Краткие сообщения по физике № 6-1986 г.

УДК 621.039.531

РЕШЕТКА ПОР КАК ДИССИПАТИВНАЯ СТРУКТУРА

Ф.Х. Мирзоев, Е.П. Фетисов, Л.А. Шелепин

Предложен механизм пространственного упорядочения вакансионных пор при облучении. Определены параметр упорядочения и характерное время существования решетки пор.

При определенных условиях поры, возникающие в процессе облучения ряда металлов высокоэнергетическими частицами, могут образовывать пространственную решетку с симметрией исходного кристалла /1/. Ее период d_v увеличивается с ростом температуры облучения и уменьшается с возрастанием скорости K образования точечных дефектов. Установлено существенное влияние сверхрешеток пор (СП) на физические и механические свойства кристаллов. Хотя накоплен большой объем экспериментальной и теоретической информации /2–4/, однако механизмы формирования СП до конца еще не поняты. Существующие модели не могут адекватно описывать всю совокупность экспериментальных данных /2,3/.

Ниже рассмотрен новый механизм образования СП. Это – процесс самоорганизации /5/, сопровождающийся кооперативными эффектами перестройки открытых диссипативных структур в условиях, далеких от равновесия. Состояние системы пора – точечные дефекты будем описывать следующей системой нелинейных уравнений для концентрации вакансий N_v и межузельных атомов N_i и функции распределения пор $f(x, t)$ по их радиусам x:

$$\frac{\partial N_v}{\partial t} = K - 4\pi \int_0^\infty x^2 V_1(x) f\,dx - \rho_d D_v (N_v - N_{ve}) + D_v \Delta N_v, \tag{1}$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = K - 4\pi \int_0^\infty x^2 V_2(x) f\,dx - \rho_d \eta N_i D_i + D_i \Delta N_i, \tag{2}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}[V(x) f(x,t)] + D_0(x)\Delta f. \tag{3}$$

Здесь D_a $(a = i,v)$ – коэффициенты диффузии точечных дефектов; η – параметр преференса $(\eta > 1,\ \eta - 1 \ll 1)$; ρ_d – линейная плотность дислокаций. Величины V_1 и V_2 характеризуют скорости изменения радиуса пор соответственно за счет потока вакансий и межузельных атомов и равны: $V_1 = \Theta/x$, $\Theta = D_v \times [N_v - N_{ve}\exp(2\gamma\omega/xkT)]$, $V_2 = \nu/x$, $\nu = D_i N_i$, где γ – коэффициент поверхностного натяжения, ω – атомный объем, kT – фактор Больцмана, N_{ve} – равновесное значение.

Величина $V = (\Theta - \nu)/x$ определяет скорость роста пор за счет избыточного потока вакансий по сравнению с потоком межузельных атомов. Член $D_0 \Delta f$ в (3) характеризует пространственную диффузию пор в координатном пространстве; $D_0(x) = \beta/x^2$ – коэффициент диффузии, $\beta = 3D_v N_{ve}/8\pi$ /6/. Для простоты в (1) и (3) пренебрегается изменением концентрации точечных дефектов за счет их рекомбинации и зарождением новых пор в процессе облучения, предполагается также, что $\exp(2\gamma\omega/xkT) \sim 1$.

Система уравнений (1)–(3) имеет следующее квазистационарное пространственно-однородное решение (N_v^0, N_i^0, f^0): $D_v(N_v^0 - N_{ve}) = K/(\rho_d + \rho_s)$, $D_i N_i^0 = K/(\eta\rho_d + \rho_s)$, $f^0 = N_0 \delta(x - \bar{x})$, $\rho_s = 4\pi N_0 \bar{x}$ ($\bar{x}$ – средний радиус). Исследуем это решение на устойчивость. Полагая $N_v = N_v^0 + \delta N_v$, $N_i = N_i^0 + \delta N_i$, $f = f^0 + \delta f$ $(\delta N_v,\ \delta N_i,\ \delta f \propto \exp(\lambda t + i\vec{q}\vec{r}))$ и линеаризуя полученную систему по малым отклонениям δN_v, δN_i и δf, в предположении квазистационарности концентрации точечных дефектов $(\delta\dot{N}_v = \delta\dot{N}_i = 0)$ находим:

$$D_v \delta N_v = -4\pi\Theta(\rho_t + \vec{q}^{\,2})^{-1} \int_0^\infty x\delta f(x,q,\lambda)\,dx,$$

$$D_i \delta N_i = -4\pi\nu(\rho_t + \vec{q}^{\,2})^{-1}\,[1 - \rho_d(\eta - 1)/(\rho_t + \vec{q}^{\,2})] \int_0^\infty x\delta f(x,q,\lambda)\,dx, \tag{4}$$

$$[\lambda + \vec{q}^{\,2}\beta x^{-2}]\delta f + \epsilon\,\frac{d}{dx}\,(\delta f/x) = -4\pi(\rho_t + \vec{q}^{\,2})^{-1}[\epsilon + \nu(\eta - 1)\rho_d(\rho_t + \vec{q}^{\,2})^{-1}]\,\times$$

$$\times\,\frac{d}{dx}\left[\frac{f^0(x)}{x}\right]\int_0^\infty x\delta f(x,q,\lambda)\,dx,\ \ \epsilon = \Theta - \nu,$$

где $\rho_t = \rho_s + \rho_d$. Чтобы получить дисперсионное соотношение для системы (1)–(3), определим из (4) функцию $\delta f/x$, а затем умножим ее на x^2 и проинтегрируем от 0 до ∞; в результате имеем:

$$\rho_d + \vec{q}^{\,2} - \epsilon^{-1}(\eta - 1)\rho_d\nu = -4\pi\epsilon^{-1}\int_0^\infty x^2P^{-1}(x)\,dx \int_{x_c}^{x} P(x_1)\,f^0(x_1)\,(\lambda + \vec{q}^{\,2}\beta x_1^{-2})\,dx_1, \tag{5}$$

где x_c – критический радиус поры; $P(x) = (\frac{x}{x_c})^{\beta\vec{q}^{\,2}/\epsilon}\exp\left[\frac{\lambda(x^2 - x_c^2)}{2\epsilon}\right]$ – интегрирующий множитель. Вычислив интегралы в (5), приходим к следующему дисперсионному соотношению:

$$\lambda(\vec{q}^{\,2}) = \left\{3\epsilon\rho_d - 3\nu(\eta - 1)\rho_d + [3\epsilon - \beta\rho_s]\vec{q}^{\,2} - \beta\vec{q}^{\,4}\right\}/\rho_s\bar{x}^2.$$

При малых значениях скорости генерации К и действительных $\vec{q}$ $\lambda(\vec{q}^{\,2}) < 0$ и, следовательно, решение устойчиво. При $3\epsilon > \beta\rho_s$, т.е. $K > K_{cr} = \beta\rho_s^3/3\rho_d(\eta - 1)$ и $\rho_d \ll \rho_s$ решение неустойчиво: существует по крайней мере одно положительное собственное значение $\vec{q}^{\,2}$, для которого $\lambda(\vec{q}^{\,2}) > 0$. Из этого неравенства следует, что неустойчивые значения $\vec{q}^{\,2}$ должны удовлетворять условиям $\vec{q}^{\,2}_{c(-)} < \vec{q}^{\,2} < \vec{q}^{\,2}_{c(+)}$, где $\vec{q}^{\,2}_{c(\pm)}$ – корни биквадратного уравнения $\lambda(\vec{q}^{\,2}_c) = 0$. Нетрудно заметить, что в интервале $\vec{q}^{\,2}_{c(-)} < \vec{q}^{\,2} < \vec{q}^{\,2}_{c(+)}$ $\lambda(\vec{q}^{\,2})$ возрастает и $\lambda(\vec{q}^{\,2}_{c(\pm)}) = 0$. Поэтому $\lambda(\vec{q}^{\,2})$ должна иметь максимум. Определим значения $\vec{q}^{\,2}$, при которых функция $\lambda(\vec{q}^{\,2})$ принимает максимальное значение:

$$\vec{q}^{\,2}_{max} = (3\epsilon - \beta\rho_s)/2\beta,\ \ \lambda_{max} = \lambda(\vec{q}^{\,2}_{max}) = (3\epsilon - \beta\rho_s)^2/4\beta\rho_s\bar{x}^2.$$

Таким образом, при определенных условиях в системе хаотически расположенных пор возможен переход в неоднородное состояние. Характерное время существования такого неустойчивого состояния $\tau_v \sim \lambda^{-1}_{max}$ на несколько порядков превышает характерное время однородного состояния системы пор. Причина возникновения упорядоченного состояния связана с тем, что благодаря наличию резкого максимума $\lambda(\vec{q}^{\,2})$ происходит быстрый рост флуктуаций с волновыми векторами, близкими к q_{max}. В результате в среде формируется периодическая структура с характерным волновым числом $k \sim 2\pi/d_v \sim q_{max}$. Для периода и характерного времени существования τ_v возникшей структуры можно записать следующие выражения:

$$d_V = d_0 \sqrt{\frac{K_{cr}}{K - K_{cr}}},\ K_{cr} = \beta\rho_s^3/3\rho_d(\eta - 1),\quad d_0 = 2\pi\sqrt{2/\rho_s},$$

$$\tau_V = \tau_0 \left(\frac{K_{cr}}{K - K_{cr}}\right)^2,\ \tau_0 = 4\overline{x}^2/\beta\rho_s.$$

Сравним полученные оценки d_V и τ_V с экспериментальными данными по облучению молибдена при температуре 900 $^{\circ}$C ионами Cu^+. При значениях параметров $D_V N_{Ve} = 10^{-4}\exp(-\ Q/0{,}1\ эВ)$, $Q = 5{,}95$ эВ /6/, $\eta - 1 = 0{,}01$, $\rho_d = 2\cdot 10^9$ см$^{-2}$, $\overline{x} = 3{,}8$ нм, $N_0 = 3\cdot 10^{16}$ см$^{-3}$ /4/, $K = 3\cdot 10^{-4}$ сна/с, $K_{cr} = 8\cdot 10^{-6}$ сна/с период СП равен 39,2 нм, что хорошо согласуется с экспериментальным значением d_V, равным 40 ± 5 нм /4/. При этом характерное время $\tau_V \sim 2\cdot 10^5$ с. Количественное совпадение с экспериментом свидетельствует о доминирующей роли рассмотренного механизма формирования СП. Заметим, что данный подход является достаточно общим и может быть использован для понимания механизмов формирования сверхрешеток других дефектов, например, межузельных атомов, дислокационных петель, преципитатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Evans J.H. Rad. Eff., 10, 55 (1971).
2. Зеленский В.Ф. и др. Некоторые проблемы физики радиационных повреждений материалов. Киев, Наукова думка, 1979, с. 240.
3. Krishan K. Rad. Eff., 66, 121 (1982).
4. Liou K.Y., Smith H.V. J. Nucl. Mat., 83, 335 (1979).
5. Хакен Г. Синергетика. М., Мир, 1985.
6. Максимов Л.А., Рязанов А.И. ЖЭТФ, 579, № 6, 2311 (1980).
7. Келли Б. Радиационное повреждение твердых тел. М., Атомиздат, 1970.

Поступила в редакцию 27 марта 1986 г.