

А. С. ПОТАНИН, И. ХРОМУШИН, Б. А. АЛИЕВ, Г. ПАРТИЗАН

КИНЕТИКА НАКОПЛЕНИЯ РАДИАЦИОННЫХ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В НАНОДИСПЕРСНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ЧАСТИЦАХ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ЭЛЕКТРОНАМИ

Проведены модельные расчеты накопления радиационных точечных дефектов в нано- и микродисперсных металлах. При рассмотрении предложенной модели это позволило последовательно учитывать аттермические рекомбинации.

В связи с развитием современной техники все более возрастаает необходимость в разработке экологически чистых, наукоемких технологий и создании на их базе материалов с улучшенными физико-механическими и функциональными характеристиками. Одним из путей решения этих задач является реализация радиационных технологий и модифицирования материалов. Современные промышленные радиационные технологии, в основном, используют низкоэнергетичное облучение, в частности, электронное или гамма излучение. При таком воздействии на материалы превалируют процессы образования точечных дефектов, свободных радикалов в полимерах и т.д. В данной работе представлена математическая модель, описывающая кинетику накопления радиационных точечных дефектов (РТД) в металлах.

Применяемые для описания накопления радиационных дефектов в основном кинетические системы дифференциальных уравнений математически сложны, и для получения количественных оценок обычно используются численные методы их решения, либо рассматриваются упрощенные системы уравнений, которые не всегда физически обоснованы и позволяют описывать лишь отдельные частные задачи радиационного повреждения материалов. Ограничен также выбор доминирующих процессов взаимодействия радиационных дефектов и физически обоснованных параметров, влияющих на аннигиляционные процессы радиационных дефектов.

На основании проведенного анализа современного состояния проблем накопления радиационных дефектов следует, что весьма актуальны задачи развития модельных представлений о

кинетике накопления радиационных дефектов в различных материалах, выявление доминирующих механизмов, разработка математических методов решения систем дифференциальных уравнений.

Для описания кинетики накопления РТД в металлических средах при облучении низкоэнергетическими частицами, способными генерировать точечные дефекты, нами предлагается следующая система дифференциальных уравнений.

$$\begin{cases} \frac{\partial C_i}{\partial t} = \left[K - K_i C_i - jm C_i C_v + D_i \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_i}{\partial r} \right) \right] \times \\ \times (1 - m C_v) \\ \frac{\partial C_v}{\partial t} = \left[K - K_v C_v - jm C_i C_v + D_v \left(\frac{\partial^2 C_v}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_v}{\partial r} \right) \right] \times \\ \times (1 - m C_i) \end{cases} \quad (1.1)$$

с начальными и граничными условиями

$$\begin{aligned} C_i(r, 0) &= C_i(R, t) = 0; \\ C_v(r, 0) &= C_v(R, t) = 0; \end{aligned} \quad (1.2)$$

$$\left. \frac{\partial C_i}{\partial r} \right|_{r=0} = \left. \frac{\partial C_v}{\partial r} \right|_{r=0} = 0,$$

где D_i и D_v – коэффициенты диффузии межузельных атомов и вакансий; r – расстояние от центра до поверхности частицы радиуса R ; C_i , C_v – атомные концентрации межузельных атомов и вакансий, соответственно; K – скорость генерации дефектов; m – эффективное число узлов в зоне рекомбинации дефекта; j – эффективная частота

скажков межузельных атомов; K_i , K_v – скорости аннигиляции дефектов на постоянных стоках для межузельных атомов и вакансий, соответственно.

Приведенная система уравнений (1.1), записанная с учетом влияния поверхности, последовательно учитывает эффект атермической рекомбинации, что важно для анализа накопления точечных радиационных дефектов в металлах в широком диапазоне значений температуры и мощности дозы.

Нами были проведены численные расчеты кинетики накопления концентраций радиационных точечных дефектов, проводили с помощью математической программы MatLab для комнатных температур в зависимости от скорости генерации дефектов, радиуса частицы, мощности линейных стоков, времени облучения.

Результаты расчетов для случая, когда влияние дислокаций незначительно, представлены на рис. 1.1. Максимальные концентрации обоих типов точечных дефектов по порядку величины близки. Однако накопление межузельных атомов и вакансий до максимальных значений разделено времененным промежутком.

По положению максимума концентрации межузельных атомов на шкале времен максимальные значения концентрации междуузельных атомов достигаются через ~ 0.5 с с момента начала облучения (рис. 1.1, а). Тогда как для достижения максимальных концентраций вакансий требуется более длительное (около 10 с) облучение (рис. 1.1, б).

Результаты расчетов изменения концентрации радиационных точечных дефектов для средних

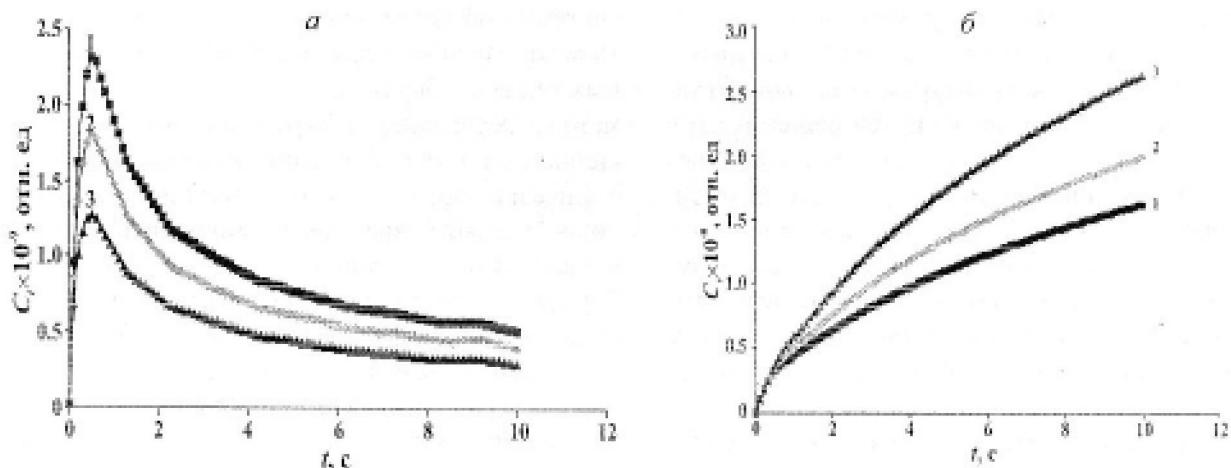


Рис. 1.1. Кинетика изменения концентрации межузельных атомов и вакансий для различных значений расстояния от центра частицы: а – $C_i(r)$; б – $C_v(r)$; 1 – 3.75; 2 – 500; 3 – 703 нм

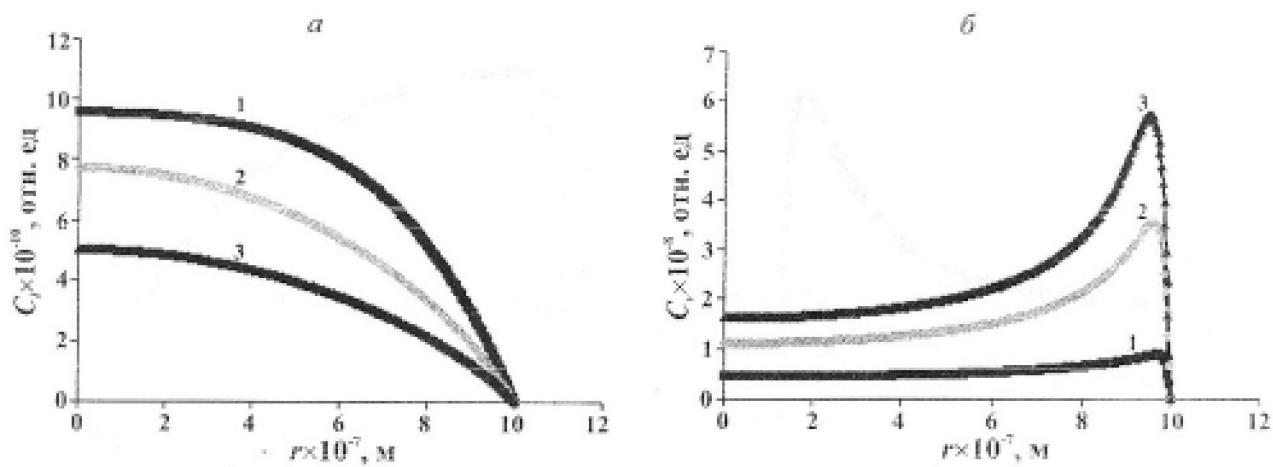


Рис. 1.2. Зависимость концентрации дефектов от радиуса частицы для разных времен облучения: *a* – $C_i(r)$; *б* – $C_v(r)$; 1 – 1 с; 2 – 5 с; 3 – 10 с

времен и различных расстояний от центра частицы представлены на рис. 1.2.

Как видно из рис. 1.2, *a*, кривые изменения концентрации междуузельных атомов в зависимости от расстояний от центра частицы накопление междуузельных атомов уменьшается с ростом времени облучения. Это согласуется с результатами, приведенными на рис. 1.1, *a*, где показано асимптотическое уменьшение концентрации междуузельных атомов при временах выше 0,5 с. Что касается вакансий, рис. 1.2, *б*, со временем облучения характер накопления вакансий не изменяется, а концентрация их увеличивается, стремясь к стационарным значениям.

Выраженный максимум концентрации вакансий в приповерхностном слое при временах

облучения, превышающих 1 с, учитывая очень малые значения концентраций междуузельных атомов, указывает на то, что в приповерхностных областях идут процессы порообразования.

Рассмотрим теперь особенности влияния скорости генерации дефектов K (мощности дозы) на изменение концентрации радиационных точечных дефектов. Как видно из рис. 1.3, с увеличением скорости генерации накопление радиационных точечных дефектов обоих типов возрастает, при этом важной особенностью является преимущественное накопление вакансий вблизи поверхности. С дальнейшим увеличением скорости генерации до $1 \cdot 10^{-8} \text{ с}^{-1}$ концентрации обоих типов дефектов увеличивается в 5 и 6 раз соответственно для междуузельных атомов вблизи центра частицы и вакансий вблизи поверхности.

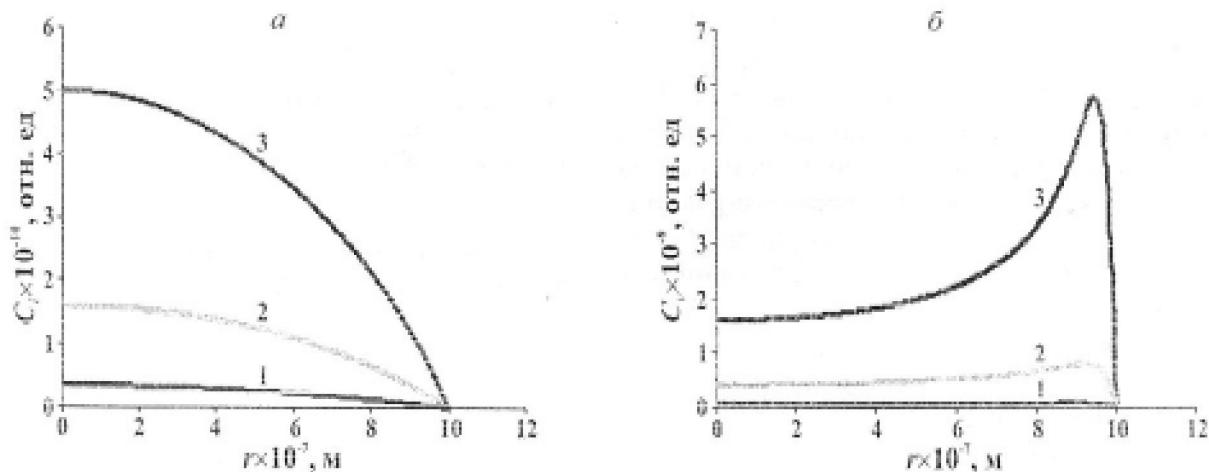


Рис. 1.3. Зависимости $C(r)$ при различных скоростях генерации дефектов: *a* – $C_i(r)$; *б* – $C_v(r)$; 1 – $1 \cdot 10^{-10} \text{ с}^{-1}$; 2 – $1 \cdot 10^{-9} \text{ с}^{-1}$; 3 – $1 \cdot 10^{-8} \text{ с}^{-1}$

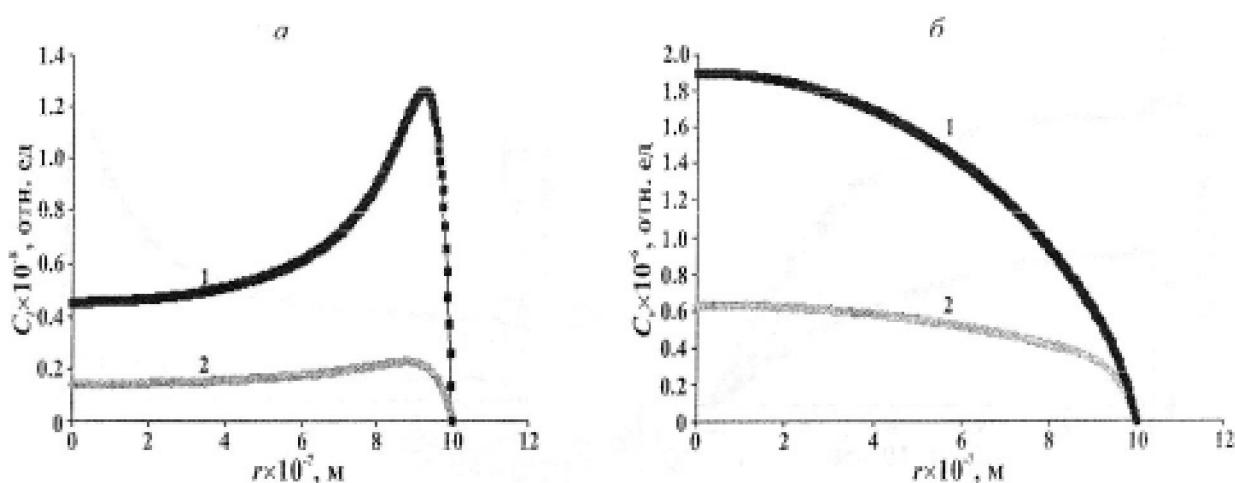


Рис. 1.4. Зависимость С(г) для малых значений коэффициентов диффузии:
 $\alpha - C_i(r)$; $\beta - C_v(r)$, 1 – $1 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$, 2 – $1 \cdot 10^{-15} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$

Необходимо отметить, что рассмотренные выше расчеты проведены для случая комнатных температур. Теперь рассмотрим случай низких температур, когда значения коэффициентов диффузии и подвижности дефектов малы.

Результаты расчета концентраций обоих типов дефектов в зависимости от радиуса частицы с учетом диффузии по межузельному механизму представлены на рис. 1.4. Обнаружено, что при низкой подвижности межузельных атомов проявляется, наоборот, эффект накопления межузельных атомов вблизи поверхности частицы (рис. 1.4, α). Оценка положения максимума концентрации межузельных атомов показала, что он соответствует на расстоянии ~ 50 нм от поверхности, тогда как для кривых концентраций вакансий (рис. 1.4, β) в приповерхностной области частиц не наблюдается. Такое изменение соотношения концентраций точечных дефектов, скорее всего, ведет к залечиванию нанопор и образованию новых дислокационных дефектов в приповерхностных слоях частицы. Как известно, разветвленные дислокационные структуры ведут к увеличению коэффициентов диффузии, что также может оказаться на активации поверхности частицы.

Таким образом, проведенные модельные расчеты накопления РТД для нанодисперсных частиц металлов показали, что:

- преимущественное накопление междуузельных атомов до концентраций, превышающих стационарное значение, происходит при малых ($> 0,1$ с) временах облучения, тогда как концентрация

вакансий асимптотически приближается к стационарному значению;

- в случае наличия эффективного поверхностного стока наблюдается преимущественное накопление вакансий вблизи поверхности частицы;

- при низкой подвижности радиационных точечных дефектов (низкие температуры) преимущественное накопление межузельных атомов имеет место вблизи (~ 50 нм) поверхности частицы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Быстров Л.Н., Иванов Л.И., Платов Ю.М. Механизм радиационно-стимулированной диффузии в металлах // ФХОМ. 1970. № 1. С. 14-24.
2. Зайкин Ю.А., Алиев Б.А., Потанин А.С. Об аналитическом описании накопления точечных радиационных дефектов в металлических средах в области высоких скоростей их генерации // Мат-лы 4-й Межд. конф. «Ядерная и радиационная физика». Алматы: ИЯФ НЯЦ РК, 2003. С. 285-292.
3. Алиев Б.А., Потанин А.С., Зайкин Ю.А. Об аналитическом описании накопления точечных радиационных дефектов в металлических средах // Вестник КазНУ. Сер. мат., мех., информ. 2006. № 1(24). С. 22-29.

Резюме

Микро- және нонодисперсті металдардағы радиациялық нүктелік ақаулардың жиналуын сипаттайтын модельдік есеп карастырылған. Ұсынылған модельді карастыру кезінде аттермиялық рекомбинациясын тізбектей отырып ескеретіні көрсетілді.

Summary

In work performed model calculations of the accumulation of radiation defects in the nano and microdispersed metals. In considering the proposed model is allowed to consistently take into account aftertermination recombination.