

яснены в работах [8,9]. Легко показать\*, что температура нейтронного газа в воде  $T_n(r)$  в рамках МПГ может быть приближенно описана выражением

$$T_n(r) \approx T_1 + (T_2 - T_1) \frac{g}{b + \frac{I_0(r/L_D)}{I_1(r/L_{rt})}}, \quad (2)$$

где  $T_1$  и  $T_2$  — величины, имеющие смысл температуры нейтронного газа в воде и графите соответственно на большом расстоянии от границы раздела;  $L_D$  и  $L_{rt}$  — длина диффузии и длина ретермализации МПГ в  $P_1$ -приближении;  $g$  и  $b$  — некоторые константы.

Параметры  $g$ ,  $b$  и  $L_{rt}$  определялись подгонкой выражения (2) к экспериментальным данным с помощью метода наименьших квадратов. При  $L_D = 2,83$  см длина ретермализации оказалась равной  $L_{rt} = 0,664 \pm 0,66$  см. Соответствующее этому значению  $L_{rt}$  выражение (2) хорошо описывает экспериментальное распределение температуры нейтронного газа (см. рис. 5).

Необходимо отметить, что эффекты анизотропии потока существенно сказываются для эпитепловых нейтронов (0,2 — 1 эВ) и в значительно меньшей степени этот эффект проявляется для тепловых нейтронов. Эффекты химических связей, анизотропия рассеяния, кинетические эффекты в спектрах нейтронов в цилиндрических системах качественно и по порядку величины близки к соответствующим эффектам в спектрах нейтронов в плоской геометрии [8]. Однако для получения количественных вы-

\* В предположении, что в соответствующей системе уравнений МПГ [8] сечение ретермализации, описывающее переход нейтронов из равновесной для воды группы в неравновесную, и члены источника могут быть приняты равными нулю.

УДК 621.039.548.3

## Радиационный рост, обусловленный анизотропией диффузии

САРАЛИДЗЕ З. К.

В основу предложенного [1] диффузионно-дислокационного механизма высокотемпературного радиационного роста анизотропных кристаллов было положено предположение о том, что в анизотропном кристалле зависимость упругого поля дислокации от ее ориентации относительно кристаллографических осей должна приводить к ориентационной зависимости

диффузионных потоков точечных дефектов к дислокациям.

В настоящей работе исследована размерная нестабильность анизотропных кристаллов под облучением, вызванная анизотропией диффузии. Для объяснения явления радиационного роста анизотропия диффузии впервые была привлечена в работе [2]. Однако, в отличие от этой

работы требуется сравнение настоящего эксперимента с более точным (по углам) решением кинетического уравнения, чем в  $P_1$ -приближении.

Экспериментальные и расчетные кривые распределения превышения температуры нейтронного газа над асимптотическим значением температуры  $T(r) - T(0)$  хорошо согласуются между собой в асимптотической области, однако в области, прилегающей к границе сред, различие становится более значительным. Таким образом, влияние различных моделей рассеяния на температуру нейтронов существенно меньше, чем кинетический эффект. В рамках метода перекрывающихся групп в  $P_1$ -приближении распределение температуры нейтронного газа в системе можно описать с помощью длины диффузии МПГ,  $L_D = 2,83$  см и длины ретермализации МПГ  $L_{rt} = 0,664 \pm 0,066$  см.

В заключение авторы выражают благодарность О. Я. Ермолаеву за помощь в проведении эксперимента, расчетов и в оформлении работы.

Поступила в Редакцию 24.VI.77

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Майоров Л. В. и др. Pulsed Neutron Research. Vienna, IAEA, 1965, v. 1, p. 657.
2. Абдуллаев Х. Ш. В кн.: Спектры медленных нейтронов. М., Атомиздат, 1971, с. 361.
3. Bennet R. BNL-739 (C-32), III, 1962, p. 838.
4. Rehmand A., Andrens D. «Nucl. Sci. Engng», 1973, v. 52, № 3, p. 321.
5. Труханов Г. Я. В кн.: Методы расчета полей тепловых нейтронов в решетках реакторов. М., Атомиздат, 1975, с. 240.
6. Ермолаев О. Я. и др. Препринт ИАЭ-2274. М., 1973.
7. Honeck H. «Nucl. Sci. and Engng», 1960, v. 8, p. 193.
8. Мостовой В. И. и др. «Атомная энергия», 1971, т. 31, вып. 5, с. 459.
9. Абдуллаев Х. Ш., Никитин В. Д., Труханов Г. Я. «Атомная энергия», 1969, т. 26, вып. 6, с. 538.



работы, согласно которой радиационный рост заключается в надстраивании новых атомных плоскостей на определенных границах кристалла вследствие анизотропного выноса материала из объема (самопроизвольная радиационная ползучесть по механизму Набарро — Херринга [3, 4]), в настоящей работе радиационный рост связывается с ориентационной зависимостью диффузионных потоков точечных дефектов к дислокациям [1], причиной которой является анизотропия диффузии (самопроизвольная радиационная ползучесть по диффузионно-дислокационному механизму [5, 6]).

Рассмотрим анизотропный кристалл со взаимно перпендикулярными основными кристаллографическими направлениями, вдоль которых выберем координатные оси. Потоки точечных дефектов к линии дислокации определяются их подвижностью в плоскостях, перпендикулярных к линии дислокации. Поэтому дислокации, имеющие различную ориентацию относительно кристаллографических осей, не будут находиться в одинаковых условиях.

Не усложняя задачу поиском общей закономерности зависимости диффузионных потоков к линии дислокации от ориентации последних, рассмотрим дислокацию, лежащую вдоль одной из кристаллографических осей. Предположим, что в выбранной координатной системе тензорный коэффициент диффузии  $D_{ik}$  имеет диагональный вид

$$D_{ik} = D_i \delta_{ik} \quad (1)$$

(по повторяющемуся индексу здесь и далее суммирование не подразумевается). Тогда коэффициент диффузии в плоскости  $x_j \alpha x_k$ , который определяет диффузионные потоки точечных дефектов к дислокации, лежащей вдоль оси  $x_i$ , будет иметь следующую структуру:

$$D_{\alpha\beta}^{(i)} = D_j \delta_{\alpha\beta} + (D_k - D_j) \delta_{\alpha k} \delta_{\beta k}. \quad (2)$$

(Здесь и далее тройка индексов  $i \gamma k$  принимает значение 1, 2, 3 или другое, получаемое их циклической перестановкой, а индексы  $\alpha$  и  $\beta$  каждый в отдельности могут принимать значения  $j$  или  $k$ .)

Диффузионные потоки точечных дефектов к линии дислокации довольно просто могут быть найдены в случае слабой анизотропии  $\{(D_k - D_j) \ll D_j\}$ , что вполне достаточно для иллюстрации возможностей предлагаемого механизма размерной нестабильности.

Стационарные концентрации точечных дефектов могут быть найдены из решения урав-

нения

$$\sum_{\alpha, \beta} D_{\alpha\beta}^{(i)} \nabla_{\alpha} \nabla_{\beta} c^{(i)} = D_j \Delta c^{(i)} + (D_k - D_j) \nabla_k \nabla_k c^{(i)} = 0 \quad (3)$$

с граничными условиями

$$\left. \begin{aligned} c^{(i)}(r_0) &= c_0; \\ c^{(i)}(R) &= \bar{c}, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где  $r_0$  — радиус ядра дислокации или радиус цилиндра, на поверхности которого дислокация поддерживает термически равновесную концентрацию  $c_0$ ;  $R \approx 1/\sqrt{\rho}$  — среднее расстояние между дислокациями, на котором внешними условиями поддерживается некоторая самосогласованная концентрация  $\bar{c}$ ;  $\rho$  — плотность краевых дислокаций.

Если искать решение уравнения (3) в виде

$$c^{(i)}(r, \theta) = c_1^{(i)}(r) + c_2^{(i)}(r, \theta), \quad (5)$$

где

$$c_1^{(i)}(r) = \frac{\bar{c} - c_0}{\ln(R/r_0)} \ln \frac{r}{R_0} + \bar{c} \quad (6)$$

является решением изотропной задачи с граничными условиями (4), то для  $c_2^{(i)}(r, \theta)$ , представляющей собой малую поправку, вызванную слабой анизотропией диффузии ( $c_2^{(i)} \ll c_1^{(i)}$ ), получим уравнение

$$\Delta c_2^{(i)} = \frac{D_k - D_j}{D_j} \frac{\bar{c} - c_0}{\ln(R/r_0)} \frac{\cos 2\theta}{r^2} \quad (7)$$

с нулевыми граничными условиями на обоих цилиндрах. В приведенных выше формулах  $r$  — расстояние от оси дислокации;  $\theta$  — полярный угол, отсчитываемый от оси  $x_j$ .

Легко убедиться, что решение уравнения (7) должно иметь вид

$$c_2^{(i)}(r, \theta) = c_3^{(i)}(r, \theta) - \frac{D_k - D_j}{D_j} \frac{\bar{c} - c_0}{\ln(R/r_0)} \cos 2\theta, \quad (8)$$

где  $c_3^{(i)}(r, \theta)$  — гармоническая функция, удовлетворяющая граничным условиям

$$c_3^{(i)}(r_0) = c_3^{(i)}(R) = \frac{\bar{c} - c_0}{\ln(R/r_0)} \frac{D_k - D_j}{D_j} \cos 2\theta, \quad (9)$$

отыскание которой не представляет никакого труда.

Окончательно для стационарных концентраций точечных дефектов получим

$$c^{(i)}(r, \theta) = \frac{\bar{c} - c_0}{\ln(R/r_0)} \left[ \ln \frac{r}{R} + \frac{D_k - D_j}{D_j} \times \left( \frac{r_0^2}{r^2} + \frac{r^2}{R^2} - 1 \right) \cos 2\theta \right] + c, \quad (10)$$



что для потоков к единице длины дислокации дает следующее выражение:

$$I^{(i)} = -r_0 \int_0^{2\pi} \sum_{\alpha} J_{\alpha}^{(i)}(r_0\theta) \frac{r_{\alpha}}{r} d\theta = \frac{2\pi(\bar{c}-c_0)}{\omega \ln(R/r_0)} \frac{D_j + D_k}{2}, \quad (11)$$

где  $J_{\alpha}^{(i)} = - \sum_{\beta} \frac{D_{\alpha\beta}^{(i)}}{\omega} \nabla_{\beta} c^{(i)}$  (12)

— плотность потоков точечных дефектов. Здесь  $\omega$  — атомный объем, при записи выражения (10) принято во внимание очевидное условие  $r_0/R \ll 1$ . Как видно из выражения (11), в случае слабой анизотропии потоки дефектов к единице длины дислокации имеют такую же структуру, что и в изотропном приближении, но с коэффициентом диффузии, равным полусумме диагональных компонентов  $D_{\alpha\beta}^{(i)}$ .

Рассмотрим далее для простоты кристалл, в котором краевые дислокации лежат только вдоль основных кристаллографических осей, выбранных в качестве координатных. Обозначим  $\rho_{\alpha}^{(i)}$  плотность дислокаций, лежащих вдоль оси  $x_i$  и имеющих вектор Бюргера вдоль оси  $x_{\alpha}$  ( $\alpha = j, k$ ). Очевидно, что

$$\sum_{\alpha} \rho_{\alpha}^{(i)} = \rho^{(i)}; \quad \sum_i \rho^{(i)} = \rho,$$

где  $\rho$  — полная плотность краевых дислокаций (все величины, относящиеся к межузельным атомам и вакансиям, имеют соответственно знаки + или -).

Если температура облучения и плотность дислокаций в кристалле достаточно высоки, то объемной рекомбинацией точечных дефектов можно пренебречь и условие стационарности процесса запишется как

$$\sum_i \rho^{(i)} I_{\pm}^{(i)} = Q, \quad (13)$$

где  $Q^+ = Q^- = Q$  — интенсивность образования точечных дефектов в процессе облучения. Из условия (13) могут быть найдены самосогласованные стационарные концентрации  $c^{\pm}$ , а с их помощью диффузионные потоки  $I_{\pm}^{(i)}$ :

$$I_{\pm}^{(i)} = \frac{Q(D_j^{\pm} + D_k^{\pm})}{\rho^{(1)}(D_2^{\pm} + D_3^{\pm}) + \rho^{(2)}(D_3^{\pm} + D_1^{\pm}) + \rho^{(3)}(D_1^{\pm} + D_2^{\pm})}. \quad (14)$$

Поскольку к изменению размеров кристалла вдоль оси  $x_i$  приводит только переползание краевых дислокаций  $\rho_i^{(j)} = \rho_i^{(k)}$ , то выражение для скорости пластической деформации в этом

направлении может быть записано в виде

$$\dot{\epsilon}_i = \omega \rho_i^{(j)} (I_+^{(j)} - I_-^{(j)}) + \omega \rho_i^{(k)} (I_+^{(k)} - I_-^{(k)}). \quad (15)$$

Подставляя сюда значения потоков из уравнения (11), можно получить окончательное выражение для скорости деформации вдоль всех осей.

Ограничимся рассмотрением случая, когда все плотности  $\rho_{\alpha}^{(i)}$  одинаковы и равны  $\frac{1}{\sigma} \rho$ .

Тогда  $\rho^{(i)} = \frac{1}{3} \rho$  и формула (11) принимает более простой вид:

$$I_{\pm}^{(i)} = \frac{3Q(D_j^{\pm} + D_k^{\pm})}{2(D_1^{\pm} + D_2^{\pm} + D_3^{\pm})\rho}, \quad (16)$$

а для скорости деформации вдоль оси  $x_i$  получаем

$$\dot{\epsilon}_i = \frac{\omega\theta}{4} \frac{D_i^+ (D_j^- + D_k^-) - D_i^- (D_j^+ + D_k^+)}{(D_1^+ + D_2^+ + D_3^+) (D_1^- + D_2^- + D_3^-)}. \quad (17)$$

Нетрудно убедиться, что  $\sum_i \dot{\epsilon}_i = 0$ . Это соот-

ветствует деформации без изменения объема, как и наблюдается при радиационном росте.

Можно определить скорость квазистационарного радиационного роста в более общем случае с учетом объемной рекомбинации точечных дефектов и влияния распределения дислокационных сегментов по длинам на ранее использованной схеме [1]. Для равномерных по ориентациям дислокаций все результаты работы [1] должны быть справедливы и в этом случае. Формулы (11) — (16) работы [1] и весь анализ зависимостей скорости роста от температуры и интенсивности образования точечных дефектов могут быть перенесены без изменения, только вместо  $\xi$  надо использовать

$$\xi_i = \frac{3[D_i^+ (D_j^- + D_k^-) - D_i^- (D_j^+ + D_k^+)]}{2(D_1^+ + D_2^+ + D_3^+) (D_1^- + D_2^- + D_3^-)}. \quad (18)$$

Выражение (17) дает максимально возможное значение скорости радиационного роста. Малые значения стационарных пересыщений точечных дефектов при высокотемпературном облучении и соответственно большое значение критического радиуса кривизны «свободно» переползающего дислокационного сегмента вводит в выражение (17) малое отношение плотности закритических дислокаций к полной их плотности [1]. Кроме того, реальная скорость радиационного роста должна быть еще меньше



за счет усреднения по ориентационному распределению дислокаций.

Для оценки значений параметра  $\xi_i$  можно воспользоваться следующими соображениями. Анализ анизотропии диффузии точечных дефектов для  $\alpha$ -урана [2] показал, что отношение коэффициентов диффузии точечных дефектов вдоль направлений [100], [010] и [001] для вакансий должно быть 1:0:0,8, а для межузельных атомов — 0,9:0,9:1. Согласно этим оценкам, диффузия межузельных атомов почти изотропна, а диффузия вакансий отличается очень сильной анизотропией. Однако в экспериментах с мечеными атомами столь существенная анизотропия самодиффузии не была обнаружена [7]. Поэтому предположим, что диффузия межузельных атомов изотропна, а диффузия вакансий обладает очень слабой анизотропией с отношением коэффициентов диффузии вдоль отмеченных выше осей 1:0,98:0,99 (направления экстремальных подвижностей выбраны в соответствии с приведенными выше оценками [2]). Тогда для  $\xi_{(i)}$  получим

$$\xi_{[100]} = -5 \cdot 10^{-3}; \quad \xi_{[010]} = 5 \cdot 10^{-3}; \quad \xi_{[001]} = 0.$$

Это означает удлинение кристалла вдоль направления [010], сужение вдоль направления [100] и отсутствие изменения размера вдоль направления [001], что полностью соответствует наблюдаемому характеру радиационного роста  $\alpha$ -урана.

Согласно оценкам [1], максимальное значение параметра  $\xi$  обусловлено ориентационной зависимостью упругого поля дислокации (радиуса ядра дислокации) и соответствующее сильной анизотропии, может быть  $\sim 10^{-2}$ . Поскольку эта оценка может оказаться слишком завышенной, можно заключить, что если анизотропия диффузии точечных дефектов достигает нескольких процентов, то высокотемпературный радиационный рост (естественно, при условии полного отсутствия зарождения ориентированных скоплений точечных дефектов) может быть обусловлен в основном анизотропией диффузии.

Подобная анизотропия ( $\leq 10\%$ ) наблюдается и во многих гексагональных кристаллах (сводные данные [8]), что может быть причиной их радиационного роста. Привлекает внимание и тот факт, что в разных гексагональных кристаллах анизотропия диффузии имеет разную направленность. В некоторых из них (например, Zn, Mg, Cd) энергия активации самодиффузии

больше в базисной плоскости, чем в перпендикулярном направлении (вдоль оси  $C$ ). В других же гексагональных кристаллах (например, Be,  $\beta$ -Sn), наоборот, энергия активации самодиффузии относительно меньше именно в базисной плоскости. Используя выражение (17) и считая диффузию межузельных атомов во всех случаях изотропной, можно заключить, что Zn, Mg и Cd при облучении должны сужаться в направлении  $C$ , в то время как Be и  $\beta$ -Sn, наоборот, в этом направлении будут расти.

Следует также отметить, что параметр (17) может существенно зависеть от температуры. Если энергию активации миграции дефектов представить в виде  $E_i^\pm = E_0^\pm + \Delta E_i^\pm$  и считать  $\Delta E_i^\pm/kT \ll 1$  (слабая анизотропия), то нетрудно убедиться, что  $\xi$  будет обратно пропорционально температуре.

Преимущество дислокационного механизма перед механизмом, предложенным в работе [2], состоит в том, что в стационарном режиме пересыщения точечных дефектов в бездислокационном кристалле (диффузионная длина порядка размера кристалла или зерна) должны быть велики и из-за гибели большого числа точечных дефектов вследствие объемной рекомбинации эффективная интенсивность образования точечных дефектов, определяющая скорость роста, будет сильно заниженной. Для кристалла с достаточно большой плотностью дислокаций (диффузионная длина порядка  $R \approx 1/\sqrt{\rho}$ ) пересыщения и роль объемной рекомбинации должны быть несравненно меньше, а при высокой температуре облучения вклад объемной рекомбинации может оказаться вообще пренебрежимо малым.

Поступила в Редакцию 18.VII.77

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Саралидзе З. К. «Атомная энергия», 1974, т. 37, вып. 2, с. 149.
2. Seigle L., Opinsky A. «Nucl. Sci. and Engng», 1957, v. 2, p. 48.
3. Nabarro F. Strength of Solids. L., Phys. Soc., 1948, p. 50.
4. Herring C. «J. Appl. Phys.», 1950, v. 21, p. 437.
5. Косевич А. М., Саралидзе З. К., Слезов В. В. «ЖЭТФ», 1960, т. 50, с. 958.
6. Косевич А. М., Саралидзе З. К., Слезов В. В. «Физика твердого тела», 1967, т. 9, с. 895.
7. Peterson N. Solid State Physics. N. Y.—L., Acad. Press, 1968, v. 22, p. 409.
8. Resnik R., Castleman L., Seigle L. USAEC Report, SEP, p. 255, 1961.