

ФОРМИРОВАНИЕ ГАЗОВОЙ ПОРИСТОСТИ В МЕТАЛЛАХ, ИМПЛАНТИРОВАННЫХ ГЕЛИЕМ

Г.З. Ганеев, Х.Г. Кадыров, С.Б. Кислицин

Институт ядерной физики Национального ядерного центра республики Казахстан, 480082, Казахстан, г. Алма-Ата, ул. Ибрагимова 1, 7(3272)546467, 7(3272)546517, e-mail: skislitsin@inp.kz

В работе проведены теоретические исследования формирования газовой пористости и набухания в двухслойном материале имплантированном гелием. Теоретическая модель учитывает два механизма коалесценции пор: за счет броуновского движения и дрейфовой диффузии в поле градиента напряжений от имплантированного гелия. Расчеты выполненные для системы железо – бериллий показывают, что для системы железо – бериллиевое покрытие увеличивается концентрация пор большего радиуса и увеличивается величина набухания по сравнению с чистым железом.

Введение

Известно, что имплантация инертных газов, например, гелия, в металлические материалы приводит к формированию в них специфической области, насыщенной гелием. Распределение гелия в этой области (область страгглинга) имеет следующий вид: концентрация гелия постепенно возрастает, достигает максимума на глубине соответствующей проективному пробегу альфа-частиц и далее уменьшается до нуля. Термическая обработка насыщенного гелием металлического материала приводит к трансформации первоначального распределения гелия и формированию газовых пор. Установлено, что при температурах $\sim (0.6-0.7 T_{пл})$, практически весь гелий осаждается в поры [1]. Изучению формирования газовой пористости в металлах и сплавах с помощью как экспериментальных, так и теоретических методов уделялось большое внимание [1,4]. Но, как правило, эти работы были посвящены исследованиям чистых металлов и сплавов. В данной работе теоретически исследуется процесс формирования газовой пористости в двухслойном материале - т.е. развитие газовой пористости исследуется на границе контакта двух материалов.

Модель формирования газовых пор

Целью данной работы является сравнительное исследование эволюции имплантированного в материал инертного газа (гелия) и величины набухания в процессе отжига в чистом материале (на примере альфа-железа) и двухслойном материале (на примере альфа-железа с бериллиевым покрытием). Основные положения модели следующие. Концентрация альфа-частиц в области страгглинга описывается гауссовым распределением. В начальный момент времени, т.е. непосредственно после облучения, весь имплантированный гелий представляет собой единичные атомы в положении внедрения. Пора минимального размера содержит один атом гелия, т.е. распределение гелия в материале после облучения представляет собой гауссово распределение газовых пор минимального размера. Полагается, что кроме атома гелия пора минимального размера содержит также две вакансии, т.е. объем поры минимального размера

равен $2^* \Omega$, где Ω - атомный объем. Это обеспечивает начальное набухание материала за счет имплантации гелия и появление в нем напряжений. В начальный момент времени коалесценция пор обусловлена броуновским движением. По мере роста среднего размера пузырьков происходит набухание материала. Это набухание приводит к появлению гидростатического сжатия, которое обуславливает дрейфовое движение пор к центру распределения. Начинает работать дополнительный механизм коалесценции, обусловленный зависимостью скоростей перемещения пор от размеров, тогда как коалесценция, обусловленная броуновским движением резко уменьшается с ростом среднего размера поры. Учет многослойности материала выполнен следующим образом (см. рис.1) полагается, что область страгглинга захватывает как область покрытия, так и подложки. Подложка и покрытие имеют разные атомные объемы, различные упругие свойства и разные коэффициенты диффузии.

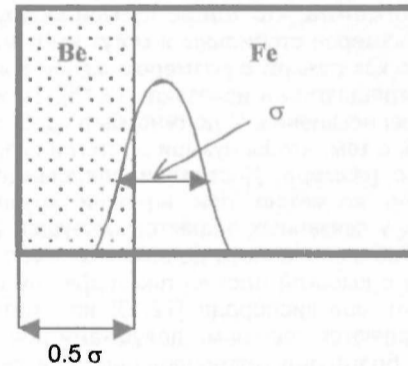


Рис. 1. Модель многослойного материала. Толщина нанесенного на материал покрытия = 0.5σ , где σ - дисперсия начального распределения имплантированного гелия

Рассмотрим коалесценцию газовых пор в области страгглинга при отжиге облученного гелием образца. Предполагается, что в процессе коалесценции число атомов гелия сохраняется и вследствие этого перемещение пузырька

обусловлено поверхностной диффузией. В сферической системе координат радиальная скорость перемещения элемента поверхности v_r определится выражением [1]

$$v_r = \frac{\Omega C_s D_s}{kT} (\nabla \cdot f_\theta)_s, \quad (1)$$

где Ω - атомный объем, D_s - коэффициент поверхностной диффузии, C_s - поверхностная плотность атомов, k , T - постоянная Больцмана и температура, f_θ - полярная компонента силы f , обусловленной градиентом химического потенциала. В сферической системе координат (1) примет вид:

$$v_r = \frac{2\Omega C_s D_s}{RkT} f \cos\theta, \quad (2)$$

где R - радиус сферической поры, заполненной газом.

В соответствии с (2) скорость движения поры как целого определится выражением:

$$v_b = \frac{2\Omega C_s D_s}{RkT} f, \quad (3)$$

В соответствии с формулой Нернста-Эйнштейна скорость v_b запишется в виде:

$$v_b = \frac{D_b}{kT} F = \frac{D_b}{kT} (V_b f), \quad (4)$$

где D_b - коэффициент диффузии включения (пузырька) как целого, v_b - объем поры. С учетом (3), (4), имеем

$$D_b = 3\Omega^2 C_s D_s / 2\pi R^4, \quad (5)$$

Скорость образования пузырьков радиуса R запишем в виде:

$$n(R, R_1, R_2) = \sigma(R_1, R_2) \delta(R^2 - R_1^2 - R_2^2) \quad (6)$$

Здесь σ представляет собой сумму двух составляющих $\sigma = \sigma_m + \sigma_b$. Первое слагаемое обусловлено дрейфовой миграцией в поле напряжений:

$$\sigma_m(R_1, R_2) = \pi(R_1 + R_2)^2 |v_{b1} - v_{b2}|, \quad (7)$$

второе - броуновской коалесценцией [2]:

$$\sigma_b = 4\pi(D_{b1} + D_{b2})(R_1 + R_2) / (1 - (R_1 + R_2) / (\pi(D_{b1} + D_{b2})t))^{1/2} \quad (8)$$

Второй сомножитель в (6) обеспечивает сохранением атомов газа в процессе столкновения пор радиусов R_1 и R_2 .

Изменение концентрации пор радиуса R запишется в виде:

$$dC(R, t) = [1/2 \int dR_1 \int dR_2 n(R_1, R_2) C(R_1) C(R_2) - C(R) \int dR_1 \sigma(R_1, R) C(R_1)] dt - \nabla \cdot (C v_b) \quad (9)$$

где $n(R_1, R_2)$, $\sigma(R_1, R)$ - сумма обоих механизмов коалесценции.

Радиус поры определится числом атомов газа, уравновешивающих давление Лапласа:

$$R^2 = (3kT / 8\pi\gamma) n, \quad (10)$$

где n - число атомов газа в поре, γ - плотность поверхностной энергии.

Нормируем концентрацию пор радиуса R , содержащих n атомов на общее число атомов газа (ионов гелия) в единице объема m и переходя к переменной n , получим:

$$f(n, t) = \frac{C(R, t)}{m} \quad (11)$$

Начальное условие, т.е. после имплантации гелия:

$$f(1, 0) = 1, \quad (12)$$

Результаты расчетов и обсуждение

Расчеты формирования газовых пор и распухания выполнены для случая облучения железа и железа с бериллиевым покрытием альфа-частицами с энергией 400 кэВ (энергии характерные для ускорителей ИЯФ НЯЦ РК «Везувий» и УКП - 2 -1). Для альфа-частиц с такой энергией пробег составляет 0.8 мкм, страгглинг $\Delta^{1/2} = 0.5$ мкм, доза облучения $\sim 10^{17}$ см⁻². Предполагается, что распределение концентрации альфа-частиц соответствует гауссиану:

$$C = C_0 \exp(-z^2 / 2\Delta), \quad (13)$$

Относительное распухание γ

$$\gamma(z) = \int mf^2(n) v_n dn, \quad (14)$$

где v_n - объем поры, содержащей n атомов газа. Зависимость относительного распухания от z запишем в виде:

$$\gamma = \gamma_0 \exp(-z^2 / 2\Delta_\gamma), \quad (15)$$

Гидростатическое давление, вызванное распуханием определяется выражением [3]:

$$\sigma_H = -(4/9)\mu(1+\nu)/(1-\nu)\gamma(z) \quad (16)$$

где μ - модуль сдвига, ν - коэффициент Пуассона. Тогда сила f , обуславливающая поверхностную диффузию, определится выражением:

$$f = -\nabla\mu, \quad (17)$$

где $\mu = \Omega\sigma_H$.

Уравнение (9) решалось методом конечных разностей. Интервал временного шага за один шаг итерации определялся изменением концентрации $< 5 \cdot 10^{-2} C_{\max}$. Предполагалось, что минимальный объем поры, содержащей один атом гелия равен двум объемам атома матрицы. Т.е. профиль относительного распухания в начальный момент совпадал с профилем имплантированных ионов.

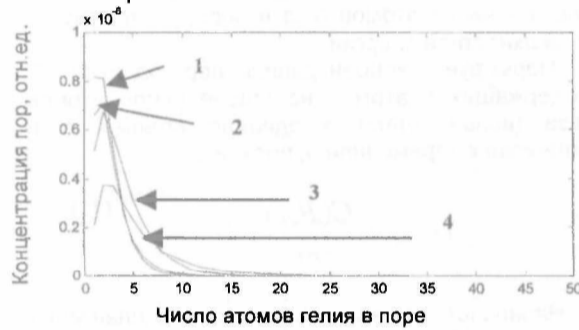


Рис.2. Распределение пор по размерам в зависимости от времени отжига, Кривые 1, 2 – 0.1ч., 3 и 4 – 1ч. Температура отжига 600 К

В процессе расчета учитывалось изменение гидростатического давления обусловленного изменением распределения пор по размерам. Неоднородность матрицы (подложка, покрытие)

учитывалась различием упругих постоянных, коэффициентов диффузии и атомных объемов.

На рис. 2 приведены результаты расчетов распределения пор по размерам в чистом железе и в железе с бериллиевым покрытием (см. рис.1) для температуры отжига 600 К. Кривые 1 и 4 соответствуют системе железо – бериллий, 2 и 3 – чистому железу. Видно, что наличие слоя бериллия приводит к увеличению концентрации пор большего размера и уменьшению общего количества пор. Величина распухания в таком двухслойном материале увеличивается по сравнению с чистым железом. Увеличение среднего размера пор в железе с бериллиевым покрытием объясняется большей подвижностью гелиевых пор в бериллии. Увеличение величины распухания обусловлено тем фактом, что гелиевые поры большего размера дают больший вклад в распухание, чем поры меньшего размера, при одной и той же концентрации имплантированного гелия.

Заключение

Сравнительные расчеты формирования газовой пористости в рамках модели, учитывающей механизмы коалесценции пор за счет броуновского движения и дрейфовой диффузии в поле градиента напряжений от имплантированного гелия, показывают, что в системе железо – бериллиевое покрытие увеличивается концентрация пор большего радиуса и увеличивается величина распухания по сравнению с чистым железом.

Список литературы

1. Walker G.K. // J.Nucl.Mater. - 1976 - V. 61 - P.171.
2. Гегузин Я.Е., Кривоглаз М.А. Движение макроскопических включений в твердых телах. - М., «Металлургия», 1971, 344 с.
3. Chandrasekhar S. Stochastic problems in physics and astronomy. - Rev.Mod.Phys. - 1943. - V.15. - P.1.
4. Hall B.O. // J.Nucl.Mater. - 1976. - V.63. - P.265.

GAS BUBBLE FORMATION IN METALS IMPLANTED BY ALPHA-PARTICLES

G.Z. Ganeev, H.G. Kadyrov, S.B. Kislitsin

Institute of Nuclear Physics of National Nuclear Center of Republic of Kazakhstan, 480082, Kazakhstan, Almaty, Ibragimov St., 1, 7(3272)546467, 7(3272)546517, e-mail: skislitsin@inp.kz

The theoretical investigations of gas bubble formation and gas swelling in two-layer material preliminarily implanted by helium are presented. Theoretical model includes two mechanisms of gas bubble coalescence: conjunction of bubbles due to random (Brownian) motion and drift diffusion in the stress field from implanted helium. The calculations made for the iron - beryllium system shows that for iron with beryllium coating the concentration of gas bubbles of greater radius and the value of gas swelling increase in compare with pure iron.