а, б) моновакансия и ее миграция; (в, г) дивакансия и ее миграция; (д, е) тривакансия и ее переориентация; (ж, з) тетравакансия [49].

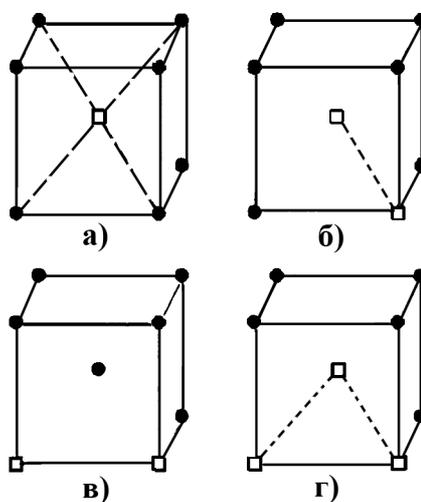


Рис. 1.16 Вакансии в ОЦК решетке: а) вакансия; б) метастабильная дивакансия; в) стабильная дивакансия; г) тривакансия [49].

Хотя энергия связи вакансионных кластеров значительно меньше, чем кластеров межузлий, кластеризация (объединение) вакансий также очень часто наблюдается в облученных материалах.

Наиболее стабильная дивакансия в ОЦК решетке состоит из двух вакансий на позициях ближайших соседей. Их энергия связи $E_{2v}^b \sim 0,2$ эВ, что приблизительно на 50 % больше, чем для метастабильной дивакансии на позициях ближайших соседей [49].

Несмотря на значительные усилия, полного понимания процессов радиационного повреждения и свойств точечных дефектов в ГПУ металлах (Zr) до сих пор не существует. Векторы смещения решетки $\langle 1120 \rangle$ в ГПУ системах обычно являются векторами а-типа, а вектор $[0001]$ - с-типа. Плоскости (0001) являющиеся плотноупакованными, и плоскости $\{1010\}$ известны как базисные и призматические плоскости (первого порядка), соответственно. Некоторые из важных направлений и плоскостей в структуре показаны на рисунке 1.17. Для плотной упаковки твердых сферических частиц отношение c/a имеет идеальную величину в $(8/3)^{1/2}=1.633$, однако для большинства ГПУ металлов c/a ниже, чем приведенное значение. Следует отметить, что даже для самого простого ГПУ металла – Mg до сих пор отсутствует однозначность по вопросу стабильной конфигурации вакансий. Результаты полученные при компьютерном моделировании [51], указывают на энергию миграции вакансии E_m^v в интервале 6-8 $kT_{пл.}$ по сравнению с энергией формирования, E_f^v примерно в 7-10 $kT_{пл.}$ (Величины $kT_{пл.}$ для ГПУ металлов приведены в таблице 1.4).

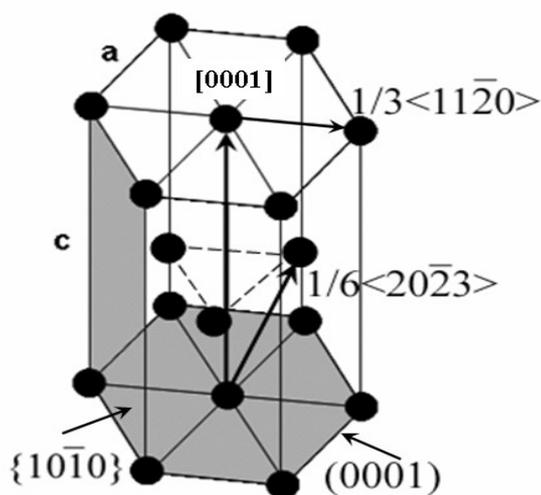


Рис. 1.17 Индексы некоторых плоскостей и направлений в ГПУ решетке.

Энергия миграции приблизительно изотропна. Для собственных межузельных атомов энергия формирования, E_f^v располагается в интервале $\sim 14-36 kT_{пл.}$ (неопределенность возникает из-за того, что ни один из потенциалов используемых при компьютерном моделировании не подходит для получения информации об атомных взаимодействиях при малых межатомных расстояниях, характерных для этого дефекта).

Таблица 1.4.

Соотношение параметров решетки, и температура плавления некоторых ГПУ металлов, k -постоянная Больцмана

Металл	c/a	$T_{пл.}$ (К)	$kT_{пл.}$ (eV)
Be	1.568	1560	0.135
Hf	1.581	2500	0.216
Ru	1.582	2523	0.218
Ti	1.587	1940	0.167
Zr	1.593	2125	0.183
Re	1.615	3453	0.298
Co	1.623	1768	0.153
Mg	1.623	922	0.080
Zn	1.856	693	0.060
Cd	1.886	594	0.051

В последнее время, для моделирования точечных дефектов парные потенциалы заменяются многомерными потенциалами. Эти потенциалы содержат парный член, описывающий (отталкивающее) взаимодействие между ионными остовами атомов и многомерный член,

описывающим энергию сцепления, приобретенную, когда атом внедряется в среду, созданную его соседями. Необходимо помнить, что многомерный член изотропен и в нем не учитывается угол при соединении. Поэтому для переходных металлов эти потенциалы дают только упрощенную картину о реальной ситуации.

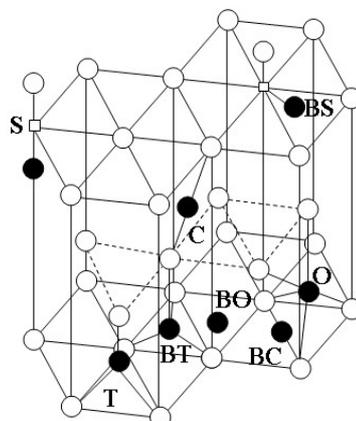


Рис. 1.18. Некоторые возможные положения СМА в ГПУ структуре [51]

BO- базисное октаэдрическое, C- внебазисный краудион, BC- базисный краудион
T-тетраэдрическое, BT- базисное тетраэдрическое, S-гантелеобразное, BS- базисное гантелеобразное.

Установлено, что краудионный дефект (C) является стабильным в случае когда E_f^i равна 25, 22 и 25 $kT_{пл}$. для Mg, Ti and Zr, соответственно, и первой метастабильной позицией будет октаэдрическая, базисная октаэдрическая и октаэдрическая, соответственно. В работе [52] использовались два «модельных» потенциала, подогнанных к физическим параметрам циркония, но с изменением отношения c/a - равным либо 1.580, либо 1.625, для исследования влияния коэффициента c/a на свойства точечных дефектов. Величина E_f^v составила 10.2 и 8.9 $kT_{пл}$, а энергия миграции была почти изотропной для обоих коэффициентов c/a . Из этих результатов следует два важных заключения. Во-первых, E_m^v несколько ниже в модели с низким c/a , так что энергия активации для самодиффузии, равна $(E_f^i + E_m^v)$, не зависит от c/a и равна 14.4 $kT_{пл}$. Во-вторых, было установлено, что стабильные и первые метастабильные конфигурации собственных межузельных атомов будут базисной октаэдрической и краудионной в модели с $c/a=1.580$, $E_f^i=19.0$ и $20kT_{пл}$, соответственно, однако при $c/a=1.625$, с $E_f^i =24.5$ и $25.3kT_{пл}$. стабильной конфигурацией становится краудион, а первой метастабильной – базисная октаэдрическая. Результаты компьютерного моделирования для СМА представлены в таблице 1.5.

Таблица 1.5

Свойства точечных дефектов в Zr, полученные компьютерным моделированием.
Энергия приведена в единицах kT_m . Термины «in» и «out» показывают миграцию в и из плоскости (0001)

Модель	c/a	E_f^e	E_m^v (i n)	E_m^v (ou t)	E_f^i	Положение	E_m^i (i n)	E_m^i (ou t)
Парный	1,633	8,7	6,6	6,0	21	BO	4,4	2,7

потенциал					22	C	2,7	1,6
Многомерный потенциал	1,633	-	-	-	25	C		
-	1,58	10,2	4,2	4,3	19	BO		
					20	C		
-	1,625	8,9	5,5	5,8	25	C		
					25	BO		

E_f^i располагается в интервале 3.7-4.6 eV для Zr, и прослеживается явное преимущество для базисных и базисных октаэдрических конфигураций при $c/a < 1.663$. Из моделей с $c/a \cong 1.663$ будет затруднительно предсказать, какая краудинная конфигурация будет преобладать в реальных металлах-базисная или не базисная. Результаты указывают на то, что и базисные и небазисные конфигурации СМА будут скорее всего стабильными в металлах с $c/a \leq$ идеальной величины. Базисная конфигурация обуславливает связывающую дисторсию, сконцентрированную в основном в своей собственной плоскости - одномерной для дефекта имеющего базисную гантелеобразную конфигурацию и двумерной для дефекта в базисной октаэдрической конфигурации. Небазисные конфигурации смещают ближайшие соседние атомы в направлении $\langle 2023 \rangle$, создавая трехмерный дефект.

Хотя миграция СМА была детально изучена только в двухпарно-потенциальных моделях, можно сказать, что размерность этого дефекта оказывает сильное влияние на его подвижность и вид миграции. Результаты для энергии миграции E_m^i , приведены в таблице 1.5. Несмотря на тот факт, что приведенные величины E_m^i , сильно отличаются, относительные величины в пределах одного метода указывают, что базисные октаэдрические конфигурации СМА обладают намного большей подвижностью для скачков в своей плоскости (0001), чем те которые распространяются на соседние плоскости. С другой стороны, межузлие, обладающее краудинной конфигурацией, должно обнаруживать обратное поведение или мигрировать изотропно.

Предполагается, что различие в поведении межузлий и вакансий в изучаемых металлах связано главным образом с изменением объема при введении соответствующего типа точечного дефекта, связанное с релаксацией окружающих атомов, т.е. с так называемым релаксационным объемом [53].

При введении точечного источника дилатации мощностью F_j в изотропное упругое тело с неограниченной поверхностью, изменение объема выражается следующим уравнением:

$$\Delta V_j = 4\pi r F_j \quad (1.12)$$

где Γ - фактор Эшелби, равный $\Gamma = 3 \left(\frac{1-\nu}{1+\nu} \right)$

ν - коэффициент Пуассона.

В таблице 1.6 представлены некоторые релаксационные объемы для различных металлических структур, определенные различными методами:

Видно, что релаксационные объемы для межузельных атомов в различных материалах с ГЦК решеткой имеют приблизительно одинаковые значения $V_i^{rel} = 1,6 \pm 0,3$ атомных объемов. Большие значения V_i^{rel} могут быть легко объяснены, исходя из модели твердых шаров при формировании плотноупакованной структуры. Объемы релаксации для вакансий малы при низких температурах, но очень сильно зависят от выбора межатомных потенциалов взаимодействия.

Таблица 1.6

Средние релаксационные объемы межузлий и вакансий [49]

Сингония , металл	V_i^{rel} (Ω)	V_v^{rel} (Ω)
ГЦК		
Cu	$1,55 \pm 0,20$	$- 0,25 \pm 0,05$
Al	1,9	- 0,05
Ni	1,8	- 0,2
Pt	1,8	- 0,2
ОЦК		
Mo	1,1	- 0,1
Fe	1,1	- 0,05
ГПУ		
Zn	3.5	-0.6
Co	1,5	--0.05
Zr	0.6	-0.05-0.18

Для ОЦК металлов (Mo, α -Fe) существует хорошее согласие в величине $V_i^{rel} = 1,0 \pm 0,2$ атомных объема, т.е. для межузлий они меньше, чем в ГЦК металлах, что связано с более рыхлой решеткой ОЦК сингонии.

Таким образом, собственные межузлия имеют большие релаксационные объемы и, следовательно, более высокую энергию образования. Соответственно, их энергия миграции мала, результатом чего является высокая подвижность даже при низких температурах.

Энергия образования вакансий обычно меньше, чем половина соответствующего значения для межузлий. Их энергия миграции, однако, значительно выше и, следовательно, они менее подвижны, чем собственные межузельные атомы.

Важнейшим следствием для эффектов радиационного повреждения является результат взаимодействия точечных дефектов с краевой дислокацией.

В случае поглощения точечного дефекта дислокацией их силовое взаимодействие в первом приближении описывается энергией взаимодействия [54]:

$$E = \frac{(1-\nu)\mu b}{3\pi(1+\nu)} \frac{\sin \theta}{R} \Delta V_{i,v} \quad (1.13)$$

где: p - гидростатическое поле напряжений дислокаций;

ν - коэффициент Пуассона;

ΔV_v - дилатационный объем точечного дефекта;

μ - модуль сдвига;

b – вектор Бюргерса.

R - расстояние до точечного дефекта

Поскольку дилатационный объем межузельного атома $\Delta V_i = 1-2$ атомных объемов, а для вакансии он составляет $\Delta V = - (0,25-0,5)$ атомных объемов [49], то из выражения (1.13) следует, что при прочих равных условиях межузельные атомы сильнее, чем вакансии, поглощаются дислокациями (рис. 1.19).

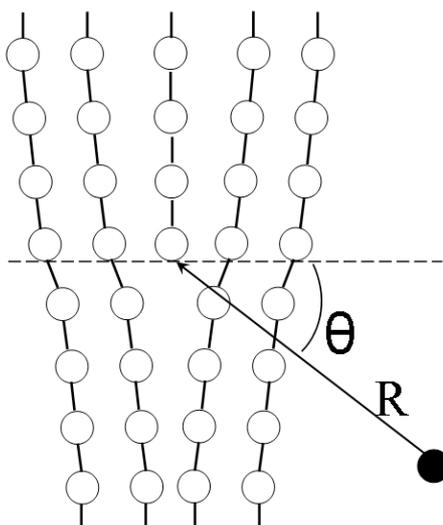


Рис.1.19. Схема взаимодействия краевой дислокации и точечного дефекта.

В процессе облучения имеют место реакции между различными типами дефектов, образованных в процессе облучения. Причина аннигиляции межузлия и вакансии определяется деформацией противоположных знаков, связанных с напряжениями, возникающими при их образовании. Эффекты, вносимые межузельным атомом, по абсолютной величине в несколько раз превышают вносимые вакансиями. Межузельный атом приводит к локальным искажениям кристаллической решетки в пределах не менее 5 координационных сфер. На рис. 1.20 представлены некоторые результаты возможных реакций между дефектами в металлах, облученных при высоких температурах [55].

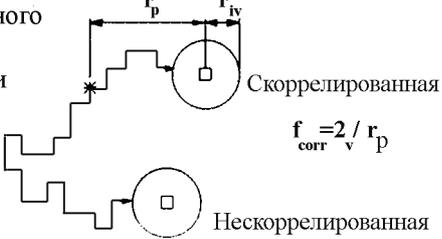
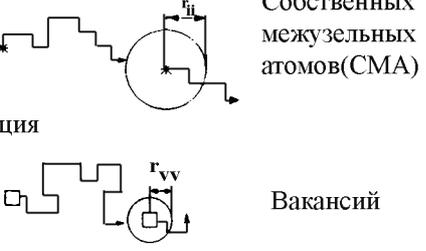
Взаимодействие	Результат
<p>Рекомбинация собственного межузельного атома и вакансии</p>  <p>Скоррелированная</p> $f_{\text{corr}} = 2 / r_p$ <p>Нескоррелированная</p>	 <p>(прямая рекомбинация)</p>
<p>Кластеризация</p>  <p>Собственных межузельных атомов(СМА)</p> <p>Вакансий</p>	<p>ди-межузлия три-межузлия</p> <p>дислокационные петли</p> <p>ди-вакансии три-вакансии</p> <p>дислокационные петли тетраэдры дефекта упаковки поры</p>
	

Рис. 1.20 Некоторые примеры взаимодействия дефектов в облучаемых материалах при высоких температурах. * – собственные межузельные атомы; □ – вакансии; r_p – начальное расстояние между СМА и вакансией непосредственно после их возникновения; радиус эффективного взаимодействия – r_{iv} между СМА и вакансией, r_{ii} между двумя СМА, r_{vv} между двумя вакансиями, r_{it} между СМА и атомом примеси, r_{id} между СМА и дислокацией и т. п.

Большая часть информации о реакциях между дефектами получена в экспериментах по отжигу (рис.1.21). Из пяти стадий отжига радиационных дефектов для рассмотрения технологически важных радиационных явлений процессов набухания материалов, радиационной ползучести и высокотемпературное радиационное охрупчивание [56] наибольший интерес представляет изучение реакций между дефектами на III и IV стадиях отжига, т.е. в температурном интервале $(0,2-0,4)T_{пл}$.

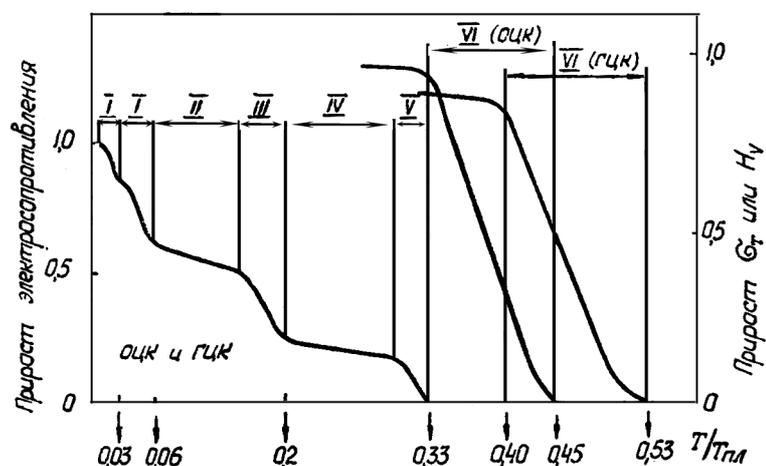
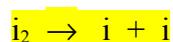


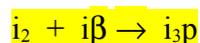
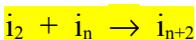
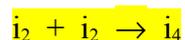
Рис. 1.21. Стадии отжига радиационных дефектов в облученном материале с ОЦК и ГЦК – структурой [56].

На стадии III предложены следующие механизмы отжига дефектов [56]:

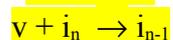
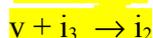
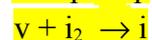
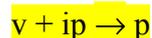
- диссоциация димежузлий и последующая их рекомбинация с вакансиями:



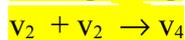
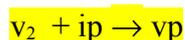
- миграция димежузлий и их объединение с другими дефектами:

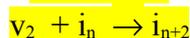
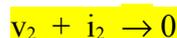


- миграция вакансий и их рекомбинация с выжившими после стадии II собственными атомами, захваченными примесными атомами, а также объединение движущихся вакансий с неподвижными комплексами:

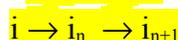


- миграция дивакансий и их объединение с неподвижными комплексами:

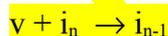
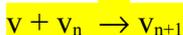
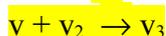
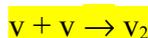




- миграция конфигураций межузельных атомов, неподвижных вплоть до стадии отжига III, их рекомбинация с вакансиями и объединение с неподвижными комплексами



Основное отличие стадии IV от всех предыдущих - активное участие в реакциях вакансий, образующих вакансионные комплексы. На этой стадии отжига мигрируют и участвуют в реакциях с идентичными и другими дефектами структуры вакансии, выжившие на предыдущих трех стадиях отжига



На стадии V отжига происходит отжиг скоплений и устанавливается состояние термодинамического равновесия. Образование комплексов растворенных атомов с точечными дефектами (вакансии - растворенный атом, межузлие - растворенный атом), образующимися в процессе облучения, оказывает значительное влияние на кинетику процессов радиационного повреждения сплавов.

Обнаружено, что важнейшим фактором, оказывающим влияние на характеристики таких комплексов, является атомный радиус растворенного элемента.

Установлено, что большинство примесных атомов в металлах являются эффективными ловушками для межузлий.

Подразмерные примеси формируют стабильные комплексы с межузлиями, которые термически не диссоциируют ниже температур, где вакансии становятся мобильными.

Количественное изменение свойств комплексов СМА-РА (где СМА – собственный межузельный атом, РА - растворенный атом) в ГЦК металлах может быть объяснено в простой модели Дедерихса [55], описывающей взаимодействие с решеткой потенциалом Морзе. В рамках этой модели возможно объяснение для увеличения межатомного расстояния решетки (надразмерные атомы) или ее сжатия (подразмерные атомы).

В окрестности как надразмерного, так и подразмерного растворенных атомов имеется определенное количество узлов решетки, где будут существовать гантели собственных атомов. Узлы, которые предпочтительны для подразмерных атомов, будут отталкивать надразмерные. Увеличение энергии происходит, когда один из двух собственных атомов решетки, формирующих гантель (100), заменяется подразмерным растворенным атомом, образуя так называемую смешанную гантель.

Для надразмерных примесных атомов имеет место уменьшение энергии и, следовательно, они остаются предпочтительно в положении замещения. Эти качественные аргументы хорошо совпадают с результатами, полученными при машинном моделировании.

На рис. 1.22. представлена типичная микроструктура аустенитной стали ЭИ-847, облученной тяжелыми ионами в низкотемпературной области (~ 100 °С). Доминирующей микроструктурной особенностью является высокая концентрация мелких кластеров "black dots". Средний размер этих кластеров дефектов не превышает 3 нм. Численные подсчеты, выполненные на сплавах Fe-Cr-Ni и чистых ГЦК металлах показали, что большинство кластеров типа "black dots" создаются прямо в каскадах смещения во время "отжига" каскада.

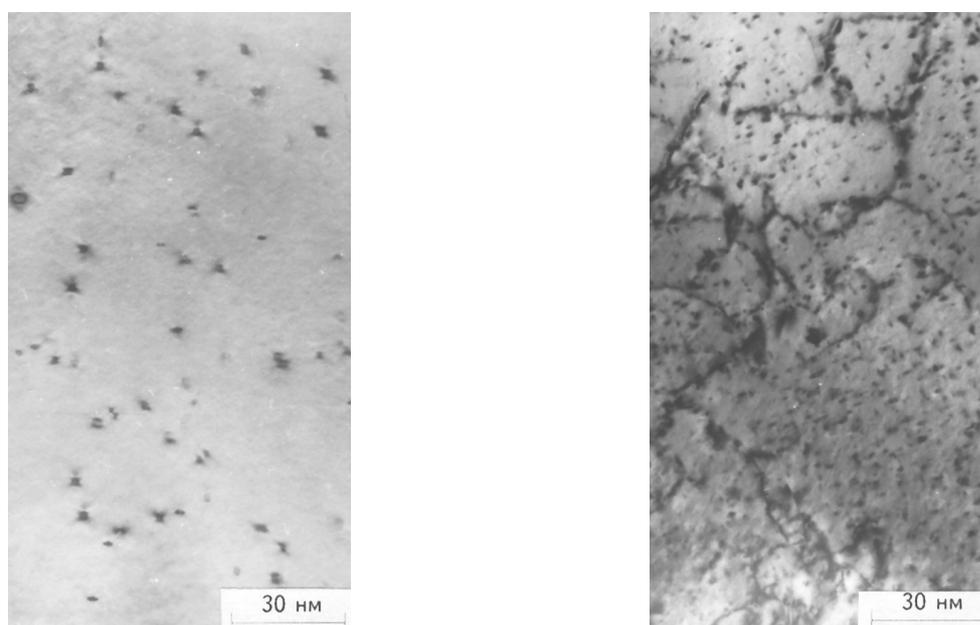


Рис. 1.22 Микроструктура стали ЭИ-847 (а) и Ni (б), облученных ионами Ni при комнатной температуре: а) $D=40$ сна; б) $D=20$ сна.

Суммарная плотность кластеров мелких дефектов сравнима с плотностями, наблюдаемыми в чистых ГЦК металлах аналогичной массы, таких как Ni или Cr. Однако, следует отметить, что часть от общего количества кластеров дефектов, тетраэдры дефектов упаковки в нержавеющей стали составляют менее 1%, в то время как в Ni и Cu в подобных условиях облучения концентрация тетраэдров дефектов упаковки значительно выше (от 25 до 50 %) [57]. Это подтверждает, что примеси в нержавеющей стали модифицируют поведение каскада во время закалки и подавляют образование тетраэдров дефектов.

1.4. Кинетика свободно мигрирующих дефектов

К основным микроструктурным изменениям в облученных металлах относятся - развитие поровой структуры, дислокационной сетки, распад твердого раствора, формирование

радиационно-индуцированных выделений. Эти эффекты проявляются при высоких температурах, когда подвижность точечных дефектов достаточно высока и зависят от длиннопробежной миграции точечных дефектов. Пути их миграции значительно превышают типичные размеры каскадов и вся эволюция микроструктуры полностью определяется диффузией свободномигрирующих дефектов и соответствующими их реакциями между собой и с имеющимися в решетке дефектами.

Классическим примером реакций между дефектами является реакция между подвижными дефектами и неподвижным дефектом (поры, дислокации, границы зерен, внешние поверхности), называемым стоком. Они обычно характеризуются феноменологическим радиусом реакции r_s , на котором концентрация подвижных дефектов спадает до нуля (рис.1.23) [5].

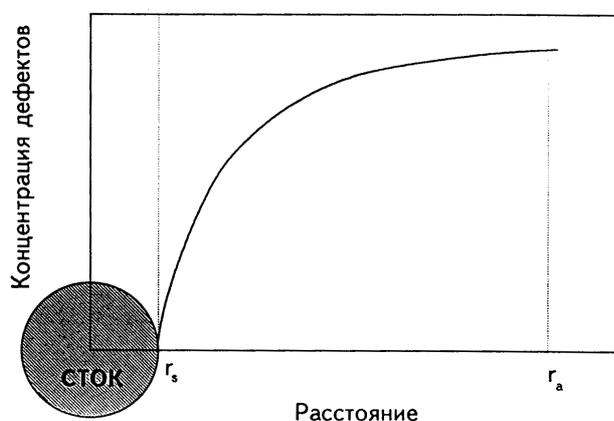


Рис. 1.23. Схема концентрационного профиля мобильного дефекта у сферического стока.

Для представляющего практический интерес случая многочисленных стоков и первоначальной гомогенной концентрации дефектов концентрационный профиль дефектов вокруг стока $C(r,t)$ определяется в соответствии с уравнением:

$$C(r,t) \approx C_0 g(r) \exp(-R_s t) \quad (1.14)$$

где r - расстояние от стока;

t - время;

C_0 - первоначальная гомогенная концентрация дефектов;

$g(r)$ - стационарная форма концентрационного профиля;

R_s - постоянная скорости процесса.

В общем случае стационарная форма концентрационного профиля $g(R)$ и константа скорости R зависят от геометрии стока и граничных условий. Скорость исчезновения дефектов на различных типах стоков пропорциональна коэффициентам диффузии соответствующих дефектов D , посчитанные значения для основных видов стоков приведены в таблице 1.7

Постоянные скорости рекомбинации точечных дефектов на стоках [5].

Тип стока	Постоянная скорости R_s / s^{-1}
Сфера радиуса r_s	$4\pi r_s C_s D / \Omega$
Цилиндр радиуса r_s	$2\pi \Delta D / \ln(r_a / r_s)$
Поверхность плоскости пластины (шириной равной $2L$)	$2D / L$

В связи с тем, что технологически важные изменения структурных материалов наблюдаются в течение длительного высокотемпературного облучения, то этот интервал очень велик по сравнению со временем релаксации точечных дефектов.

Следовательно, кинетика свободно мигрирующих дефектов может быть описана в адиабатическом приближении для квазистационарного состояния, т.е. только медленно меняющаяся субструктура стоков точечных дефектов определяет временную зависимость концентрации точечных дефектов. Действительно, это квазистационарное состояние для концентраций C_v и C_i свободномигрирующих вакансий и межузлий (которые главным образом и определяют любой перенос массы) может быть рассчитано из уравнений скоростной теории.

Широкое распространение в кинетической теории радиационного повреждения [58] получил метод скоростей химических реакций. Основным его удобством является гомогенизация стоков точечных дефектов по объему кристалла, позволяющая отказаться от математических сложностей при решении диффузионных задач с граничными условиями. В настоящее время этот метод стал более физическим по природе, чем химическим.

Основными реакциями точечных дефектов в чистых металлах, определяющими среднюю концентрацию межузлий и вакансий, являются следующие:



где v , i , s - вакансия, межузельный атом и сток, соответственно

Условия баланса, описывающие изменения концентрации свободных межузельных атомов и вакансий в процессе облучения, в скоростной теории представляются следующим образом:

$$\begin{aligned} K_i^2 + K_i - K_i^2 D_i C_i - \alpha C_i C_v &= \frac{\partial C_i}{\partial t} \\ K_v^2 + K_v - K_v^2 D_v C_v - \alpha C_i C_v &= \frac{\partial C_v}{\partial t} \end{aligned} \quad (1.17)$$

$K_i = K$ - скорость создания нескоррелированных межузельных атомов;

$K_v = (1 - \epsilon)$ - скорость создания нескоррелированных вакансий;

C_v , C_i - концентрации вакансий и межузлий, соответственно;

D_v - коэффициент диффузии вакансий;

α - коэффициент рекомбинации.

$$\alpha = 4\pi v_{i,v} (D_i + D_v) / \Omega, \quad D_{i,v} = D_{i,v} \exp(-E_{i,v}^m / kT) \quad (1.18)$$

где $D_{i,v}$ - коэффициенты диффузии межузельных атомов и вакансий;

$E_{i,v}^m$ - энергии миграции межузельных атомов и вакансий;

k - постоянная Больцмана;

T - абсолютная температура;

K_v^2, K_i^2 - мощности фиксированных стоков для вакансий и межузлий.

В скоростной теории вопросом особой важности является подсчет общей мощности стоков.

Для межузельных атомов

$$K_i^2 = K_i^2 \text{ пор} + K_0^2 \text{ пет.дисл} + K_i^2 \text{ м.п.} + K_i^2 \text{ в.п.} + K_i^2 \text{ дисл.сет.} + K_i^2 \text{ гр.зерен} \quad (1.19)$$

Для вакансий

$$K_v^2 = K_v^2 \text{ пор} + K_v^2 \text{ м.п.} + K_v^2 \text{ в.п.} + K_v^2 \text{ дисл.сет.} + K_v^2 \text{ гр.зерен} \quad (1.20)$$

Расписывая мощности каждого стока, получаем

а) для вакансионных пор

$$K_{i\text{пор}}^2 = 4\pi r_{\text{п}} C_{\text{п}} [1 + K_i r_{\text{п}}] \quad (1.21)$$

$$K_{v\text{пор}}^2 = 4\pi r_{\text{п}} C_{\text{п}} [1 + K_v r_{\text{п}}] \quad (1.22)$$

где: $r_{\text{п}}$ - средний радиус поры;

$C_{\text{п}}$ - объемная концентрация пор.

Скорость эмиссии вакансий из пор определяется как

$$K_{v\text{п}} = K_v^2 D_v C_v \exp\left[\left(\frac{2\gamma}{r_{\text{п}}} - P\right) \frac{\Omega}{kT}\right] \quad (1.23)$$

где C_v - равновесная концентрация вакансий при температуре T ;

γ - поверхностная энергия поры;

P - давление газа в поре.

б) для дислокаций :

Мощность стоков различных видов дислокаций может быть представлена в следующей форме:

межузельные петли

$$K_{i \text{ м.п.}}^2 = Z_i \rho_{\text{м.п.}} \quad (1.24)$$

$$K_{v \text{ м.п.}}^2 = Z_v \rho_{\text{м.п.}} \quad (1.25)$$

где Z_i, Z_v - мощность дислокационных стоков для межузлий и вакансий.

В данном случае $\rho_{\text{м.п.}} = 4\pi N_{\text{м.п.}} r_{\text{м.п.}}$

вакансионные петли:

$$K_{i \text{ в.п.}}^2 = Z_i \rho_{\text{в.п.}} \quad (1.26)$$

$$K_{v \text{ в.п.}}^2 = Z_v \rho_{\text{в.п.}} \quad (1.27)$$

Здесь $\rho_{\text{в.п.}} = 2 \pi N_{\text{в.п.}} r_{\text{в.п.}}$

В некоторых моделях скоростной теории дислокационная сетка считается особым стоком с мощностью:

$$\begin{aligned} K_I^2 \text{дисл.сет.} &= Z_I \rho_d = 2\pi / \ln(r_\infty / r_{di}) L \\ K_V^2 \text{дисл.сет.} &= Z_V \rho_d = 2\pi / \ln(r_\infty / r_{dv}) L \end{aligned} \quad (1.28), (1.29)$$

Скорость эмиссии вакансий из дислокаций различных типов такова:

$$\begin{aligned} K_V \text{м.п.} &= K_V^2 \text{м.п.} D_V C_V^e \exp \left[-\frac{(\gamma_{д.у.} + F_{м.п.}) b^2}{kT} \right] \\ K_V \text{в.п.} &= K_V^2 \text{в.п.} D_V C_V^e \exp \left[-\frac{(\gamma_{д.у.} + F_{в.п.}) b^2}{kT} \right] \end{aligned} \quad (1.30), (1.31)$$

$$K_V \text{лин.дисл.} = K_V^2 \text{лин.дисл.} D_V C_V^e \quad (1.32)$$

где $\gamma_{д.у.}$ - энергия дефекта упаковки;

F - сила на единицу длины параметра межузельной (м.п.) или вакансионной (в.п.) петли;

$$F = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial r} (E_{упр.вз.}) \quad (1.33)$$

b - вектор Бюргерса дислокационной петли.

б) для границ зерен:

Суммарная мощность стоков в зерне определяется таким образом:

$$K^2 = K_{\text{монокр.}}^2 + K_{\text{гр.зерен}}^2 \quad (1.34)$$

где $(K_{\text{гр.зерен}})^2 = 2L/d^2$

d - диаметр зерна, L - длина границ зерен

(индексы "i" или "v" добавляются, когда необходимо).

Доля потерь межузлий и вакансий на атом в каждом зерне равна соответственно

$$D_i C_i K_i^2 \text{ гр.зерен} \text{ и } \{D_v C_v K_v^2 \text{ гр.зерен} - K_v \text{ гр.зерен}\} \quad (1.35)$$

Эффективность некогерентных выделений как стоков точечных дефектов оценивается приблизительно равной эффективности вакансионных пор.

Из уравнений баланса следуют два основных механизма аннигиляции: взаимной рекомбинации или абсорбции на фиксированных стоках [5]

$$\text{где:} \quad D_V C_V = D_I C_I = \begin{cases} K\Omega / (4\pi r_s C_s), \\ KD_V \Omega / (4\pi r_{I,V})^{1/2}, \end{cases} \quad (1.36)$$

$A \ll 1$ адсорбция на стоках;

$A \gg 1$ взаимная рекомбинация.

где:

$$A = \frac{4K_\alpha}{K_i^2 K_V^2 C_s^2} \quad (1.37)$$

C_s - суммарная концентрация всех стоков в облучаемом материале;

$r_{i,v}$ - радиус рекомбинации, который в общем случае равен параметру решетки a .

1.5. Эффекты трансмутации

В радиационном повреждении материалов участвуют два процесса - обратимый процесс смещений и образования кластеров дефектов, и необратимый процесс трансмутации элементов исходного материала в ядерных реакциях.

В последнее время становится все более очевидным, что при исследовании радиационной повреждаемости материалов самое пристальное внимание должно быть уделено пониманию различия в спектральных условиях, особенно в ситуациях, где трансмутация оказывает значительное влияние [59].

Скорость генерации ядер трансмутантов и элементов радиационной микроструктуры определяется произведением сечения на плотность потока нейтронов. Поэтому уровень генерации элементов – трансмутантов будет сравним (или превышает) концентрацию отдельных элементов радиационной микроструктуры и может оказывать влияние на параметры и эволюцию последней.

Характер эволюции элементов радиационной микроструктуры (размер, концентрация, подвижность и т.д.) зависит от объемного размерного фактора генерированных элементов и их физико-химических особенностей и установлен экспериментально, а также при моделировании методом молекулярной динамики.

Постоянно образуемые (в процессе эксплуатации) в ядерных реакциях трансмутации атомы элементов:

- изменяют заранее созданный баланс атомов различных элементов в сплаве;
- влияют на процесс конкуренции за наиболее важные элементы при образовании двух или нескольких фаз, одновременно;
- служат катализаторами или ингибиторами твердотельных химических реакций при образовании новых фаз из выбитых атомов сплава в процессе свободной миграции (“free migration”), понижая или повышая их энергетический барьер;
- дестабилизируют образованные до облучения в процессе термообработки обработки фазы выделений процессом своего образования, чем влияют на величину свободной энергии системы;
- образуют твердый раствор внедрения из элементов трансмутантов, не участвующих в образовании выделений.

В нержавеющей сталях различного состава генерируются, в основном, элементы легирующих добавок с различным объемным фактором $\pm 10\%$, и только при наличии ванадия в сплаве происходит генерация Ti и Sc с объемным размерным фактором с +25,8% до +52,4% (Ti) и 120,5% (Sc). В сплавах циркония образуется молибден с величиной объемного размерного фактора -34,4% Y (+44,8%), Sc (+142,6%). Однако сечения реакции трансмутации позволяют

получить количества ядер – трансмутантов $\sim 100 \div 1000$ аррм только в случае длительной эксплуатации, поэтому основными элементами, влияющими на эволюцию радиационной микроструктуры на первых этапах эксплуатации являются подрамерные примеси Si, P, S и элементы – продукты их трансмутации, входящие в единую генеалогическую схему рис. 1.24 [60].

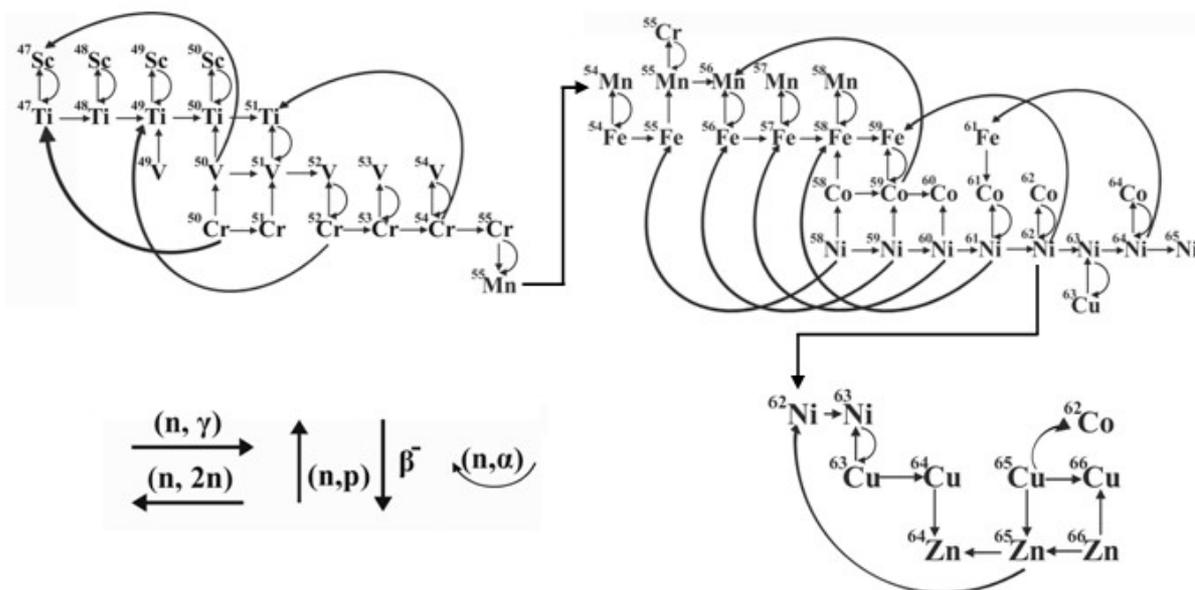
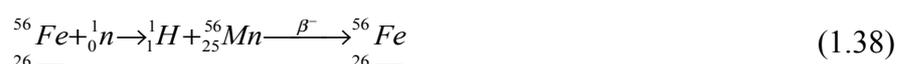


Рис. 1.24. Схема радиационных превращений элементов и изотопов входящих в состав нержавеющей стали X18Ni10Ti в ядерных реакциях трансмутации в потоке нейтронов реактора ВВЭР-1000.

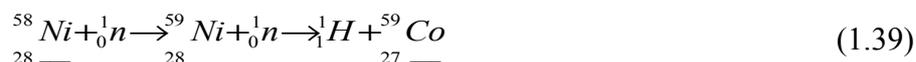
Вопрос о генерации газообразных трансмутантов - гелия и водорода, в сталях внутрикорпусных устройств реакторов деления рассматривается уже давно в связи с их влиянием на процессы вакансионного распухания и охрупчивания, установленных на уровне корреляционных зависимостей этих явлений от концентрации их образования. Считалось, что высокая подвижность атомов водорода и невозможность его удержания в сталях будет мало влиять на эти процессы. Что касается гелия, то его нерастворимость в сталях и очень низкий коэффициент диффузии не давали возможность определить механизмы его влияния. И только при высоких температурах, где диффузия гелия заметна была обнаружена его способность к миграции (по-видимому, по вакансионному механизму) и созданию газовых выделений, приводящих к высокотемпературному охрупчиванию сталей.

Особенностью генерации водорода быстрыми нейтронами ($E_n > 0,1 \text{ МэВ}$) в сталях различного состава является его непрерывное образование в реакциях (n, p) , не приводящих к изменению элементарного состава, так как атомы - продукты этой реакции - короткоживущие радиоактивные изотопы, β^- -распад которых приводит к исходному материнскому изотопу



Присутствие никеля в сталях значительно увеличивает в них уровни генерации водорода в двухступенчатой реакции с образованием промежуточного радиоактивного изотопа

^{59}Ni ($T_{\frac{1}{2}} = 7,5 \cdot 10^4$ лет). Это приводит к некоторой задержке его поступления в сталь из никеля. Изотоп ^{59}Ni имеет высокое сечение реакции (n, p) в условиях активной зоны реакторов с водой под давлением ($\sigma_p = 2,0 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$) и высокое значение резонансного интеграла ($I_p = 4,22 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$)



Необходимо отметить, что после первой ежегодной остановки реактора на перезагрузку топлива в сталях реактора образуется равновесная концентрация долгоживущего изотопа ^{59}Ni ($\approx 70 \text{ аррм}$). По сути, после первой перезагрузки топлива стали внутри корпусные устройства (ВКУ) будут легированы ранее отсутствующим изотопом ^{59}Ni , что при дальнейшей эксплуатации реактора приводит к непосредственному участию этого изотопа в прямой реакции генерации водорода.



что увеличивает уровень генерации водорода в дальнейшем на $\approx 30\%$ (сталь X18H10T).

Особенностью реакторов с водой под давлением (ВВЭР, PWR, BWR), является регулирование режима их работы при помощи выгорающего поглотителя тепловых и резонансных нейтронов – изотопа ^{10}B , вводимого в теплоноситель/замедлитель первого контура охлаждения в виде борной кислоты H_3BO_3 ($9,0 \div 13,5$ г/кг H_2O) захват теплового нейтрона приводит к рождению атома гелия



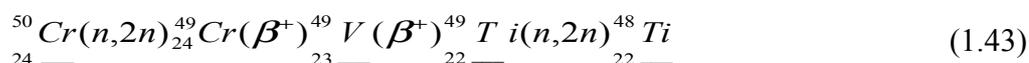
с кинетической энергией $\approx 1,8 \text{ МэВ}$, что позволяет ему имплантироваться в материал внутрикорпусных устройств на глубину до ≈ 40 микрон от поверхности и создавать в этом слое высокую концентрацию (~ 1000 аррм He/год).

В термоядерных реакторах синтеза Т (d,n) He энергетический спектр нейтронов более жесткий, большую часть потока нейтронов составляют нейтроны с энергией 14 МэВ . При такой высокой энергии на всех изотопах элементов сталей преобладают реакции (n, 2n) и практически исчезают реакции радиационного захвата, сечения которых пропорциональны $(\sqrt{E_n})^{-1}$. Это обстоятельство изменяет направление эволюции элементного состава сталей на противоположное по сравнению с аналогичной радиационной эволюцией сталей в активных зонах реакторов деления.

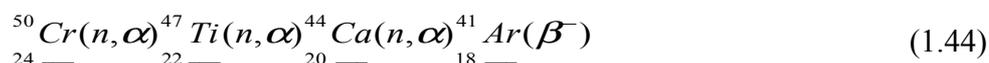
Трансмутация элементов сталей тепловыми нейтронами в реакциях (n, γ), имеющих высокие сечения в реакторах деления, увеличивает концентрацию более тяжелых изотопов и приводит к образованию следующих по номеру в периодической системе элементов, например:



и так далее. В термоядерном реакторе реакция $(n, 2n)$ приводит к обратному направлению эволюции элементного состава сталей, образуя более легкие изотопы и элементы с меньшим номером в периодической системе



В спектре нейтронов термоядерного реактора сечение реакций образования водорода и гелия на ~ 2 порядка величины выше, чем в реакторах деления достигая значений более $100 \cdot 10^{-27} \text{см}^2$ (водород) и более $40 \times 10 \cdot 10^{-27} \text{см}^2$ (гелий), что приводит к участию этих реакций в эволюции элементного состава облучаемого материала и возрастанию ~ 2 порядка уровня их генерации, достигая для водорода концентрации $\sim 1000 \text{ аppm}$ Н/год. Этот уровень значительно возрастает, если сталь содержит никель ($\sigma_{\text{np}} = 374 \cdot 10^{-27} \text{см}^2$). Генерация газообразных атомов гелия приводит к уменьшению номера элемента-продукта в периодической системе на 2 единицы



Уровень генерации гелия в результате этих реакций достигает $200 \div 300 \text{ аppm}$ He/год [61].

В энергетических ядерных технологиях следующего поколения (generation IV) в электроядерных системах для генерации нейтронов используются ускорители заряженных частиц (электронов или протонов) на энергию от 100 до 1000 МэВ. Энергетический спектр нейтронов простирается до энергий 100 и более МэВ и сечения ядерных реакций трансмутации $(n, 2n)$, (n, p) и (n, α) возрастают, в связи с чем возрастает скорость трансмутационного изменения элементного состава сталей и уровень трансмутационного образования газообразных трансмутантов.

Облучение не только изменяет первоначальную структуру материала, но также изменяет композицию твердого раствора как результат взаимодействия потоков точечных дефектов и атомов твердого раствора.

В аустенитных нержавеющей сталях нейтральные и преференциальные стоки обогащаются Ni, Si, P, нейтральные и преференциальные стоки обедняются Cr, Mo, Nb, Ti (большой атомный радиус). Распад гомогенного твердого раствора в облученном материале приводит к двум важным взаимосвязанным результатам:

1) перераспределение элементов и локальное изменение матричной композиции;

2) образование и рост новых выделений вторых фаз и модификация композиции фаз, существовавших перед облучением.

Вакансионный поток противоположен движению атомов, а межузельный совпадает с движением атомов.

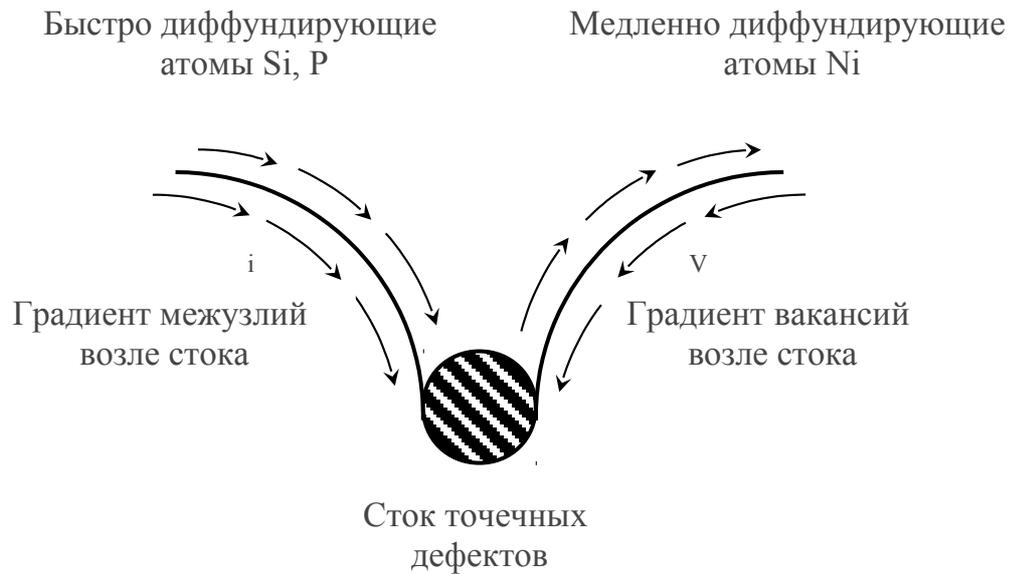


Рис.13

Обратный эффект Киркендала

$$\frac{J_A^i}{J_B^i} = \frac{D_A^i C_A}{D_B^i C_B} \quad (12)$$

C – концентрация

A, B – компоненты

D – коэффициент диффузии

Поток атомов раствора → поток вакансий

$$\frac{J_A^v}{J_B^v} = \frac{D_A^v C_A}{D_B^v C_B} \quad (13)$$

Поток вакансий и межузлий → поток атомов раствора

$$J_v = J_A^v + J_B^v$$

Если коэффициенты диффузии элементов A, B не равны между собой, то область вблизи стоков обедняется быстро диффундирующими компонентами и обогащается медленно диффундирующим компонентом – *вакансионный механизм*. Для радиационных межузельных атомов стоки будут обогащаться быстро диффундирующим элементом.

Прямой эффект Киркендала: когда в необлученном материале под воздействием нагрузки поток атомов раствора инициирует поток вакансий.

Обратный эффект – поток V и i инициирует поток атомов твердого раствора.

Сегрегационные процессы в ферритных сталях определяются главным образом поведением Cr .

Надразмерные атомы (больше атома матрицы) сегрегируют аналогично своему поведению в аустенитной стали.

Радиационное распухание – это, в отличие от радиационной ползучести, объемное изменение геометрических размеров облученного материала и оно связано

с междоузельной компонентой радиационного повреждения, которые избежали аннигиляцию с вакансиями, находящимися в скоплениях, в частности полостях (могут и в кластерах и дислокационных петлях). Поэтому вакансионные полости это не причина распухания, а свидетельство того, что эквивалентная им часть междоузельных дефектов сохранилась и материально участвует в радиационном распухании. Из автореферата не ясно, оценивалась ли корреляция между количеством вакансий в полостях и междоузельных атомов в дислокационных петлях, а также между относительным объемом полостей и величиной изменения плотности облученного материала? Это важно для прояснения не только механизма распухания, но и методов борьбы с ним.