

КЛАСТЕРНЫЕ СТРУКТУРЫ В ГЦК МАТЕРИАЛАХ ПРИ ВЫСОКИХ УРОВНЯХ РАДИАЦИОННОГО ПОВРЕЖДЕНИЯ

В.С.Хмелевская, Н.В.Куликова, А.В.Накин, В.Г.Малынкин

Обнинский институт атомной энергетики, г. Обнинск



Показано, что в различных материалах (сплавах на основе Fe-Ni-Cr, Ni-Cr, Fe-Cr, V-Ti-Cr, а также в чистых металлах Zr и Ti) при взаимодействии с ионным излучением возникают особые неравновесные состояния со следующими признаками: существенное изменение рентгеновской дифракционной картины (расщепление пиков дифрактограммы); необычная морфология - появление в структуре малых кластеров; сильное (в несколько раз) повышение микротвердости. Предложена модель локальной перестройки кристаллической решетки в окрестности вакансии, при которой образуется атомная группа и далее малый кластер икосаэдрической симметрии. Компьютерный эксперимент показывает, что при таком преобразовании появляется бимодальное распределение длин ребер полиэдра, это должно привести к расщеплению дифракционных пиков. Сильное упрочение, наблюдаемое в области существования неравновесных состояний, по-видимому, также связано с перестройкой структуры - металлическая матрица оказывается армированной кластерами с иной симметрией.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование взаимодействия излучения с веществом является основой прогнозирования поведения материалов в радиационном поле и их эксплуатационных характеристик. Между тем, существующие модели такого взаимодействия являются в значительной мере упрощенными и оказываются не в состоянии описать многие радиационно-индуцированные процессы и возникающие при этом неравновесные состояния вещества. Особенно это относится к состояниям, формирующимся при высоких уровнях радиационного повреждения. Так, например, ранее авторы данной работы наблюдали возникновение специфических радиационно-индуцированных неравновесных состояний в большой группе металлических материалов - сплавов (преимущественно твердых растворов), принадлежащих системам Fe-Ni, Fe-Cr-Ni, Ni-Cr, Cu-Ni, Fe-Cr, V-Ti-Cr, а также в чистых металлах - Zr и Ti [1-3]. Данные состояния появлялись в узком интервале радиационных параметров (доз, температур облучения и интенсивностей потока) и имели универсальные свойства для различных материалов (с ГЦК, ОЦК и ГПУ кристаллическими решетками) и при разных способах облучения (в ионном ускорителе, при облучении стационарной или импульсной плазмой), причем в случае изменения приро-

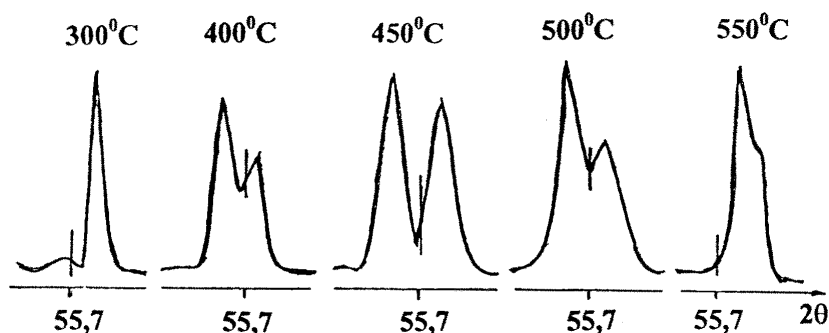


Рис.1. Дифракционные линии (111) в сплаве Fe-Cr-Ni, облученном (Ar⁺, 20кэВ, $1,5 \cdot 10^{18}$ ион/см²) при различных температурах

ды или энергии иона свойства состояний не изменялись, однако интервал их существования сдвигался по шкале радиационных параметров.

Главные свойства обнаруженных неравновесных состояний следующие:

- существенное изменение рентгеновской дифракционной картины, указывающее на появление гетерофазности в ранее однофазной и равновесной системе;
- неравновесный характер состояния - оно разрушается при температурах, не превышающих температуры облучения;
- формирование необычной морфологии структуры;
- сильные изменения свойств ионной и электронной подсистем твердого тела в области существования неравновесного состояния [3].

Характерным признаком возникновения данного состояния, позволяющим его распознать и идентифицировать, являются существенные дифракционные изменения, в частности, расщепление линий дифрактограммы на два пика (рис.1). Видно, что расщепление возникает в достаточно узком интервале радиационных параметров - в данном случае, температур облучения, задаваемых облучающим устройством.

Морфология материала также изменяется - формируется кластерная структура (пример такой структуры показан на рис.2). Видно, что кластеры занимают значительную долю радиационно-поврежденного объема, причем размер кластера составляет примерно 30-40 Å.

Сильно изменяются также макросвойства материала, в частности, его микро-

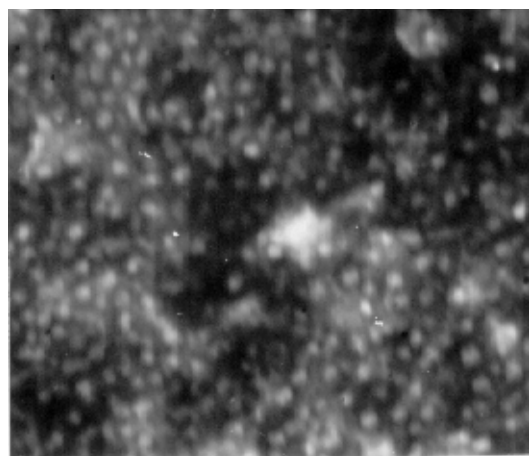


Рис.2. Кластерная структура в облученном сплаве Fe-Cr-Ni

твердость (рис.3) - эти изменения коррелируют с дифракционными эффектами, т.е. максимальная микротвердость соответствует температуре облучения, при которой расщепление линий дифрактограммы является максимальным.

В данной работе предлагается модель локальной перестройки кристаллической решетки, приводящая к наблюдаемым дифракционным эффектам и изменениям структуры и свойств, а также приводятся результаты компьютерных экспериментов, находящиеся в качественном согласии с экспериментальными фактами.

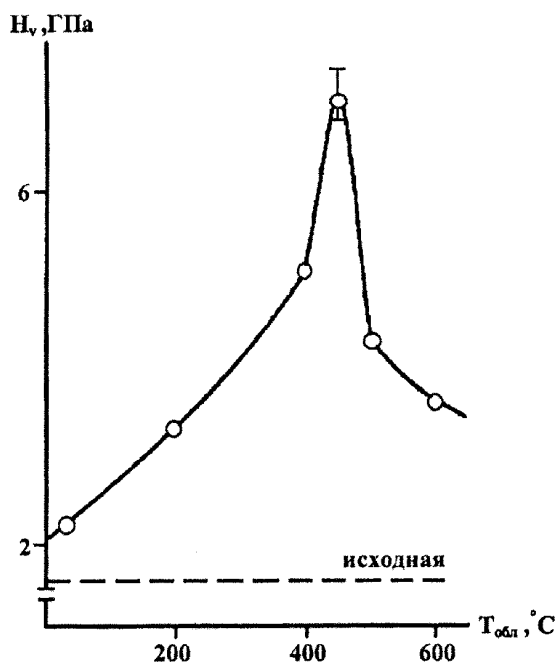


Рис.3. Изменения микротвердости в сплаве Fe-Cr-Ni, облученном при различных температурах

МОДЕЛЬ ЛОКАЛЬНОЙ ПЕРЕСТРОЙКИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ГЦК-РЕШЕТКИ В ОКРЕСТНОСТИ ТОЧЕЧНОГО ДЕФЕКТА

Обычно считают, что кристаллическая решетка в окрестности вакансии остается неизменной и лишь слегка искажается. В рамках данной модели предполагается, что в действительности происходит локальная перестройка решетки, в результате которой координационный полиэдр (кубооктаэдр) преобразуется в икосаэдр - многогранник с пятерной симметрией. В [4] описано подобное преобразование, при котором происходит вращение треугольных граней $\{111\}$ полиэдра вокруг нормальных к ним кристаллографических направлений $\langle 111 \rangle$ на $22,24^\circ$.

Возможны также и другие схемы перестройки кристаллической решетки. В результате образуется атомная икосаэдрическая группа, которая в результате укладки последующих слоев может расти, образуя малый кластер с симметрией, отличной от матрицы.

Стимулом подобной перестройки может быть то обстоятельство, что икосаэдрическая симметрия, запрещенная в обычной кристаллической решетке и не позволяющая транслировать элементарную ячейку, в малых кластерах дает возможность заполнения пространства с большой плотностью (77%), что выше, чем в самой плотной металлической решетке (74%). В этом случае может быть частично компенсирован дефект плотности, связанный с вакансией.

Работы последних лет [5,6] показали, что подобная трансформация для малых кластеров в материалах с ГЦК-структурой наблюдается достаточно часто. Более того, в работе [7] показано, что присутствие вакансии в центре икосаэдра может стабилизировать кластер, а изменение свободной энергии, связанное с такой вакансией, становится отрицательным.

Если предположить, что электронно-микроскопически наблюдаемые нами кластеры (рис.2) являются именно такими группами икосаэдрической симметрии, то в этом случае может быть предложено следующее объяснение изменениям картины рентгеновской дифракции и свойств материала. Сами кластеры из-за своей малости не дают самостоятельной дифракционной картины, соответствующей измененной симметрии решетки. Однако в процессе преобразования кубооктаэдр - икосаэдр, а также при дальнейшем формировании икосаэдрического кластера возникают деформации ребер полиэдра. В результате в радиационно-поврежденном объеме мы будем встречать одну и ту же атомную связь (ребро полиэдра), деформированную - в икосаэдрическом кластере и недеформированную - в матрице. Такое бимодальное распределение длин связи должно привести к расщеплению соответствующих дифракционных линий. Кроме того, материал оказывается армированным кластерами иной симметрии, что должно привести к изменению

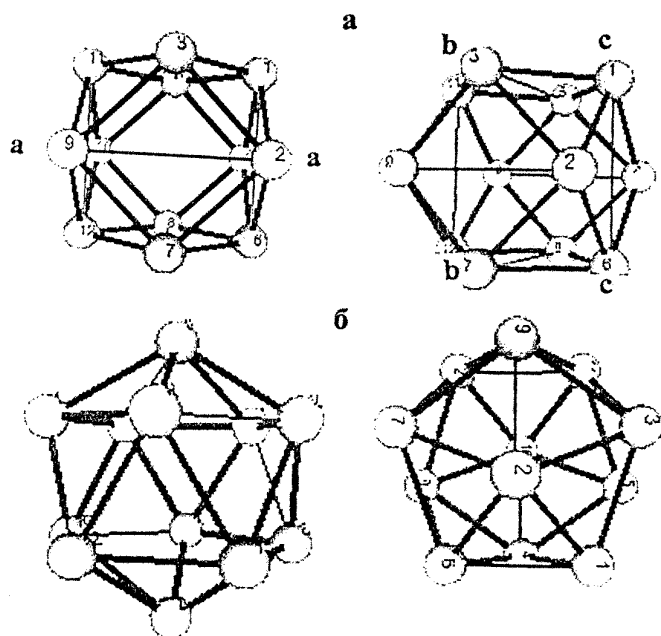


Рис. 4. Схема преобразования координационного полиэдра в ГЦК-структуре (кубооктаэдр - икосаэдр). Исходный кубооктаэдр (а) плавно деформируется вдоль трех различных направлений совокупности $\langle 100 \rangle$ (показаны буквами aa, bb, cc); 4б - икосаэдр в двух проекциях.

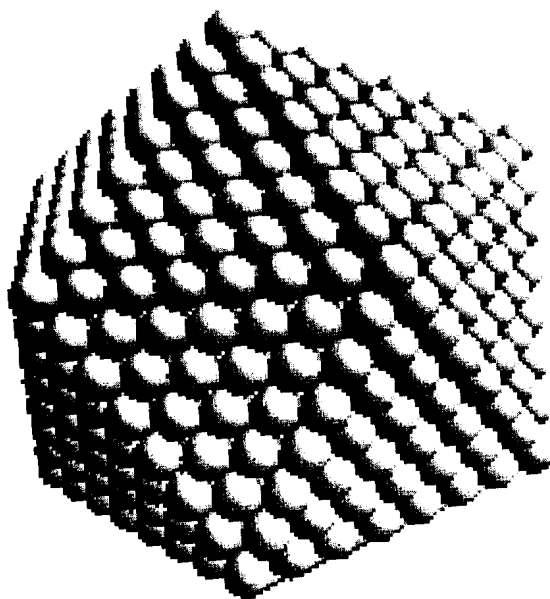


Рис.5. Кластер икосаэдрической симметрии, состоящий из семи слоев

ребра полиэдра в процентах к исходному значению, а также относительное число направлений совокупности, вошедшее в группу с данной деформацией.

Измерялись деформации для икосаэдра, а также для кластера (рис.5) из семи последовательных слоев (общее число атомов - 1414). Поскольку деформации однотипны для всех четных и нечетных слоев, в таблице показаны результаты для первого, а также для шестого и седьмого слоев. При формировании кластера ато-

свойств ионной и электронной подсистем твердого тела.

РЕЗУЛЬТАТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В данной работе преобразование координационного полиэдра кубооктаэдр - икосаэдр реализовано несколько другим путем, чем в работе [4], результаты данного преобразования показаны на рис.4а и 4б. Плавно выполнена одновременная деформация вдоль трех различных направлений типа $\langle 100 \rangle$ (выделены на рисунке). При этом фиксировались изменения длин для различных совокупностей кристаллографических направлений, в частности, для направлений типа $\langle 100 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$.

На данном этапе исследования использовался прямоугольный потенциал - жесткие шарики - для качественной оценки результатов преобразования.

В результате преобразования все совокупности кристаллографических направлений разбились на группы, причем для разных групп наблюдаются деформации разного знака, а некоторые из направлений не изменили свою длину после преобразования. Результаты измерений показаны в табл.1. Указана деформация

мы данного слоя касались друг друга, а при наложении последующих слоев они деформировались, “проникая” друг в друга примерно на пять процентов, что находится в качественном согласии с результатами работы [4].

Видно, что, действительно, в результате преобразования кубооктаэдр - икосаэдр совокупности направлений разбиваются на две группы, а это должно привести к расщеплению соответствующего дифракционного максимума.

Данный эффект максимален для направления $\langle 100 \rangle$ и является наименьшим для направления $\langle 110 \rangle$. Такой результат согласуется с результатами структурных экспериментов, выполненных нами ранее для облученного монокристалла Fe-Ni [8]. При облучении образца монокристалла Fe-Ni вдоль различных кристаллографических направлений во всех случаях соответствующие линии дифрактограммы оказывались расщепленными, однако при этом наибольший эффект расщепления наблюдался нами для направления $\langle 100 \rangle$, наименьший - для направления $\langle 110 \rangle$. В табл.2 показаны изменения периода решетки, подсчитанные по величине расщепления рентгеновских линий. Видно, что эти изменения для направления $\langle 100 \rangle$ для всех доз превосходят изменения для направления $\langle 110 \rangle$ не менее, чем в два раза.

Таблица 1

Деформация ребер полиэдра при трансформации кубооктаэдр-икосаэдр для различных совокупностей кристаллографических направлений

$\langle 100 \rangle$

Число уровней - 1, число атомов - 12

Изменение длины ребра, %	Число компонент совокупности, %
12,597	50
41,424	50

Число уровней - 7, число атомов - 1414

Изменение длины ребра, %	Число компонент совокупности, %
-18,351	19
-12,597	20
-2,476	37
-41,424	29

$\langle 110 \rangle$

Число уровней - 1, число атомов - 12

Изменение длины ребра, %	Число компонент совокупности, %
0,000	67
5,147	33

Число уровней - 7, число атомов - 1414

Изменение длины ребра, %	Число компонент совокупности, %
-27,539	8
0,000	51
5,147	41

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено сравнение результатов структурного исследования неравновесного радиационно-индуцированного состояния в металлических материалах и результатов компьютерного эксперимента, описывающего формирование кластер-

Таблица 2

Разность периодов решетки ($\Delta a \times 10^2$ А), соответствующая расщеплению дифракционных линий, при облучении вдоль различных кристаллографических направлений

Доза, ион/см ²	<111>	<110>	<100>
$1 \cdot 10^{17}$	1,0	0,8	2,4
$5 \cdot 10^{17}$	0,8	1,1	1,7
$1 \cdot 10^{18}$	0,9	0,9	1,9

ной структуры после облучения. Получено качественное согласие, позволяющее продвинуться в понимании взаимодействия излучения с веществом и природы образующихся неравновесных состояний.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Khmelevskaya V.S. and Malynkin V.G.* // Phase Transitions.- 1997. - V.60.- P.59-60.
2. *Khmelevskaya V.S., Kraposhin V.S. and Malynkin V.G.* // Int.Journ.Non-Equilibrium Processing.- 1998. - V.10. - № 3/4. - P.323-331.
3. *Хмелевская В.С., Малынкин В.Г.* // Материаловедение. - 1998.- № 2. - С.25-33.
4. *Mackay A.L.* Acta Cryst. - 1962. - V.15. - P. 916-918.
5. *Howie A. and Marks L.D.* //Philos.Mag.- 1984.- V. A 49. - P.95-101.
6. *Reinhard D., Hall B.D., Ugarte D., Monot R.* // Phys.Rev. B. - 1997. - V.55.- № 12.- P. 7868-7881.
7. *Morret C., Treglia G., Legrand B.* // Surface Science.- 1997.- V. 383.- P.L719-L727.
8. *Хмелевская В.С., Малынкин В.Г., Кудря Е.В.* //Вопр.ат. науки и тех. Сер.:ФРП и РМ. - 1989. - Вып. 3(50). - С. 58-61.

Поступила в редакцию 23.05.99.

The experimental study carried out using probes of two types have shown that the violation of periodicity in staking of the cut spring rings results in distortion of the temperature field both over the length and radius of the TC. Thus a conclusion is reached that it is possible to extrapolate the size of the gas clearance on the base of the temperature field distribution.

УДК 539.1.04:669.017.3

Cluster Structures in FCC-materials at High Levels of Radiation Damage \ V.S. Khmelevskaya, N.V. Kulikova, A.V. Nakin, V.G. Malynkin; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetica" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 6 pages, 2 tables, 5 illustrations. - References, 8 titles.

It is shown, that in various metal materials (alloys on the basis Fe-Ni-Cr, Ni-Cr, Cu-Ni, Fe-Cr, V-Ti-Cr, and also pure Zr and Ti) as a results of interaction with ion radiation special non-equilibrium states arise. The model of local reorganization of a crystal lattice in the vicinity of vacancy is suggested atomic groups and small clusters of icosahedral symmetry are formed. The computer experiment shows that a bimodal distribution of lengths of edges of a polyhedron appears at such transformation and it should lead to splitting of X-ray diffraction peaks.

УДК 539.163.517.91

Information Reference System «Transmutation of Nuclides in Nuclear Reactors» \ V.I. Plyaskin, R.A. Kosilov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetica" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 9 pages. - References, 5 titles.

Description of the information reference system is given permits to perform calculations of nuclides transmutation in nuclear reactors. The offered algorithms of calculation of the basic parameters of the transmutation are based on the directional graph of the transmutations of nuclides, have allowed to increase the rate of calculations. The calculations are carried out using newest databases for nuclear-physical constants which raise the reliability of results.

УДК 539.17.212

Calculation of Angular Distribution of Direct Pick-up Reaction with Transfer of Three Nucleons \ V.S. Masterov, N.P. Savelyev; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetica" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 6 pages, 5 illustrations. - References, 17 titles.

The computational model for the three-nucleon transfer reaction (p, α) is developed. The approach to calculation of the dynamic amplitude of the differential cross-section is offered. The results of calculations of the cross-sections for nuclei ^{39}K , ^{42}Ca , ^{58}Ni within the energy range from 20 up to 72 MeV are given.