

АТЕРМИЧЕСКИЙ МЕХАНИЗМ РАДИАЦИОННОГО РОСТА УРАНА

А.И. Жуков, Л.В. Танатаров, Э.А. Резниченко
 ННЦ ХФТИ, г.Харьков

Предложена простая модель, описывающая радиационный рост урана. В основу модели положено предположение о зарождении вакансионных и междоузельных петель в каскадах атомных столкновений, описан их рост и взаимное влияние. Получено кинетическое уравнение для функции распределения по размерам дислокационных петель различных типов. Установлен вид граничных условий, предложен механизм взаимодействия (экранирования) петель, вытекающий из закона сохранения числа дефектов. Получены решения кинетического уравнения и проведено сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными.

ВВЕДЕНИЕ

Под радиационным ростом понимают изменение формы ненагруженных кристаллических тел при облучении, не сопровождающееся изменением удельного объёма. Радиационному росту в той или иной степени подвержены все материалы, работающие в активной зоне реактора, но наиболее ярко он проявляется для анизотропных материалов, таких как металлический уран и сплавы циркония. Несмотря на обширные экспериментальные данные, полученные за более чем сорок лет, полная теория этого явления далека от завершения. Общим для всех предлагаемых механизмов является тезис, что сокращение в одном направлении и удлинение в другом обусловлено тем, что облучение приводит к изъятию атомов из одних кристаллографических плоскостей и перемещению их в другие. Одной из первых попыток объяснения радиационного роста α -U была работа Конобеевского с сотрудниками [1]. Авторы предполагали, что точечные дефекты рождаются однородно во всём объёме материала.

Одиночные вакансии можно представить как пропуски атомов в почти квадратных сетках, образующих гофрированные слои перпендикулярно направлению [010] (Рис.1). Междоузельные атомы могут заполнять две возможные позиции с наибольшим координационным числом: так называемые пирамидальные и октаэдрические позиции. Пирамидальная позиция представляет собой центр почти правильной пирамиды, образованной четырьмя атомами квадратной сетки и вершиной – атомом в одном из узлов соседней сетки. Октаэдрическая позиция представляет собой центр петли квадратной сетки. Размещение междоузельного атома в пирамидальной позиции приводит в результате действия сил отталкивания со стороны ближайших соседей к анизотропной деформации кристалла. Из-за большого различия в силах связи, действующих между атомами, образующими сетку, и между атомами из соседних сеток (последние гораздо слабее), объёмная деформация кристалла будет сопровождаться удлинением в направлении [010] и сокращением в направлении [100]. При заполнении октаэдрических пустот деформация оказывается значительно меньшей по сравнению с заполнением пирамидальных позиций. Однако в этом случае необходимо допустить возможность временного перехода

атома урана из четырёхвалентного состояния в шестивалентное с одновременным уменьшением его ионного радиуса, поскольку размещение междоузельного атома в основном валентном состоянии связано с большой упругой энергией в области, окружающей дефект. Предполагалось, что октаэдрическое положение дефекта в решётке α -U является метастабильным, и поэтому при увеличении внутренней энергии кристалла междоузельные атомы из этого положения будут переходить в пирамидальную позицию.

В работах [2]-[4] исследовалась роль диффузионных механизмов и, в частности, анизотропия коэффициента диффузии точечных дефектов.

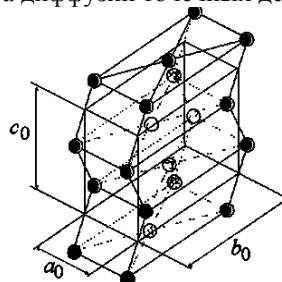


Рис.1 Структура решётки α -U

Однако большинство работ посвящено преимущественному зарождению и росту междоузельных и вакансионных дислокационных петель в различных ориентированных кристаллографических плоскостях. Рассматриваются как гомогенное зарождение и диффузионный рост (растворение) таких петель, так и зарождение петель в каскадах атомных столкновений и атермический рост или растворение этих петель, обусловленные присоединением междоузельной или вакансионной части каскада.

О важной роли атермического механизма говорит тот экспериментальный факт, что радиационный рост наблюдается при гелиевых температурах, а также то, что при температурах ниже 300 °С скорость радиационного роста практически не зависит от скорости создания точечных дефектов, а зависит от дозы. По данным работы [5] поликристаллический образец α -U облучался при температуре $T = 4.6$ К и потоке нейтронов от $3 \cdot 10^{11}$ до $1.54 \cdot 10^{13}$ см⁻²с⁻¹, при этом существенного изменения скорости радиационного роста отмечено не было.

Наилучшее согласие с опытными данными полу-

чил атермический механизм радиационного роста, предложенный Buckley [6] и развитый Leteurtre [7]. Согласно этой модели радиационный рост обусловлен образованием в поле упругих напряжений пиков смещения далеко отстоящих друг от друга групп вакансий и междоузельных атомов. Последние удалены от пика смещения за счёт фокусирующих столкновений и краудионов. Напряжения, возникающие в результате нагрева в термическом пике, создают условия для конденсации междоузельных атомов и вакансий в разных атомных плоскостях. Удлинение за счёт плоских скоплений смещённых атомов в плоскости (010) идёт по направлению минимального температурного расширения. Сокращение в направлении максимального температурного расширения происходит из-за скопления вакансий в плоскости (100). Этому благоприятствует малое значение вектора Бюргерса в направлении [100]. Вектор Бюргерса в направлении [001] больше, поэтому плоские скопления в плоскости (001) не возникают. Leteurtre [7] дал качественное объяснение зависимости радиационного роста от дозы (выгорания): «Заполнение образца сгустками образования зародышей происходит сначала пропорционально дозе, но вскоре весь объём образца покрывается каскадами смещений, плотность петель становится настолько большой, что новые петли больше не могут образовываться, петли становятся стоками для точечных дефектов; если новый каскад смещения образуется там, где уже был один, то смещённые атомы попадают или на междоузельную петлю, которая увеличивается, или на вакансионную, которая сужается: именно поэтому количество петель насыщается...».

В данной работе предложено развитие атермического механизма радиационного роста. На основе идей Buckley и Leteurtre получено кинетическое уравнение для функции распределения по размерам дислокационных петель различных типов. Установлен вид граничных условий, предложен механизм взаимодействия (экранирования) петель, вытекающий из закона сохранения числа дефектов. Получены решения кинетического уравнения и проведено сравнение результатов расчётов с экспериментальными данными.

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Деление атомов урана создает в материале каскады смещений атомов. После спонтанной рекомбинации междоузельных атомов и вакансий область повреждений приблизительно можно представить как состоящую из двух частей: внутренней, насыщенной вакансиями, и внешней, обогащенной междоузельными атомами. Предположим, что междоузельная часть каскада атермически эволюционирует по одному из следующих путей. Если рядом с возникшим каскадом в пределах радиуса междоузельной зоны находится ядро дислокационной петли (или дислокации), то вся междоузельная часть каскада присоединяется к дислокационной петле, увеличивая её, если петля междоузельного типа, или уменьшая, если петля вакансионного ти-

па. В другом случае, когда рядом нет дислокации, междоузельная часть каскада схлопывается в междоузельную дислокационную петлю. Подобным образом изменяется вакансионная часть каскада. Мы не рассматриваем эти процессы на микроскопическом уровне, это должно быть предметом отдельного исследования методами математического моделирования. Нашей целью является феноменологическое описание макроскопических изменений в материале.

Дислокационная структура зерна урана полностью описывается величинами $F_\alpha(\mathbf{b}, N, t)$ - функциями распределения петель по размерам, представляющими собой число в единице объёма дислокационных петель типа $\alpha = i, v$, содержащих N дефектов и имеющих вектор Бюргерса \mathbf{b} . Положим, что междоузельные петли образуются только в плоскостях (010), а вакансионные петли - в плоскостях (100). Тогда среди аргументов функции распределения можно опустить вектор Бюргерса, поскольку он однозначно определяется типом петли - индексом α . Радиус петли R_α связан с количеством дефектов N формулой

$$N\Omega = \pi R_\alpha^2 b_\alpha, \quad (0)$$

где Ω - атомный объём. Сумма длин всех петель в единице объёма представляет собой плотность дислокаций $\rho_d(t)$:

$$\sum_{N=1}^{N_m^i} 2\pi R_i(N) F_i(N, t) + \sum_{N=1}^{N_m^v} 2\pi R_v(N) F_v(N, t) \quad (0)$$

$$\equiv \rho_{di}(t) + \rho_{dv}(t) = \rho_d(t)$$

Здесь $R_{i,v}(N_m^{i,v})$ - максимальный радиус дислокационной петли, т.е. размер зерна в направлениях [010] и [100] соответственно.

Пусть в единице объёма зерна в единицу времени возникает S каскадов, каждый из которых порождает n междоузельных атомов в области радиуса r_i и n вакансий в области радиуса r_v . Если ядро дислокации, образующей дислокационную петлю, попадает в одну из этих областей, она присоединяет к себе все n дефектов; петля при этом переходит из состояния с размером N в состояние с размером $N + n$ или $N - n$ в зависимости от того, совпадает тип петли с типом дефекта или нет. Таким образом, для $W_\alpha \langle N | N' \rangle$ - вероятности в единицу времени перехода петли типа α с размером N в петлю с размером N' отличными от нуля являются только величины $W_\alpha \langle N | N + n \rangle$ и $W_\alpha \langle N | N - n \rangle$.

Кинетическое уравнение для функции распреде-

ления при этих предположениях имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} F_{\alpha}(N, t) = & W_{\alpha} \langle N - n | N \rangle \cdot F_{\alpha}(N - n, t) \\ & - W_{\alpha} \langle N | N + n \rangle \cdot F_{\alpha}(N, t) \\ & + W_{\alpha} \langle N + n | N \rangle \cdot F_{\alpha}(N + n, t) \\ & - W_{\alpha} \langle N | N - n \rangle \cdot F_{\alpha}(N, t). \end{aligned} \quad (0)$$

Поскольку петли растут, присоединяя или теряя по n дефектов, их размер кратен n . Слагаемое

$$W_{\alpha} \langle 0 | n \rangle \cdot F_{\alpha}(0, t) \equiv J_{\alpha}(t) \quad (0)$$

дает скорость рождения петель типа α . Т.к. петля, вышедшая на поверхность не может уменьшить свой размер, то слагаемое

$$W_{\alpha} \langle N_m^{\alpha} | N_m^{\alpha} - n \rangle \cdot F_{\alpha}(N_m^{\alpha}, t) \quad (0)$$

должно обращаться в нуль, т.е.

$$F_{\alpha}(N_m^{\alpha}, t) = 0. \quad (0)$$

Уравнения (0) и (0) служат граничными условиями для кинетического уравнения (0).

Рассмотрим подробнее вероятности перехода $W_i \langle N | N + n \rangle$ и $W_v \langle N | N - n \rangle$. Вероятность как междуузельной, так и вакансионной петель, присоединить n междуузельных атомов пропорциональна объему области влияния этих петель и скорости рождения каскадов. До тех пор, пока среднее расстояние между дислокациями больше диаметра междуузельной составляющей каскада $2r_i$, объем области влияния петли типа α равен (см. Рис.1)

$$2\pi R_{\alpha}(N) \cdot \pi r_i^2 \quad (0)$$

Часть каскадов при этом не попадает ни на одну дислокацию и образует петли минимального размера. В случае же, когда среднее расстояние между дислокациями меньше, чем $2r_i$, каждый междуузельный каскад попадает на дислокацию, и новые междуузельные петли не рождаются. Области влияния петель занимают весь объем зерна и начинают перекрываться. В этом случае естественно переопределить размер

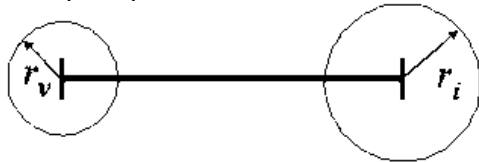


Рис.2 Области влияния дислокационной петли относительно присоединения междуузельной (r_i) и вакансионной (r_v) частей каскада области влияния и положить её равной

$$2\pi R_i(N) \cdot \pi r_{di}^2, \quad (0)$$

где расстояние между дислокациями r_{di} находится из уравнения

$$\begin{aligned} \pi r_{di}^2 \times \left\{ \sum_{N=0}^{N_m^i} 2\pi R_i(N) F_i(N, t) \right. \\ \left. + \sum_{N=0}^{N_m^v} 2\pi R_v(N) F_v(N, t) \right\} = 1 \end{aligned} \quad (0)$$

Аналогично можно рассмотреть вероятности переходов, вызванных присоединением вакансионной части каскада к петлям. В результате получим:

$$W_i \langle N | N + n \rangle = 2\pi \sqrt{\frac{\Omega}{\pi b_i}} \pi \tilde{r}_i^2 S \sqrt{N}, \quad (0)$$

$$W_v \langle N | N - n \rangle = 2\pi \sqrt{\frac{\Omega}{\pi b_v}} \pi \tilde{r}_i^2 S \sqrt{N}, \quad (0)$$

$$W_i \langle N | N - n \rangle = 2\pi \sqrt{\frac{\Omega}{\pi b_i}} \pi \tilde{r}_v^2 S \sqrt{N}, \quad (0)$$

$$W_v \langle N | N + n \rangle = 2\pi \sqrt{\frac{\Omega}{\pi b_v}} \pi \tilde{r}_v^2 S \sqrt{N}. \quad (0)$$

Здесь радиус области влияния относительно составляющей каскада типа α есть минимальный из двух радиусов:

$$\tilde{r}_{\alpha} \equiv \min(r_{\alpha}, r_{d\alpha}). \quad (0)$$

Скорость рождения петель $J_{\alpha}(t)$ не является независимой. Каждый каскад либо рождает петлю, либо присоединяется к уже существующей петле. Поэтому скорость рождения петель, равную

$$J_{\alpha}(t) \equiv W_{\alpha} \langle 0 | n \rangle \cdot F_{\alpha}(0, t),$$

можно определить из законов сохранения числа дефектов. Для междуузельной части каскада этот закон имеет вид:

$$\begin{aligned} W_i \langle 0 | n \rangle F_i(0, t) \\ + \sum_{N=n}^{N_m^i} W_i \langle N | N + n \rangle F_i(N, t) \\ + \sum_{N=n}^{N_m^v} W_v \langle N | N - n \rangle F_v(N, t) = S \end{aligned} \quad (0)$$

Аналогично для вакансионной части каскада

$$\begin{aligned} W_v \langle 0 | n \rangle F_v(0, t) \\ + \sum_{N=n}^{N_m^i} W_i \langle N | N - n \rangle F_i(N, t) \\ + \sum_{N=n}^{N_m^v} W_v \langle N | N + n \rangle F_v(N, t) = S \end{aligned} \quad (0)$$

Перейдем к безразмерным переменным:

характерное время - $t_0 \equiv \omega_0^{-1}$,

$$\omega_0 = 2\pi \sqrt{\frac{n\Omega}{\pi b_0}} \cdot \pi r_0^2 \cdot S,$$

где $r_0^2 = \frac{1}{2}(r_i^2 + r_v^2)$ есть средний квадрат радиуса каскада, а $b_0 = \frac{1}{2}(b_i + b_v)$ - среднее значение вектора Бюргерса, новое время: $\tau = \omega_0 t$,

характерное число дефектов в петле - n , новая переменная - размер, $\xi = N/n$,

$$\text{характерная длина} - 2\pi R(n) = 2\pi \sqrt{\frac{n\Omega}{\pi b_0}},$$

характерное значение функции $F_\alpha(N, t)$:

$$\tilde{F}_\alpha = \left(2\pi \sqrt{\frac{n\Omega}{\pi b_\alpha}} \cdot \pi r_0^2 \right)^{-1},$$

новая функция: $f_\alpha(\xi, \tau) = F_\alpha(N, t)/\tilde{F}_\alpha$.

Уравнение (0) в этих обозначениях принимает вид:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{b_\alpha}{b_0}} \frac{\partial}{\partial \tau} f_\alpha(\xi, \tau) &= \frac{1}{2}(\Delta_\beta - \Delta_\alpha) \\ &\times [\sqrt{\xi+1} f_\alpha(\xi+1, \tau) - \sqrt{\xi-1} f_\alpha(\xi-1, \tau)] \\ &+ \frac{1}{2}(\Delta_\alpha + \Delta_\beta) \\ &\times [\sqrt{\xi+1} f_\alpha(\xi+1, \tau) + \sqrt{\xi-1} f_\alpha(\xi-1, \tau) \\ &- 2 \cdot \sqrt{\xi} f_\alpha(\xi, \tau)], \end{aligned} \quad (0)$$

где $\Delta_\alpha \equiv \frac{\tilde{r}_\alpha^2}{r_0^2}$ - безразмерные квадраты радиусов влияния дислокационных линий α -петель, β - индекс, сопряженный α .

Если перейти к непрерывному распределению петель по размерам, то уравнение (0) примет следующий вид

$$\frac{\partial}{\partial \tau} f_\alpha(\xi, \tau) + \frac{\partial}{\partial \xi} \Phi(\xi, \tau) = 0, \quad (0)$$

где поток в пространстве размеров

$$\Phi_\alpha(\xi, \tau) = V_\alpha \sqrt{\xi} f_\alpha(\xi, \tau) - D_\alpha \frac{\partial}{\partial \xi} \sqrt{\xi} f_\alpha(\xi, \tau) \quad (0)$$

Здесь $V_\alpha = \sqrt{\frac{b_\alpha}{b_0}}(\Delta_\alpha - \Delta_\beta)$ - скорости дрейфа,

$D_\alpha = \sqrt{\frac{b_\alpha}{b_0}}(\Delta_\alpha + \Delta_\beta)$ - коэффициенты диффузии

в пространстве размеров. Законы сохранения числа дефектов для случая непрерывного распределения петель имеют вид:

$$\begin{aligned} \lim_{\xi \rightarrow 0} \sqrt{\xi} f_\alpha(\xi, \tau) + \int_1^{\xi_m^\alpha} f_\alpha(\xi, \tau) \sqrt{\xi} d\xi \\ + \int_1^{\xi_m^\beta} f_\beta(\xi, \tau) \sqrt{\xi} d\xi = \frac{1}{\Delta_\alpha} \end{aligned} \quad (0)$$

Однако для численного решения более удобными являются уравнения в дискретной форме.

В дальнейшем вместо безразмерной функции распределения $f_\alpha(\xi, \tau)$ мы будем использовать другую функцию:

$$\varphi_\alpha(\xi, \tau) \equiv \sqrt{\xi} f_\alpha(\xi, \tau). \quad (0)$$

Величина $\varphi_\alpha(\xi, \tau)/(\pi r_0^2)$ дает длину дислокаций в единице объема всех α -петель размера ξ (или N), т.е. плотность дислокаций.

Итак, кинетические уравнения принимают вид:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{b_\alpha}{b_0}} \frac{1}{\sqrt{\xi}} \frac{\partial}{\partial \tau} \varphi_\alpha(\xi, \tau) \\ = \frac{1}{2}(\Delta_\beta - \Delta_\alpha) \cdot [\varphi_\alpha(\xi+1, \tau) - \varphi_\alpha(\xi-1, \tau)] \\ + \frac{1}{2}(\Delta_\alpha + \Delta_\beta) \cdot [\varphi_\alpha(\xi+1, \tau) + \varphi_\alpha(\xi-1, \tau) \\ - 2 \cdot \varphi_\alpha(\xi, \tau)]. \end{aligned} \quad (0)$$

Начальные условия - $\varphi_\alpha(\xi, 0) = 0$, граничные условия на правой границе - $\varphi_\alpha(\xi_m^\alpha, \tau) = 0$. Граничные условия на левой границе определяются законами сохранения (0) и (0), принимающими вид:

$$\varphi_\alpha(0, \tau) = \frac{1}{\Delta_\alpha} - \sum_{\xi=1}^{\xi_m^\alpha} \varphi_\alpha(\xi, \tau) - \sum_{\xi=1}^{\xi_m^\beta} \varphi_\beta(\xi, \tau). \quad (0)$$

Если правая часть этого уравнения больше нуля, то оно определяет скорость рождения петель $\varphi_\alpha(0, \tau)$. В обратном случае $\varphi_\alpha(0, \tau) = 0$ и уравнение служит для определения размера области влияния дислокационных петель $\Delta_\alpha(\tau)$:

$$\frac{1}{\Delta_\alpha(\tau)} = \sum_{\xi=1}^{\xi_m^\alpha} \varphi_\alpha(\xi, \tau) + \sum_{\xi=1}^{\xi_m^\beta} \varphi_\beta(\xi, \tau). \quad (0)$$

Отметим, что только одна из величин Δ_α может удовлетворять этому уравнению, а именно большая из них, т.е. Δ_i .

Стационарные решения уравнений (0), (0) имеют следующий вид:

$$\varphi_i(\xi) = \varphi_i(0) \cdot \frac{1 - \kappa \xi_m^i - \xi}{1 - \kappa \xi_m^i}, \quad (0)$$

$$\varphi_v(\xi) = \varphi_v(0) \cdot \frac{\kappa \xi - \kappa \xi_m^v}{1 - \kappa \xi_m^v}, \quad (0)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_i(0) &= \frac{\Delta_i - \Delta_v}{\Delta_i \cdot \Delta_v} \\ &\times \frac{\xi_m^v \kappa^{\xi_m^v} / \left(1 - \kappa^{\xi_m^v}\right)}{\xi_m^i / \left(1 - \kappa^{\xi_m^i}\right) - \xi_m^v \kappa^{\xi_m^v} / \left(1 - \kappa^{\xi_m^v}\right)} \quad (0) \\ &\approx \frac{\Delta_i - \Delta_v}{\Delta_i \cdot \Delta_v} \cdot \frac{\xi_m^v}{\xi_m^i} \kappa^{\xi_m^v} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_v(0) &= \frac{\Delta_i - \Delta_v}{\Delta_i \cdot \Delta_v} \\ &\times \frac{\xi_m^i / \left(1 - \kappa^{\xi_m^i}\right)}{\xi_m^i / \left(1 - \kappa^{\xi_m^i}\right) - \xi_m^v \kappa^{\xi_m^v} / \left(1 - \kappa^{\xi_m^v}\right)} \quad (0) \\ &\approx \frac{\Delta_i - \Delta_v}{\Delta_i \cdot \Delta_v} \end{aligned}$$

$$\kappa \equiv r_v^2 / r_i^2 < 1.$$

Заметим, что для стационарного решения отношение скоростей рождения междуузельных и вакансионных петель или, что то же самое, отношение амплитуд функций распределения экспоненциально мало:

$$\varphi_i(0) / \varphi_v(0) \sim \kappa^{\xi_m^v} \ll 1, \quad (0)$$

поскольку отношение площади поперечного сечения зерна к площади петли минимального размера $\xi_m^v \gg 1$.

Скорость удлинения зерна определяется скоростью роста междуузельных петель и их потоком на поверхность:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} L(t) &= \frac{b_i V}{\pi R_{im}^2} \\ &\times \left\{ \sum_{N=n}^{N_m^i} \pi R_i^2(N) \cdot \frac{\partial F_i(N, t)}{\partial t} \right. \\ &\left. + \pi R_{im}^2 \cdot W \langle N_m^i - n | N_m^i \rangle F_i(N_m^i - n, t) \right\} \quad (0) \end{aligned}$$

где $V = \pi R_{im}^2 L$ - объём зерна, $R_{im} = R_i(N_m^i)$ - радиус зерна (размер в плоскости (010)), L - продольный размер (размер в направлении [010]). Тогда относительная скорость роста будет равна

$$\begin{aligned} L^{-1} \frac{d}{dt} L(\tau) &= \frac{d}{dt} l_i(\tau) = \tilde{F}_i \Omega n \times \\ &\left\{ \sum_{\xi=1}^{\xi_m^i} \sqrt{\xi} \frac{\partial}{\partial \tau} \varphi_i(\xi, \tau) + \sqrt{\frac{b_0 \xi_m^i \Delta_i}{b_i}} \varphi_i(\xi_m^i - 1, \tau) \right\} \quad (0) \end{aligned}$$

где l_i - относительное удлинение. Подставив производную по времени из уравнения (0), получим:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} l_i(\tau) &= \frac{\sqrt{\pi b_0 \Omega n}}{2\pi^2 r_0^2} \\ &\times \left\{ (\Delta_i - \Delta_v) \sum_{\xi=1}^{\xi_m^i} \varphi_i(\xi, \tau) + \Delta_i \varphi_i(0, \tau) \right\} \quad (0) \end{aligned}$$

Если вакансионные петли растут в тех же плоскостях, их вектор Бюргера будет равен вектору Бюргера междуузельных петель и относительная скорость продольного сжатия будет равна

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} l_v(\tau) &= - \frac{\sqrt{\pi b_0 \Omega n}}{2\pi^2 r_0^2} \times \\ &\times \left\{ (\Delta_v - \Delta_i) \sum_{\xi=1}^{\xi_m^v} \varphi_v(\xi, \tau) + \Delta_v \varphi_v(0, \tau) \right\} \quad (0) \\ &= - \frac{\sqrt{\pi b_0 \Omega n}}{2\pi^2 r_0^2} \end{aligned}$$

$$\times \left\{ (\Delta_i - \Delta_v) \sum_{\xi=1}^{\xi_m^i} \varphi_i(\xi, \tau) + \Delta_i \varphi_i(0, \tau) \right\},$$

или

$$\frac{d}{dt} l_v(\tau) = - \frac{d}{dt} l_i(\tau) \quad (0)$$

т.е. никакого роста не будет.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Применим формулы, полученные в предыдущем разделе для расчета относительного удлинения зёрен урана. Напомним, что удлинение происходит за счет роста междуузельных петель в плоскости (010), а поперечное сжатие обеспечивается ростом вакансионных петель в плоскости (100).

Оценим значения параметров, необходимых для расчётов. Для α -U дозу облучения, т.е. общее число каскадов или смещённых атомов принято измерять в единицах выгорания τ . Единице выгорания в α -U соответствует $5 \cdot 10^{22}$ делений в 1 cm^3 . из экспериментальных значений, приведенных на Рис.2, видно, что при малых выгораниях

$$l(\tau) \approx G \cdot \tau, \quad (0)$$

где $G \sim 4 \cdot 10^4$. Это позволяет определить полное количество точечных дефектов, созданных одним актом деления как $G / (\Omega \cdot 5 \cdot 10^{22}) \sim 4 \cdot 10^4$. Это число по порядку величины согласуется с оценками Leteurte [7]. Точечные дефекты распределены по каскадам. Различные оценки дают число каскадов, входящих на одно деление, как величину от 150 до 500 и, следовательно, число выживших дефектов в каскаде может принимать значения в интервале от 80 до 260. Это несколько выше оценок Leteurte. Труднее оценить радиус влияния дислокационных петель. Leteurte [7] приводит оценку в 3 нм для меньшего числа точечных дефектов в каскаде. Для наших оценок эта величина может быть увеличена до 6 нм за счёт большего числа дефектов. Однако и

этого недостаточно для объяснения уменьшения скорости роста уже при малых выгораниях. Чтобы обеспечить изменение скорости роста мы были вынуждены взять большие радиусы влияния дислокаций (радиусы междоузельной и вакансионной частей каскада). Значения параметров, использованные при расчётах, приведены ниже:

1. Параметры кристаллической решётки:
 $a_0 = 0.2852$ нм,
 $b_0 = 0.5865$ нм,
 $c_0 = 0.4955$ нм,
2. Вектор Бюргера междоузельной петли
 $b_i = 0.2478$ нм,
3. Вектор Бюргера вакансионной петли
 $b_v = 0.2852$ нм,
4. Радиус междоузельной части каскада
 $r_i = 23$ нм,
5. Радиус вакансионной части каскада
 $r_v = 21$ нм,
6. Число каскадов, приходящихся на одно деление
 450 ,
7. Число выживших пар Френкеля в каскаде
 $n = 75$,
8. 1 выгорание = $5 \cdot 10^{22}$ делений.

На рис.3 приведены экспериментальные данные по росту поликристаллического урана при комнатной температуре и данные, полученные расчётным путём.

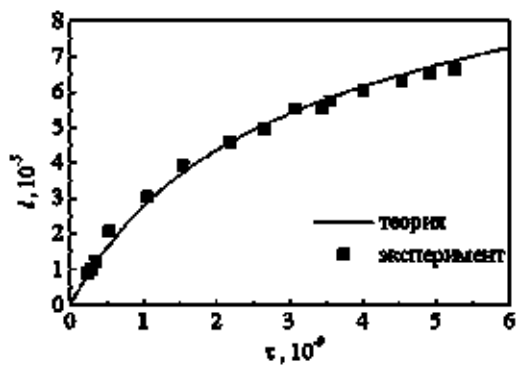


Рис.3 Зависимость относительного удлинения поликристаллического урана при температуре от выгорания [2].

Из рисунка видно, что при малых дозах наблюдается линейная зависимость, так как петли не мешают друг другу, затем области влияния петель начинают уменьшаться из-за увеличения длины дислокационных линий и рост замедляется. Неплохое согласие достигнуто за счёт больших радиусов влияния дислокаций (размеров каскада). Возможное объяснение состоит в том, что при комнатных температурах диффузия междоузельных атомов также существенна и вносит большой вклад в процессы аннигиляции точечных дефектов. В нашей модели это обстоятельство можно интерпретировать как увеличение размера каскада.

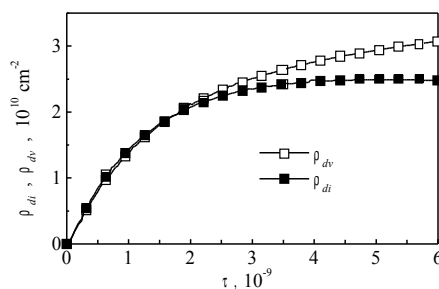


Рис.4. Расчётная зависимость плотности дислокаций от выгорания

На рис.4 изображены плотности дислокаций (длина дислокационных линий в единице объёма) в зависимости от выгорания для обоих типов петель междоузельных ρ_{di} и вакансионных ρ_{dv} . Вследствие большего радиуса влияния междоузельных петель их длина стабилизируется раньше, чем длина вакансионных петель.

На рис.5 показана зависимость от выгорания количества междоузельных (N_i) и вакансионных (N_v) петель в единице объёма:

$$N_i \equiv \sum_{N=1}^{N_m^i} F_i(N, t),$$

$$N_v \equiv \sum_{N=1}^{N_m^v} F_v(N, t).$$

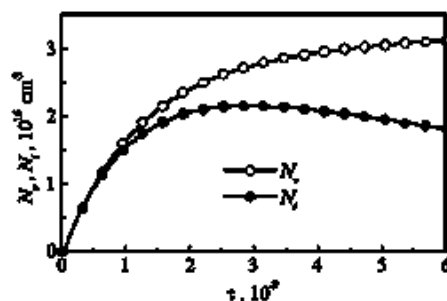


Рис.5 Расчётная зависимость количества дислокационных петель от выгорания.

Количество междоузельных петель уже в середине рассмотренного интервала выгораний достигает максимума и начинает уменьшаться, при этом их общая длина остаётся неизменной.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Атермический механизм радиационного роста, предложенный Buckley [6] и Leteurte [7], получил в данной работе дальнейшее развитие. В частности, на основе геометрических характеристик каскада и дислокационных петель было получено кинетическое уравнение для функции распределения петель по размерам, предложен механизм косвенного взаимодействия петель, следующий из законов сохранения числа дефектов.

Предложенная модель радиационного роста урана содержит существенные упрощения, к важнейшим из которых относятся следующие:

1- каждый каскад вносит вклад в рост – сгусток точечных дефектов или является зародышем петли, или присоединяется к уже существующей петле;

2- строгое разделение дислокационных петель по типам – междоузельные петли образуются в одних плоскостях, а вакансионные в других – перпендикулярных;

3- в модели отсутствует диффузия точечных дефектов, которая, по-видимому, может объяснить температурную зависимость радиационного роста.

Однако, несмотря на сделанные упрощения каскадная модель радиационного роста удовлетворительно объясняет зависимость радиационного роста от выгорания и даёт разумные оценки других характеристик растущего урана.

Работа выполнена при поддержке Украинского Научно-Технологического Центра по проекту STCU-442. Авторы благодарят руководителя проекта А.С. Бакая, а также Н.П. Лазарева, А.А. Туркина за полезные обсуждения

ЛИТЕРАТУРА

1. С.Т.Конобеевский, Левитский Б.И., Л.Д. Пантелеев. К вопросу о механизме радиационного роста урана при малых дозах облучения // *Атомная энергия*. 1968, т.24, с. 312.
2. D.Fainstein-Pedraza, E.J.Savino, A.J. Pedraza // *Journal of Nuclear Materials*. 1978. v.73, p.151-168.
3. К.Саралидзе Радиационный рост, обусловленный анизотропией диффузии // *Атомная энергия*. 1978. т. 45, с. 41.
4. С.J.Ball. The contribution of the intrinsic anisotropy of point defect diffusion rates to irradiation growth of zirconium // *J. Nucl. Mater.* 1981, v. 101, p.147.
5. C.Weinberg, J.Dural et R.R. Conte Croissance de l'uranium sous irradiation a 25⁰ C // *Phys.Letters*. 1968, v.27a.p.690.
6. S.N. Buckley. Irradiation growth of Uranium // *Rep. AERE-R5262*. 1966.
1. J. Leteurte Dislocations and Radiation // *Damage in Uranium*. 1969. Rapport CEA – R-3607.