

Н. М. В л а с о в, Ю. Г. Д р а г у н о в (Подольск, РОНЦ МГОУ). **Математическое моделирование радиационного охрупчивания конструкционных материалов.**

Радиационное охрупчивание конструкционных материалов при нейтронном облучении обусловлено взаимодействием пар Френкеля (вакансий и межузельных атомов) с дефектами кристаллического строения. При низких температурах облучения межузельные атомы закрепляют краевые дислокации, и в макроскопическом масштабе наблюдают повышение предела текучести материала. Раскрытие микротрещин происходит без пластического течения материала в окрестности их вершин. При высоких температурах увеличивается диффузионная подвижность радиационных вакансий, и процесс охрупчивания обусловлен образованием пористости по границам зерен. Целью данного сообщения является математическое моделирование радиационного охрупчивания конструкционных материалов на основе дислокационных и дисклинационных представлений.

При низких температурах облучения подвижность межузельных атомов существенно превышает указанную характеристику для вакансий. Поэтому межузельные атомы диффузионно мигрируют на стоки в виде краевых дислокаций и клиновых дисклинаций. Конечным результатом такого процесса является образование примесных сегрегаций из межузельных атомов в окрестности краевых дислокаций и клиновых дисклинаций с положительной дилатацией. Примесные сегрегации закрепляют упомянутые структурные дефекты, и происходит повышение предела текучести материала. Раскрытие и продвижение трещин осуществляется за счет формирования поверхности разрушения. При этом вся внешняя энергия расходуется исключительно на раскрытие берегов трещины, т. е. без работы пластической деформации.

Рассмотрим процесс закрепления краевой дислокации примесной сегрегацией из межузельных атомов радиационного происхождения. Равновесную концентрацию межузельных атомов представим в виде

$$C = C_0 \exp \left\{ - \frac{A \sin \theta}{kT r} \right\} = C_0 - \frac{C_0 A \sin \theta}{kT r} + \frac{C_0}{2} \left(\frac{A}{kT} \right)^2 \frac{\sin^2 \theta}{r^2} + \dots$$

и при $A/(kTr_0) < 1$ (приближение слабого взаимодействия) ограничимся линейным по $A/(kT)$ членом разложения

$$C - C_0 = -C_0 \frac{A \sin \theta}{kT r}, \quad A = \frac{\mu b(1 + \nu)}{3\pi(1 - \nu)} \delta v, \quad (1)$$

где μ — модуль сдвига, ν — коэффициент Пуассона, b — модуль вектора Бюргера краевой дислокации, C_0 — средняя концентрация межузельных атомов, δv — изменение объема материала при размещении межузельного атома, k — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, r и θ — полярные координаты, r_0 —

радиус ядра дислокации. Приращение энергии системы при смещении краевой дислокации на расстояние x без изменения межузельной сегрегации (на единицу длины дислокационной линии) имеет вид

$$\frac{\Delta W(x)}{L} = A \int_{r_0}^{\infty} \int_0^{2\pi} (C - C_0) \left(\frac{\sin \varphi}{\rho} - \frac{\sin \theta}{r} \right) r dr d\theta, \quad (2)$$

$$\rho^2 = r^2 + x^2 - 2rx \cos \theta, \quad \rho \sin \varphi = r \sin \theta.$$

Сила, препятствующая смещению краевой дислокации, определяется как производная от приращения энергии системы по смещению x (на единицу длины линии дислокации). После проведения интегрирования получим [1, 2]

$$\frac{F}{L} = \frac{\pi C_0 A^2}{r_0 kT} \left\{ \frac{r_0}{x} - \left(\frac{r_0}{x} \right)^3 \right\}. \quad (3)$$

Максимальная величина F/L достигается при $x/r_0 = \sqrt{3}$ и равна $(F/L)_{\max} = (2\pi C_0 A^2)/(3\sqrt{3}r_0 kT)$. Закрепление клиновой дисклинации (упругая модель тройного стыка границ зерен с положительной дилатацией) межузельной сегрегацией осуществляется по аналогии с краевой дислокацией [3].

При высоких температурах возрастает диффузионная подвижность радиационных вакансий. Они мигрируют на клиновые дисклинации с отрицательной дилатацией, а также на границы зерен. Это приводит к образованию и росту пор на междолинных границах. В макроскопическом масштабе наблюдают охрупчивание и разрушение материала за счет радиационных вакансий. Кинетика этого процесса описывается уравнением диффузии с учетом поля напряжений структурных дефектов [1].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Драгунов Ю. Г., Власов Н. М., Иванов С. Д., Федик И. И. Самоуравновешенные внутренние напряжения. М.: МГОУ, 2010, 391 с.
2. Власов Н. М. Закрепление краевой дислокации примесной атмосферой. — ФММ, 1983, т. 56, в. 3, с. 583–586.
3. Власов Н. М., Любов Б. Я. Закрепление клиновой дислокации примесной атмосферой. — Доклады РАН, 1981, т. 259, в. 2, с. 348–351.