

ВЛИЯНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ НА МЕЖДОУЗЕЛЬНЫЙ МЕХАНИЗМ СПИНОДАЛЬНОГО РАСПАДА БИНАРНЫХ СПЛАВОВ ПОД ОБЛУЧЕНИЕМ

П.А.Селищев

(Киевский университет им.Тараса Шевченко, г.Киев, Украина)

Проанализирована роль взаимодействующих междоузельных атомов и их малоподвижных комплексов в спинодальном распаде облучаемых бинарных a - b сплавов, компоненты которых имеют существенно различные атомные массы, например, $NiBe$, $CuBe$, $AlZn$.

Рассматривается низкоэнергетическое облучение, когда в междоузельные положения в основном выбиваются более легкие атомы типа a , а генерацией междоузельных атомов типа b можно пренебречь.

В предлагаемой модели изучаются вакансионный и междоузельный механизмы массопереноса. Это связано с тем, что концентрационное расслоение сплава является диффузионно-контролируемым процессом, а отличительной особенностью массопереноса на микроуровне в облучаемом сплаве является, наряду с заметным усилением потока атомов по вакансиям, возникновение превышающего его междоузельного диффузионного потока. Действительно, под облучением за единицу времени в кристалле создаются примерно равные количества вакансий и междоузельных атомов, но подвижность последних значительно выше. Без облучения диффузия происходит по вакансионному механизму, концентрация термических междоузельных атомов и их поток - ничтожно малы.

Изменение концентраций a -атомов в узлах матрицы n_a , в междоузельном положении n_i , и захваченных ловушками n_i^+ , b -атомов в узлах матрицы n_b , вакансий n_v , описывается уравнениями

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = Kn_a^o - n_i / \tau_i - \gamma n_i^- n_i^+ + \beta_i n_i^+ - \text{div } j_i \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_i^+}{\partial t} = \gamma n_i^- n_i - \beta_i n_i^+ \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_a}{\partial t} = -Kn_a^o + n_i / \tau_i - \text{div } j_a^v \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_b}{\partial t} = -\text{div } j_b^v \quad (4)$$

$$\frac{\partial n_v}{\partial t} = Kn_a^o - n_v / \tau_v - \text{div } j_v \quad (5)$$

Здесь $\tau_i(T)$ и $\tau_v(T)$ - характерные времена жизни вакансий и междоузельных атомов типа a по отношению к уходу на стоки, Kn_a^o - скорость их генерации. Она пропорциональна не локальной, а усредненной концентрации a -атомов n_a^o потому, что концентрация дефектов в данной точке пространства определяется скоростью их генерации усредненной по области, характерные размеры которой примерно равны среднему пробегу первично выбитого атома, сравнимого с периодом спинодального распада

(100-400 нм). $\gamma n_i^- n_i$ и β_i - скорости образования комплексов и их термического распада, они связаны согласно принципу детального равновесия. $n_i^- = n_i - n_i^+$, n_i - концентрация ловушек. Поток вакансий и потоки a - и b - атомов по вакансиям связаны соотношением $-j_v = j_a^v + j_b^v$ и равны

$$j_v = -D_v \nabla n_v + d_a n_v \nabla n_a + d_b n_v \nabla n_b \quad (6)$$

$$j_{a(b)} = -d_{a(b)} n_v \nabla n_{a(b)} + d_v^{a(b)} n_{a(b)} \nabla n_v \quad (7)$$

$j_i = D_i (\nabla n_i - n_i F/T)$ - поток междоузельных атомов, он зависит от силы упругого взаимодействия дефектов

$$F = \int \nabla_r (V(r - r') n_i(r') + V_t(r - r') n_i^+(r')) dr' \quad (8)$$

D_i - коэффициент диффузии междоузельных атомов, T - температура в энергетических единицах, $V(r)$ и $V_t(r)$ - потенциалы взаимодействия. Рекомбинацией точечных дефектов пренебрегалось, поскольку она к неустойчивости не приводит.

Стационарное однородное решение уравнений (1) - (5) имеет вид: $n_i^o = KN_a \tau_i$, $n_v^o = KN_a \tau_v$, $n_i^{+o} = \gamma \tau_i KN_a n_i / (\gamma \tau_i KN_a + \beta_i)$, $n_a^o = N_a - n_i^{+o} - n_i^o$, $n_b^o = I - N_a$. N_a - концентрация a -атомов.

Однородный сплав станет неустойчивым по отношению к спинодальному распаду, если действительная часть декремента затухания его малого возмущения λ (моды с некоторым волновым вектором $k=k_c$) станет положительной. Характеристическое уравнение для $\lambda(k)$ имеет вид $P_2(\lambda)P_3(\lambda)=0$, где $P_2(\lambda)$ и $P_3(\lambda)$ - многочлены второй и третьей степени. Первый зависит от n_i , n_i^+ и фурье-образов потенциалов взаимодействия $V(k)$ и $V_t(k)$, но не зависит от n_v , n_a , n_b и параметров диффузии по вакансионному механизму. Второй - от n_v , n_a , n_b и параметров диффузии по вакансиям, но не от n_i , n_i^+ , $V(k)$ и $V_t(k)$. Это дает возможность рассмотреть междоузельный ($P_2(\lambda)=0$) и вакансионный, ($P_3(\lambda)=0$), механизмы развития неустойчивости независимо.

Вакансионный механизм в рамках данной модели к концентрационному расслоению не приводит. Развитие неустойчивости по междоузельному механизму связано с тем, что благодаря анизотропии для некоторых направлений в матрице междоузельные атомы (свободные и в составе комплексов) притягиваются, и их взаимодействие может начать доминировать над влиянием диффузии. Случайное увеличение концентрации междоузельных атомов в плоскости перпендикулярной k_c приведет к тому, что они

будут стремиться расположиться в той же плоскости. Это вызовет их избыточный поток в матрицу вследствие рекомбинации и поглощения насыщающимися стоками. Формируются чередующиеся плоскости, обогащенные и обедненные a -атомами.

Сохраняя первое и второе слагаемые, которые описывают дальнедействующее притяжение и короткодействующее отталкивание, для направления совпадающего с k_c имеем $V(k) = V^o(-1+Bk^2)$, $V_i(k) = V_i^o(-1+Bk^2)$, где $V^o = -V(k=0)$ и $V_i^o = -V_i(k=0)$ являются функциями упругих модулей и изменения объема кристалла при введении в матрицу свободного и, соответственно, захваченного ловушкой междоузельного атома. Величина B - порядка квадрата нескольких периодов кристаллической решетки.

В присутствии ловушек существуют два независимых критерия возникновения неустойчивости. Первый приводит к критическому значению температуры T_{c1} , которое меньше чем в отсутствие ловушек (T_c). Второй - к уравнению для T_{c2}

$$T_{c2} = \left(n_i^o V^o + n_i^+ n_i^- V_i^o / n_i \right) / \left[\varphi \left(\xi^* (T_{c2}) \right) \right] \quad (6)$$

где $\xi^*(T) = \rho + \gamma n_i^- / D_i$. Влияние ловушек описывает второе слагаемое в (6). Оно пропорционально произведению концентраций свободных и занятых ловушек, которое зависит от температуры,

энергии миграции междоузельного атома E_m^i и энергии его связи с ловушкой E_l .

Если все ловушки заняты или, наоборот, свободны, это слагаемое равно нулю. Когда температура высока, произведение концентраций свободных и занятых ловушек для реальных значений параметров мало, роль комплексов незначительна, уравнение (6) удовлетворяться не будет. Следовательно, для высокой температуры однородный сплав стабилен, но при ее понижении ниже критического значения $T_{c2}^{(1)}$ - становится неустойчивым, происходит его концентрационное расслоение. С дальнейшим понижением температуры достигается второе критическое значение температуры $T_{c2}^{(2)}$. Оно меньше $T_{c2}^{(1)}$, но больше T_{c1} . Однородный сплав вновь становится стабильным и остается таковым вплоть до значения температуры T_{c1} . С увеличением концентрации ловушек область неустойчивости между $T_{c2}^{(1)}$ и $T_{c2}^{(2)}$ расширяется как в сторону меньших, так и в сторону больших температур. При уменьшении концентрации ловушек до нуля она сужается и исчезает. С возрастанием E_l она смещается в сторону низких скоростей генерации дефектов. Период бифуркационной моды во всех случаях равен

$$d = 2\pi / k_c = 2\pi \sqrt{2\varphi(\xi^*) B / (\varphi(\xi^*) - 1)} \quad (7)$$

и составляет десятки (при высоких температурах) - сотни нанометров и слабо зависит от n_i и E_l .