

Список литературы

1. Tolstolutskaia G.D., Ruzhytskyi V.V., Voyevodin V.N. et al. // J. Nucl. Mater. 2013. V.422. S710-S714.
2. Бендиков В.И., Карпов С.А., Ружицкий В.В. // Пре-принт. ХФТИ, 2003-2. 16 с.
3. Karpov S.A., Tolstolutskaia G.D., Sungurov B.S., Ruzhytskyi V.V. // PAST. 2017. № 2 (108). P. 36-40.
4. Головин Ю.И. // Физика твердого тела. 2008. Т. 50. Вып. 12. С. 2113–2143.

INFLUENCE OF DAMAGE MICROSTRUCTURE ON MECHANICAL PROPERTIES AND ACCUMULATION OF HYDROGEN IN SS316 STEEL

Bogdan Sungurov, Galina Tolstolutskaia, Sergey Karpov, Valeriy Ruzhytskyi, Igor Kopanets
National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"
1 Akademicheskaya str., 61108 Kharkov, Ukraine, b.sungurov@gmail.com, g.d.t@kipt.kharkov.ua,
karpoff@kipt.kharkov.ua, ruzhytskyi@kipt.kharkov.ua, iropanets@ukr.net

Data on the evolution of damage microstructure, as well as accumulation levels and temperature intervals of retention of the hydrogen isotope deuterium in SS316 austenitic steel were obtained. It has been established that vacancy-type defects are the most preferential trapping sites for deuterium atoms at irradiation doses of ~1 dpa (displacement per atom). The development of dislocation structures, vacancy and gas-filled pores is shown and their distribution by size is determined. The dependence of the amount of trapped deuterium atoms on the development of a defect structure upon annealing is determined. An essential hydrogen retention in the traps associated with helium and argon bubbles has been established, that support the data obtained for stainless steels irradiated in light water reactors. The correlation of radiation-induced hardening of SS316 stainless steel and the evolution of its microstructure during irradiation in the dose range of 0-25 dpa at 300 K was studied. It was found that hardening at such doses reaches 75% and saturated at 2 dpa. The greatest contribution to hardening is made by clusters of defects and dislocation loops with a diameter of less than 15 nm. At operating conditions hydrogen affects the hardening at concentrations of ~1 at. %.

ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ И ИХ РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ

В.В. Углов, Н.Т. Квасов, И.В. Сафронов, Н.Д. Комаров
Белорусский государственный университет,
пр. Независимости 4, 220030 Минск, Беларусь, Uglov@bsu.by

Предложена методика и проведены расчёты модуля упругости Юнга наноструктурированных материалов в зависимости от размеров и концентрации наночастиц. Определяющую роль здесь играют модули упругости матрицы и самих нановключений. Исследована кинетика дефектной системы с учётом рекомбинационных процессов и действия стоков, которыми являются наночастицы. Установлено наличие корреляции между упругими и радиационными свойствами наноструктурированных материалов.

Введение

Одним из путей повышения прочностных свойств, температурной и радиационной стойкости материалов является синтез нанокompозитных систем, представляющих собой в простейшем случае структурированную наноразмерными частицами матрицу. Физические свойства матрицы, отдельных наночастиц, их размеры и концентрация в совокупности определяют характеристики полученного таким образом материала. При этом следует учитывать, что между макроскопическим и наноразмерным состояниями должна существовать определённая переходная зона (размерная «граница» R_0), обусловленная изменением физических свойств материала при соответствующем изменении его размера. Изменение физико-механических, магнитных, теплофизических и других свойств наночастиц может быть связано с деформацией материала, обусловленной поверхностным натяжением, уменьшением координационного числа в приповерхностном слое, изменением его группы симметрии, перестройкой архитектуры электронных оболочек, изменением энергии связи. Существенное влияние

на физические свойства нанообъектов могут оказывать также различные дефекты структуры.

Основная часть

Поверхностное натяжение, характеризуемое коэффициентом σ , приводит к деформации решётки $\varepsilon(r)$, значение которой в рамках теории упругости имеет следующий вид:

$$\varepsilon(r) = - \frac{2\sigma R^2}{3K(R^3 - r_0^3)} \left(1 - \frac{r_0^3}{r^3}\right), \quad (1)$$

где K – модуль всестороннего сжатия объёмного материала, $r_0 \sim a_0$, a_0 – постоянная решётки в равновесном состоянии, R – радиус сферической наночастицы.

Зависимость модуля упругости Юнга от деформации можно определить следующей формулой:

$$E(r) = B_0 [1 - 3\gamma\varepsilon(r)] U_b(r), \quad (2)$$

где γ – постоянная Грюнайзена, $U_b(r)$ – энергия связи, $B_0 = \frac{36N\bar{\varepsilon}^2}{a_0 m_c(R)}$, N_0 – концентрация атомов

решётки, $m_k(R)$ – среднее значение координационного числа в сферической частице радиуса R .

Аппроксимация полученных в ряде компьютерных экспериментов зависимостей $m_k(R)$ может быть выражена следующей формулой:

$$m_k(R) = m_k^0 (1 - k_1 e^{-k_2 R}), \quad (3)$$

где m_k^0 – координационное число объёмного материала, k_1 и k_2 определяются отдельно для каждого конкретного вещества.

Энергию связи для деформированного металла оценивали из формулы для полной энергии кристалла [1]:

$$U_b(r) = -\frac{b_1}{a^3} - \frac{b_2}{a^2} + \frac{b_3}{a} - b_4, \quad (4)$$

где выражения для b_1 , b_2 , b_3 , b_4 приведены в работе [2], $a(r) = a_0 [1 + \varepsilon(r)]$.

Тогда зависимость $E(R)$ можно определить из [3].

С целью определения модуля упругости Юнга E_{ns} наноструктурированного материала полученную зависимость $E(R)$ необходимо трансформировать в степенной закон $E(R) = A \left(\frac{R}{R_0}\right)^m$ [4], аналогичный закону Холла-Петча. Причём A и m определяются на интервале $0 \leq R \leq R_0$ (где R_0 – граничное значение R , при превышении которого модуль Юнга равен значению E_0 для объёмного материала). Тогда согласно [4] можно записать:

$$E_{ns} = \frac{E_1(3E_2 + G_1) + (E_2 - E_1)(3E_1 + G_1)n_s}{3E_2 + G_1}, \quad (5)$$

где E_1 – модуль упругости Юнга матрицы, G_1 – модуль сдвига материала матрицы, $E_2 \equiv E(R)$, n_s – объёмная доля наночастиц.

Пусть в циркониевой матрице распределены сферические наночастицы железа радиуса R и с концентрацией N_s . На рис. 1 представлены соответствующие зависимости $E_{ns}(R, n_s)$.

В ряде экспериментов показано, что наноструктурированные материалы обладают более высокой радиационной стойкостью. Это связывается в первую очередь с геттерирующей способностью наноразмерных включений.

Пусть при облучении наноструктурированного материала, например, нейтронами, скорость генерации элементарных дефектов в единичном объёме (вакансий (v) и междоузельных атомов (i)) равна I .

Тогда скорость изменения концентрации v и i в объёме можно описать следующим уравнением [4]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_j}{\partial t} = I - \mu_j D_j N_j - \frac{\chi}{N_0} N_i N_v + \\ + D_j \Delta N_j - \frac{D_j \nabla N_j}{k_b T} \vec{F}_j - \frac{D_j N_j}{k_b T} \nabla \vec{F}_j, \end{aligned} \quad (6)$$

где $j = i, v$; μ_j – эффективность действия стоков в облучаемом материале; χ – коэффициент рекомбинации i и v ; D – коэффициент диффузии; \vec{F}_j – сила взаимодействия дефекта j -типа со стоком; размерность N_j – m^{-3} ; k_b – постоянная Больцмана;

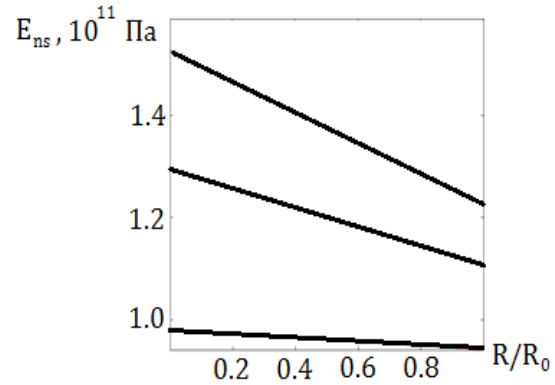


Рис. 1. Зависимость модуля упругости Юнга E_{ns} от радиуса наночастицы $\frac{R}{R_0}$

T – температура; $\varepsilon_j = \frac{1}{\sqrt{\mu_j}}$ – длина пробега j -ого дефекта;

$$\chi = 4\pi\rho N_0(D_i + D_v) ; D_i = 8 \cdot 10^{-7} \exp\left(-\frac{0.15}{k_b T}\right),$$

$$D_v = 1.4 \cdot 10^{-6} \exp\left(-\frac{0.138}{k_b T}\right), \quad (D_i \text{ и } D_v \text{ имеют размерности } \frac{m^2}{c}, k_b T - \text{эВ}); \rho - \text{радиус объёма рекомбинации,}$$

$$\rho = \left[\frac{\alpha}{2} + \left(\frac{\alpha^2}{4} + \beta\right)^{\frac{1}{2}}\right]^{\frac{1}{2}},$$

$$\alpha = \frac{\eta e^2 a_0}{8\pi \varepsilon_0 \varepsilon U_m}; \beta = \frac{3\kappa a_0 \Delta V_i \Delta V_v}{2U_m}; N_0 - \text{концентрация атомов матрицы; } \eta - \text{валентность; } e - \text{заряд электрона; } \Delta V_i \text{ и } \Delta V_v - \text{дилатационные объёмы междоузельного атома и вакансии соответственно; } \varepsilon - \text{динамическая диэлектрическая проницаемость; } \varepsilon_0 - \text{электрическая постоянная; } U_m - \text{энергия миграции. Для нашего случая } \mu_j = 4\pi R N_s [5].$$

Существенные трудности здесь представляет собой определение функциональной зависимости силы, действующей на дефект со стороны нановключения. В монокристаллической матрице можно предположить дислокационный характер этой зависимости:

$$F(r) = -F_k \left(\frac{R_d}{r}\right)^2, \quad (7)$$

где $F_k \sim \frac{2U_m}{a_0}$.

Решение уравнения (6) проводится сначала для одной наночастицы ($N_s = 1 m^{-3}$), а затем результат обобщается для N_s количества наночастиц, находящихся в единичном объёме. Из проведенных расчётов согласно уравнения (6) следует, что количество радиационных дефектов начинает существенно уменьшаться при $N_s \geq (R_d + 2R)^{-1/2}$. Величина R_d определяется из условия $\left|\frac{dU(r)}{dr}\right|_{r=R_d} = \frac{2U_m}{a_0}$, где $U(r) = \frac{Gb\delta \sin\theta}{\pi r}$, b – вектор Бюргерса, δ – дилатационный объём дефекта ($\delta \sim V_i$).

Это, естественно, является положительным результатом наноструктурирования материалов.

Однако при температурном разогреве, сопровождающем радиационное воздействие на такие материалы, будет иметь место формирование сложного напряженно-деформированного состояния системы. Термоупругие деформации $\varepsilon(r)$ в

отдельной наночастице могут быть получены из следующего уравнения:

$$\frac{3(1-\nu)}{(1+\nu)} \nabla(\nabla \vec{u}) - \frac{3(1-2\nu)}{(1+\nu)} \nabla \times \nabla \vec{u} = \alpha \nabla T(r, t), \quad (8)$$

где ν – соотношения Пуассона, \vec{u} – смещение, α_t – коэффициент линейного температурного расширения, $T(r, t)$ – температура наночастицы, $\varepsilon(\vec{r}) = \frac{d\vec{u}(\vec{r})}{dr}$.

Напряженное состояние материала вследствие разогрева наночастицы определялось методом Эшелби введением соответствующей деформационной матрицы, и формула для давления P будет иметь следующий вид:

$$P(r, t) = \Phi_1(t) \cdot \Phi_2(r, t), \quad (9)$$

где $\Phi_1(t) = \frac{2}{9} \frac{\alpha E (1-2\nu)(1+\nu) K_1}{\xi(t)(1+\nu)^2 [3(1-\nu)K - (1+\nu)(K_1 - K)]}$, K_1 – модуль сжатия наночастицы, $\Phi_2(r, t) = \left(\frac{2}{r^2} + 2\xi(t) e^{-\xi(t)r^2} - \frac{2}{r^2} \int_0^r e^{-\xi(t)r'^2} dr' + \frac{2(1-2\nu)}{(1+\nu)R^2} \int_0^R e^{-\xi(t)r'^2} - \frac{2(1-2\nu)}{(1+\nu)R^2} e^{-\xi(t)r^2} \right)$, $\xi(t) = \frac{1}{4Dt}$.

На рис. 2 представлен профиль давления в матрице в результате единичного акта взаимодействия ускоренного иона с материалом.

Такой уровень давления, очевидно, будет приводить к локальному разрушению материала. Здесь возникает также проблема, связанная с размерными эффектами в наночастицах. В связи с уменьшением координационного числа и энергии связи при уменьшении размеров наночастицы будет также уменьшаться и температура ее плавления:

$$T_{пл}(R) = T_{пл}^0 (1 - k_2 e^{-k_4 R}), \quad (10)$$

Это в свою очередь будет приводить к ухудшению жаропрочных свойств наноструктурированных материалов.

Заключение

Наноструктурирование материалов позволяет

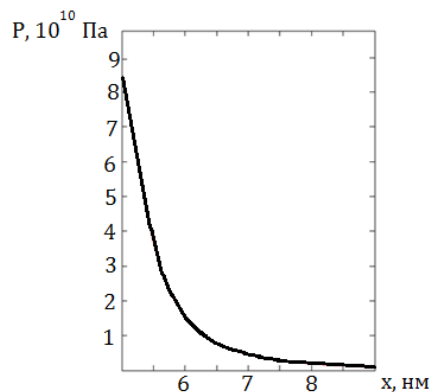


Рис. 2. Пространственный профиль упругих напряжений в окрестности наночастицы размером 5 нм

управлять как упругими свойствами, так и их радиационной стойкостью. Однако сильное различие упругих характеристик матрицы и нановключений может приводить при нагреве к разрушению материала. Кроме того, размерные эффекты обусловят преждевременное плавление наночастиц.

Список литературы

1. Харрисон У. Теория твердого тела. М.: Мир, 1972. 618 с.
2. Углов В.В., Квасов Н.Т., Ремнев Г.Е., Поликарпов Р.В. О физической природе пороговой энергии смещения в радиационной физике // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2015. №11. С. 96-103.
3. Uglov V.V., Doroshevich I.L., Kvasov N.T., Remnev G.E., Shymanski V.I. On physical properties of nanoparticles: size effect and scale of nanoobjects // Phys. Status Solidi. 2016. P. 1-5.
4. Кристенсен Р. Введение в механику композитов. М.: Мир, 1982. 334 с.
5. Зеленский В.Ф., Неклюдов И.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и набухание металлов. Киев: Научкова думка, 1988. 236 с.

PHYSICO-MECHANICAL PROPERTIES OF NANOSTRUCTURED MATERIALS AND THEIR RADIATION RESISTANCE

V.V. Uglov, N.T. Kvasov, I.V. Safronov, N.D. Komarov

Belarusian State University, 4 Nezavisimosti ave., 220030 Minsk, Belarus, Uglov@bsu.by

One of the ways to improve the strength properties, the temperature and radiation resistance of materials is the synthesis of nanocomposite systems, which in the simplest case are a matrix structured by nanoscale particles. The change in physical, mechanical, magnetic, thermophysical and other properties of nanoparticles can be related to deformation of the material due to surface tension, reduction of the coordination number in the near-surface layer, change in its symmetry group, restructuring the architecture of electronic shells, changing binding energy. A significant influence on the physical properties of nanoobjects can also have various structural defects. The dependence of Young's modulus of elasticity on the radius of a nanoparticle was determined in treatise [3]. In order to determine the Young's modulus of elasticity of a nanostructured material, the resulting formula for $E(R)$ must be transformed into a power law $E(R) = A \left(\frac{R}{R_0}\right)^m$. Similar to the Hall-Petch law. Moreover, A and m are defined on the interval $0 \leq R \leq R_0$ (where R_0 is the boundary value of R , when exceeded, the Young's modulus is equal to the value of E_0 for the bulk material). Then, according to [3], we can write: $E_{ns} = \frac{E_1(2E_2 + G_1) + (E_1 - E_2)(2E_1 + G_1)^{m_2}}{2E_2 + G_1}$, where E_1 is the Young's modulus of the matrix, G_1 is the shear modulus of the matrix material, $E_2 \equiv E(R)$, n_s is the volume fraction of the nanoparticles, E_{ns} is the Young's modulus of the nanostructured material. During the experiments it was shown that nanostructured materials have a higher radiation resistance. This is associated primarily with the generating capacity of nanoscale inclusions. Let the rate of generation of elementary defects in a unit volume (vacancies (v) and interstitial atoms (i)) be equal to I when the nanostructured material is irradiated, for example, by neutrons. Then the rate of change in the concentration of v and i in the volume can be described by the following equation: $\frac{\partial N_j}{\partial t} = I - \mu_j D_j N_j - \frac{\alpha}{N_0} N_i N_v + D_j \Delta N_j - \frac{\sigma_j N_j}{k_B T} F_j - \frac{\sigma_j N_j}{k_B T} \nabla F_j$. An analysis of this equation shows that, as in the case of simple materials, the nanostructured systems also have a correlation between physico-mechanical and radiation properties. However, the correlation mechanisms are different in both cases.