

辐照材料的肿胀理论 (I)*

中 性 尾 闾

朱 慧 珑

北京师范大学低能核物理研究所

1988 年 11 月 7 日收到

本文从反应扩散方程出发,研究在辐照条件下,微洞和位错(无应力场)周围点缺陷的分布情况.对含有点缺陷复合项的定态的反应扩散方程,给出了一种近似求解的方法并分别得到了微洞和位错吸收点缺陷的汇强度.从所得结果与前人略去复合项的结果比较可知,微洞较大时,复合项对汇强度的影响变得重要;对于位错,当点缺陷产生率较大时,考虑了复合项后所得的汇强度可达前人结果的 1.5 倍以上.

一、引 言

辐照材料的肿胀问题,是辐照损伤中的基本问题之一.核反应堆材料长期工作在辐照条件下,辐照产生的过剩的点缺陷会成团.空位成团后可形成微洞(void),微洞会不断长大,进而引起堆材料的力学和几何性能的变化.这些变化直接影响到堆设计,所以研究辐照材料的肿胀有着重要的实用价值.

自 50 年代以来,许多科学工作者对上述肿胀问题从实验和理论两方面进行了大量的研究.较系统的理论研究始于 70 年代初.当时,Brailsford 和 Bullough^[1]等人^[1]提出一套用反应速率理论计算肿胀的公式.此方法比较简捷,易于计算,现已被广泛采用^[2-4].BB 理论提出后,许多文章从各种不同的角度对它进行了进一步的研究^[5-11].但至今仍有一些问题没有得到较好的解决.例如理论算出的偏吸率比为了拟合实验而代入肿胀公式中的偏吸率大一个数量级^[7];理论算出的复合系数比拟合实验所用值大一个数量级^[12,13].

研究肿胀问题的关键,一是求出中性尾闾(不考虑应力场)的汇强度,即单位时间内流入微洞或位错(不考虑应力场)中的点缺陷的个数;二是求出考虑位错应力场后,位错对不同点缺陷的偏吸的大小,进而求出偏吸率.

本文的主要目的是从反应扩散方程出发,在同时考虑点缺陷和复合项的作用下(前人理论往往全部略去这两项或略去复合项),给出中性尾闾的汇强度.所得结果表明,对于微洞而言,前人略去复合项的近似处理,当微洞较小时是合理的,但当微洞较大时,会引起一定的误差.对于位错来说,当点缺陷的产生率较大时,我们得到的汇强度比前人的结果

* 国家教委博士点基金资助的课题.

大一倍以上。由此可见,同时考虑点缺陷产生率和复合项的作用,对于求算汇强度来说是很重要的。

关于有位错应力场存在时的汇强度公式将在另文中给出。

二、微洞的汇强度

假设微洞和位错已形成,并认为微洞一般出现在位错网之中部(因此处空位浓度最大,空位易成团),见图1。另外,假设空位和间隙原子的分布在微洞和位错周围分别具有球和柱对称性。严格地讲,由于实际位错周围有应力场存在,应力场与点缺陷的相互作用使点缺陷的分布不具有柱对称性。考虑应力场时的点缺陷分布将在另文中给出,但由于在计算中要用到本文结果,所以求解无应力场条件下位错周围点缺陷的分布函数是必要的。

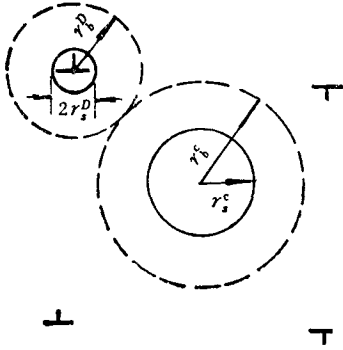


图1 微洞处在位错网中的示意图

r_p^D 和 r_s^C 分别表示位错核和微洞的半径, r_p^D 和 r_s^C 分别表示位错和微洞的俘获柱体和球体的半径

由上面的讨论可得一个位于 r 面上的格点出现空位的几率 $p_v(r, t)$ 和一个位于 r 面上的间隙位置出现间隙原子的几率 $p_i(r, t)$ 所满足的方程

$$\frac{\partial p_v^C}{\partial t} = \frac{D_v}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial p_v^C}{\partial r} \right) + K - \alpha p_v^C p_i^C \quad r_i^C < r \leq r_s^C, \quad (1)$$

$$\frac{\partial p_i^C}{\partial t} = \frac{D_i}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial p_i^C}{\partial r} \right) + K - \alpha p_v^C p_i^C \quad r_i^C < r \leq r_s^C, \quad (2)$$

$$\frac{\partial p_v^D}{\partial t} = \frac{D_v}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p_v^D}{\partial r} \right) + K - \alpha p_v^D p_i^D \quad r_i^D < r \leq r_p^D, \quad (3)$$

$$\frac{\partial p_i^D}{\partial t} = \frac{D_i}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial p_i^D}{\partial r} \right) + K - \alpha p_v^D p_i^D \quad r_i^D < r \leq r_p^D, \quad (4)$$

$$p_v^C|_{t=0} = p_{v_0}^C, \quad p_i^C|_{t=0} = p_{i_0}^C, \quad p_v^D|_{t=0} = p_{v_0}^D, \quad p_i^D|_{t=0} = p_{i_0}^D, \quad (5)$$

$$p_v^C(r, t)|_{r=r_s^C} = p_{v_0}^C, \quad p_i^C(r, t)|_{r=r_s^C} = 0, \quad (6)$$

$$p_v^D(r, t)|_{r=r_p^D} = p_{v_0}^D, \quad p_i^D|_{r=r_p^D} = 0, \quad (7)$$

$$p_v^C|_{r=r_s^C} = p_v^D|_{r=r_p^D}, \quad p_i^C|_{r=r_s^C} = p_i^D|_{r=r_p^D}, \quad (8)$$

式中 C 和 D 分别对应微洞和位错; V 和 I 表示空位和间隙原子; K 为点缺陷产生率, 注意这里略去了由于热运动而产生的 Frenkel 对, 对点缺陷浓度的影响, 因为它比由辐照所产生的点缺陷的数目小得多, 微洞和位错线热发射所产生的空位由边界条件(6)和(7)式给出; r_s^C 和 r_p^D 表示微洞和位错核的半径; r_i^C 和 r_i^D 由下面(9)式给出; $p_{v_0}^C$, $p_{i_0}^C$, $p_{v_0}^D$ 和 $p_{i_0}^D$ 表示空位和间隙原子在相应区域内的初始分布; $p_{v_0}^C$ 和 $p_{v_0}^D$ 分别表示微洞表面和位错线上的空位浓度, 一般认为处在热平衡态, 对于 $p_{v_0}^C$ 需考虑表面能的贡献; α 为空位与间隙原

子的复合率; $D_{V(1)}$ 表示空位(间隙原子)的扩散系数.

$$\frac{4\pi}{3} r_b^c \rho_c = \frac{1}{2}, \quad \pi r_b^D \rho_D = \frac{1}{2}. \quad (9)$$

上式中 ρ_c 和 ρ_D 分别为单位体积内微洞的个数和单位面积上位错线的根数. r_b^c 和 r_b^D 的选取有一定的任意性, 但因它们在一定范围内变化时, 对所要求的结果影响不大, 所以令它们满足(9)式. 出现 1/2 是认为微洞和位错对点缺陷的俘获体积各为样品体积的一半.

微洞和位错生长所用去的空位和间隙原子数相对于辐照所产生的空位和间隙原子数而言, 只是很小一部分. 这可估算如下:

一般来讲, 损伤剂量为 20dPa 时, 材料肿胀的最大值为 4% 左右^[14,16,17]. 考虑到到达微洞表面的有些空位 ($< \frac{4}{5}$) 与同时到达的间隙原子相复合的效应后, 可得流入微洞(或位错)的点缺陷的数目与辐照产生的点缺陷的数目之比

$$\frac{5\Delta VN}{20VN} = 1\%, \quad (10)$$

式中 N 为单位体积内原子的个数; V 为样品体积; ΔV 为辐照引起的样品体积的变化. 由(10)式可知, 流入微洞或位错的点缺陷一般不到辐照产生的点缺陷的 1%. 这与文献[15]的观点是一致的.

由上面讨论可知, 微洞和位错的生长所引起的点缺陷浓度的变化相对变化前的浓度是很小的, 故在此对方程(1)至(4)做准静态近似, 有

$$\frac{D_V}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dp_V^c}{dr} \right) = -K + \alpha p_V^c p_I^c \quad r_i^c < r \leq r_b^c, \quad (11)$$

$$\frac{D_I}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dp_I^c}{dr} \right) = -K + \alpha p_V^c p_I^c \quad r_i^c < r \leq r_b^c, \quad (12)$$

$$\frac{D_V}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dp_V^D}{dr} \right) = -K + \alpha p_V^D p_I^D \quad r_i^D < r \leq r_b^D, \quad (13)$$

$$\frac{D_I}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dp_I^D}{dr} \right) = -K + \alpha p_V^D p_I^D \quad r_i^D < r \leq r_b^D. \quad (14)$$

边界条件由(6)至(8)式给出.

由(11)和(12)式, 得

$$\frac{d}{dr} \left\{ r^2 \frac{d}{dr} [D_V p_V^c - D_I p_I^c] \right\} = 0 \quad (15)$$

即

$$D_V p_V^c - D_I p_I^c = A + B/r. \quad (16)$$

由于这里不考虑位错应力场对不同类型点缺陷的吸引作用, 所以微洞不可能生长^[3], 也即

$$\left. \frac{dp_V^c}{dr} \right|_{r=r_i^c} = \left. \frac{dp_I^c}{dr} \right|_{r=r_i^c}. \quad (17)$$

利用边界条件(6)及(16)、(17)式易得

$$D_V p_V^c - D_I p_I^c = D_V p_{V_i}^c \quad (18)$$

由于流入微洞或位错的点缺陷只占辐照产生的点缺陷中的很小一部分 ($< 1\%$). 所以绝大部分的空位和间隙原子是相互复合掉, 在远离微洞和位错的地方更是如此. 因此由(11)或(12)式得

$$K - \alpha p_V^c(r_b^c) p_I^c(r_b^c) \approx 0. \quad (19)$$

由(18)和(19)两式, 得

$$p_V^c(r_b^c) \approx \sqrt{\frac{KD_I}{\alpha D_V}}, \quad (20)$$

$$p_I^c(r_b^c) \approx \sqrt{\frac{KD_V}{\alpha D_I}}. \quad (21)$$

得到以上两式时, 用到

$$p_V^c(r_b^c) \gg p_{V_i}^c. \quad (22)$$

在求解(11)和(12)式(或(13)和(14)式)的过程中, 以前的理论认为存在一个区域: $r_i^c \leq r \leq R$, $r_i^c \ll R$, 在这一区域内有复合项^[1,13] $\alpha p_V^c p_I^c \equiv 0$ 或 $K - \alpha p_V^c p_I^c \equiv 0$, 而在 $r_b^c \geq r > R$ 的区域内 p_V^c 和 p_I^c 取各自的平均值. 这一近似对于微洞较小时是合理的. 但当微洞较大时, 误差会增大^[9]. 另外, 后面的计算结果表明对位错来讲, 以前的理论误差很大.

由于考虑了复合项, 就必须求解非线性方程(11)和(12). 我们尝试求下列分区近似解:

$$p_{V_1}^c(r) = C_{3VC} r^3 + C_{2VC} r^2 + C_{0VC} + C_{-1VC} r^{-1} \quad r_i^c \leq r \leq r', \quad (23)$$

$$p_{V_2}^c(r) = C'_{0VC} + C'_{-1VC} r^{-1} + C'_{-2VC} r^{-2} + C'_{-3VC} r^{-3} \quad r' \leq r \leq r_b^c, \quad (24)$$

$$p_V^c(r) = \begin{cases} p_{V_1}^c(r) & r_i^c \leq r \leq r', \\ p_{V_2}^c(r) & r' \leq r \leq r_b^c. \end{cases} \quad (25)$$

对于 $p_{V_1}^c$ 和 $p_{V_2}^c$ 要求在 $r = r'$ 处函数及其一阶导数连续.

求出 $p_V^c(r)$ 后, $p_I^c(r)$ 由(18)式给出.

在(23)式中之所以取 r^{-1} , r^0 和 r^2 作为基函数, 是因为当 $C_{2VC} = -K/(6D_V)$ 时, 这三项是 $\alpha p_I^c p_V^c \equiv 0$ 时方程(11)的解. 另一个基函数取为 r^3 , 是因为 C_{3VC} 当 $\alpha \rightarrow 0$ 时, 它趋于零. 这样(23)式当 $\alpha \rightarrow 0$ 时, 与令 $\alpha p_I^c p_V^c \equiv 0$ 的解趋向一致. 这里之所以以 $\alpha \rightarrow 0$ 时, (23)式可趋近 $\alpha p_V^c p_I^c \equiv 0$ 的解作为选择基函数的一种手段, 原因是在 $r \rightarrow r_i^c$ 时, $\alpha p_V^c p_I^c$ 越来越小, 最后趋于零. 并且可以合理地选取 r' , 使 $\alpha p_I^c p_V^c / K$ 在 $r_i^c < r < r'$ 区域内较小.

(24)式中的 C'_{0VC} 和 $C'_{-1VC} r^{-1}$ 是 $K - \alpha p_V^c p_I^c \equiv 0$ 时, 方程(11)的解. 由(19)式可知, 当 $r \rightarrow r_b^c$ 时, (24)式中的其它项的贡献应趋于零, 所以在(24)式中引入两衰减项 r^{-2} 和 r^{-3} . 这里以 $K - \alpha p_V^c p_I^c \rightarrow 0$ 作为选取基函数的参考, 是因当 $r \rightarrow r_b^c$ 时, 它趋于零的缘故. 并且可以合理地选取 r' , 使 $(K - \alpha p_V^c p_I^c) / K$ 在 $r' < r < r_b^c$ 的区域内较小.

为了确定(23)和(24)式中的系数, 还要求它们满足下列方程:

$$-\frac{D_V}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} p_{V_1}^C(r) \right) \Big|_{r=r'} = K - \alpha p_{V_1}^C(r') p_1^C(r'), \quad (26)$$

$$-\frac{D_V}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} p_{V_2}^C(r) \right) \Big|_{r=r'} = K - \alpha p_{V_1}^C(r') p_1^C(r'), \quad (27)$$

$$-\frac{D_V}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} p_{V_1}^C(r) \right) \Big|_{r=r_i^C} = K - \alpha p_{V_1}^C(r_i^C) p_1^C(r_i^C), \quad (28)$$

$$-\frac{D_V}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} p_{V_2}^C(r) \right) \Big|_{r=r_b^C} = K - \alpha p_{V_1}^C(r_b^C) p_1^C(r_b^C). \quad (29)$$

利用 p_V^C 的两个边界条件 (6) 和 (8) 式。在 $r = r'$ 处的两个连接条件和方程 (26) 至 (29), 可定出 (23) 和 (24) 两式中的八个待定常数。所得的解既满足边界条件, 又在 $r = r_i^C, r'$ 和 r_b^C 附近满足方程 (11)。如果合理地选取 r' , 就可得到较好的近似解。

在 r_i^C, r' 和 r_b^C 点上, 对复合项分别做如下选择:

$$\alpha p_V^C p_1^C = \begin{cases} 0 & r = r_i^C, \\ K/2 & r = r', \\ K & r = r_b^C. \end{cases} \quad (30)$$

当 $r = r_i^C$ 时, 认为复合项为零。这可直接由 (6) 式看出。当 $r = r_b^C$ 时, 复合项的取值易从 (19) 式得到。

r' 的选取有一定的任意性。为了得到较好的近似, 需兼顾 $\alpha p_V^C p_1^C / K$ 在 $r_i^C < r < r'$ 区域内较小, 而在 $r' < r < r_b^C$ 区域内 $(K - \alpha p_V^C p_1^C) / K$ 较小, 才能得到较好的近似之特点, 我们做满足 (30) 式的选择。

用上述方法求出的 p_V^C 的诸系数是 r' 的函数。只有确定 r' 之后, 诸系数才能真正确定。由 (19) 和 (30) 两式可联合解出

$$p_V^C(r') = \sqrt{\frac{KD_1}{2\alpha D_V}}. \quad (31)$$

由上面的讨论可看出, 一旦选定了 $\alpha p_V^C p_1^C$ 在 r' 处的值 ($< K$), r' 就被唯一地确定, 不再具有任意性。

在上面讨论的基础上, 易得 (23) 和 (24) 两式中诸系数的表达式

$$C_{-1VC} = C_{3VC} r'^4 + \frac{C_{2VC}}{2} r'^3 + C'_{-1VC} + \frac{r'}{2} (C'_{0VC} - C_{0VC}) + \frac{3C'_{-2VC}}{2r'} + \frac{2C'_{-3VC}}{r'^2}, \quad (32)$$

$$C_{0VC} = p_{V_1}^C - C_{3VC} r_i^{C^2} - C_{2VC} r_i^{C^2} - \frac{1}{r_i^C} \left\{ C_{3VC} r'^4 + \frac{C_{2VC}}{2} r'^3 + \frac{r'}{2} (C'_{0VC} - C_{0VC}) + C'_{-1VC} + \frac{3C'_{-2VC}}{2r'} + \frac{2C'_{-3VC}}{r'^2} \right\}, \quad (33)$$

$$C_{2VC} = -\frac{1}{6D_V} \left(K + \frac{K}{2} \cdot \frac{r_i^C}{r' - r_i^C} \right), \quad (34)$$

$$C_{3VC} = \frac{K}{24D_V} \cdot \frac{1}{r' - r_i^C}, \quad (35)$$

$$C'_{-3VC} = -\frac{K}{12D_V} \cdot \frac{r_b^c r''}{r_b^c - r'}, \quad (36)$$

$$C'_{-2VC} = -\frac{3C'_{-3VC}}{r_b^c}, \quad (37)$$

$$C'_{-1VC} = -\frac{2C'_{-2VC}}{r_b^c} - \frac{3C'_{-3VC}}{r_b^2}, \quad (38)$$

$$C'_{0VC} = C_{0VC} + \frac{1}{r''} \left\{ C'_{-2VC} + \frac{2C'_{-3VC}}{r'} + 3C_{2VC}r'' + 4C_{3VC}r''^2 \right\}. \quad (39)$$

从(36)式易得 C'_{-2VC} 和 C'_{-1VC} 的具体表达式。然后,从(39)式可求出 $(C'_{0VC} - C_{0VC})$ (利用(34)和(35)式,代入(32)和(33)式后可得到 C_{-1VC} 和 C_{0VC})。最后再利用(39)式可得 C'_{0VC} 的具体表达式。这样八个待定系数全部作为 r' 的函数确定下来。如上所述, r' 可由(31)式自洽地解出。

有了上面的结果,就可讨论点缺陷的复合效应对微洞周围点缺陷浓度的影响。微洞的汇强度,可由下式给出:

$$S_C = 4\pi r_i^c D_V \left. \frac{d\rho_{V1}^c}{dr} \right|_{r=r_i^c}$$

由 BB 理论^[3]微洞的汇强度可表示成

$$S_C^{BB} = 4\pi r_i^c D_V (\bar{p}_V - pV_i^c),$$

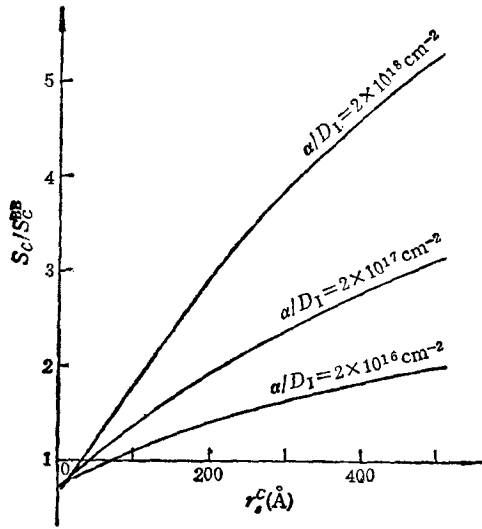


图2 S_C/S_C^{BB} 随比值 α/D_1 和 r_i^c 的变化曲线

计算参数: $D_{V0} = 8 \times 10^{-3} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$, $E_V^c = 1.3 \text{eV}$, $E_V^i = 2.3 \text{eV}$, $\gamma = 2000 \text{erg/cm}^2$, $b = 3.5 \text{\AA}$, $T = 1000^\circ\text{C}$, $\rho_C = 10^{14} \text{cm}^{-3}$, 其中 $D_V = D_{V0} \exp\left(-\frac{E_V^c}{kT}\right)$, $\rho_{V1}^c = \exp\left(-\frac{E_V^i}{kT} + \frac{2\gamma b^3}{r_i^c}\right)$

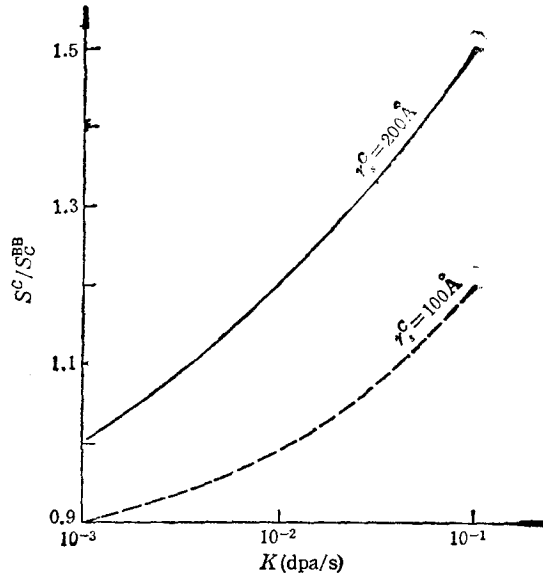


图3 S_C/S_C^{BB} 随剂量率的变化曲线

计算用的是 Nb 的参数: $D_{V0} = 8 \times 10^{-3} \text{cm}^2 \text{s}^{-1}$, $E_V^c = 1.17 \text{eV}$, $E_V^i = 2.45 \text{eV}$, $\gamma = 2.2 \times 10^3 \text{erg/cm}^2$, $T = 1010^\circ\text{C}$, $b = 3.29 \text{\AA}$, $\alpha/D_1 = 1.85 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$, $\rho_C = 10^{14} \text{cm}^{-3}$; 实线为 $r_i^c = 200 \text{\AA}$ 时的结果; 虚线为 $r_i^c = 100 \text{\AA}$ 时的结果

其中 \bar{p}_v 为空位浓度的平均值。图 2 给出 S_c/S_c^{bb} 随 r_i^c 和 α 的变化情况。可看出 r_i^c 越大, 复合项的影响也就越大。这一点与文献[9]的结果有类似之处。但应指出, 文献[9]认为当复合项的影响开始变大时, r_i^c 已基本上不再增大, 既肿胀也近饱和。根据现有的实验数据^[16], r_i^c 在肿胀峰处约为 500 Å, 从图 2 可看出当 $r_i^c > 200$ 时, 复合项的作用已变得重要, 此结论与文献[9]的观点有所不同。另外, 从物理上看 α 越大, 复合的影响也越大。这一点也可从图 2 看出。

图 3 给出 S_c/S_c^{bb} 随点缺陷产生率的变化曲线。计算中用的是 Nb 的参数。由图 3 可看出当点缺陷产生率变大时, S_c 偏离 S_c^{bb} 也变大。因此对于产生率较大的情况, 复合项是不能略去的。

前面曾讲过在 (30) 式中 $\alpha p_v^c(r') p_i^c(r')$ 的值的选取有一定的任意性。只有 S_c 对 $\alpha p_v^c(r') p_i^c(r')$ 所选取的值的变化的(在一定范围内)不敏感时, 这种“任意性”才不致引起大的误差。计算结果表明当 $\alpha p_v^c(r') p_i^c(r')$ 的取值从 $K/4$ 到 $K/2$ 变化 1 倍时, S_c 只变化 1/5 左右。由此可见所引入的“任意性”不会造成大的误差。之所以造成的误差不大, 是因为当 $\alpha p_v^c(r') p_i^c(r')$ 的取值变化时, 由于 (31) 式的限制, r' 的取值也需有相应的变化。

三、位错的汇强度

关于位错周围点缺陷浓度的分布, 应由方程 (13) 和 (14) 及相应的边界条件给出。这里仍用求解 (11) 和 (12) 式的方法来求解 (13) 和 (14) 式。

由 (13) 和 (14) 式, 得

$$D_v p_v^D - D_i p_i^D = A' + B' \ln \frac{r}{r_i^D}, \quad (40)$$

由

$$D_v \frac{d p_v^D}{d r} \Big|_{r=r_i^D} = D_i \frac{d p_i^D}{d r} \Big|_{r=r_i^D}$$

及边界条件 (7) 式, 得

$$D_v p_v^D - D_i p_i^D = D_v p_{v,0}^D. \quad (41)$$

类似 (19) 至 (21) 式, 有

$$K - \alpha p_v^D(r_b^D) p_i^D(r_b^D) \approx 0, \quad (42)$$

$$p_v^D(r_b^D) \approx \sqrt{K D_i / (\alpha D_v)}, \quad (43)$$

$$p_i^D(r_b^D) \approx \sqrt{K D_v / (\alpha D_i)}. \quad (44)$$

并令

$$p_{v1}^D(r) = C_{3VD} r^3 + C_{2VD} r^2 + C_{0VD} + C_{VD} \ln \frac{r}{r_i^D} \quad r_i^D \leq r \leq r'', \quad (45)$$

$$p_{v2}^D(r) = C'_{0VD} + C'_{VD} \ln \frac{r}{r''} + \frac{C'_{-1VD}}{r} + \frac{1}{r^2} C'_{-2VD} \quad r'' \leq r \leq r_b^D, \quad (46)$$

$$p_v^D(r) = \begin{cases} p_{v1}^D(r) & r_i^D \leq r \leq r'', \\ p_{v2}^D(r) & r'' \leq r \leq r_b^D, \end{cases} \quad (47)$$

对于 $p_{v_1}^D$ 和 $p_{v_2}^D$ 要求在 $r = r'$ 处函数及其一阶导数连续。

求出 $p_{v_1}^D(r)$ 后, $p_i^D(r)$ 可由(41)式得到。

选取基函数的原则与(23)和(24)式的完全一样,在此不再赘述。

另外,(45)和(46)两式需分别满足下列方程:

$$-\frac{D_V}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} p_{v_1}^D(r) \right) \Big|_{r=r''} = K - \alpha p_{v_1}^D(r'') p_i^D(r''), \quad (48)$$

$$-\frac{D_V}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} p_{v_2}^D(r) \right) \Big|_{r=r''} = K - \alpha p_{v_2}^D(r'') p_i^D(r''), \quad (49)$$

$$-\frac{D_V}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} p_{v_1}^D(r) \right) \Big|_{r=r_i^D} = K - \alpha p_{v_1}^D(r_i^D) p_i^D(r_i^D), \quad (50)$$

$$-\frac{D_V}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} p_{v_2}^D(r) \right) \Big|_{r=r_b^D} = K - \alpha p_{v_2}^D(r_b^D) p_i^D(r_b^D). \quad (51)$$

在 r_i^D , r'' 和 r_b^D 各处, $\alpha p_{v_1}^D p_i^D$ 有类似(30)式的关系

$$\alpha p_{v_1}^D p_i^D = \begin{cases} 0 & r = r_i^D, \\ K/2 & r = r'', \\ K & r = r_b^D \end{cases} \quad (52)$$

及

$$p_{v_1}^D(r'') \approx \sqrt{KD_I / (2\alpha D_V)}. \quad (53)$$

利用上面给出的条件,经代数运算不难得到

$$C_{0VD} = -\frac{K}{18D_V} \frac{r_i^{D^3}}{r'' - r_i^D} + \frac{K}{4D_V} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} \right] r_i^{D^3} + p_{v_1}^D, \quad (54)$$

$$C_{VD} = C'_{VD} - \frac{K}{D_V} \left(\frac{1}{2} \frac{r''^3}{r_b^D - r''} + \frac{1}{6} \frac{r''^3}{r'' - r_i^D} \right) + \frac{K r''^3}{2D_V} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} + \frac{1}{2} \frac{r_b^D}{r_b^D - r''} \right], \quad (55)$$

$$C_{2VD} = -\frac{K}{4D_V} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} \right], \quad (56)$$

$$C_{3VD} = \frac{K}{18D_V} \frac{1}{r'' - r_i^D}, \quad (57)$$

$$C'_{-1VD} = -\frac{K}{8D_V} \frac{r''^3 r_b^D}{r_b^D - r''}, \quad (58)$$

$$C'_{-1VD} = \frac{K}{2D_V} \frac{r''^3}{r_b^D - r''}, \quad (59)$$

$$C'_{VD} = \left\{ \sqrt{\frac{KD_I}{\alpha D_V}} - \frac{3K}{8D_V} \frac{r''^3}{r_b^D (r_b^D - r'')} + \frac{K}{2D_V} \frac{r''^3}{r_b^D - r''} - \frac{K}{8D_V} \frac{r''^3 r_b^D}{r_b^D - r''} + \frac{K}{18D_V} \frac{r_i^{D^3}}{r'' - r_i^D} - \frac{K r_i^{D^3}}{4D_V} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} \right] \right\}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{K}{18D_V} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} + \frac{Kr'''^2}{4D_V} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} \right] - \mathcal{K} \ln \frac{r''}{r_i^D} \Big/ \ln \frac{r_b^D}{r_i^D}, \\
& \approx \left\{ \sqrt{\frac{KD_1}{aD_V}} - \frac{Kr'''^2}{8D_V} + \frac{1}{2D_V} \frac{r'''^2}{r_b^D} - \frac{K}{18D_V} \frac{r'''^2}{r'' - r_i^D} \right. \\
& \quad \left. + \frac{K}{4D_V} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} \right] r'''^2 - \mathcal{K} \ln \frac{r''}{r_i^D} \right\} \Big/ \ln \frac{r_b^D}{r_i^D}, \quad (60)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C'_{ovD} &= C_{ovp} + C_{VD} \ln \frac{r''}{r_i^D} + \frac{K}{18D_V} \frac{r'''^2}{r'' - r_i^D} - \frac{K}{4D_V} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} \right] r'''^2 \\
& - \frac{K}{2D_V} \frac{r'''^2}{r_b^D - r''} + \frac{Kr'''^2}{8D_V} \frac{r_b^D}{r_b^D - r''} \quad (61)
\end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned}
\mathcal{K} &= \frac{K}{D} \left\{ \frac{r'''^2}{2} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{r_i^D}{r'' - r_i^D} + \frac{1}{2} \frac{r_b^D}{r_b^D - r''} \right] - \frac{1}{2} \frac{r'''^2}{r_b^D - r''} \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{6} \frac{r'''^2}{r'' - r_i^D} \right\}. \quad (62)
\end{aligned}$$

从(56)至(60)和(62)式易解出(54)、(55)和(61)式。然后,利用(53)式可定出 r'' ,进而得到 $p_v^D(r)$ 的一个近似解。

类似上节,可用上面的结果讨论点缺陷的复合效应对位错周围点缺陷浓度的影响。位错的汇强度,可由下式给出:

$$S_D = 2\pi r_i^D D_V \left. \frac{dp_{v1}^D}{dr} \right|_{r=r_i^D},$$

由 BB 理论^[1]位错的汇强度可表示成

$$S_D^{BB} = D_V (\bar{p}_V - p_{v1}^D),$$

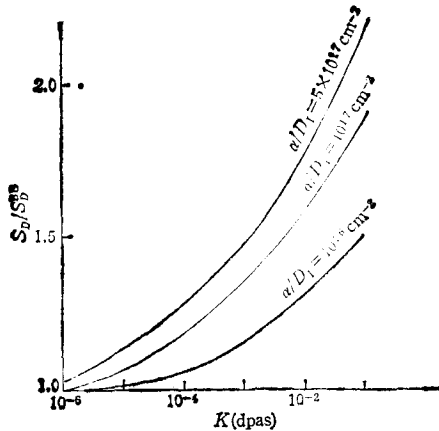


图4 S_D/S_D^{BB} 随比值 α/D_1 和剂量率 K 的变化曲线
除温度改用 500°C 和 ρ_C 改为 $\rho_D = 5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$
外,其余参数同图3

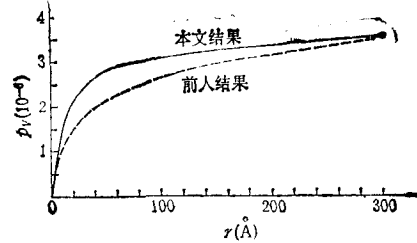


图5 本文理论和前人理论给出的位错线周围空位浓度的分布曲线
实线为本文结果;虚线为前人结果;计算参数取用
Nb的(参见图3) $\rho_D = 2 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$

式中 \bar{p}_v 为空位浓度的平均值。图 4 给出 S_D/S_D^{BB} 随不同的复合率 α 和点缺陷产生率 K 的变化情况。由图 4 可看出,当 α 和 K 较大时,点缺陷之间的复合效应,对汇强度影响很大。这和上节微洞汇强度的结果有类似之处。

图 5 给出在相同的照射条件下,在俘获体积内略去点缺陷产生率和复合项后位错周围空位浓度随 r 的变化情况(虚线)及在考虑了产生率和复合项后相应的计算结果(实线)。可见实线在位错线附近的变化速度比虚线要快。因此可以说前人给出的位错的汇强度小于实际位错的汇强度。

四、总 结

本文在同时考虑点缺陷的产生率和复合效应的条件下,得到了下列结果:

- 1) 微洞及无应力场位错周围近似的点缺陷浓度的定态分布;
- 2) 当产生率和复合率增大时,它们的作用变得重要,使汇强度比不考虑它们时可大 1 倍以上;
- 3) 对于位错汇强度而言,计及产生率和复合项在俘获体积内的效应后,汇强度比略去它们的要大;
- 4) 随着微洞半径的增大,复合效应的作用变得明显。对有些材料(例如 Nb),微洞半径还远没有增大到肿胀停止时,复合项的作用已经很大。

本文是在黄祖洽教授指导下完成的,作者表示衷心感谢。还感谢陈式刚研究员的有益讨论。

- [1] A. D. Brailsford and R. Bullough, *J. Nucl. Mater.*, 44(1972), 121.
- [2] D. Simon and E. Steinbach, *J. Nucl. Mater.*, 126(1984), 304.
- [3] R. W. Smith and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, 139(1986), 137.
- [4] C. H. Woo and W. Frank, *J. Nucl. Mater.*, 140(1986), 214.
- [5] P. T. Heald *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 66(1976), 107.
- [6] F. A. Nichols, *J. Nucl. Mater.*, 75(1978), 32.
- [7] F. A. Nichols, *Rad. Eff.*, 39(1978), 169.
- [8] N. M. Ghoniem *et al.*, *Rad. Eff.*, 41(1979), 81.
- [9] A. D. Brailsford *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 79(1979), 1.
- [10] M. R. Hayns, *J. Nucl. Mater.*, 79(1979), 323.
- [11] S. M. Murphy, *J. Nucl. Mater.*, 151(1988), 120.
- [12] D. R. Olander, *Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements*, ERDA Technical Information Center, (1976), p. 208.
- [13] 见文献[12], p. 210.
- [14] H. Takahashi *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 122 & 123(1984), 327.
- [15] 见文献[12], p. 470.
- [16] J. E. Westmoreland *et al.*, *Rad. Eff.*, 26(1975), 1.
- [17] B. A. Loomis *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 56(1975), 25.
- [18] M. H. Yoo, *Philos. Mag.*, A40(1979), 193.

A THEORY OF SWELLING DUE TO VOID GROWTH IN IRRADIATED MATERIALS (I)

NEUTRAL SINKS

ZHU HUI-LONG

Institute of low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University

(Received 7 November 1988)

ABSTRACT

The Point defect concentrations around voids and dislocations in irradiated materials were studied using reaction-diffusion equations. The equations which contained the terms involving recombination of vacancies and interstitials were solved approximately. It turned out that the effects of the recombination on the sink strengths cannot be neglected when damage dose rate and void size become large. Actually, we obtain that when void radius is greater than 200Å and damage dose rate reaches 10^{-2} dPa/s the values of void sink and dislocation sink strength exceed more than 50% of those given by previous works.