

На правах рукописи

Ульянов Владимир Владимирович

**ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ В ПОЛЯХ ГРАДИЕНТОВ НАПРЯЖЕНИЙ
В ГЦК МЕТАЛЛАХ**

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Томск - 2008

Работа выполнена в ГОУ ВПО «Томский государственный университет»,
кафедра физики металлов.

Научный руководитель:

кандидат физико-математических наук, доцент

Кузнецов Владимир Михайлович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор
Чернов Вячеслав Михайлович

доктор физико-математических наук, профессор
Потекаев Александр Иванович

Ведущая организация: ГОУ ВПО «Томский политехнический университет»

Защита состоится «25» декабря 2008 г. в 14-30 на заседании
диссертационного совета Д 212.267.07 при ГОУ ВПО «Томский
государственный университет» по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Томского
государственного университета.

Автореферат разослан «21» ноября 2008 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук

Ивонин И.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. В физике конденсированного состояния вещества, в физическом металловедении, физике прочности и пластичности большое внимание уделяется исследованиям, связанным с решением задач о состояниях и эволюции дефектов, микроструктур и физических свойств металлов на различных стадиях их деформирования. Согласно основным положениям физической мезомеханики структурно-неоднородных сред, деформированное тело есть многоуровневая система, в которой пластическое течение самосогласованно развивается как последовательная эволюция потери сдвиговой устойчивости на различных масштабных (микро-, мезо- и макро-) уровнях. На микроуровне локальное структурное превращение проявляется как зарождение и движение дефектов, их кластеров, дислокаций и дисклинаций в зонах микроконцентраторов напряжений, а зарождение микропор и микротрещин объясняется, в настоящее время, на основе дислокационного и дисклинационного механизмов их образования.

Важным механизмом изменения микроструктуры металлов (как дополнение к основному дислокационно-дисклинационному) является диффузионный (диффузионно-дислокационный), реализация которого зависит от симметрии кристаллической решетки металла и ее дефектов, полей, в которых находится металл (термических, механических, радиационных). В процессе пластической деформации твердых тел генерируется большое число точечных дефектов. Обычно концентрация деформационных вакансий составляет величину $10^{-5} \div 10^{-6}$ даже для не очень больших скоростей деформации и средних температур ($T \sim 0.3 \div 0.4T_{пл}$).

Поля напряжений дислокаций оказывают значительное влияние на образование и кинетику точечных дефектов, определяя дополнительные (по сравнению с отсутствием дислокаций) особенности образования и распада твердых растворов собственных точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов). В связи с этим представляется важным исследовать влияние дислокационных полей напряжений на энергетику образования и миграции вакансий и собственных межузельных атомов (СМА) в ГЦК металлах.

Исходя из линейной теории упругости в полях градиентов напряжений должна наблюдаться восходящая диффузия точечных дефектов (известный эффект Горского), когда вакансии перемещаются из области менее сжатого кристалла в область более сжатого кристалла, т.е. уменьшается концентрация вакансий в области растяжения. Однако линейная теория упругости не учитывает реального смещения атомов в окрестности вакантного узла. Релаксация атомов вблизи вакансий может существенно уменьшить её энергию образования вследствие уменьшения упругой энергии большого числа атомов вокруг вакансии. В этом случае поток вакансий может быть направлен в область менее сжатого кристалла, что должно приводить к перенасыщению вакансиями этой области и реализовать условия локальных

структурных превращений и образований локальных несплошностей. Такой механизм можно назвать нисходящей диффузией.

Цель работы:

Исследовать поведение точечных дефектов в полях градиентов напряжений в ГЦК металлах с учетом их реальной атомной структуры.

Задачи исследования:

1. Применить многочастичные межатомные потенциалы, полученные в методе погруженного атома для ГЦК металлов, к расчету термодинамических свойств вакансий в *Al*, *Ni*, *Cu*. Рассчитать объемы и энергии образования вакансий, а так же релаксацию атомов вблизи вакансии для этих металлов.
2. Рассчитать зависимости энергии образования и химические потенциалы вакансий, обусловленных их взаимодействием с полями упругих напряжений, для всестороннего растяжения, одноосного растяжения вдоль направлений [100], [110] и [111] и сдвиговых деформаций для *Al*, *Ni*, *Cu*.
3. Определить величину и направление вынуждающей силы, действующей на вакансии, в зависимости от градиента напряжений при всестороннем и одноосном растяжении и сдвиге для *Al*, *Ni*, *Cu*.
4. Рассчитать физические свойства собственных точечных дефектов и анизотропию их энергии миграции в упругих полях дислокаций в ГЦК *Pu*.

Методы исследования Для расчета полной энергии кристалла как в недеформированном, так и в деформированном состоянии используется метод погруженного атома, учитывающий многочастичное взаимодействие между атомами. Для нахождения равновесного положения атомов вблизи дефектов использовался метод молекулярной динамики (метод градиентного спуска). Расчет упругих полей дислокаций и энергий их взаимодействия с точечными дефектами в ГЦК кристалле плутония проводится в рамках анизотропной линейной теории упругости.

Научная новизна Впервые проведены расчеты энергии образования вакансий в полях градиентов напряжений для всестороннего растяжения, одноосного растяжения вдоль направлений [100], [110] и [111] и сдвиговых деформаций для *Al*, *Ni*, *Cu*. Предложен метод построения химических потенциалов вакансий, обусловленных их взаимодействием с полями упругих напряжений. Получено выражение для вынуждающей силы, действующей на вакансию в полях градиентов напряжений.

Показано, что при одноосном растяжении после достижения некоторой критической деформации наблюдается поток вакансий в область более растянутого кристалла. Предложен новый механизм движения вакансий в полях градиентов напряжений, который по аналогии с восходящей диффузией Горского, можно назвать нисходящей диффузией.

При деформации сдвига химический потенциал вакансий, обусловленный её взаимодействием с полем упругих напряжений, для рассматриваемых ГЦК металлов (*Al*, *Cu*, *Ni*) всегда уменьшается при увеличении деформации, т.е. поток вакансий всегда направлен в область более деформированного кристалла.

В рамках анизотропной теории упругости рассчитана пространственная зависимость энергии взаимодействия собственных точечных дефектов (упругих диполей) с краевыми и винтовыми дислокациями в системах скольжения $[110]\{111\}$ и $[110]\{110\}$ в ГЦК кристалле плутония. Показано существенное влияние упругих полей дислокаций на энергетические и кристаллографические характеристики точечных дефектов и направления их миграции. В окрестности всех рассмотренных дислокаций существуют области, где энергия $[110]$ гантели меньше энергии образования $[100]$ гантели.

Положения, выносимые на защиту:

1. Метод построения химических потенциалов вакансий, обусловленных их взаимодействием с полями упругих напряжений. Выражение для вынуждающей силы, действующей на вакансию в полях градиентов напряжений.
2. Зависимость химического потенциала вакансий, обусловленного их взаимодействием с полем упругих напряжений при всестороннем и одноосном растяжениях ГЦК металлах (*Al, Ni, Cu*). Химический потенциал вакансии принимает максимальные значения при некоторой критической деформации (различных для каждого ГЦК металла, что связано с уровнями их упругой анизотропии). При превышении этой критической деформации вынуждающая сила, действующая на вакансию, направлена в более растянутую область кристалла.
3. Зависимость химического потенциала вакансий, обусловленного их взаимодействием с полем упругих напряжений при деформации сдвига в ГЦК металлах (*Al, Ni, Cu*). Вынуждающая сила всегда направлена в область более деформированного кристалла.
4. Расчет пространственной зависимости энергии взаимодействия собственных точечных дефектов (упругих диполей) с краевыми и винтовыми дислокациями в системах скольжения $[110]\{111\}$ и $[110]\{110\}$ в ГЦК кристалле плутония.

Научная и практическая ценность работы заключается в том, что полученные в ней научные данные могут быть использованы при прогнозировании и анализе микроструктуры и физико–химических свойств, изученных в работе, ГЦК–металлов (*Al, Cu, Ni, Pu*) и основанных на них многих конструкционных и функциональных материалов для новой техники, в том числе ядерной, работающих в сложно-напряженных состояниях и подвергаемых деформациям, термическим и радиационным воздействиям.

Достоверность научных результатов и выводов работы обусловлена применением физически обоснованных современных научных методов и моделей в физике твердого тела, физическом металловедении, физической мезомеханики, использованием многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, известных моделей расчетов энергетических и кинетических параметров собственных точечных дефектов, химических потенциалов вакансий и их потоков (направлений миграции) в нагруженных ГЦК металлах (*Al, Cu, Ni, Pu*), критическим сравнением полученных

результатов с данными других теоретических, расчетных и экспериментальных исследований.

Апробация работы

Материалы работы были доложены на следующих конференциях и семинарах:

1. XXX Международная конференция по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (г. Москва, 2000 г.).
2. V Международная конференция «Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение» (г. Александров, 2001 г.).
3. IV Всероссийской конференции молодых ученых «Физическая мезомеханика материалов» (г. Томск, 2001)
4. Региональная научно – практическая конференция «Прогрессивные технологии и экономика в машиностроении» (г. Юрга, 2002 г.).
5. Всероссийская научно – практическая конференция «Прогрессивные технологии и экономика в машиностроении» (г. Юрга, 2003 г.).
6. VI Международная конференция «Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение», (г. Александров, 2003 г.).
7. Вторая Международная конференция по физике кристаллов «Кристаллофизика 21-го века», посвященная памяти М.П. Шаскольской (г. Москва, 2003г.).
8. Научная сессия молодых ученых научно-образовательного центра «Физика и химия высокоэнергетических систем» (г. Томск, 2004 г.).
9. Международная конференция по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов (г. Томск, 2004 г.).
10. I Всероссийская конференция молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем», (г. Томск, 2005 г.).
11. II Международная конференция студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук» (г. Томск, 2005 г.).
12. Международная школа-конференция молодых ученых «Физика и химия наноматериалов» (г. Томск, 2005 г.).
13. II Всероссийская конференция молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем», (г. Томск, 2006 г.)
14. Российский семинар по радиационной повреждаемости материалов атомной техники (г. Обнинск, 2008 г.).

Публикации Основные результаты диссертации опубликованы в 14 работах [1-14].

Структура и объем работы Диссертация объемом 117 страниц состоит из введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы из 135 наименований и включает в себя 26 рисунков и 7 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во Введении изложены основные положения образования и зарождения очагов микронесплошностей (микропор и микротрещин) в металлах как основных причин, определяющих их работоспособность и

ресурс, и как перспективную направленность исследований диссертационной работы, определяемой выяснением микромеханизмов (в основном в вакансионной подсистеме дефектов), формирующих такие микронесплошности (микро- и мезо-дефекты, микро-поры и микро-трещины). Определены актуальность темы диссертации, научная новизна полученных результатов, практическая ценность работы, достоверность результатов и выводов работы, приведен список конференций и семинаров, где результаты диссертации были доложены, и список публикаций, где приведены основные результаты диссертации.

В Главе 1 изложены имеющиеся результаты, модели и подходы по закономерностям и механизмам образования локальных несплошностей (микропор и микротрещин) и их параметрам и распределению в металлах, кинетике разрушения металлов. Показана существенная роль вакансий и их потоков в механизмах формирования несплошностей в полях градиентов напряжений, когда вакансионно-дислокационный механизм образования микронесплошностей становится важным в металлах, определяя их функциональные свойства. В том числе, роль вакансий в образовании микронесплошностей при вязком и квазихрупком разрушении, при образовании полос локализации деформации, а также при образовании микронесплошностей на включениях и частицах на межзеренных границах при высокотемпературной ползучести. Приведены существующие в настоящее время модели по дополнительному диффузионному потоку при неоднородном распределении упругих напряжений в кристалле. В континуальной теории упругости согласно восходящей диффузии Горского для одноосных растяжений вдоль оси X при $\sigma_{yy}=\sigma_{zz}=0$ плотность потока вакансий:

$$J_x(x) = -D \frac{\partial n(x)}{\partial x} - \frac{\Omega_0 n D}{3T} \frac{\partial \sigma_x(x)}{\partial x} \quad (1)$$

где D – коэффициент диффузии, n – плотность вакансий, σ_x – напряжение, T – температура, Ω_0 – объём, приходящийся на один атом. Первое слагаемое в (1) является следствием энтропийной тенденции к равномерному распределению вакансий в объеме кристалла, второе слагаемое обусловлено полем градиентов напряжений. При одноосном растяжении $\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} > 0$ сила, действующая на вакансию в поле упругих сил, направлена в сторону более сжатой части кристалла.

В Главе 2 показано, что атомистический подход, с использованием наиболее физически обоснованных многочастичных потенциалов межатомных взаимодействий в металлах, является основным при анализе вакансионной структуры металлов, потоков вакансий и образованных ими несплошностей в больших масштабных диапазонах размеров таких несплошностей (пор, микротрещин). Определяющим параметром всех расчетов методом молекулярной динамики является многочастичное межатомное взаимодействие, наиболее эффективно описываемое методом

функционала электронной плотности (ФЭП) и методом погруженного атома (МПА).

Полная энергия металла E_{tot} в методе погруженного атома имеет вид:

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_i) + \sum_{i>j} \Phi(r_{ij}), \quad (2)$$

где $F_i(\rho_i)$ - функция погружения, учитывающая многочастичный характер межатомного взаимодействия в металлах, ρ_i - электронная плотность приходящая на узел i -атома со стороны окружающих атомов, $\Phi(r_{ij})$ - парный потенциал взаимодействия между атомами i и j , находящимися на расстоянии r_{ij} . В МПА плотность ρ_i вычисляется в приближении суперпозиции электронных плотностей атомов:

$$\rho_i = \sum_{j(\neq i)} f(r_{ji}), \quad (3)$$

Функция распределения атомных плотностей задается в виде:

$$f(r) = f_l \exp(-\chi(r - r_l)), \quad (4)$$

где f_l - масштабный множитель, r_l - параметр решетки идеального кристалла при равновесных условиях, χ - параметр, используемый для моделирования распределения атомной плотности электронов. В работе функция погружения и потенциал парного взаимодействия выбрана в виде:

$$F(\rho) = -F_0 \left[1 - \ln \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right)^n \right] \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right)^n + F_1 \left(\frac{\rho}{\rho_l} \right), \quad (5)$$

$$\Phi(r) = -\alpha \left[1 + \beta \left(\frac{r}{r_a} - 1 \right) \right] \exp \left[-\beta \left(\frac{r}{r_a} - 1 \right) \right]. \quad (6)$$

Данная модель межатомных потенциалов взаимодействия использует 5 параметров. Параметры модели рассчитывались из условия согласия экспериментальных и теоретических значений модулей упругости второго порядка C_{11} , C_{12} и C_{44} , энергии образования вакансии $E_0^{f(v)}$ (без релаксации), энергии сублимации E_c и параметра решетки кристалла a_0 при равновесных условиях.

В Главе 3 изложены модели и методы расчетов термодинамических свойств вакансий в металлах в атомистическом подходе, в рамках которого получены выражения для энергий образования вакансий, химических потенциалов и потоков вакансий в полях градиентов напряжений, а также, изложены результаты расчетов термодинамических характеристик вакансий в ГЦК металлах Al , Cu и Ni в исходном состоянии (недеформированном) и в зависимости от степени и типа деформирования (одноосного, объемного и сдвигового).

В рамках равновесной и неравновесной термодинамики получены выражения для химического потенциала вакансий в полях градиентов напряжений. Проведено сравнение полученных выражений для адиабатически изолированной системы. Весь кристалл был разбит на

элементарные объёмы, содержащие N_{am} и N невзаимодействующих между собой вакансий ($N_{am} \gg N$). Как и в континуальной теории диффузии, можно ввести химический потенциал вакансии, зависящей от тензора деформаций $\{\varepsilon_{ij}(\vec{r})\}$, выбрав за начало отчета потенциала энергию образования вакансии $E_v^F(0)$ в недеформированной области кристалла, т.е.

$$\mu(\varepsilon_{ij}) = E_v^F(\varepsilon_{ij}) - E_v^F(0). \quad (7)$$

В соответствии с общей термодинамической теорией неравновесных состояний для потоков вакансий, сформулированных Онзагером, и микроскопической теорией диффузии, которая в явном виде учитывает атомную структуру вещества, были получены выражения для потоков вакансий. Для кубических кристаллов при одноосном растяжении вдоль оси X , обладающей осевой симметрией, и при условии $\sigma_{yy} = \sigma_{zz} = 0$ поток вакансий имеет следующий вид:

$$j_x(x) = -D(x) \frac{\partial n(x)}{\partial x} \Big|_x - \frac{D(x)n(x)}{kT} \frac{\partial E_v^F(x)}{\partial x} \Big|_x, \quad (8)$$

где $E_v^F(\vec{r})$ - энергия образования вакансии в локальной области с радиус-вектором \vec{r} , $D(x)$ - коэффициент диффузии в точке, с координатой x , $n(x)$ - плотность вакансий. Эту формулу можно переписать, используя терминологию движущей силы вакансии $\vec{F}_v(\vec{r})$:

$$j_x(x) = -D(x) \frac{\partial n(x)}{\partial x} - \frac{n(x)D(x)}{kT} F_{vx}(x); \quad (9)$$

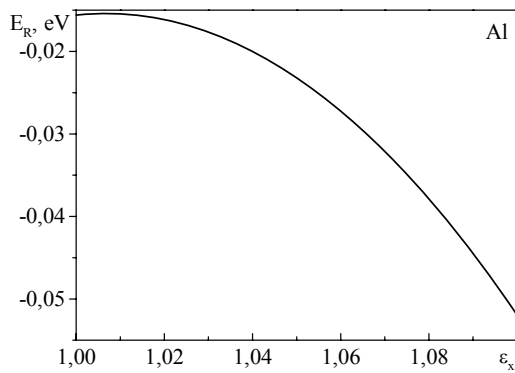
$$F_{vx}(x) = -\frac{\partial E_v^F(x)}{\partial x}. \quad (10)$$

Из полученного выражения видно, что для нахождения движущей силы вакансии и, соответственно, потока вакансии необходимо знать, как изменяется энергия образования вакансии E_v^F при наличии в твердом теле градиента напряжений. При малых деформациях тензор напряжений связан с тензором деформаций законом Гука.

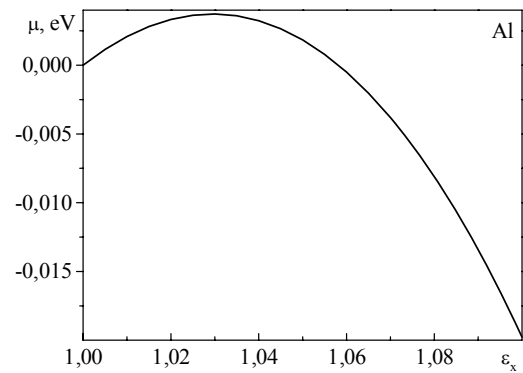
В настоящей работе расчет термодинамических свойств вакансий проводился для трех типов деформации - всестороннего растяжения, одноосного растяжения вдоль направления $[100]$, $[110]$, $[111]$ и деформации сдвига, соответствующих модулям сдвига C_{44} и C' . При одноосном растяжении происходит удлинение кристалла по заданному направлению и минимизирующее полную энергию поджатие кристалла в направлении, перпендикулярном растяжению.

Таблица 1. Результаты расчета энергии образования вакансии в металлах Al , Cu , Ni в точке критической деформации u_{xx}^m вдоль направления $[100]$.

	Al	Cu	Ni
Критическое растяжение u_{xx}^m , %	3	1,65	1,75
E_v^f , эВ	0.74	1.310	1.63
E_R , эВ	-0.0177	-0.0310	-0.0341
Деформация кристалла в направлениях $[010]$ и $[001]$	0.9877	0.9938	0.9928

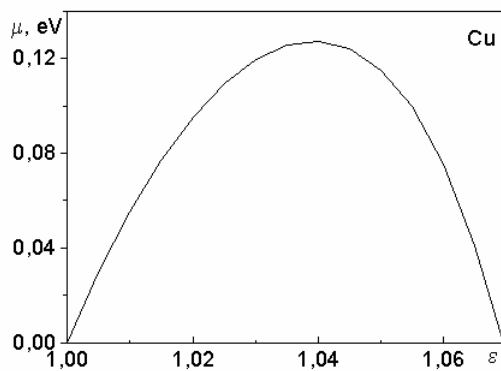


a

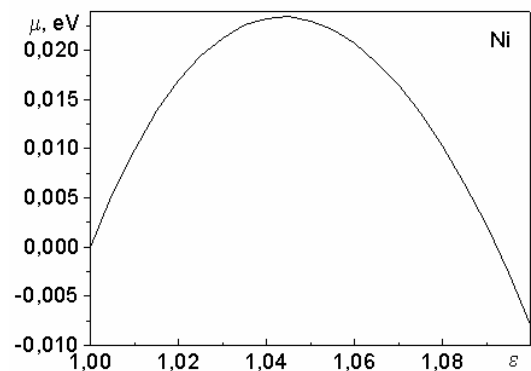


b

Рис.1 Зависимость энергии релаксации E_R (**a**) и химического потенциала μ (**b**) от одноосной деформации вдоль направления $[100]$ для Al .

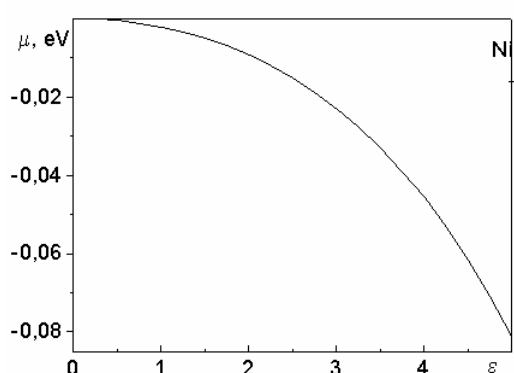


a

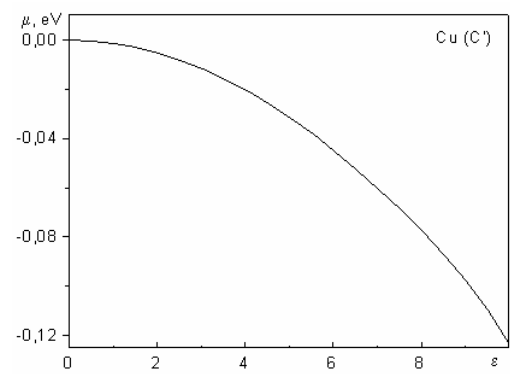


b

Рис.2 Зависимость химического потенциала от объёмной деформации для Cu (**a**) и зависимость химического потенциала от одноосной деформации вдоль направления $[111]$ для Ni (**b**).



a



b

Рис.3 Зависимость химического потенциала от деформации сдвига (вида C_{44}) в Ni (**a**), от деформации сдвига (вида C') в Cu (**b**).

Расчет релаксации атомов вблизи вакантного узла для каждого значения деформаций проводился минимизацией полной энергии кристалла по атомным смещениям методом градиентного спуска. При этом моделировался кристаллит, содержащий 7000 атомов, а взаимодействие между атомами учитывалось в радиусе 5-й координационной сферы недеформированного кристалла.

Расчеты показали, что при одноосном растяжении ГЦК металлов (*Al*, *Cu*, *Ni*) вдоль направлений [100], [110], [111] и объёмной деформации химический потенциал μ_σ имеет максимум при относительной деформации $u_{xx}^m = 1.01 - 1.04$. Значения термодинамических характеристик вакансий в металлах *Al*, *Cu*, *Ni* в точке критической деформации u_{xx}^m вдоль направления [100] приведены в Табл. 1.

Существование максимума u_{xx}^m на зависимости химического потенциала μ от деформации u_{xx} означает, что при $u_{xx} < u_{xx}^m$ дополнительный диффузионный поток вакансий, обусловленный градиентом напряжений, направлен в сторону более сжатой области кристалла, а при $u_{xx} > u_{xx}^m$ - в сторону более растянутой области кристалла. Наличие максимума для μ как функции от u_{xx} имеет простое физическое истолкование. В величину μ дает вклад энергия релаксации атомов, окружающих вакансию. Энергия релаксации есть величина отрицательная. Поскольку атомам при релаксации энергетически выгодно занимать позиции, соответствующие недеформированной кристаллической решетке, то при увеличении деформации u_{xx} увеличивается величина релаксации и число релаксируемых атомов. При этом через смещение атомов вокруг вакансии уменьшается упругая энергия деформации значительной области кристалла, окружающей вакантный узел. Зависимость энергии релаксации атомов вокруг вакантного узла для *Al* вдоль направления [100] приведены на Рис.1(а). Аналогичные результаты получены и для объёмной деформации кристалла, однако, величина рассчитанных критических напряжений значительно выше, чем при одноосной деформации. Зависимости химических потенциалов для одноосной деформации вдоль направления [100] для *Al* приведена на Рис.1(б), зависимость химического потенциала от объёмной деформации для *Cu* - на Рис.2 (а), на Рис.2(б) показана зависимость химического потенциала от одноосной деформации вдоль направления [111] для *Ni*.

При деформации сдвига рассчитанный в данной работе химический потенциал вакансий для всех рассматриваемых ГЦК металлов уменьшается при увеличении деформации. Это значит, что вакансиям энергетически выгодно двигаться в область с большей деформацией, поскольку при смещении атомов вокруг вакантного узла уменьшается упругая энергия. Причем для всех рассматриваемых ГЦК металлов величина уменьшения химического потенциала вакансии при сдвиговой деформации на порядок больше, чем его уменьшение при одноосном растяжении при одной и той степени деформации. Зависимость химического потенциала от деформации

сдвига (вида C_{44}) для Ni показано на Рис.3(а) и для деформации сдвига (вида C') для Cu – Рис.3(б).

В главе 4 вычислены энергетические, кристаллографические и кинетические характеристики собственных точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов) во внутренних градиентных полях напряжений, созданных дислокациями разных типов в ГЦК кристалле плутония, обладающего рекордным показателем ($A = 2c_{44}/(c_{11}-c_{12}) > 7$) упругой анизотропии. Для расчетов использовался гибридный метод, когда характеристики точечных дефектов вычислялись методом молекулярной статики с использованием метода погруженного атома, а упругие поля дислокаций и их взаимодействий с точечными дефектами (упругими диполями) вычислялись методами анизотропной теории упругости.

Наиболее энергетически выгодной конфигурацией собственного межузельного атома является $[100]$ гантельная конфигурация с энергией образования равной 1.66 эВ и энергией миграции 0.11 эВ. Величины энергии образования и миграции вакансии равны 0.53 эВ и 1.56 эВ, соответственно.

В рамках анизотропной теории упругости рассчитана пространственная зависимость энергии взаимодействия собственных точечных дефектов (упругих диполей) с краевыми и винтовыми дислокациями в системах скольжения $[110]\{111\}$ и $[110]\{110\}$ в ГЦК кристалле плутония.

Показано существенное влияние упругих полей дислокаций на энергетические и кристаллографические характеристики точечных дефектов и направления их миграции. В окрестности всех рассмотренных дислокаций существуют области, где энергия $[110]$ гантели меньше энергии образования $[100]$ гантели. Границы этих областей находятся на расстоянии 1-2 b от дислокационной линии, где b – модуль вектора Бюргеса.

Попадание точечного дефекта в ядро дислокации затруднено во всех рассмотренных случаях упругого взаимодействия дислокации и точечных дефектов, кроме случая винтовой дислокации и вакансии, в котором траектории миграции с наименьшей энергией миграции вакансии ведут к ядру дислокации. Вакансии могут образовывать локальные скопления, положение которых зависит от типа дислокации (похожие эффекты были ранее получены для кристаллов меди, с некоторыми отличиями, обусловленными, может быть, существенным различием степеней анизотропности ГЦК кристаллов меди и плутония).

Каждому направлению миграции отвечает своя ориентация упругого диполя седловой конфигурации. Таким образом, рассчитанные энергии образования всех возможных ориентаций седловой конфигурации дефекта в некоторой точке \vec{r} позволяют определить направление миграции дефекта с наименьшей энергией миграции в этой точке и построить траекторию его движения с наименьшими энергетическими барьерами. На рис. 4 приведены построенные траектории миграции вакансии и $[100]$ гантельной конфигурации СМА с наименьшими энергетическими барьерами в упругих полях дислокаций ED $[110]\{111\}$, ED $[110]\{110\}$ и SD $[110]$. Здесь символ ED обозначает краевую дислокацию, SD – винтовую дислокацию. Чтобы

характеризовать расстояния, на которых анизотропия миграции становится значительной, были вычислены средние расстояния между дефектом и дислокацией \bar{r} , при которых разность между энергиями миграции собственных точечных дефектов в различных направлениях больше энергии $k_B T$ при $T = 20^\circ \text{C}$. Для всех типов дислокаций и точечных дефектов оно примерно составило $13b$.

В области притяжения вакансии в диапазоне углов $200^\circ < \varphi < 218^\circ$, $238^\circ < \varphi < 259^\circ$, $281^\circ < \varphi < 302^\circ$, $322^\circ < \varphi < 340^\circ$ направления движения с наименьшей энергией миграции направлены в сторону от дислокации, что затрудняет приближение вакансии к дислокации. В области притяжения $[100]$ гантели, траектории не ведут к дислокации, что затрудняет приближение $[100]$ гантели к дислокации (рис. 4 б).

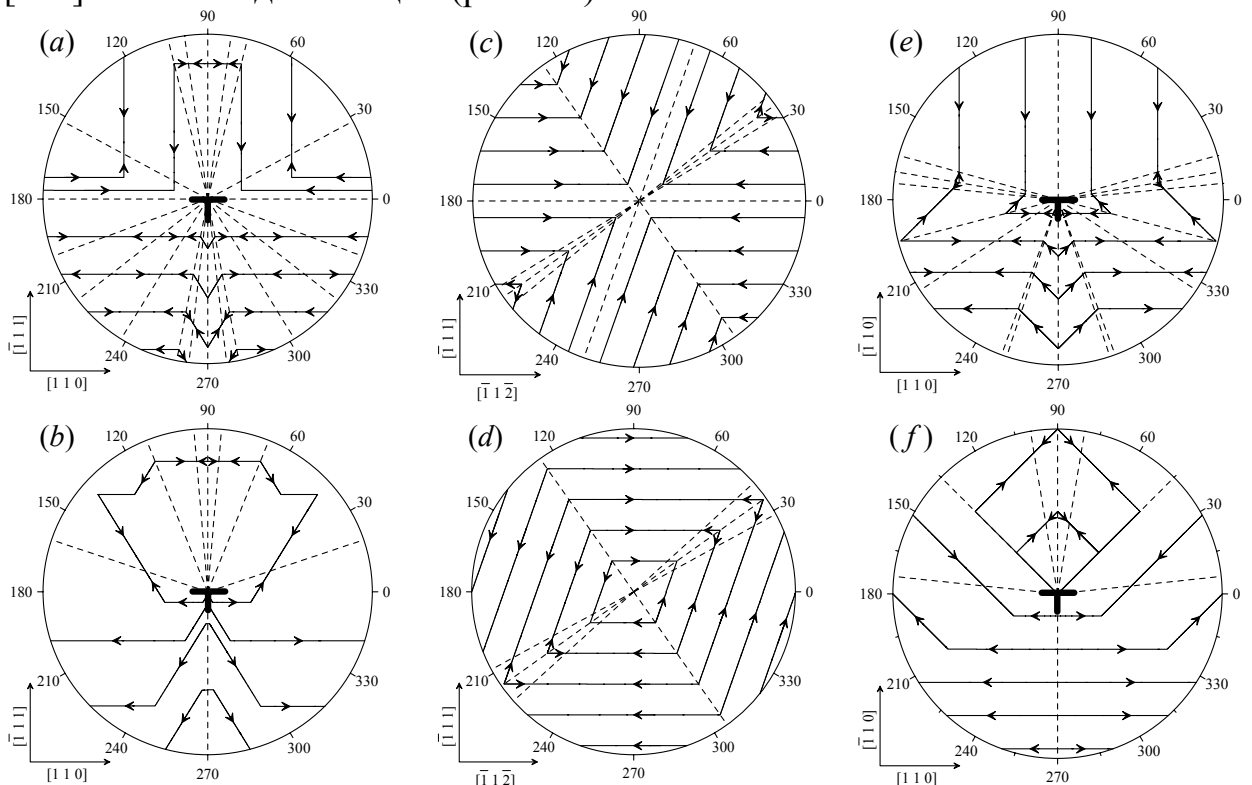


Рис. 4. Траектории миграции собственных точечных дефектов с наименьшими энергетическими барьерами в упругом поле дислокации (стрелками показаны направления движения собственных точечных дефектов по траектории, а пунктирными линиями - лучи $\varphi = \text{const}$, соответствующие экстремумам энергии E_{int} седловой конфигурации дефекта при его движении по данной траектории).

- | | |
|-----------------------------------|--|
| (a) ED $[110]\{111\}$ + вакансия; | (b) ED $[110]\{111\}$ + $[100]$ гантель; |
| (c) SD $[110]$ + вакансия; | (d) SD $[110]$ + $[100]$ гантель; |
| (e) ED $[110]\{110\}$ + вакансия; | (f) ED $[110]\{110\}$ + $[100]$ гантель |

Указанные признаки поведения собственных точечных дефектов в дислокационных полях могут существенно влиять на кинетику образования дефектов и их потоков, эффективность дислокаций, как стоков для точечных дефектов в ГЦК кристалле плутония и, следовательно, на эволюцию

микроструктуры материала под облучением (распухание, ползучесть, разрушение, др.).

В заключении обобщены и суммированы основные результаты диссертации, ее основные положения и выводы:

Основные результаты и выводы

1. Показано, что как при всестороннем, так и при одноосном растяжении химический потенциал вакансии, обусловленный её взаимодействием с полем упругих напряжений, принимает максимальные значения при некоторой критической деформации (различных для каждого ГЦК металла (*Al*, *Cu*, *Ni*), что связано с уровнями их упругой анизотропии). Существование максимума на деформационной зависимости химического потенциала означает, что выше некоторой деформации (критической) дополнительный диффузионный поток вакансий, обусловленный градиентом напряжений, меняет свое направление в сторону области разрежения.

2. Показано, что при деформации сдвига химический потенциал вакансий, обусловленный её взаимодействием с полем упругих напряжений, для рассматриваемых ГЦК металлов (*Al*, *Cu*, *Ni*) всегда уменьшается при увеличении деформации, т.е. поток вакансий всегда направлен в область более деформированного кристалла.

3. Рассчитана пространственная зависимость энергии упругого взаимодействия собственных точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов) и прямолинейных краевых (системы скольжения $[110]\{111\}$ и $[110]\{110\}$) и винтовой (вектор Бюргерса $\frac{1}{2}[110]$) дислокаций в ГЦК кристалле *Pu* методом молекулярной динамики с использованием многочастичного межатомного потенциала, полученного модифицированным методом погруженного атома, и методами упругой анизотропии. Показано существенное влияние полей дислокаций на энергетические и кристаллографические характеристики собственных точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов) и направления их миграции в кристалле плутония. Градиентные поля напряжений дислокаций существенно влияют на диффузионные потоки точечных дефектов, вызывая их потоки к ядру дислокации, но не все ядра дислокаций являются непосредственными стоками таких дефектов, поскольку поля напряжений дислокаций отклоняют потоки дефектов от центра ядер дислокаций.

4. Рассчитаны энергетические и кинетические характеристики собственных точечных дефектов, их химические потенциалы и потоки в градиентных полях напряжений (вакансий в ГЦК металлах *Al*, *Cu*, *Ni* во внешних полях, вакансий и собственных межузельных атомов в ГЦК кристалле *Pu* во внутренних дислокационных полях). Показано, что потоки вакансий, обусловлены нисходящей диффузией, позволяют объяснить ряд экспериментальных фактов по образованию микропор и микротрещин при вязком и квазихрупком разрушении, при эволюции микроструктуры вблизи концентраторов напряжений.

Результаты по диссертации опубликовано в работах:

- [1] Ульянов В.В., Руденский Г.Е., Кузнецов В.М., Тверскова А.В. «Расчет термодинамических характеристик вакансий в ГЦК-металлах в условиях одноосного растяжения» // **Физическая мезомеханика**. 2001. Т. 4, № 2. С.7-11.
- [2] Ульянов В.В., Дубасова Н.А., Сивак А.Б. «Характеристики собственных точечных дефектов и их анизотропная миграция в упругих полях дислокаций в ГЦК плутонии» // **Вопросы атомной науки и техники**. 2008. Серия: «Материаловедение и новые материалы». 2(71), С.179-191.
- [3] Ульянов В.В., Руденский Г.Е., Кузнецов В.М. Расчет потоков вакансий в полях градиентов напряжений в чистых металлах. V Международная конференция «Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение». 10-14 сентября 2001 г. Труды, Александров, ВНИИСИМС, с. 305-314.
- [4] Ульянов В.В., Тверскова А.В. Движущая сила, действующая на вакансии при наличии градиентов напряжений в металлах. Нисходящая диффузия. Материалы VIII Российской научной студенческой конференции. Ред. М.Ф.Жоровков, Ю.Ю.Эрвье. – Томск: ИФПМ СО РАН, 2002, с. 46-48.
- [5] Ульянов В.В., Тверскова А.В., Руденский Г.Е. Поток деформационных вакансий в твердых телах при наличии градиента по сдвигу. Труды Всероссийской научно-практической конференции «Прогрессивные технологии и экономика в машиностроении». 24-25 апреля 2003 г., Юрга, с. 317-318.
- [6] Ульянов В.В., Тверскова А.В., В.М.Кузнецов, Руденский Г.Е. Поток деформационных вакансий в твердых телах при наличии градиента по сдвигу. VI Международная конференция «Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение». 8-12 сентября 2003 г., Материалы, Александров, ВНИИСИМС, с. 214-218.
- [7] Ульянов В.В., Беломестных В.Н., Ульянов В.Л. Параметр Грюнайзена ионных и ионно-молекулярных кристаллов. VI Международная конференция «Кристаллы: рост, свойства, реальная структура, применение». 8-12 сентября 2003 г., Материалы, Александров, ВНИИСИМС, с. 183-187.
- [8] Ульянов В.В., Тверскова А.В., Кузнецов В.М., Руденский Г.Е. Поток деформационных вакансий в твердых телах при наличии градиента по сдвигу. Вторая Международная конференция по физике кристаллов «Кристаллофизика 21-го века», посвященной памяти М.П.Шаскольской. 28-30 октября 2003 г., Москва, МИСиС, 2003, с. 187-188.
- [9] Ульянов В.В. Движущая сила, действующая на вакансии в ГЦК-металлах при наличии в них градиентов напряжений. // Материалы научной сессии молодых ученых научно-образовательного центра

«Физика и химия высокоэнергетических систем», 17-20 марта 2004 г., Томск, Россия, с. 61-63.

- [10] Ульянов В.В., Тверскова А.В., Кузнецов В.М. Термодинамические характеристики ГЦК металлов при одноосной деформации. Ноосферные знания и технологии. Сборник статей. Вып. 1, 2004, Томск, Изд-во Том. Ун-та, с. 92-96.
- [11] Ульянов В.В. Кузнецов В.М., Руденский Г.Е., Тверскова А.В. Вакансионно-дислокационный механизм образования микропор и микротрещин при вязком и квазихрупком разрушении. Нисходящая диффузия в полях градиентов напряжений // Международная конференция по физической мезомеханике, компьютерному конструированию и разработке новых материалов, 23-28 августа 2004 г., Томск, Россия.
- [12] Ульянов В.В., Тверскова А.В. Термодинамические характеристики и химические потенциалы вакансий в ГЦК-металлах при одноосной деформации. Труды Второй Международной конференции студентов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук», 16-20 мая 2005 г., Томск. Томский политехнический университет, 2005. с. 96-98.
- [13] Ульянов В.В., Тверскова А.В. Нисходящая диффузия вакансий в полях градиентов напряжений при одноосном растяжении // Сборник материалов Международной школы-конференции молодых ученых «Физика и химия наноматериалов» 13-16 декабря 2005 г., Томск, Россия, С. 248–252.
- [14] Ульянов В.В., Тверскова А.В. Нисходящая диффузия вакансий в ОЦК и ГЦК металлах при деформации сдвига. // Сборник материалов II Всероссийской конференции молодых ученых «Физика и химия высокоэнергетических систем» 4-6 мая 2006 г., Томск, Россия, С. 127–130.