



I. Общие вопросы физики радиационных повреждений

Modeling Radiation Damage Effects on the Ductility of Polycrystalline Metals

A. Arsenlis*, B. D. Wirth**, and M. Rhee*

*Materials Science and Technology Division,

Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA, USA (arsenlis@llnl.gov)

**Department of Nuclear Engineering, University of California, Berkeley, CA, USA

Performance degradation of structural steels in nuclear environments results from the formation of a high number density of nanometer scale defects. The defects observed in copper-based alloys are composed of vacancy clusters in the form of stacking fault tetrahedra and/or prismatic dislocation loops that impede the motion of dislocations. The mechanical behavior of irradiated copper alloys exhibits increased yield strength, decreased total strain to failure and decreased work hardening as compared to their unirradiated behavior. Above certain critical defect concentrations (neutron doses), the mechanical behavior exhibits distinct upper yield points. In this paper, we describe the formulation of an internal state variable model for the mechanical behavior of such materials subject to these (irradiation) environments. This model has been developed within a multiscale materials modeling framework, in which molecular dynamics simulations of dislocation – radiation defect interactions inform the final coarse-grained continuum model. The plasticity model includes mechanisms for dislocation density growth and multiplication and for irradiation defect density evolution with dislocation interaction. The general behavior of the constitutive (homogenous material point) model shows that as the defect density increases, the initial yield point increases and the initial strain hardening decreases. The final coarse-grained model is implemented into a finite element framework and used to simulate the behavior of tensile specimens with varying levels of irradiation induced material damage. The simulation results compare favorably with the experimentally observed mechanical behavior of irradiated materials.

This work was performed under the auspices of the U.S. Department of Energy by University of California Lawrence Livermore National Laboratory under contract No. W-7405-Eng-48.

Модифицированная модель образования каскадов смещений для случая облучения монокристаллических материалов пучком ионов He^+ и Ar^+ с широким энергетическим спектром

Н. В. Волков, Б. А. Калинин, И. В. Олейников

Московский инженерно-физический институт (государственный университет),
Москва, Россия (volkov@vfk.mephi.ru)

В ряде случаев методика имитационных экспериментов предполагает применение пучков ионов с широким энергетическим распределением (ионная имплантация, воздействия термоядерной плазмы и т.п.). Одним из узловых моментов подобных экспериментов является адекватность формирования каскадов атомных столкновений, которые создают дефекты, определяют на первом этапе массоперенос в облучаемом слое, а в дальнейшем и структурно-фазовое состояние приповерхностного слоя исследуемого материала.

В настоящей работе представлены результаты расчета вида каскадной функции для случая облучения материалов (Be, монокристаллы: алмаз, Si, Cu, Fe, Ni, Mo, W) пучком ионов He^+ , Ar^+ с широким гауссоподобным энергетическим спектром в интервале энергий 1-50 кэВ при величинах средней энергии ионов 1, 5, 10, 20 и 30 кэВ.

Вид каскадной функции, учитывающей энергетический спектр ионов, подбирался из результатов сравнения расчетных данных величин коэффициентов распыления и параметров атомного перемешивания с экспериментально измеренными величинами – коэффициентом распыления Sp , глубиной внедрения ионов R_p и глубиной проникновения ПВА из пленки в тело подложки – матрицы X_m .

Исследование процесса формирования радиационных дефектов проводилось с помощью просвечивающей электронной микроскопии. Изучение закономерностей массопереноса под облучением выполнено с помощью вторичной ионной масс-спектрометрии, обратного резерфордского рассеяния и метода ядер отдачи.

В качестве наиболее подходящей тестирующей программы были взяты коды TRIM- Sp и TRIM- R_p (использующие потенциал Бьерзака-Циглера), которые дали хорошее согласие с экспериментальными результатами для случаев облучения монокристаллических мишеней со средней и большой атомными массами (Cu, Fe, Ni, Mo, W). Однако при облучении Be и монокристаллов C и Si (110) расхождение расчетных значений с экспериментальными данными достигает 200-500 и более %.

Показано, также, что ТРН-стандарт удовлетворительно описывает экспериментальные данные при облучении материалов ионами Ar^+ с энергией выше 20 кэВ. Однако в области энергий 1 – 20 кэВ расчетное количество смещенных атомов оказывается завышенным по сравнению с данными, полученными из экспериментов. Эти расхождения, видимо, связаны с особенностями распределения по глубине радиационных дефектов, их взаимодействием с последующими каскадами атомных смещений, а также с радиационно-стимулированными процессами при облучении материалов пучком ионов с широким энергетическим спектром.

Исследование накопления и отжига радиационных дефектов в Fe-Ni ГЦК сплавах с добавками Al и Ti

А. П. Дружков, В. Л. Арбузов, Д. А. Перминов, К. В. Шальнов, В. А. Павлов
Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия (druzhkov@imp.uran.ru)

Примесные атомы в твердом растворе взаимодействуют либо с междоузельными атомами (подразмерные примеси), либо с вакансиями (надразмерные примеси), в результате подвижность точечных дефектов в сталях может уменьшаться. В случае концентрации примесных добавок выше предела растворимости при термическом или радиационно-индуцированном старении возможно выделение дисперсных частиц вторичных фаз, в частности интерметаллидов. Известно, что интерметаллидные частицы сдерживают распухание в нержавеющих сталях.

Цель этой работы – исследовать влияние примесей Al и Ti как в твердом растворе, так и в составе частиц выделений типа $\text{Ni}_3\text{Al}(\text{Ti})$ на эволюцию радиационных дефектов в модельном гцк Fe-Ni сплаве. Радиационные дефекты создавались электронным облучением при температурах 280 – 573 К. Дефекты диагностировались методом позитронной аннигиляционной спектроскопии, имеющим высокую чувствительность к дефектам вакансионного типа. Аттестация исходной микроструктуры сплавов после различных термообработок (закалка, старение) проводилась методами просвечивающей электронной и сканирующей туннельной микроскопии.

Показано, что атомы Ti (надразмерная примесь) эффективно взаимодействуют с вакансиями, являются ядрами для вакансионных кластеров. Вакансионные кластеры, декорированные атомами Ti, термически стабильны до 450 К.

Хотя алюминий и является надразмерной примесью, его взаимодействие с вакансиями не обнаружено. Однако, было установлено, что интерметаллидные когерентные наночастицы типа Ni_3Al сдерживают накопление дефектов вакансионного типа. Эффективность этого процесса увеличивается с ростом температуры облучения. В докладе приводятся также результаты отжига дефектов в Fe-Ni сплавах с различной исходной микроструктурой, обсуждаются механизмы влияния интерметаллидных наночастиц на эволюцию радиационных дефектов в аустенитных сплавах.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 04-02-16053) и Программы поддержки ведущих научных школ (проект № III-639.2003.2).

Атомная структура интерфейсов после радиационных и других интенсивных внешних воздействий

В. А. Ивченко

Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия (ivchenko@ier.uran.ru)

В настоящем докладе представлены результаты оригинальных исследований изменений атомной структуры интерфейсов в материалах после интенсивных внешних воздействий, включая радиационные, методами полевой ионной микроскопии (ПИМ) и атомного зонда ПИМ (АЗПИМ). Преимущества заключаются в возможности проводить прямое прецизионное изучение реальной структуры поверхностных и приповерхностных слоев кристаллической решетки конденсированных состояний в процессе управляемого и последовательного удаления поверхностных атомов электрическим полем при криогенных температурах. АЗПИМ, представляющий собой масс-спектрометр предельного разрешения (одномерный), позволяет определять химическую природу отдельного атома поверхности посредством перемещения его изображения в зондирующее отверстие и последующего полевого испарения с помощью добавочного высоковольтного импульса. Таким образом, регистрируется химический состав отдельных кластеров или частиц выделившейся фазы, которые попадают в поле зрения микроскопа в процессе контролируемого удаления одного атомного слоя за другим. Томографический атомный зонд полевого ионного микроскопа (ТАЗПИМ) позволяет реконструировать элементное распределение атомов изучаемого объекта в объеме $15 \times 15 \times L \text{ нм}^3$ в процессе последовательного полевого испарения одного атома за другим с поверхности образца.

Цель работы заключалась не только в сопоставлении параметров вышеуказанных планарных интерфейсов на атомном уровне (имеются в виду ширина граничной области, строение дефектов и т.д.), но и в анализе вида того воздействия, который вызвал появление именно таких нарушений кристаллической решетки материала.

В процессе исследований ионно-имплантированных материалов методом полевой ионной микроскопии выявлены радиационные эффекты воздействия заряженных пучков частиц ($E=20 \text{ кэВ}$, $D=10^{18} \text{ ион/см}^2$, $j=300 \text{ мкА/см}^2$) на приповерхностный объем атомно-упорядочивающихся сплавов (Cu_3Au), твердых растворов ($50\text{Pd}30\text{Cu}20\text{Ag}$), в процессе распада которых происходит выделение атомно-упорядоченной фазы. Обнаружено образование ультрадисперсной блочной структуры как на поверхности, так и в приповерхностных объемах чистого металла (иридия) в результате имплантации ионов аргона.

В результате изучения атомного строения планарных дефектов в металлическом W, поликристаллическом Ni марки (НО), Cu и Ir, полученных после различных интенсивных внешних воздействий, и механически сплавленном $\text{Cu}_{80}\text{Co}_{20}$, методами ПИМ, АЗПИМ и ТАЗ, установлена различная структура их граничной области. Показано, что природа их атомного строения непосредственно зависит от типа внешнего воздействия и определяет, в конечном счете, физико-механические свойства материалов.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 04-02-96069-р2004урал_a, грант № 03-02-16560-а) и программы государственной поддержки ведущих научных школ РФ (грант НШ-639.2003.2).

Полевая ионная микроскопия радиационных дефектов в Pt после нейтронного облучения

Е. В. Попова, В. А. Ивченко, А. В. Козлов*, В. В. Овчинников
Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия (ivchenko@ier.uran.ru)
* ФГУП ВНИИНМ, Заречный, Россия

Основная цель настоящей работы заключалась в изучении радиационных дефектов в чистой платине (единичных точечных дефектов и небольших их комплексов, а также радиационных кластеров, образующихся в неперекрывающихся каскадных областях), облученной в реакторе ИВВ-2М при температуре ~ 310 К до флюенсов быстрых нейтронов $6.7 \times 10^{21} \text{ м}^{-2}$ и $6.7 \times 10^{22} \text{ м}^{-2}$ методом полевой ионной микроскопии (ПИМ). ПИМ позволяет проводить прецизионное исследование изменений реальной структуры приповерхностных атомных слоев кристаллической решетки металлов и сплавов, происходящих в результате облучения, в атомном масштабе. В то же время этот метод дает возможность анализировать структуру образца в объеме путем управляемого последовательного удаления поверхностных атомов электрическим полем.

В результате нейтронного облучения чистой платины до $6.7 \times 10^{21} \text{ м}^{-2}$ радиационные повреждения, как правило, представляли собой отдельные вакансии, небольшие вакансионные кластеры, смещенные из положений равновесия (узлов идеальной решетки) отдельные атомы и зоны смещенных атомов с размерами, сравнимыми с межатомным расстоянием.

При изучении структурного состояния чистой Pt после нейтронного облучения до $6.7 \times 10^{22} \text{ м}^{-2}$ (с $E > 0.1$ МэВ) методом ПИМ было обнаружено присутствие большого количества радиационных кластеров. Эти дефекты представляли собой обедненные зоны (области с локально повышенной концентрацией вакансий) с «поясом» междоузельных атомов. Средняя концентрация вакансий в обедненных зонах составила 9 %, а концентрация междоузельных атомов – 1,5 %. Форма обедненных зон, изученная с помощью полевого испарения, была крайне нерегулярной, что соответствует модели Зеегера. Средний размер радиационных кластеров, определенный на основании расчета локальных радиусов кривизны вершины эмиттера и соответствующих линейных расстояний составил ~ 4 нм. Изучение большого количества микроснимков поверхности облученной платины позволило установить плотность радиационных нарушений в объеме. Экспериментально измеренная плотность составила $4 \times 10^{24} \text{ м}^{-3}$.

Проводилось моделирование полевых ионных изображений радиационных дефектов в облученной быстрыми нейтронами чистой платине.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 04-02-96069-р2004урал_а, грант № 03-02-16560-а) и программы государственной поддержки ведущих научных школ РФ (грант НШ-639.2003.2).

Расчет спектров первично-выбитых атомов и скоростей создания смещений в корпусных сталях ВВЭР

Ю. В. Конобеев, В. А. Печенкин, И. В. Пышин
ГНЦ РФ Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского,
Обнинск, Российская Федерация (konobeev@ippe.obninsk.ru)

Для сравнения данных по радиационному охрупчиванию корпусных сталей реакторов типа ВВЭР, а также в разных точках одного такого реактора необходимо рассчитать повреждающую дозу в единицах смещений на атом (сна). Кроме того, для разработки теоретических моделей охрупчивания и физически обоснованных нормативных зависимостей важен также расчет «эффективных» сна и спектров первично-выбитых атомов (ПВА).

Представлены результаты расчетов скоростей создания смещений и спектров ПВА на внутренней и внешней поверхности корпусов, а также в позициях образцов-свидетелей ВВЭР-440 и ВВЭР-1000. В качестве исходных данных использованы спектры нейтронов, полученные с помощью трехмерного расчета нейтронных и гамма-полей в этих реакторах. Скорости создания смещений рассчитаны как с помощью известного дифференциального сечения смещений, так и путем свертки полученных спектров ПВА с каскадной функцией, соответствующей так называемому NRT-стандарту, рекомендованному МАГАТЭ. Показано, что скорость создания смещений в образцах-свидетелях примерно на порядок выше, чем на внутренней поверхности корпуса ВВЭР-440. Проведены расчеты «эффективных» сна с использованием литературных данных о каскадной эффективности ПВА, полученных методом молекулярной динамики. Представлены также результаты расчетов вклада гамма-квантов в скорость создания смещений.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 04-02-17278).

О прочности и разрушении металлов и сплавов при тепловом ударе

В. Т. Пунин, А. В. Грунин, А. М. Молитвин, А. В. Гришин, С. А. Горностай-Польский
Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт
экспериментальной физики, г. Саров, Россия (a-molitvin@expd.vniief.ru)

Создание разнообразных энергетических и облучательных установок стимулировало изучение механических свойств материалов в условиях воздействия мощных потоков излучения: электронного, рентгеновского, лазерного, пучка ионов и т.д. Интенсивно изучаются поверхностное и глубинное упрочнение металлов и сплавов при облучении,

генерация упругих и ударных волн, разрушение материалов при тепловом ударе и т.д. (см., например, [1-5] и библиографию к ним). Интерес к исследованиям разрушения материалов при тепловом ударе в значительной степени обусловлен тем, что напряжения, возникающие при тепловом ударе, могут привести к разрушению элементов самих энергетических и облучательных установок. Результаты исследований откольного разрушения при тепловом ударе способствуют развитию теории разрушения твёрдых тел.

В докладе излагаются результаты исследований откольного разрушения металлов и сплавов при тепловом ударе, результаты исследований влияния геометрии облучаемого объекта на картину его термомеханического разрушения. В рамках кинетического подхода к проблеме откола, рассматривающего откол как протекающий во времени процесс, найдены временные зависимости откольной прочности меди, никеля, титана, латуни, бронзы, молибдена, вольфрама, тантала, кадмия, свинца, цинка, серебра и сталей при тепловом ударе. Показано, что долговечность металлов и сплавов при тепловом ударе экспоненциально убывает с ростом амплитуды разрушающих напряжений.

В рамках энергетического подхода, основанного на сопоставлении запаса энергии в образце и работы разрушения, найдены временные зависимости критической удельной энергии разрушения названных выше металлов и сплавов при тепловом ударе. Показано, что критическая удельная энергия разрушения материала, необходимая для совершения работы отрыва, разделения подвергнутого тепловому удару образца на части, возрастает с ростом времени действия растягивающих напряжений в сечении откола.

К снижению порога разрушения и увеличению степени разрушения объекта при тепловом ударе могут приводить геометрические эффекты, обусловленные кумуляцией напряжений, возникновением кумулятивных выбросов материала, потерей устойчивости при воздействии интенсивных потоков энергии проникающего излучения на конусы, конические оболочки, диски и стержни.

Литература

1. Eliezer S., Gilath I., Bar-Noy T. // *J. of Appl. Phys.* 1990, V.67, N2, P.715.
2. Воробьев С.А., Лопатин В.С., Погребняк А.Д. и др. // *ЖТФ*, 1985, т.55, вып.6, с.1237
3. Бонюшкин Е.К., Глушак Б.Л., Завада Н.И. и др. // *ПМТФ*, 1996, т.37, №6, с.105
4. Молитвин А.М., Борин И.П., Босамыкин В.С. // *ПМТФ*, 1996, т.37, №5, с.162
5. Молитвин А.М. // *ПМТФ*, 2003, т.44, №1, с.163

Пластическая деформация материалов под облучением

П. А. Селищев В. В. Москаленко

КНУ имени Тараса Шевченко, физический факультет,
пр. Глушкова, 6, Киев-022, 02022, Украина (selyshchev@mail.univ.kiev.ua)

В условиях интенсивного развития ядерной энергетики проблема ползучести материалов внутри реакторных установок, где помимо силового и термического факторов важную роль играет постоянное облучение, остается актуальной и в настоящее время.

В данной работе проведено теоретическое исследование, которое объясняет нелинейные особенности (перегибы, изломы) дозовой зависимости скорости ползучести

примесных материалов под облучением. Эти особенности многократно наблюдались экспериментально.

Динамика переходной ползучести чистых материалов изучена в [1]. Представляет интерес анализ влияния на ползучесть облучаемых металлов наличие атомов примеси, которые всегда присутствуют в реальном материале.

Исследования проводились в рамках модели «скольжение-переползание». Предполагалось, что скорость ползучести пропорциональна модулю разности потоков междоузельных атомов и вакансий. Полагалось, что скользящая дислокация может захватывать вакансии. Роль примеси заключается в связывании свободных вакансий и междоузельных атомов в малоподвижные комплексы.

В ходе работы установлено, что в зависимости от условий облучения и свойств облучаемого образца могут реализоваться либо один, либо два стационарных режима ползучести. Конкретный стационарный режим ползучести определяется начальным состоянием образца. Скорость ползучести стремится к стационарному значению либо монотонно, либо проходя через экстремум. В момент времени, когда потоки на дислокации вакансий и междоузельных атомов становятся равными, скорость ползучести будет равна нулю. Это приводит к появлению изломов дозовой зависимости ползучести.

Изменение концентрации примеси ведет к изменению стационарных значений скорости ползучести и концентрации дефектов. Качественное изменение динамики нестационарной ползучести не происходит. Фазовые портреты деформируются, но остаются топологически подобными. Все качественные эффекты (излом, перегиб, гистерезис, провал скорости ползучести) свойственные ползучести в облученных материалах, имеют место как в чистых, так и в материалах с примесями.

Полученные результаты позволяют прогнозировать поведение материалов и определять оптимальные режимы их эксплуатации.

Литература

1. Селищев П.А. Самоорганизация в радиационной физике// Киев: Аспект полиграф, 2004, с.240

Properties of point defects and anomalous features of stage III in Fe-16Cr alloy

A. L. Nikolaev

Institute of Metal Physics, Ekaterinburg GSP-170, 620219 Russia (nikolaev@imp.uran.ru)

The resistivity recovery (RR) after low temperature electron irradiation was investigated in Fe-(14-16)Cr alloys, non-doped and doped with impurities (about 0.1 at. % of Au, N and Si). A modification of the method using two samples of the same alloy with different initial defect concentrations and permitting identification of the short-range order (SRO) establishing onset in course of post irradiation anneal was applied. The reliable identification of the SRO establishing onset required further method modification: a difference between RRs in these samples was introduced. The onset of the SRO establishing in impurity-doped alloys is shifted as compared to that in non-doped alloy by about 20 K. This temperature interval was attributed to difference

between free migration onsets of vacancies and interstitial atoms (IAs). In non-doped alloy onset of vacancy free migration initiates the SRO establishing while in doped ones vacancies are trapped at impurity atoms and the SRO manifestation is driven by onset of IA migration at higher temperature.

Respective RR peak is seen only for IAs at 225 K and no peak for vacancies can be found in RR spectra at all. According to the shift in onset temperatures of free migration the vacancy peak (stage III) should be positioned around 205 K.

Comparison of RR data in Cr16 and Cr16Si alloys around 205 K demonstrates that replacement of unknown vacancy reactions in Cr16 with vacancy trapping at Si atoms in Cr16Si is accompanied with increase in RR and appearance of invisible before vacancy peak. This result indicates that dominating reaction in which participate migrating vacancies is vacancy clustering with no visible signs of recombination. Analysis and comparison of present data with available data on RR and positron annihilation in close Fe-15Cr [1] lead to conclusion that vacancy clustering is stopped at di-vacancy formation step. This situation is possible in BCC lattice, in contrast to FCC one where di-vacancies are always more mobile than vacancies. Dominating di-vacancy formation in stage III will actually result in negligible RR giving negligible and unobservable RR peak. Di-vacancy formation is also not resolved by spectroscopy of positron lifetime since the latter is very close in vacancies and di-vacancies [2]. Thus, stage III is almost invisible for positrons too.

Following di-vacancy formation the IA migration at slightly higher temperatures (around 225 K) leads to recombination of IAs with immobile di-vacancies resulting in release of mobile mono-vacancies. Since both type defect migration contribute to defect annealing over these temperatures, their mutual migration enhances as defect recombination as SRO establishing and, therefore, gives rise to large RR peak. Since the annealing processes in this stage to large extent are determined by di-vacancies formed in preceding stage III and vacancies released due to recombination, this stage RR peak height is strongly affected by vacancy traps.

It is shown with available experimental data that with application of traditional experimental methods and approaches such as RR (one sample), positron lifetime and slight doping (~0.01 at. % of impurity vacancy traps) only, the RR peak at 225 K (attributed to IA migration) demonstrates distinct classical signs of vacancy migration stage (stage III). And only thorough analysis with use of additional data obtained within different approach can unmask this miracle.

The work was carried out with the financial support of Russian Foundation for Basic Research (grant # 04-02-16053).

References

1. Dimitrov C., Benkaddour A., Corbel C. and Moser P., Ann. de Chimie (France) 16, 319 (1991)
2. Puska M.J., Nieminen R.M., J. Phys. F: Met. Phys. 13, 333 (1983)

Определение температуры областей каскадов атомных смещений на стадии термического пика

В. В. Овчинников, Б. Ю. Голобородский, Ф. Ф. Махинько, В. И. Соломонов, О. А. Снигирева
Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия (Vladimir@iep.uran.ru)

Образец α -железа (армко-Fe 99.99 Fe) облучался в вакууме при остаточном давлении $< 10^{-5}$ мм рт. ст. непрерывным пучком ионов Ag^+ при изменении их энергии от 5 до 20 кэВ и плотности ионного тока от 50 до 150 мкА/см². Спектр свечения мишени измерялся многоканальным фотоприемником на базе дифракционного спектрографа ОС-12 и ПЗС-линейки в диапазоне от 360 до 850 нм. Спектральное разрешение аппаратуры во всем диапазоне - не хуже 2 нм, погрешность измерения длины волны - не хуже 1,2 нм. Световой поток от облучаемого образца в фотоприемник передавался по многожильному кварцевому световоду, приемный конец которого был установлен на расстоянии 1 см от края образца и направлен на поверхность образца под углом 60^0 . Световой поток снимался с поверхности диаметром около 6 мм.

Во всех спектрах присутствуют две широкие полосы планковского теплового излучения. Первая полоса с максимумом при длине волны λ_{m1} , (изменяющейся с изменением энергии ионов в пределах от 500 до 570 нм) соответствует планковскому излучению приповерхностной плазмы. Максимум второй полосы при длине волны λ_{m2} расположен в ИК области спектра, недоступной фотоприемнику. Эта полоса проявляется лишь в виде ее коротковолнового крыла и обусловлена тепловым излучением мишени, нагретой воздействием пучка.

На фоне этих широких полос во всех спектрах наблюдается значительно более узкие полосы неравновесного излучения. Из них, по крайней мере, две наиболее узкие полосы при $\lambda_1 = 659,2$ нм (самая сильная во всех спектрах) и ее более слабый спутник при $\lambda_2 = 794,2$ нм хорошо соответствуют излучению атомов железа. Кроме них в коротковолновой части во всех спектрах наблюдаются восемь сравнительно широких полос (максимумов). По-видимому, все эти полосы представляют собой рекомбинационное излучение ионов железа, а полоса с наибольшей длиной волны соответствует излучению ионов Fe^{2+} . В длинноволновой области спектра наблюдается серия сильных узких полос, одна из которых может быть приписана излучению атома аргона.

Наименьшая длина волны для максимума планковского излучения $\lambda_{m1}=500$ нм наблюдается при энергии ионов Ag^+ 5 кэВ. В соответствии с законом Вина $T = b/\lambda_{m1}$ это соответствует температуре плазмы $T=5796$ К ($b=0.002898$ м·К - постоянная Вина). Наличие широкой коротковолновой полосы планковского излучения связывается с наличием термических пиков, возникающих в результате эволюции плотных каскадов атомных столкновений. То, что плотность выделяемой в каскаде энергии и, соответственно, температура термического пика возрастает с уменьшением энергии ионов, согласуется с результатами расчета в работе [1]. Результаты работы являются прямыми измерениями температуры ионной подсистемы в термализованном каскаде.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант № 04-02-17602-а).

Литература

1. Овчинников В.В. и др.// Труды X Межнационального совещания «Радиационная физика твердого тела». Севастополь, 2000, с. 391-394.

Механизмы влияния интерметаллидных наночастиц типа Ni_3Al на эволюцию радиационных дефектов в модельных ГЦК железо-никелевых сплавах

Д. А. Перминов, А. П. Дружков, В. Л. Арбузов

Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия (d_perm@rambler.ru)

Одним из перспективных способов снижения распухания является применение в качестве конструкционных материалов для ядерных реакторов стареющих аустенитных сплавов с радиационно-стимулированным выделением интерметаллидов $\text{Ni}_3\text{Ti}(\text{Al}, \text{Si})$. Когерентные частицы интерметаллидов снижают накопление радиационных дефектов. Тем не менее, механизмы влияния выделений на развитие процессов радиационной повреждаемости до конца не поняты. Целью данной работы является изучение влияния интерметаллидных выделений Ni_3Al на накопление радиационных дефектов на ранних стадиях радиационной повреждаемости ($10^{-4} - 10^{-3}$ сна), когда только формируются небольшие скопления дефектов.

В работе исследовались Fe-Ni и Fe-Ni-Al ГЦК сплавы. Часть образцов сплавов с алюминием были состарены при 823 К и 923 К в течение различного времени. Размеры образовавшихся в сплавах когерентных частиц интерметаллидной фазы Ni_3Al менялись от 0.4 нм до 7 нм. Исследуемые образцы облучались электронами энергией 5 МэВ на линейном ускорителе при температуре 300 К, 423 К и 573 К. Для исследования дефектной структуры использовался метод измерения угловой корреляции аннигиляционного излучения (УКАИ). Метод УКАИ позволяет также исследовать локальное химическое окружение центров захвата позитронов.

В ходе исследования были обнаружены позитронные состояния в бездефектных частицах интерметаллидных выделений нано- и субнаноразмеров, что позволило исследовать их атомную структуру [1]. Было показано, что частицы Ni_3Al значительно снижают накопление дефектов при температурах облучения 423 К и 573 К, тогда как при 300 К влияние частиц выделений на поведение дефектов не обнаружено. Установлено, что образование вакансионных кластеров происходит преимущественно в матрице, тогда как внутри выделений этот процесс практически полностью подавлен. Полученные данные свидетельствуют о том, что снижение накопления радиационных дефектов обусловлено рекомбинационным механизмом, представленном в [2].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №04-02-16053) и

программы Президиума РАН «Фундаментальные проблемы физики и химии наноразмерных систем и наноматериалов» (проект №7 ИФМ УрО РАН)

Литература

1. Druzhkov A.P., Perminov D.A., Arbuzov V.L., Stepanova N.N. and Pechorkina N.L., *J. Phys: Condens. Matter* **16** 6395-6404 (2004)
2. Turkin A.A., Bakai A.S., *J. Nucl. Mater.* **270** 349-356 (1999)

О роли подвижных вакансионных кластеров в набухании металлов

В. А. Печенкин, Ю. В. Конобеев, И. В. Пышин, А. М. Минашин, С. А. Подгорнов
ГНЦ РФ Физико-энергетический институт им. А.И. Лейпунского,
Обнинск, Российская Федерация (vap@ippe.obninsk.ru)

В существующих теориях зарождения и роста вакансионных пор в металлах и сплавах под облучением, как правило, не учитываются диффузионные потоки дивакансий и более крупных вакансионных кластеров. Известно, однако, что подвижность дивакансий и тривакансий в ГЦК металлах выше подвижности моновакансий. Поэтому под облучением диффузионные потоки мелких вакансионных кластеров могут вносить существенный вклад в зарождение и рост пор. Ограниченные литературные данные указывают на то, что в ОЦК металлах подвижность дивакансий меньше или сравнима с подвижностью вакансий.

Методом молекулярной динамики проведены расчеты энергий связи и миграции дивакансий в α -Fe. Использованы парный потенциал и потенциал на основе метода погруженного атома. Для дивакансий показано, что в наиболее стабильной конфигурации вакансии расположены на расстоянии вторых соседей, в то время как энергия связи конфигурации с вакансиями в положении ближайших соседей оказывается меньше 0.1 эВ. Рассчитанная эффективная энергия миграции дивакансий оказалась близкой к энергии миграции вакансий.

Проведены расчеты стационарных концентраций вакансий, дивакансий и междоузельных атомов в ГЦК (Cu, Ni) и ОЦК (V, Fe) металлах в условиях однородной генерации точечных дефектов, а также в условиях каскадообразующего облучения. Показано, что в ГЦК металлах диффузионный поток дивакансий может существенно превышать поток вакансий и определять рост пор при относительно низких температурах. На примере никеля показано, что учет подвижности дивакансий в теории гомогенного зарождения пор приводит к существенному увеличению скорости их зарождения во всем температурном интервале набухания.

Проведены модельные расчеты скорости набухания металлов применительно к условиям нейтронного, электронного и ионного облучения. Показано, что учет подвижности дивакансий может приводить к существенному увеличению скорости набухания ГЦК металлов, особенно при температурах, когда концентрация точечных дефектов определяется рекомбинацией. В ОЦК металлах подвижные дивакансии не

вносят существенного вклада в скорость распухания. Таким образом, относительно высокая подвижность и термическая стабильность мелких вакансионных кластеров в ГЦК металлах может быть одной из причин их более высокого распухания по сравнению с ОЦК металлами.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 04-02-17278).

Расчет эффективности рождения дефектов в мезоскопической модели каскада

С. В. Рогожкин* **, Ю. Н. Девятко*, А. А. Плясов*

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет), Москва, Россия
(grcm@mephi.ru)

**ФГУП ГНЦ РФ ИТЭФ им. А.И. Алиханова

На начальной стадии развития каскада атом-атомных соударений в поврежденной области находится значительное количество смещенных и выбитых атомов. Однако процессы быстрого отжига оставляют малую часть дефектов в каскадной области, что характеризуется коэффициентом каскадной эффективности.

Расчеты эффективности каскада, как источника радиационных дефектов, вызывают широкий интерес. Основной метод исследования релаксации каскадов - молекулярная динамика (см. напр. [1, 2]). Однако возможности этого метода ограничены начальными стадиями релаксации каскада ($\sim 10^{-10}$ с). Кроме того, результаты, полученные методом молекулярной динамики, критическим образом зависят от параметров используемых потенциалов межатомного взаимодействия.

В работе проведено исследование эффективности каскада на основе мезоскопической модели каскадных процессов [3, 4] и исследовано влияние изменения механизма теплопроводности в процессе релаксации каскада. Расчеты выполнены для каскадов в железе при различных температурах среды и различных энергиях первично выбитого атома. Результаты показали, что доминирующий в начале диффузионной стадии механизм фононной теплопроводности приводит к существенному уменьшению числа дефектов в каскадной области. На этапе быстрого отжига (времена $\sim 10^{-10}$ с) полученные результаты согласуются с результатами метода молекулярной динамики. Показано, что продолжающаяся далее релаксация каскада приводит к увеличению доли отожженных дефектов и, соответственно, к уменьшению коэффициента каскадной эффективности.

Данная работа была выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты 04-02-17064 и 02-02-17489).

Литература

1. English C. A., Foreman A. J. E., Phythian W. J., Bacon D. J., Jenkins M. L., *Materials Science Forum*, **97-99**, 1 (1992)
2. Stoller R.E., *Journal of Nuclear Materials*, **276**, 22 (2000)
3. Девятко Ю.Н., Климов М. В., Маклецов А. А., в сб.: *Ионизирующие излучения и лазерные материалы*, Энергоатомиздат, Москва, 1982, с. 101
4. Девятко Ю.Н., Чернов В.М., Плясов А.А., Рогожкин С.В., *ВАНТ, серия: Материаловедение и новые материалы*, **1(62)**, 288 (2004)

Радиационные дефекты в ионно имплантированных сплавах с дальним порядком

Н. Н. Сюткин

Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия (micros@iep.uran.ru)

Представлен обзор работ автора по исследованию радиационных дефектов, наблюдаемых в упорядоченных сплавах после ионного облучения. Структурная часть работы выполнена методом полевой ионной микроскопии (ПИМ) с высоким пространственным разрешением, близким к атомному.

Показано, что ионы с энергиями 20 - 40 keV создают в приповерхностном слое сплавов широкий спектр разнообразных дефектов.

Используя особенности геометрии образцов для ПИМ облучение проводили как вдоль, так и поперек оси образца, что позволило наблюдать на одном изображении упорядоченные и разупорядоченные области.

Проведена оценка распределения и размеров различного типа дефектов.

Используя метод испарения материала образцов в сильном электрическом поле, прослежено распределение дефектов, их размеры. Установлено, что дефекты находятся в приповерхностном объеме на глубине, существенно превышающей проективные пробеги ионов.

Проведено обсуждение обобщенных результатов.

Моделирование каскадов атомных смещений в цирконии методом молекулярной динамики

М. Ю. Тихончев, Г. А. Шиманский

Федеральное Государственное Унитарное Предприятие “Государственный научный центр РФ Научно-исследовательский институт атомных реакторов”, г. Димитровград, Россия (dns@niiar.ru)

Повреждающая доза является одной из важных характеристик радиационного воздействия, используемых при исследовании изменений физических и механических свойств материалов при длительном облучении. Ее достоверная оценка позволяет сравнивать различные условия облучения и прогнозировать поведение материала в действующих и в проектируемых реакторах в зависимости от меры радиационного воздействия. Специалистами в области реакторного материаловедения и реакторной дозиметрии оговорена процедура расчетов повреждающих доз, соответствующая NRT-стандарту [1].

Важной величиной, используемой для оценки повреждающей дозы по NRT-стандарту, является средняя пороговая энергия смещения E_d . Именно эта величина несет в себе практически всю информацию о кристаллической решетке, где происходят смещения, и о механизме самого смещения. Определение E_d осуществляется в настоящее время с помощью достаточно громоздких экспериментов или с помощью компьютерного моделирования. Причем роль последнего постоянно возрастает.

Также, в последние годы получили развитие новые модели радиационного повреждения, призванные более корректно оценивать повреждающую способность различных энергетических групп нейтронного спектра. При развитии каскадов смещений часть произведённых дефектов аннигилирует, часть попадает в неподвижные кластеры. Поэтому в последнее время многие исследователи склоняются к мысли об учёте фракций свободно-мигрирующих дефектов (FMD) [2-4] при сопоставлении результатов облучения материалов в различных спектрах бомбардирующих частиц.

Настоящая работа посвящена компьютерному моделированию каскадов атомных смещений в цирконии методом молекулярной динамики [5]. При моделировании использовался многотельный потенциал межатомного взаимодействия, базирующийся на методе "погруженного" атома (МПА) [6]. Моделировались атомные смещения в цирконии от первично выбитого атома (ПВА) энергии до 10 кэВ. Рассчитаны величины пороговой энергии смещения для различных кристаллографических направлений в температурном диапазоне от 0 до 600К. Показано, что с ростом температуры величина E_d для циркония изменяется слабо. В тоже время хорошо наблюдается снижение анизотропии пороговой энергии с увеличением температуры. Проведены оценки доли "выживших" дефектов при развитии каскада смещений.

Полученные результаты предлагается использовать для оценки радиационной повреждаемости циркония и циркониевых сплавов.

Авторы выражают глубокую благодарность сотрудникам Тверского Государственного Технического Университета А.Н. Балашову и Е.И. Шамариной за оказанную ими неоценимую помощь.

Литература

1. Norgett N.J., Robinson M.T., Torrens I.M., The proposed method of displacement doze rate calculation, -Nucl. Eng. And Design, 1975, 33, p.50-56.
2. Wiedersich H. Effects of the primary recoil spectrum on microstructural evolution. - J. Nucl. Mater. 179-181 (1991) 70.
3. H.L. Heinisch. Simulating the production of free defects in irradiated metals.// Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 102 (1995), pp. 47-50.
4. B. Petrovic, A. Haghighat, A. Motta, V. Kucukboyaci, J. Kwon. Contribution of gamma irradiation to material damage at BWR core shroud and pressure vessel. Proceedings of the 1998 ANS Radiation Protection and Shielding Division Topical Conference "Technologies for the New Century", April 19-23, 1998, Nashville, Tennessee, USA, V. 2, pp. 25-32.
5. Кирсанов В.В. ЭВМ-эксперимент в атомном материаловедении -М.: Энергоатомиздат, 1990
6. Oh D.J., Johnson R.A. Simple embedded atom method for fcc and hcp metals.// J.Mater.Res., 1988, v.3, p.471.

Кластерные структуры в облученных твердых растворах и интерметаллидах

В. С. Хмелевская

Обнинский государственный технический университет атомной энергетики,
Обнинск, Россия (khmel@iate.obninsk.ru)

Методами структурного эксперимента и математического моделирования исследованы облученные ионами (Ar^+ , 30 кэВ) металлические твердые растворы систем Fe-Cr-Ni, Fe-Cr, V-Ti-Cr и некоторые интерметаллиды (сплавы системы Cu-Mn-Al, содержащие фазу Гейслера). Обнаружено, что в некотором интервале радиационных параметров (доз, температур мишени и интенсивостей потока) в них формируются неравновесные радиационно-индуцированные состояния с существенно измененной структурой и свойствами. Электронномикроскопическое исследование показывает, что морфология материалов в данном состоянии представляет собой структуры, в которых матрица пронизана кластерами, занимающими значительную часть объема. В данной области параметров изменяется микротвердость (в несколько раз), а также электронные свойства твердых растворов, одновременно изменяется рентгенодифракционная картина. Анализ дифракционных эффектов и моделирование методами молекулярной динамики позволили высказать предположение о том, что наблюдаемые кластеры образуются при локальной деформации кристаллической решетки в окрестности радиационных дефектов (радиационных вакансий) и имеют отличную от матрицы икосаэдрическую симметрию. С помощью математического моделирования исследована возможность перехода кубооктаэдр (полиэдр ГЦК структуры) - икосаэдр и стабильность икосаэдрических кластеров внутри ГЦК матрицы, показана определяющая роль свойств потенциала межатомного взаимодействия для данного преобразования. Предположение об икосаэдрической симметрии кластеров подтверждается также данными ЯГР спектроскопии, которые указывает на появление в матрице образований другой симметрии, причем изменения изомерного сдвига подобны тем, которые наблюдаются в квазикристаллах. В интерметаллиде (фазе Гейслера) также образуется подобное радиационно-индуцированное состояние, при этом в интервале его существования значительно изменяются магнитные свойства материала. Совокупность результатов позволяет предположить, что в данном случае образуются T_d -кластеры (пересечение четырех икосаэдров). Поскольку величину намагниченности в фазе Гейслера определяет пространственное распределение атомов с магнитным моментом (здесь это атомы марганца), формирование кластеров в исходной матрице приводит к наблюдаемому увеличению намагниченности материала.