

PACS: 05.70. Ln; 61.72.jd. 61.72 Qq, 62.20.fg, 81.30.30.Kf

“PARADOX” OF THE VOID NUCLEATION**I.N. Laptev¹, O.O. Parkhomenko^{1,2}, V.I. Tkachenko^{1,2}**¹*National Scientific Center “Kharkiv Institute of Physics and Technology”**1, Akademicheskaya St., Kharkov, 61108, Ukraine*²*V.N. Karazin Kharkov National University**4 Svobody Sq., Kharkov, 61022, Ukraine**e-mail: parkhomenko@kipt.kharkov.ua*

Received September 8, 2014

On the basis of advanced before a method of phase diagrams martensitic transformations into systems such as « iron - carbon - vacancies », are determined energy of activation of formation of vacancies and voids. It is shown, that elastic volumetric deformation 11-th elementary tetragonal cells of iron (circuit Бейна) on 4,2 %, leads to formation of one structural vacancy. The data testify to significant power advantage of formation of vacancies (0.04 eV) and voids the critical size (3eV) on the mechanism of the opposites martensitic transformations, in comparison with ordinary diffusion mechanism (more 1eV- vacancy, and some tens eV-the void).

KEYWORDS: «iron-carbon- vacancies» system, martensitic transformation, vacancy and voids formation energy, radiation effects

«ПАРАДОКС» ЗАРОЖДЕНИЯ ПОР**И.Н. Лаптев¹, А.А. Пархоменко^{1,2}, В.И. Ткаченко^{1,2}**¹*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»**ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина*²*Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина**пл. Свободы 4, г. Харьков, 61022, Украина*

На основе развитого ранее метода фазовых диаграмм мартенситных превращений в системах «железо – углерод - вакансии», определены энергии активации образования вакансий и пор. Показано, что упругая объемная деформация 11-ти элементарных ОЦТ ячеек железа (схема Бейна) на 4,2% приводит к образованию одной структурной вакансии. Данные свидетельствуют о значительной энергетической выгоды образования вакансий (0,04 эВ) и зародышей пор критического размера (3эВ) по механизму обратных мартенситных превращений, по сравнению с диффузионным механизмом (более 1эВ - вакансия, и несколько десятков эВ - пора).

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: система «железо-углерод-вакансии», мартенситные превращения, энергия образования вакансий и пор, радиационные эффекты

«ПАРАДОКС» ЗАРОЖДЕНИЯ ПОР**І.М. Лаптев¹, О.О. Пархоменко^{1,2}, В.І. Ткаченко^{1,2}**¹*Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»**вул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна*²*Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна**пл. Свободи 4, м. Харків, 61022, Україна*

На основі розвинутого раніше методу фазових діаграм мартенситних перетворень у системах «залізо-вуглець-вакансії», визначені енергії активації утворення вакансій та пор. Показано, що пружна об'ємна деформація одинадцяти елементарних ОЦТ – ячіюк заліза (за схемою Бейна) на 4,2% призводить до створення однієї структурної вакансії. Дані свідчать про значну енергетичну вигідність утворення вакансій (0.04eV), та пор (3eV) за механізмом зворотніх мартенситних перетворень у порівнянні із дифузійним механізмом (більш, як 1eV - вакансія, та декілька десятків eV - пора).

КЛЮЧОВІ СЛОВА: система «залізо-вуглець-вакансії», мартенситні перетворення, енергія утворення вакансій и пор, радіаційні ефекти

Работа является продолжением исследований, направленных на развитие новых, альтернативных существующим, представлений о механизмах зарождения пор в сильнонеравновесных системах, таких, как облученные материалы, с помощью метода фазовых диаграмм мартенситных превращений (ФДМП) [1- 4].

В работе [1] предложен сам метод ФДМП, оригинальная модель зарождения пор и трещин в неравновесных системах на основе железа, за счет образования вакансий, выделяющихся при обратных мартенситных превращениях, а так же новый механизм хрупкого разрушения ОЦК металлов. Как показано в этой работе, модель находится в полном согласии с экспериментальными фактами: взрывной характер их образования (10⁻⁸с) за времена сравнимые с временами образования мартенсита, процесс протекает в упругой области деформаций, действующие напряжения – трехосное растяжение, стремящееся к гидростатическому.

В работе [2] предложен механизм образования мартенсита под действием облучения в низкоэнергетических каскадах смещений, с энергией ПВА не превышающей 5 кэв, уже при низких дозах реакторного облучения -менее 0.01 сна. Модель объясняет результаты магнитных измерений металла корпусов реакторов типа ВВЭР 1000, являющихся основой ядерной энергетики Украины.

В работе [3] на основе МФДМП предложена новая концепция имитации и прогнозирования

радиационного охрупчивания. Согласно ей, в качестве главного требования выдвигается не достижение подобия дефектной структуры материалов, облученных в реакторах и в ускорителях, а необходимость создания в результате имитационного облучения, деформирования, циклирования и т.д. подобия деформационно-напряженного состояния.

В работе [4] авторы ввели понятие о т.н. «тихом» растрескивании металла корпусов реакторов, как результате зарождения пор по механизму обратных мартенситных превращений с последующим их объединением под действием растягивающих напряжений в зародыши трещин.

В данной работе проанализированы существующие, фактически диффузионные, подходы к зарождению пор на основе т.н. гомогенной и гетерогенной моделей, связанные с вакансионным пересыщением. Суть тезиса о «парадоксе порообразования» состоит в том, что вакансионное пересыщение не может быть причиной зарождения пор при временах повреждаемости не превышающих диффузионные, как при сжимающих, так и при растягивающих напряжениях.

Предложенный оригинальный механизм зарождения пор устраняет сформулированный выше «парадокс порообразования», и показывает возможность повышения радиационной стойкости реакторных материалов, не за счет борьбы с набуханием как таковым, а за счет устранения причин его вызывающих, по аналогии с известной дилеммой: лечить болезнь, или устранить ее причину.

Целью данной работы является анализ эффективности образования вакансий и их комплексов (пор, петель) за счет механизма обратных мартенситных превращений в системах на основе железо-углерод, (в том числе в корпусных сталях атомных реакторов) и оценка энергетических параметров процесса.

ДИФФУЗИОННЫЕ МЕХАНИЗМЫ ЗАРОЖДЕНИЯ ПОР НА ОСНОВЕ РЕФЕРЕНСА

Общепринятые, так называемые, гомогенная и гетерогенная теории описывают процесс зарождение пор с помощью диффузионных механизмов последовательного присоединения вакансий к друг другу под облучением в условиях вакансионной пересыщенности [5]. При этом, источником самой вакансионной пересыщенности служит эффект преференса, связанный с преимущественной адсорбцией междуузельных атомов дислокациями по сравнению с вакансиями [6].

Однако еще в 80-х годах прошлого века было показано, что образование зародышей пор в условиях хаотической коалесценции диффундирующих вакансий является нереалистичным без участия атомов газа [7]. Тот факт, что вакансии сами по себе не приводят к порообразованию, подтвердился и в работах [8,9] где было показано, что и в меди, и в нержавеющей стали, которые были обезгажены перед облучением, порообразование было подавлено.

В ряде работ было подвергнуто сомнению само существование преференса в реальных облучаемых материалах. Так Naudorf [10], проводя тонкие диффузионные эксперименты на металлах показал, что в свободно мигрирующих дефектах содержится одинаковое количество вакансий и интерстиций, не оставив при этом места для преференса. Такое же заключение сделал и Abromeit [11] исследуя структуры, образующиеся в облученных материалах.

Следует остановиться также на вопросе о пространственной локализации мест зарождения пор. Согласно классическим преференциальным механизмам зарождения пор, они должны быть непосредственно связаны с дислокациями. В монографии Черняевой и др. приведено множество примеров нахождения пор у дислокационных линий, в основном, в сильно набухших материалах [5]. Однако, эти примеры характеризуют скорее фазу развития, а не зарождения пористости в интервале температур облучения выше максимума набухания. В этих условиях порообразование начинается при дозах порядка десятков смещений на атом. В условиях «низкотемпературного» (100-200⁰C) облучения поры начинают образовываться в чистых металлах при дозах в тысячи раз ниже. Именно здесь, при пористости сотые доли процента лучше всего наблюдать особенности их зарождения. Такие исследования были проведены в работе [12]. Они показали, что зарождение пор начинается в областях свободных от дислокаций, в бездефектных областях кристалла. По мнению авторов это ставит под сомнение роль преференса в зарождении пор. Этот результат соответствует предложенной авторами модели зарождения пор в идеальных областях кристалла за счет обратных мартенситных превращений [1].

Возвращаясь к проблеме порообразования в рамках представлений о дислокационном преференсе, отметим еще один важный момент. Дело в том, что наряду с вакансиями к зародышам пор идет огромный поток междуузельных атомов. Учет этого обстоятельства приводит к тому, что зарождение пор может иметь место лишь при значениях дислокационного преференса выше 10% [13]. Таким образом, если верны общепринятые значения преференса на уровне 1-2 %, то возникновение вакансионных пор под облучением, по мнению авторов этой работы- невозможно.

Еще одним фактором, снижающим вероятность работы дислокационного преференса является образование атмосфер из примесей на дислокациях. Norris [14] показал, что концентрация примесей в облученном материале на уровне 0,02 может полностью подавить преференс через влияние на упругое поле дислокации.

Следует остановиться еще на одном важном аспекте взаимодействия точечных дефектов с дислокациями.

Дело в том, что поглощение дефектов дислокациями происходит на ступеньках и порогах. Энергия образования порога напрямую связана с шириной расщепления дислокации, т.е. с ее энергией дефекта упаковки. В ряде работ, на целом ряде материалов, удалось показать [15,16], что облучение, газообразные продукты ядерных реакций и, в частности, гелий могут приводить к значительному увеличению расщепления дислокаций и снижению энергии дефекта упаковки. Таким образом, под облучением может значительно затрудняться процесс поглощения точечных дефектов за счет трудности с образованием порогов. Трудность зарождения порогов, и более прямые (по сравнению с исходной структурой) дислокации наблюдались в работах [17,18].

Таким образом, и существование преференса, и общепринятый механизм образования вакансионных пор в условиях вакансионной пересыщенности в реальных облучаемых сплавах находится под большим сомнением.

РОЛЬ ВАКАНСИЙ В РАЗРУШЕНИИ МАТЕРИАЛОВ

Концентрация неравновесных вакансий в зависимости от напряжения и температуры в локальном объеме может быть найдена из формулы [19]:

$$C = C_0 \exp(\sigma_n V_a / kT),$$

где σ_n (или просто P – давление) и T – соответственно, напряжение и температура, C_0 – равновесная концентрация вакансий в ненагруженном кристалле, V_a – атомный объем, k – постоянная Больцмана. Для области сжатия следует брать $(+\sigma_n)$, для растяжения – $(-\sigma_n)$. Следовательно, в металлах и сплавах знак действующих внутренних гидростатических напряжений определяется состоянием вакансионной подсистемы: в любой системе с образованием в ней вакансионного пересыщения действует гидростатическое сжатие, а если концентрация вакансий ниже равновесного уровня, – возникает гидростатическое растяжение.

Известно, что гидростатическое сжатие подавляет порообразование [19], т.е. вакансионное пересыщение налагает запрет на образование вакансионных комплексов. В условиях растяжения вакансионная недостаточность, в соответствии с классическими теориями [5,20] также не позволяет образовываться комплексам. И в том и в другом случае сама вакансионная подсистема налагает запрет на диффузионный механизм образования пор. В этом и заключается «парадокс» порообразования.

Тем не менее, хрупкое разрушение металлов (т.е. разрушение без пластической деформации, куда следует относить и образование пор и микротрещин), наблюдается в условиях действия именно всесторонних растягивающих напряжений, т.е. в условиях вакансионной недосыщенности и, следовательно, в противоречии с существующими теориями.

Характерной особенностью механизмов порообразования является его «взрывной» характер, получивший свое название благодаря экспериментальному определению времен зарождения пор и микротрещин в процессе деформации, составляющих порядка 10^{-6} с [20]. Этот факт, по мнению авторов, является одним из главных аргументов против гомогенного механизма их зарождения. Образование зародышей пор (трещин) размером 0.01-0.1 мкм за такие времена требует мгновенного объединения тысяч вакансий, которым неоткуда взяться (в соответствующих объемах материалов) даже при максимально возможных их концентрациях, будь то закалка, облучение, или интенсивная деформация. Во всех указанных процессах предельная концентрация вакансий в металлах не превышает 10^{-3} .

Существование всех этих факторов приводит к мысли об альтернативных механизмах зарождения пор в облучаемых материалах.

На рис.1 представлена петля гистерезиса $\gamma \rightleftharpoons \alpha$ фазовых превращений, построенная для системы железо-углерод [1]. В верхнем и нижнем углах петли изображены по два характерных силовых вектора σ_t и σ_{min} , каждый из которых отвечает напряжениям чистого сдвига и минимальным напряжениям образования мартенсита соответственно. Если верхний угол петли описывает процессы прямых мартенситных превращений, то нижний – отвечает за обратные превращения.

Поскольку петля обладает угловой симметрией (поворот петли вокруг центральной оси на 180° приводит к полному совпадению всех ее точек), то соответствующие силовые вектора равновелики, но в каждой паре $\sigma_t > \sigma_{min}$. Это означает, что как только в кристалле начинает формироваться тензор трехосных сжимающих или растягивающих напряжений, так сразу возникают условия, подавляющие пластическую деформацию и облегчающие мартенситные превращения.

Плотность упаковки α и γ фаз железа различна. Поэтому фазовые γ - α (в том числе и мартенситные) превращения протекают с изменением объема. Объем фазового несоответствия может быть нормирован на объем вакансии. В процессе обратного мартенситного превращения этот объем должен выделяться в виде вакансий или их комплексов. Поскольку образование мартенсита – процесс коллективный, то и объем может выделяться в виде вакансионного комплекса.

Если в общепринятых подходах к эволюции дефектной структуры, например, под облучением базовым событием является выбивание атомов из их позиций в решетке, то для образования вакансии в процессе МП достаточно смещения группы атомов на долю параметра решетки. Такой подход, позволяет отказаться от диффузионных [20] и дислокационных [21] моделей зарождения пор и трещин, и оставляет надежду на совершенно естественный способ образования зародышей трещин и пор – через коллапс упругих деформаций растяжения с созданием локализованных состояний.

Представления о вакансиях только как о точечных дефектах обедняет их природу и создает проблемы, например, при объяснении процессов зарождения вакансионных пор и трещин. На самом деле, вакансии – составная часть свободного объема кристаллической решетки. При этом вакансии может находиться как в локализованном (точечный дефект и сжимающие напряжения), так и делокализованном («размазанный» дефект и растягивающие напряжения) состоянии.

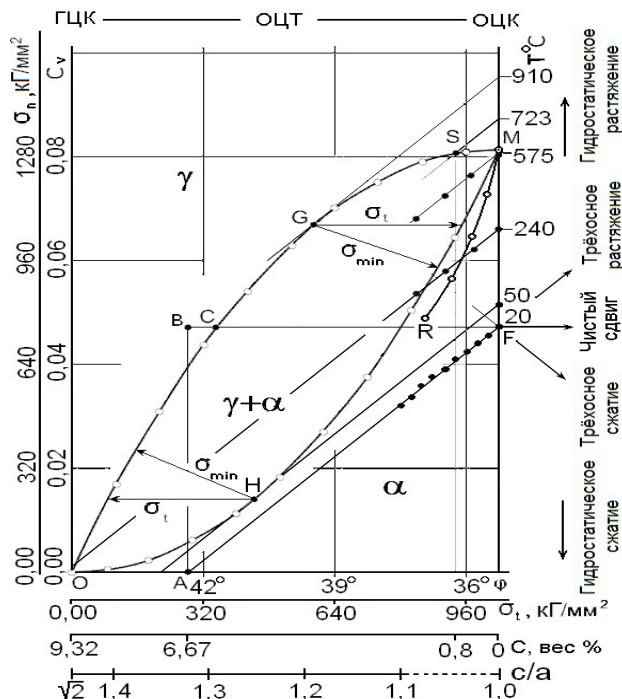


Рис.1. Петля гистерезиса ГЦК – ОЦК фазовых превращений в чистом железе[1].

О дуализме вакансий при криогенных температурах и возможности существования «размазанных» вакансионных дефектов (дефектонов) впервые было сказано в работе [22], при обычных температурах – декларировано в нашей работе [1].

Образование вакансии неразрывно связано с принципом постоянства плотности внутренней энергии [23]. Указанный принцип заключается в том, что в приращенном объеме при расширении конденсированных систем вследствие нагревания должно выполняться условие: плотность внутренней энергии p_0 остается постоянной.

$$p_0 = Q_c / V_0,$$

где Q_c – энергия сублимации, V_0 – объем моля вещества при абсолютном нуле.

В соответствии с этим принципом, конечным состоянием эволюции, любой неравновесной системы, поглощающей энергию извне (в частности, облучаемого кристалла), должно быть всестороннее растяжение.

Дуализм вакансий позволяет: во-первых - всегда поддерживать минимальной их концентрацию в виде точечных дефектов в металлах, во-вторых - изменять объем с изменением внутренней энергии.

С целью выяснения природы зарождения пор и трещин в неравновесных системах (закалка, облучение, деформирование) изучены механизмы образования свободного объема за счет бездиффузионных фазовых превращений мартенситного типа.

То, что образование вакансионных пор и трещин по механизму МП энергетически более выгодно, чем диффузионно, подтверждают элементарные расчеты энергии образования вакансий в железе. Такие расчеты были проведены с использованием известных данных по изменению тетрагональности мартенсита в закаленных углеродистых сталях [24] и диаграммы мартенситных фазовых превращений.

Анализ полученных результатов, показал, что объемы ячеек аустенита и мартенсита увеличиваются с ростом содержания углерода в железе. Однако, объем фазового несоответствия (разность объемов аустенита и мартенсита) ΔV элементарной ячейки не зависит от содержания углерода в железе и составляет в среднем $1,015 \text{ \AA}^3$. Постоянное значение ΔV указывает на то, что существует неизменная доля объема фазового несоответствия, которая обусловлена только вакансиями.

В аустенитной фазе железа углерод не формирует тетрагональных искажений, поскольку его распределение в кристаллической решетке ни как не связано с упорядочением. Поэтому образование тетрагональных искажений и объемные изменения в аустените до превращения определяются только вакансиями, усредненная концентрация которых составляет $\approx 4,2$ об.%. (Концентрация вакансий определяется как $c_v = \Delta V / V$, где $\Delta V \approx 1,015 \text{ \AA}^3$, а V – усредненное значение объема элементарной ячейки мартенсита $V \approx 24,14 \text{ \AA}^3$).

Понятно, что такая концентрация вакансий не может быть одновременно достигнута во всем объеме материала, но локально и в плоскости образования мартенсита это вполне реально. Именно анизотропия распределения вакансий в различных плоскостях порождает тетрагональные искажения в изотропной кристаллической решетке. Об анизотропном распределении вакансий свидетельствует сама форма мартенситных кристаллов.

Таким образом, концентрация вакансий достигает максимальных значений в плотно упакованных плоскостях, что приводит систему (локально) в одно из экстремальных состояний ее внутренней энергии и последующему мартенситному превращению.

На рис.2 представлены: петля гистерезиса фазовых ГЦК-ОЦК превращений, а также графики изменения внутренней энергии вдоль верхней и нижней ветвей петли гистерезиса и ее первой производной (которая обращается в экстремуме в нуль) для идеального кристалла железа в процессе $\gamma \rightleftharpoons \alpha$ превращений. Графики демонстрируют, что внутренняя энергия, изменяясь вдоль петли, имеет два экстремума, которым отвечают напряжения около 328 и 968 кг/мм² с тетрагональностью c/a порядка 1,313 (отклонение от 1,4142) для аустенита и 1,106 (отклонение от 1) для феррита, соответственно.

Указанным тетрагональным искажениям отвечают значения относительного объема $\Delta V/V$ в среднем равное 0,021. Определенное из экспериментальных данных значение относительного объема при прямом превращении (закалка) $\Delta V/V = 0,042$. Следовательно, система окажется в экстремуме, используя примерно половину образовавшихся при закалке, вакансий. Вторая их половина уйдет на создание тензора напряжений способного реализовать мартенситное превращение.

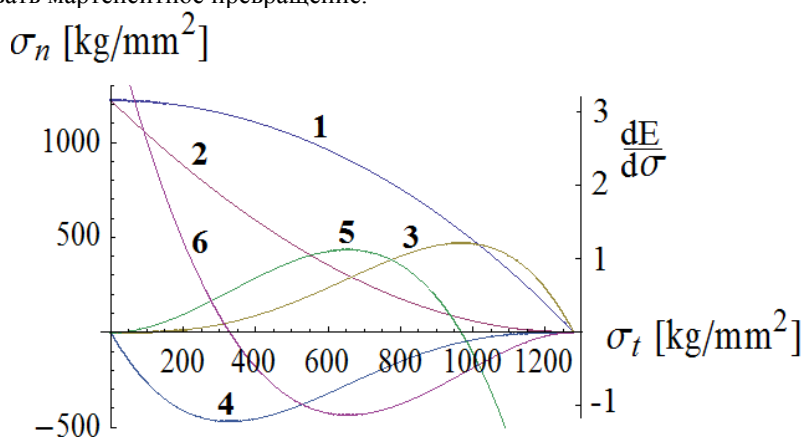


Рис.2. Петля гистерезиса - кривые 1-2. Графики, которые демонстрируют: характер изменения энергии (3,4) и производной $dE/d\sigma$ (5,6). Положения экстремумов на петле гистерезиса определяет условие $(\partial E/\partial \sigma) = 0$.

Зная объем вакансии, легко подсчитать число ячеек, мартенситное превращение в которых способно породить одну вакансию, а вычислив изменение энергии одной элементарной ячейки за счет изменения ее объема, подсчитать энергию образования одной вакансии.

Определим изменение энергии элементарной ОЦТ ячейки в результате мартенситного фазового превращения как:

$$\Delta E^* = K(\Delta V/V)^2,$$

где $K=16,8 \cdot 10^3 \text{ кг/мм}^2$ – модуль объемного сжатия, $\Delta V/V$ - изменение относительного объема аустенита при превращении его в мартенсит равное 0,042.

Расчет дает значение изменения энергии одной ОЦТ ячейки кристалла $\Delta E^* \approx 0,0036 \text{ эВ}$.

Полагая, что объем вакансии равен объему атома железа $V_v \approx 12 \text{ \AA}^3$, легко вычислить энергию образования одной вакансии при мартенситных превращениях в углеродистых сталях. Полученное значение $E_v \approx 0,04 \text{ эВ}$ в 30 раз меньше энергии образования вакансии по механизмам Шоттки или Френкеля. Теоретические оценки этих энергий для железа находятся в пределах $1,1 \div 1,45 \text{ эВ}$ [5]. Энергия образования вакансии, возникающей при МП - $E_v \approx 0,04 \text{ эВ}$, является величиной постоянной и не зависит от размера поры или трещины.

Таким образом, простейший расчет показывает, что мартенситное превращение приблизительно 11-ти элементарных ячеек ОЦТ искаженной кристаллической решетки порождает (или поглощает) свободный объем равный объему одной вакансии (в виде точечного дефекта объемом $V_v = 12 \text{ \AA}^3$) под действием гидростатических напряжений. Иначе следует понимать, что растворенная в объеме вакансии оказывается равномерно «размазанной» приблизительно по 11-и элементарным ячейкам.

Диаграмма ГЦК-ОЦК мартенситных фазовых превращений и механизмы образования мартенсита, использованные для ее построения, позволяют утверждать, что образование петель дислокаций вакансионного типа в феррите не нуждается в диффузии вакансий. Энергетически более выгодно их образование за счет сдвиговых деформаций, возникающих при образовании мартенсита. В этом случае образующийся мартенсит – фаза более плотная, чем α -матрица и прямо при сдвиге над объемом превращения возникают растяжения подобные тем, которые создает петля дислокации вакансионного типа.

Считая, межатомное расстояние порядка 3Å , можно ожидать, что мартенситная прослойка толщиной $30\div 35\text{Å}$ породит полную петлю дислокации. Энергия образования такой петли с радиусом 6Å , состоящей приблизительно из 40 вакансий не превысит $1,6\text{ эВ}$, что намного ниже энергии образования петель того же размера, полученной в рамках классической модели упругого континуума ($30\div 40\text{ эВ}$) [25].

Зная критический радиус зародыша вакансионной поры, можно оценить размер мартенситной фазы способной его образовать. Следуя литературным экспериментальным данным [25] полагаем, что радиус стабильного зародыша равен $\approx 6\text{Å}$. Тогда, объем поры равен $\approx 905\text{Å}^3$, число вакансий, его образующих – 75, а объем мартенситного кристалла, который порождает такую пору $\approx 21720\text{Å}^3$. Энергия образования поры из такого числа вакансий $E_p = 0,04 \times 75 = 3\text{ эВ}$. Это значение на порядок ниже значения пороговой энергии диффузионного образования поры, которая оценивается в $30 \div 35\text{ эВ}$ [25]. Чтобы преодолеть этот порог диффузионно, такая пора должна образоваться флуктуационно из 75 вакансий в виде точечных дефектов, что практически не реально [26]. Механизм образования пор на мартенситных фазовых превращениях позволяет легко преодолеть энергетический барьер в 3 эВ за счет бездиффузионного коллапса упругих деформаций растяжения.

Считается, что для полного разрыва межатомных связей (образование трещины) достаточно удалить атомы на расстояние равное двум параметрам кристаллической решетки. Обратный переход с образованием мартенситной пластины толщиной всего в $70\div 75\text{Å}$ приведет к тому, что такая трещина возникнет вдоль всей межфазной границы.

Полученные в работе результаты находят экспериментальное подтверждение при изучении структурно фазовой эволюции корпусных сталей. Исследования показали наличие ассоциаций нано пор и частиц ГЦК фазовых выделений на медной основе в облученных корпусных сталях (ОЦК) и модельных системах, образовавшихся по механизму бездиффузионных превращений мартенситного типа [27,28]. Естественно, что этот процесс должен приводить к эффекту размагничивания корпусов, что и наблюдается экспериментально. Например, в работе [29], выполненной на корпусной стали 15X2НМФА реакторов ВВЭР 1000, облученной до дозы менее $0,1\text{ с.н.а}$ показано, что остаточная намагниченность уменьшается после облучения на 48%. Если представленный подход является правильным, то в сталях аустенитного класса должна наблюдаться противоположная картина: прямое мартенситное превращение должно приводить к увеличению намагниченности стали. Проведены нами исследования магнитных характеристик реакторной стали ОХ16Н15МЗБ облученной до того же уровня повреждений ($10^2\div 10^1\text{ с.н.а}$), что и корпусные стали показали, что происходит существенное, в разы, увеличение остаточной намагниченности в результате облучения [30].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С целью выяснения природы зарождения пор и трещин в неравновесных системах (закалка, облучение, деформирование) изучены механизмы образования свободного объема за счет бездиффузионных фазовых превращений мартенситного типа. Показано, что упругая объемная деформация 11-ти элементарных ОЦТ ячеек железа на $4,2\%$ приводит к образованию одной структурной вакансии.

Полная объемная деформация является суммой примерно равных частей в $2,1\%$: одна из них отвечает за объемные изменения за счет сдвига, а вторая за объемные изменения под действием гидростатики.

Определена энергия активации образования вакансий по этому механизму, составившая приблизительно $0,04\text{ эВ}$, что в тридцать раз ниже, чем при образовании вакансий по механизмам Шоттки или Френкеля.

Определена энергия образования вакансионной поры критического размера (радиус 6Å) приблизительно равная 3 эВ .

Показано, что мартенситная прослойка толщиной $30\div 35\text{Å}$, возникающая при обратном превращении, порождает петлю дислокации вакансионного типа. Если толщина мартенситной прослойки оказывается порядка $70\div 75\text{Å}$, в металле образуется трещина или пора. Из этого следует, что мощность мартенситной прослойки как источника вакансий (или междоузлий) определяется ее толщиной.

Представленные в работе данные свидетельствуют об энергетической выгоде образования зародышей пор по механизму обратных мартенситных превращений по сравнению с диффузионным механизмом, в котором энергия образования поры критического размера составляет десятки электрон-вольт.

Особо следует подчеркнуть, что мартенситные фазовые превращения – не только механизм образования пор и трещин. Они являются также эффективным источником дислокационных петель как вакансионного, так и междоузельного типа.

Фактором, определяющим степень охрупчивания любой неравновесной системы, является рост тетрагональных искажений кристаллической решетки в условиях формирования тензора всесторонних растягивающих напряжений. Любая ОЦК система окажется в хрупком состоянии, когда тетрагональные искажения в ней достигнут экстремального значения. Наличие вязкой составляющей в хрупком разрушении объясняется «локализацией» объема, в котором формируется тензор гидростатического растяжения. Чем больше объем превращения, тем меньше вязкая составляющая.

Указанная выше «локализация» коренным образом отличается от той, которая используется в так называемом «локальном подходе» [20], поскольку связана с локализацией хрупкого разрушения, а не с

«локализацией пластической деформации». Образование петли дислокации вакансионного типа приводит к локальному росту свободного объема и увеличению внутренней энергии. Ее значение в окрестности петли стремится к Q_c . Образование второго слоя вакансий при толщине мартенситной прослойки больше 70\AA приводит к тому, что отношение E/V в этом локализованном объеме становится больше Q_c/V_0 и кристалл локально разрушается, образуя пору или трещину.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Laptev I.N., Parkhomenko A.A. Fazovye prevrascheniya i hrupkost' sistemy «zhelezo-vakansii» v poljah uprugih naprjazhenij // Uspehi fiziki metallov. – 2010. – T.11, vyp.1. – С.5-50.
2. Laptev I.N., Parkhomenko A.A. O vozmozhnosti obrazovaniya martensita v austenitnykh nerzhavajuwih staljah pod oblucheniem // Voprosy atomnoj nauki i tehniki. Serija: «Fizika radiacionnykh povrezhdenij i radiacionnoe materialovedenie». – 2010. – No.4(82). – С.143.
3. Laptev I.N., Parkhomenko A.A., Neklyudov I.M. The new approach to the description of phase transformation and fragility of strongly nonequilibrium systems // The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”. – 2011. – No.955. – P.98-107.
4. Neklyudov I.M., Laptev I.N., Parkhomenko A.A., Voyevodin V.N., Ozhigov L.S., Bryk V.V. Kooperativnie mody radiatsionnogo okhrupchivaniya // Voprosy atomnoj nauki i tehniki. Serija: «Fizika radiacionnykh povrezhdenij i radiacionnoe materialovedenie». – 2012. – No.5 (81). – S.51-61.
5. Cherniaeva T.P., Zelensky V.F., Neklyudov I.M. Radiation defects and swelling of materials. - Kiev: Naukova Dumka, 1988.- 296p.
6. Brailsford A.D., Bullough R. Void growth and its relation to intrinsic point defects properties // Journal of Nuclear Materials - 1978. – Vol. 69/70. – P.434-450.
7. Singh B.N., Foreman A.J.E. An assessment of void nucleation by gas atoms during irradiation // Journal of Nuclear Materials. – 1981. – Vol.103. – P.1469-1471.
8. Glowinsky L.D., Fiche C. Void nucleation and growth in copper during irradiation // Journal of Nuclear Materials. – 1976. – Vol.61. – P.29-37.
9. Sindelar L.R., Dodd R.A., Kulcinsky G.L. Damage analysis and fundamental Studies // Quarterly Progress Report. – 1985. – DOE/ER -0046/21. – P.148-159.
10. Naundorf V. On origin of freely migrating defects in ion and neutron irradiated metals // Journal of Nuclear Materials. – 1991. – Vol.182. – P.254-261.
11. Abromeit C. Structure of irradiated metals // Int. J. Mod. Phys. – 1989. – Vol.B3. – P.1301-1319.
12. Singh B.N., Zinkle S.J. Defect accumulation in pure fcc metals in the transient regime: a review // Journal of Nuclear Materials. – 1993. – Vol.206. – P.212-229.
13. Golubov S.I., Kaizepkaya E.N. Vzaimodeistvie vakansionnykh skopleniy s tochechnymi defektami // EVM i modelirovanie defektov v kristalakh. – Leningrad: LIYAF. – 1982. – P.76-78.
14. Norris D.I.R. Defect evolution in metals during neutron irradiation // AERE Report. – 1975. – R-7934. – P.134-150.
15. Parkhomenko O.O. K voprosu o vliyaniy oblucheniya na energiyu defekta upakovki // Nauchnie vedomosti (Belgorod State University). – 1998. – No.1(6). – P.75-80.
16. Gerasimenko V.I., Mikhailovsky I.M., Neklyudov I.M., Parkhomenko O.O., Velikodnaya O.A. Changes of the grain boundary structure induced by helium // Tech.Phys. – 1998. – Vol.43. – P.803-808.
17. Shimomura Y., Mukouda I. Defect structures in irradiated copper // Journal of Nuclear Materials. – 2000. – Vol.283-287. – P.249-257.
18. Porolo S.I., Konobeev Yu.V., Kruglov A.S. Stress-effect dislocation development of stainless steel during neutron irradiation / Proc.of 19-th Int.Conf. “Effects Radiation on Materials”. – USA, PA, 2000. – P.850-861.
19. Geguzin Ja.E. Diffuzionnaya zona. – M.: Nauka, 1979. – 343s.
20. Chermenskoy P.G., Slezov V.V., Betehtin V.I. Pory v tverdom tele. – M.: Energoatomizdat, 1990. – 376s.
21. Kotrechko S.A., Meshkov Yu.Ja. Predelnaya prochnost. – Kiev: Naukova Dumka, 2008. – 293s.
22. Lifshitz I.M., Andreev A.F. Kvantovaya teoriya defektov v kristalakh // JETP. – 1969. – Vol.56. – P.2057-2068.
23. Meshkov Yu.Ja. Prinzip sohraneniya plotnosti vnutrenney energii // Metallofizika i noveishie tehnologii. – 1996. – Vol.18. – No.5. – S.60-76.
24. Guliaev A.P. Metallovedenie. – M.: Oborongiz, 1963. – 185s.
25. Cuddy L.J., Manahan M.P., Brauer G., Martinko J. Ductile fracture mechanisms in reactor pressure vessel steel / Proc.17 Int.Conf. “Effects Radiation on Materials”, ASTM STP 1270. – 1996. – P.637-659.
26. Si-Ahmed A., Wolfer W.G. Effects Radiation on Materials, ASTM STP 870. – 1982. – P.1008-1017.
27. Othen P., Jenkins M.L., Smith G., Phythian W.J. Transmission electron microscopy investigation of the structure of copper precipitates in Fe-Cu and Fe-Cu-Ni // Philosophical Magazine Letters. – 1991. – Vol.64. – P.383-389.
28. Lambrecht M., Almazouzi A. Positron annihilation study of neutron irradiated model alloys and of a reactor pressure vessel steel // J.Nucl. Mater. – 2009. – Vol.385. – P.334-338.
29. Gorkunov E.S., Nichiporuk A.P., Somova V.M., Levit V.I. O vozmozhnosti kontrolya strukturnogo sostoyaniya obluchenoj korpusnoy stali 15X2HMΦA magnitnymi metodami // Defektoskopia. – 1993. – No.7. – P.62-66.
30. Azhazha V.M., Desnenko V.A., Ozhigov L.S., Parkhomenko A.A., Svechkarev V.N., Fedorenko A.V. Izmernenie magnitnogo sostoyaniya austenitnykh staley pri obluchenii // Proc. XVII Int.Conf. “Physics of the radiation phenomena and reactor material science” Ukraine (Alushta, 3-7.09.2006.), Kharkov. – 2006. – P.121-122.