

## Зарождение дислокационных междузельных петель в металлах при электронном облучении

Ю. М. Платов

Предложена комбинированная модель зарождения дислокационных междузельных петель в металлах при электронном облучении, основанная на кинетическом диффузионном механизме образования и роста трехмерных скоплений междузельных атомов и термодинамическом скачкообразном механизме их превращения в дислокационные петли. Установлено, что существует критическая скорость введения свободно-мигрирующих точечных дефектов  $G_c$ . Когда скорость введения свободно-мигрирующих точечных дефектов  $G < G_c$  на стадии зарождения образуются петли минимального размера, состоящие из четырех междузельных атомов. При  $G \geq G_c$  число междузельных атомов  $n_0 \geq 4$  увеличивается с ростом  $G$ . При анализе соответствующих экспериментальных данных по электронному облучению алюминия показано, что по формулам, полученным в рамках предложенной модели, при заданной скорости введения свободно-мигрирующих точечных дефектов, можно численно оценить все параметры процесса зарождения дислокационных междузельных петель не проводя соответствующих экспериментальных исследований.

**Ключевые слова:** модель зарождения дислокационных междузельных петель, металлы, электронное облучение, механизмы.

Combine model of nucleation of interstitial dislocation loops in metals during electron irradiation is suggested. The model is based on the kinetics diffusion mechanism of formation and growth of interstitial clusters and thermodynamic jumping mechanism of their transformation into dislocation loops. It is established, that critical point defect introduction rate  $G_c$  exists. When  $G < G_c$  dislocation loops formed at the nucleation stage contain  $n_0 = 4$  interstitials. When  $G \geq G_c$  dislocation loops contain  $n_0 \geq 4$  interstitials. Number interstitials in loops  $n_0$  when  $G > G_c$  increase with growth  $G$ . During analysis of corresponding experimental data on electron irradiated Al is shown that numerical values of the loop nucleation parameters can be estimated with use of the formulae obtained in the frame of the suggested model without doing corresponding experiments.

**Key words:** nucleation of interstitial dislocation loops, metals, electron irradiation, mechanisms.

### Введение

Исследования механизмов зарождения и роста дислокационных междузельных петель в металлических материалах актуальны для радиационной физики металлов и радиационного материаловедения. Эти процессы в значительной степени контролируют кинетику радиационного упрочнения и охрупчивания, а также фазовую нестабильность облученных металлов, сталей и сплавов [1–3].

В работе [4] была разработана кинетическая модель зарождения и роста дислокационных междузельных петель в металлах при электронном облу-

чении. Общая формула, описывающая зарождение и рост петель в рамках этой модели, имеет вид:

$$C_i^l = C_0 + atnb(t - \tau_n), \quad (1)$$

$C_i^l$  — суммарная концентрация междузельных атомов в петлях за время облучения  $t$ ,  $C_0$  — суммарная концентрация междузельных атомов в дислокационных петлях образованных за время их зарождения  $\tau_n$ . Параметры  $a$  и  $b$  равны:

$$a = \left[ \frac{G(1 + K_d / K_v)}{K_v} \right]^{1/2}, \quad (2)$$

$$b = \left[ \frac{GK_v}{(1 + K_d / K_v)} \right]^{1/2}, \quad (3)$$

где  $G$  — скорость введения свободно-мигрирующих междоузельных атомов и вакансий,  $K_v$  и  $K_d$  — константы реакций образования и диссоциации дивакансий.

Параметр  $a$  равен суммарной концентрации междоузельных атомов в дислокационных петлях  $C_{is}^l$  и вакансий в матрице  $C_{vs}^m$  при насыщении, а параметр  $b$  — скорости поглощения точечных дефектов петлями при насыщении. Насыщение достигается при дозах облучения, когда потоки междоузельных атомов и вакансий на петли становятся равными.

В соответствии с формулами (2) и (3) скорость введения свободно-мигрирующих точечных дефектов равна:

$$G = ab. \quad (4)$$

В явном виде  $G$  равно [5]:

$$G = G_0 P = \sigma_d v I \exp(-\bar{E}_B / kT). \quad (5)$$

В формуле (5)  $G_0 = \sigma_d v I$  — скорость введения коррелированных пар Френкеля. Спонтанно эти пары не аннигилируют,  $\sigma_d$  — сечение первичных атомных смещений, образующих эти коррелированные пары,  $v$  — число вторичных атомных смещений, которые также образуют такие коррелированные пары,  $I$  — интенсивность облучения,  $P = \exp(-\bar{E}_B / kT)$  — вероятность диссоциации коррелированных пар,  $\bar{E}_B$  — средняя энергия связи междоузельных атомов и вакансий в коррелированных парах Френкеля.

Формула (1) фактически включает в себя два различных механизма эволюции структуры междоузельных атомов. Второй член правой части этой формулы описывает процесс роста дислокационных петель. Справедливость данного механизма и его параметров неоднократно подтверждена при анализе экспериментов по облучению V, Ti, Al и его твердых растворов Al – Zn, Al – Sc и Al – Mg электронами с энергией 1 и 2,2 МэВ при температурах 293 – 343 К [1 – 9]. Вместе с тем, корректный механизм зарождения петель, определяющий концентрацию  $C_0$  и  $\tau_n$  в формуле (1) и другие его параметры, в настоящее время не разработаны.

В данной статье предложена комбинированная модель зарождения петель. На ее основе анализируются экспериментальные данные по зарождению дислокационных междоузельных петель в алюминии, облученном электронами с энергией 1 МэВ в интервале температур 293 – 343 К. Результаты анализа сравниваются с теоретическими расчетами кристал-

лической структуры трехмерных комплексов междоузельных атомов и дислокационных петель в ГЦК решетке в зависимости от числа междоузельных атомов в этих скоплениях [10]. Обсуждается относительная стабильность этих образований.

Прежде чем перейти к непосредственному изложению этих результатов необходимо отметить следующее:

1. При выводе формулы (1) на основе решения соответствующей системы дифференциальных уравнений, в работах [4, 5] было принято, что эффективность поглощения петель свободно-мигрирующих междоузельных атомов  $f(n)$  является линейной функцией от суммарного числа междоузельных атомов  $n$ :  $f(n) = n$ . Эта закономерность впервые была установлена в работе [7] на основе анализа распределения дислокационных петель по размерам в алюминии, облученном в высоковольтном микроскопе, по формуле для дисперсии этого распределения, полученной в этой же работе. Аналитические выражения для дисперсии при различных  $f(n)$  выведены из формул для размерных распределений дислокационных петель, полученных в работах [7, 11] при решении уравнений типа Фоккера – Планка.

Следует отметить, что за исключением наших исследований, в других известных работах [12, 13] для петель  $f(n)$  принимается равной  $f(n) = n^{1/2}$  в предположении, что захват свободно-мигрирующих точечных дефектов осуществляется междоузельными атомами, локализованными на периметре петли. Между тем, аналогичный дисперсионный анализ распределения петель по размерам в облученном электронами алюминии показал [7], что для этого варианта результат анализа отрицателен. В наглядном виде для того, чтобы  $f(n)$  была равна  $f(n) = n^{1/2}$ , траектория миграции точечного дефекта при подходе к петле должна, в точности, заканчиваться на ее периметре, что, очевидно, маловероятно.

Необходимо также отметить, что эффективность поглощения точечных дефектов их трехмерными скоплениями  $f(n) = n^{1/3}$ .

Эффективности поглощения свободно-мигрирующих междоузельных атомов и вакансий скоплениями дефектов и дислокационными петлями  $f(n)$  являются одними из основных параметров механизмов их зарождения и роста. При неправильной интерпретации  $f(n)$ , механизмы, разработанные на их основе, некорректны.

2. При дифференцировании формулы (1) получаем, что скорость введения свободно-мигрирующих точечных дефектов  $G$ , одновременно является и начальной скоростью роста суммарной концентрации междоузельных атомов в дислокационных петлях

на стадии их роста при постоянной плотности петель  $\rho_l$ :

$$\left. \frac{dC_i^l}{dt} \right|_0 = ab = G. \quad (6)$$

**Теоретический анализ процесса зарождения дислокационных междуузельных петель**

Процесс зарождения дислокационных петель начинается с образования комплексов из двух междуузельных атомов в гантельной конфигурации. Для скорости изменения концентрации свободно-мигрирующих междуузельных атомов  $C_i$  имеем:

$$\frac{dC_i}{dt} = G - 2K_i C_i^2. \quad (7)$$

Член  $2K_i C_i^2$  в уравнении (7) представляет собой скорость накопления суммарной концентрации междуузельных атомов  $C_{i2}$  в их комплексах из двух междуузельных атомов концентрации  $C_2$ :  $C_{i2} = 2C_2$ .

Для скорости изменения концентрации  $C_{i2}$  имеем:

$$\frac{dC_{i2}}{dt} = 2K_i C_i^2. \quad (8)$$

Ее решение:

$$C_{i2} = 2C_2 = 2K_i C_i^2 \tau_2, \quad (9)$$

где  $K_i$  — константа реакции образования комплексов из двух междуузельных атомов,  $\tau_2$  — время зарождения этих комплексов.

Поскольку диффузионная подвижность междуузельных атомов очень высока и их динамическая концентрация  $C_i$  устанавливается быстро, для представления решения (9) в более наглядной форме, можно использовать квазистационарное приближение:

$$\frac{dC_i}{dt} = 0 \text{ и } 2K_i C_i^2 = G. \quad (10)$$

Отсюда:

$$C_{i2} = 2C_2 = G\tau_2, \quad (11)$$

$$\text{где } \tau_2 = \frac{2C_2}{G}. \quad (12)$$

При дальнейшем облучении суммарная концентрация междуузельных атомов в комплексах ( $n$ ) увеличивается только за счет их роста. При этом концентрация комплексов  $C_2$  остается постоянной, так как эффективность поглощения свободно-

мигрирующих междуузельных атомов комплексами из  $n > 2$  междуузельных атомов  $f(n)$  больше, чем эффективность реакции образования комплексов из двух междуузельных атомов для которой  $f(n) = 1$ .

Соответствующая последовательность роста суммарной концентрации междуузельных атомов в комплексах имеет вид:

$$C_{i2} \rightarrow C_{i3} \rightarrow C_{i4} \rightarrow \dots \rightarrow C_{in}. \quad (13)$$

Скорость изменения суммарной концентрации междуузельных атомов в комплексах из трех междуузельных атомов равна:

$$\frac{dC_{i3}}{dt} = K_i f(n) C_2 C_i = \frac{dC_2 f(n)}{dt}, \quad (14)$$

где  $f(n) = 2$ .

Для трехмерных комплексов ( $n \geq 3$ ):

$$\frac{dC_{in}}{dt} = K_i f(n) C_2 C_i = \frac{dC_2 f(n)}{dt} = \frac{dC_2 n^{1/3}}{dt}, \quad (15)$$

где  $f(n) = n^{1/3}$ , как уже отмечалось ранее. При определенном числе междуузельных атомов в трехмерных скоплениях  $n_0$  они превращаются в двумерные скопления — дислокационные петли. Соответствующая реакция имеет вид:

$$\frac{dC_2 N_0 n_0^{1/3}}{dt} \rightarrow \frac{d\rho_l n_0}{dt}, \quad (16)$$

где  $\rho_l$  — плотность петель, а  $N_0$  — число атомов в единице объема. Для Al  $N_0 = 6,1 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ .

Согласно теории [14], переход между различными кристаллическими модификациями совершается путем фазового перехода при котором происходит скачкообразная перестройка кристаллической решетки, что очевидно, справедливо и в рассматриваемом случае превращения трехмерных скоплений междуузельных атомов в двумерные — дислокационные петли. При этом скачкообразно изменяется форма скоплений, эффективность поглощения ими свободно-мигрирующих междуузельных атомов  $f(n)$ : от  $f(n) = n^{1/3}$  до  $f(n) = n$ , и главный параметр — свободная энергия дефектной структуры  $F$ :

$$F = E - TS, \quad (17)$$

где  $E$  — внутренняя энергия,  $T$  — температура,  $S$  — энтропия.

В рамках рассматриваемой модели, левая часть выражения (16) представляет собой конечную скорость роста трехмерных комплексов перед ее спонтанным, бездиффузионным переходом в начальную скорость роста дислокационных междуузельных петель (правая часть выражения (16)), которая

согласно формуле (6), равна  $G$ . При этом, в виду спонтанности превращения комплексов в петли, время процесса зарождения  $\tau_n$  в точности равно времени начала их роста  $\tau_g$ . После интегрирования отмеченного выше равенства:

$$\frac{d\rho n_0}{dt} = N_0 G, \quad (18)$$

получим:

$$\rho n_0 = N_0 G \tau_n, \quad (19)$$

а

$$\tau_n = \tau_g = \frac{\rho n_0}{N_0 G}. \quad (20)$$

Число междоузельных атомов в петлях  $n_0$  на момент времени начала их роста равно:

$$n_0 = \frac{N_0 G \tau_n}{\rho_l}. \quad (21)$$

Из выражения (18) следует, что с момента времени облучения  $t \geq \tau_n$  свободно-мигрирующие междоузельные атомы поглощаются только дислокационными петлями.

При этом, петли растут при их постоянной плотности  $\rho_l$  со скоростью:

$$\frac{dC_i^l}{dt} = G \sec h^2 b (t - \tau_n). \quad (22)$$

Для стадии роста дислокационных петель  $\tau_n$  является инкубационным периодом.

С повышением скорости введения свободно-мигрирующих междоузельных атомов  $G$  величина  $n_0$  увеличивается и это закономерно: увеличение  $G$  стимулирует образование неупорядоченной, неравновесной структуры из трехмерных скоплений [1]. При этом фазовый переход кристаллической модификации трехмерных скоплений в петли должен происходить при более высоких значениях свободной энергии  $F$  в формуле (17) в результате увеличения  $E$  и уменьшения  $S$ .

В заключение следует отметить, что физическую основу предложенной модели составляют два механизма: кинетический диффузионный механизм

образования и роста трехмерных скоплений (выражения (7)–(15)) и термодинамический скачкообразный механизм их превращения в двумерные скопления — дислокационные петли (формулы (16), (17)).

### Результаты численных оценок параметров зарождения дислокационных петель и их обсуждение

В статье [5] приведены кинетические зависимости изменения суммарной концентрации междоузельных атомов в дислокационных петлях  $C_i^l$  в процессе электронного облучения алюминия в интервале температур 293–423 К, полученные в работе [9]. При их обработке в соответствии с зависимостью (1) с целью получения скорости введения дефектов  $G$  по формуле (4), использовались все экспериментальные точки зависимости  $C_i^l - t$ . При этом не было принято во внимание, что формула (1) справедлива для постоянной плотности петель  $\rho_l$  (до стадии их коагуляции). При температурах облучения 293 и 343 К  $\rho_l$  для всех доз облучения сохранялась постоянной, тогда как для температур 383 и 423 К после нескольких начальных доз облучения она начинала уменьшаться в результате коагуляции петель. В результате это привело к заниженным значениям  $G$  и энергии связи  $\bar{E}_B$ .

В настоящей работе этот недостаток устранен: при определении величин  $G$  для температур 383 и 423 К аппроксимация экспериментальных данных  $C_i^l - t$  в соответствии с формулой (1) проводилась только с использованием начальных экспериментальных точек, для которых  $\rho_l$  сохранялась постоянной. Скорректированные таким образом значения  $G$  приведены в таблице и на рис. 1.

Величина  $\sigma_d \nu$  в таблице оценивалась по формуле (5) с использованием значения  $\bar{E}_B = 0,17$  эВ, полученного из зависимости  $\ln G - 1/T$  на рис. 1. Время образования комплекса из двух междоузельных атомов — зародыша петли  $\tau_2$  оценивалось по формуле:

$$\tau_2 = \frac{2\rho_l}{N_0 G}, \quad (23)$$

в которой в соответствии с формулой (12)  $\rho_l = C_2 N_0$ .

Таблица

Параметры зарождения дислокационных междоузельных петель в алюминии чистотой 99,999%, облученном в интервале температур 293 – 423 К электронами с энергией 1 МэВ. Интенсивность облучения  $4,4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$

$T, \text{ К}$	$G, \text{ с}^{-1}$	$\sigma_d \nu, \text{ см}^2$	$\rho_l^e, \text{ см}^{-3}$	$n_0$	$\rho_l^e / n_0, \text{ см}^{-3}$	$\rho_l^i, \text{ см}^{-3}$	$\tau_2, \text{ с}$	$\tau_n, \text{ с}$	$\bar{E}_B, \text{ эВ}$	$E_i^m(\rho_l), \text{ эВ}$	$E_i^m(n_0), \text{ эВ}$
293	$3,5 \cdot 10^{-8}$	$9 \cdot 10^{-24}$	$5,2 \cdot 10^{14}$	4,0	$1,3 \cdot 10^{14}$	$4,6 \cdot 10^{14}$	0,49	1,0	0,17	0,090	0,091
343	$8,3 \cdot 10^{-8}$		$7,2 \cdot 10^{14}$	7,0	$1,0 \cdot 10^{14}$	$7,1 \cdot 10^{14}$	0,28	1,0			
383	$1,6 \cdot 10^{-7}$		$9,6 \cdot 10^{14}$	10,1	$9,6 \cdot 10^{14}$	$9,9 \cdot 10^{14}$	0,21	1,0			
423	$2,8 \cdot 10^{-7}$		$14,4 \cdot 10^{14}$	11,9	$1,2 \cdot 10^{14}$	$13 \cdot 10^{14}$	0,17	1,0			

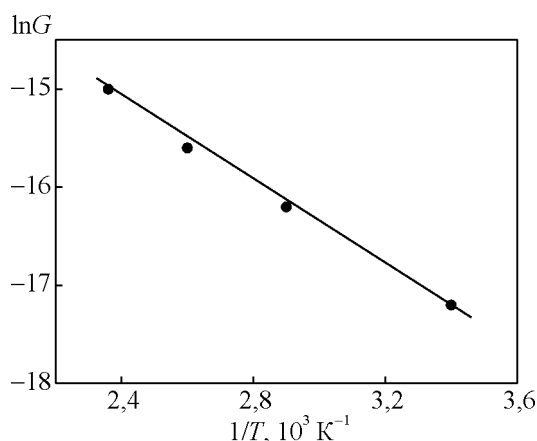


Рис. 1. Температурная зависимость скорости введения радиационных точечных дефектов  $G$  в алюминии.

Величина  $n_0$  в таблице оценивалась по формуле:

$$n_0 = \frac{N_0 G}{\rho_l} \quad (24)$$

С использованием величин  $G$  и  $\rho_l$ , приведенных в таблице эта формула для  $n_0$  дает точно такие же результаты как и формула (21), в которой  $\tau_n$  принято равным единице. В формулах (21) и (24) величины  $G$  и  $\rho_l$  независимо получены непосредственно из эксперимента при анализе микроструктуры облученного Al и кинетической зависимости  $C_i^l - t$ . Корректность оценок  $n_0$  по формулам (21) и (24) подтверждается их целочисленными значениями, поскольку число междоузельных атомов в дислокационных петлях не может, естественно, быть дробным. Отсюда следует, что  $\tau_n$  в формуле (21) действительно равно единице.

Из формулы (23), которая преобразована из формулы (12), в которой  $C_2$  заменено на  $C_2 = \rho_l/N_0$ , и формулы (24) имеем:

$$\tau_n = \frac{\tau_2 n_0}{2} \quad (25)$$

Эта формула дает значение  $\tau_n = 1,0$ , которое и приведено в таблице.

Независимость  $\tau_n$  от параметров облучения обусловлено тем, что изменения  $n_0$ ,  $G$  и  $\rho_l$  при изменении  $G$  и  $T$  взаимно компенсируют друг друга.

Процессы образования зародышей петель из двух междоузельных атомов и их последующий рост контролируются единым механизмом – механизмом миграции междоузельных атомов. На рис. 2а и б представлены зависимости:  $\ln \rho_l - 1/T$  и  $\ln n_0 - 1/T$ . Расчеты  $E_i^m$  с их использованием дали абсолютно одинаковые результаты:  $E_i^m(\rho_l) = 0,090$  эВ,  $E_i^m(n_0) = 0,091$  эВ (таблица).

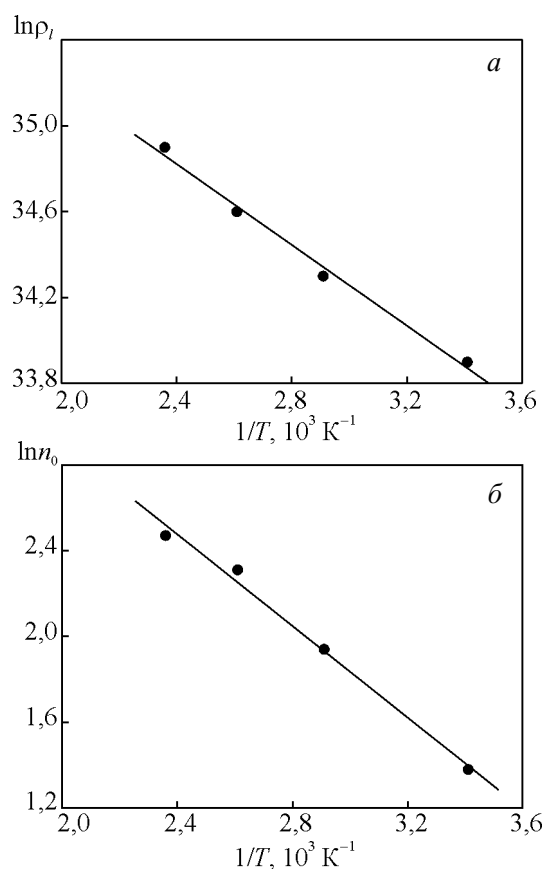


Рис. 2. Температурные зависимости: а –  $\rho_l$ , б –  $n_0$ , в облученном алюминии.

Величина  $\bar{E}_B$  представляет собой среднюю величину энергии связи междоузельный атом – вакансия в коррелированной паре Френкеля [5]. По нашим оценкам для алюминия она равна  $\bar{E}_B = 0,17$  эВ (таблица). Минимальная энергия связи между вакансией и междоузельным атомом в коррелированной паре Френкеля  $E_B^m$  равна  $E_B^m = \bar{E}_B/2 = 0,85$  эВ. Для того, чтобы междоузельный атом в образованной паре Френкеля был свободно-мигрирующим, а пара – некоррелированной, его энергия  $E_i^m$  должна быть больше  $E_B^m = \bar{E}_B/2$ .

По нашим результатам это условие выполняется:  $E_i^m > \bar{E}_B/2$ . Этот результат означает, что полученные значения  $E_i^m$  и  $E_i^m > \bar{E}_B/2$ .  $E_B^m$  взаимно корректны. Из таблицы следует, что величина  $\rho_l/n_0$  не зависит ни от температуры, ни от скорости введения точечных дефектов. Ее средняя величина равна  $A = \rho_l/n_0 = 1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ . Отсюда для  $n_0$  получаем:

$$n_0 = \frac{\rho_l}{A} = 1 \cdot 10^{-14} \rho_l \quad (26)$$

Подставляя (26) в формулу (21) и, проводя ее преобразования, окончательно имеем:

$$\rho_l^t = (N_0 A G \tau_n)^{1/2} = (A N_0 D_C)^{1/2}, \quad (27)$$

где  $\rho_l^t$  — теоретическая величина  $\rho_b$ ,  $D_C = G$  ( $\tau_n = 1$  с) — критическая доза облучения, соответствующая переходу от стадии зарождения петель к стадии их роста. Она численно равна скорости введения свободно-мигрирующих точечных дефектов.

Величина  $\rho_l^t$ , оцененная по формуле (27) приведена в таблице. В этой формуле, как и во всех последующих  $\tau_n = 1$  с, что доказано при анализе экспериментальных данных по формулам (20), (23).

Величина  $A = \rho_l/n_0 = 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-3</sup> представляет собой корректировочный фактор. По нашему мнению, с его использованием по формуле (27) определяется более реальная величина  $\rho_b$ , поскольку по методике ее оценки по экспериментальным данным ошибка может достигать 20%.

Важным следствием из предложенной модели является следующий результат: согласно расчетам [10] дислокационная петля минимального размера состоит из четырех междоузельных атомов в гантельной конфигурации  $\langle 001 \rangle$ . Из формул (21) и (27) максимальная критическая скорость введения точечных дефектов  $N_0 G_C$  при которой она образуется определяется как:

$$N_0 G_C = \frac{4\rho_l^t}{\tau_n} = 16 \frac{1 \cdot 10^{-14}}{\tau_n} = 1,6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}, \quad (28)$$

где  $G_C = 3,0 \cdot 10^{-8}$  с<sup>-1</sup>. По результатам расчета образования петли из четырех междоузельных атомов, приведенных в таблице скорость  $N_0 G = 1,8 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> или  $G = 3,5 \cdot 10^{-8}$  с<sup>-1</sup>

При более высоких скоростях введения точечных дефектов образуются петли с  $n_0 > 4$  междоузельных атомов, что полностью согласуется с результатами расчетов  $n_0$ , представленными в таблице. Из приведенных выше формул и численных оценок следует, что плотность петель при скоростях введения точечных дефектов  $N_0 G < N_0 G_C = 1,6 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup>с<sup>-1</sup> в соответствии с формулой (19) можно оценить как:

$$\rho_l^t = \frac{N_0 G \tau_n}{4}, \quad (29)$$

где  $\tau_n = 1$  с.

При  $N_0 G > N_0 G_C \rho_l^t$  определяется по формуле (27).

В заключение этого анализа еще раз подчеркнем, что установленный факт о существовании критической скорости введения свободно-мигрирующих точечных дефектов и соответствующие расчеты очень важны, так как подтверждают полную досто-

верность формул предложенной модели и результатов численных оценок ее параметров, приведенных по этим формулам. Экспериментальная зависимость  $n_0$  от  $G$  подтверждает теоретическую зависимость (21), согласно которой увеличение  $G$  стимулирует образование неравновесной структуры из трехмерных комплексов междоузельных атомов, что, в результате дает фазовый переход комплексы – дислокационные петли при более высоких значениях свободной энергии  $F$  (формула (17)):  $E$  увеличивается, а  $S$  уменьшается.

Используя формулы модели можно численно оценить все параметры зарождения петель при наличии только заданной скорости введения свободно-мигрирующих точечных дефектов  $G$ , не проводя соответствующих экспериментальных исследований.

Сопоставим далее полученные результаты с результатами теоретических расчетов при компьютерном моделировании кристаллических конфигураций трехмерных и двухмерных скоплений междоузельных атомов в ГЦК решетках Cu и Al [10]. В отличие от настоящей работы начальный период образования трехмерных комплексов междоузельных атомов (формула (12)) в работе [10] не рассматривается. В кристалл сразу вводится  $n_0$  междоузельных атомов  $\langle 001 \rangle$  (от  $n_0 = 2$  до  $n_0 = 37$ ) и моделируется диффузионный процесс образования их трехмерных и двухмерных конфигураций. Их наиболее стабильные структуры определяются на основе расчетов минимальных значений энергий их образования с использованием трех потенциалов межатомного взаимодействия: потенциала Морзе, модифицированного потенциала Морзе и потенциала, полученного при подгонке теоретических кривых дисперсии фононов к экспериментальным данным. В результате установлено, что для скоплений из  $\geq 10$ –13 междоузельных атомов, это дислокационные петли, состоящие из междоузельных атомов в гантельной конфигурации, локализованные в плоскостях  $\{111\}$ . Они более стабильны, чем трехмерные комплексы. Для скоплений  $< 9$   $n_0$  более стабильны трехмерные комплексы. Этот вывод нельзя считать достаточно обоснованным: в свободную энергию кристаллических модификаций (формула (17)) помимо энергии образования  $E$  входит и энтропийный член  $TS$ , который в расчетах [10] не учитывался. Дислокационные петли по сравнению с трехмерными скоплениями всегда являются более стабильными образованиями, так как для них, в соответствии с теорией необратимых процессов [15], энтропия  $S$  больше.

На рис. 3 приведены кристаллические конфигурации дислокационных петель из  $n_0 = 4$  междо-

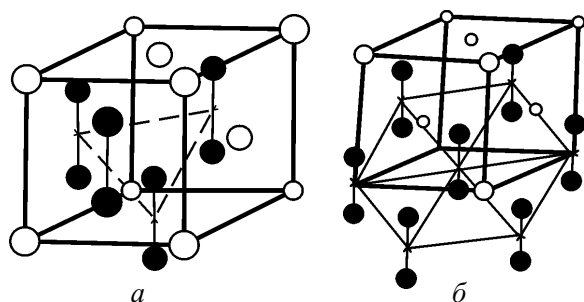


Рис. 3. Кристаллические конфигурации дислокационных междуузельных петель в ГЦК решетке [10]: *a* – дислокационная петля из 4 междуузельных атомов в гантельной конфигурации  $\langle 001 \rangle$  в плоскости  $(111)$ ; *b* – дислокационная петля из 7 междуузельных атомов в гантельной конфигурации  $\langle 001 \rangle$  в плоскости  $(111)$ .

узельных атомов и  $n_0 = 7$  междуузельных атомов [10]. Они соответствуют скоростям введения свободно-мигрирующих междуузельных атомов  $G$  при температурах 293 и 343 К в таблице.

Конфигурации петель из 10 и 12 междуузельных атомов для температур 383 и 423 К (таблица) по результатам расчетов [10] представляют собой дислокационные петли из междуузельных атомов в октаэдрической конфигурации, локализованные в плоскостях  $\{111\}$ .

В экспериментальных исследованиях, в том числе в наших работах по электронному облучению Al и его твердых растворов [1–7, 9, 11], дислокационные междуузельные петли наблюдали именно в плоскостях  $\{111\}$ .

Специально следует подчеркнуть, что модельные конфигурации петель в работе [10] и по форме и по числу междуузельных атомов  $n_0$  одинаковы для любых температур, то есть температура в расчетах [10] не фигурирует. Структура скоплений определяется только числом междуузельных атомов  $n_0$ . Этот результат согласуется и с представлениями предложенной комбинированной модели.

Согласно формулам (20) и (26) процесс зарождения петель непосредственно от температуры облучения не зависит ( $\tau_n$  в этих формулах от температуры облучения не зависит). Реально, процесс зарождения контролируется только скоростью введения свободно-мигрирующих междуузельных атомов  $G$ .

Как уже отмечалось, увеличение  $G$  стимулирует образование неравновесных дефектных структур. Трехмерные скопления междуузельных атомов по сравнению с дислокационными петлями таковыми и являются. При этом, как уже отмечалось, чем больше  $G$ , тем при больших величинах  $\rho_l$  и  $n_0$  осуществляется спонтанный переход трехмерных

скоплений в дислокационные петли согласно формулам (16) и (18). В данном случае температура облучения дает только вклад в скорость введения радиационных точечных дефектов  $G$  (формула (5)), величина которой и определяет спонтанный переход трехмерных скоплений междуузельных атомов в дислокационные петли. Температура облучения в таблице, в соответствии с формулой (5), именно такую функцию и выполняет.

Подтверждение этого положения: влияние изменения  $G$  в формуле (5) на параметры  $\rho_l$  и  $n_0$  только за счет изменения интенсивности облучения  $I$  при одной и той же температуре совершенно аналогично влиянию изменения температуры облучения при постоянной интенсивности  $I$ . При этом величины  $n_0$  в работе [10] полностью идентичны величинам  $n_0$  в формулах (21) и (24) комбинированной модели. Фактически они прямопропорциональны скорости введения свободно-мигрирующих точечных дефектов  $G$ , нормированной на плотность дислокационных петель  $\rho_l$ . При этом, как и в работе [10], мы получаем число междуузельных атомов  $n_0$  в одной петле.

Таким образом обе эти модели взаимно уточняют и дополняют друг друга и дают идентичные результаты в оценках числа междуузельных атомов при переходе процесса зарождения петель к процессу их роста в рамках предложенной комбинированной модели. Более того при равных  $n_0$  в обеих моделях структуры дислокационных петель также одинаковы и соответствуют кристаллическим конфигурациям петель, полученным в работе [10].

## Заключение

Предложена комбинированная модель зарождения дислокационных междуузельных петель в металлах при электронном облучении. Она основана на двух механизмах: кинетическом диффузионном механизме образования и роста трехмерных скоплений междуузельных атомов и термодинамическом скачкообразном механизме их превращения в дислокационные петли. Установлено, что скорость введения свободно-мигрирующих точечных дефектов играет главную роль в процессе зарождения дислокационных петель. Она входит во все формулы предложенной комбинированной модели. Корректность этих формул подтверждена результатами анализа зарождения петель в облученном алюминии и литературными данными компьютерного моделирования кристаллических конфигураций дислокационных петель в ГЦК решетке. Установлено, что существует критическая скорость введения свободно-мигрирующих точечных

дефектов  $G_C$ . При скоростях введения точечных дефектов  $G < G_C$  независимо от величины  $G$ , на стадии зарождения образуются только петли минимального размера, состоящие из четырех междоузельных атомов в гантельной конфигурации  $\langle 001 \rangle$ . При скоростях  $G > G_C$  с повышением  $G$  число междоузельных атомов в петлях увеличивается. При заданных значениях  $G$  с использованием этих формул для любых температур электронного облучения можно численно оценить величины всех параметров зарождения дислокационных междоузельных петель, не проводя соответствующих экспериментальных исследований.

Переход от процесса зарождения дислокационных междоузельных петель к процессу их роста в металлах при электронном облучении происходит при критической дозе, численно равной скорости введения свободно-мигрирующих точечных дефектов.

#### Литература

1. Иванов Л.И., Платов Ю.М. Радиационная физика металлов и ее приложения, М., Интерконтакт Наука, 2002, 300 с.
2. Платов Ю.М., Лазоренко В.М., Товтин В.И., Хасанов Ф.А. Кинетика радиационного упрочнения, обусловленная образованием дислокационных междоузельных петель в ванадии, алюминии и его бинарных сплавах при электронном облучении. Перспективные материалы, 2010, № 6, с. 37 – 40.
3. Платов Ю.М., Симаков С.В. Образование и рост скоплений точечных дефектов и нестабильность бинарных твердых растворов в условиях облучения. Физика металлов и материаловедение, 1986, т. 61, вып. 2, с. 213 – 217.
4. Лазоренко В.М., Платов Ю.М., Симаков С.В., Зарождение и рост дислокационных петель междоузельного типа в разбавленных сплавах на основе алюминия. Физика металлов и материаловедение, 1984, т. 58, вып. 5, с. 943 – 949.
5. Платов Ю.М. Механизм, контролирующий скорость введения свободно-мигрирующих междоузельных атомов в металлах, облученных электронами. Перспективные материалы, 2012, № 6, с. 213 – 217.
6. Platov Yu.M., Lazorenko V.M., Simakov S.V., Tovtin V.I., Ivanov V.V. Instability of solid solutions under irradiation. Mater. Sci. Forum., 1992, v. 97 – 99, p. 253 – 272.
7. Лазоренко В.М., Платов Ю.М., Плетнев М.Н. Исследование распределения междоузельных петель дислокаций по размерам в металлах, облучаемых в высоковольтном электронном микроскопе. Физика металлов и материаловедение, 1980, т. 50, вып. 1, с. 169 – 174.
8. Платов Ю.М., Лазоренко В.М., Товтин В.И., Хасанов Ф.А. Параметры гомогенного зарождения дислокационных междоузельных петель в электролитическом ванадии, облученном электронами с энергией 1 МэВ. Физика и химия обработки материалов, 2008, № 4, с. 18 – 25.
9. Платов Ю.М., Колотов В.П., Лазоренко В.М., Товтин В.И., Хасанов Ф.А. Зарождение и рост дислокационных междоузельных петель в облученном алюминии. Физика и химия обработки материалов, 2010, № 3, с. 15 – 18.
10. Ingle K.W., Perrin R. C., Schober, H.R. Interstitial cluster in FCC metals. J. Phys. F. Metal Phys., 1981, no. 11, p. 161 – 173.
11. Плетнев М.Н., Платов Ю.М. Образование и рост скоплений междоузельных атомов. Физика металлов и материаловедение, 1975, т. 40, вып. 2, с. 304 – 310.
12. Russell K.C., Powell R.W. Dislocation loops nucleation in irradiated metals. Acta Metallurgica, 1973, v. 21, p. 187 – 193.
13. Ghoniem N. M., Stochastic theory of diffusional planar-atomic clustering and its application to dislocation loops. Phys. Review B., 1989, v. 36, no. 16, p. 11810 – 11819.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. М.: Наука, 1964, 567 с.
15. Ghoniem N.M., Kulcinski G.L. The use of the fully dynamic rate theory for predict void growth in metals. Radiation Effects, 1979, v. 41, p. 81 – 89.
16. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. М.: Издательство иностранной литературы, 1960, 127 с.

Статья поступила в редакцию 11.07.2013 г.

*Платов Юрий Михайлович — Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник. Специалист в области воздействия излучений на металлические материалы и радиационного материаловедения. E-mail: platov@imet.ac.ru.*