

Влияние внешних напряжений на эффективность дислокационных стоков в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах

А. Б. Сивак, П. А. Сивак, В. А. Романов, В. М. Чернов

Для ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллов при температуре 293 К методом кинетического Монте-Карло (КМК) рассчитаны эффективности линейных стоков для собственных точечных дефектов (СТД), упруго взаимодействующих (дислокации) и не взаимодействующих с такими стоками плотностью $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, в зависимости от типа и величины приложенной к кристаллам механической нагрузки (до 200 МПа) и типов линейных стоков. Для дислокационных стоков (ДС) рассмотрены полные дислокации в системах скольжения $[111](1\bar{1}0)$, $[111](11\bar{2})$, $[100](001)$, $[100](011)$ для Fe и V и $[100](001)$ для Cu. Для не взаимодействующих линейных стоков (НЛС) их направления соответствуют ДС. Взаимодействие СТД с внутренними (дислокационными) и внешними полями напряжений рассчитано в рамках анизотропной линейной теории упругости. Относительные изменения под действием приложенной нагрузки для эффективностей разных сонаправленных линейных стоков (взаимодействующих и не взаимодействующих с СТД) примерно одинаковы при небольшой нагрузке. Рассчитаны скорости радиационной ползучести в рассматриваемых кристаллах при одноосных нагрузках в стационарном режиме образования пар Френкеля. Скорости ползучести сильно зависят от направлений нагружения и векторов Бюргерса дислокаций в Fe и V и практически не зависят от них в Cu. При одинаковой скорости генерации пар Френкеля скорость радиационной ползучести, усредненная по всем направлениям нагружения, в ОЦК кристаллах (Fe, V), содержащих дислокации с вектором Бюргерса $a/2\langle 111 \rangle$, значительно больше, чем в ГЦК кристаллах (Cu).

Ключевые слова: эффективность дислокационных стоков, собственные точечные дефекты, диффузия, внешние напряжения, кинетический Монте-Карло.

Введение

В [1] были рассмотрены разные механизмы деформирования кристалла при радиационном воздействии под нагружением и продемонстрировано, что наибольшим по величине эффектом обладает анизотропия диффузии радиационных точечных дефектов, индуцированная приложенным напряжением. Из-за такой анизотропии диффузии дефектов возникает зависимость эффективностей дислокационных стоков (ДС) радиационных дефектов от приложенных внешних нагрузок, что приводит к перераспределению баланса потоков собственных межузельных атомов (СМА) и вакансий к различно ориентированным относительно внешней нагрузки

дислокациям и, как следствие, к переползанию дислокаций. Для определения скорости радиационного деформирования кристалла при заданном внешнем нагружении, обусловленной переползанием краевых дислокаций, необходимо знать зависимости эффективностей ДС радиационных дефектов от приложенных внешних нагрузок в рамках анизотропной диффузии СТД, что в [1] не было сделано.

При расчете данных зависимостей необходимо использовать методы и подходы, чувствительные к реальной симметрии кристаллов, так как данный механизм радиационного деформирования кристалла определяется анизотропными эффектами. Аналитическое решение для эффективностей ДС, взаимодействующих с собственными точечными дефектами

(СТД), отсутствует, а для его определения необходимо использовать численные методы.

Цель настоящей работы — определение зависимости эффективности ДС от приложенных внешних нагрузок для анизотропных ОЦК(Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллов методом кинетического Монте-Карло (КМК) [2, 3].

Для сравнения также будут вычислены эффективности линейных стоков для диффундирующих СТД, невзаимодействующих со стоками и поглощаемыми стоками при попадании на ядро такого стока, имеющего некоторый радиус поглощения (невзаимодействующие линейные стоки — НЛС). Направления, плотности и радиусы поглощения НЛС соответствуют взаимодействующим с СТД дислокационным стокам (ДС).

Взаимодействие СТД, рассматриваемых как упругие диполи, с дислокационными и внешними полями напряжений рассчитывается в рамках анизотропной линейной теории упругости [4, 5]. При этом использовали кристаллографическую систему координат (правая), добавление индексов “+” или “-” к обозначению величины означает, что она относится к СМА или вакансии, соответственно.

Компьютерная модель

Собственные точечные дефекты

Характеристики СТД (энергия образования и дипольный тензор СТД в основных и седловых конфигурациях) для ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллов, используемые для расчетов в настоящей работе, получены в [7, 8] методом молекулярной статистики. Хотя моделирование [9, 10] методом молекулярной динамики с использованием тех же потенциалов межатомного взаимодействия, что и в [7, 8], показало, что диффузия СМА и вакансий может осуществляться по разным механизмам, в данной работе при моделировании диффузии СТД КМК-методом учитывали только основные механизмы диффузии:

— для СМА — скачок $\langle 110 \rangle$ гантели в ближайший соседний узел с поворотом оси гантели на 60° для ОЦК кристаллов Fe и V, скачок $\langle 100 \rangle$ гантели в ближайший соседний узел с поворотом оси гантели на 90° для ГЦК кристалла Cu;

— для вакансий — перескок атома из узла решетки в ближайший вакантный узел.

ДС и НЛС

Для ОЦК кристаллов рассмотрены прямолинейные полные краевые (КД) и винтовые (ВД)

дислокации с векторами Бюргерса $a/2[111]$ и $a[100]$ (a — параметр решетки) в системах скольжения $[111](1\bar{1}0)$, $[111](112)$, $[100](001)$ и $[100](011)$.

Для ГЦК кристалла Cu рассмотрены прямолинейная полная КД с вектором Бюргерса $a/2[110]$ в системе скольжения $[110](001)$.

Рассмотрены также НЛС лежащие в кристаллографических направлениях $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$ в ОЦК и ГЦК кристаллах.

Внешние нагрузки

Для расчетов эффективностей стоков СТД рассмотрены шесть разных типов нагрузок: одна из шести независимых компонент тензора внешних напряжений полагается равной величине σ , остальные пять равны нулю. Для удобства далее соответствующий тип нагрузки будем обозначать отличной от нуля компонентой тензора напряжений, например, σ_{12} . Для ГЦК кристаллов рассчитывали все шесть типов нагрузок, для ОЦК — только три: σ_{12} , σ_{13} , σ_{23} , так как диагональные компоненты тензора напряжений, в силу особенностей симметрии ОЦК решетки (оси нагрузок σ_{11} , σ_{22} , σ_{33} лежат вдоль осей симметрии 4-го порядка) и механизмов диффузии (скачок СТД происходит вдоль оси симметрии 3-го порядка), не приводят к анизотропии диффузии СТД а, значит, и к изменению эффективности стока в ОЦК кристалле. Расчеты проводили для величин σ , равных ± 40 , ± 80 , ± 120 , ± 160 , ± 200 МПа.

Взаимодействие СТД со стоками и внешними полями напряжений

Энергия взаимодействия СТД в основных и седловых конфигурациях с дислокационными и внешними полями напряжений, рассчитывали в рамках анизотропной теории упругости [4, 5, 11]:

$$E^{\text{int}} = -P_{ij} S_{ijkl} (\sigma_{kl}^d + \sigma_{kl}), \quad (1)$$

где P_{ij} — дипольный тензор СТД, S_{ijkl} — тензор упругих податливостей, σ_{kl}^d и σ_{kl} — тензоры дислокационных и внешних полей напряжений, по повторяющимся индексам производится суммирование ($i, j, k, l = 1, 2, 3$). Использовались те же значения упругих постоянных (c_{11} , c_{12} , c_{44}) и параметра решетки, что и в [7, 8].

Сопоставление результатов расчетов энергий взаимодействия СТД с дислокационными и внешними полями напряжений, проведенных методами молекулярной статистики и анизотропной теории упругости, показало их хорошее согласие между собой [9, 12].

Эффективность стоков

Расчет эффективности стоков $\xi = k^2/\rho_d$, где k^2 — сила стока (k^{-1} — диффузионная длина для STD до поглощения на стоке), ρ_d — плотность ДС или НЛС, осуществляли КМК-методом, следуя [8, 9, 13].

В модельном кристаллите присутствует только один STD и один тип стока (в настоящей работе — ДС или НЛС заданного типа). Стартовые позиции STD задавали случайным образом в кристаллите. Модельный кристаллит представлял собой прямую призму бесконечной длины, в основании которой лежал квадрат с длиной стороны L . ДС или НЛС располагались в центре призмы. На боковые грани призмы накладывали периодические граничные условия: в случае, если STD покидал кристаллит, его возвращали обратно с противоположной стороны кристаллита. Таким образом, моделировали кристалл, содержащий квадратную сетку параллельных линейных стоков с расстояниями между ними L , что соответствует плотности стоков в кристалле L^{-2} . Величина L выбрана равной $200a$ и $160a$ для ОЦК и ГЦК кристаллов, соответственно. Следовательно, плотность стоков равна $\sim 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, что соответствует типичной величине дислокационной плотности в деформированных или облученных металлах. Траекторию STD рассчитывали до тех пор, пока STD не поглощался стоком (приближался на расстояние, меньшее r_0 к стоку). После этого в модельный кристаллит вводили новый STD того же типа. Эффективность стока ξ определяется выражением [8, 9, 13]:

$$\xi = \frac{2dL^2}{l^2 \langle N \rangle}, \tag{2}$$

где l — длина скачка, равная $a 3^{1/2}/2$ и $a 2^{1/2}/2$ в ОЦК и ГЦК решетках соответственно, $\langle N \rangle$ — среднее число скачков, совершенных STD до поглощения на стоке, $d = 3$ — размерность движения.

Для ОЦК кристаллов величина r_0 выбрана равной $3a$, так как радиус дислокационного ядра в Fe не превышает этой величины [9]. Для ГЦК кристаллов r_0 выбран равным $2,4a$, чтобы геометрически модель для ОЦК и ГЦК кристаллов была подобной, то есть, чтобы отношение L/r_0 не зависело от выбора материала. Некоторая неопределенность критерия выбора величины r_0 не оказывает значительного влияния на рассчитанные величины эффективностей ДС, так как полевое взаимодействие между STD и дислокациями вносит определяющий вклад в величину ξ [14].

Влияние расщепления полной дислокации на две частичные дислокации Шокли на эффективность ДС в Cu не учитывали [13].

Точность расчетов

Для получения статистически достоверных данных о влиянии нагружения на эффективность стока рассчитывали такое количество траекторий STD, чтобы статистическая погрешность результата не превышала 0,3% (доверительная вероятность принята равной 99 %). Такую точность обеспечило моделирование 10^6 траекторий STD. Поскольку в работе сравнивали относительные изменения эффективностей ДС и НЛС под воздействием нагружений, эффективности стоков в отсутствие нагружений были рассчитаны с еще большей точностью: 0,1% и 0,05% для ДС и НЛС, соответственно. В ряде случаев симметрия рассматриваемой задачи приводила к тому, что разные приложенные типы нагрузок приводили к одинаковому изменению эффективности стока. В таких случаях точность расчетов возрастала дополнительно.

Результаты

Эффективности стоков без приложенных внешних нагрузок

Рассчитанные КМК-методом эффективности ДС в ОЦК и ГЦК кристаллах в отсутствие внешних нагрузок рассчитаны в [8, 9, 13, 14]. Для НЛС результаты (табл. 1) определяются только симметрией кристалла (при рассматриваемых механизмах диффузии STD), так как энергия взаимодействия STD со стоком, определяющая специфику конкретного материала, равна нулю. Поэтому в табл. 1 результаты разделяются только по симметрии кристалла без указания конкретного материала.

Таблица 1

Эффективности НЛС в отсутствие внешних нагрузок, $\xi_0^\pm(0)$ (“+” для СМА, “-” для вакансий), в ОЦК и ГЦК кристаллах с плотностью линейных стоков $(200a)^{-2}$ и $(160a)^{-2}$, соответственно. Относительная погрешность менее 0,05%

Невзаимодействующий линейный сток	Эффективности НЛС в кристаллах			
	ОЦК		ГЦК	
	$\xi_0^+(0)$	$\xi_0^-(0)$	$\xi_0^+(0)$	$\xi_0^-(0)$
НЛС<100>	2,104	2,107	2,104	2,106
НЛС<110>	2,101	2,106	2,098	2,100
НЛС<111>	2,094	2,098	2,106	2,107
НЛС<112>	2,100	2,106	2,104	2,105

Влияние приложенных нагрузок на эффективность стоков

Влияние внешних нагружений на эффективность ДС и НЛС в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах было

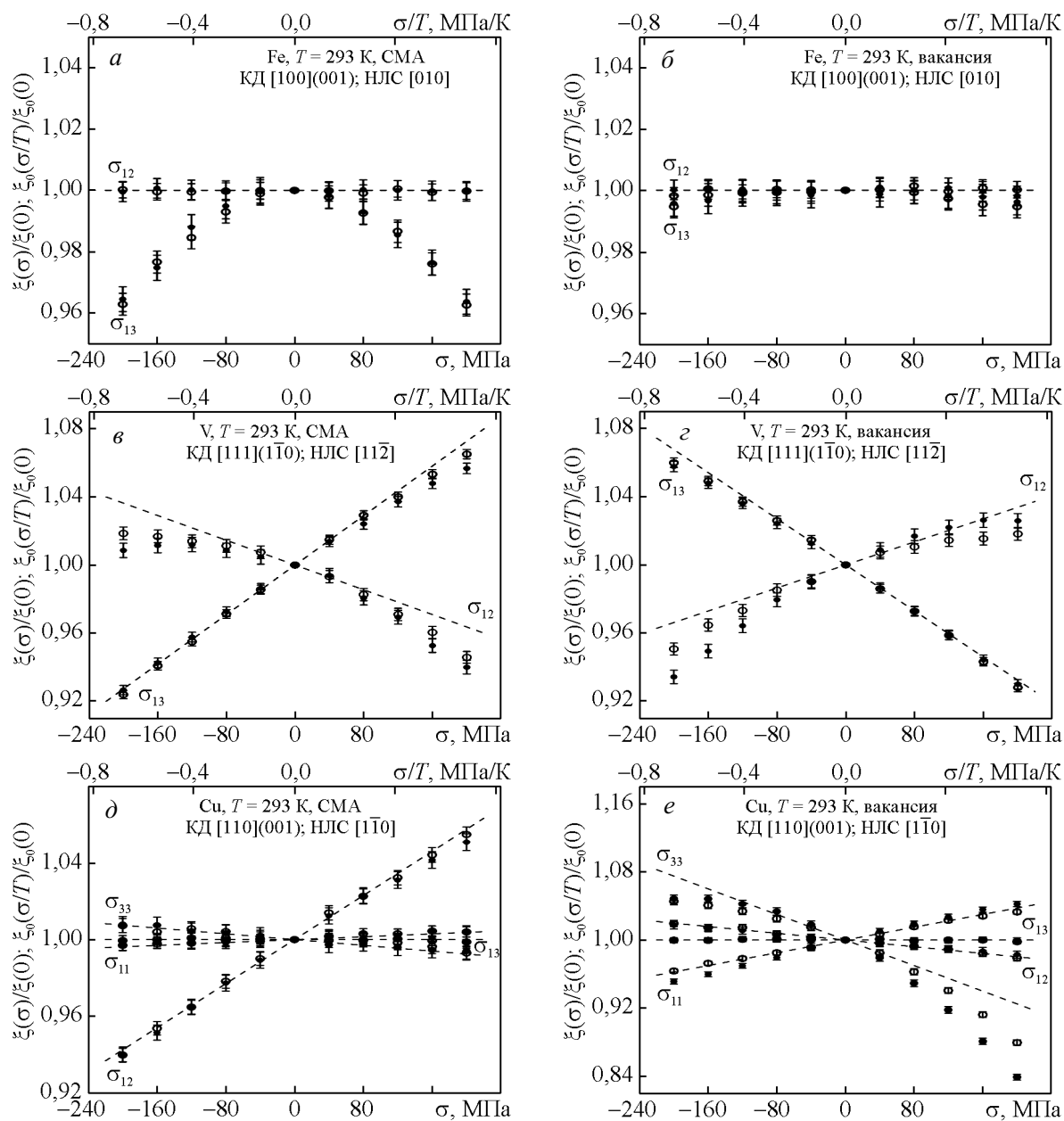


Рис. 1. Зависимости эффективностей ДС и НЛС от величины приложенной нагрузки σ для СМА (а, в, д) и вакансии (б, з, е): а, б – КД[100](001) и НЛС[010] соответственно в ОЦК кристалле Fe, в, з – КД[111](1 $\bar{1}$ 0) и НЛС [11 $\bar{2}$] соответственно в ОЦК кристалле V, д, е – КД[110](001) и НЛС [1 $\bar{1}$ 0] соответственно в ГЦК кристалле Cu при 293 К. Закрашенные и не покрашенные символы относятся к ДС и НЛС, соответственно. Пунктирные прямые – аналитическое решение Саралидзе [1, 6].

рассчитано для всех рассматриваемых в работе типов стоков и внешних нагружений. Поскольку полученные результаты многочисленны, на рис. 1 представлены типичные примеры рассчитанных зависимостей эффективностей стоков для рассматриваемых кристаллов. При используемых приближениях (частоты скачков СТД определяются зависи-

мостью аррениусовского типа, причем полагается, что предэкспоненциальный множитель не зависит от внешних полей напряжений [8, 9, 13]) эффективность НЛС зависит только от отношения величины нагрузки σ к абсолютной температуре T , поэтому на рис. 1 добавлена дополнительная ось абсцисс для параметра σ/T .

Там же для сравнения приведены результаты расчетов эффективностей НЛС с помощью аналитического решения Саралидзе [1, 6]:

$$\frac{\xi_0(\sigma_{ij})}{\xi_0(0)} = \frac{3D_{\perp}}{\text{Tr}D_{ij}}, \quad (3)$$

где $\xi_0(\sigma_{ij})$ — эффективность НЛС под действием внешнего поля напряжений σ_{ij} , $\xi_0(0)$ — эффективность НЛС в отсутствие внешнего поля напряжений, $\text{Tr}D_{ij}$ — след тензора диффузии СТД, D_{\perp} — средний коэффициент диффузии в плоскости, перпендикулярной направлению НЛС.

На рис. 1 рассмотрены типы нагружений, при которых не равна нулю только одна компонента тензора внешних напряжений σ_{ij} . Для рассматриваемых на рис. 1а, б стокв типы нагружений σ_{12} и σ_{23} кристаллографически эквивалентны, на рис. 1в, г — кристаллографически эквивалентны σ_{13} и σ_{23} , на рис. 1д, е — σ_{11} и σ_{22} , а также σ_{13} и σ_{23} .

В линейном приближении для указанных выше механизмов диффузии СМА (+) и вакансии (–) в ОЦК кристаллах влияние внешних напряжений на вид тензора D_{ij}^{\pm} можно записать в виде (по повторяющимся индексам нет суммирования):

$$\frac{3D_{ij}^{\pm}}{\text{Tr}D_{ij}^{\pm}} = \delta_{ij} + \frac{P^{\pm}\beta}{c_{44}}\sigma_{ij}(1-\delta_{ij}), \quad (4)$$

где δ_{ij} — символ Кронекера, $P^- = P_{12}^-$, $P^+ = (P_{12}^+ + P_{13}^+ + P_{23}^+)/3$, P_{ij}^{\pm} — дипольный тензор СТД в седловой конфигурации, отвечающей скачку в направлении [111], $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B — постоянная Больцмана.

Для ГЦК кристаллов аналогичное соотношение выглядит как (по повторяющимся индексам нет суммирования)

$$\begin{aligned} \frac{3D_{ij}^{\pm}}{\text{Tr}D_{ij}^{\pm}} = & \delta_{ij} + \frac{P_n^{\pm}\beta}{c_{44}}\sigma_{ij}(1-\delta_{ij}) + \\ & + \frac{P_d^{\pm}\beta}{c_{11}-c_{12}}\left(\sigma_{ij} - \frac{\text{Tr}\sigma_{ij}}{3}\right)\delta_{ij}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $P_n^{\pm} = P_{12}^{\pm}/2$, $P_d^+ = 9(P_{11}^+ - P_{33}^+)/16$, $P_d^- = (P_{11}^- - P_{33}^-)/2$, P_{ij}^{\pm} — дипольный тензор СТД в седловой конфигурации, отвечающей скачку в направлении [110].

Решение Саралидзе [1, 6] описывает эффективность НЛС с точностью не менее 1% при $|\sigma/T| \leq 0,34$ МПа/К (здесь σ — максимальная компонента тензора напряжений) для всех типов нагрузок и НЛС в рассматриваемых кристаллах Fe, V и Cu.

Сопоставление КМК-данных для эффективностей ДС и сонаправленных НЛС позволяет сделать вывод, что их относительные изменения под действием нагрузки примерно совпадают:

$$\frac{\xi(\sigma_{ij})}{\xi(0)} \approx \frac{\xi_0(\sigma_{ij})}{\xi_0(0)}. \quad (6)$$

Таким образом, для описания изменения эффективностей ДС также можно использовать решение Саралидзе. Диапазон его применимости несколько уже, чем для НЛС: точность не менее 1% при $|\sigma/T| \leq 0,27$ МПа/К при $T = 293$ К. При увеличении температуры диапазон применимости решения Саралидзе для ДС, определяемый величиной $|\sigma/T|$, стремится к диапазону применимости решения Саралидзе для НЛС. Так, при $T = 1000$ К решение Саралидзе применимо для ДС при $|\sigma| < \sim 300$ МПа, что покрывает рабочий диапазон внешних нагрузок для конструкционных материалов активных зон ядерных и термоядерных реакторов.

Эффективность ДС в ОЦК кристаллах не зависит от диагональных элементов тензора внешних напряжений, вследствие особенностей симметрии решетки и механизмов диффузии СТД.

Обсуждение

Полученные зависимости эффективности ДС от величин внешнего нагружения позволяют рассчитать скорость радиационной ползучести кристаллов, обусловленную переползанием краевых дислокаций.

Рассмотрим случай, когда облучение создает стационарные концентрации СМА и вакансий, намного превышающие равновесные концентрации. На рис. 2 представлены рассчитанные температурные зависимости стационарных концентраций радиационных и тепловых СТД.

Стационарные концентрации радиационных СТД рассчитывали в пренебрежении рекомбинацией как

$$C = \frac{G}{D\Omega\xi\rho_d}, \quad (7)$$

где $G = 10^{-7} \text{ c}^{-1}$ — скорость образования пар Френкеля (число пар Френкеля на атом в секунду), Ω — атомный объем, $\rho_d = 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, D — коэффициенты диффузии СТД (значения взяты из [9], [10] и [15] для Fe, V и Cu, соответственно), ξ — эффективность ДС (КД<111>{110} для Fe и V, КД<110>{001} для Cu). При указанных значениях параметров учет рекомбинации приводит к изменению значений C в пределах 5 % от рассчитанных с помощью (7) значений при $T \geq 400$ К.

Тепловую концентрацию СТД определяли по формуле

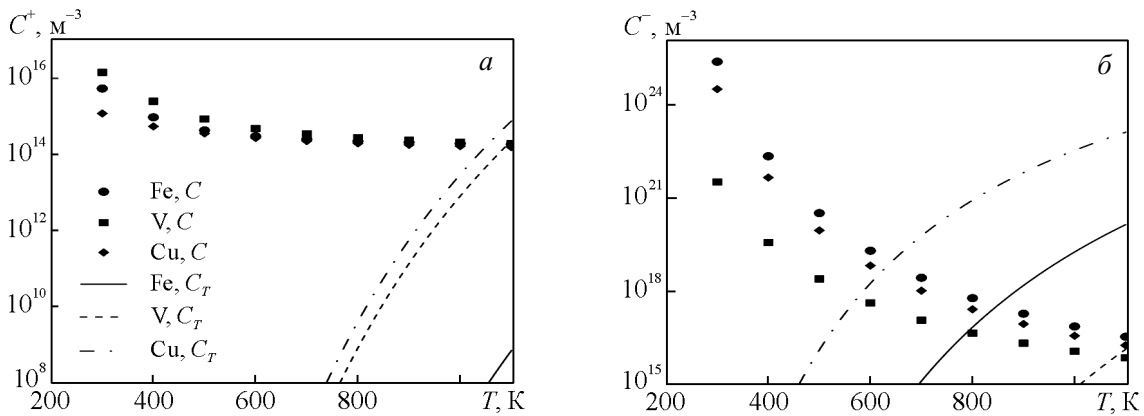


Рис. 2. Температурная зависимость стационарных концентраций тепловых C_T и радиационных C : а – СМА, б – вакансий в Fe, V и Cu при скорости образования пар Френкеля (на атом) 10^{-7} c^{-1} и дислокационной плотности $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$.

$$C_T = \exp(-E^F \beta), \quad (8)$$

где E^F — энергия образования СТД. Вклад энтропии образования СТД в тепловую концентрацию (дополнительный энтропийный множитель $\exp(S^F/k_B)$ в правой части (8)) не учитывали. Величина S^F/k_B для вакансий по разным оценкам лежит в основном в пределах от 0 до 4 [15 – 17], для СМА разброс шире: от –2 до 10 [15, 17 – 19], то есть реальные значения тепловой концентрации могут отличаться от приведенных на рисунке значений на два порядка для вакансий и четыре порядка для СМА.

Из рис. 2 видно, что при рассматриваемых условиях соотношение $C_T \ll C$ выполняется для СМА до 1000 К для Fe, V и Cu; для вакансий — до 600, 800 и 1000 К для Cu, Fe и V, соответственно.

Скорость деформирования кристалла в направлении вектора Бюргерса переползающих дислокаций семейства i [1]:

$$\dot{\epsilon}_i = \rho_{d,i} b_i v_i = \Omega \rho_{d,i} (I_i^+ - I_i^-), \quad (9)$$

где v_i — скорость переползания дислокаций i , I_i^\pm — потоки СТД на единицу длины дислокаций i :

$$I_i^\pm = \xi_i^\pm D^\pm C^\pm. \quad (10)$$

Если рекомбинация мала,

$$D^\pm C^\pm = G \left(\Omega \sum_{i=1}^n \xi_i^\pm \rho_{d,i} \right)^{-1}, \quad (11)$$

где n — число дислокационных семейств.

При отсутствии в кристалле текстуры ($\rho_{d,1} = \rho_{d,2} = \dots = \rho_{d,n} = \rho_d/n$), подстановка (10), (11) в (9) дает выражение для вклада семейства дислокаций i в скорость деформирования:

$$\dot{\epsilon}_i = \frac{G}{n} \left(\frac{\xi_i^+(\sigma)}{\xi_i^+(0)} - \frac{\xi_i^-(\sigma)}{\xi_i^-(0)} \right). \quad (12)$$

ОЦК кристаллы Fe и V

В случае если в кристалле содержатся только дислокации с $\mathbf{b} = a/2 \langle 111 \rangle$, использование (3) – (6), (12) дает для скоростей деформации в направлениях одноосных нагрузок $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ выражения

$$\dot{\epsilon}_{\langle 111 \rangle} = \frac{G\beta\sigma}{27} \frac{P^+ - P^-}{c_{44}},$$

$$\dot{\epsilon}_{\langle 110 \rangle} = \frac{G\beta\sigma}{36} \frac{P^+ - P^-}{c_{44}},$$

$$\dot{\epsilon}_{\langle 100 \rangle} = 0.$$

При одноосной нагрузке 100 МПа в направлении $\langle 111 \rangle$ и $T = 600 \text{ К}$, скорость ползучести в направлении нагрузки составит $3,6 \cdot 10^{-3} G$ и $3,8 \cdot 10^{-3} G$ для Fe и V, соответственно.

Если в кристалле содержатся только дислокации с $\mathbf{b} = a \langle 100 \rangle$, скорость радиационной ползучести будет равна нулю для любого типа внешних нагрузок.

ГЦК кристалл Cu

В случае если в кристалле содержатся только дислокации с $\mathbf{b} = a/2 \langle 110 \rangle$, использование (3) – (6), (12) дает для скоростей ползучести в направлениях одноосных нагрузок $\langle 111 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ выражения

$$\dot{\epsilon}_{\langle 111 \rangle} = \frac{G\beta\sigma}{36} \frac{P_n^+ - P_n^-}{c_{44}},$$

$$\dot{\epsilon}_{\langle 110 \rangle} = \frac{G\beta\sigma}{48} \left(\frac{P_n^+ - P_n^-}{c_{44}} + \frac{P_d^+ - P_d^-}{6(c_{11} - c_{12})} \right),$$

$$\dot{\epsilon}_{\langle 100 \rangle} = \frac{G\beta\sigma}{72} \frac{P_d^+ - P_d^-}{c_{11} - c_{12}}.$$

При одноосной нагрузке 100 МПа в направлениях $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ и $T = 600$ К, скорость ползучести в направлении нагрузки составит $1,1 \cdot 10^{-3}$ Г и $1,4 \cdot 10^{-3}$ Г соответственно: скорость ползучести слабо зависит от направления нагрузки в ГЦК кристалле Cu.

В среднем по всем направлениям нагружения, скорость ползучести в два раза меньше в ГЦК кристалле Cu, содержащем дислокации с $\mathbf{b} = a/2\langle 110 \rangle$, чем в ОЦК кристаллах Fe и V, содержащих дислокации с $\mathbf{b} = a/2\langle 111 \rangle$, при одинаковой скорости образования пар Френкеля.

Заключение

1. Методом КМК рассчитаны эффективности линейных стоков для радиационных точечных дефектов, взаимодействующих (дислокации) и не взаимодействующих с такими стоками при температуре 293 К в ОЦК (Fe, V) и ГЦК (Cu) кристаллах с плотностью стоков $\sim 3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ под воздействием внешних нагрузений различного типа и величины (до 200 МПа). Энергии взаимодействия СТД с внешними и дислокационными полями напряжений рассчитаны в рамках анизотропной линейной теории упругости.

2. Относительное изменение эффективностей дислокационных и не взаимодействующих линейных стоков под действием приложенной нагрузки совпадают при относительно небольших величинах нагрузки, что позволяет для описания влияния внешних нагрузок на эффективность дислокационных стоков использовать аналитическое решение (3) для НЛС, которое аккуратно описывает полученные расчетные данные в зависимости от температур и нагрузок в рассчитанных их интервалах.

3. ОЦК симметрия кристаллической решетки приводит к особенностям полученных зависимостей эффективностей стоков от приложенных нагрузок:

— эффективность дислокационных стоков не зависит от диагональных элементов тензора внешних напряжений;

— эффективность дислокационных стоков слабо зависит от любого типа внешних нагружений, если дислокации лежат вдоль направлений $\langle 100 \rangle$.

4. Получены оценки скоростей радиационной ползучести рассмотренных ОЦК и ГЦК кристаллов

вследствие переползания краевых дислокаций (дислокации равномерно распределены по всем возможным системам скольжения) при стационарной скорости создания пар Френкеля для некоторых частных случаев и показано:

— внутри кристаллографического класса численные результаты для скорости радиационной ползучести для разных ОЦК материалов (Fe и V) слабо различаются;

— в ОЦК кристалле, содержащем только дислокации с $\mathbf{b} = a\langle 100 \rangle$, скорость ползучести равна нулю при любом типе внешних нагрузок;

— скорость ползучести сильно зависит от направления одноосного нагружения в ОЦК (Fe, V) кристаллах (например, равна нулю при одноосной нагрузке в направлении $\langle 100 \rangle$) и практически не зависит в ГЦК кристалле (Cu);

— усредненная по всем направлениям нагружения, скорость ползучести в два раза меньше в ГЦК кристалле (Cu), содержащем дислокации с $\mathbf{b} = a/2\langle 110 \rangle$, чем в ОЦК кристаллах (Fe и V), содержащих дислокации с $\mathbf{b} = a/2\langle 111 \rangle$.

Литература

1. Saralidze Z.K., Indenbom V.L. Dislocations in irradiated crystals. In: Elastic strain fields and dislocation mobility. Eds. Indenbom V.L. and Lothe J. Amsterdam: Elsevier, 1992, 778 p.
2. Domain C., Becquart C.S., Malerba L. Simulation of radiation damage in Fe alloys: an object kinetic Monte Carlo approach. J. Nucl. Mater., 2004, v. 335, p. 121 – 145.
3. Caturla M.J., Diaz de la Rubia T., Fluss M. Modeling microstructure evolution of f.c.c. metals under irradiation in the presence of He. J. Nucl. Mater., 2003, v. 323, p. 163 – 168.
4. Hirth J.P., Lothe J. Theory of Dislocations. New York: Wiley, 1982, 857 p.
5. Kröner E. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. Arch. Rational Mech. Anal., 1959/60, v. 4, p. 273 – 334.
6. Саралидзе З.К. Радиационный рост, обусловленный анизотропией диффузии. Атомная энергия, 1978, т. 45, вып. 1, с. 41 – 44.
7. Sivak A.B., Chernov V.M., Dubasova N.A., Romanov V.A. Anisotropy migration of self-point defects in dislocation stress fields in BCC Fe and FCC Cu. J. Nucl. Mater., 2007, v. 367 – 370, p. 316 – 321.
8. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A., Sivak P.A. Kinetic Monte-Carlo simulation of self-point defect diffusion in dislocation elastic fields in bcc iron and vanadium. J. Nucl. Mater., 2011, v. 417, p. 1067 – 1070.
9. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A. Diffusion of self-point defects in body-centered cubic iron crystal containing dislocations. Crystallogr. Rep., 2010, v. 55, p. 97 – 108.

10. Романов В.А., Сивак А.Б., Сивак П.А., Чернов В.М. Равновесные и диффузионные характеристики собственных точечных дефектов в ванадии. ВАНТ, Сер. Термоядерный синтез, 2012, т. 35, вып. 2, с. 60 – 80.
11. Indenbom V.L., Chernov V.M. Thermally activated glide of a dislocation in a point defect field. In: Elastic strain fields and dislocation mobility. Eds. Indenbom V.L. and Lothe J. Amsterdam: Elsevier, 1992, 778 p.
12. Сивак А.Б., Романов В.А., Чернов В.М. Расчет взаимодействия собственных точечных дефектов с внешними полями напряжений в кристалле железа методами компьютерного моделирования и теории упругости. ВАНТ, Сер. Материаловедение и новые материалы, 2006, т. 1(66), с. 246 – 258.
13. Sivak A.B., Sivak P.A. Efficiency of dislocations as sinks of radiation defects in fcc copper crystals. Crystallogr. Rep., 2014, vol. 59, no. 3, p. 407 – 414.
14. Сивак А.Б., Сивак П.А., Романов В.А., Чернов В.М. Эффективность дислокационных стоков для собственных точечных дефектов в кристаллах железа и ванадия. Перспективные материалы, 2014, № 10, с. 5 – 16.
15. Suzuki A., Mishin Y. Atomistic modeling of point defects and diffusion in copper grain boundaries. Interface Science, 2003, v. 11, p. 131 – 148.
16. Wolfer W.G. Fundamental properties of defects in metals. In: Comprehensive Nuclear Materials. Ed. Konings R. J. M. Amsterdam: Elsevier, 2012, v. 1, 496 p.
17. Lucas G., Schaublin R. Vibrational contributions to the stability of point defects in bcc iron: a first-principles study. Nucl. Instrum. Methods Phys. B, 2009, v. 267, p. 3009 – 3012.
18. Ram P.N. Green's-function calculation of entropy of formation of self-interstitials in Cu. Phys. Rev. B, 1984, v. 30, p. 6146 – 6153.
19. Malerba L., Marinica M.C., Anento N., Björkas C., Nguyen H., Domain C., Djurabekova F., Olsson P., Nordlund K., Serra A., Terentyev D., Willaime F., Becquart C.S. Comparison of empirical interatomic potentials for iron applied to radiation damage studies. J. Nucl. Mater., 2010, v. 406, p. 19 – 38.
5. Kröner E. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. Arch. Rational Mech. Anal., 1959/60, vol. 4, pp. 273 – 334.
6. Saralidze Z.K. Radiational growth due to diffusional anisotropy. Sovietatomicenergy, 1978, vol. 45, iss. 1, pp. 697 – 700.
7. Sivak A.B., Chernov V.M., Dubasova N.A., Romanov V.A. Anisotropy migration of self-point defects in dislocation stress fields in BCC Fe and FCC Cu. J. Nucl. Mater., 2007, vol. 367 – 370, pp. 316 – 321.
8. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A., Sivak P.A. Kinetic Monte-Carlo simulation of self-point defect diffusion in dislocation elastic fields in bcc iron and vanadium. J. Nucl. Mater., 2011, vol. 417, pp. 1067 – 1070.
9. Sivak A.B., Chernov V.M., Romanov V.A. Diffusion of self-point defects in body-centered cubic iron crystal containing dislocations. Crystallogr. Rep., 2010, vol. 55, pp. 97 – 108.
10. Romanov V.A., Sivak A.B., Sivak P.A., Chernov V.M. Ravnovesnye i diffuzionnye kharakteristiki sobstvennykh tochechnykh defektov v vanadii [Equilibrium and diffusion parameters of self point defects in vanadium]. Thermonuclear fusion, 2012, vol. 35, iss. 2, pp. 60 – 80.
11. Indenbom V.L., Chernov V.M. Thermally activated glide of a dislocation in a point defect field. In: Elastic strain fields and dislocation mobility. Eds. Indenbom V.L. and Lothe J. Amsterdam: Elsevier, 1992, 778 p.
12. Sivak A.B., Romanov V.A., Chernov V.M. Raschet vzaimodeystviya sobstvennykh tochechnykh defektov s vnesnimi polyami napryazheny v kristalle zheleza metodami kompyuternogo modelirovaniya i teorii uprugosti [Calculation of interaction of self-point defects with external stress fields in iron crystal by computer simulation and elasticity theory]. Voprosy atomnoi nauki i tekhniki. Ser. Materialovedenie i novye materialy — Problems of atomic science and technology. Ser. Materials science and new materials, 2006, vol. 1(66), pp. 246 – 258.
13. Sivak A.B., Sivak P.A. Efficiency of dislocations as sinks of radiation defects in fcc copper crystals. Crystallogr. Rep., 2014, vol. 59, no. 3, pp. 407 – 414.
14. Sivak A.B., Sivak P.A., Romanov V.A., Chernov V.M. Effektivnost dislokatsionnykh stokov dlya sobstvennykh tochechnykh defektov v kristallakh zheleza i vanadiya [Dislocation sinks efficiencies for self-point defects in iron and vanadium crystals]. Perspektivnye materialy — Advanced materials, 2014, no. 10, pp. 5 – 16.
15. Suzuki A., Mishin Y. Atomistic modeling of point defects and diffusion in copper grain boundaries. Interface Science, 2003, vol. 11, pp. 131 – 148.
16. Wolfer W.G. Fundamental properties of defects in metals. In: Comprehensive Nuclear Materials. Ed. Konings R. J. M. Amsterdam: Elsevier, 2012, vol. 1, 496 p.
17. Lucas G., Schaublin R. Vibrational contributions to the stability of point defects in bcc iron: a first-principles study. Nucl. Instrum. Methods Phys. B, 2009, vol. 267, pp. 3009 – 3012.
18. Ram P.N. Green's-function calculation of entropy of formation of self-interstitials in Cu. Phys. Rev. B, 1984, vol. 30, pp. 6146 – 6153.

References

1. Saralidze Z.K., Indenbom V.L. Dislocations in irradiated crystals. In: Elastic strain fields and dislocation mobility. Eds. Indenbom V.L. and Lothe J. Amsterdam: Elsevier, 1992, 778 p.
2. Domain C., Becquart C.S., Malerba L. Simulation of radiation damage in Fe alloys: an object kinetic Monte Carlo approach. J. Nucl. Mater., 2004, vol. 335, p. 121 – 145.
3. Caturla M.J., Diaz de la Rubia T., Fluss M. Modeling microstructure evolution of f.c.c. metals under irradiation in the presence of He. J. Nucl. Mater., 2003, vol. 323, p. 163 – 168.
4. Hirth J.P., Lothe J. Theory of Dislocations. New York: Wiley, 1982, 857 p.

19. Malerba L., Marinica M.C., Anento N., Вјдркас С., Nguyen H., Domain C., Djurabekova F., Olsson P., Nordlund K., Serra A., Terentyev D., Willaime F.,

Becquart C.S. Comparison of empirical interatomic potentials for iron applied to radiation damage studies. J. Nucl. Mater., 2010, vol. 406, pp. 19 – 38.

Статья поступила в редакцию 2.06.2014 г.

Сивак Александр Борисович — НИЦ “Курчатовский институт” (123182 Россия, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, специалист в области радиационного материаловедения, теории и моделирования дефектов кристаллов. E-mail: sivak_ab@nrcki.ru.

Сивак Полина Александровна — НИЦ “Курчатовский институт” (г. Москва), инженер, специалист в области математического моделирования дефектов кристаллов и физических процессов. E-mail: sivak_pa@nrcki.ru.

Романов Владимир Александрович — ФГУП “ГНЦ РФ – ФЭИ” (249033 Россия, г. Обнинск Калужской обл., пл. Бондаренко, 1), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, специалист в области физического радиационного материаловедения, теории и моделирования дефектов кристаллов. E-mail: romanov-ipre@mail.ru.

Чернов Вячеслав Михайлович — Чернов Вячеслав Михайлович — ОАО “ВНИИНМ” (123098 Россия, г. Москва, а/я 369, ул. Рогова, д. 5а), Томский государственный университет (г. Томск), доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, специалист в области физического радиационного материаловедения. E-mail: chernovv@bochvar.ru.

Effect of external stresses on dislocation sinks efficiencies in BCC (Fe, V) and FCC (Cu) crystals

A. B. Sivak, P. A. Sivak, V. A. Romanov, V. M. Chernov

For BCC (Fe, V) and FCC (Cu) crystals at the temperature 293 K, linear sinks efficiencies for self-point defects (SPDs) elastically interacting (dislocations) and non-interacting with such sinks of the density $3 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ depending on applied external loads of different type and magnitude (up to 200 MPa) and linear sink type were calculated by object kinetic Monte Carlo method. For dislocation sinks (DSs), full straight dislocations were considered in slip systems $[111](1\bar{1}0)$, $[111](1\bar{1}\bar{2})$, $[100](001)$, $[100](011)$ for Fe and V, and $[110](001)$ for Cu. For non-interacting linear sinks, their directions correspond to DSs. The interaction energy of SPDs with dislocation and external stress fields was calculated in the framework of the anisotropic linear theory of elasticity. Relative change of efficiency under applied external load for different codirectional linear sinks (interacting and non-interacting with SPDs) was approximately the same. Radiation creep rates were calculated for considered crystals under uniaxial loads at the stationary generation rate of Frenkel pairs. The creep rates depend strongly on the direction of the uniaxial load and Burgers vector direction of dislocations in Fe and V, and practically do not in Cu. On equal generation rate of Frenkel pairs, radiation creep rate, averaged over all directions of loading, in BCC crystals (Fe, V), containing dislocations with Burgers vector $a/2\langle 111 \rangle$, is significantly larger than in FCC crystals (Cu).

Keywords: dislocation sinks efficiency, self-point defects, diffusion, external stresses, object kinetic Monte Carlo.

Sivak Alexander — NRC “Kurchatov Institute” (1, AkademikaKurchatova pl., Moscow, 123182, Russia, Tomsk State University, 36, Lenin Prospekt, Tomsk, 634050, Russia), PhD, senior researcher. Specialist in radiation materials science, theory and modelling of crystal defects. E-mail: sivak_ab@nrcki.ru.

Sivak Polina — NRC “Kurchatov Institute”, Moscow, engineer. Specialist in mathematical modelling of crystal defects and physical processes. E-mail: sivak_pa@nrcki.ru.

Romanov Vladimir — FSUE “SSC RF – IPPE” (1, Bondarenko pl., Obninsk, Kaluga reg., 249033, Russia), philosophy doctor; senior researcher. Specialist in the field of physical radiation materials science, theory and modelling of crystal defects. E-mail: romanov-ippe@mail.ru.

Chernov Viacheslav — JSC “VNIINM” (5-a, Rogova str., Moscow, PoB 369, 123098, Russia), Tomsk State University, Tomsk, DrSci (Phys-Math), professor; principal researcher. Specialist in the field of physical radiation materials science, theory and modelling of crystal defects. E-mail: chernovv@bochvar.ru.