

Определение стоковых сил дислокаций для кластеров собственных межузельных атомов в ОЦК-металлах Fe и V

Д.Н. Демидов
НИЦ КИ

Диффузия радиационных дефектов (РД) к стокам (дислокации, границы зёрен, субграницы, поверхности раздела фаз, и т.д.) и их поглощение приводят к эволюции микроструктуры конструкционных материалов термоядерных и ядерных реакторов и, как следствие, к изменению их физико-механических свойств (радиационно-ускоренная ползучесть, радиационное охрупчивание и радиационное вакансионное распухание материалов). Для построения физических моделей изменения свойств материалов под радиационными, механическими и термическими нагрузками необходимо знать характеристики РД, которые являются параметрами таких моделей. Важной характеристикой РД, оказывающей влияние на изменение свойств материалов, является его механизм диффузии.

Такие РД как кластеры собственных межузельных атомов (СМА) обладают смешанным 1D/3D механизмом диффузии: дефект движется вдоль одного кристаллографического направления с относительно редкими сменами направления движения. Известно, что длина одномерного пробега РД может оказывать существенное влияние на силы стока различных элементов микроструктуры (дислокации, поры, границы зерен) для этих РД.

Наличие неоднородных упругих полей, создаваемых элементами микроструктуры (ЭМ), в случае 1D/3D механизма диффузии изменяет энергии образования седловых конфигураций РД для процессов его миграции или смены направления диффузии (реориентации). Это приводит к изменению частот диффузионных скачков и реориентаций РД и, соответственно, к изменению сил стока ЭМ.

В настоящей работе с помощью кинетического метода Монте-Карло, рассчитаны стоковые силы дислокаций различных типов для димежузлий (кластеров СМА, состоящих из двух СМА) в температурном диапазоне 300—1000 К, в диапазоне дислокационных плотностей $3 \cdot 10^{13}$ — $3 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ для ОЦК Fe и V. Проведено сравнение стоковых сил дислокаций для димежузлий, рассчитанных с учетом 1D/3D механизма диффузии и с помощью ранее разработанного подхода, в котором диффузия димежузлия сводилась к эффективному 3D-механизму.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-7201090, <https://rscf.ru/project/23-72-01090/>