

辐照材料的肿胀理论 (II)*

偏吸率与肿胀公式

朱 慧 琬

北京师范大学低能核物理研究所

1988 年 12 月 7 日收到

本文用分区的方法,得到了在同时计及位错应力场和辐照效应的情况下,位错周围点缺陷分布函数的零级、一级和二级近似解,进而得到了偏吸率。利用所得的偏吸率及文献 [1] 的结果,给出了新的肿胀公式。新公式优于前人的理论,不仅理论本身自洽,而且与实验符合较好。

一、引 言

在文献 [1] 中,我们给出了略去位错应力场对点缺陷迁移的影响时,在辐照条件下点缺陷流入单位长度位错线的流的公式。如果考虑应力场对点缺陷迁移的影响,不同类型的点缺陷流入位错的流就会有所不同。这里称这种现象为偏吸现象。实际上没有偏吸也就没有肿胀^[2]。

关于偏吸现象的研究, Nichols^[3] 曾做过总结。至今为止,研究主要沿两个方向进行:一是略去点缺陷与位错相互作用能中的角变量,用一等效的各向同性的应力场来替代实际晶体中的应力场后,代入扩散方程求出由应力场造成的点缺陷流偏差的大小^[4]。另一途径是略去体内点缺陷产生率和复合效应后^[5,6],在考虑相互作用能中的角分量影响的条件下,给出了计算流偏差的公式。由于这两种近似距实际系统较远,同时也未明确给出近似的条件,甚至理论自身存在着自相矛盾的地方,故其结果的正确性受到怀疑^[3]。本文将根据不同的物理条件,用分区的方法分别做出近似,以期得到可靠的计算偏吸率的公式。

正确地计算在辐照条件下材料肿胀的大小,是核反应堆材料设计中的一个基本问题。因此自 50 年代以来,许多科学工作者在这方面进行了大量的研究^[7]。较系统的理论研究是由 Brailsford 和 Bullough 等人在 70 年代初提出的。BB 理论虽然经过十多年的不断完善,但仍存在一些尚待解决的问题。例如,为了与实验符合,肿胀公式中的偏吸率和复合率取值须小于理论算出的相应的值一个数量级左右^[8,9,15]。再例如,BB 理论中肿胀峰所对应的温度与微洞的表面自由能的数值大小关系很大,但为了符合实验值,对同一种材料所用的表面能的数值可相差近一倍^[10,11]。

除此之外,一般来讲肿胀随温度的变化呈一驼峰状^[12],但对有些材料,例如铌和不锈钢^[13,14],其肿胀与温度的关系呈双驼峰状。这一现象至今尚未得到解释。本文将给出一

* 国家教委博士点基金资助的课题。

↑新的计算肿胀的公式。此公式不仅在理论上可以自洽,而且能与实验符合较好。

二、尾部的偏吸率

本节用分区的方法,研究考虑位错应力场与点缺陷的相互作用后,点缺陷的迁移行为。为了得到合理的分区近似,必须知道有应力场存在时,空位和间隙原子分布的一些有关性质。因此有必要先研究下列分区前的空位和间隙原子分布满足的方程:

$$-\nabla \cdot \mathbf{J}_v = -K + \alpha p_v^D(r, \theta) p_i^D(r, \theta) \quad r_i^D < r \leq r_b^D, \quad (1)$$

$$-\nabla \cdot \mathbf{J}_i = -K + \alpha p_v^D(r, \theta) p_i^D(r, \theta), \quad r_i^D < r \leq r_b^D, \quad (2)$$

$$\mathbf{J}_v = -\nabla p_v^D(r, \theta) - D_v p_v^D(r, \theta) \nabla \phi_v(r, \theta), \quad (3)$$

$$\mathbf{J}_i = -\nabla p_i^D(r, \theta) - D_i p_i^D(r, \theta) \nabla \phi_i(r, \theta), \quad (4)$$

$$p_v^D|_{r=r_i^D} = p_v^D, \quad p_i^D|_{r=r_i^D} = 0, \quad (5)$$

$$p_v^D|_{r=r_b^D} = p_v^D, \quad p_i^D|_{r=r_b^D} = p_i^D. \quad (6)$$

上面的方程是在如图 1 所示的柱坐标系中写出的。 r 为柱的半径; θ 为极角。所用符号同文献[1]。

另外,

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta},$$

$$\phi_\xi(r, \theta) = E_\xi(r, \theta)/kT, \quad (7)$$

$$E_\xi(r, \theta) = -\frac{kTL_\xi}{r} \cos \theta,$$

$$L_\xi = \frac{(1+\nu)\mu b_\xi \Delta V_\xi}{3kT(1-\nu)\pi}, \quad (8)$$

式中 ξ 可取 V 或 I; $E_\xi(r, \theta)$ 为位错与 ξ 型点缺陷的相互作用能; μ 为切变模量; b_ξ 为 Burgers 矢量的模; ΔV_ξ 为一个 ξ 型点缺陷引起的体积变化。

(3)和(4)两式分别为有应力场时,空位和间隙原子流与其相应的浓度梯度及相互作用能之间的关系。(5)和(6)式为边界条件。

分别对(1)和(2)式等号两边在体积 $V^D = \pi(r^2 - r_i^{D2})$ 内积分,得

$$\begin{aligned} & D_\xi \int_0^{2\pi} p_\xi^D(r, \theta) d\theta + \int_{r_i^D}^r D_\xi dr' \int_0^{2\pi} p_\xi^D(r', \theta) \frac{\partial}{\partial r'} \phi_\xi(r', \theta) d\theta \\ &= -\frac{\pi K}{2} (r^2 - r_i^{D2}) - C_\xi \ln \frac{r}{r_i^D} - C_{0\xi} \\ &+ \int_{r_i^D}^r \frac{dr'}{r'} \int_0^{2\pi} \int_{r_i^D}^{r'} \alpha p_v^D(r'', \theta) p_i^D(r'', \theta) r'' dr'' d\theta, \end{aligned} \quad (9)$$

注意这里 z 轴取在位错线上。

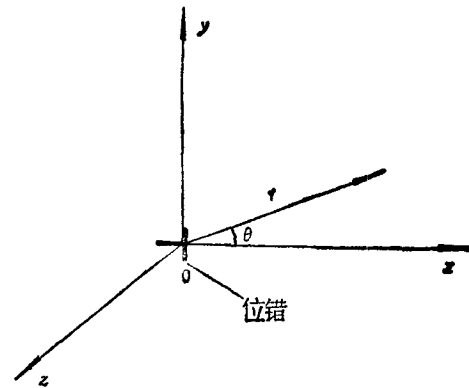


图 1 z 轴取在位错线上

由(5)和(6)式得

$$C_{0v} = -2\pi p_{0v}^D, \quad C_{01} = 0, \quad (10)$$

$$C_\xi = \left[-\frac{\pi K}{2} (r_b^{D_1} - r_i^{D_1}) - C_{0\xi} - D_\xi \int_0^{2\pi} p_{\xi b}^D d\theta - \Sigma_\xi + \Delta \right] / \ln \frac{r_b^D}{r_i^D}, \quad (11)$$

式中

$$\Sigma_\xi = D_\xi \int_{r_i^D}^{r_b^D} dr' \int_0^{2\pi} p_\xi^D(r', \theta) \frac{\partial}{\partial r'} \phi_\xi(r', \theta) d\theta, \quad (12)$$

$$\Delta = \int_{r_i^D}^{r_b^D} \frac{dr}{r} \int_0^{2\pi} \int_{r_i^D}^r \alpha p_{v1}^D(r', \theta) p_1^D(r', \theta) dr' d\theta. \quad (13)$$

利用(3),(4)式和(9)至(11)式可求出单位时间内流入柱面 $2\pi R z$ 的点缺陷的数目 I_ξ ,

$$I_\xi = zR \int_0^{2\pi} J_\xi|_{r=R} d\theta = z \left[-\pi R^2 K - C_\xi + \int_0^{2\pi} \int_{r_i^D}^R r \alpha p_{v1}^D d\theta dr \right]. \quad (14)$$

下面讨论略去 $(K - \alpha p_{v1}^D)$ 项的条件.

如果要在以位错线为轴心的体积 $\pi R^2 z$ 内,略去 $(K - \alpha p_{v1}^D)$, 而只考虑从柱面 $2\pi R z$ 流入的点缺陷对体积 $\pi R^2 z$ 内的点缺陷浓度的影响,只有在

$$I_\xi \gg z \int_0^{2\pi} d\theta \int_{r_i^D}^R (K - \alpha p_{v1}^D) r dr \quad (15)$$

时才合理.

由(14)和(15)两式得

$$-C_\xi + 2 \int_0^{2\pi} d\theta \int_{r_i^D}^R \alpha p_{v1}^D r dr \gg 2\pi R^2 K. \quad (16)$$

在(11)式中,令 $C_{0\xi} \approx 0$, $p_{v1}^D \approx \overline{p_{v1}}$ 和近似认为 $p_{\xi b}^D$ 已与 θ 无关,则

$$C_\xi < \pi r_i^{D_1} \alpha \overline{p_{v1}^D} - 2\pi D_\xi p_{\xi b}^D / \ln \frac{r_b^D}{r_i^D}. \quad (17)$$

在(17)式的推导中,用到了 $(K - \alpha \overline{p_{v1}}) > 0$ 和 $\Sigma_\xi \geq 0$. 前者显然. 后者是因为点缺陷在那里能量低,它在那里的浓度就大. 另外, $\frac{\partial}{\partial r'} \phi_\xi(r', \theta)$ 对于给定的 r' , 是一以 2π 为周期在正负之间振荡的周期函数,并且 E_ξ 的最小值对应着它的最大值. 同样,由方程(1)至(4)可看出 $p_\xi^D(r, \theta)$ 也是以 2π 为周期的大于或等于零的函数. 因此对于任意给定的 r' , 有 $\int_0^{2\pi} p_\xi^D(r', \theta) \frac{\partial}{\partial r'} \phi_\xi(r', \theta) d\theta \geq 0$, 即 $\Sigma_\xi \geq 0$.

注意到 $R^2 \gg r_i^{D_1}$, 并利用(16)和(17)两式可知,只要下式成立, (16)式就可自动得到满足:

$$D_\xi p_{\xi b}^D / \ln \frac{r_b^D}{r_i^D} \gg R^2 K.$$

利用上式和 $p_{v1}^D \approx \sqrt{KD_1 / (\alpha D_v)}$ 易得

$$R^2 \ll \sqrt{\frac{D_1 D_v}{\alpha K}} / \ln \frac{r_b^D}{r_i^D}. \quad (18)$$

用(18)式,可粗估一下 R 的数量级. 当 $K = 10^{-3} \text{dPa/s}$, $T = 500^\circ\text{C}$ 时, 对于一般金属 $D_1/\alpha \approx 10^{-17}$, $D_V \approx 10^{-9}$, $\ln r_0^D/r_i^D \approx 6$, 所以

$$R^2 \ll 3 \times 10^4 \text{ \AA}^2. \quad (19)$$

可知如果 $R \lesssim 100 \text{ \AA}$, 即在以位错线为轴心, 以 100 \AA 为半径的圆柱体内, 可略去 $(K - \alpha p_V p_I)$ 的影响. 但在上述圆柱体之外, 此项变得重要. 然而我们注意到, 随着 r 的增加, $|\phi_\xi(r, \theta)|$ 不断减小, 这为将 $p_\xi^D(r, \theta)$ 中的角分量作为小量展开或作为各向同性近似处理提供了条件.

为了便于与前人结果比较, 将(1)至(6)式改写成

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_\xi = K - \alpha p_V p_I, \quad r_i^D < r < r_\xi^D, \quad (20)$$

$$\mathbf{J}_\xi = -D_\xi \nabla p_\xi - D_\xi p_\xi \nabla \phi_\xi, \quad r_i^D < r < r_\xi^D, \quad (21)$$

$$p_\xi(r_i^D) = 0, \quad (22)$$

$$\left. \frac{\partial p_\xi}{\partial r} \right|_{r=r_\xi^D} = 0. \quad (23)$$

在(23)式中, r_ξ^D 是与 r_0^D 相差不多的一个量. 在有些文献中认为 $r_0^D = r_i^D = r_0^D$ ^[14, 15]. 但这一假设实际上等于说单位时间内流入位错线内的空位数目和间隙原子的相等, 也即无流偏差可言. 这是因为单位时间内由辐照产生的空位数和间隙原子数之间恒保持相等. 如果(23)式和 $r_0^D = r_i^D$ 同时成立, 意味着在体积 $\pi z r_0^D$ 内, 能使点缺陷消失的途径只有两种: 空位与间隙原子复合或点缺陷跑到位错线中去. 前者不会有多余的空位或间隙原子产生, 这样 $(K - \alpha p_V p_I)$ 提供的空位和间隙原子之间总是成对的. 因此达到定态时不可能有流偏差出现, 也即在求流偏差时假设 $r_0^D = r_i^D$ 和(23)式同时成立是不妥当的. 在这里, 对 r_ξ^D 不做附加限制, 对所需求的结果而言, 它们只作为中间变量出现.

在(22)式中, 令 $p_\xi(r_i^D) = 0$ 或 $p_\xi(r_i^D) = p_{0\xi} e^{-\phi_\xi}$ (热平衡条件), 在数学处理上可平行进行^[16], 但在此对所需求结果影响不大, 故在此取前者.

对于(20)式, 先利用文献[16]提出的方法, 引入变换

$$p_\xi(r, \theta) = g_\xi(r, \theta) \exp\left(-\frac{1}{2} \phi_\xi(r, \theta)\right), \quad (24)$$

得

$$\left[\nabla^2 g_\xi(r, \theta) - \frac{L_\xi^2}{4r^4} g_\xi(r, \theta) \right] D_\xi e^{-\frac{1}{2} \phi_\xi} = -(K - \alpha p_V p_I). \quad (25)$$

当 $r < R$ 时, 如上所述 $(K - \alpha p_V p_I)$ 可略, 则

$$\nabla^2 g_\xi^i(r, \theta) - \frac{L_\xi^2}{4r^4} g_\xi^i(r, \theta) = 0. \quad (26)$$

令 $g_\xi^i(r, \theta) = g_{0\xi}^i(r) + \sum_{n=1}^{\infty} g_{n\xi}^i(r) \cos n\theta$, 并作变换 $u_\xi = |L_\xi|/2r$, 由(26)式得

$$\frac{\partial^2 g_{n\xi}^i(u_\xi)}{\partial u_\xi^2} + \frac{1}{u_\xi} \frac{\partial}{\partial u_\xi} g_{n\xi}^i(u_\xi) - \left(\frac{n^2}{u_\xi^2} + 1\right) g_{n\xi}^i(u_\xi) = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots. \quad (27)$$

上式解为

$$g_{n\xi}^i(r) = C_{n1\xi}^i \left[I_n \left(\frac{|L_\xi|}{2r} \right) K_n \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) - I_n \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) K_n \left(\frac{|L_\xi|}{2r} \right) \right] \\ n = 0, 1, 2, \dots, \quad (28)$$

式中 I_n 和 K_n 为 n 阶虚宗量 Bessel 函数; $C_{n1\xi}^i$ 为待定常数. 推导中用到(22)式.

当 $r > R$ 时, 需考虑 $(K - \alpha p_V p_I)$ 的影响. 由于此区中 $\alpha p_V p_I$ 随 r 和 θ 变化都较慢, 所以可近似令

$$K_{\text{eff}} = K - \alpha p_V p_I \quad r > R, \quad (29)$$

K_{eff} 为待定常数.

如果选 $R = \max(|L_V|, |L_I|)$, 此值对于金属一般小于 100 \AA . 则(25)式可展开为 (因为 $|\frac{1}{2} \phi_\xi| \leq \frac{1}{2}$)

$$\nabla^2 g_\xi^0(r, \theta) - \frac{L_\xi^2}{4r^4} g_\xi^0(r, \theta) = - \frac{K_{\text{eff}}}{D_\xi} \left(1 + \frac{1}{2} \phi_\xi + \frac{1}{8} \phi_\xi^2 \right), \quad (30)$$

令 $x_\xi = \frac{2r}{|L_\xi|}$ 和

$$g_\xi^0(r, \theta) = g_{0\xi}^0(r) + g_{1\xi}^0(r) \cos \theta + g_{2\xi}^0 \cos 2\theta, \quad (31)$$

得

$$\frac{1}{x_\xi} \frac{d}{dx_\xi} \left(x_\xi \frac{d}{dx_\xi} g_{0\xi}^0(x_\xi) \right) - \frac{1}{x_\xi^4} g_{0\xi}^0(x_\xi) = - \frac{K_{\text{eff}}}{D_\xi} \left(\frac{L_\xi}{2} \right)^2 \left(1 + \frac{1}{4x_\xi^2} \right), \quad (32)$$

$$\frac{1}{x_\xi} \frac{d}{dx_\xi} \left(x_\xi \frac{d}{dx_\xi} g_{1\xi}^0(x_\xi) \right) - \frac{1}{x_\xi^4} g_{1\xi}^0(x_\xi) - \frac{1}{x_\xi^2} g_{1\xi}^0(x_\xi) = \frac{K_{\text{eff}}}{D_\xi} \left(\frac{L_\xi}{2} \right)^2 \frac{1}{x_\xi}, \quad (33)$$

$$\frac{1}{x_\xi} \frac{d}{dx_\xi} \left(x_\xi \frac{d}{dx_\xi} g_{2\xi}^0(x_\xi) \right) - \frac{1}{x_\xi^4} g_{2\xi}^0(x_\xi) - \frac{4}{x_\xi^2} g_{2\xi}^0(x_\xi) = - \frac{K_{\text{eff}}}{D_\xi} \frac{L_\xi^2}{16} \frac{1}{x_\xi^3}. \quad (34)$$

(32)至(34)式的通解依次为

$$g_{0\xi}^0(r) = C_{01\xi}^0 I_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2r} \right) + C_{02\xi}^0 K_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2r} \right) \\ - \frac{K_{\text{eff}} r^2}{4D_\xi} \left[1 + \frac{\left(\ln \left(\frac{2r}{|L_\xi|} \right) \right)^2}{\left(\frac{2r}{|L_\xi|} \right)^2} + O \left(\frac{1}{2} \frac{\left(\ln \frac{2r}{|L_\xi|} \right)^2}{\left(\frac{2r}{|L_\xi|} \right)^4} \right) \right], \quad (35)$$

$$g_{1\xi}^0(r) = \frac{C_{11\xi}^0}{r} + C_{12\xi}^0 r + \frac{K_{\text{eff}} L_\xi}{4D_\xi} r \ln \frac{2r}{|L_\xi|}, \quad (36)$$

$$g_{2\xi}^0(r) = \frac{C_{21\xi}^0}{r^2} + C_{22\xi}^0 r^2 + \frac{K_{\text{eff}} L_\xi^2}{64D_\xi}. \quad (37)$$

由于 $x_\xi \geq 2$, 所以在(33)和(34)式中略去了 $\frac{1}{x_\xi^2} g_{1(2)\xi}^0(x_\xi)$ 项. 在(35)至(37)式中

$C_{nm\xi}^0$ 为待定常数.

因当 $r = r_\xi^D$ 时, $\phi_\xi(r_\xi^D, \theta) \approx 0$, 故可把

$$g_{n\xi}^0(r_\xi^D) = 0 \quad n = 1, 2 \quad (38)$$

作为定解条件.

另外有连接条件

$$g_{n\xi}^i(R) = g_{n\xi}^0(R), \quad \frac{d}{dR} g_{n\xi}^i(R) = \frac{d}{dR} g_{n\xi}^0(R), \quad n = 0, 1, 2 \quad (39)$$

及

$$g_{n\xi}^i(r) \equiv 0 \quad n \geq 3. \quad (40)$$

利用边界条件和连接条件, 得

$$C_{02\xi}^0 = \left\{ \left(\frac{A_{01\xi}^i A_{01\xi R}^{0(1)}}{A_{01\xi}^{i(1)} A_{01\xi}^{0(1)}} - \frac{A_{01\xi R}^0}{A_{01\xi}^{0(1)}} \right) E_{01\xi}^{0(1)} + E_{01\xi R}^0 - \frac{A_{01\xi}^i}{A_{01\xi}^{i(1)}} E_{01\xi R}^{0(1)} \right\} \\ \div \left\{ \frac{A_{01\xi R}^0 A_{02\xi}^{0(1)}}{A_{01\xi}^{0(1)}} - \frac{A_{01\xi}^i A_{01\xi R}^{0(1)} A_{02\xi}^{0(1)}}{A_{01\xi}^{i(1)} A_{01\xi}^{0(1)}} + A_{02\xi R}^0 + \frac{A_{01\xi}^i A_{02\xi R}^{0(1)}}{A_{01\xi}^{i(1)}} \right\}, \quad (41)$$

$$C_{01\xi}^0 = \frac{A_{02\xi}^{0(1)}}{A_{01\xi}^{0(1)}} C_{02\xi}^0 + \frac{E_{01\xi}^{0(1)}}{A_{01\xi}^{0(1)}}, \quad (42)$$

$$C_{01\xi}^1 = (C_{01\xi}^0 A_{01\xi R}^0 + C_{02\xi}^0 A_{02\xi R}^0 - E_{01\xi R}^0) / A_{01\xi}^1; \quad (43)$$

$$C_{12\xi}^1 = \left\{ \frac{r_\xi^D}{R^2} E_{11\xi}^0(r_\xi^D) + \frac{r_\xi^D}{R} \frac{A_{11\xi}^{1(1)}}{A_{11\xi}^1} E_{11\xi}^0(r_\xi^D) + E_{11\xi}^{0(1)} - \frac{A_{11\xi}^{1(1)}}{A_{11\xi}^1} E_{11\xi R}^0 \right\} \\ \div \left\{ -1 - \frac{r_\xi^D}{R^2} - \frac{A_{11\xi}^{1(1)}}{A_{11\xi}^1} \frac{1}{R} (r_\xi^D - R^2) \right\}, \quad (44)$$

$$C_{11\xi}^0 = -r_\xi^D C_{12\xi}^1 - r_\xi^D E_{11\xi}^0(r_\xi^D), \quad (45)$$

$$C_{11\xi}^1 = (C_{11\xi}^0 / R + R C_{12\xi}^1 + E_{11\xi R}^0) / A_{11\xi}^1; \quad (46)$$

$$C_{21\xi}^1 = -E_{21\xi}^1 \left(-\frac{R^2}{r_\xi^D} + 1 + \frac{2R A_{21\xi}^1}{A_{21\xi}^{1(1)} r_\xi^D} \right) \\ \div \left(\frac{1}{R^2} + \frac{2}{R^3} \frac{A_{21\xi}^1}{A_{21\xi}^{1(1)}} - \frac{R^2}{r_\xi^D} + \frac{2R}{r_\xi^D} \frac{A_{21\xi}^1}{A_{21\xi}^{1(1)}} \right), \quad (47)$$

$$C_{22\xi}^1 = -C_{21\xi}^1 / r_\xi^D - E_{21\xi}^1 / r_\xi^D, \quad (48)$$

$$C_{21\xi}^0 = (C_{21\xi}^1 / R^2 + R^2 C_{22\xi}^1 + E_{21\xi R}^1) / A_{21\xi}^0. \quad (49)$$

这里

$$A_{01\xi}^{0(1)} = -\frac{|L_\xi|}{2r_\xi^D} I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_\xi^D} \right), \quad A_{02\xi}^{0(1)} = -\frac{|L_\xi|}{2r_\xi^D} K_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_\xi^D} \right), \quad (50)$$

$$E_{01\xi}^{0(1)} = \frac{K_{\text{eff}}}{2D_\xi} \left(r_\xi^D + \frac{L_\xi^2}{4r_\xi^D} \ln \frac{2r_\xi^D}{|L_\xi|} \right), \quad (51)$$

$$A_{01\xi R}^0 = I_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right), \quad A_{02\xi R}^0 = K_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right), \quad (52)$$

$$E_{01\xi R}^0 = \frac{K_{\text{eff}} R^2}{4D_\xi} \left[1 + \left(\frac{L_\xi}{2R} \ln \left(\frac{2R}{|L_\xi|} \right) \right)^2 \right], \quad (53)$$

$$A_{01\xi R}^{0(1)} = -\frac{|L_\xi|}{2R^2} I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right), \quad A_{02\xi R}^{0(1)} = -\frac{|L_\xi|}{2R^2} K_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right), \quad (54)$$

$$E_{01\xi R}^{(1)} = \frac{K_{\text{eff}}}{2D_\xi} \left[R + \frac{L_\xi^2}{4R} \ln \frac{2R}{|L_\xi|} \right], \quad (55)$$

$$A_{01\xi}^i = I_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) K_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) - I_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) K_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right), \quad (56)$$

$$A_{01\xi}^{(1)} = - \frac{|L_\xi|}{2R^2} \left[I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) K_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) + I_0 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) K_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) \right], \quad (57)$$

$$E_{11\xi}^0 = \frac{5RL_\xi K_{\text{eff}}}{4D_\xi} \ln \frac{10R}{|L_\xi|}, \quad (58)$$

$$E_{11\xi}^{(1)} = \frac{K_{\text{eff}} L_\xi}{4D_\xi} \left(1 + \ln \frac{2R}{|L_\xi|} \right), \quad E_{11\xi R}^0 = \frac{RL_\xi K_{\text{eff}}}{4D_\xi} \ln \frac{2R}{|L_\xi|}, \quad (59)$$

$$A_{11\xi}^{(1)} = - \frac{|L_\xi|}{2R^2} \left\{ \left[\frac{2R}{|L_\xi|} I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) + I_2 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) \right] K_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) - \left[\frac{2R}{|L_\xi|} K_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) - K_2 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) \right] I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) \right\}, \quad (60)$$

$$A_{11\xi}^i = I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) K_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) - I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) K_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right), \quad (61)$$

$$E_{21\xi}^0 = \frac{K_{\text{eff}} L_\xi^2}{64D_\xi}, \quad (62)$$

$$A_{21\xi}^{(1)} = - \frac{|L_\xi|}{2R^2} \left\{ \left[\frac{4R}{|L_\xi|} I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) + I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) \right] K_2 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) - \left[\frac{4R}{|L_\xi|} K_2 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) - K_3 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) \right] I_1 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) \right\}, \quad (63)$$

$$A_{21\xi}^i = I_2 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right) K_2 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) - I_2 \left(\frac{|L_\xi|}{2r_i^D} \right) K_2 \left(\frac{|L_\xi|}{2R} \right). \quad (64)$$

现除 K_{eff} 和 r_i^D 外,所有待定系数都已求出.

为得到 K_{eff} 和 r_i^D ,先用相同的分区方法求出无应力场时与有应力场时的 K'_{eff} (撇表示无应力场)与 K_{eff} 、 r_i^D 的关系,然后给出 K'_{eff} 、 r_i^D 与文献[1]中给出的中性尾闾汇强度之间的关系.最后可得到偏吸率.

分区处理无应力场时的点缺陷的分布 p'_i 所应满足的方程为

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} p'_i \right) = 0, \quad r_i^D < r < R; \quad (65)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{d}{dr} p'_i \right) = -K'_{\text{eff}}, \quad R < r < r_i^D; \quad (66)$$

$$p'_i(r_i^D) = 0, \quad \left. \frac{dp'_i(r)}{dr} \right|_{r=r_i^D} = 0. \quad (67)$$

连接条件为

$$\left. \frac{dp'_i}{dr} \right|_{r=R} = \left. \frac{dp'_i}{dr} \right|_{r=R}, \quad p'_i|_{r=R} = p'^0|_{r=R}. \quad (68)$$

由(65)至(68)式易得

$$p_{\xi}^i(r) = \frac{K'_{\text{eff}}}{2D_{\xi}} (r_b^{D_{\xi}} - R^2) \ln \frac{r}{r_i^{D_{\xi}}}, \quad (69)$$

$$p_{\xi}^o(r) = -\frac{K'_{\text{eff}}}{4D_{\xi}} (r^2 - R^2) + \frac{K'_{\text{eff}}}{2D_{\xi}} (r_b^{D_{\xi}} - R^2) \ln \frac{R}{r_i^{D_{\xi}}} + \frac{K'_{\text{eff}} r_b^{D_{\xi}}}{2D_{\xi}} \ln \frac{r}{R}. \quad (70)$$

因远离位错处的点缺陷浓度主要取决于它们之间的相互复合^[4], 与位错的存在关系不大。故应有

$$p_{\xi}^o(r_b^{D_{\xi}}) \approx p_{\xi}(r_b^{D_{\xi}}, \theta) = g_{0\xi}^o(r_{\xi}^{D_{\xi}}). \quad (71)$$

上式实际上等于说有无位错的应力场对远离位错处的点缺陷浓度影响不大。这是因为如果应力场使位错吸收点缺陷的能力增加一倍, 点缺陷的平均浓度只变化百分之几, 在远离位错的地方点缺陷浓度的变化还要更小些。

由(50)至(56), (41)和(42)式可得

$$C_{02\xi}^j \approx \frac{K_{\text{eff}} r_{\xi}^{D_{\xi}}}{2D_{\xi}}, \quad C_{01\xi}^o \approx 0. \quad (72)$$

上式推导中用到 $r_{\xi}^{D_{\xi}} \gg R, |L_{\xi}|$ 。

利用(35)、(70)至(72)式及注意到 $2r_{\xi}^{D_{\xi}}/|L_{\xi}| \gg 1$, 有

$$\frac{K_{\text{eff}} r_{\xi}^{D_{\xi}}}{2D_{\xi}} K_0\left(\frac{|L_{\xi}|}{2r_{\xi}^{D_{\xi}}}\right) - \frac{K_{\text{eff}} r_{\xi}^{D_{\xi}}}{4D_{\xi}} = \frac{K'_{\text{eff}} r_b^{D_{\xi}}}{2D_{\xi}} \ln \frac{r_b^D}{r_i^{D_{\xi}}} - \frac{K'_{\text{eff}} r_b^{D_{\xi}}}{4D_{\xi}}, \quad (73)$$

上式推导中用到 $r_{\xi}^U, r_b^{D_{\xi}} \gg R$ 。

单位时间流入单位长度位错线中点缺陷的个数为

$$\begin{aligned} I_{\xi} &= \frac{R}{b^3} \int_0^{2\pi} d\theta \left[D_{\xi} \frac{\partial}{\partial R} p_{\xi}(R, \theta) + D_{\xi} p_{\xi}(R, \theta) \frac{\partial}{\partial R} \phi_{\xi}(R, \theta) \right] \\ &\approx \frac{2\pi R}{b^3} \left\{ \frac{d}{dR} g_{0\xi}^o(R) + \frac{L_{\xi}}{4R} \frac{d}{dR} g_{1\xi}^o(R) + \frac{L_{\xi}^2}{16R^2} \frac{d}{dR} g_{0\xi}^o(R) \right. \\ &\quad \left. + \frac{L_{\xi}}{4R^2} g_{1\xi}^o(R) + \frac{L_{\xi}^2}{8R^3} g_{0\xi}^o(R) \right\}. \quad (74) \end{aligned}$$

在上式计算中只保留到 $\cos^2 \theta$ 项, b 为晶格常数。

利用(35), (36), (44)和(45)式, 并略去 $R^2/r_{\xi}^{D_{\xi}}$, $L_{\xi}^2/r_{\xi}^{D_{\xi}}$ 和 $R|L_{\xi}|/r_{\xi}^{D_{\xi}}$ 项后, (74)式变为

$$I_{\xi} = \pi K_{\text{eff}} r_{\xi}^{D_{\xi}} \frac{|L_{\xi}|}{2R} \left[K_1\left(\frac{|L_{\xi}|}{2R}\right) + \frac{|L_{\xi}|}{4R} K_0\left(\frac{|L_{\xi}|}{2R}\right) \right] \frac{1}{b^3}. \quad (75)$$

(73)和(75)式联合给出

$$\begin{aligned} I_{\xi} &= \frac{\pi K'_{\text{eff}} r_b^{D_{\xi}} |L_{\xi}|}{2R b^3} \left(\ln \frac{r_b^D}{r_i^{D_{\xi}}} - \frac{1}{2} \right) \left[K_1\left(\frac{|L_{\xi}|}{2R}\right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{|L_{\xi}|}{4R} K_0\left(\frac{|L_{\xi}|}{2R}\right) \right] \left/ \left[K_0\left(\frac{|L_{\xi}|}{2r_b^{D_{\xi}}}\right) - \frac{1}{2} \right] \right. \quad (76) \end{aligned}$$

上式推导中做了如下近似: $K_0\left(\frac{|L_{\xi}|}{2r_b^{D_{\xi}}}\right) \approx K_0\left(\frac{|L_{\xi}|}{2r_b^D}\right)$ 。由于 $K(\alpha) \approx \ln \frac{2}{\alpha}$, $\alpha \rightarrow 0$, 所以

实际上相当于令 $\ln r_{\xi}^D \approx \ln r_b^D$, 因此在所讨论的问题中不会引起大的误差。

从(76)式易得

$$I_I - I_V = \pi K'_{\text{eff}} r_b^D Q \frac{1}{b^3}, \quad (77)$$

其中

$$Q = Q_I - Q_V \quad (78)$$

为偏吸率, Q_{ξ} 由下式给出:

$$Q_{\xi} = \frac{\ln \frac{r_b^D}{r_i^D} - \frac{1}{2}}{K_0 \left(\frac{|L_{\xi}|}{2r_b^D} \right) - \frac{1}{2}} \left[\frac{|L_{\xi}|}{2R} \left(K_1 \left(\frac{|L_{\xi}|}{2R} \right) + \frac{|L_{\xi}|}{4R} K_0 \left(\frac{|L_{\xi}|}{2R} \right) \right) \right]. \quad (79)$$

另外, 由于(65)至(67)式给出的点缺陷浓度及其流应与文献[1]中给出的位错(无应力场)周围的点缺陷浓度及其流相等, 故 (p^D 为无应力场时位错周围空位的浓度)^[1]

$$2\pi r_i^D D_V \frac{dp_V^D}{dr} \Big|_{r=r_i^D} = 2\pi r_i^D D_V \frac{dp_V^i}{dr} \Big|_{r=r_i^D} = \pi K'_{\text{eff}} r_b^D. \quad (80)$$

利用(73), (75)和(80)式可得到计及位错应力场后, 在辐照条件下流入位错线内的点缺陷流。

图2给出有关铜的 Q_{ξ} 和 Q 随位错密度的变化情况 及与前人结果的比较。对于铜有: $\nu = 0.32$, $\mu = 5.5 \times 10^{11} \text{ dyn/cm}^2$, $b = 3.6 \text{ \AA}$, $b_{\xi} = \frac{\sqrt{2}}{2} b$, $\Delta V_L^{(17)} = 1.45Q - 1.45b^3/4$, $\Delta V_V^{(17)} = -0.4b^3/4$, $T = 723\text{K}$ 。计算中取 $R = L_1 = 24b_{\xi}$ 。

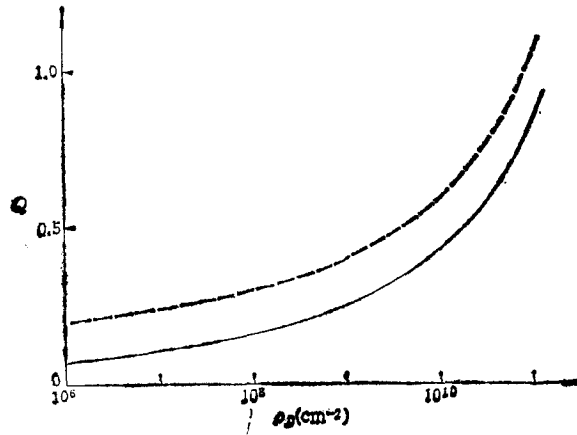


图2 铜的偏吸率随位错密度的变化及本文结果与前人结果比较
实线为本文结果; 虚线为前人结果

图2表明本文理论给出的偏吸率较前人^[15]的理论结果要小。在 $\rho_D = 10^9 \text{ cm}^{-2}$ 附近本文结果是前人的 $2/3$ 左右。

三、肿胀公式及与实验比较

材料在辐照条件下的肿胀是由于微洞的不断长大所引起的。微洞长大要求在同等的辐照条件下, 流入微洞的空位数多于间隙原子数。因辐照产生的空位数等于由它产生的间隙原子数, 所以微洞获得的多余空位只能来自位错对点缺陷吸收的不平衡。这样有

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\Delta V}{V} \right) &= 4\pi r_i^2 \rho_C \left(D_V \frac{dp_V}{dr} - D_I \frac{dp_I}{dr} \right) \Big|_{r=r_i^C} \\ &= 2\pi r_i^2 \rho_D \left(D_I \frac{dp_I}{dr} - D_V \frac{dp_V}{dr} \right) \Big|_{r=r_i^D} - 4\pi r_i^2 \rho_C \nu_V p_{V_i}^C. \end{aligned} \quad (81)$$

(81) 式中第二式等号右边第一项乘以 b^{-3} 后, 表示每单位时间单位体积内进入位错的净间隙原子数(减去了空位数)。从这一项中减去 $4\pi r_i^2 \rho_C \nu_V R \nu_i^C b^{-2}$ (单位体积内微洞表面单位时间内热发射的空位数), 就应等于进入微洞的净空位个数。其中 ν_V 为空位的跳跃频率; ρ_C 和 ρ_D 分别为微洞和位错的密度; r_i^C 为微洞半径; $p_{V_i}^C$ 为微洞表面的空位浓度,

$$p_{V_i}^C = \exp \left(-\frac{E_V^*}{kT} + \frac{2\gamma b^2}{r_i^C} \cdot \frac{1}{kT} \right), \quad (82)$$

式中 γ 为微洞的表面自由能 $\Delta V/V$ 为体肿胀率。

由(77)和(87)式易得

$$\frac{\Delta V}{V} = 2\pi \rho_D r_i^2 D_V (t - t_0) Q \frac{dp_V^D}{dr} \Big|_{r=r_i^D} - (36\pi \rho_C)^{1/3} \nu_V \int_{t_0}^t \left(\frac{\Delta V}{V} \right)^{2/3} p_{V_i}^C dt, \quad (83)$$

式中 t 为辐照时间, t_0 为开始肿胀的时间, 若辐照时间较长, 可略。推导中用到 $\frac{\Delta V}{V} = \frac{4\pi}{3} r_i^2 \rho_C$ 。

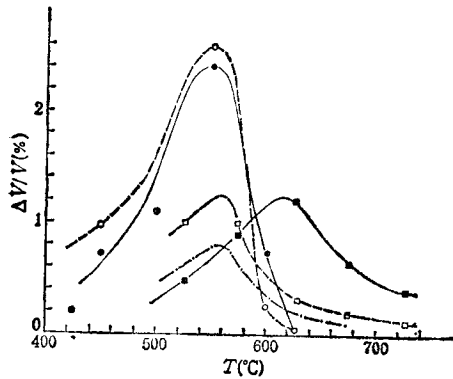


图3 金属镍的肿胀与温度之间的关系

实线为实验结果; 虚线为本文结果; 点划线为 BB 理论的结果; \odot 和 \circ 为低点缺陷产生率 ($K=7 \times 10^{-4} \text{dPa/s}$) 时的实验值和计算值; \boxtimes 和 \square 为高点缺陷产生率 ($K=7 \times 10^{-2} \text{dPa/s}$) 时的实验和计算值

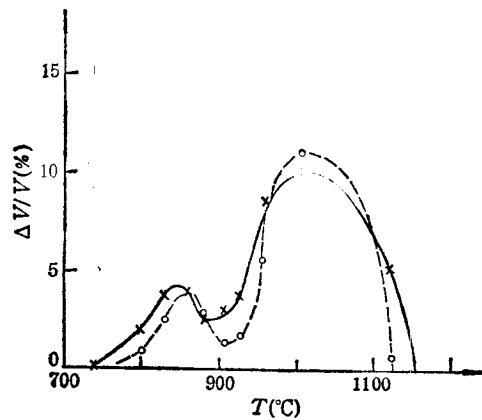


图4 纯钛的肿胀随温度的变化曲线及与本文理论结果的比较

图3 给出金属镍的肿胀与温度之间的关系。其中实线为实验结果^[10], 点划线为 BB 理论的结果, 虚线是由本文(83)式给出的。当 $K = 7 \times 10^{-4} \text{dPa/s}$ 时, 计算结果与实验符合

得较好,当剂量率较大时, $K = 7 \times 10^{-2} \text{dPa/s}$, 理论和实验曲线在形状上符合得比较好. 本文理论给出的肿胀峰值比 BB 理论更接近实验值. 肿胀峰值对应的温度, 实验值约为 615°C , 两种理论给出的值均在 565°C 左右, 相对误差 6% 左右.

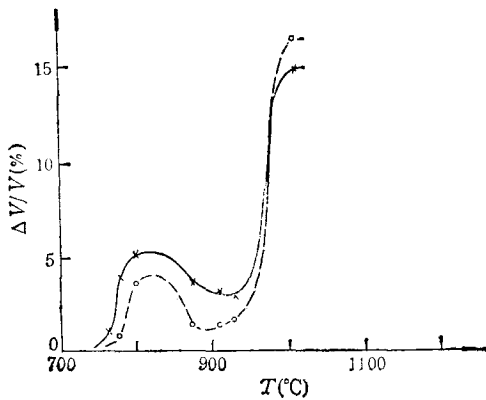


图 5 Nb-1%Zr 的肿胀随温度的变化曲线及与本文理论结果的比较

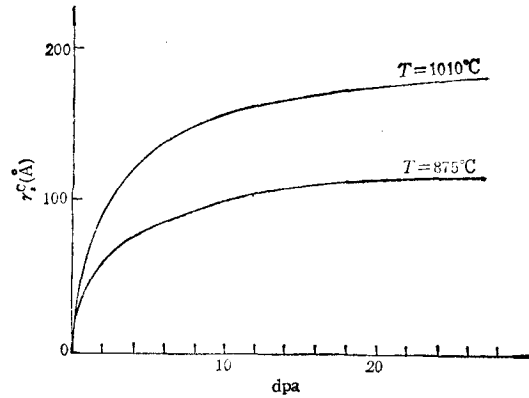


图 6 微洞半径随 dPa 的变化曲线
实线为 $T = 1010^\circ\text{C}$; 虚线为 $T = 875^\circ\text{C}$; 计算所用参数同镍

图 4 和图 5 分别给出纯 Nb 和 Nb-1%Zr 的肿胀随温度的变化关系. 实线和虚线分别代表实验^[13]和(83)式给出的结果. 由于在计算中所用的参数, 除 α/D_1 为理论估算的以外, 其余均为实验所测数据, 故认为理论结果是较可靠的. 另外, 也说明 α/D_1 的理论估算较正确. 对于上述两种材料肿胀随温度的变化呈双驼峰形状, 此现象第一次得到理论解释. 之所以有双峰出现, 是因在肿胀峰所处的温度附近, 位错密度明显高于其它温区的位错密度.

图 6 给出微洞半径随每个原子平均位移次数 (displacement per atom) 的变化. 从图 6 中可看出在 10 dPa 处, r_c 的生长开始变得缓慢. 另外, 温度高更利于微洞的生长 (保持位错密度不变). 这是因为在高温条件下点缺陷更易移动, 因此在位错密度不变, 也即偏吸率不变的条件下, 微洞生长更快. 辐照材料之所以在高温区会出现肿胀减小, 甚至消失 (见图 3 至图 5), 是因在高温条件下晶体损伤容易恢复, 使位错密度减小所致.

表 1 给出计算所需的参数. 估算金属中点缺陷的复合率时用到

$$\alpha = \frac{\beta Z_{IV} D_I}{b^2}, \quad (84)$$

式中 Z_{IV} 为空位和间隙原子相复合的组合数, 一般在 500 数量级^[18]. (84) 式可见文献 [19] 导出. 只需注意

$$D_I = \frac{1}{\beta} b^2 w_I, \quad (85)$$

式中 w_I 为单位时间内, 间隙原子跳到指定的邻近间隙位置上的几率. 这里对于铌只考虑两种较稳定的间隙原子位形^[20]——[110]和[111]亚铃状的扩散, 故 $\beta_{\text{Nb}} = 4$; 对于镍 $\beta_{\text{Ni}} = 1$. 另外, 还用到下列公式:

表 1

参 数	金 属	
	Nb, Nb-1%Zr*	Ni
$E_V^f(\text{eV})$	2.45 [21]	1.78 [21]
$E_{ac}^f(\text{eV})$	3.62 [22]	—
$\alpha/D_1(\text{cm}^{-2})$	1.85×10^{13} (84)式	5.3×10^{17} (84) 式
$\Delta V_1(10^{-24}\text{cm}^3)$	18 [23]	10 [26]
$\Delta V_V(10^{-24}\text{cm}^3)$	-4 [24]	-1.6 [27]
$D_{V0}(\text{cm}^2/\text{s})$	8×10^{-3} [22]	0.1 [10]
$E_V^M(\text{eV})$	1.17 (87)式	1.4 [10]
$b(10^{-9}\text{cm})$	3.29	3.49
$b_r(10^{-8}\text{cm})$	2.30	2.45
ν	0.37	0.34
$\gamma(\text{erg} \cdot \text{cm}^{-2})$	2200 [25]	2000 [28]
$\mu(10^{11}\text{dyn} \cdot \text{cm}^{-2})$	4.34	8.0

* 这里用的是纯铌的数据. 1) 计算中令 $R = 1$.

$$D_V = D_{V0} \exp\left(-\frac{E_V^M}{RT}\right), \quad (86)$$

$$E_V^M = E_{ac} - E_V^f. \quad (87)$$

其中 D_{V0} 为一常数; E_V^M 为空位迁移能; E_{ac} 为自扩散系数中的激活能; E_V^f 为空位形成能.

应指出在计算肿胀时, 使用了本文第二节给出的偏吸率, 并与实验符合得比较好. 解决了以前的理论只有当偏吸率小于理论算出的偏吸率时, 才能与实验相符合的矛盾. 此外, 我们给出的肿胀模型中, 肿胀峰值对微洞表面自由能的依赖很小, 表面自由能在 1000 至 2500 $\text{erg} \cdot \text{cm}^{-2}$ 内变化时, 对肿胀峰几乎没有影响. 其原因是因为由位错密度随温度的变化而造成的肿胀的变化比表面自由能的要大.

四、总 结

本文用分区的方法及结合文献[1], 研究了考虑位错产生的应力场后位错周围点缺陷(辐照产生的)分布的情况, 得到

- 1) 点缺陷分布函数的零级、一级和二级近;
- 2) 用所得的近似解, 较合理地给出了偏吸率. 所得结果比前人的偏吸率要小;
- 3) 用所得的偏吸率及文献[1]中给出的中性尾间, 导出一新的计算肿胀的公式. 理论与实验符合较好. 解决了一些理论与实验相矛盾的问题.

本文是在黄祖洽教授指导下完成的, 作者表示衷心感谢. 还感谢李林、柳百新和马本盛等教授的有益讨论及 R. Bullough 教授提供的有参考价值的资料.

[1] 朱慧琰, 本刊本期.

[2] A. D. Brailsford and R. Bullough, *J. Nucl. Mater.*, **44**(1972), 121.

[3] F. A. Nichols, *Rad. Eff.*, **39**(1978), 169.

- [4] R. Bullough *et al.*, *Nucl. Appl. Tech.*, 9(1970), 346.
 [5] P. T. Heald, *Phil. Mag.*, 31(1975), 551.
 [6] W. G. Wolfer *J. Appl. Phys.* 47(1976), 791.
 [7] D. R. Olander, *Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements*, ERDA Technical Information Center, (1976).
 [8] 见文献[7], p. 210.
 [9] M. H. Yoo, *Phil. Mag.*, A40(1979), 193.
 [10] J. E. Westmoreland *et al.*, *Rad. Eff.*, 26(1975), 1.
 [11] R. W. Smith and G. S. Was, *J. Nucl. Mater.*, 139(1986), 137.
 [12] S. Ohnuki *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 122 & 123(1984), 317.
 [13] B. A. Loomis *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 56(1975), 25.
 [14] H. Takahashi *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 122 & 123(1984), 327.
 [15] P. T. Heald *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 66(1976), 107.
 [16] И. Г. Маргелашвили, З. К. Саралидзе, *Физика твердого тела*, 15 (1973), 9.
 [17] P. Ehrhart and U. Schlagheck, *J. Phys. F*, 4(1974), 1575.
 [18] J. B. Gibson *et al.*, *Phys. Rev.*, 120(1960), 1229.
 [19] 见文献[7], p. 206.
 [20] J. R. Beeler, *Radiation Effects Computer Experiments*, North-Holland Publishing Company, (1983), p. 209.
 [21] H. E. Schaeter, *Proceedings of the Seventh International Conference on Positron Annihilation*, Edited by P. C. Jain, R. M. Singru and K. P. Gopinathan, New Delhi, India, (1985), p. 448.
 [22] R. E. Einziger *et al.*, *J. Nucl. Mater.*, 69 & 70(1978), 523.
 [23] 见文献[20], p. 218; p. 227.
 [24] 见文献[20], p. 166.
 [25] W. Kohn *et al.*, *Phys. Rev.*, B20(1979), 4948.
 [26] 见文献[20], p. 247.
 [27] 见文献[20], p. 168.
 [28] C. H. Woo and W. Frank, *J. Nucl. Mater.*, 148(1987), 121.

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

BIAS FACTOR AND SWELLING FORMULA

ZHU HUI-LONG

Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University

(Received 7 December 1988)

ABSTRACT

Approximate concentration distributions of point defects around a dislocation in irradiated material are obtained by dividing the region near the dislocation into two parts in which some definite approximations are used. Then dislocation biasfactor for interstitials is determined, the value of the factor is less than the previous one by 20—50%. As a result, a formula of swelling due to void growth in irradiated materials is obtained, it agrees with experimental data reasonably.