

سَنُرِيهِمْ ءَايَٰتِنَا فِى ٱلْءَافَاقِ وَفِىٓ أَنفُسِهِمْ
حَتَّىٰ يَتَبَيَّنَ لَهُمْ أَنَّهُ ٱلْحَقُّ

به زودی نشانه‌های خود را در آفاق و در وجود خودشان
به آنها نشان خواهیم داد تا آشکار شوند که او حق است

سوره فصلت (۵۳)

مبانی علم مواد در اثر تابش

ترجمه

حمزه فراتی راد

محمد قنادی مراغه

(عضو هیئت علمی پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای)

Gary S. Was، گری استیون واس ۱۹۵۳- م
م. حمزه فراتی راد، ۱۳۶۲، محمد قنادی مراغه، ۱۳۳۱.
مبانی علم مواد در اثر تابش/ [تالیف گری استیون واس]:
مترجمین: حمزه فراتی راد، محمد قنادی مراغه
تهران: پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، ۱۳۹۳.
۱۲۲۱ ص.: مصور، جدول، نمودار.
ISBN: 978-600-7414-02-6
فهرست نویسی بر اساس اطلاعات فیپا
عنوان اصلی:
۱. کتابنامه ۲. فلزها، اثر دما ۳. آلیاژها، اثر دما
پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای
رده بندی کنگره: ۱۳۹۳ ۲ م ۲ و/TA۴۶۰
رده بندی دیویی: ۶۲۰/۱۶۲۸
شماره کتابشناسی ملی: ۳۵۴۶۵۵۹

نام کتاب: مبانی علم مواد در اثر تابش
مترجمین: حمزه فراتی راد، محمد قنادی مراغه
ویراستار ادبی: مهدیه‌السادات عامل ابراهیمی
ناظر فنی: فریبا علی اکبری
ویرایش صفحه بندی: شادی معماری‌آذر
تهیه و تنظیم جلد: مهرک الهامی
تیراژ: ۱۰۰۰ جلد
چاپ: ۱۳۹۳
نوبت چاپ: اول
قیمت: ۲۵۰۰۰۰ریال
چاپ و صحافی: پیام رسان فردا، تلفن: ۸۸۷۲۸۰۰۲
ناشر: پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای
شابک: ۶-۰۲-۷۴۱۴ -۶۰۰- ۹۷۸
کلیه حقوق چاپ و انتشار این اثر متعلق به پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای می‌باشد.

پیشگفتار

هدف این کتاب تهیه‌ی اصول و مبانی لازم برای فهم نظریه‌ها و سازوکارهای اثرگذاری تابش بر روی فلزات و آلیاژهاست که شامل سه بخش است که هر بخش از چندین فصل تشکیل شده است و در مجموع یک تصویر کلی از نحوه‌ی برهم‌کنش پرتو و تغییر ساختار و ویژگی‌های فلزات فراهم می‌کند. بخش یک شامل پنج فصل است و روی فرایند آسیب‌شناسی تمرکز می‌کند و فرمول‌بندی‌هایی را برای پیش‌بینی مقدار و آرایش فضایی آسیب تولید شده به‌وسیله‌ی بمباران ذرات پیشنهاد می‌کند. فصل یک برهم‌کنش‌های بین ذرات را مورد بحث قرار می‌دهد که منجر به انتقال انرژی از ذره‌ی فرودی به اتم‌های هدف می‌شود. فصل دوم بر روی تعیین تعداد جابه‌جایی‌های تولید شده به‌وسیله‌ی ذرات بمباران کننده تمرکز می‌کند و فصل سوم آرایش فضای عیوب حاصله را تشریح می‌کند. فصل چهار پیش‌زمینه‌ای در مورد غلظت تعادلی عیوب نقطه‌ای و نفوذ آن‌ها را فراهم می‌کند. فصل پنج نفوذ و واکنش‌های بین عیوب نقطه‌ای تحت پرتودهی را مورد بحث قرار می‌دهد که مبنای تمام اثرات قابل مشاهده است.

آسیب تابشی اگرچه حالت ماده‌ی پرتو دیده را تشریح می‌کند؛ اما اثرات تابش، مرتبط با رفتار عیب در جامد بعد از تشکیل است. بخش دوم (فصل‌های ۶ تا ۱۱) اثرات فیزیکی پرتودهی بر روی فلزات را مورد بررسی قرار می‌دهد. فصل شش جدایش القایی تابشی را که نتیجه‌ای مستقیم از افزایش نفوذ تحت پرتودهی است، مورد توجه قرار می‌دهد. فصل‌های هفت و هشت جوانه‌زنی و رشد حلقه‌های

نابجایی و حفره‌ها را بررسی می‌کند. فصل نهم پایداری فازهای تحت پرتودهی و رسوب‌گذاری القایی تابشی و انحلال رسوبات را شرح می‌دهد. فصل ده اثرات پرتودهی را به اثرات منحصر به فرد ناشی از پرتودهی یونی مانند تغییر ساختار، کندوپاش، تورق و غیره بسط می‌دهد. در پایان این بخش، فصل یازده کاربرد پرتودهی یونی برای شبیه‌سازی اثرات پرتودهی نوترونی را توضیح می‌دهد.

اثرات مکانیکی آسیب‌شناسی (بخش سوم) با اعمال تنش از اثرات فیزیکی متمایز می‌شود. سخت‌گردانی و تغییر شکل آلیاژها تحت پرتودهی در فصل دوازده مورد بحث قرار گرفته است. اثر پرتودهی بر روی جوانه‌زنی ترک و گسترش ناشی از بارگذاری استاتیک یا خستگی در فصل سیزده بررسی شده است. تغییر شکل خزشی و رشد در فصل چهارده شرح داده شده است. پرتودهی هم‌چنین یک اثر قابل توجهی را روی خوردگی و ترک‌خوردگی تنشی دارد و ثابت شده است که این مدهای تخریب محدودیت‌هایی را برای طراحی بسیاری از رآکتورها ایجاد می‌کند. فصل پانزده اثرات پرتودهی را با فرایندهای خوردگی و ترک‌خوردگی تنشی ترکیب می‌کند تا نحوه‌ی آسیب آلیاژ تحت پرتودهی و شرایط محیطی را بررسی کنند.

هر فصل از مثال‌ها و شکل‌هایی از اثرات پرتودهی و محاسباتی برای تعیین و تشریح مشاهدات تشکیل و در پایان مسایلی برای تقویت اهداف اصلی فصل ارایه شده است و فهم خواننده در مورد هر موضوع را به چالش می‌کشد. در مجموع هر فصل بیان جامعی از اثرات پرتودهی بر روی فلزات و آلیاژها را ارایه می‌دهد.

تدریس مطالب ارایه شده در این کتاب دو ترم تحصیلی دانشگاهی را نیاز دارد. بسیاری از موضوعات ارایه شده نیاز به دانش پایه‌ای در زمینه‌هایی مانند ترمودینامیک، الاستیسیته و پلاستیسیته، سینتیک جامدات، ساختار کریستالی، تغییر شکل، شکست، خوردگی و ترک‌خوردگی تنشی دارد. مطالب این کتاب پیش‌زمینه‌ی لازم برای هر یک از این موضوعات را تا حد خوبی ارایه می‌دهد و در مواردی که خواننده اطلاعات بیش‌تری را نیاز دارد مراجع مناسبی را معرفی می‌کند. اگرچه فصل‌ها به صورت یک‌پارچه ارایه شدند و هرکدام براساس مجموع مطالب ارایه شده در فصل‌های قبل تدوین شده است؛ ولی این امکان وجود دارد که خواننده فصل را برای یک موضوع خاص انتخاب کند.

در پایان بر خود لازم می‌دانیم که از افراد ذیل آقایان دکتر احمد نوزاد، دکتر بابک خدادوست، دکتر سید حسن نبوی، دکتر حمید رضا نجفی، دکتر هادی عادلخانی، دکتر حشمت اللّه دهکردی، دکتر محسن اسدی، دکتر اکبر حریری، دکتر علی پذیرنده، مهندس امیر شیردل و خانم دکتر حاج اسماعیل‌بیگی که در ترجمه‌ی این اثر یاری‌رسان ما بودند صمیمانه سپاس‌گزاری کنیم.

کتاب پیش‌رو نتیجه‌ی بیش از دو سال تلاش و پی‌گیری مستمر مترجمین است که یقیناً هر اثری با کاستی‌هایی همراه است. لذا از تمامی صاحب نظران و دانشجویان تقاضا داریم هرگونه اشکال و کمبودی را از طریق دبیرخانه‌ی شورای انتشارات پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای به مترجمین اطلاع دهند.

حمزه فراتی راد

محمد قنادی مراغه

تیر ۹۳

مقدمه

تغییرات فیزیکی که به علت تابش در مواد ایجاد می‌شوند، قابل توجه هستند. ولی کشف این حقیقت که پرتودهی چگونه یک‌پارچگی ساختاری را تغییر می‌دهد به اثرات مکانیکی تابش بر می‌گردد. این اثرات مکانیکی تنها در کاربردهای تنشی است که خود را آشکار می‌سازند. در واقع آلیاژها پس از تابش رفتاری از خود نشان می‌دهند که بسیار متفاوت‌تر از آن‌چه است که قبلاً بدون تابش نشان می‌دادند. برای مثال انرژی ضربه‌ی فولاد پرتودهی شده به طور قابل توجهی کاهش می‌یابد. برای فولادهایی که پرتودهی نشده‌اند، انرژی جذب شده به شدت تابع دما است. در دماهای پایین، انرژی بسیار کمی جذب شده و فولاد بسیار شکننده است ولی با افزایش دما ظرفیت جذب انرژی به طور چشم‌گیری افزایش می‌یابد. تابش‌دهی نوترونی به وضوح می‌تواند موجب کاهش کرنش و افزایش چند برابر استحکام فولاد شود. نتایج حاکی از پنج برابر شدن استحکام و کاهش چقرمگی بیش‌تر از ده برابری می‌شود. علاوه بر این پرتودهی می‌تواند سازوکار تغییر شکل مواد در دماهای بالا را تحت تأثیر قرار دهد. به دلیل شکنندگی ناشی از پرتودهی تحت نیروی ثابت، اتلاف کاملی از استحکام خزش مشاهده می‌شود.

هم‌چنین، پرتودهی با شار نوترون بیش‌تر از $5\times10^{20}\ n/cm^2$ (انرژی> ۱ MeV)، باعث تسریع شکست بین دانه‌ای در آلیاژهای آستنیتی پایه‌ی آهن و پایه‌ی نیکل در رآکتورهای آب سبک می‌شود. این پدیده شکست تمام آلیاژهای آستنیتی که در رآکتورهای آبی مختلف استفاده می‌شوند را تحت تأثیر قرار می‌دهد. هر یک از این اثرات به وضوح نتیجه‌ی عمیقی در یک‌پارچگی و بی‌عیب بودن اجزای رآکتور خواهند داشت. دانستن سازوکار وقوع این عوامل، کلیدی برای طراحی پیرامون اثرات مضر یا توسعه‌ی آلیاژهای جدیدی است که در مقابل پرتودهی مقاومت بیش‌تری از خود نشان می‌دهند. تمامی این اثرات معمولاً ارتباط مشترکی با یک‌دیگر دارند و منجر به ایجاد عیوبی مانند تهی‌جایی‌ها و

ترک‌های مجزا، خوشه‌های تهی‌جایی و ترک، حلقه‌ها و خطوط نابجایی، خلل و فرج‌ها و تخلخل‌ها می‌شوند.

خواننده باید همواره این عیوب را به خاطر بسپارد زیرا پس از تشریح اثرات فیزیکی آسیب‌های پرتودهی، اثرات مکانیکی آن‌ها توضیح داده می‌شود.

از آن‌جایی که آسیب تابشی اساس فهم اثرات پرتودهی است ابتدا این پدیده توضیح داده می‌شود. سپس با تعیین کمیت اندازه‌ی آسیب پرتودهی، بیان فیزیکی فرایند برهم‌کنش گسترش داده می‌شود. در تعیین کمیت فرایند جابه‌جایی اتم‌ها، نکته‌ی حایز اهمیت، توصیف کمّی تعداد تهی‌جایی‌ها و ترک‌هایی است که براثر ذره‌ی پرتاب شونده به وجود می‌آید. بجز این مورد عامل دیگری برای فهم مقدار آسیب پرتودهی وجود ندارد. اهمیت تعیین اثر پرتودهی بر حسب تولید عیوب در فصل‌های ۲ و ۳ بررسی و با مثالی ساده نشان داده شده است. برای یک اتم، مقدار جابه‌جایی‌هایی که با شار نوترون ایجاد می‌شود، تابع پیچیده‌ای از انرژی وابسته به آن شار است. آن‌چه که در نمودار بالایی شکل I ـ۱ نشان داده شده است، بیانگر این است که وابستگی استحکام تسلیم فولاد ۳۱۶ به شار نوترون، ارتباط زیادی به طیف ویژه‌ی شار نوترونی دارد[۲].

OWR رآکتور آزمایشی‌ای با طیف نوترون رآکتور آب سبک است. RTNS ـ II منبع تولید نوترون خالص MeV ۱۴ و LASREF طیف وسیعی از انرژی نوترون‌ها را دارد. هر چند اگر استحکام تسلیم به صورت تابعی از آسیب جابه‌جایی اتم در آلیاژ رسم شود (dpa = تغییر مکان به ازای اتم در جامد)، تمامی سه منشأ نوترونی به صورت شگفت‌انگیزی به صورت خط مایل در می‌آیند (نمودار پایین شکل I ـ۱)، که مستقل از طیف شار است.

مستقل بودن رابطه‌ی استحکام تسلیم ـ dpa از طیف نوترون اشاره به این نکته دارد که در مقایسه با شار، dpa معرف بهتری از اثر پرتودهی بر روی خواص مواد است و این ما را به هدف اولمان که تعیین کمیت R است بسیار نزدیک می‌کند. کمیت R تعداد جابه‌جایی‌ها در واحد حجم در واحد زمان است:

(۱–I)

$$R \equiv \frac{\#\text{displacements}}{\text{cm}^3\text{s}} = N \int_{\check{E}}^{\hat{E}} \phi(E_\text{i}) \sigma_D(E_\text{i}) \, \text{d}E_\text{i} \,,$$

در این رابطه، N دانسیته‌ی تعداد اتم، $\hat{E}$ بیش‌ترین انرژی ذرات وارد شونده، $\check{E}$ کم‌ترین انرژی ذرات وارد شونده، $\phi(E_{\mathrm{i}})$ انرژی وابسته به شار ذرات و $\sigma_D(E_{\mathrm{i}})$ با توجه به رابطه‌ی زیر انرژی وابسته به سطح مقطع جابه‌جایی است:

(۲–I)

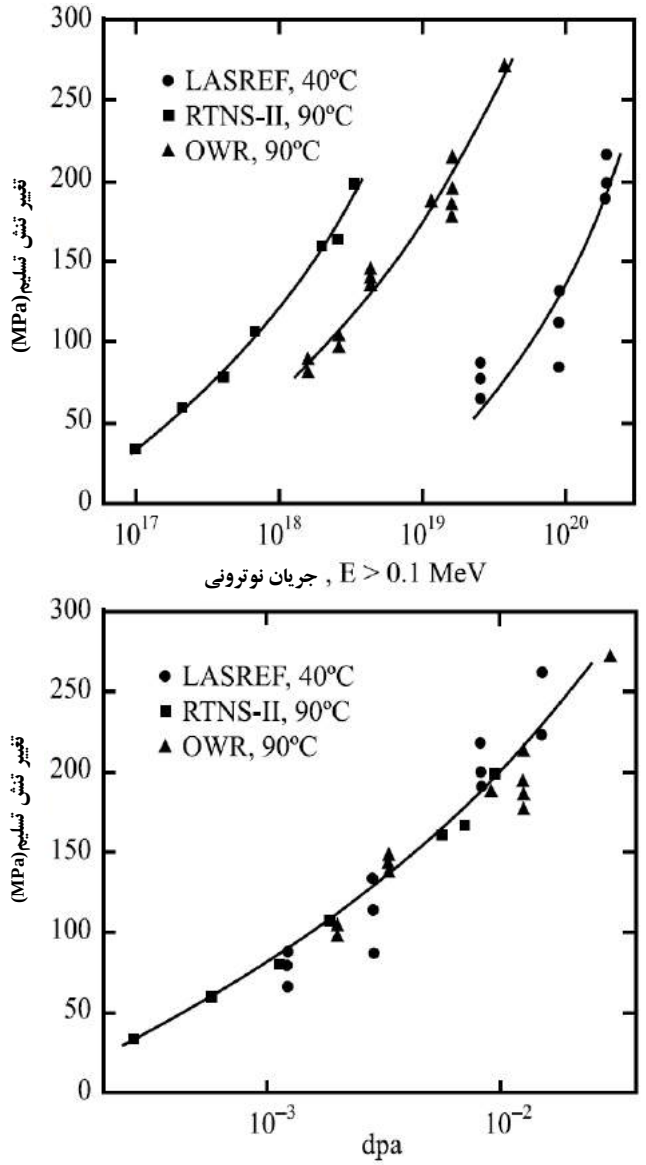
$$\sigma_{\mathrm{D}}(E_{\mathrm{i}}) = \int_{\check{T}}^{\hat{T}} \sigma(E_{\mathrm{i}})\nu(T)\,\mathrm{d}T\,,$$

که در آن $\hat{T}$ بیش‌ترین انرژی انتقال یافته از برخورد یک ذره با انرژی E_{i} و شبکهٔ اتم، $\check{T}$ کم‌ترین انرژی انتقال یافته از برخورد یک ذره با انرژی E_{i} و شبکه‌ی اتم، $\sigma(E_{\mathrm{i}},T)$ سطح مقطع برخورد ذرات با انرژی E_{i} است که باعث انتقال انرژی T به اتمی که بر اثر برخورد تهییج شده است و $\nu(T)$ تعداد جابه‌جایی‌ها به ازای اتم تهییج یافته است. بنابراین برای کمیت R می‌توان نوشت:

(۳–I)

$$R = N\int_{\check{E}}^{\hat{E}}\int_{\check{T}}^{\hat{T}} \phi(E_{\mathrm{i}})\sigma(E_{\mathrm{i}},T)\nu(T)\,\mathrm{d}T\,\mathrm{d}E_{\mathrm{i}}\,.$$

دو متغیر کلیدی در این تساوی $\sigma(E_{\mathrm{i}},T)$ و $\nu(T)$ هستند. عبارت $\sigma(E_{\mathrm{i}},T)$ انرژی انتقال یافته از ذره‌ی فرودی به اتم اول در برخورد به هدف، اتم ضربه خورده‌ی اولیه (PKA) است. تعیین این کمیت هدف فصل ۱ است. کمیت دوم $\nu(T)$ است که بیانگر تعداد کلی جابه‌جایی‌هایی است که اتم ضربه خورده‌ی اولیه (PKA) درون جامد طی می‌کند. این کمیت با جزییات کامل در فصل ۲ توضیح داده می‌شود. این دو متغیر در مجموع تعداد کلی جابه‌جایی‌های ایجاد شده به وسیله‌ی ذره‌ی فرودی با انرژی E_{i} را تعیین می‌کنند و رابطه‌ی (۳–I) نیز توزیع انرژی ذرات فرودی را محاسبه می‌کند. نتیجه‌ی این عبارت تعداد کلی جابه‌جایی‌ها در هدف از شار ذرات با توزیع انرژی مشخص است. این عبارت ماهیت تعیین آسیب‌های ناشی از پرتودهی در جامدات است.



شکل I-۱. مقایسه‌ی تغییرات تنش تسلیم در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده در سه تأسیسات مختلف با طیف شار انرژی نوترونی مختلف.

فهرست

بخش ۱

آسیب تابشی ۱

فصل ۱

رخداد آسیب تابشی ۳

۱-۱ برهم‌کنش‌های نوترون ـ هسته ۵

۱-۱-۱ پراکندگی کشسان ۵

۱-۱-۲ پراکندگی غیرکشسان ۱۷

۱-۱-۳ واکنش‌های (n ،۲n) ۲۱

۱-۱-۴ واکنش‌های (γ ،n) ۲۳

۱-۲ برهم‌کنش‌های میان اتم‌ها و یون‌ها ۲۶

۱-۲-۱ پتانسیل‌های بین اتمی ۲۷

۱-۲-۲ جنبش‌شناسی برخورد ۳۸

۱-۳ برخوردهای یونیزه کننده ۶۶

۱-۳-۱ تئوری اتلاف انرژی ۶۷

۱-۳-۲ محاسبات برد ۸۷

نام‌گذاری اصطلاحات ۹۹

مسایل ۱۰۳

مراجع ۱۰۹

فصل ۲

جابه‌جایی اتم‌ها ۱۱۱

۲-۱ نظریه‌ی مقدماتی جابه‌جایی ۱۱۱

۲-۱-۱ احتمال جابه‌جایی ۱۱۲

۲-۱-۲ مدل کینچین و پیس برای جابه‌جایی‌های اتمی ۱۱۵

۲-۱-۳ انرژی جابه‌جایی ۱۱۹

۲-۱-۴ محدوده‌ی اتلاف انرژی الکترونی ۱۲۷

۲-۲ اعمال اصلاحاتی به مدل جابه‌جایی K-P ۱۳۰

۲-۲-۱ بررسی E_d در تعادل انرژی ۱۳۰
۲-۲-۲ سطح مقطع‌های انتقال انرژی واقعی ۱۳۱
۲-۲-۳ اتلاف انرژی به وسیله‌ی برانگیختگی الکترونیکی ۱۳۳
۲-۲-۴ اثرات بلورینگی ۱۳۹
۲-۳ سطح مقطع جابه‌جایی ۱۶۰
۲-۳-۱ پراکندگی کشسان ۱۶۱
۲-۳-۲ پراکندگی غیرکشسان ۱۶۲
۲-۳-۳ جابه‌جایی‌های (n,۲n) و (n,γ) ۱۶۳
۲-۳-۴ اصلاحات مدل K-P و سطح مقطع جابه‌جایی کلی ۱۶۴
۲-۴ نرخ‌های جابه‌جایی ۱۶۶
۲-۵ ارتباط تغییر ویژگی‌ها و مقدار پرتوگیری تابشی ۱۷۱
۲-۶ جابه‌جایی‌های ایجاد شده به وسیله‌ی پرتودهی ذرات باردار ۱۷۳
نام‌گذاری اصطلاحات ۱۸۰
مسایل ۱۸۴
مراجع ۱۸۸

فصل ۳
آبشار آسیب ۱۹۱
۳-۱ مسیر متوسط آزاد جابه‌جایی ۱۹۱
۳-۲ طیف پس‌زنی اولیه ۱۹۴
۳-۳ انرژی آسیب آبشاری و حجم آبشار ۲۰۱
۳-۴ شبیه‌سازی کامپیوتری آسیب تابشی ۲۰۳
۳-۴-۱ روش تقریب برخورد دوتایی ۲۰۴
۳-۴-۲ روش جنبشی مولکولی ۲۰۸
۳-۴-۳ روش جنبشی مونته کارلو (KMC) ۲۱۲
۳-۵ مراحل گسترش آبشار ۲۱۳
۳-۶ رفتار عیوب در درون آبشار ۲۱۷
نام‌گذاری اصطلاحات ۲۳۱
مسایل ۲۳۴
مراجع ۲۳۵

فصل ۴

تشکیل عیوب نقطه‌ای و نفوذ ۲۳۷
۴-۱ ویژگی‌های عیوب القایی تابشی ۲۳۷
۴-۱-۱ بین‌نشین‌ها ۲۳۸
۴-۱-۲ بین‌نشین‌های چندتایی ۲۴۴
۴-۱-۳ ترکیب‌های بین‌نشینی ـ ناخالصی ۲۴۵
۴-۱-۴ جاهای خالی ۲۴۷
۴-۱-۵ جاهای خالی چندتایی ۲۴۷
۴-۱-۶ خوشه‌های عیب ـ عنصر حل شده و ناخالصی ـ عیب ۲۴۹
۴-۲ ترمودینامیک تشکیل عیب نقطه‌ای ۲۴۹
۴-۳ نفوذ عیوب نقطه‌ای ۲۵۵
۴-۳-۱ توضیح ماکروسکوپی نفوذ ۲۵۶
۴-۳-۲ سازوکارهای نفوذ ۲۵۷
۴-۳-۳ توضیح میکروسکوپی نفوذ ۲۶۳
۴-۳-۴ بسامد پرش، Γ ۲۶۷
۴-۳-۵ بسامد پرش، ω ۲۶۹
۴-۳-۶ معادلاتی برای D ۲۷۱
۴-۴ نفوذ هم‌بسته ۲۷۶
۴-۵ نفوذ در سیستم‌های چند جزیی ۲۸۰
۴-۶ نفوذ در طول مسیرهایی با ضریب نفوذ بالا ۲۸۱
نام‌گذاری اصطلاحات ۲۸۷
مسایل ۲۹۰
مراجع ۲۹۲

فصل ۵

افزایش نفوذ تابشی و نظریه‌ی سرعتی واکنش عیب ۲۹۳
۵-۱ معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای ۲۹۴
۵-۱-۱ مورد ۱: دمای پایین، چگالی جاهک پایین ۲۹۸
۵-۱-۲ مورد ۲: دمای پایین، چگالی جاهک متوسط ۳۰۲
۵-۱-۳ مورد ۳: دمای پایین، چگالی جاهک بالا ۳۰۳
۵-۱-۴ مورد ۴: دمای بالا ۳۰۵
۵-۱-۵ ویژگی‌های معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای ۳۰۹

۵-۱-۶ نقایص مدل تعادلی عیب نقطه‌ای ساده ۳۱۱
۵-۲ نفوذ افزایشی تابشی ۳۱۱
۵-۳ واکنش‌های عیوب ۳۱۷
۵-۳-۱ تولید عیب ۳۲۱
۵-۳-۲ بازترکیبی ۳۲۱
۵-۳-۳ اتلاف در چاهک‌ها ۳۲۲
۵-۳-۴ شدت چاهک‌ها ۳۲۲
۵-۴ واکنش‌های کنترل شده‌ی سرعتی ۳۲۳
۵-۴-۱ برهم‌کنش عیب ـ حفره ۳۲۳
۵-۴-۲ برهم‌کنش عیب ـ نابجایی ۳۲۴
۵-۵ واکنش‌های محدود شده‌ی نفوذی ۳۲۵
۵-۵-۱ واکنش‌های عیب ـ حفره ۳۲۵
۵-۵-۲ واکنش‌های عیب ـ نابجایی ۳۳۰
۵-۶ کنترل سرعت ترکیبی ۳۳۲
۵-۷ واکنش‌های عیب ـ مرزدانه ۳۳۴
۵-۸ رسوبات هم‌بسته و عناصر حل شده ۳۳۷
نام‌گذاری اصطلاحات ۳۴۰
مسایل ۳۴۳
مراجع ۳۴۸

بخش ۲
اثرات فیزیکی آسیب تابشی ۳۴۹

فصل ۶
جدایش القایی تابشی ۳۵۱
۶-۱ جدایش القایی تابشی در آلیاژهای دوتایی غنی شده ۳۵۴
۶-۱-۱ راه‌حل معادلات دیفرانسیلی جزیی دوتایی ۳۶۴
۶-۱-۲ پیوند بین‌نشین‌ها ۳۶۴
۶-۱-۳ اثر اندازه‌ی عنصر حل شده ۳۶۷
۶-۱-۴ اثر دما ۳۶۸
۶-۱-۵ اثر نرخ دوز ۳۷۲

۶-۲ جدایش القایی تابشی در آلیاژهای سه‌تایی ۳۷۳
۶-۳ اثر تغییر ترکیب موضعی روی جدایش القایی تابشی ۳۷۹
۶-۴ اثر عناصر حل شده روی جدایش القایی تابشی ۳۸۵
۶-۵ مثال‌هایی از جدایش القایی تابشی در آلیاژهای آستنیتی ۳۹۱
۶-۶ جدایش القایی تابشی در آلیاژهای فریتی ۳۹۳
نام‌گذاری اصطلاحات ۳۹۸
مسایل ۴۰۱
مراجع ۴۰۳

فصل ۷

ریزساختار نابجایی ۴۰۵
۷-۱ خط‌های نابجایی ۴۰۶
۷-۱-۱ حرکت نابجایی ۴۱۰
۷-۱-۲ توصیف یک نابجایی ۴۱۴
۷-۱-۳ جابه‌جایی‌ها، کرنش‌ها و تنش‌ها ۴۱۷
۷-۱-۴ انرژی یک نابجایی ۴۲۳
۷-۱-۵ کشش خطی یک نابجایی ۴۲۵
۷-۱-۶ نیروهای روی یک نابجایی ۴۳۰
۷-۱-۷ برهم‌کنش بین نابجایی‌ها ۴۳۷
۷-۱-۸ نابجایی‌های گسترش یافته ۴۴۱
۷-۱-۹ کینگ‌ها و جاگ‌ها ۴۴۲
۷-۲ حلقه‌های نقص‌دار و چهاروجهی نقص در چیده شدن ۴۴۵
۷-۳ خوشه‌های عیب ۴۴۸
۷-۳-۱ کسر عیوب تشکیل دهنده‌ی خوشه‌ها ۴۵۰
۷-۳-۲ انواع خوشه‌ها ۴۵۳
۷-۳-۳ تحرک خوشه ۴۵۸
۷-۴ عیوب گسترش یافته ۴۶۳
۷-۵ تولید عیب مؤثر ۴۶۸
۷-۶ جوانه زنی و رشد حلقه‌های نابجایی ۴۷۱
۷-۶-۱ جوانه‌زنی حلقه ۴۷۱
۷-۶-۲ نظریه‌ی خوشه‌ای شدن ۴۸۲
۷-۶-۳ گرایش تولید ـ تحریک جوانه‌زنی خوشه ۴۸۶

۷-۷ رشد حلقه‌ی نابجایی ۴۹۱
۷-۸ بازیابی ۴۹۹
۷-۹ تکامل ریزساختار حلقه‌ی بین‌نشینی ۵۰۳
نام‌گذاری اصطلاحات ۵۰۷
مسایل ۵۱۱
مراجع ۵۱۵

فصل ۸

حباب‌ها و حفره‌های القایی تابشی ۵۱۷
۸-۱ جوانه‌زنی حفره ۵۱۸
۸-۱-۱ توزیع اندازه‌ی حفره‌ی تعادلی ۵۲۰
۸-۱-۲ نرخ جوانه‌زنی حفره ۵۲۴
۸-۱-۳ تأثیر گاز خنثی ۵۳۶
۸-۱-۴ جوانه‌زنی حفره با گرایش تولید ۵۴۵
۸-۲ رشد حفره ۵۴۹
۸-۲-۱ نرخ‌های جذب عیب و غلظت‌ها در سطوح چاهک‌ها ۵۵۱
۸-۲-۲ موازنه‌های عیب نقطه‌ای ۵۵۸
۸-۳ معادله‌ی رشد حفره ۵۶۰
۸-۳-۱ وابستگیِ دمایی ۵۶۹
۸-۳-۲ وابستگیِ مقدار مجاز پرتوگیری ۵۷۳
۸-۳-۳ نقش نابجایی‌ها به جای چاهک‌های گرایش شده ۵۷۹
۸-۳-۴ وابستگی نرخ مقدار پرتوگیری ۵۸۳
۸-۳-۵ تغییر متغیرهای تابشی ۵۸۵
۸-۳-۶ وابستگی تنشی ۵۹۱
۸-۳-۷ اثر جدایش القایی تابشی ۵۹۷
۸-۳-۸ اثر گرایش تولید ۶۰۰
۸-۳-۹ شبکه‌های حفره ۶۰۶
۸-۳-۱۰ اثر ریزساختار و ترکیب ۶۰۸
۸-۳-۱۱ اثر تاریخچه‌ی فعالیت رآکتور ۶۱۶
۸-۴ رشد حباب ۶۱۹
۸-۴-۱ علم مکانیک حباب ۶۲۰
۸-۴-۲ قانون رشد ۶۲۵

۸-۴-۳ رشد حباب به وسیله‌ی تورفتگی حلقه‌ی نابجایی ۶۳۰
۸-۴-۴ شبکه‌های حباب ۶۳۱
۸-۴-۵ تولید هلیوم ۶۳۲
نام‌گذاری اصطلاحات ۶۳۴
مسایل ۶۳۹
مراجع ۶۴۳

فصل ۹
پایداری فازی تحت پرتودهی ۶۴۷
۹-۱ جدایش القایی تابشی و رسوب‌گذاری القایی تابشی ۶۴۸
۹-۲ انحلال معکوس ۶۵۱
۹-۳ بی‌نظمیِ تابشی ۶۶۶
۹-۴ جوانه‌زنی رسوب ناهم‌دوس ۶۷۴
۹-۵ جوانه‌زنی رسوب هم‌دوس ۶۸۳
۹-۶ فازهای شبه پایدار ۶۸۷
۹-۶-۱ استحاله‌های نظم ـ بی‌نظمی ۶۸۹
۹-۶-۲ استحاله‌های ساختار بلوری ۶۸۹
۹-۶-۳ تشکیل شبه بلور ۶۹۲
۹-۷ بی‌شکل‌سازی ۶۹۳
۹-۷-۱ حرارت تشکیل ترکیب و تفاوت‌های ساختار بلوری ۶۹۴
۹-۷-۲ محدوده‌ی انحلال‌پذیری ترکیبات و دانسیته‌ی عیب بحرانی ۶۹۹
۹-۷-۳ ترمودینامیک و جنبش‌شناسی بی‌شکل شدن ۷۰۱
۹-۸ پایداری فازی در آلیاژهای سازنده‌ی قلب رآکتور ۷۱۷
نام‌گذاری اصطلاحات ۷۲۰
مسایل ۷۲۵
مراجع ۷۲۸

فصل ۱۰
اثرات منحصر به فرد پرتودهی یونی ۷۳۱
۱۰-۱ روش‌های پرتودهی یونی ۷۳۲
۱۰-۲ تغییرات ترکیبی ۷۳۵
۱۰-۲-۱ کندوپاش ۷۳۶

۱۰-۲-۲ جذب گیبسی ۷۴۷
۱۰-۲-۳ کاشت برگشتی ۷۴۹
۱۰-۲-۴ اختلاط (همسان‌گرد، جابه‌جاساز) آبشاری ۷۵۳
۱۰-۲-۵ ترکیبی از فرایندهای اثرگذار بر تغییرات ترکیبی سطح ۷۷۲
۱۰-۲-۶ توزیع مجدد کاشت در طول کاشت یونی ۷۷۶
۱۰-۳ اثرات دیگر کاشت یونی ۷۷۹
۱۰-۳-۱ رشد دانه ۷۷۹
۱۰-۳-۲ بافت ۷۸۳
۱۰-۳-۳ ریزساختار نابجایی ۷۸۵
۱۰-۴ بارگذاری گازی مقدار بالا: تاول زدن یا ورقه ورقه شدن ۷۸۸
۱۰-۵ فازهای جامد و شبکه‌های حباب گاز بی‌اثر ۷۹۵
نام‌گذاری اصطلاحات ۷۹۷
مسایل ۸۰۱
مراجع ۸۰۵

فصل ۱۱

شبیه‌سازی اثرات پرتودهی نوترونی با یون‌ها ۸۰۹
۱۱-۱ انگیزه‌های استفاده از پرتودهی یونی به منزله‌ی جایگزینی برای پرتودهی نوترونی ۸۱۰
۱۱-۲ مرور جنبه‌های آسیب تابشی مربوط به پرتودهی یونی ۸۱۲
۱۱-۳ وابستگی جدایش القایی تابشی به نوع ذره ۸۱۷
۱۱-۴ مزایا و معایب انواع مختلف ذره ۸۲۵
۱۱-۴-۱ الکترون‌ها ۸۲۷
۱۱-۴-۲ یون‌های سنگین ۸۳۱
۱۱-۴-۳ پروتون‌ها ۸۳۴
۱۱-۵ عوامل پرتودهی برای پرتودهی‌های ذرات ۸۳۵
۱۱-۶ شبیه‌سازی آسیب تابش نوترونی با تابش پروتونی ۸۳۸
نام‌گذاری اصطلاحات ۸۴۶
مسایل ۸۴۷
مراجع ۸۴۹

بخش ۳
اثرات مکانیکی آسیب تابشی ۸۵۱

فصل ۱۲

سخت‌گردانی و تغییر شکل تابشی ۸۵۳
۱۲-۱ تغییر شکل کشسان و پلاستیک ۸۵۶
۱۲-۱-۱ کشسانی ۸۵۶
۱۲-۱-۲ شکل‌پذیری ۸۶۳
۱۲-۱-۳ تست کشش ۸۶۷
۱۲-۱-۴ استحکام تسلیم ۸۷۳
۱۲-۲ سخت‌گردانی تابشی ۸۷۵
۱۲-۲-۱ سخت‌گردانی منبعی ۸۷۶
۱۲-۲-۲ سخت‌گردانی اصطکاکی ۸۸۰
۱۲-۲-۳ برهم نهی سازوکارهای سخت‌گردانی ۸۹۴
۱۲-۲-۴ سخت‌گردانی در چند بلورها ۹۰۲
۱۲-۲-۵ اشباع سخت‌گردانی تابشی ۹۰۶
۱۲-۲-۶ مقایسه‌ی سخت‌گردانی اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده ۹۱۰
۱۲-۲-۷ سخت‌گردانی بازپختی تابشی ۹۱۷
۱۲-۲-۸ هم‌بستگی بین سختی و استحکام تسلیم ۹۱۸
۱۲-۳ تغییر شکل در فلزات پرتودیده ۹۲۴
۱۲-۳-۱ نقشه‌های سازوکار تغییر شکل ۹۲۹
۱۲-۳-۲ تغییر شکل موضعی ۹۳۳
نام‌گذاری اصطلاحات ۹۳۸
مسایل ۹۴۲
مراجع ۹۴۶

فصل ۱۳

شکست و تردی ۹۵۱
۱۳-۱ انواع شکست ۹۵۲
۱۳-۲ استحکام چسبندگی فلزات ۹۵۳
۱۳-۳ مکانیک شکست ۹۵۷

۱۳-۴ آزمون‌های مکانیکی شکست ۹۶۸
۱۳-۵ مکانیک شکست کشسان ـ پلاستیک ۹۷۰
۱۳-۶ شکست ترد ۹۷۴
۱۳-۷ تردی القایی تابشی در فولادهای فریتی ۹۸۴
۱۳-۷-۱ آزمون ضربه مفتول شکاف‌دار ۹۸۴
۱۳-۷-۲ DBTT و کاهش در حد انرژی بالایی ۹۸۸
۱۳-۷-۳ روش منحنی اصلی ۹۹۰
۱۳-۷-۴ عوامل مؤثر بر درجه‌ی ترد شوندگی ۹۹۵
۱۳-۷-۵ تردشوندگی فولادهای فریتی ـ مارتنزیتی ۱۰۰۱
۱۳-۷-۶ بازپخت و پرتودهی مجدد ۱۰۰۴
۱۳-۷-۷ خستگی ۱۰۰۶
۱۳-۸ شکست و خستگی آلیاژهای آستنیتی در دماهای پایین تا متوسط ۱۰۱۲
۱۳-۸-۱ اثر پرتودهی روی چقرمگی شکست ۱۰۱۲
۱۳-۸-۲ اثر پرتودهی روی خستگی ۱۰۱۶
۱۳-۹ تردی دما بالا ۱۰۱۹
۱۳-۹-۱ حفره‌های مرزدان‌های و حباب‌ها ۱۰۲۱
۱۳-۹-۲ لغزش مرزدانه ۱۰۲۹
۱۳-۹-۳ رشد ترک مرزدان‌های ۱۰۳۲
۱۳-۹-۴ نقشه‌های سازوکار شکست ۱۰۳۵
نام‌گذاری اصطلاحات ۱۰۳۶
مسایل ۱۰۴۰
مراجع ۱۰۴۳

فصل ۱۴

خزش تابشی و رشد ۱۰۴۷
۱۴-۱ خزش حرارتی ۱۰۴۸
۱۴-۱-۱ خزش نابجایی ۱۰۵۵
۱۴-۱-۲ خزش نفوذی ۱۰۶۵
۱۴-۲ خزش تابشی ۱۰۷۰
۱۴-۲-۱ جوانه‌زنیِ ترجیحیِ القایی تنشیِ حلقه‌ها ۱۰۷۰
۱۴-۲-۲ جذب ترجیحی القایی تنشی ۱۰۷۵
۱۴-۲-۳ صعود و خزش ناشی از جذب ترجیحی ۱۰۷۹

۱۴-۲-۴ صعود و لغزش تحریک شده به وسیله‌ی گرایش نابجایی ۱۰۸۳
۱۴-۲-۵ خزش گذرا ۱۰۸۵
۱۴-۲-۶ بی‌نقص شدن حلقه ۱۰۹۰
۱۴-۲-۷ بازیابی خزش ۱۰۹۳
۱۴-۲-۸ خزش نفوذی: چرا هیچ‌گونه اثری از پرتودهی وجود ندارد ۱۰۹۴
۱۴-۲-۹ مقایسه‌ی نظریه با اطلاعات خزش ۱۰۹۶
۱۴-۲-۱۰ اصلاح تابشی نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل ۱۱۰۲
۱۴-۳ رشد تابشی و خزش در آلیاژهای زیرکونیوم ۱۱۰۳
۱۴-۳-۱ ریزساختار آلیاژهای زیرکونیوم پرتودیده ۱۱۰۶
۱۴-۳-۲ رشد تابشی ۱۱۰۸
۱۴-۳-۳ خزش تابشی ۱۱۱۴
نام‌گذاری اصطلاحات ۱۱۱۹
مسایل ۱۱۲۳
مراجع ۱۱۲۷

فصل ۱۵

ترک‌گذاری محیطی فلزات و آلیاژهای پرتودیده ۱۱۲۹
۱۵-۱ ترکِ خوردگی تنشی: آموزش ۱۱۳۳
۱۵-۱-۱ آزمون‌های ترکِ خوردگیِ تنشی ۱۱۳۶
۱۵-۱-۲ فرایندهای ترکِ خوردگیِ تنشی ۱۱۴۰
۱۵-۱-۳ شرایط متالورژیکی ۱۱۴۲
۱۵-۱-۴ آغاز ترک و انتشار ترک ۱۱۴۴
۱۵-۱-۵ سازوکارهای ترکِ خوردگی تنشی ۱۱۵۴
۱۵-۱-۶ مدل پیش‌گویانه برای گسترش ترک ۱۱۵۹
۱۵-۱-۷ مدل‌های مکانیکی شکست ۱۱۶۱
۱۵-۱-۸ خستگی خوردگی ۱۱۶۴
۱۵-۱-۹ تردی هیدروژنی ۱۱۶۴
۱۵-۲ اثرات پرتودهی روی شیمی آب ۱۱۶۶
۱۵-۲-۱ پرتوکافت و اثرات آن روی پتانسیل خوردگی ۱۱۶۶
۱۵-۲-۲ اثر پتانسیل خوردگی روی IASCC ۱۱۷۰
۱۵-۳ مشاهدات تعمیراتی و آزمایشگاهی از اثرات پرتودهی روی ترک خوردگی تنشی ۱۱۷۳
۱۵-۳-۱ آلیاژهای آستنیتی ۱۱۷۳

۱۵-۳-۲ آلیاژهای فریتی ۱۱۸۱
۱۵-۴ سازوکارهای IASCC ۱۱۸۳
۱۵-۴-۱ تهی‌سازی کروم مرزدان‌های ۱۱۸۴
۱۵-۴-۲ سخت‌گردانی تابشی ۱۱۸۶
۱۵-۴-۳ حالت تغییر شکل ۱۱۸۷
۱۵-۴-۴ اکسیداسیون داخلی انتخابی ۱۱۸۹
۱۵-۴-۵ خزش القایی تابشی ۱۱۸۹
نام‌گذاری اصطلاحات ۱۱۹۱
مسایل ۱۱۹۴
مراجع ۱۱۹۵

بخش ۱

آسیب تابشی

۱

رخداد آسیب تابشی

رخداد آسیب تابشی به صورت انتقال انرژی از یک پرتابه‌ی فرودی به یک جامد و در نتیجه توزیع اتم‌های هدف بعد از اتمام فرایند تابش، تعریف می‌شود. رخداد آسیب تابشی در حقیقت از چندین فرایند مجزا تشکیل شده است. این فرایندها و ترتیب رخداد آن‌ها در ادامه آمده است.

۱. برهم‌کنش یک ذره‌ی فرودی پرانرژی با یک اتم شبکه،
۲. انتقال انرژی جنبشی به اتم شبکه و ایجاد یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه[1] (PKA)،
۳. جابه‌جایی اتم از مکان آن در شبکه،
۴. عبور اتم جابه‌جاشده از شبکه و ایجاد هم‌زمان اتم‌های ضربه‌خورده‌ی بیش‌تر،
۵. تولید یک آبشار جابه‌جایی[2] (مجموعه‌ای از عیوب نقطه‌ای ایجاد شده به وسیله‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه)،
۶. توقف اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه به صورت یک بین‌نشین.

1. Primary Knock-on Atom
2. Displacement cascade

رخداد آسیب تابشی هنگامی به پایان می‌رسد که اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه در شبکه به صورت یک بین‌نشین به حالت سکون می‌رسد. نتیجه‌ی یک رخداد آسیب تابشی، ایجاد مجموعه‌ای از عیوب نقطه‌ای (جاهای خالی و بین‌نشین‌ها) و خوشه‌های این عیوب در شبکه‌ی بلوری است. نکته‌ی مهم این است که این زنجیره‌ی کامل از رخدادها فقط در زمانی در حدود $۱۰^{-۱۱}$ ثانیه رخ می‌دهد (جدول ۱ـ۱ ملاحظه شود). رخدادهای ثانویه‌ی در برگیرنده‌ی مهاجرت عیوب نقطه‌ای و خوشه‌های عیوب و هم‌چنین تشکیل خوشه‌های اضافی یا انحلال خوشه‌ها به عنوان اثرات آسیب تابشی طبقه‌بندی می‌شوند.

آن‌چه لازم است در ابتدا برای درک و تعیین کمیت آسیب تابشی دانست، توضیح چگونگی برهم‌کنش میان یک ذره و یک جامد است که به ایجاد جابه‌جایی‌ها منجر می‌شود و بعد از آن نحوه‌ی تعیین کمیت این فرایندها است. ساده‌ترین مدل به این صورت است که برخورد کره‌های سخت را با جابه‌جایی‌های ایجاد شده در هنگامی که انرژی انتقالی به اندازه‌ی کافی بالا است و باعث جدا شدن اتم ضربه‌خورده از موقعیتش در شبکه می‌شود، شبیه‌سازی کرد. علاوه بر انتقال انرژی به وسیله‌ی برخوردهای کره‌های سخت، اتم متحرک، انرژی خود را به وسیله‌ی برهم‌کنش با الکترون‌ها، میدان کولنی اتم‌های مجاور، ساختار تناوبی بلور و غیره از دست می‌دهد. این دشواری به نحوی که در ادامه توضیح داده خواهد شد، کم‌تر می‌شود. اگر بتوان وابستگی انرژی شار ذره‌ی فرودی و سطح مقطع (احتمالات) انتقال انرژی[1] برای برخوردهای بین اتم‌ها را توضیح داد، سپس می‌توان کمیت تولید یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه در یک محدوده‌ی دیفرانسیلی انرژی را تعیین کرد و از این مقدار برای تعیین تعداد اتم‌های جابه‌جا شده استفاده کرد. در این فصل، روی تعیین کمیت انرژی انتقال یافته بین اجزای برهم‌کنش کننده و نیز سطح مقطع انتقال انرژی تمرکز خواهد شد.

با توجه به این‌که ماهیت خنثای نوترون، برهم‌کنش را ساده می‌سازد، توضیحات این فصل با واکنش‌های نوترون ـ هسته شروع می‌شود. پس از تولید اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه، برهم‌کنش‌های بعدی بین اتم‌ها رخ می‌دهد و بار مثبت هسته و بار منفی ابر الکترونی می‌تواند در فهم چگونگی واکنش اتم‌ها مهم باشد. در واقع برهم‌کنش‌های اتم ـ اتم، محدوده‌ی انرژی پایین برهم‌کنش‌های اتم ـ یون است که در قلب رآکتورها و از طریق تابش‌های یونی با استفاده از شتاب‌دهنده‌ها در محدوده‌های

1. Energy Transfer Cross Sections

وسیع انرژی، اتفاق می‌افتد و می‌تواند منجر به آخرین نوع از برهم‌کنش‌ها یعنی برخوردهای یونیزه‌کننده شود.

جدول ۱-۱. مقیاس زمانی تقریبی برای تولید عیوب در فلزات پرتودهی شده[۱].

زمان (ثانیه)	رخداد	نتیجه
$۱۰^{-۱۸}$	انتقال انرژی از ذره‌ی فرودی	تولید اولین اتم ضربه‌خورده
$۱۰^{-۱۳}$	جابه‌جایی اتم‌های شبکه به وسیله‌ی PKA	آبشار جابه‌جایی
$۱۰^{-۱۱}$	اتلاف انرژی، باز ترکیب خودبه‌خودی و خوشه‌ای شدن	جفت‌های فرانکل پایدار (اتم‌های بین‌نشین تنها (SIA) و جاهای خالی) و خوشه‌های عیب
$> ۱۰^{-۸}$	برهم‌کنش عیب‌ها به وسیله‌ی مهاجرت حرارتی	باز ترکیب SIA و جای خالی، خوشه‌ای شدن، به‌دام‌اندازی و انتشار عیب

۱-۱ برهم‌کنش‌های نوترون ـ هسته

۱-۱-۱ پراکندگی کشسان[1]

به علت خنثی بودن بار الکتریکی نوترون‌ها، می‌توان برخوردهای کشسان بین نوترون‌ها و هسته‌ها را به مثابه‌ی برخورد کره‌های سخت در نظر گرفت. هنگامی که نوترون‌ها از میان یک جامد عبور می‌کنند، این احتمال هرچند محدود وجود دارد که آن‌ها با یک اتم شبکه برخورد کرده و یک انرژی پس‌زنی را به اتم برخورد شده وارد کنند. این احتمال به وسیله‌ی دیفرانسیل دوگانه‌ی سطح مقطع پراکندگی (بر حسب انرژی و زاویه)، $\sigma_s(E_i, E_f, \Omega)$، تعریف می‌شود که E_i و E_f به ترتیب انرژی قبل از برخورد و انرژی نهایی بعد از برخورد و Ω زاویه‌ی سه بعدی است که نوترون در آن پراکنده می‌شود. سطح مقطع پراکندگی اغلب فقط به صورت تابعی از E_i و زاویه‌ی پراکندگی در نظر گرفته می‌شود. دیفرانسیل یگانه سطح مقطع پراکندگی به صورت رابطه‌ی ۱-۱ است.

(۱-۱)

$$\sigma_s(E_i, \Omega) = \int \sigma_s(E_i, E_f, \Omega)\, dE_f .$$

احتمال پراکندگی کلی برای نوترون‌هایی با انرژی E_i برابر است با:

1. Elastic scattering

(۲-۱)

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}) = \int \sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}, \Omega)\, \mathrm{d}\Omega\,.$$

محققین در مطالعه‌ی اثرات تابشی به دنبال رفتار اتم ضربه‌خورده می‌باشند. بنابراین در جستجوی سطح مقطع انتقال انرژی، (T و E_{i}) σ_{s}، یا احتمالی که یک نوترون با انرژی E_{i}، که در اثر برخورد با یک اتم با جرم M به صورت کشسان پراکنده شده، یک انرژی پس‌زنی T را به اتم ضربه‌خورده وارد کند، هستند. اما ابتدا لازم است که T را برحسب انرژی نوترون و زاویه‌ی پراکندگی محاسبه کرد. برای این کار باید دینامیک برخوردهای کشسان دوتایی در مختصات مرکز جرم و مختصات آزمایشگاهی بررسی شود.

شکل ۱-۱ الف مسیر یک نوترون و هسته‌ی هدف را قبل و بعد از پراکندگی، همان طوری که در سیستم مرجع آزمایشگاهی[1] و سیستم مرکز جرمی[2] دیده می‌شود، نشان می‌دهد. آسان‌ترین راه برای به‌دست آوردن رابطه میان انرژی وارد شده از طرف نوترون، زاویه‌ی پراکندگی و انرژی انتقال یافته، تحلیل دینامیک برخورد در سیستم مرکز جرم است. هنگامی که برخورد در سیستم مرکز جرم نمایش داده شود، ذره‌های ضربه‌خورده در جهت‌های مخالف از یک‌دیگر دور می‌شوند. بقای اندازه حرکت در طول محورهای نزدیک و دور شدن الزام می‌دارد که:

(۳-۱)

$$\begin{aligned} v_{\mathrm{c}} m - V_{\mathrm{c}} M &= 0 \\ v'_{\mathrm{c}} m - V'_{\mathrm{c}} M &= 0\,, \end{aligned}$$

و از قانون بقای انرژی جنبشی داریم:

(۴-۱)

$$\frac{1}{2} m v_{\mathrm{c}}^2 + \frac{1}{2} M V_{\mathrm{c}}^2 = \frac{1}{2} m v_{\mathrm{c}}'^2 + \frac{1}{2} M V_{\mathrm{c}}'^2\,.$$

1. Laboratory Reference System
2. Center-of-Mass System (CM)

با استفاده از رابطه‌ی ۱-۳ می توان V_c و V'_c را حذف کرد و به رابطه‌ی زیر رسید:

(۵-۱)

$$\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{M}{m}\right)^2+\frac{1}{2}M\right]V_c^2=\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{M}{m}\right)^2+\frac{1}{2}M\right]V_c'^2.$$

بنابراین $V'_c=V_c$ و در نتیجه $v'_c = v_c$ است.

از آن‌جایی که هسته‌ی هدف در سیستم آزمایشگاهی در حال سکون است و در سیستم مرکز جرم با سرعت V_c به سمت چپ حرکت می‌کند، بنابراین خود سیستم مرکز جرم باید نسبت به سیستم آزمایشگاهی با سرعتی برابر V_c به سمت راست حرکت کند. بنابراین اگر از V_{CM} برای مشخص کردن سرعت سیستم مرکز جرم نسبت به سیستم آزمایشگاهی استفاده شود، اندازه‌ی V_{CM} و V_c یکسان هستند (اما در جهت مخالف). این روابط می‌توانند به صورت زیر بیان شوند:

(۷-۱)

$$v_c = v_\ell - V_{CM} = v_\ell - V_c,$$

و با استفاده از رابطه‌ی ۱-۳ می‌توان نوشت:

(۸-۱)

$$V_{CM} = \left(\frac{m}{M+m}\right)v_\ell.$$

یادآوری می‌شود هدف این است که ارتباط انرژی انتقال یافته به اتم ضربه‌خورده (T) با زاویه‌ی پراکندگی در سیستم مرکز جرم (ϕ) مشخص شود. همان طوری که در شکل ۱-۱ ب نشان داده شده است، می‌توان با استفاده از جمع برداری سرعت پس‌زنی هسته‌ی هدف، V'_1، را در سیستم آزمایشگاهی به ϕ ارتباط داد. به‌طوری‌که به شکل ترکیبی از بر هم‌کنش در سیستم‌های آزمایشگاهی و مرکز جرم نشان داده شده در شکل ۱-۱ الف باشد. با استفاده از قانون کسینوس‌ها می‌توان نوشت:

(۹-۱)

$$V_{\ell}'^2 = V_{\mathrm{CM}}^2 + V_{\mathrm{c}}'^2 - 2V_{\mathrm{CM}}V_{\mathrm{c}}'\cos\phi\,,$$

و با بازنویسی سرعت‌ها در معادله‌ی ۱-۹ برحسب انرژی می‌توان نوشت:

$$V_{\ell}'^2 = \frac{2T}{M}, \quad V_{\mathrm{CM}}^2 = \frac{2E_{\mathrm{i}}}{m}\left(\frac{m}{m+M}\right)^2, \quad , \quad V_{\mathrm{c}}'^2 = \frac{2m}{M^2}E_{\mathrm{m}}'\,,$$

و با جایگذاری این عبارت در رابطه‌ی ۱-۹ می‌توان نوشت:

(۱۰-۱ الف)

$$T = \frac{mM}{(m+M)^2}E_{\mathrm{i}} + \frac{m}{M}E_{\mathrm{m}}' - 2\left(\frac{m}{m+M}\right)\left(E_{\mathrm{i}}E_{\mathrm{m}}'\right)^{1/2}\cos\phi\,,$$

یا

(۱۰-۱ ب)

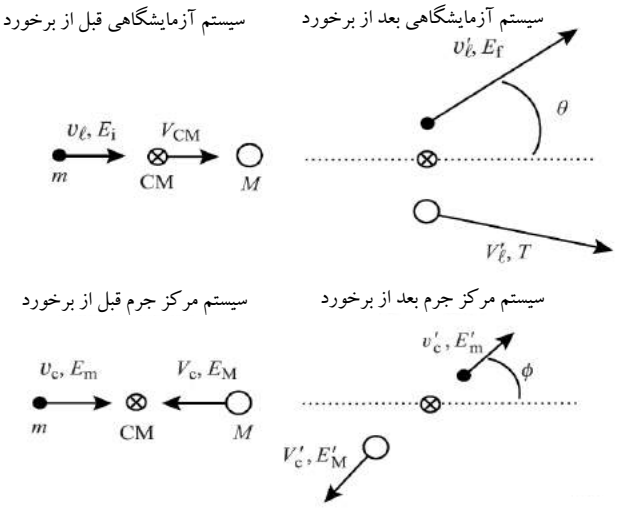
$$T = \eta_1\eta_2 E_{\mathrm{i}} + \frac{\eta_1}{\eta_2}E_{\mathrm{m}}' - 2\eta_1\left(E_{\mathrm{i}}E_{\mathrm{m}}'\right)^{1/2}\cos\phi\,,$$

که در این روابط $\eta_1 = m/(m+M)$ و $\eta_2 = M/(m+M)$ هستند.

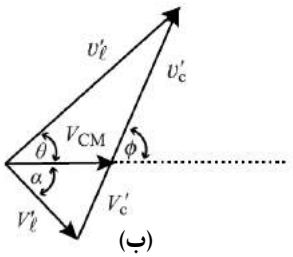
برای این‌که انرژی انتقال یافته، T فقط به صورت تابعی از انرژی اولیه و زاویه‌ی پراکندگی به‌دست آید، از رابطه‌ی E_{i} و E_{m}' برای حذف E_{m}' استفاده می‌شود. با استفاده از رابطه‌های ۱-۷ و ۱-۸ می‌توان نوشت:

(۱۱-۱)

$$v_{\mathrm{c}}' = v_{\ell} - \left(\frac{m}{m+M}\right)v_{\ell} = v_{\ell}\left(\frac{M}{m+M}\right).$$



(الف)



(ب)

شکل ۱-۱. سرعت‌های برداری (الف) سیستم‌های مرکز جرم و آزمایشگاهی و (ب) نمودار ترکیبی مرتبط با سرعت‌ها در هر دو سیستم.

با نوشتن رابطه‌ی ۱-۱۱ برحسب انرژی، معادله‌ی ۱-۱۲ حاصل می‌شود:

(۱-۱۲)

$$E'_m = E_i \left(\frac{M}{m+M} \right)^2 = \eta_2^2 E_i \,.$$

و با جایگذاری در رابطه‌ی ۱-۱۰ ب و ساده‌سازی آن:

(۱۳-۱)

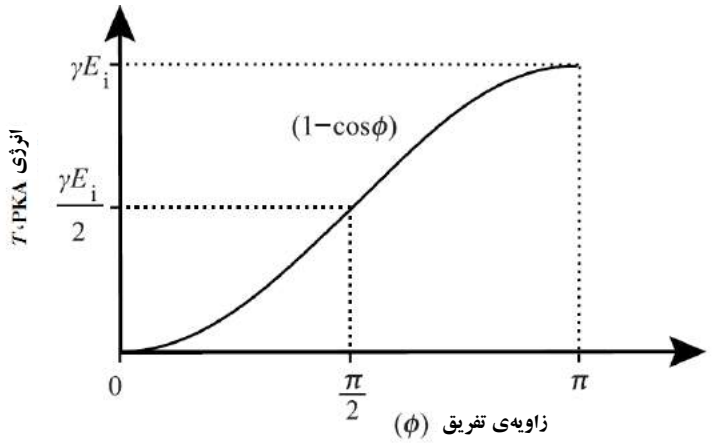
$$T = \frac{\gamma}{2} E_{\mathrm{i}} (1 - \cos\phi) ,$$

که در این رابطه

(۱۴-۱)

$$\gamma = \frac{4mM}{(M+m)^2} = \frac{4A}{(1+A)^2} ,$$

که $m = 1$ و $A = M$ است. از این‌رو T فقط به مجهول ϕ بستگی دارد. بستگی زاویه‌ای T به ϕ در شکل ۱-۲ نشان داده شده است. انرژی انتقال یافته از $\phi = 0$ در $\phi = 0$ تا بیشینه‌ی γE_{i} در $\phi = \pi$ یا $\check{T} = 0$ و $T_{\min} = \check{T} = 0$ و $T_{\max} = \hat{T} = 0$، افزایش می‌یابد. در نتیجه انرژی انتقال یافته هنگامی که ذره باز پراکنده[1] می‌شود، بیشینه است و هنگامی که ذره به هدف برخورد نکند، کم‌ترین مقدار است که در نتیجه هیچ گونه تغییر مسیری ایجاد نمی‌شود ($\phi = 0$).



شکل ۱-۲. انتقال انرژی به منزله‌ی تابعی از زاویه‌ی پراکندگی مرکز جرم.

1. Backscatter

مثال ۱-۱. برای یک نوترون فرودی بر یک اتم هیدروژن $\hat{T}_{n-H}/E_i$ =۱ است؛ اما برای یک نوترون فرودی برروی یک اتم اورانیوم $\hat{T}_{n-U}/E_i$ =۰٫۰۱۷ است. از طرف دیگر، با مقایسه‌ی واکنش یک آهن اتم با یون‌ها یا الکترون‌های Xe^+ با انرژی ۱۰۰ keV، مقدار γ برای واکنش Xe-Fe، برابر با ۰٫۸۳ است که $\hat{T}$ برابر با ۸۳۰۰۰eV را نتیجه می‌دهد. به هرجهت مقدار γ برای واکنش e^--Fe، ۰٫۰۰۰۰۴ است که $\hat{T}$ برابر با ۴eV را نتیجه می‌دهد. همان طوری که در فصل ۲ خواهید دید این انرژی برای جابه‌جایی یک اتم آهن از موقعیتش در شبکه کافی نخواهد بود.

زاویه‌های پراکندگی در سیستم آزمایشگاهی برای ذره‌ی فرودی (θ) و ذره‌ی ضربه‌خورده‌ی (α)، می‌تواند با استفاده از نمودار برداری شکل ۱-۱ ب، بر حسب زاویه‌ی پراکندگی در سیستم مرکز جرم (ϕ) نوشته شود. با اعمال قانون سینوس‌ها به شکل ۱-۱ ب برای ذره‌ی پراکنده شده، می‌توان نوشت:

$$\frac{v'_\ell}{\sin(\pi-\theta)} = \frac{v'_c}{\sin\theta}$$

که v'_c به وسیله‌ی رابطه‌های ۱-۶ و ۱-۷ محاسبه می‌شود:

$$v'_c = V_{CM}\left(\frac{v_\ell}{V_{CM}} - 1\right)$$

و با استفاده از رابطه‌ی ۱-۸ می‌توان نوشت:

$$v'_c = V_{CM}\frac{M}{m}$$

با اعمال قانون کسینوس‌ها به مثلث مشابه می‌توان نوشت:

$$v'^2_\ell = v'^2_c + V^2_{CM} - 2V_{CM}v'_c\cos(\pi-\phi)$$

و با ترکیب کردن سه معادله‌ی اخیر برای نشان دادن θ بر حسب تابعی از ϕ داریم:

$$\tan\theta = \frac{(M/m)\sin\phi}{1+(M/m)\cos\phi}$$

با اعمال قانون سینوس‌ها به نمودار برداری شکل ۱-۱ ب برای اتم ضربه‌خورده، رابطه‌ی زیر حاصل می‌شود:

$$\frac{V'_{\mathrm{c}}}{\sin\alpha} = \frac{V'_{\ell}}{\sin\phi}$$

و با ترکیب این نتایج با رابطه‌های ۱-۶ و ۱-۹ که در آن‌ها انرژی‌ها برحسب سرعت نوشته شده است، می‌توان نتیجه گرفت که:

$$\tan\alpha = \frac{\sin\phi}{1-\cos\phi}$$

در ادامه احتمال وارد شدن یک Tی مشخص به یک اتم ضربه‌خورده محاسبه خواهد شد. این احتمال به سطح مقطع دیفرانسیلی بستگی دارد. در این‌جا عبارت $\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}$ و $\phi)\,\mathrm{d}\Omega$ به صورت احتمالی از یک برخورد تعریف می‌شود که ذره‌ی فرودی را با زاویه‌ی مرکز جرمی در محدوده‌ی (ϕ و $\mathrm{d}\Omega$) پراکنده می‌کند که در آن $\mathrm{d}\Omega$ یک عنصر از زاویه‌ی سه بعدی حول محور پراکندگی ϕ است. از آن‌جایی که احتمال‌های دیفرانسیلی نوشته شده در متغیرهای تبدیل شده معادل هستند، ($\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}$ و ϕ) می‌تواند برحسب متغیرهای مرکز جرم نوشته شود:

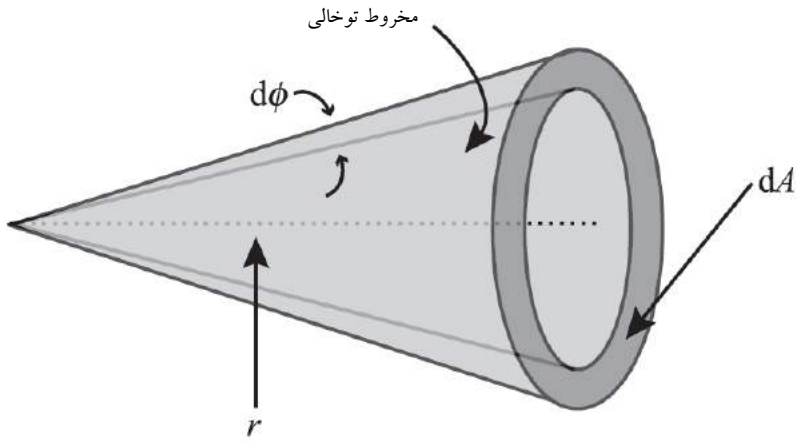
(۱-۱۵)

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}, T)\,\mathrm{d}T = \sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}, \phi)\,\mathrm{d}\Omega\,.$$

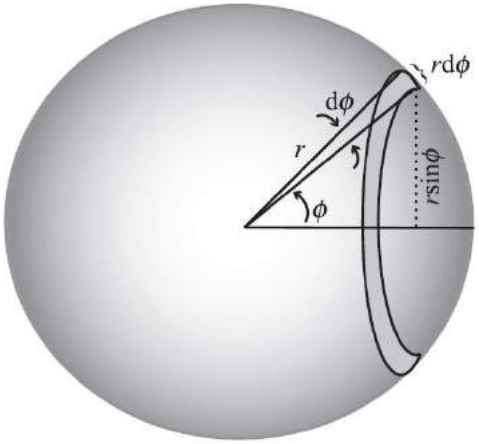
با استفاده از شکل ۱-۳ که $\mathrm{d}\Omega$ را به $\mathrm{d}\phi$ نسبت می‌دهد و با توجه به تعاریف:

(۱-۱۶)

$$\mathrm{d}\Omega = \mathrm{d}A/r^2\,,$$



شکل ۱-۳. پراکندگی در داخل عنصر زاویه‌ای فضایی $d\Omega$ تعریف شده به وسیله‌ی dA/r^2.



شکل ۱-۴. زاویه‌ی فضایی $d\Omega$ گسترش یافته در زاویه‌ی پراکندگی ϕ به وسیله‌ی زاویه‌ی نمایی $d\phi$.

و از شکل ۱-۴ می‌توان نوشت:

(۱-۱۷)

$$d\Omega = \frac{r\,d\phi\,(2\pi r\sin\phi)}{r^2} = 2\pi\sin\phi\,d\phi\,.$$

حال با جایگذاری رابطه‌ی ۱–۱۷ در رابطه‌ی ۱–۱۵، رابطه‌ی ۱–۱۸ حاصل می‌شود:

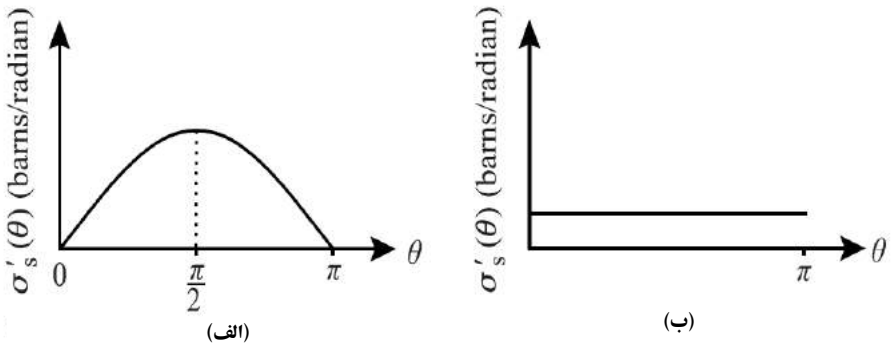
(۱–۱۸)

$$\sigma_s(E_i,T)\,dT = \sigma_s(E_i,\phi)\,d\Omega = 2\pi\sigma_s(E_i,\phi)\sin\phi\,d\phi\,.$$

و از آن‌جایی که $T=\frac{\gamma}{2}E_i(1-\cos\phi)$ است، در نتیجه داریم $dT=\frac{\gamma}{2}E_i\sin\phi\,d\phi$، آن‌گاه می‌توان نوشت:

(۱–۱۹)

$$\sigma_s(E_i,T)=\frac{4\pi}{\gamma E_i}\sigma_s(E_i,\phi)\,.$$



شکل ۱–۵. سطح مقطع دیفرانسیلی هم‌سانگرد در واحدهای (الف) مساحت در واحد زاویه‌ی پراکندگی و (ب) مساحت در واحد زاویه‌ی فضایی.

شکل ۱–۵ تفاوت در سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی در واحدهای سطح در زاویه‌ی فضایی واحد برحسب سطح در زاویه‌ی واحد با توجه به رابطه‌ی ۱–۱۸ را نشان می‌دهد. اگرچه تعداد اتم‌های پراکنده شده در سرتاسر یک افزایش زاویه $d\phi$ در اطراف $\phi=\pi/2$ بیش‌تر از تعداد اتم‌های پراکنده شده در سرتاسر یک افزایش زاویه‌ای $d\phi$ در اطراف $\phi=0$ یا π می‌باشند (شکل ۱–۵ الف)، ولی تعداد

سطوح کروی بریده شده در واحد زاویه‌ی فضایی در تمام زوایای ϕ ثابت است (شکل ۱-۵ ب). از این‌رو $\mathrm{d}T/\mathrm{d}\phi$ به صورت سینوسی با ϕ تغییر می‌کند؛ اما $\mathrm{d}T/\mathrm{d}\Omega$ مستقل از ϕ است.
با توجه به رابطه‌های ۱-۲ و ۱-۱۸ سطح مقطع کلی پراکندگی کشسان برابر است با:

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}) = \int \sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},\phi)\,\mathrm{d}\Omega = 2\pi \int \sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},\phi)\sin\phi\,\mathrm{d}\phi\,.$$

اگر فرض شود که پراکندگی کشسان در سیستم مرکز جرم مستقل از زاویه پراکندگی است (به عبارت دیگر پراکندگی همسان‌گرد[1] است) مطابق با شکل ۱-۶، سپس داریم:

(۱-۲۰)

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}) = \int \sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},\phi)\,\mathrm{d}\Omega = 2\pi\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},\phi)\int \sin\phi\,\mathrm{d}\phi = 4\pi\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},\phi)$$

و

(۱-۲۱)

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},T) = \frac{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}{\gamma E_{\mathrm{i}}}\,,$$

که مستقل از T است! یعنی σ_{s} (E_{i} و T)، احتمالی که یک نوترون با انرژی E_{i}، که در اثر برخورد با یک اتم با جرم M به صورت کشسان پراکنده شده، انرژی پس‌زنی T را به اتم ضربه‌خورده وارد کند به انرژی ضربه بستگی ندارد.
اکنون میانگین انرژی اتم ضربه‌خورده قابل محاسبه است:

(۱-۲۲)

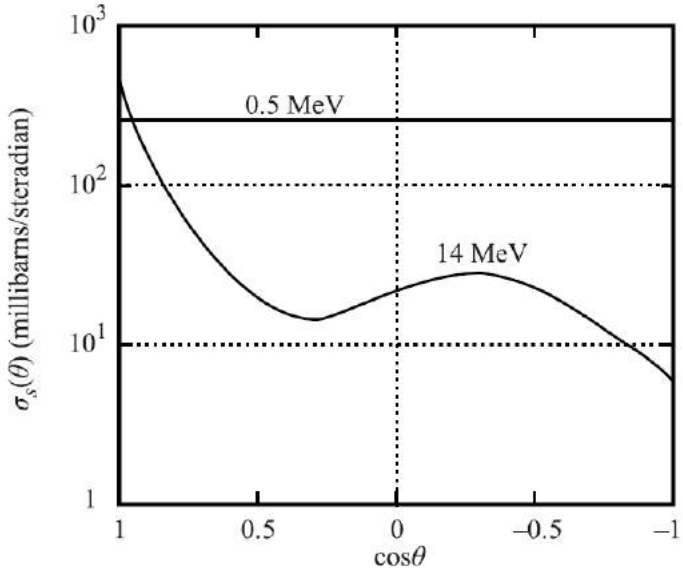
$$\bar{T} = \frac{\int_{\check{T}}^{\hat{T}} T\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},T)\,\mathrm{d}T}{\int_{\check{T}}^{\hat{T}} \sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},T)\,\mathrm{d}T} = \frac{\check{T}+\hat{T}}{2} \approx \frac{\hat{T}}{2} = \frac{\gamma E_{\mathrm{i}}}{2}\,.$$

1. Isotropic

با اعمال رابطه‌ی ۱-۲۲ به موردی مانند یک نوترون فرودی با انرژی 1MeV روی عناصری با جرم متغیر، مقادیر زیر به‌دست می‌آید:

$$\begin{aligned}
&1\,\text{MeV n on C:} \quad \gamma = 0.28 \quad \bar{T} = 0.14\,\text{MeV}\\
&1\,\text{MeV n on Fe:} \quad \gamma = 0.069 \quad \bar{T} = 0.035\,\text{MeV}\\
&1\,\text{MeV n on U:} \quad \gamma = 0.017 \quad \bar{T} = 0.009\,\text{MeV}
\end{aligned}$$

علاوه بر پراکندگی‌های کشسانی که بحث شد، انتقال انرژی به وسیله‌ی پراکندگی‌های غیرکشسان، واکنش‌های (۲n و n) و واکنش های (γ و n)، نیز وجود دارد. دو واکنش اول در مقادیر انرژی‌های نوترونی بالاتر از ۱٫۰ و ۸٫۰MeV بسیار اهمیت می‌یابند، درحالی‌که واکنش آخر، در انرژی‌های نوترون حرارتی در U^{235} اتفاق می‌افتد.



شکل ۱-۶. سطح مقطع‌های دیفرانسیلی پراکندگی کشسان برای C^{12} در نوترون‌های ۰٫۵MeV و ۱۴MeV به صورت تابعی از کسینوس زاویه‌ی پراکندگی مرکز جرم[۲].

۱-۱-۲ پراکندگی غیرکشسان

پراکندگی غیرکشسان به وسیله‌ی واکنشی توصیف می‌شود که در آن ذره‌ی ساطع شده عملاً شبیه ذره‌ی گیر افتاده است؛ اما یک اتلاف انرژی جنبشی در سیستم وجود دارد. این انرژی به صورت انرژی برانگیختگی هسته‌ی تولیدی ظاهر می‌شود، به عبارت دیگر N^{14} (p , p′) N^{14*} یا C^{14} (n , n′)C^{14*}. تفاوت در انرژی گروه‌های ذره‌های پراکنده شده، مطابق با انرژی جداشدگی ترازهای برانگیختگی در هسته‌ی تولید شده است:

$$Q = \sum_f KE_f - \sum_i KE_i = \sum_f M_f c^2 - \sum_i M_i c^2 .$$

در یک برخورد غیرکشسان، یک نوترون به وسیله‌ی هسته جذب شده و یک هسته مرکب[1] (هسته‌ای با برانگیختگی بالا و نیمه عمر کوتاه که به صورت یک مرحله‌ی میانی در واکنش هسته‌ای القاء شده شکل می‌گیرد) ایجاد می‌شود که این هسته یک نوترون و یک پرتو گاما نشر می‌کند. ممکن است که بیش‌تر از یک پرتو گاما ساطع شود و هم‌چنین ممکن است که هسته در طول مسیر یک برهم‌کنش، در یک حالت برانگیخته باقی بماند. سطح مقطع پراکندگی غیرکشسان به دو مؤلفه‌ی تشدید تفکیک شده و غیرتفکیک شده[2] تقسیم می‌شود [۳]. برای یک تشدید معین (تشدید jth) از هسته‌ی هدف، سطح مقطع پراکندگی تابعی از Q_j، انرژی واپاشی گامای هسته باقی‌مانده است که همیشه منفی خواهد بود. مشابه رابطه‌ی ۱-۱۵ می‌توان تساوی‌های دیفرانسیلی $\sigma_{sj}(Ei, Q_j, T)\,dT = \sigma_{sj}(Ei, Q_j, \phi)\,d\Omega$ را نوشت، در نتیجه، داریم:

(۱-۲۳)

$$\sigma_{sj}(E_i, Q_j, T) = \sigma_{sj}(E_i, Q_j, \phi)\, 2\pi \sin\phi \frac{d\phi}{dT} .$$

به هرجهت عبارت موجود برای T در معادله‌ی ۱-۱۳ برای برخوردهای غیرکشسان معتبر نیست، زیرا بقای انرژی جنبشی حفظ نمی‌شود. در عوض باید روی بقای انرژی کلی تمرکز شود. اگر هسته‌ی

1. Compound Nucleus
2. Unresolved Resonance

هدف M در سیستم آزمایشگاهی در حالت سکون باشد و ذره‌ی m دارای انرژی E_{i} باشد، در نتیجه تعادل انرژی در مختصات مرکز جرم به صورت زیر خواهد بود:

(۱-۲۴)

$$\frac{M}{M+m}E_{\mathrm{i}}+Q_j=E'_{\mathrm{m}}+E'_{\mathrm{M}},$$

که در این رابطه‌ی Q_j انرژی واکنش است و E'_{M} و E'_{m} به ترتیب انرژی جنبشی ذره‌ی خارجی و هسته در مختصات مرکز جرم هستند. برای آن‌که بقای اندازه‌ی حرکت محفوظ باقی بماند، داریم:

(۱-۲۵)

$$mE'_{\mathrm{m}}=ME'_{\mathrm{M}},$$

با ترکیب معادله‌های ۱-۲۴ و ۱-۲۵، با فرض آن‌که جرم‌های پرتابه و هدف پس از واکنش بدون تغییر باقی بمانند، می‌توان نوشت:

$$E'_{\mathrm{m}}=\frac{M}{M+m}\left(Q_j+\frac{M}{M+m}E_{\mathrm{i}}\right)$$

یا

(۱-۲۶)

$$E'_{\mathrm{m}}=\eta_2\left(Q_j+\eta_2 E_{\mathrm{i}}\right).$$

و با یادآوری عبارت اصلی برای T در معادله‌ی ۱-۱۰ ب، داریم:

$$T=\eta_1\eta_2E_{\mathrm{i}}+\frac{\eta_1}{\eta_2}E'_{\mathrm{m}}-2\eta_1\left(E_{\mathrm{i}}E'_{\mathrm{m}}\right)^{172}\cos\phi,$$

و با جایگذاری E'_{m} از معادله‌ی ۱-۲۶ در رابطه‌ی اخیر، می‌توان نوشت:

(۱-۲۷)

$$T\left(E_{\mathrm{i}}, Q_j, \phi\right)=\frac{\gamma}{2} E_{\mathrm{i}}-\frac{\gamma}{2}\left[E_{\mathrm{i}}\left(E_{\mathrm{i}}+Q_j \frac{A+1}{A}\right)\right]^{1/2} \cos \phi+\frac{Q_j}{A+1} .$$

اکنون عبارت $\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\phi}$ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱-۲۸)

$$\frac{\mathrm{d}T\left(E_{\mathrm{i}}, Q_j, \phi\right)}{\mathrm{d}\phi}=\frac{\gamma}{2} E_{\mathrm{i}}\left[1+\frac{Q_j}{E_{\mathrm{i}}} \frac{A+1}{A}\right]^{1/2} \sin \phi .$$

قابل ذکر است که در مورد برخوردهای کشسان $Q_j = 0$ و معادله‌ی ۱-۲۷ به صورت معادله‌ی ۱-۱۳ خلاصه می‌شود. اکنون اگر فرض شود که پراکندگی غیرکشسان در سیستم مرکز جرم همسان‌گرد باشد، در نتیجه داریم:

(۱-۲۹)

$$\sigma_{\mathrm{s}j}\left(E_{\mathrm{i}}, Q_j\right)=\int \sigma_{\mathrm{s}j}\left(E_{\mathrm{i}}, Q_j, \phi\right) \mathrm{d}\Omega=4 \pi \sigma_{\mathrm{s}j}\left(E_{\mathrm{i}}, Q_j, \phi\right) .$$

با جایگذاری معادله‌های ۱-۲۸ و ۱-۲۹ در معادله‌ی ۱-۲۳، معادله‌ی ۱-۳۰ حاصل می‌شود:

(۱-۳۰)

$$\sigma_{\mathrm{s}j}\left(E_{\mathrm{i}}, Q_j, T\right)=\frac{\sigma_{\mathrm{s}j}\left(E_{\mathrm{i}}, Q_j\right)}{\gamma E_{\mathrm{i}}\left(1+\frac{Q_j}{E_{\mathrm{i}}} \frac{A+1}{A}\right)^{1/2}} .$$

این رابطه برای برخوردهای غیرکشسان در ناحیه‌ی تشدید تفکیک شده معتبر است. هنگامی که هسته‌ی مرکب به انرژی‌های به اندازه‌ی کافی بالا برانگیخته می‌شود، ترازهای تشدیدی هم‌پوشانی

کرده و به صورت مجزا قابل تشخیص نیستند. سطح مقطع پراکندگی غیرکشسان به صورت یک تسلسل رفتار می‌کند و به وسیله‌ی یک مدل تبخیری[1] و به صورت زیر توضیح داده می‌شود [۳]:

(۳۱-۱)

$$\sigma_{is}\left(E_i, E'_m, T\right) = \sigma_{is}\left(E_i\right) \frac{f\left(E_i, E'_m\right)}{4\frac{1}{A+1}\left(E_i E'_m\right)^{1/2}},$$

$$\sigma_{is}\left(E_i, T\right) = \sigma_{is}\left(E_i\right) \int_0^{E'^{max}_m} \frac{f\left(E_i, E'_m\right)}{4\frac{1}{A+1}\left(E_i E'_m\right)^{1/2}} \mathrm{d}E'_m,$$

که $f(E_i, E'_m)$ تابع توزیع برای انرژی E'_m از نوترون پراکنده شده در سیستم مرکز جرم است که احتمال این‌که یک نوترون از هسته‌ی مرکب متحرک تبخیر شود را نشان می‌دهد و مقدار آن در سیستم مرکز جرم یک توزیع ماکسولی از دمای هسته‌ای[2] $E_D = kT$ می‌باشد:

(۳۲-۱)

$$f\left(E_i, E'_m\right) = \frac{E'_m}{I\left(E_i\right)} \mathrm{e}^{\left(-E'_m/E_D\right)},$$

و

(۳۳-۱)

$$I\left(E_i\right) = E_D^2 \left[1 - \left(1 + \frac{E'^{max}_m}{E_D}\right) \mathrm{e}^{-E'^{max}_m/E_D}\right],$$

یک عامل بهنجارساز است و به گونه‌ای تعریف می‌شود که:

(۳۴-۱)

$$\int_0^{E'^{max}_m} f\left(E_i, E'_m\right) \mathrm{d}E'_m = 1.$$

بیش‌ترین مقدار E'_m با استفاده از معادله‌ی ۱-۲۶ و با جایگذاری $Q = Q_1$، پایین‌ترین تراز انرژی، تعیین می‌شود و کم‌ترین مقدار E'_m صفر است.

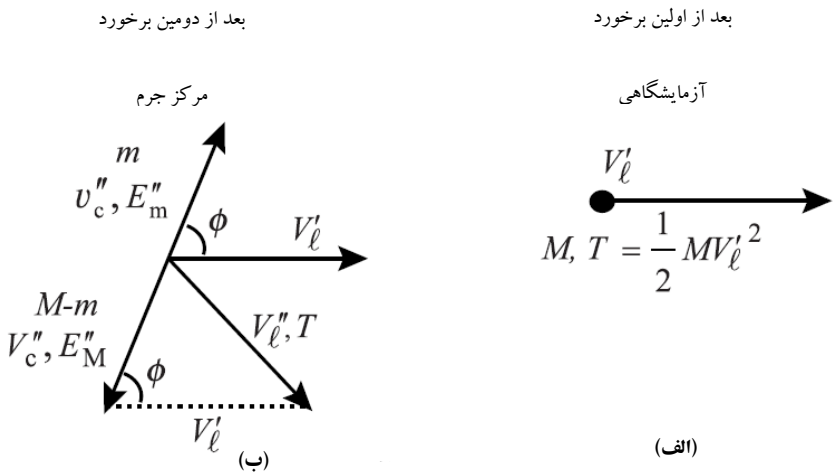
1. Evaporation model
2. Maxwellian of nuclear temperature

۱-۱-۳ واکنش‌های (n ،۲n)

واکنش‌هایی مانند واکنش (n ،۲n) در اثرات تابشی بر روی مواد بسیار حایز اهمیت هستند؛ زیرا این واکنش‌ها، نوترون‌های اضافه‌ای را تولید می‌کنند که می‌توانند منجر به آسیب یا واکنش‌های تبدیل هسته‌ای در ترکیبات مورد نظر شوند. با بررسی مدل ۲n که بر پایه‌ی کارهای اودته[1] [۴] و سگاو[2] [۵] پایه‌گذاری شده است، یک نوترون ثانویه فقط در صورتی می‌تواند ساطع شود که برانگیختگی باقی‌مانده‌ی هسته بعد از نشر اولین نوترون، بیش‌تر از انرژی پیوندی یک نوترون در نوکلوئیدی با جرم M باشد. انرژی پس‌زنی بعد از انتشار اولین نوترون به صورت یک مقدار میانگین در نظر گرفته می‌شود ($\cos\phi = 0$ در معادله‌ی ۱-۱۰ ب) که در شکل ۱-۷ الف و در سیستم آزمایشگاهی نشان داده شده است. سپس دومین واکنش (انتشار) در سیستم مرکز جرم تحلیل می‌شود که در شکل ۱-۷ ب توضیح داده شده است. برای شروع از قانون کسینوس‌ها برای ارتباط دادن V_c'' به ϕ استفاده می‌شود:

(۱-۳۵)

$$V_\ell''^2 = V_\ell'^2 + V_c''^2 - 2V_\ell' V_c'' \cos\phi\,.$$



شکل ۱-۷. سرعت‌های برداری برای واکنش (n ،۲n) در (الف) سیستم آزمایشگاهی و (ب) سیستم مرکز جرمی.

1. Odette
2. Segev

از شکل ۱-۷ الف، می‌توان نوشت:

$$\frac{1}{2}MV_{\ell}'^2 = \bar{T}_{\ell} \quad \text{or} \quad V_{\ell}'^2 = \frac{2\bar{T}_{\ell}}{M},$$

از شکل ۱-۷ ب نیز نتیجه می‌شود که:

$$\frac{1}{2}(M-m)V_{\mathrm{c}}''^2 = E_{\mathrm{M}}'' \quad \text{or} \quad V_{\mathrm{c}}''^2 = \frac{2E_{\mathrm{M}}''}{M-m}.$$

از بقای اندازه‌ی حرکت داریم:

(۱-۳۶)

$$(M-m)V_{\mathrm{c}}'' = mv_{\mathrm{c}}'',$$

با مربع کردن رابطه‌ی اخیر می‌توان نوشت:

(۱-۳۷)

$$V_{\mathrm{c}}''^2 = \left(\frac{m}{M-m}\right)^2 v_{\mathrm{c}}''^2 = \frac{2m}{(M-m)^2}E_{\mathrm{m}}''.$$

با جایگذاری در قانون کسینوس‌ها، معادله‌ی ۱-۳۵ نتیجه می‌شود که:

(۱-۳۸)

$$V_{\ell}''^2 = \frac{2\bar{T}_{\ell}}{M} + \frac{2m}{(M-m)^2}E_{\mathrm{m}}'' - 2\left(\frac{2m}{(M-m)^2}\frac{2}{M}E_{\mathrm{m}}''\bar{T}_{\ell}\right)^{1/2}\cos\phi,$$

که $\bar{T}_1 = \eta_1\eta_2 E_{\mathrm{i}} + (\frac{\eta_1}{\eta_2})E_{\mathrm{m}}'$ انرژی پس‌زنی متوسط بعد از انتشار اولین نوترون است. با نوشتن $V_1''^2$ برحسب انرژی، انرژی پس‌زنی دومین انتشار به‌دست می‌آید که برابر است با:

(۳۹-۱)

$$
\begin{aligned}
T &= \frac{1}{2}(M-m)V_\ell''^2 \\
&= \frac{M-m}{M}\bar{T}_\ell + \frac{m}{M-m}E_{\mathrm{m}}'' - 2\left(\frac{m}{M}\right)^{1/2}(E_{\mathrm{m}}''\bar{T}_\ell)^{1/2}\cos\phi \\
&= \frac{A-1}{A}\bar{T}_\ell + \frac{1}{A-1}E_{\mathrm{m}}'' - 2\left(\frac{1}{A}\right)^{1/2}\left(\bar{T}_\ell E_{\mathrm{m}}''\right)^{1/2}\cos\phi \\
&= \frac{A}{A-1}\frac{\eta_1}{\eta_2}E_{\mathrm{m}}'' + \frac{A-1}{A}\bar{T}_\ell - 2\left(\frac{\eta_1}{\eta_2}\right)^{1/2}\left(\bar{T}_\ell E_{\mathrm{m}}''\right)^{1/2}\cos\phi\,.
\end{aligned}
$$

سطح مقطع واکنش (n,۲n) یک مورد خاص از سطح مقطع پراکندگی غیرکشسان تعیین شده در رابطه‌ی ۱-۳۱ می‌باشد:

(۴۰-۱)

$$
\begin{aligned}
&\sigma_{\mathrm{n,2n}}\left(E_{\mathrm{i}}, E_{\mathrm{m}}', E_{\mathrm{m}}'', T\right) \\
&\quad = \sigma_{\mathrm{n,2n}}\left(E_{\mathrm{i}}\right)\frac{E_{\mathrm{m}}'}{I\left(E_{\mathrm{i}}\right)}\mathrm{e}^{-E_{\mathrm{m}}'/E_{\mathrm{D}}}\frac{E_{\mathrm{m}}''}{I\left(E_{\mathrm{i}}, E_{\mathrm{m}}'\right)}\mathrm{e}^{-E_{\mathrm{m}}''/E_{\mathrm{D}}}, \quad \text{and} \\
&\sigma_{\mathrm{n,2n}}\left(E_{\mathrm{i}}, T\right) \\
&\quad = \int_0^{E_{\mathrm{i}}-U}\frac{E_{\mathrm{m}}'}{I\left(E_{\mathrm{i}}\right)}\mathrm{e}^{-E_{\mathrm{m}}'/E_{\mathrm{D}}}\int_0^{E_{\mathrm{i}}-U-E_{\mathrm{m}}'}\frac{E_{\mathrm{m}}''}{I\left(E_{\mathrm{i}}, E_{\mathrm{m}}'\right)}\mathrm{e}^{-E_{\mathrm{m}}''/E_{\mathrm{D}}}\,\mathrm{d}E_{\mathrm{m}}'\,\mathrm{d}E_{\mathrm{m}}'',
\end{aligned}
$$

که $I(E_{\mathrm{i}})$ در معادله‌ی ۱-۳۳ با $E_{\mathrm{m}}'^{\max} = E_{\mathrm{i}} - U$ تعیین شده است و $I(E_{\mathrm{i}}, E_{\mathrm{m}}')$ با جایگزین کردن $E_{\mathrm{m}}'^{\max}$ در معادله‌ی ۱-۳۳ با $E_{\mathrm{m}}''^{\max} = E_{\mathrm{i}} - U - E_{\mathrm{m}}'$ به‌دست می‌آید و برای واکنش‌های (n ،۲n)، U = 0 است [۳].

۱-۱-۴ واکنش‌های (γ، n)

گروه دیگری از واکنش‌ها که می‌توانند وسعت آسیب تابشی را تحت تأثیر قرار دهند، شامل انتشار فوتون می‌باشد. این واکنش از این جهت حایز اهمیت است که انرژی هسته‌ی ضربه‌خورده برای جابه‌جایی یک اتم کافی است. همان طوری که در آینده خواهیم دید، این نوع جابه‌جایی‌ها اساساً در

آسیب تابشی در مخازن رآکتورهای تحت فشار اهمیت پیدا کنند که در آن‌ها شار گاما از شار نوترون سریع در قلب رآکتور بسیار قابل توجه‌تر است. با یادآوری قوانین بقای انرژی و اندازه‌ی حرکت از معادله‌های ۱-۳ و ۱-۴ و شکل ۱-۱ که برای واکنش‌های (n ،γ) می‌باشند، $E_i \sim 0$ است. به علت آن‌که این واکنش‌ها با نوترون‌های حرارتی با انرژی ۰٫۰۲۵ eV رخ می‌دهند و نیز $E_f \equiv 0$ است، چون هیچ نوترون پراکنده شده‌ای وجود ندارد و Q برابر است با تفاوت جرم بین ذره‌های ابتدایی و هسته‌های مرکب. هنگامی که هسته‌ی مرکب از حالت برانگیخته خارج می‌شود، یک پرتو گاما با این انرژی ساطع می‌کند. بقای اندازه‌ی حرکت الزام می‌دارد که هسته با اندازه‌ی حرکتی برابر با رابطه‌ی زیر پس‌زده شود:

(۱-۴۱)

$$(m+M)V_c' = \frac{E_\gamma}{c}.$$

شایان ذکر است که این یک تقریب است، زیرا فاقد هرگونه کاهش عیوب جرمی از هسته مرکب است. با به توان رساندن دوطرف معادله‌ی ۱-۴۱ و تقسیم بر $2(m+M)$ می‌توان نوشت:

$$\frac{1}{2}(m+M)V_c'^2 = \frac{E_\gamma^2}{2(m+M)c^2}.$$

نظر به این‌که در مورد پراکندگی کشسان، T از رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$T = \left(V_{CM}^2 + V_c'^2 - 2V_{CM}V_c'\cos\phi\right)\left(\frac{M+m}{2}\right),$$

از آن‌جایی‌که $V_c' >> V_{CM}$ است و در نتیجه با یک تقریب خوب می‌توان نوشت:

$$T \cong \left(\frac{m+M}{2}\right)V_c'^2 = \frac{E_\gamma^2}{2(M+m)c^2}.$$

اکنون فرض می‌شود که این مقدار T بیشینه‌ی انرژی پس‌زنی را نشان دهد. لیکن با توجه به این‌که تمام Q در یک پرتو گامای تنها ساطع نخواهد شد، میانگین انرژی پس‌زنی به صورت نصف مقدار بیشینه‌ی انرژی پس‌زنی تقریب زده می‌شود، که به‌دست می‌دهد:

(۴۲-۱)

$$\bar{T} \cong \frac{E_\gamma^2}{4(M+m)c^2}.$$

هنگامی که هسته‌ی هدف، اندازه‌ی حرکت زاویه‌ایِ ذاتیِ صفر دارد و هسته مرکب یک پهنای نوترونی Γ_n و یک پهنای تابشی Γ_g و یک پهنای کلی Γ را دارد و E_0 انرژی تشدیدی و λ طول موج باشند، سطح مقطع گیراندازی تابشی[1] از فرمول تک سطحی Breit-Wigner به‌دست می‌آید[۶]:

(۴۳-۱)

$$\sigma_{n,\gamma}(E_i) = \pi\lambda^2 \frac{\Gamma_n \Gamma_\gamma}{(E_i - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2}.$$

با بیان معادله‌ی۱-۴۳ برحسب σ_0، بیشینه‌ی مقدار سطح مقطع گیراندازی تابشی (در $E = E_0$) و متناسب گرفتن Γ_n به $1/\lambda$ و $\sqrt{E}$ نتیجه می‌شود که:

(۴۴-۱)

$$\sigma_{n,\gamma}(E_i) = \sigma_0 \sqrt{\frac{E_0}{E_i}} \left\{ \frac{1}{[(E_i - E_0)/(\Gamma/2)]^2 + 1} \right\}.$$

جدول ۱-۲ خلاصه‌ای از انتقال انرژی و سطح مقطع‌های انتقال انرژی را برای انواع مختلفی از واکنش‌های مورد بحث در قسمت ۱-۱ نشان می‌دهد.

1. Radiative Capture Cross Section

جدول ۱-۲. انتقال انرژی و سطح مقطع‌های انتقال انرژی برای انواع مختلفی از برخوردهای نوترون ـ هسته.

نوع برخورد	انتقال انرژی و سطح مقطع انتقال انرژی	معادله در متن
پراکندگی کشسان	$T=\frac{\gamma}{2}E_{\mathrm{i}}(1-\cos\phi)$	(۱-۱۳)
	$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},T)=\frac{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}{\gamma E_{\mathrm{i}}}$	(۱-۲۱)
پراکندگی غیرکشسان	$T(E_{\mathrm{i}},Q_j,\phi)=\frac{\gamma}{2}E_{\mathrm{i}}-\frac{\gamma}{2}\left[E_{\mathrm{i}}\left(E_{\mathrm{i}}+Q_{\mathrm{i}}\frac{A+1}{A}\right)\right]^{1/2}\cos\phi+\frac{Q_j}{A+1}$	(۱-۲۷)
ناحیه‌ی تشدید	$\sigma_{\mathrm{s},j}(E_{\mathrm{i}},Q_j,T)=\frac{\sigma_{\mathrm{s},j}(E_{\mathrm{i}},Q_j)}{\gamma E_{\mathrm{i}}\left(1+\frac{Q_j}{E_{\mathrm{i}}}\frac{l+A}{A}\right)^{1/2}}$	(۱-۳۰)
ناحیه‌ی تشدید غیرتفکیک شده	$\sigma_{\mathrm{is}}(E_{\mathrm{i}},T)=\sigma_{\mathrm{is}}(E_{\mathrm{i}})\int_0^{E_{\mathrm{m}}^{l\max}}\frac{f(E_{\mathrm{i}},E'_{\mathrm{m}})}{\frac{1}{4}\frac{1}{A+1}(E_{\mathrm{i}}E'_{\mathrm{m}})^{1/2}}\,\mathrm{d}E'_{\mathrm{m}}$	(۱-۳۱)
(n,2n)	$T=\frac{A}{A-1}\frac{\eta_1}{\eta_2}E''_{\mathrm{m}}+\frac{A-1}{A}\bar{T}_\ell-2\left(\frac{\eta_1}{\eta_2}\right)^{1/2}(\bar{T}_\ell E''_{\mathrm{m}})^{1/2}\cos\phi$	(۱-۳۹)
	$\sigma_{\mathrm{n,2n}}(E_{\mathrm{i}},T)=\int_0^{E_{\mathrm{i}}-U}\frac{E'_{\mathrm{m}}}{I(E_{\mathrm{i}})}\mathrm{e}^{-E'_{\mathrm{m}}/E_{\mathrm{D}}}\times\int_0^{E_{\mathrm{i}}-U-E'_{\mathrm{m}}}\frac{E''_{\mathrm{m}}}{I(E_{\mathrm{i}},E'_{\mathrm{m}})}\mathrm{e}^{-E''_{\mathrm{m}}/E_{\mathrm{D}}}\,\mathrm{d}E'_{\mathrm{m}}\,\mathrm{d}E''_{\mathrm{m}}$	(۱-۴۰)
(n,γ)	$\bar{T}\cong\frac{E_\gamma^2}{4(M+m)c^2}$	(۱-۴۲)
	$\sigma_{\mathrm{n},\gamma}(E_{\mathrm{i}})=\sigma_0\sqrt{\frac{E_0}{E_{\mathrm{i}}}}\left\{\frac{1}{[(E_{\mathrm{i}}-E_0)/(\Gamma/2)]^2+1}\right\}$	(۱-۴۴)

۱-۲ برهم‌کنش‌های میان اتم‌ها و یون‌ها

برخوردهای یون ـ اتم یا اتم ـ اتم به وسیله‌ی برهم‌کنش‌های میان ابرهای الکترونی، ابر الکترونی و هسته و میان هسته‌ها کنترل می‌شوند. این برهم‌کنش‌ها به وسیله‌ی آن‌چه که به عنوان پتانسیل‌های بین اتمی شناخته شده‌اند، توضیح داده می‌شوند. به منظور شرح گسترده از سطح مقطع‌های انتقال انرژی

برای برهم‌کنش‌های میان اتم‌ها، نیاز به توضیحاتی در مورد توابع پتانسیلی است که آن برهم‌کنش‌ها را پوشش دهد. متأسفانه هیچ تابع تکی وجود ندارد که تمام برهم‌کنش‌ها را توصیف کند؛ اما ماهیت برهم‌کنش‌ها شدیداً تابع انرژی‌های اتمی است و از این‌رو تابع فاصله‌ی نزدیک‌ترین مسیر برخورد هسته‌ها می باشد. در قسمت بعد خلاصه‌ای از پتانسیل‌های بین اتمی که از چادرتون[1] اقتباس شده است [۷]، توضیح داده خواهد شد.

۱-۲-۱ پتانسیل‌های بین اتمی

محصول پایانی برهم‌کنش نوترون ـ هسته ایجاد یک اتم جداشده‌ی اولیه با مقداری انرژی جنبشی است. این اتم برخوردهای بعدی با دیگر اتم‌ها در جامد را ایجاد خواهد کرد. دانش نیروهای عمل کننده بین دو اتم برخورد کننده جنبه‌های اساسی آسیب‌های تابشی را بیان می‌کند که بدون آن توضیح درستی از وقایع اولیه و عیوب ساختاری متعاقب آن غیرممکن است. بیش‌ترین توجه در این فصل برروی نیروهای بین اتم‌های مشابه، اتم‌های غیرمشابه یا یون‌ها و اتم‌ها است. توضیح برهم‌کنش‌های بین اتم‌ها با استفاده از توابع پتانسیلی اجرا می‌شود. یادآوری می‌شود که اتم‌ها معمولاً از نظر الکتریکی خنثی هستند ولی ترکیبی از اجزای مثبت و منفی می‌باشند که در تمام نقاط در فضا خنثی نمی‌شوند. مشخص شده است که انرژی پتانسیل بین دو بار نقطه‌ای هم علامت با فاصله‌ی r از یک‌دیگر به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر توصیف می‌شود که معادله‌ی کولن[2] نامیده می‌شود:

(۴۵-۱)

$$V(r) = \frac{\varepsilon^2}{r},$$

که در این رابطه ε واحد بار است. به هرجهت در مورد اتم‌ها، هسته‌ی بارداری وجود دارند که به وسیله‌ی یک ابر الکترونی با بار مخالف احاطه شده است. کاملاً واضح است که تابع پتانسیلی توضیح دهنده برهم‌کنش بین اتم‌ها بسیار پیچیده است. حتی در ساده‌ترین مورد، $V(r)$، هیچ‌گاه به صورت دقیق تعیین نشده است؛ اما بعضی از بررسی‌های ساده نشان می‌دهد که این تابع به وسیله‌ی دو بخش

1. Chadderton
2. Coulomb equation

مجزا در سراسر محدوده بررسی و کنترل می‌شود. شاید ساده‌ترین تابع از تمام توابع پتانسیلی، تقریب کره‌ی سخت است. این پتانسیل به صورت زیر توضیح داده می‌شود:

(۴۶-۱)

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{for} \quad r > r_0 \\ \infty & \text{for} \quad r < r_0 \,. \end{cases}$$

این تابع پتانسیلی یک برهم‌کنش با یک لبه‌ی حدی[1] بی‌نهایت تیز در شعاع اتمی r_0 را توضیح می‌دهد. در فواصل بیش‌تر نسبت به این شعاع، برهم‌کنش ناپدید می‌شود، درحالی‌که در فواصل کم‌تر از r_0 اندازه‌ی بی‌نهایت است. این توضیح با رفتار توپ‌های بیلیارد قابل مقایسه است و از این‌رو، اتم‌ها در این مدل در نقش عمل کننده به همین صورت توضیح داده می‌شوند. به صورت واضح این یک توضیح واقع بینانه از برخوردهای اتم به اتم نمی‌باشد؛ زیرا مشخص شده است که لایه‌های الکترونی می‌توانند هم‌پوشانی داشته باشند.

شکل ۱-۸ نشان می‌دهد که چه‌طور پتانسیل بین اتمی با فاصله‌ی بین اتم‌ها تغییر می‌کند. در فواصل زیاد برهم‌کنش اصلی به وسیله‌ی نیروهای کولنی فراهم می‌شود، درحالی‌که در فواصل کم‌تر نیروهای دافعه‌ی میدان مرکزی غالب هستند. صرف نظر از ماهیت پیوندها، روابط مشابه‌ای به تمام بلورها اعمال می‌شود. در تمام موارد، یک منحنی صاف با یک قسمت کمینه در فاصله جدایش مطابق با فاصله‌ی نزدیک‌ترین همسایه در شبکه، r_e (هم‌چنین به صورت D نیز گزارش می‌شود) وجود دارد.

در توضیح برهم‌کنش بین اتم‌ها، دو مقیاس برای نقاط مرجع استفاده می‌شود. یکی از آن دو، شعاع بوهر اتم هیدروژن، $a_\circ$ = ۰٫۰۵۳ nm است که اندازه‌ای از موقعیت لایه‌های اتمی را فراهم می‌کند. مقیاس دیگر r_e است که فاصله‌ی بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها در بلور (به صورت نمونه تقریباً ۰٫۲۵ nm) است. هنگامی که $r << r_e$ باشد، الکترون‌ها پایین‌ترین سطوح انرژی (لایه‌های مسدود[2]) اتم‌های مشخص را اشغال می‌کنند و فقط لایه‌های ظرفیت بیرونی دارای سطوح خالی خواهند بود. هنگامی که دو اتم در کنار یک‌دیگر قرار می‌گیرند، لایه‌های ظرفیت در یک‌دیگر تداخل می‌کنند و نیروهای جاذبه ضعیف مانند نیروهای واندروالس ظاهر می‌شوند. هنگامی که $a_\circ < r \leq r_e$ باشد،

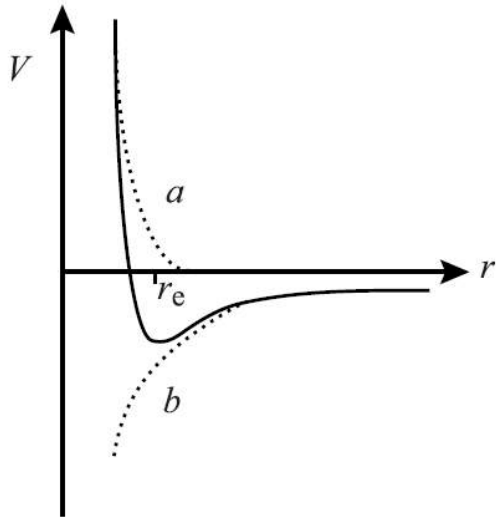
1. Cut-off

۲. اشاره به تغییرات در چهار عدد کوانتومی برای یک مقدار عدد کوانتومی n، در محدوده‌ی اصل طرد پائولی است. بهترین مثال برای آن گازهای بی‌اثر هستند که مانند هیدروژن یک یا تعداد بیش‌تری لایه‌های مسدود را دارند.

لایه‌های داخلی مسدود در یک‌دیگر تداخل می‌کنند. با توجه به اصل طرد پائولی[1] بعضی از الکترون‌ها تمایل دارند که سطوح خودشان را تغییر دهند و از این‌رو به سطوح انرژی بالاتر حرکت می‌کنند. این انرژی اضافی اتم‌ها را به سمت یک‌دیگر حرکت می‌دهد و یک انرژی پتانسیل مثبت متقابلی را ایجاد می‌کند که به عنوان دافعه‌ی لایه‌ی مسدود[2] شناخته می‌شود و پتانسیلی که به صورت بسیار دقیق این ناحیه را توضیح می‌دهد، پتانسیل بورن ـ مایر[3] می‌باشد:

$$V(r) = A\exp(-r/B)\,, \qquad (۴۷-۱)$$

که در این رابطه A و B ثابت‌های تعیین شده از مدول کشسانی می‌باشند [۸]. اگرچه این تابع اولین بار توسط بورن و مایر برای نشان دادن دافعه‌ی هسته‌ی یون در تئوری بلورهای یونی این دانشمندان استفاده شد، ولی این تابع برای فواصلی در حدود فاصله‌ی تعادلی، r_e، کاملاً صادق است و در رفتار برخوردهای آستانه یا نزدیک به آستانه که پارامتر برخوردی در حدود r_e است، نیز مفید است.



شکل ۱-۸ . تغییرات پتانسیل بین اتمی با فاصله‌ی جدایش، r. نیروهای کولنی در فواصل زیاد (b) غالب هستند و در فواصل کم (a) نیروی دافعه‌ی مرکزی غالب می‌باشند و در فواصل میانی یک گذار صاف بین دو کرانه با یک کمینه‌ی مرتبط با فاصله‌ی جدایش تعادلی r_e یا D وجود دارد.

1. Pauli exclusion principle
2. Closed Shell Repulsion
3. Born–Mayer Potential

هنگامی که $r << a_{\circ}$ باشد، برهم‌کنش کولنی بین هسته‌ها، بر تمام مؤلفه‌های دیگر در $V(r)$ غلبه دارد.

(۴۸-۱)

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r}.$$

در فواصل اندکی بزرگ‌تر، بارهای هسته‌ای که وارد فضای بین هسته‌ای شده‌اند، به صورت الکتروستاتیکی به وسیله‌ی بارهای فضایی لایه‌های الکترونی درونی‌تر استتار می‌شوند. پتانسیل توضیح دهنده‌ی این رفتار به عنوان پتانسیل استتار شده‌ی کولنی[1] شناخته می‌شود [۸-۱۲] :

(۴۹-۱)

$$V(r) = \left(\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r}\right) \exp(-r/a),$$

که $a = Ca_0 / (Z_1 Z_2)^{1/6}$ یا $a = Ca_0 / (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$، $C = ۰٫۸۸۵۳$ و $a_{\circ}$ شعاع بوهر اتم هیدروژن است. به طور کلی استتار از طریق ابر الکترونی به وسیله‌ی یک تابع استتار $\chi(r)$ توضیح داده می‌شود که برای نسبت پتانسیل اتمی واقعی در یک شعاع r به پتانسیل کولنی تعریف می‌شود. تابع $\chi(r)$، برای تعدیل پتانسیل کولنی برای توضیح برهم‌کنش بین اتم‌ها در تمام فواصل جدایش است. برای فواصل بزرگ‌تر، $\chi(r)$ به سمت صفر میل می‌کند و در فواصل بسیار کوچک $\chi(r)$ به سمت واحد میل خواهد کرد، این راهی است که به وسیله‌ی آن یک تابع پتانسیل بین اتمی واحد می‌تواند برای توضیح تمام برخوردها مورد استفاده قرار گیرد.

در ادامه دو نوع از برهم‌کنش‌ها توضیح داده خواهد شد. در فواصل جدایش کم ($r << a_{\circ}$) عبارت عبارت استتار شده‌ی کولنی بر دیگر بخش‌ها غالب است که به صورت نمایی با فاصله‌ی جدایش کاهش می‌یابد. در ناحیه‌ی $a_{\circ} < r \leq r_e$ برهم‌کنش‌های الکترونیکی غالب هستند و به خوبی به وسیله‌ی پتانسیل بورن ـ مایر توضیح داده شده‌اند. در فواصل جدایش متوسط هیچ توضیح رضایت‌بخشی از

1. Screened coulomb potential

ماهیت برهم‌کنش اتمی وجود ندارد. متأسفانه، دقیقاً در این ناحیه است که برای فراهم کردن تحلیلی مناسب از آسیب‌تابشی، اطلاعاتی مورد نیاز است.

این امکان وجود دارد که با جمع پتانسیل‌های کنترل کننده در فواصل جدایش کم و زیاد، یک تقریب اولیه از پتانسیل کلی ایجاد شود:

(۵۰-۱)

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r} \exp(-r/a) + A \exp(-r/B),$$

که در این رابطه $A = 2.58\times10^{-5}(Z_1 Z_2)^{11/4} e\mathrm{V}$ و $B = 1.5a_0 / (Z_1 Z_2)^{1/6}$ فرمول‌های تجربی پیشنهاد شده به وسیله‌ی برینکمن[1] [۱۱] هستند که با تراکم‌پذیری و مدول کشسانی مشاهده شده در فلزات نجیب مانند Cu، Ag و Au سازگار می‌باشند. متأسفانه اطلاعات آزمایشگاهی کمی در مورد نیروهای بین اتم‌های فلز وجود دارد که هدف اصلی مطالعات هستند. شکل ۱-۹ نشان می‌دهد که عبارت اول برای فاصله‌های کوچک و عبارت دوم برای فواصل بزرگ‌تر غالب هستند.

برینکمن مدلی را برای برهم‌کنش بین دو اتم مشابه که در آن‌ها هسته با توزیع بار الکتریکی صلب، ρ_ε، احاطه شده است، پیشنهاد کرد که در آن فرض شده است که هردو اتم میدان استتار شده‌ی کولنی از یک نوع را فراهم می‌سازند:

(۵۱-۱)

$$V(r) = \frac{Z^2 \varepsilon^2}{r} \mathrm{e}^{-r/a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right).$$

وقتی r به سمت صفر نزدیک می‌شود، این رابطه به پتانسیل دافعه‌ی کولنی نزدیک می‌شود و در $r = 2a$ تغییر علامت داده و به یک پتانسیل جاذب ضعیف با کمینه‌ای در $r = a(1+\sqrt{3})$ تبدیل می‌شود. لیکن این پتانسیل یک انرژی برهم‌کنشی قوی را در فواصل بزرگ پیش‌بینی می‌کند و نمی‌تواند معرف یک تصویر فیزیکی واقعی برای فلزات باشد. برینکمن یک تابع پتانسیل جدید را به صورت زیر فرمول‌بندی کرد:

1.Brinkman

(۵۲-۱)

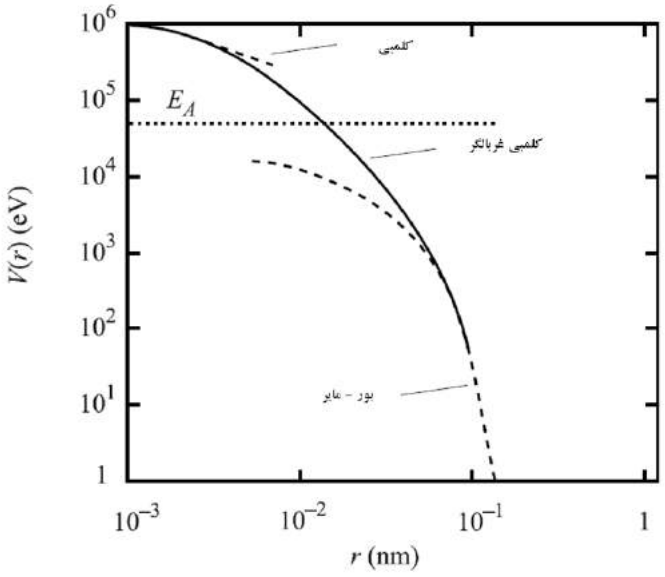
$$V(r) = \frac{AZ_1Z_2\varepsilon^2 \exp(-Br)}{1-\exp(-Ar)}.$$

قابل ذکر است که برای مقادیر کوچک r، تابع پتانسیل برهم‌کنش دافعه‌ی کولنی را به دقت تقریب می‌زند، به عبارت دیگر:

$$\lim_{r\to\infty} V(r) \to \frac{Z_1Z_2\varepsilon^2}{r},$$

و در فواصل بزرگ، معادله‌ی پتانسیل، دافعه‌ی نمایی نوع بورن ـ مایر را تقریب می‌زند:

$$\lim_{r\to\infty} V(r) \to AZ_1Z_2\varepsilon^2 \exp(-Br).$$



شکل ۱-۹. رفتار توابع پتانسیلی مختلف در یک محدوده‌ای از فواصل جدایی میان اتم‌های مس.

ثابت B به صورت $B = Z_{\text{eff}}^{1/3} / Ca_0$ تعریف می‌شود که $Z_{\text{eff}} = (Z_1 Z_2)^{1/2}$ و C در مرتبه‌ی ۱ یا ۱٫۵ می‌باشد. ثابت A به تراکم‌پذیری و مدول حجمی بستگی دارد که به روی‌هم افتادگی لایه‌های الکترونی مسدود وابسته است. یک عبارت تجربی برای A به صورت $A = \frac{0.95\times10^{-6}}{a_0} Z_{\text{eff}}^{7/6}$ است.
با جایگذاری ثابت‌های A، B و C=۱٫۵ در رابطه‌ی ۱-۵۲ عبارت زیر حاصل می‌شود:

(۱-۵۳)

$$V(r) = 1.9\times10^{-6} Z_{\text{eff}}^{1/2} E_{\text{R}} \frac{\exp\left(-Z_{\text{eff}}^{1/3} r/1.5a_0\right)}{1-\exp\left(-0.95\times10^{-6} Z_{\text{eff}}^{7/6} r/a_0\right)},$$

که $E_{\text{R}} = \varepsilon^2 / 2a_0$ انرژی ریدبرگ[1] است (۱۳٫۶ eV).
این نکته باید ذکر شود که اگرچه تابع پتانسیل، یک تابع معتبر منطقی برای تمام فلزاتی است که عدد اتمی آن‌ها در سراسر محدوده‌ی $r <$ ۰٫۷ r_e ، بالاتر از ۲۵ است؛ اما این تابع نباید در نزدیک $r = r_e$ استفاده شود. زیرا در استخراج این عبارت به صورت ضمنی فرض شده است که تمام فواصل بین اتمی نزدیک به مقادیر مربوط به Cu، Ag و Au می باشد. بنابراین، این تابع یک پتانسیل معتبر برای استفاده در محاسبه‌ی انرژی‌های تشکیل و مهاجرت عیوب نقطه‌ای نمی‌باشد.
دو تابع پتانسیلی دیگر باید بحث شوند. اولی پتانسیل دو مرکزی فیرسو[2] یا توماس ـ فرمی[3] می‌باشد. این تابع پتانسیلی یک تابع اصلاح یافته از پتانسیل استتار شده‌ی کولنی است؛ زیرا مبنای آن محاسبه‌ی تغییر در انرژی الکترونی مرتبط با برخورد متقابل هسته‌ها می‌باشد. این پتانسیل می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$V(r) = \frac{\chi(r)}{r},$$

1. Rydberg energy
2. Firsov
3.Thomas–Fermi

که $\chi(r)$ تابع استتار است. در مورد پتانسیل استتار شده‌ی کولنی:

(۵۴-۱)

$$\chi(r) = \chi_B(r)$$
$$\chi_B(r) = Z_1 Z_2 \varepsilon^2 \exp(-r/a),$$

درحالی‌که در پتانسیل فیرسو:

(۵۵-۱)

$$\chi(r) = \chi_{TF}(r/a) = \chi\left[\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3} \frac{r}{a}\right],$$

بنابراین می توان نوشت:

(۵۶-۱)

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r} \chi\left[\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3} \frac{r}{a}\right],$$

که

$$\chi\left[\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2}\right)^{2/3} \frac{r}{a}\right]$$

یک تابع استتار است.

دومین پتانسیل مورد توجه، پتانسیل دو مرکزی توماس ـ فرمی ـ دیراک[1] می‌باشد (TFD). مدل آماری توماس ـ فرمی ـ دیراک برای محاسبه‌ی پتانسیل، از اتم مطابق اصول اولیه استفاده کرده است. در نتیجه، این پتانسیل برای محاسبه‌ی اثرهای تبادلی و مکان‌های یک مرز محدود، تعریف شده به وسیله‌ی

1. Thomas–Fermi–Dirac

r_b، در توزیع فضایی چگالی ابر الکترونی ρ_ε به‌کار گرفته می‌شود. پتانسیل به‌دست آمده برای اتم‌های مشابه برابر است با:

$$\bar{V}(r) = \frac{Z^2\varepsilon^2}{r}\chi\left(Z^{1/3}\frac{r}{a}\right) - \alpha Z + \bar{\Lambda}\,, \qquad (۵۷-۱)$$

که $\alpha \cong 3.16\times10^{-3}\,\frac{\varepsilon^2}{a_0}$ و $\bar{\Lambda}$ یک سری از انتگرال‌های بسیار دقیق چگالی‌های الکترونی تک مرکز می‌باشد. محاسبات با استفاده از این پتانسیل نشان داده است که برای فواصل جدایی بسیار کوچک‌تر از ۰٫۳a، $\bar{V}(r)$ تطابق خوبی با دیگر منحنی‌های نظری و با مقادیر تجربی دارد، درحالی‌که در محدوده‌ی ۰٫۳a تا ۳a، $V(r)$ در توافق بهتری با دیگر نتایج نظری و تجربی از پتانسیل استتار شده‌ی کولنی یا پتانسیل فیرسو است [۷].

در انتخاب پتانسیل مناسب برای یک مسئله‌ی برخوردی خاص، محدوده‌ی جدایی می‌تواند به وسیله‌ی تساوی انرژی جنبشی موجود با پتانسیل تعیین شود و از این‌رو کوچک‌ترین فاصله‌ی جدایی به‌دست می‌آید و سپس عبارت‌های مهم بر هم‌کنش برای محاسبه‌ی جدایی تعیین می‌شود. برای برهم‌کنش‌های میان اتم‌های فلز در انرژی‌های جنبشی پایین، 10^{-1} تا 10^{3} eV، عبارت بورن ـ مایر به تنهایی با ثابت‌های تعیین شده در معادله‌ی ۱-۵۰ کافی خواهد بود. در مورد برخوردهای اتم ـ اتم در آبشار برخورد[1]، که انرژی‌ها در محدوده‌ی 10^{3} تا 10^{5} eV است، پتانسیل توان معکوس بسیار کاربردی است. چنین پتانسیلی می‌تواند به وسیله‌ی جاسازی یک تابع C/r^s در یکی از توابع پتانسیلی بالا در یک گستره‌ی محدودی از r فرمول‌بندی شود. برای مثال می‌توان یک تابع مربع‌معکوس ($s = 2$) را در پتانسیل استتار شده‌ی کولنی در $r = a$ جاسازی کرد و انحنا، عرض از مبدأ و شیب مشابهی را به‌دست آورد [۱۳]:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2 a}{r^2} e^{-1}\,. \qquad (۵۸-۱)$$

1. Collision cascade

برای یک ناحیه‌ی محدود از r، این تابع می‌تواند به عنوان یک پتانسیل مناسب استفاده شود. با بازنویسی رابطه‌ی ۱-۴۹ برای a می‌توان نوشت:

$$V(r) = \frac{2E_R}{e}(Z_1 Z_2)^{5/6}\left(\frac{a_0}{r}\right)^2. \qquad (۵۹-۱)$$

یک تبدیل مناسب برای محاسبات عددی استفاده از این امر است که $\frac{2E_R}{e} \cong 10eV$، و از این‌رو:

$$V(r) = 10(Z_1 Z_2)^{5/6}\left(\frac{a_0}{r}\right)^2 \text{eV}. \qquad (۶۰-۱)$$

این پتانسیل می‌تواند به بمباران یون سنگین در محدوده‌ی انرژی $۱۰^۳$ تا $۱۰^۵$ eV نیز اعمال شود. در مورد یون‌های سبک در انرژی بالا، مانند پروتون، با انرژی ۵ MeV، پتانسیل کولنی ساده مناسب است. جدول ۱-۳ توابع پتانسیلی مختلف و نواحی را نشان می‌دهد که این توابع قابل استفاده هستند؛ اما چگونه می‌توان درستی یک تابع پتانسیلی را تعیین کرد؟ برای مثال چگونه می‌توان ثابت‌های A و B در پتانسیل بورن ـ مایر برای یک عنصر مشخص را تعیین کرد؟ از آن‌جایی که پتانسیل بورن ـ مایر بر پایه‌ی فواصل تعادلی کوچک است (به عبارت دیگر r_e)، می‌توان این ثابت‌ها را با اندازه‌گیری ویژگی‌های حجمی یک جامد، مانند تراکم‌پذیری؛ مدول کشسانی و غیره به‌دست آورد. اگر پتانسیل $\phi(r)$ به صورت $\phi_0 + (\frac{d\phi}{dr})_0 r + 1/2(\frac{d^2\phi}{dr^2})_0 r^2 + \ldots$ بسط داده شود، ضریب $(\frac{d^2\phi}{dr^2})_0$ برابر با انحنای منحنی انرژی ـ فاصله در $r = r_e$ نشان داده شده در شکل ۱-۸، خواهد بود.

چگونه می‌توان فهمید که یک پتانسیل معین، برهم‌کنش در ناحیه‌ی r را به خوبی توضیح می‌دهد یا نه؟ می‌توان این مشخصات را به وسیله‌ی اندازه‌گیری‌های پراکندگی یا اندازه‌گیری‌های برد یون‌ها در جامدات تعیین کرد. از آن‌جایی که $V(r)$ ماهیت برهم‌کنش‌ها را توضیح می‌دهد، این تابع هم‌چنین درباره‌ی $\sigma_s(E_i)$، که می‌تواند به وسیله‌ی آزمایش‌های پراکندگی تعیین شود، نیز توضیحاتی را ارایه خواهد داد. هم‌چنین اندازه‌گیری‌های برد می‌تواند یک نشانه‌ی خوبی از تعداد برهم‌کنش‌هایی باشد که باید رخ دهد تا یک یون در موقعیتش در داخل شبکه قرار گیرد. هر دوی این مجموعه آزمایش‌ها،

اطلاعاتی را در مورد شایستگی تابع پتانسیلی انتخاب شده برای توضیح دقیق برهم‌کنش میان اتم‌ها در جامد، فراهم می‌کند. با اندکی توجه برروی روشی که در آن اتم‌های خنثی یا اتم‌ها و یون‌ها برهم‌کنش می‌کنند، اکنون می‌توان توضیحاتی را برای برخورد میان این گونه‌ها ارایه کرد که در بعضی از جهات مشابه و از جهاتی دیگر بسیار متفاوت از برخوردهای هسته ـ نوترون هستند. فرمول نتیجه شده، ابزاری را برای تعیین انرژی منتقل شده از اتم فرودی به اتم ضربه‌خورده به همراه سطح مقطع انتقال انرژی فراهم می‌کند. توضیحاتی که در ادامه آورده شده از تامپسون[1] [۱۳] اقتباس شده است.

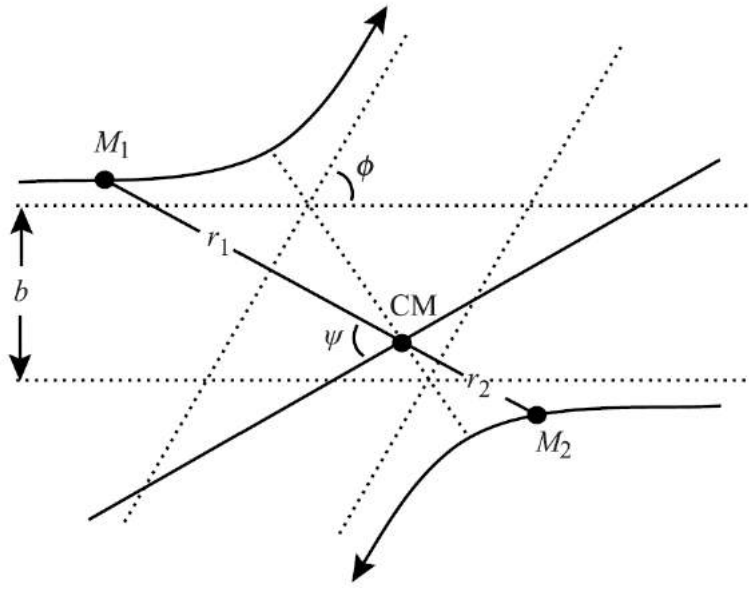
جدول ۱-۳. خلاصه‌ای از توابع پتانسیلی.

پتانسیل	معادله برای $V(r)$ برابر با:	محدوده قابل کاربرد	ملاحظات	معادله در متن
کره‌ی سخت	$0 \text{ for } r > r_0$ $\infty \text{ for } r > r_0$	$10^{-1} < T < 10^3 \text{eV}$	r_0 = اندازه اتم	(۱-۴۶)
بورن ـ مایر	$V(r) = A\exp(-r/B)$	$10^{-1} < T < 10^3 \text{Ev}$ $a_0 < r \le r_e$	A,B تعیین شده از ضریب کشسانی	(۱-۴۷)
کولنی ساده	$\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r}$	$r << a_0$ یون‌های سبک با انرژی بالا		(۱-۴۸)
استتار شده‌ی کولنی	$(\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r})\exp(-r/a)$	$r < a_0$ یون‌های سبک	a_0 = شعاع بور a = شعاع استتار	(۱-۴۹)
برینکمن I	$\frac{Z^2\varepsilon^2}{r}\mathrm{e}^{(-r/a)}(1-\frac{r}{2a})$	$r < a$	$a \cong a_0 / Z^{1/3}$	(۱-۵۱)
برینکمن II	$\frac{AZ_1Z_2\varepsilon^2\exp(-Br)}{1-\exp(-Ar)}$	$Z > 25$ $r < 0.7r_e$	$A = \frac{0.95\times10^{-6}}{a_0} Z_{\text{eff}}^{7/6}$ $B = Z_{\text{eff}}^{1/3} / Ca_0$ $C \cong 1.5$	(۱-۵۲)
فیرسو	$\frac{Z_1Z_2\varepsilon^2}{r}\chi\left[(Z_1^{1/2}+Z_2^{1/2})^{2/3}\frac{r}{a}\right]$	$r \le a_0$	χ = تابع استتار	(۱-۵۶)
دومرکزی TFD	$\frac{Z^2\varepsilon^2}{r}\chi(Z^{1/3}\frac{r}{a}) - \alpha Z + \bar{\Lambda}$	$r < r_b(3a_0)$	r_b = شعاعی که در آن ابر الکترونی متراکم ناپدید می‌شود	(۱-۵۷)
مربع ـ معکوس	$\frac{2E_r}{e}(Z_1Z_2)^{5/6}(\frac{a_0}{r})$	$a/2 < r < 5a$	E_R = انرژی ریدبرگ = 13.6Ev	(۱-۵۹)

1. Thompson

۱-۲-۲ جنبش شناسی برخورد

مسیر دو اتم برخورد کننده در شکل ۱-۱۰ به مرکز جرمِ جرم‌های M_1 و M_2 نشان داده شده است. موقعیت ذره‌ها در مختصات قطبی به ترتیب برای جرم‌های M_1 و M_2 به صورت (r_1، ψ) و (r_2، ψ) نشان داده می‌شود. پارامتر برخوردی b است و ψ زاویه‌ی پراکندگی اتم ضربه‌خورده در سیستم آزمایشگاهی و ϕ زاویه‌ی پراکندگی خط مجانبی است هنگامی که فضای بین ذره‌ای به بی‌نهایت نزدیک می‌شود. همان طوری که در شکل ۱-۱۰ نشان داده شده است، پارامتر برخوردی به عنوان فاصله‌ی میان خط سیر مجانب‌های ذره‌های برخورد کننده تعریف می‌گردد. هدف تعیین جزییات مسیرها به وسیله‌ی نشان دادن ϕ به صورت تابعی از b است. سپس این نتیجه برای تعیین سطح مقطع پراکندگی استفاده می‌شود.



شکل ۱-۱۰. مسیرهای برخورد در سیستم مرکز جرم.

سرعت شعاعی و عرضی[1] جرم M_1 در مختصات قطبی، $\dot{r}_1$ و $r_1\dot{\psi}$ است و سرعت برآیند $(\dot{r}_1^2 + r_1^2\psi^2)^{1/2}$ است. مؤلفه‌های تشکیل دهنده‌ی سرعت برای جرم M_2 مشابه جرم M_1 است و فقط اندیس ۱ به ۲ تبدیل می‌شود. بقای انرژی الزام می‌دارد که انرژی کلی در هر سیستمی ثابت باقی

1. Radial and transverse velocity

بماند. انرژی در سیستم مرجع آزمایشگاهی برابر با $E_{\mathrm{T}} = \frac{1}{2}M_1\upsilon_l^2 = E_{\mathrm{i}}$ است. با یادآوری این‌که $V_{\mathrm{CM}} = \frac{M_1}{M_1+M_2}\upsilon_l$ است و این‌که انرژی جنبشی خود مرکز جرم (در سیستم مرجع آزمایشگاهی) برابر است با:

$$E_{\mathrm{CM}} = \frac{1}{2}(M_1+M_2)V_{\mathrm{CM}}^2 = \left(\frac{M_1}{M_1+M_2}\right)E_{\mathrm{i}}.$$

از این‌رو انرژی موجود برای استحاله در سیستم مرکز جرم برابر با انرژی جنبشی کلی منهای انرژی جنبشی سیستم مرکز جرم است:

(۶۱-۱)

$$E = E_{\mathrm{T}} - E_{\mathrm{CM}} = E_{\mathrm{i}} - E_{\mathrm{CM}} = E_{\mathrm{i}}\left(\frac{M_2}{M^1+M_2}\right).$$

در یک برخورد کشسان، مجموع انرژی‌های جنبشی و پتانسیل در هر نقطه در مسیر باید برابر جمع مجانبی انرژی‌های جنبشی باشد، بنابراین:

(۶۲-۱)

$$E_{\mathrm{i}}\left(\frac{M_2}{M_1+M_2}\right) = \frac{1}{2}M_1\left(\dot{r}_1^2 + r_1^2\dot{\psi}^2\right) + \frac{1}{2}M_2\left(\dot{r}_2^2 + r_2^2\dot{\psi}^2\right) + V(r_1+r_2).$$

انرژی پتانسیل مجموع انرژی جنبشی در هر نقطه در انرژی مجانبی

عبارت $r = r_1 + r_2$ فاصله‌ی کلی جدایش است و $r_1 = \frac{M_2}{M_1+M_2}r$ و $r_2 = \frac{M_1}{M_1+M_2}r$ می‌باشند و بعد از موازنه‌ی انرژی در معادله‌ی ۱-۶۲، این معادله به صورت زیر خلاصه می‌شود:

(۶۳-۱)

$$\eta E_{\mathrm{i}} = \frac{1}{2}\mu\left(\dot{r}^2 + r^2\dot{\psi}^2\right) + V(r),$$

که $\eta = \frac{M_2}{M_1 + M_2}$ و $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ جرم کاهش یافته است.

قانون بقای اندازه‌حرکت زاویه‌ای الزام می‌دارد که مقدار هر نقطه‌ای در مسیر باید برابر با مقدار مجانب باشد، یادآوری می‌شود که:

$$v_\ell = v_\ell - V_{\mathrm{CM}} = v_\ell \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2} \right) \quad \text{and} \quad V_2 = V_{\mathrm{CM}} = v_\ell \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} \right),$$

در نتیجه مقدار مجانب اندازه‌حرکت زاویه‌ای برابر است با:

$$M_1 v_1 b_1 + M_2 v_2 b_2 = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} v_\ell (b_1 + b_2) = \mu b v_\ell . \tag{۶۴-۱}$$

و اندازه‌حرکت زاویه‌ای در هر نقطه‌ای به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

(۶۵-۱)

$$\begin{aligned} M_1 r_1^2 \dot{\psi} + M_2 r_2^2 \dot{\psi} &= \left[M_1 \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2} r \right)^2 + M_2 \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2} r \right)^2 \right] \dot{\psi} \\ &= \mu r^2 \dot{\psi}, \end{aligned}$$

از این‌رو:

$$\mu r^2 \dot{\psi} = \mu b v_\ell . \tag{۶۶-۱}$$

با جایگذاری رابطه‌ی ۱-۶۶ در معادله‌ی ۱-۶۳ برای حذف $\dot{\psi}$ و حل برای $\dot{r}$، می‌توان نوشت:

(۶۷-۱)

$$\dot{r} = \left(\frac{2}{\mu} \right)^{1/2} \left[\eta E_{\mathrm{i}} \left(1 - \frac{b^2}{r^2} \right) - V(r) \right]^{1/2}.$$

با اعمال ضرب‌های رابطه‌ی ۱-۶۳، نتیجه می‌شود که:

$$\eta E_{\mathrm{i}} - \frac{1}{2}\mu \dot{r}^2 = \frac{1}{2}\mu \frac{v_\ell^2 b^2}{r^2} + V(r)\,,$$

و با بازنویسی آن، معادله‌ی ۱-۶۸ نتیجه می‌شود:

(۱-۶۸)

$$\eta E_{\mathrm{i}} - \frac{1}{2}\mu \frac{v_\ell^2 b^2}{r^2} = \frac{1}{2}\mu \dot{r}^2 + V(r)\,.$$

یادآوری می‌شودکه $E_{\mathrm{i}} = 1/2\, M_1 \upsilon_l^2$ و در نتیجه $\upsilon_l^2 = 2E_{\mathrm{i}}/M_1$ و می‌توان υ_lرا حذف کرد و در نتیجه عبارت دوم در سمت چپ معادله‌ی ۱-۶۸ برابر $-\frac{\mu b^2 E_{\mathrm{i}}}{M_1 r^2}$ می‌شود. از این‌رو $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ و $\frac{\mu}{M_1} = \eta$ و در نتیجه:

$$\eta E_{\mathrm{i}} - \eta E_{\mathrm{i}} \frac{b^2}{r^2} = \frac{\mu \dot{r}^2}{2} + V(r), \quad , \quad \eta E_{\mathrm{i}} \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) = \frac{\mu \dot{r}^2}{2} + V(r),$$

یا

$$\dot{r} = \left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2} \left[\eta E_{\mathrm{i}} \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) - V(r)\right]^{1/2},$$

که مشابه رابطه‌ی ۱-۶۷ است. قابل ذکر است که هنگامی که $\dot{r} = 0$ باشد، r به فاصله‌ی نزدیک‌ترین برخورد می‌رسد. در این نقطه:

(۱-۶۹)

$$V(r) = \eta E_{\mathrm{i}} \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right),$$

و $V_{max}=\eta E_i$ (در $b = 0$) که یک برخورد رودررو[1] را نشان می‌دهد. بنابراین اگر ذره به یک اتم هدف با جرم برابر برخورد کند، در نتیجه $V_{max} = ½E_i$.

هنگامی که $r \rightarrow \infty$، $V(r) \rightarrow 0$ و $\dot{r}^2 = (\frac{2}{\mu})\eta E_i$ یا $\dot{r}^2 = 2E_i/M_1$، $E_i = 1/2M_1\dot{r}^2$

(و هنگامی که $r \rightarrow \infty$، $\dot{r} = \upsilon_l$)، در نتیجه $E_i = 1/2M_1\upsilon_l^2$.

یادآوری می‌شود که در این قسمت هدف تعیین ϕ به صورت تابعی از b می‌باشد. با برگشت به معادله‌ی ۱-۶۷ و تقسیم $\dot{r}$ در معادله‌ی ۱-۶۷ بر $\dot{\psi}$ از معادله‌ی ۱-۶۶ می‌توان نوشت:

(۱-۷۰)

$$\frac{\dot{r}}{\dot{\psi}} = \frac{dr}{d\psi} = -\left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2}\left[\mu E_i\left(1-\frac{b^2}{r^2}\right)-V(r)\right]^{1/2}\frac{r^2}{\upsilon_\ell b}.$$

علامت منفی در جلوی کمیت سمت راست تساوی به این علت است که در نیمه‌ی اول مسیر هم‌چنان که ψ افزایش می‌یابد، $\dot{r}$ کاهش می‌یابد. با آوردن r^2 در داخل ریشه‌ی دوم رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

(۱-۷۱)

$$\frac{dr}{d\psi} = -\frac{1}{\upsilon_\ell b}\left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2}\left[\mu E_i\left(r^4-r^2b^2\right)-r^4V(r)\right]^{1/2}.$$

با بیرون آوردن $\eta E_i b^2$ از داخل ریشه‌ی دوم می‌توان نوشت:

(۱-۷۲)

$$\frac{dr}{d\psi} = -\frac{1}{\upsilon_\ell b}\left(\frac{2}{\mu}\right)^{1/2}(\eta E_i)^{1/2}b\left[\frac{r^4}{b^2}\left(1-\frac{V(r)}{\eta E_i}\right)-r^2\right]^{1/2}.$$

1. Head-on

از آن‌جایی که $E_{\mathrm{i}} = 1/2M_1\upsilon_l^2$، در نتیجه $\upsilon_l = (\frac{2E_{\mathrm{i}}}{M_1})^{\frac{1}{2}}$ و با جایگذاری υ_l در رابطه داریم:

(۷۳-۱)

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\psi} &= -\left(\frac{2}{\mu}\frac{M_1}{2E_{\mathrm{i}}}\eta E_{\mathrm{i}}\right)^{1/2}\left[\frac{r^4}{b^2}\left(1-\frac{V(r)}{\eta E_{\mathrm{i}}}\right)-r^2\right]^{1/2}\\ &= -\left(\frac{M_1}{\mu}\eta\right)^{1/2}\left[\frac{r^4}{b^2}\left(1-\frac{V(r)}{\eta E_{\mathrm{i}}}\right)-r^2\right]^{1/2}\\ &= -\left[\frac{r^4}{b^2}\left(1-\frac{V(r)}{\eta E_{\mathrm{i}}}\right)-r^2\right]^{1/2}.\end{aligned}$$

و با جایگذاری $x = 1/r$ می‌توان نوشت:

(۷۴-۱)

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\psi} = \left[\frac{1}{b^2}\left(1-\frac{V(x)}{\eta E_{\mathrm{i}}}\right)-x^2\right]^{1/2}.$$

که این معادله‌ی مسیر است ($\psi = f(x)$).

زاویه‌ی پراکندگی ϕ با بیان $d\psi$ به صورت تابعی از x و $\mathrm{d}x$ و انتگرال‌گیری از محدوده‌های ψ مطابق با $x = 0$ و $1/\rho$ به‌دست می‌آید. این محدوده‌ها همان طوری که در شکل ۱-۱۰ نشان داده شده است به ترتیب $\phi/2$ و $\pi/2$ می‌باشند. با اعمال این انتگرال‌گیری برای نیمه‌ی اول مسیر می‌توان نوشت:

(۷۵-۱)

$$\int_{\phi/2}^{\pi/2}\mathrm{d}\psi = \int_0^{1/\rho}\left[\frac{1}{b^2}\left(1-\frac{V(x)}{\eta E_{\mathrm{i}}}\right)-x^2\right]^{-1/2}\mathrm{d}x$$

و

(۷۶-۱)

$$\phi = \pi - 2\int_0^{1/\rho}\left[\frac{1}{b^2}\left(1-\frac{V(x)}{\eta E_{\mathrm{i}}}\right)-x^2\right]^{-1/2}\mathrm{d}x.$$

مقدار ρ در حد بالای x برابر با مقدار r است هنگامی که $\psi = \pi/2$ باشد و از این‌رو فاصله‌ی نزدیک‌ترین برخورد می‌باشد و در نتیجه هنگامی که $\psi = \pi/2$ است، $\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\psi} = 0$ است و ρ با توجه به رابطه‌ی ۱-۷۴ به‌دست می‌آید:

(۱-۷۷)

$$\eta E_{\mathrm{i}} = \frac{V(\rho)}{1 - \dfrac{b^2}{\rho^2}}.$$

رابطه‌های ۱-۷۶ و ۱-۷۷ ارتباط میان ϕ و b را فراهم می‌کند.

اکنون باید سطح مقطع برای رخداد پراکندگی مدنظر ما تعیین شود. این کار می‌تواند به صورت زیر انجام شود. اگر ذره‌های M_1 اتم‌های هدف M_2 را بمباران کنند، سپس در شکل ۱-۱۱، آن یون‌هایی که ناحیه‌ی $2\pi b\,\mathrm{d}b$ احاطه شده با دایره‌هایی با شعاع‌های b و $b+\mathrm{d}b$ را قطع می‌کنند، با زاویه‌ی $\mathrm{d}\phi$ در اطراف ϕ پراکنده می‌شوند. از آن‌جایی که ارتباط میان $\mathrm{d}b$ و $\mathrm{d}\phi$ به وسیله‌ی مشتق‌گیری از رابطه‌ی ۱-۷۶ به‌دست می‌آید، سطح مقطع دیفرانسیلی به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر تعیین می‌شود:

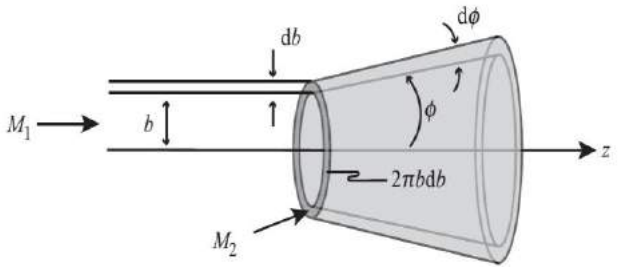
(۱-۷۸)

$$\sigma(E_{\mathrm{i}}, T)\,\mathrm{d}T = 2\pi b\,\mathrm{d}b \quad \text{and} \quad \sigma(E_{\mathrm{i}}, T) = 2\pi b \frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\phi}\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}T}.$$

با دانستن $V(r)$ این امکان وجود دارد که با استفاده از معادله‌ی ۱-۷۶، ϕ برحسب b^2 و سپس با استفاده از معادله‌ی ۱-۱۳ بر حسب T نوشته شود. مشتق‌گیری، رابطه‌ی $2\pi b\,\mathrm{d}b$ را به صورت تابعی از T و $\mathrm{d}T$ در می‌آورد. سپس با توجه به رابطه‌ی ۱-۷۸، سطح مقطع دیفرانسیلی برای برخوردها، پس‌زنی‌هایی را در $\mathrm{d}T$ در اطراف T خواهد داشت. سطح مقطع کلی برای برخوردهایی با T در هر مکانی در محدوده‌ی $\check{T}$ تا γE_{i} برابر است با:

(۱-۷۹)

$$\sigma(E_{\mathrm{i}}) = \int_{\check{T}}^{\gamma E_{\mathrm{i}}} \sigma(E_{\mathrm{i}}, T)\,\mathrm{d}T.$$



شکل ۱-۱۱. پراکندگی یون‌های عبوری از ناحیه‌ی $2\pi b\,\mathrm{d}b$ در یک برش زاویه‌ای $d\phi$ در اطراف ϕ.

فرایند یافتن سطح مقطع انتقال انرژی می‌تواند به صورت زیر خلاصه شود:

۱. انتخاب یک تابع پتانسیل $V(r)$،

۲. استفاده از معادله‌ی ۱-۷۶ برای به‌دست آوردن b به صورت تابعی از ϕ، $b = f(\phi)$،

۳. استفاده از معادله‌ی ۱-۱۳ برای به‌دست آوردن ϕ به صورت تابعی از T، $\phi = g(T)$،

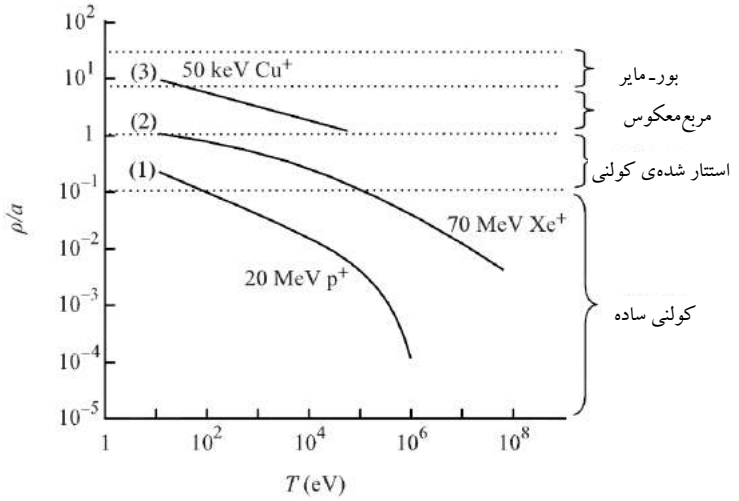
۴. استفاده از رابطه‌ی میان b و ϕ و میان ϕ و T در معادله‌ی ۱-۷۸ برای به‌دست آوردن سطح مقطع انتقال انرژی.

توضیحات قبلی از سطح مقطع انتقال انرژی، اهمیت آگاهی از توابع پتانسیلی توضیح دهنده برهم‌کنش‌های مشخص یون ـ اتم یا اتم ـ اتم را تأیید می‌کند. بدون داشتن آگاهی دقیق از توابع پتانسیلی، توضیحات بیش‌تر از فرایندهای برخورد و ساختار عیوب ایجاد شده، غیرممکن است. متأسفانه ارزیابی صریح انتگرال معادله‌ی ۱-۷۶ فقط برای توابع پتانسیلی ساده امکان پذیر است؛ اما قبل از جستجوی بیش‌تر در توابع پتانسیلی مختلف و کاربرد آن‌ها در تعیین سطح مقطع انتقال انرژی در ابتدا نیاز است که گروه‌های مختلف یون‌ها و انرژی‌های متناظر با آن‌ها بررسی شوند.

طبقه‌بندی یون‌ها

سه گروه مهم از یون‌ها در برخوردهای یون ـ اتم وجود دارند. اولین گروه یون‌های پرانرژی سبک با انرژی $E_i > 1$ MeV هستند. گروه دوم یون‌های سنگین بسیار پر انرژی ($E_i \approx 10^2$ MeV) مانند پاره‌های شکافت ($M \approx 10^2$) می‌باشند. گروه سوم یون‌های سنگین با انرژی پایین‌تر هستند که ممکن است به وسیله‌ی شتاب دهنده‌ها تولید شوند یا از یک اتم پس‌زده شده ظاهر شوند که ناشی از یک برخورد پرانرژی اولیه است. انرژی این اتم‌های پس‌زده شده در اصل کم‌تر از 1MeV است.

برای هریک از این برهم‌کنش‌ها، باید مناسب‌ترین تابع پتانسیلی انتخاب شود. یک راهنمای مناسب ρ/a است که نسبت فاصله‌ی نزدیک‌ترین برخورد به شعاع استتار به صورت تابعی از انرژی پس‌زنی، T است. یک نمودار تقریبی از ρ برحسب T در شکل ۱-۱۲ نشان داده شده است که برای کمک در انتخاب پتانسیل، مناسب است. این سه منحنی یون‌هایی از هر سه گروه بحث شده را نشان می‌دهند: (۱) پروتون‌های با انرژی MeV ۲۰، (۲) پاره‌های شکافت با انرژی MeV ۷۰ و (۳) یون‌های مس با انرژی keV ۵۰. برخوردهای منحنی ۱ به مناطقی که $\rho << a$ است اعمال می‌شود و پتانسیل کولنی ساده برای این برخوردها مناسب است. برخوردهای منحنی ۲ که برخوردهای رودررو هستند نیز دارای $\rho << a$ خواهند بود؛ اما برای برخوردهای زودگذر[1] (برخورد در یک زاویه)، $\rho \sim a$ است و تابع پتانسیل استتار شده‌ی کولنی بسیار مناسب است. منحنی ۳ ناحیه‌ای را نشان می‌دهد که $a < \rho << 5a$ است و پتانسیل مربع‌معکوس یا پتانسیل برینکمن به آن اعمال می‌شود؛ زیرا هم عبارت‌های بورن ـ مایر و هم عبارت استتار شده‌ی کولنی باید مورد محاسبه قرار گیرد.



شکل ۱-۱۲. مسافت نزدیک‌ترین مسیر برخورد r به صورت تابعی از T برای (۱) پروتون‌های MeV ۲۰ در Cu، (۲) یون‌های Xe^+ با انرژی MeV ۷۰ در Cu و (۳) Cu^+ ضربه‌خورده با انرژی keV ۵۰ در Cu [۱۲].

1. Glancing collisions

برخوردهای نوع کره‌ی سخت

پتانسیل کره‌ی سخت برای یون‌هایی با انرژی پایین‌تر از حدود ۵۰ keV و برای برخوردهای کشسان نزدیک رودررو مناسب است. از این‌رو $\rho \sim r_e$ و اتم‌ها مانند کره‌های سخت عمل می‌کنند. در یک برخورد رودررو $b = 0$ و از معادله‌ی ۱-۷۷ می توان نوشت:

(۱-۸۰)

$$\eta E_i = V(\rho) .$$

هنگامی که b کاملاً صفر نیست، ممکن است که برخوردها همان طوری که در شکل ۱-۱۳ نشان داده شده است، به تصویر کشیده شود که در نتیجه R_1 و R_2 به صورت $R_1 = \rho \dfrac{M_2}{M_1 + M_2}$ و $R_2 = \rho \dfrac{M_1}{M_1 + M_2}$ تعریف می‌گردند. اگر ρ مشخص باشد، سپس با توجه به شکل:

(۱-۸۱)

$$b = \rho \cos\frac{\phi}{2} .$$

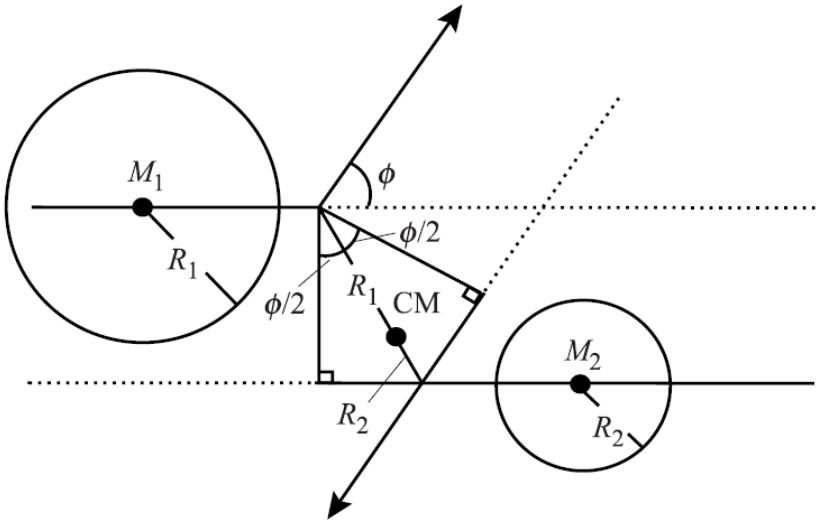
اکنون با یادآوری این‌که:

(۱-۸۲)

$$\sigma_s(E_i, T)\, dT = 2\pi b\, db$$
$$\sigma_s(E_i, T) = 2\pi b \frac{db}{d\phi}\frac{d\phi}{dT},$$

که از رابطه‌ی $b = \rho\cos\dfrac{\phi}{2}$، و از رابطه‌ی $T = \dfrac{\gamma E_i}{2}(1-\cos\phi)$، $\dfrac{db}{d\phi} = \dfrac{1}{2\rho\sin\dfrac{\phi}{2}}$ حاصل می شود. سپس $\dfrac{d\phi}{dT} = \dfrac{2}{\gamma E_i \sin\phi}$ و

$$\sigma(E_i, T) = 2\pi\rho\cos\frac{\phi}{2}\frac{\rho}{2}\sin\frac{\phi}{2}\frac{2}{\gamma E_i \sin\phi}$$



شکل ۱-۱۳. شمایی از اتم‌های برخورد کننده که تقریب کره‌ی سخت را برای برخوردها دنبال می‌کنند.

(۱-۸۳)

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},T)=\frac{\pi\rho^2}{\gamma E_{\mathrm{i}}}.$$

یادآوری می‌شود که برای برخوردهای نوترون ـ هسته، $\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},T)=\dfrac{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}{\gamma E_{\mathrm{i}}}$ است. با استفاده از این رابطه می‌توان یک برداشتی از اندازه‌ی سطح مقطع انتقال انرژی برای برهم‌کنش‌های نوترون ـ هسته برحسب برهم‌کنش‌های اتم ـ اتم به‌دست آورد:

$$\frac{\sigma(E_{\mathrm{i}},T)^{a-a}}{\sigma(E_{\mathrm{i}},T)^{\text{n-nuclear}}}=\frac{\pi\rho^2}{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}\approx\frac{\pi(10^{-8})^2}{10^{-24}}\approx 10^8$$

و نتیجه این‌که سطح مقطع انتقال انرژی برای برخوردهای اتم ـ اتم در حدود هشت برابر نسبت به برهم‌کنش‌های نوترون ـ هسته بزرگ‌تر است.

سطح مقطع پراکندگی کلی برابر است با:

(۸۴-۱)

$$\sigma_s(E_i) = \int_{\check{T}}^{\gamma E_i} \sigma_s(E_i, T)\,dT = \int_{\check{T}}^{\gamma E_i} \frac{\pi\rho^2}{\gamma E_i}\,dT = \frac{\pi\rho^2}{\gamma E_i}\left[\gamma E_i - \check{T}\right] = \pi\rho^2 .$$

قابل ذکر است که $\sigma_s(E_i)$ مستقل از E_i است (زیرا $\rho \neq f(E_i)$) و هم‌چنین $\sigma_s(E_i,T)$ متناسب با $1/E_i$و مستقل از T است. می‌توان $\sigma_s(E_i,T)$را به صورت صریح با اعمال تابع پتانسیلی مناسب برای یافتن مقدار ρ (تعیین شده به وسیله‌ی $V(r)$) به‌دست آورد. از مباحث موجود در بخش ۱-۲-۱ یادآوری می‌شود که برای برخوردهایی که پارامتر برخوردی در حدود فاصله‌ی جدایش تعادلی اتم‌ها است، پتانسیل بورن ـ مایر بسیار مناسب است. این برخوردها مربوط به انرژی‌های زیر حدود ۱۰ keV است. (قابل ذکر است که این به معنی عقب‌نشینی از مدل کره‌ی سخت است) و از این‌رو از $V(r) = A\exp(\frac{-r}{B})$ استفاده خواهد شد که A و B در رابطه‌ی ۱-۴۷ تعریف شده‌اند. با استفاده از رابطه‌ی ۱-۸۰ می‌توان نوشت:

(۸۵-۱)

$$V(\rho) = A\exp(-\rho/B) = \eta E_i$$

یا

(۸۶-۱)

$$\rho = B\ln\left(\frac{A}{\eta E_i}\right),$$

و نظر به این‌که $b = \rho\cos\frac{\varphi}{2} = B\ln(\frac{A}{\eta E_i})\cos\frac{\varphi}{2}$، سطح مقطع انتقال انرژی برابر است با:

(۸۷-۱)

$$\sigma_s(E_i,T) = \frac{\pi B^2}{\gamma E_i}\left[\ln\frac{A}{\eta E_i}\right]^2 .$$

که در نتیجه سطح مقطع پراکندگی کلی، انتگرال سطح مقطع انتقال انرژی در محدوده‌ی $\check{T}$ و γE_{i} می‌باشد:

(۱-۸۸)

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}}) = \int_{\check{T}}^{\gamma E_{\mathrm{i}}} \pi B^2 \left[\ln \frac{A}{\eta E_{\mathrm{i}}}\right]^2 \frac{1}{\gamma E_{\mathrm{i}}}\,\mathrm{d}T\,.$$

با توجه به این عبارت این امکان وجود دارد که سطح مقطع کلی برای رخدادهای پراکندگی جابه‌جایی برای تمام Tهای مجاز محاسبه شود. قابل ذکر است که سطح مقطع پراکندگی کلی وابسته به E_{i} است. هم‌چنین برای مقادیر نمونه‌وار A، B و $\check{T}$ (۲۵ eV)، مقدار $\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})$ برای برهم‌کنش‌های اتم ـ اتم در حدود 10^{-8} برابر برهم‌کنش‌های نوترون ـ هسته است.

پراکندگی رادرفورد

در ادامه به مثال دوم اشاره خواهد شد که در واقع استفاده از پتانسیل کولنی خالص برای نشان دادن پراکندگی رادرفورد می‌باشد. با توجه به تقسیم‌بندی یون‌ها بر حسب جرم و انرژی یون، برخوردهای نوع ۱، یون‌های سبک (۴ تا ۱ $\approx m$) پرانرژی ($E >$ MeV) را دربر می‌گیرد که $\rho << a$ است. برخوردهای این گروه به صورت مناسبی به وسیله‌ی پتانسیل کولنی ساده نشان داده شده است که از معادله‌ی ۱-۴۸ برابر است:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{r}\,.$$

فرض خواهد شد که Z_1 و Z_2 نشان‌دهنده‌ی بارهای هسته باشند و این برخوردها در انرژی‌های بالا رخ می‌دهد، در نتیجه الکترون‌ها از هسته‌ها حذف شده‌اند و برهم‌کنش فقط میان هسته‌ها است.

در تشریح مسیرهای ذره‌ها در سیستم مرکز جرم، مشخص شده است که در نقطه‌ی نزدیک‌ترین مسیر برخورد، $\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\psi} = 0$ است و از معادله‌ی ۱-۷۷ می‌توان نوشت:

$$\eta E_{\mathrm{i}}=\frac{V(\rho)}{1-\dfrac{b^2}{\rho^2}}.$$

و با جایگذاری در $V(r)$ نتیجه می‌دهد که:

(۸۹-۱)

$$\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{\rho}=\eta E_{\mathrm{i}}\left(1-\frac{b^2}{\rho^2}\right).$$

طبق تعریف:

(۹۰-۱)

$$b_0=\left(\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{\eta E_{\mathrm{i}}}\right),$$

که در ادامه می‌توان نوشت:

(۹۱-۱)

$$\frac{b_0}{\rho}=1-\frac{b^2}{\rho^2},$$

و

(۹۲-۱)

$$\rho=\frac{b_0}{2}\left[1+\left(1+\frac{4b^2}{b_0^2}\right)\right]^{1/2}.$$

از این‌رو، همان‌طوری که انتظار می‌رود فاصله‌ی نزدیک‌ترین مسیر برخورد به صورت تابعی از ضریب برخوردی b است. برای برخوردهای رودررو، $b = 0$ و کم‌ترین مقدار ρ وابسته به E_{i} است:

(۹۳-۱)

$$\rho\,(b=0)=\rho_0=b_0=\frac{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}{\eta E_{\mathrm{i}}}.$$

قابل ذکر است که برای این برخورد برخلاف عدم وابستگی E_i در مدل کره‌ی سخت، ρ وابسته به E_i است. با برگشت به معادله‌ی مسیر ۱-۷۵، اکنون این امکان وجود دارد که این معادله به عنوان یک انتگرال معین مورد ارزیابی قرار گیرد:

(۹۴-۱)

$$\int_{\pi/2}^{\phi/2} d\psi = \int_{1/\rho}^{0} \left[\frac{1}{b^2} - \frac{b_0}{b^2}x - x^2\right]^{-1/2} dx.$$

هنگامی که ($x = \frac{1}{\rho}$) $r = \rho$ باشد، $\psi = \frac{\pi}{2}$ است و هم‌چنین هنگامی که ($x = 0$) $r = \infty$، $\psi = \frac{\phi}{2}$ است، با در نظر گرفتن معادله‌ی $y = x + \frac{b_0}{2b^2}$، می‌توان نوشت:

(۹۵-۱)

$$\phi/2 - \pi/2 = \int_{\frac{1}{\rho}+\frac{b_0}{2b^2}}^{\frac{b_0}{2b^2}} \left[c^2 - y^2\right]^{-1/2} dy,$$

که در این رابطه $c^2 = (\frac{1}{b^2} + \frac{b_o^2}{4b^4})$، سپس مسیرها عبارتند از:

(۹۶-۱)

$$\phi/2 - \pi/2 = \left[\sin^{-1}\frac{y}{c}\right]_{\frac{1}{\rho}+\frac{b_0}{2b^2}}^{\frac{b_0}{2b^2}}$$
$$= \sin^{-1}\frac{b_0}{2b^2} - \sin^{-1}\frac{1}{c}\left(\frac{1}{\rho} + \frac{b_0}{2b^2}\right).$$

با توجه به این‌که $\sin^{-1}\frac{1}{c}(\frac{1}{\rho} + \frac{b_o}{2b^2}) = \sin^{-1}(1) = \frac{\pi}{2}$، در نتیجه:

(۹۷-۱)

$$\sin\phi/2 = \frac{b_0}{2b^2c}.$$

با جایگذاری برای c از معادله‌ی بالا در داخل معادله‌ی ۱-۹۷ می‌توان نوشت:

(۱-۹۸)

$$\sin^2 \phi/2 = \frac{1}{1+\dfrac{4b^2}{b_0^2}}\,.$$

با استفاده از روابط مثلثاتی برای $\sin^2 \dfrac{\phi}{2}$، نتیجه می شود که:

(۱-۹۹)

$$b = \frac{b_0}{2}\cot \phi/2\,.$$

اکنون رابطه‌ای میان ضریب برخوردی، b و زاویه‌ی پراکندگی مجانبی، ϕ وجود دارد. قابل ذکر است که b از طریق b_0 تابعی از E_i است.

اکنون یک عبارت برای سطح مقطع پراکندگی لازم است. با استفاده از رابطه‌ی ۱-۸۲ برای $\sigma_\mathrm{s}(E_\mathrm{i},T)$، می‌توان نوشت:

(۱-۱۰۰)

$$\sigma_\mathrm{s}(E_\mathrm{i},T)\,\mathrm{d}T = \sigma_\mathrm{s}(E_\mathrm{i},\phi)\,\mathrm{d}\Omega = 2\pi b\,\mathrm{d}b = \pi b_0 \cot\frac{\phi}{2}\,\mathrm{d}b\,,$$

و با جایگزینی $\mathrm{d}b$ از معادله‌ی ۱-۹۹، معادله‌ی ۱-۱۰۱ نتیجه می‌شود:

(۱-۱۰۱)

$$\sigma_\mathrm{s}(E_\mathrm{i},\phi) = \left(\frac{b_0}{4}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\phi/2)}\,,$$

که قانون پراکندگی معکوس توان چهارم رادرفورد است. سطح مقطع برای پس‌زنی دقیقاً شبیه برخوردهای کشسان است، معادله‌ی ۱-۱۳، و از این‌رو:

$$\sigma_s(E_i,T) = \sigma_s(E_i,\phi)\frac{d\Omega}{dT},$$

و می‌توان نوشت:

(۱۰۲-۱)

$$\sigma_s(E_i,T) = \frac{\pi b_0^2}{4}\frac{E_i\gamma}{T^2}.$$

قابل ذکر است که در کل برخلاف برخوردهای نوترون ـ هسته و پراکندگی کره‌ی سخت، سطح مقطع پراکندگی رادرفورد شدیداً تابع T است. این عبارت هم‌چنین نشان می‌دهد که هم‌چنان که T به صفر میل می‌کند ($T \to 0$)، سطح مقطع پراکندگی به سمت بی‌نهایت میل خواهد کرد ($\sigma_s(E_i,T) \to \infty$)؛ اما این فقط انعکاسی از این حقیقت است که هم‌چنان که $\phi \to 0$ میل می‌کند، $b \to \infty$ میل خواهد کرد و معرف برهم‌کنش‌های کولنی برد بلند است. در حقیقت یک شرط مرزی در b وجود دارد و از این‌رو به علت استتار الکترونی در ϕ نیز شرط مرزی وجود دارد. همان‌طوری که بعداً خواهیم دید، این شرط مرزی برابر E_d (انرژی جابه‌جایی) خواهد بود.
میانگین انرژی منتقل شده برابر است با:

(۱۰۳-۱)

$$\bar{T} = \frac{\int_{\check{T}}^{\hat{T}} T\sigma_s(E_i,T)\,dT}{\int_{\check{T}}^{\hat{T}} \sigma_s(E_i,T)\,dT} = \frac{\check{T}\ln(\hat{T}/\check{T})}{1-\frac{\check{T}}{\hat{T}}}.$$

برای $\hat{T} = \gamma E_i$ و $\check{T} = E_d$ و از این‌رو $\gamma E_i >> E_d$ و در نتیجه:

(۱۰۴-۱)

$$\bar{T} \approx E_d \ln\left(\frac{\gamma E_i}{E_d}\right).$$

که برای تمام انرژی‌های E_i، کاملاً کوچک است، که نشان دهنده‌ی وابستگی شدید به $\frac{1}{T^2}$ در معادله‌ی ۱-۱۰۲ است. انتگرال معادله‌ی ۱-۱۰۲ در محدوده‌ی T، سطح مقطع کلی برای رخدادهای جابه‌جایی به وسیله‌ی یک یون با انرژی E_i را تعیین می‌کند:

(۱-۱۰۵)

$$\sigma_s(E_i) = \frac{\pi}{4} b_0^2 \hat{T} \int_{E_d}^{\hat{T}} \frac{dT}{T^2} = \frac{\pi b_0^2}{4} \left(\frac{\hat{T}}{E_d} - 1 \right),$$

و ازآن‌جایی که در انرژی‌های بالا، $\hat{T}/E_d >> 1$ است، سپس برای $\hat{T} = \gamma E_i$ می‌توان نوشت:

(۱-۱۰۶)

$$\sigma_s(E_i) \approx \frac{\pi b_0^2}{4} \frac{\gamma E_i}{E_d},$$

که کاملاً بزرگ است.

یک سؤال قابل تأمل در اعمال نتایج بالا این است که تحت چه شرایطی پراکندگی رادرفورد می‌تواند اعمال شود؟ جواب این است که این الزام وجود دارد که در طول یک برخورد، بخش اصلی پراکندگی در ناحیه‌ای رخ دهد که $r << a$ است. اما این یک مقیاس کیفی است. چیزی که در هنگام اعمال پراکندگی رادرفورد مورد نیاز است، وسیله‌ای برای تعیین مقدار کمی می‌باشد. برای نشان دادن این سؤال، دو حالت مورد بررسی قرار می‌گیرد.

حالت ۱. *برخوردهای رودررو* (*با* T). برای برخوردهای رودرروی نزدیک ، $\rho_0 << a$ یا $E_i >> E_a$، که E_a مقداری از E_i می‌باشد که در $\rho_0 = a$ به‌دست می‌آید، با فرض یک پتانسیل استتار شده‌ی کولنی:

(۱-۱۰۷)

$$E_a = 2E_R (Z_1 Z_2)^{7/6} (M_1 + M_2)/(M_2 e),$$

که به وسیله‌ی بازنویسی پتانسیل استتار شده‌ی کولنی (معادله‌ی ۱-۴۹) به صورت قانون مربع‌معکوس $V(r) = \eta E_i = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_i$ (معادله‌ی ۱-۵۹) با $\varepsilon^2 = 2a_0 E_R$ و برابرسازی در $r = a$ و تنظیم برای یک برخورد رودررو، به‌دست آمده است.

حالت ۲. *برخوردهای زودگذر* (T *پایین*). در این قسمت فقط آن برخوردهایی که $b \leq a$ است یا آن‌هایی که در یک انتقال انرژی $\check{T} \sim E_d$ برای $b = a$ نتیجه شده‌اند، بررسی می‌شوند. برای یک پتانسیل کولنی ساده با $b = a$، از معادله‌های ۱-۹۸ و ۱-۱۳ می‌توان نوشت:

(۱-۱۰۸)

$$T = \frac{\varepsilon^2 \gamma E_a^2}{4E_i}, \quad \text{or} \quad E_i = \frac{\varepsilon^2 \gamma E_a^2}{4T},$$

این مقدار از E_i در $T = \check{T}$، E_b نامیده می‌شود و در نتیجه:

(۱-۱۰۹)

$$E_b = \frac{\varepsilon^2 \gamma E_a^2}{4\check{T}}, \quad \text{where} \quad \check{T} = E_d,$$

و این معادله برای تمامی $E_i >> E_b$ صادق است. در اصل، E_b مقداری از E_i است که در یک انتقال انرژی $T \geq E_d$ در $b = a$ حاصل شده است. یا با نگاهی دیگر، $E_b < E_i$، $T << \check{T}$ را نتیجه می‌دهد که با توجه به این‌که $\rho \geq a$ است، می‌تواند نادیده گرفته شود و این برخوردها می‌توانند حذف شوند. جدول ۱-۴، مقادیر E_a و E_d را برای ترکیبات مختلف ذره ـ اتم هدف و انرژی‌های متفاوت نشان می‌دهد.

با توجه به جدول ۱-۴، نظر به این‌که $E_a < E_b$ است، می‌توان معیاری که باید $E_i >> E_b$ باشد را برای یک آزمایش نهایی از اعتبار توضیحات پراکندگی کولنی ساده مورد استفاده قرار داد.

در مجموع اگر $E_i >> E_a$ باشد، پتانسیل کولنی ساده برای برخوردهای رودرروی نزدیک مورد استفاده قرار می‌گیرد. اگر $E_i >> E_b$ باشد، پتانسیل کولنی ساده می‌تواند برای تمام برخوردهای مورد بررسی در آسیب تابشی استفاده شود. ذره‌های باردار سبک مانند پروتون ها و آلفاها با $E_i > ۱$ MeV

در این گروه قرار می‌گیرند، درحالی‌که پاره‌های شکافت در رده $E_a < E_i < E_b$ قرار دارند و پس‌زده شده‌ها دارای $E_i \leq E_a$ هستند. این مطالب بعداً مورد بحث قرار خواهد گرفت؛ اما در ابتدا مثالی از پراکندگی رادرفورد ارایه می‌شود.

جدول ۱-۴. مقادیر E_a و E_b برای ترکیب‌ها و انرژی‌های مختلف ذره -اتم هدف[۱۳].

E_b (eV)	E_a (eV)	اتم هدف	ذره‌ی فرودی
8×10^5	2×10^3	C	C
2×10^7	1×10^4	Al	Al
1×10^9	7×10^4	Cu	Cu
1×10^{11}	7×10^5	Au	Au
3×10^{10}	5×10^5	U	Xe
2×10^3	1.5×10^2	C	D^+
2×10^4	1×10^3	Cu	D^+
1×10^5	4×10^3	U	D^+

مثال ۱-۲. پروتون‌هایی با انرژی ۲MeV فرودی برروی آلومینیوم برای این مورد،

$$\hat{T} = \gamma E_i = \frac{4(27)}{(27+1)^2} 2\text{MeV} = 0.28\text{MeV}$$

$$\breve{T} = 25\text{eV}$$

$$\bar{T} = E_d \ln\left(\frac{\gamma E_i}{E_d}\right) = 233\,\text{eV}$$

هم‌چنین می‌توان $E_a \sim$ ۲۰۰ eV، $E_b \sim$ ۴۰۰۰ eV را نیز محاسبه کرد (برای مقایسه، این مقادیر برای He^+ ۲MeV برروی Al، برابر با $E_a \sim$ ۱ keV و $E_b \sim$ ۲۵ keV است. هم‌چنین برای H^+ ۲MeV برروی Au، $E_a \sim$۱٫۶ keV و ، $E_b \sim$ ۳۸ keV است و برای He^+ ۲MeV برروی Au، $E_a \sim$ ۸ keV و $E_b \sim$ ۶۹ keV است). با توجه به این‌که $E_i >> E_b$ است، قانون کولنی ساده برای این برخوردها معتبر است. ضمناً، $\sigma(E_i) \sim$ ۴×۱۰$^{-۲۲}$ cm^۲ و از این‌رو مسیر آزاد متوسط

میان برخوردها $\lambda = 1/\sigma N$ است و هم‌چنین $N \sim ۶\times۱۰^{۲۲}\, a/\mathrm{cm}^3$ است و در نتیجه $\lambda \sim ۰٫۰۴\mathrm{cm}$ یا در حدود ۴۰۰ μm می‌باشد، یا در حدود ۱۰ برابر طول مسیر پروتون ۲ MeV در Al است که در نتیجه به صورت متوسط، فقط یک برخورد پراکندگی رادرفورد برای هر ۱۰ پروتون فرودی روی Al وجود دارد.

در ادامه گروه‌های دیگری از برخوردهای یون ـ اتم مانند یون‌های سنگین و پرانرژی، یون‌های سنگین و کند و الکترون‌های پرانرژی بررسی می‌شوند.

یون‌های سنگین، پرانرژی

برای یون‌های سنگین، پرانرژی مانند پاره‌های شکافت، شکل ۱-۱۲ نشان می‌دهد که باید یک پتانسیل مناسب برای استتار شده‌ی کولنی و دافعه‌ی لایه‌ی مسدود محاسبه شود. در ابتدا به پتانسیل کولنی ساده به منزله‌ی یک تقریب غیردقیق و با علم به این‌که استفاده از آن فقط برای انرژی‌های پس‌زنی نزدیک به γE_{i} پرداخته می‌شود که $\rho << a$ مجاز است. یادآوری می‌شود که $\sigma(E_{\mathrm{i}}) = \frac{\pi b_o^2}{4}\frac{\gamma E_{\mathrm{i}}}{E_{\mathrm{d}}}$ و $b_o \alpha \frac{Z_1}{\gamma E_{\mathrm{i}}}$، $\gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}$ و $\eta = \frac{M_2}{M_1+M_2}$ است که یک افزایش در سطح مقطع را در مقایسه با یون سبک به صورت فاکتوری از $۱۰^۶$ نشان می‌دهد.

$$\frac{\sigma_{\mathrm{heavy}}}{\sigma_{\mathrm{light}}} = \frac{\left.\frac{z_1^2 M_1}{E_{\mathrm{i}}}\right|_{\mathrm{heavy}}}{\left.\frac{z_1^2 M_1}{E_{\mathrm{i}}}\right|_{\mathrm{light}}} \approx 10^6$$

برای پاره‌های شکافت در حداکثر راندمان شکافت اورانیوم، $M_1^{\mathrm{light}} \approx ۹۶$ amu، $E_1^{\mathrm{light}} \approx ۹۵$ MeV و $M_1^{\mathrm{heavy}} \approx ۱۳۷$ amu، $E_1^{\mathrm{heavy}} \approx ۵۵$ MeV است. در مقایسه با مثال پروتون ۲ MeV برروی Al، پاره‌های شکافت یک سطح مقطع بزرگ‌ترِ تقریباً $۱۰^۴$ برابری دارند! بنابراین مسیر متوسط آزاد $۱۰^{-۴}$ برابر یک پروتون در Al است.

یادآوری می‌شود که $\sigma\ (E_i, T)$ به صورت $1/T^2$ تغییر می‌کند؛ اما این فقط نزدیک $\gamma E_i\ (\rho << a)$ صادق است. در انرژی‌های پایین‌تر، استتار حساسیت به انرژی را کاهش می‌دهد. بنابراین باید تعریف بهتری از برهم‌کنش میان یون‌های پرانرژی، سنگین و اتم‌های هدف مورد استفاده قرار گیرد.

بیان برینکمن، معادله‌ی ۱-۵۰، هردو عبارت را دربر می‌گیرد، و اگر این در تقریب تکانه‌ای[1] مورد استفاده قرار گیرد (مرجع [۱۳] ملاحظه شود)، نتیجه به این صورت است که:

(۱-۱۱۰)

$$T = \frac{M_1}{M_2}\frac{A^2}{E_i}\left[F\left(\alpha, \frac{b}{B}\right) - (1-\alpha)\,F\left(1+\alpha, \frac{b}{B}\right)\right]^2,$$

که A و B در معادله‌ی ۱-۵۰ داده شده‌اند و

(۱-۱۱۱)

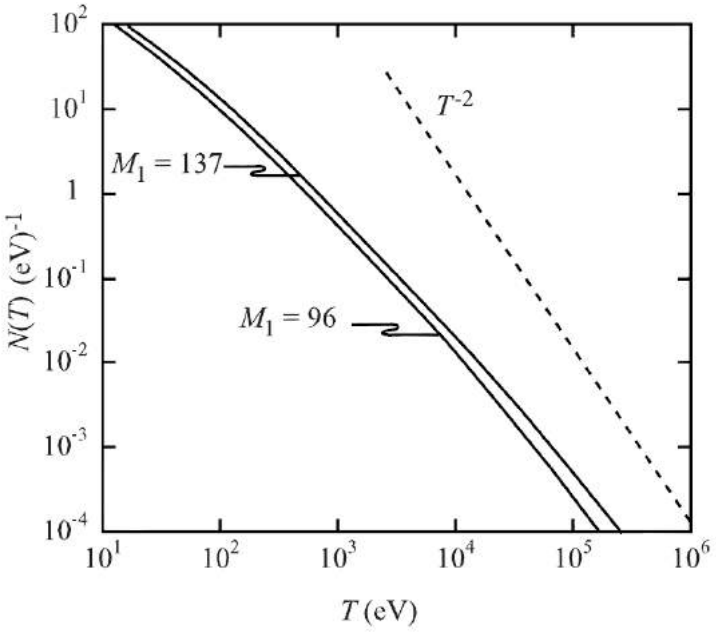
$$F\left(\alpha, \frac{b}{B}\right) = \frac{b}{B}\int_{b/a}^{\infty} \frac{-\mathrm{e}^{-x}\,\mathrm{d}x}{(x^2 - b^2/a^2)^{1/2}\,(1-\mathrm{e}^{-\alpha x})^2}$$
$$= \frac{b}{B}\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)\,K_0\left\{\frac{b}{B}(1+n\alpha)\right\},$$

که $K_0(y)$ یک تابع بسل[2] از نوع سوم می‌باشد. عبارت α نسبت بخش‌های بورن ـ مایر به استتار شده‌ی کولنی در $r = a$ می‌باشد، در نتیجه در کل $\alpha < 1$ است. T می‌تواند از b و معادله‌ی ۱-۱۱۰ محاسبه شود و با معکوس‌سازی، b به صورت تابعی از T به‌دست می‌آید. مشتق‌گیری، $\sigma = 2\pi b\ \mathrm{d}b$ را نتیجه می‌دهد. به هرجهت به علت پیچیدگی معادله‌ی ۱-۱۱۰ راه‌حل‌های عددی مورد نیاز است. با وجود این، می‌توان $\mathrm{d}N$، تعداد پس‌زنی‌ها در $\mathrm{d}T$ در T تولید شده به وسیله‌ی پاره شکافت در فرایند کند شدن، را محاسبه کرد. این عبارت به این صورت تعیین می‌شود:

1. Impulse approximation
2. Bessel function

(۱۱۲-۱)

$$\mathrm{d}N = n\sigma\,\mathrm{d}x = n\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T}\left(-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)^{-1}\mathrm{d}E\,\mathrm{d}T\,,$$



شکل ۱-۱۴. طیف انرژی پس‌زنی‌های $N(T)\mathrm{d}T$ که به وسیله‌ی کند شدن و متوقف شدن پاره‌های شکافت در اورانیوم تولید شده است. دو حالت نشان داده شده است: M_1 = ۹۶، E_1 = ۹۵ MeV و M_1 = ۱۳۷، E_1= ۵۵ MeV [۱۳].

که در این رابطه η چگالی اتم‌ها است و

(۱۱۳-۱)

$$N(T)\,\mathrm{d}T = n\int_0^{E_\mathrm{i}}\frac{\sigma}{\mathrm{d}T}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}X}\right)^{-1}\mathrm{d}E\,\mathrm{d}T\,.$$

برینکمن این محاسبات را برای پاره‌های سنگین و سبک حاصل از شکافت ^{235}U کند شده در اورانیوم محاسبه کرد. این نتایج در شکل ۱-۱۴ نشان داده شده است. قابل ذکر است که $N(T)$ از T^{-1} خیلی سریع‌تر کاهش می‌یابد و از این‌رو اکثر اتم‌های جابه‌جاشده به وسیله‌ی پس‌زنی‌هایی با انرژی پایین

تولید شده‌اند. بنابراین پس‌زنی‌های پرانرژی تماماً قابل چشم‌پوشی هستند. راه دیگر توجیه این مطلب به این صورت است که پتانسیل کولنی ساده فقط در محدوده‌ی انرژی‌ای معتبر است که به صورت قابل توجهی در جابه‌جایی‌ها سهیم نمی‌باشد.

یون‌های سنگین، کند

این یون‌ها به وسیله‌ی منحنی مشخص شده با شماره‌ی ۳ در شکل ۱-۱۲ طبقه بندی شده‌اند. این گروه یک دسته‌ی بسیار مهمی از برخوردها هستند که اکثر کاربردهای دستگاه‌های کاشت یونی با انرژی در محدوده‌ی kV و شتاب‌دهنده‌ها با انرژیِ پایین در محدوده‌ی MeV در حیطه‌ی علم مواد و آسیب‌های تابشی را پوشش می‌دهند،که موضوعاتی از قبیل کاشت یونی و شبیه‌سازی اثرات تابش یون سنگین را دربر می‌گیرد. همان طوری که شکل نشان می‌دهد برخوردها باید در محدوده‌ی $a < \rho < 10a$ قرار داشته باشند. فرمول‌بندی مورد استفاده برای پارهای شکافت در بخش قبلی به برخوردهای زودگذر اعمال می‌شود؛ اما برای برخوردهای رودررو رویکرد دیگری مورد نیاز است. پتانسیل مناسب برای $\frac{a}{5} < \rho \leq 5a$ تقریب مربع‌معکوس است. این تابع پتانسیلی به صورت زیر استفاده می‌شود:

$$V(r) = \frac{2E_R}{e}(Z_1 Z_2)^{5/6}\left(\frac{a_0}{r}\right)^2,$$

که به وسیله‌ی جایگذاری یک پتانسیل استتار شده‌ی کولنی در پتانسیل مربع‌معکوس و هم‌ارزسازی در $r=a$، معادله‌ی ۱-۵۹، به‌دست می‌آید. با جایگذاری این تابع پتانسیل در معادله‌ی مسیر ۱-۷۶ نتیجه می‌دهد که:

$$\frac{\phi}{\pi} = 1 - \left(1 + \frac{a^2 E_a}{b^2 E_i}\right)^{-1/2}. \qquad (۱۱۴-۱)$$

با استفاده از معادله‌ی ۱-۱۳ برای نشان دادن ϕ برحسب T معادله‌ی ۱-۱۱۵ حاصل می‌شود:

$$T = \gamma E_i \cos^2\left[\frac{\pi}{2}\left(1 + \frac{a^2 E_a}{b^2 E_i}\right)^{-1/2}\right]. \qquad (۱۱۵-۱)$$

با بیان b برحسب T و مشتق‌گیری:

(۱-۱۱۶)

$$\sigma_s(E_i,T)=\frac{4E_a a^2\alpha}{\gamma E_i^2(1-4\alpha^2)^2[x(1-x)]^{1/2}},$$

که در این رابطه $x=\frac{T}{\gamma E_i}$ و $\pi\alpha=\cos^{-1}x^{\frac{1}{2}}$ است.

برای x کوچک (انتقال انرژی پایین) نتیجه می‌شود که:

(۱-۱۱۷)

$$\sigma_s(E_i,T)=\frac{\pi^2 a^2 E_a\gamma^{1/2}}{8E_i^{1/2}T^{3/2}}.$$

این نکته قابل ذکر است که سطح مقطع انتقال انرژی وابسته به T است. متوسط انرژی پس‌زنی برابر است با:

(۱-۱۱۸)

$$\bar{T}=\frac{\int_{\check{T}}^{\gamma E_i}T\sigma_s(E_i,T)\,dT}{\int_{\check{T}}^{\gamma E_i}\sigma_s(E_i,T)\,dT}=(\gamma E_i\check{T})^{1/2}.$$

سطح مقطع کلی برای جابه‌جایی برابر است با:

(۱-۱۱۹)

$$\sigma_s(E_i)=\int_{\check{T}}^{\gamma E_i}\sigma_s(E_i,T)\,dT=\frac{\pi^2 a^2 E_a\gamma^{1/2}}{4(E_i\check{T})^{1/2}}.$$

الکترون‌های نسبیتی[1]

آسیب تابشی ناشی از الکترون‌ها در مواد قلب رآکتور خیلی حایز اهمیت نیست، لیکن این آسیب‌ها در آزمایشگاه بسیار حایز اهمیت هستند؛ زیرا الکترون‌ها معمولاً در میکروسکوپ‌های الکترونی برای مطالعات آسیب‌های تابشی مورد استفاده قرار می‌گیرند. به علت جرم پایین الکترون، الکترون‌ها باید

1. Relativistic electrons

انرژی‌های بسیار زیادی را به‌دست آورند تا منجر به جابه‌جایی یک اتم شبکه شوند. این انرژی‌ها به اندازه‌ای بالا هستند که مکانیک کوانتومی نسبیتی باید برای توضیح برخوردها مورد استفاده قرار گیرد. برخلاف آن، انرژی انتقال یافته تنها برای جابه‌جایی اتم‌های ضربه‌خورده و نه جابه‌جایی‌های ثانویه، کافی است.

در قالب نسبیتی، اندازه‌ی حرکت یک الکترون با جرم سکون m_0 و انرژی جنبشی E_i برابر است با:

(۲۰-۱)

$$p_\mathrm{e}^2 = \frac{E_\mathrm{i}}{c^2}\left(E_\mathrm{i} + 2m_0c^2\right).$$

از آن‌جایی که اتم ضربه‌خورده به صورت غیرنسبیتی پس‌زده می‌شود، عبارت پس‌زنی برابر با مقداری است که در معادله‌ی ۱-۹ داده شده است:

$$V_\ell'^2 = V_\mathrm{CM}^2 + V_\mathrm{c}'^2 - 2V_\mathrm{CM}V_\mathrm{c}'\cos\phi = 2V_\mathrm{CM}^2\left(1-\cos\phi\right) = 4V_\mathrm{CM}^2\sin^2\frac{\phi}{2},$$

و بقای اندازه‌ی حرکت داریم:

$$p_\mathrm{e} = \left(m_0 + M\right)V_\mathrm{CM} \cong MV_\mathrm{CM}.$$

با جایگذاری عبارت‌های سرعتی با انرژی در عبارت $V_l'^2$ نتیجه می‌دهد که:

(۱۲۱-۱)

$$T = \frac{2E_\mathrm{i}}{Mc^2}\left(E_\mathrm{i} + 2m_0c^2\right)\sin^2\frac{\phi}{2},$$

یا

(۱۲۲-۱)

$$\hat{T} = \frac{2E_\mathrm{i}}{Mc^2}\left(E_\mathrm{i} + 2m_0c^2\right).$$

یک عبارت تقریبی برای معادله‌ی دیراک برای یون‌های سبک [۱۳]، سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی را نتیجه می‌دهد:

(۱-۱۲۳)

$$\sigma_s(E_1,\phi) = \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4}\frac{1-\beta^2}{\beta^4} \times \left[1-\beta^2\sin^2(\phi/2)+\pi\alpha\beta\sin(\phi/2)\left(1-\sin(\phi/2)\right)\right] \times \cos(\phi/2)\csc^3(\phi/2)\,,$$

که $\beta = v/c$ و $\alpha = Z_2/137$ است. این عبارت، قانون پراکندگی رادرفورد برای β کوچک را بیان می‌کند. با استفاده از معادله‌های ۱-۱۲۱ و ۱-۱۲۲، سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی بر حسب T و $\hat{T}$ نوشته می‌شود:

(۱-۱۲۴)

$$\sigma_s(E_i,T) = \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4}\frac{1-\beta^2}{\beta^4}\left[1-\beta^2\frac{T}{\hat{T}}+\pi\frac{\alpha}{\beta}\left\{\left(\frac{T}{\hat{T}}\right)^{1/2}-\frac{T}{\hat{T}}\right\}\right]\frac{\hat{T}}{T^2}$$

سطح مقطع کلی به وسیله‌ی انتگرال‌گیری از معادله‌ی ۱-۲۴ در بازه‌ی $\check{T}$ تا $\hat{T}$ به‌دست می‌آید:

(۱-۱۲۵)

$$\sigma_s(E_i) = \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4}\frac{1-\beta^2}{\beta^4}\left(\frac{\hat{T}}{\check{T}}-1\right)-\beta^2\log\frac{\hat{T}}{\check{T}} +\alpha\beta 2\left(\frac{\hat{T}}{\check{T}}\right)^{1/2}-1-\log\frac{\hat{T}}{\check{T}}\,.$$

برای الکترون‌های با انرژی‌های بالاتر از آستانه‌ی آسیب و $\hat{T}/\check{T}$ به صورت کمی بزرگ‌تر از واحد می‌توان نوشت:

(۱۲۶-۱)

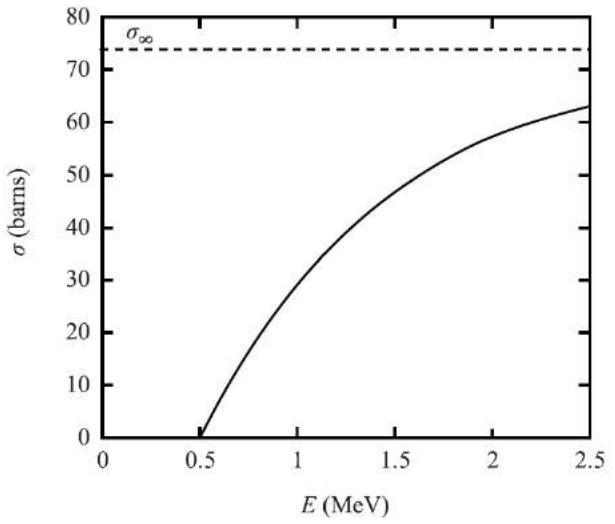
$$\sigma_s(E_i) \cong \frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2 c^4}\left(\frac{1-\beta^2}{\beta^4}\right)^2\left[\frac{\hat{T}}{\check{T}}-1\right].$$

شکل ۱-۱۵ نشان می‌دهد که در انرژی‌های به اندازه‌ی کافی بالا، $\sigma(E_i)$ به یک مقدار مجانبی می‌رسد:

(۱۲۷-۱)

$$\sigma_s(E_i) \to \frac{8\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{\check{T} M_2 c^2}$$

هنگامی که $E_i >> m_0c^2$ باشد. باید تأکید شود که به هرجهت این سطح مقطع‌ها برای عناصر سبک بسیار دقیق هستند ولی $\sigma_s(E_i)$ را برای عناصر سنگین ($Z > ۵۰$) شدیداً کم برآورد خواهند کرد. جدول ۱-۵ خلاصه‌ای از انتقال انرژی و سطح مقطع انتقال انرژی برای انواع مختلفی از برهم‌کنش‌های اتم ـ اتم بحث شده در قسمت ۱-۲ را نشان می‌دهد.



شکل ۱-۱۵. سطح مقطع آسیب برای بمباران الکترونی مس به‌طوری‌که E_d = ۲۵ eV [۱۳].

جدول ۱-۵. انتقال انرژی و سطح مقطع انتقال انرژی برای انواع مختلفی از برهم‌کنش‌های اتم ـ اتم.

نوع برخورد	انتقال انرژی و سطح مقطع انتقال انرژی	معادله در متن
کره‌ی سخت (پتانسیل بورن ـ مایر)	$\sigma_s(E_i,T)=\frac{\pi B^2}{\gamma E_i}\left[\ln\frac{A}{\eta E_i}\right]^2$	(۱-۸۷)
$\rho \sim r_e$	$\bar{T}=\gamma E_i/2$	(۱-۱۳)
پراکنش رادرفورد (پتانسیل کولنی ساده)	$\sigma_s(E_i,T)=\frac{\pi b_0^2}{4}\frac{E_i\gamma}{T^2}$	(۱-۱۰۲)
$\rho << a$	$\bar{T}\approx E_d\ln\left(\frac{\gamma E_i}{E_d}\right)$	(۱-۱۰۴)
یون سنگین (مربع معکوس)	$\sigma_s(E_i,T)=\frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{8E_i^{1/2}T^{3/2}}$	(۱-۱۱۷)
$a/5 \le \rho \le 5a$	$\bar{T}=\left(\gamma E_i \check{T}\right)^{1/2}$	(۱-۱۱۸)
الکترون‌های نسبیتی	$\sigma(E_i,T)=\frac{4\pi a_0^2 Z_2^2 E_R^2}{m_0^2c^4}\frac{1-\beta^2}{\beta^4}$ $\times\left[1-\beta^2\frac{T}{\hat{T}}+\pi\frac{\alpha}{\beta}\left\{\left(\frac{T}{\hat{T}}\right)^{1/2}-\frac{T}{\hat{T}}\right\}\right]\frac{\hat{T}}{T^2}$	(۱-۱۲۴)

۱-۳ برخوردهای یونیزه کننده

تا این قسمت برخوردها به عنوان وقایع جدا از هم مورد بررسی قرار گرفتند. به هرجهت، درکنار برخورد با یا میان هسته‌ها، ممکن است که یک یون یا اتم در حال حرکت از میان شبکه انرژی خود را به وسیله‌ی برانگیختگی الکترونیکی، یونش یا پدیده‌ی برمشترلانگ یا تابش ترمزی[1] (اتلاف انرژی یک الکترون به واسطه‌ی عبور از میان میدان کولنی یک هسته به وسیله‌ی نشر پرتوهای ایکس) از دست بدهد. این وقایع ممکن است که به منزله‌ی رخدادهایی با پیوستگی کم یا زیاد بررسی شوند. در ادامه اتلاف انرژی در جامدات مورد بررسی قرار می‌گیرد.

1. Bremsstrahlung

۱-۳-۱ تئوری اتلاف انرژی

هدف محاسبه‌ی اتلاف انرژی دیفرانسیلی یک یون یا یک اتم متحرک در داخل شبکه است. در این قسمت اتلاف انرژی در واحد طول به صورت $-\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$ (یا $NS(E)$ که N عدد چگالی اتمی و S توان بازدارندگی[1] در واحدهایی از انرژی × مربع فاصله می‌باشند) تعریف می‌شود، در نتیجه اتلاف انرژی کلی می‌تواند به وسیله‌ی جمع این اجزاء تقریب زده شود:

(۱۲۸-۱)

$$\left(-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{total}} = \left(-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{n}} + \left(-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{e}} + \left(-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{r}},$$

که در این رابطه زیرنویس‌های نوشته شده عبارتند از n : کشسان، e : الکترونیک و r : تابش.

در بسیاری از کاربردهایی که علاقه‌ی بسیاری برای بررسی آن‌ها وجود دارد، اتلاف انرژی به وسیله‌ی تابش، بسیار کوچک است و نادیده گرفته خواهد شد. از بحث‌های موجود در بخش ۱-۲-۱ کاملاً مشخص است که برای توضیح دقیق کندشدن یک یون یا اتم در گستره‌ی یک محدوده‌ی انرژی $\hat{T}$ تا $\check{T}$ (که $\hat{T}$ در محدوده‌ی MeV و $\check{T}$ تقریباً در حد ۱۰ eV می باشند)، ممکن است که چندین تابع پتانسیلی در کنار یک‌دیگر مورد استفاده قرار گیرند (شکل ۱-۹ دیده شود). این موضوع به علت ناپیوستگی‌های موجود در قسمت‌های پایان و آغاز یک بازه، مشکلاتی را ایجاد می‌کند. به هرجهت نقاط حدی این توابع اغلب وابسته به M و Z متفاوت هستند.

به هر حال توان بازدارندگی را با توجه به نوع برهم‌کنش می‌توان تفکیک یا تقسیم بندی کرد و از این‌رو، رده انرژی را نیز می‌توان تفکیک و تقسیم بندی کرد. در رده انرژی‌های بالا، $a << \rho$ و $S_{\mathrm{e}} >> S_{\mathrm{n}}$ می‌باشد و این برهم‌کنش‌ها به عنوان برخوردهای کولنی خالص در نظر گرفته می‌شود. در

1. Stopping power;

ذره‌های باردار سریع در عبور از یک ماده، اتم هایی که با آن‌ها برخورد می‌کنند را یونیزه کرده و در نتیجه ذره‌های سریع در چند مرحله انرژی خود را از دست می‌دهند، توان بازدارندگی یا توان ترمزی به منزله‌ی میانگین اتلاف انرژی ذره در طول مسیر تعریف می‌شود.

رده انرژی پایین $\rho \approx a$ و $S_n > S_e$ است. این منطقه‌ی مهمی در نهشت‌گذاری[1] انرژی جابه‌جایی است. در این دو مورد می‌توان یک فرمولی را برای محاسبه‌ی توان بازدارندگی طرح ریزی کرد،

$$\frac{dE}{dx} = NS(E).$$

اگر سطح مقطع انتقال انرژی $\sigma(E_i, T)$ برای S_n یا S_e مشخص باشد، می‌توان میانگین انتقال انرژی را محاسبه کرد:

$$\bar{T} = \frac{\int T\sigma dT}{\int \sigma dT} = \text{انرژی اتلاف شده یا منتقل شده}$$

و مسیر متوسط آزاد (mfp) میان برخوردها $\lambda = \frac{1}{N\sigma}$ است. در نتیجه نسبت این دو مقدار برابر با اتلاف انرژی در واحد طول است:

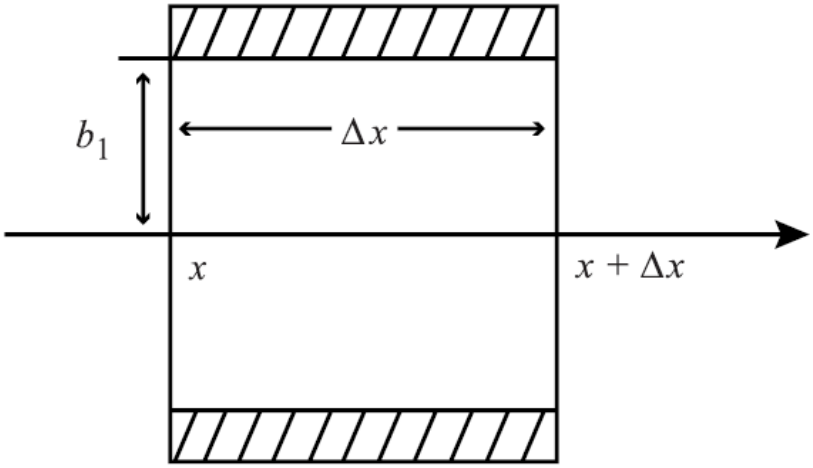
(۱۲۹-۱)

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\bar{T}}{\lambda} = \frac{\int_{\check{T}}^{\hat{T}} T\sigma(E_i, T)\,dT}{\int_{\check{T}}^{\hat{T}} \sigma(E_i, T)\,dT} \cdot N \int_{\check{T}}^{\hat{T}} \sigma(E_i, T)\,dT$$
$$= N \int_{\check{T}}^{\hat{T}} T\sigma(E_i, T)\,dT,$$

که در این رابطه N عدد چگالی هدف است.

راه دیگر برای بررسی این موضوع در ادامه آورده شده است، یک پرتابه‌ی فرودی به یک هدف بی‌شکل[2] حاوی تعداد متوسط N اتم در واحد حجم را در نظر بگیرید (شکل ۱-۱۶). در پیمایش باریکه‌ای از ماده میان x و $x + \Delta x$، پرتابه به فاصله‌ی b_1 از $N\Delta x 2\pi b_1 db$ ذره‌های هدف خواهد رسید و انرژی $T(E_i, b)$ را به هر کدام منتقل می‌کند. انرژی کلی منتقل شده به تمام ذره‌های هدف در باریکه به وسیله‌ی انتگرال‌گیری مجموع پارامترهای برخوردی ممکن به‌دست می‌آید:

1. Deposition
2. Amorphous



شکل ۱-۱۶. شمایی از یک پرتابه فرودی با انرژی E و پیمایش مسافت b_1 در درون یک رینگ حلقوی محتوی $N\Delta x 2\pi b_1 \mathrm{d}b$ اتم.

$$\Delta E = N\Delta x \int_0^{\infty} T 2\pi b \,\mathrm{d}b .$$

با فرض این‌که $\Delta E << E$ باشد و تقسیم بر Δx و اعمال حد $x \longrightarrow 0$ می‌توان نوشت:

$$\left.\frac{\Delta E}{\Delta x}\right|_{\lim x\to 0} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = N\int_0^{\infty} T 2\pi b \,\mathrm{d}b .$$

و با توجه به این‌که $\sigma\ (E_\mathrm{i}, T)\mathrm{d}T = 2\pi b \,\mathrm{d}b$ است، می‌توان نتیجه گرفت که:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = N\int_{\bar{T}}^{\hat{T}} T\sigma(E_\mathrm{i}, T)\,\mathrm{d}T ,$$

که مشابه نتایج به‌دست آمده از معادله‌ی ۱-۱۲۹ می‌باشد. در ادامه و در ابتدا بازدارندگی هسته‌ای[1] یا اتلاف انرژی برخوردهای کشسان مورد بررسی قرار می‌گیرد.

1. Nuclear stopping

توان بازدارندگی هسته‌ای[1]

$(-\frac{dE}{dx})_n$ یا $NS_n(E_i)$ به عنوان اتلاف انرژی به هسته‌های هدف، هنگامی که یک پرتابه با انرژی E_i یک فاصله‌ی دیفرانسیلی برابر با dx از یک هدف با چگالی واحد را طی کند، تعریف می‌شود. در صورتی که فرض شود هر هسته‌ی هدف به صورت کاملاً مستقل از دیگر هسته‌های هدف در کند کردن یک پرتابه عمل می‌کند، می‌توان یک فرمول ساده از $(-\frac{dE}{dx})_n$ نوشت. در واقع در این مرحله هرگونه برهم‌کنش‌های ممکن میان هسته‌ها نادیده گرفته می‌شود. این یک تقریب نسبتاً خوب برای هدف‌های بی‌شکل و نیز یک تقریب اول خوب برای هدف‌های بلوری است.

حالت ۱. *برخوردهای کشسان پر انرژی*، $\rho << a$.

پراکندگی رادرفورد، این نوع از برهم‌کنش‌ها را با دقت خوبی توصیف می‌کند. یادآوری می‌شود که برای پراکندگی کولنی ساده، سطح مقطع انتقال انرژی برابر است با (معادله‌ی ۱-۱۰۲):

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{\pi b_0^2}{4}\frac{\gamma E_i}{T^2}.$$

در نتیجه توان بازدارندگی عبارت است از:

(۱-۱۳۰)

$$\left.\frac{dE}{dx}\right|_n = NS_n(E_i) = N\int_{\check{T}}^{\gamma E_i} T\frac{\pi b_0^2}{4}\frac{\gamma E_i}{T^2}\,dT$$
$$= \frac{N\pi b_0^2}{4}\gamma E_i \ln\left(\frac{\gamma E_i}{\check{T}}\right),$$

که $\hat{T} = \gamma E_i$ و $\check{T}$ مقدار T است که در $b = a$ یا $\breve{T}_b = \frac{\varepsilon^2 \gamma E_d^2}{4E_i}$ به‌دست می‌آید.

با جایگزینی b_0 از رابطه‌ی ۱-۹۳ می‌توان نوشت:

1. Nuclear stopping power

(۱۳۱-۱)

$$\left.\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right|_{\mathrm{n}} = NS_{\mathrm{n}}(E_{\mathrm{i}}) = \frac{N\pi Z_1^2 Z_2^2 \varepsilon^4}{E_{\mathrm{i}}}\frac{M_1}{M_2}\ln\left(\frac{\gamma E_{\mathrm{i}}}{\check{T}_b}\right).$$

قابل ذکر است که برای اتم‌های مشابه، $\gamma = 1$ و $M_1 = M_2$ است و در نتیجه:

(۱۳۲-۱)

$$NS_{\mathrm{n}}(E_{\mathrm{i}}) = \frac{N\pi Z_1^2 Z_2^2 \varepsilon^4}{E_{\mathrm{i}}}\ln\left(\frac{E_{\mathrm{i}}}{\check{T}_b}\right).$$

با جایگزینی E_{a} از معادله‌ی ۱-۱۰۷ در عبارت موجود برای $\check{T}_b$، معادله‌ی ۱-۱۳۳ به‌دست می‌آید:

(۱۳۳-۱)

$$\check{T}_b = \frac{4E_{\mathrm{R}}^2 (Z_1 Z_2)^2 (Z_1 Z_2)^{2/6}}{E_{\mathrm{i}}}.$$

با استفاده از $a = a_0/\ (z_1 z_2)^{1/6}$ و جایگذاری برای $(z_1 z_2)^{1/6}$ نتیجه می‌دهد که:

$$\check{T}_b = \frac{4E_{\mathrm{R}}^2 a_0^2 Z^4}{a^2 E_{\mathrm{i}}},$$

برای $Z_1 = Z_2$ و با توجه به این‌که $\varepsilon^2 = 2a_0 E_{\mathrm{R}}$، در نتیجه معادله‌ی ۱-۱۳۲ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۳۴-۱)

$$\begin{aligned} NS_{\mathrm{n}}(E_{\mathrm{i}}) &= \frac{4N\pi Z^4 a_0^2 E_{\mathrm{R}}^2}{E_{\mathrm{i}}}\ln\left(\frac{E_{\mathrm{i}}}{\check{T}_b}\right) \\ &= \frac{4N\pi Z^4 a_0^2 E_{\mathrm{R}}^2}{E_{\mathrm{i}}}\ln\left(\frac{a^2 E_{\mathrm{i}}^2}{4a_0^2 E_{\mathrm{R}}^2 Z^4}\right) \end{aligned}$$

حالت ۲. *برخوردهای کشسان کم انرژی*، $\rho \sim a$

در انرژی‌های متوسط و پایین، پراکندگی کولنی خالص نمی‌تواند به طور صحیح برهم‌کنش‌ها را کنترل کند. در این صورت باید برای محاسبه اثرات الکترون‌ها در فضاهای بین هسته‌ای از یک تابع کولنی استتار شده استفاده کرد. لیندهارد[1]، نیلسن[2] و اسچارف[3] [۱۴] یک سطح مقطع پراکندگی دیفرانسیلی جامع تک متغیره را در یک فرم نماد کاهشی[4] پیشنهاد کردند:

(۱۳۵-۱)

$$\sigma = \frac{-\pi a^2}{2} \frac{f\left(t^{1/2}\right)}{t^{3/2}}$$

که t یک پارامتر برخوردی بی بعد است و به صورت زیر تعریف می‌گردد:

(۱۳۶-۱)

$$t = \epsilon^2 \frac{T}{\hat{T}},$$

و $\in$ انرژی بی‌بعد است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۱۳۷-۱)

$$\in = \frac{aM_2}{Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)} E_{\mathrm{i}}.$$

لیندهارد و همکارانش [۱۴] بیان کردند که $f(t^{1/2})$ یک تابع مقیاس ساده است که t یک اندازه‌ای از عمق نفوذ به داخل یک اتم در طول یک برخورد است و t ی بزرگ، مسیر برخورد نزدیک را نشان می‌دهد. تابع $f(t^{1/2})$ به صورت خط سیاه رنگ ضخیم در شکل ۱-۱۷ رسم شده است. عبارت تحلیلی برای این تابع به وسیله‌ی وینترون[5] و همکارانش بیان شده است [۱۵].

1. Lindhard
2. Nielsen
3. Scharff
4. Reduced notation
5. Winterbon

(۱۳۸–۱)

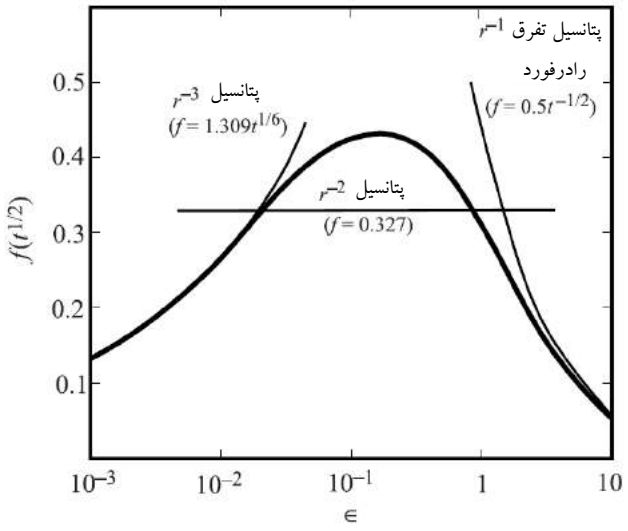
$$f\left(t^{1/2}\right) = \lambda' t^{1/6}\left[1 + (2\lambda' t^{2/3})^{2/3}\right]^{-3/2},$$

که $\lambda' = ۱٫۳۰۹$ است. تعمیم رابطه‌ی ۱–۱۳۸ برای پراکندگی قانون توانی[1] برابر است با:

(۱۳۹–۱)

$$f\left(t^{1/2}\right) = \lambda_m t^{\frac{1}{2} - m},$$

که $\lambda_{۱/۳} = ۱٫۳۰۹$، $\lambda_{۱/۲} = ۰٫۳۲۷$ و $\lambda_۱ = ۰٫۵$ می‌باشد. معادله‌ی ۱–۱۳۹ به صورت تقریبی، پراکندگی را از یک پتانسیلِ به فرم $V(r)\alpha r^{-s} = r^{-1/m}$ توصیف می‌کند که s نمای قانون توانی است.



شکل ۱–۱۷. سطح مقطع دیفرانسیلی کاهشی که از پتانسیل توماس ـ فرمی محاسبه شده است. با توجه به معادله‌ی ۱–۱۳۵ خط سیاه پررنگ در محدوده‌ی $۱۰^{-۳} < \epsilon < ۱۰$ متغیر است. خطوط سیاه رنگ باریک در سمت چپ و راست خط افقی در وسط با استفاده از سطح مقطع قانون توانی، معادله‌ی ۱–۱۳۹، محاسبه شده‌اند [۱۵].

1. Power law scattering

در انرژی‌های پایین ($\in$ پایین)، نفوذ کمی در طول برخورد وجود دارد (t کوچک است) و برخوردها به وسیله‌ی یک قانون توانی با $V(r) \propto r^{-3}$ توضیح داده می‌شوند و $m = \frac{1}{3}$ یک وابستگی $t^{1/6}$ را ایجاد می‌کند. در انرژی‌های بالاتر، اثرات استتار حداقل هستند و به وسیله‌ی یک پتانسیل $V(r) \propto r^{-1}$ توضیح داده می‌شوند و $m = 1$، یک رفتار $t^{-1/2}$ را نتیجه می‌دهد. در انرژی‌های متوسط، تابع (سطح مقطع) به آرامی تغییر می‌کند و بهترین توضیح به وسیله‌ی یک پتانسیل قانون توانی به صورت $V(r) \propto r^{-2}$ داده می‌شود و $m = \frac{1}{2}$ هیچ‌گونه وابستگی به t ایجاد نمی‌کند که به این معنی است که سطح مقطع مستقل از $\in$ است.

برای پتانسیل استتار شده‌ی کولنی، سطح مقطع دیفرانسیلی انتقال انرژی، که در معادله‌ی ۱-۱۳۵ با یک نماد کاهشی تعریف شده است، برای تعیین توان بازدارندگی هسته‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرد به صورتی که:

(۱-۱۴۰)

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = \frac{-N\pi a^2 \hat{T}}{\in^2} \int_0^{\hat{T}} f(t^{1/2})\, dt^{1/2}.$$

این عبارت می‌تواند در یک فرم کلی به صورت زیر نوشته شود [۱۶]:

(۱-۱۴۱)

$$\rho_R = \frac{N4\pi a^2 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} R,$$

که در این رابطه R اندازه‌ای از طول در سیستم آزمایشگاهی است. ناستاسی[1] و همکارانش [۱۷] رابطه‌ای را میان $S_n(E)$ و $S_n(\in)$ به صورت زیر بیان کردند:

(۱-۱۴۲)

$$S_n(\in) = \frac{M_1 + M_2}{M_1} \frac{1}{4\pi a Z_1 Z_2 \varepsilon^2} S_n(E) = \frac{\in}{\pi a^2 \gamma E_i} S_n(E),$$

1. Nastasi

که در صورت ترکیب با معادله‌ی ۱-۱۴۰ عبارت زیر حاصل می‌شود:

$$\left(\frac{\mathrm{d}\in}{\mathrm{d}\rho}\right) \equiv S_{\mathrm{n}}(\in) = \frac{1}{\in}\int_0^{\in} f\left(t^{1/2}\right)\mathrm{d}t^{1/2}, \qquad (۱۴۳-۱)$$

که باید به صورت عددی حل شود. نتیجه در شکل ۱-۱۸ به صورت تابع بازدارندگی هسته‌ای کاهشی رسم شده است. معادله‌ی ۱-۱۴۳ می‌تواند دقیقاً برای تقریب قانون توانی مطابق $f(t^{1/2})$ (معادله‌ی ۱-۱۳۹) حل شود:

$$S_{\mathrm{n}}(\in) = \frac{\lambda_{\mathrm{m}}}{2(1-m)}\in^{1-2\mathrm{m}}, \qquad (۱۴۴-۱)$$

که λ_{m} با استفاده از رابطه‌ی ۱-۱۳۹ تعیین می‌شود. با جایگذاری طول استتار، a، برای یک طول استتار کلی، a_{U}، $S_{\mathrm{n}}(\in)$ در معادله‌ی ۱-۱۴۲ به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

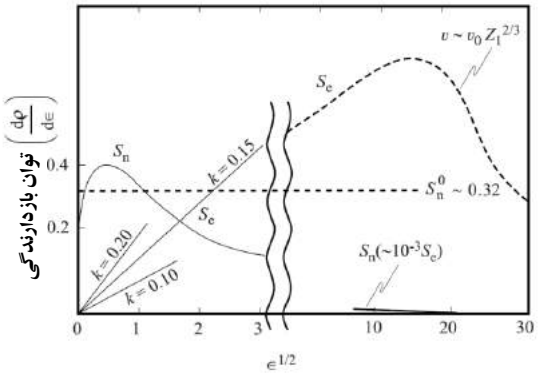
$$S_{\mathrm{n}}(\in) = \frac{\in}{\pi a_{\mathrm{U}}^2 \gamma E_{\mathrm{i}}}\int_0^{\hat{T}} T\sigma(E,T)\,\mathrm{d}T, \qquad (۱۴۵-۱)$$

و با استفاده از برابری:

$$\int_0^{\hat{T}} \sigma(E,T)\,\mathrm{d}T = \int_0^{b_{\max}} 2\pi b\,\mathrm{d}b, \qquad (۱۴۶-۱)$$

یک عبارت برای سطح مقطع بازدارندگی هسته‌ای در یک نماد کاهشی و به صورت زیر نتیجه می‌شود:

$$S_{\mathrm{n}}(\in) = \frac{\in}{a_{\mathrm{U}}^2}\int_0^{\infty} \sin^2\frac{\phi}{2}\,\mathrm{d}b^2. \qquad (۱۴۷-۱)$$



شکل ۱-۱۸. سطح مقطع‌های بازدارندگی الکتریکی و هسته‌ای کاهیده به صورت تابعی از $\epsilon^{1/2}$.

زیگلر[1] و همکارانش [۱۸] تابع استتار کننده‌ی جامع را استفاده کردند (شکل ۱-۱۹):

(۱۴۸-۱)

$$\chi_U = 0.1818e^{-3.2x} + 0.5099e^{-0.9423x} + 0.2802e^{-0.4029x} + 0.02817e^{-0.2016x},$$

و انتگرال‌گیری عددی از معادله‌های ۱-۷۶ و ۱-۱۴۷ برای محاسبه‌ی یک حالت کلی، سطح مقطع توان بازدارندگی هسته‌ای، سطح مقطع ZBL نشان داده شده در شکل ۱-۲۰، را به صورت نمادکاهشی نتیجه می‌دهد. یک عبارت مناسب برای این انتگرال‌گیری به صورت معادله‌ی ۱-۱۴۹ می‌باشد:

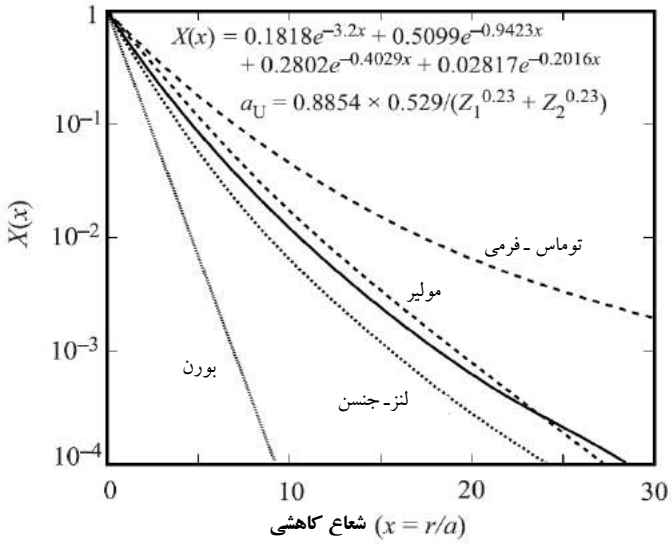
(۱۴۹-۱)

$$S_n(\epsilon) = \frac{0.5\ln(1 + 1.1383\,\epsilon)}{(\epsilon + 0.01321\,\epsilon^{0.21226} + 0.19593\,\epsilon^{0.5})},$$

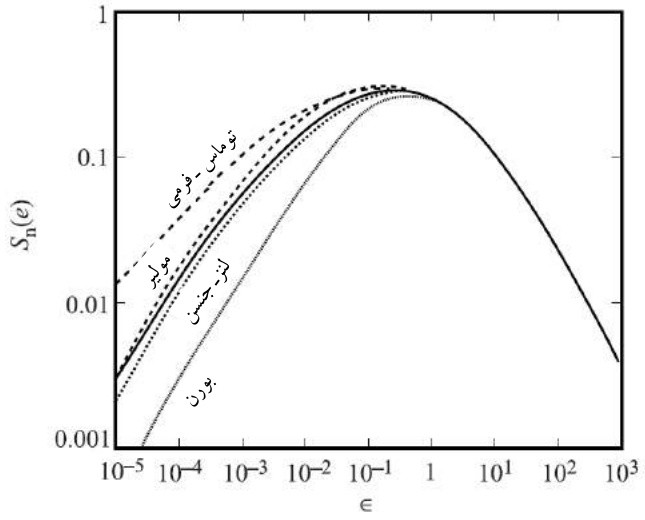
و برای محاسبات عملی، توان بازدارندگی هسته‌ای کلی ZBL برای یک یون با انرژی E_i در سیستم آزمایشگاهی برابر است با:

1. Ziegler

$$S_n(E_i) = \frac{8.462 \times 10^{-15} Z_1 Z_2 M_1 S_n(\in)}{(M_1 + M_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \frac{\text{eVcm}^2}{\text{atom}}, \qquad (۱۵۰-۱)$$



شکل ۱-۱۹. تابع استتار کلی χ_U (خط پررنگ ضخیم) از معادله‌ی ۱-۱۴۸ به صورت تابعی از $x = r/a_U$ که a_U طول استتار کلی تعریف شده، به صورت $a_U = 0.8854a_0/(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})$ است که به همراه چندین تابع استتار دیگر نشان داده شده است [۱۷].



شکل ۱-۲۰. توان بازدارندگی هسته‌ای در واحدهای کاهشی از معادله‌ی ۱-۱۴۹.

که انرژی کاهشی ZBL برابر است با:

(۱۵۱-۱)

$$\in = \frac{32.53 M_2 E_i}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})}.$$

دو تقریب از $S_n(E_i)$ برای برخوردها در رده‌های انرژی **متوسط**، مورد توجه قرار گرفته است. اولی استفاده از پتانسیل مربع‌معکوس، معادله‌ی ۱- ۵۹، است. راه‌حل دقیق مسیرها ممکن است [۱۶]، و معادله‌ی ۱-۷۶ نتیجه می‌دهد که:

(۱۵۲-۱)

$$\frac{\phi}{\pi} = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{a^2 E_a}{b^2 E_i}\right)^{1/2}}.$$

با استفاده از معادله‌ی ۱-۱۳ برای مشخص کردن T می‌توان نوشت:

(۱۵۳-۱)

$$T = \gamma E_i \cos^2\left[\frac{\pi}{2}\left(1 + \frac{a^2 E_a}{b^2 E_i}\right)^{1/2}\right].$$

با بیان b^2 بر حسب T و دیفرانسیل‌گیری و با استفاده از رابطه‌ی میان $\sigma(E_i,T)$ و b از معادله‌ی ۱-۷۸ می‌توان نوشت:

(۱۵۴-۱)

$$\sigma_s(E_i, T) = \frac{4 E_a a^2 \alpha}{\gamma E_i^2 (1 - 4\alpha^2)^2 (x(1-x))^{1/2}},$$

که $x = \frac{T}{E_i}$، $\pi\alpha = \cos^{-1}\sqrt{x}$ و برای $x(\frac{T}{E_i})$ کوچک، معادله‌ی ۱-۱۵۴ به صورت زیر است:

(۱۵۵-۱)

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}},T)=\frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{8E_{\mathrm{i}}^{1/2}T^{3/2}}.$$

سطح مقطع کلی و متوسط انرژی پس‌زنی از معادله‌ی ۱-۱۵۵ با در نظر گرفتن یک نقطه حدی تا صفر در $\overline{T}=\gamma E_{\mathrm{i}}$ محاسبه می‌شود:

(۱۵۶-۱)

$$\bar{T}=\left(\gamma E_{\mathrm{i}}\check{T}\right)^{1/2},$$

و

(۱۵۷-۱)

$$\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})=\frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{4\left(E_{\mathrm{i}}\check{T}\right)^{1/2}}.$$

در نتیجه توان بازدارندگی با استفاده از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود:

$$S_{\mathrm{n}}(E_{\mathrm{i}})=\int_{\check{T}}^{\hat{T}} T\sigma(E_{\mathrm{i}},T)\,\mathrm{d}T,$$

و با جایگذاری سطح مقطع انتقال انرژی از معادله‌ی ۱-۱۵۵ می‌توان نوشت:

(۱۵۸-۱)

$$\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{n}}=NS_{\mathrm{n}}(E_{\mathrm{i}})=\frac{\pi^2}{4}a^2 N E_a\gamma.$$

این نتیجه‌ی مشابه، با استفاده از این حقیقت به‌دست می‌آید که:

(۱۵۹-۱)

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}=\frac{\bar{T}}{\lambda}=N\sigma_{\mathrm{s}}\bar{T},$$

که $\lambda = 1/N\sigma_S$ مسیر آزاد متوسط میان برخوردها است و σ_s و $\bar{T}$ از معادله‌های ۱-۱۵۶ و ۱-۱۵۷ جایگزین می‌شوند.

تقریب دوم $S_n(E_i)$، تابع استتار توماس ـ فرمی را مورد استفاده قرار می‌دهد. فرض خواهد شد که یک سری از رخدادهای پراکندگی زاویه‌ی کوچک، مسئول اکثر اتلاف انرژی یک پرتابه در یک هدف باشند. هنگامی که این مطلب درست باشد، می‌توان انرژی منتقل شده، T، را با استفاده از حل معادله‌ی ۱-۷۶ برای ϕ با استفاده از تابع استتار توماس ـ فرمی، معادله‌ی ۱-۴۹، و گسترش راه‌حل با این فرض که ϕ کوچک است، به صورت تابعی از E_i و b بیان کرد. با انجام این روند، مشخص می‌شود که:

(۱-۱۶۰)

$$\phi = \pi - 2\int_0^{\hat{x}} \left[\frac{1}{b^2}\left(1 - \frac{V(x)}{\eta E_i} - b^2x^2\right)\right]^{-1/2} \mathrm{d}x,$$

برای $V(r) = \dfrac{Z_1Z_2\varepsilon^2}{r} f(r/a)$ که در این رابطه $f(\dfrac{r}{a}) = r/a$ است.

راه‌حل عبارت است از:

(۱-۱۶۱)

$$\phi = \pi - b\left[b^2 + \frac{Z_1Z_2\varepsilon^2 a}{E_R}\right]^{-1/2}.$$

با حل برای b و جایگذاری در عبارت:

$$\sigma(E_i, \phi)\,\mathrm{d}\Omega = 2\pi b\,\mathrm{d}b,$$

و با استفاده از معادله‌ی ۱-۱۳ برای به‌دست آوردن $\sigma_s(E_i,T)\mathrm{d}T$، می‌توان $S_n(E_i)$ را از معادله‌ی ۱-۱۲۹ تعیین کرد. نتیجه عبارت است از:

(۱-۱۶۲)

$$S_n^0 = K\frac{Z_1Z_2}{Z^{1/3}}\frac{M_1}{M_1 + M_2}\mathrm{eV\,cm^2}$$

(که در این رابطه $Z^{1/3} = (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}$ و $K = ۱٫۱۵۸\ \pi\varepsilon^2 a_0 = ۲٫۸\times۱۰^{-۱۵}\ \mathrm{eVcm}^2$)، که به توان بازدارندگی استاندارد اشاره می‌کند و در شکل ۱-۱۸ نشان داده شده است. **لازم به ذکر است که S_n^0 نسبت به تقریب اول مستقل از انرژی پرتابه است.** به صورت منطقی بردهای تخمین زده شده از S_n^0 هنگامی که پراکندگی‌های زاویه کوچک غالب باشند، نزدیک خواهند بود.

یادآوری می‌شود که فرض کلیدی در استخراج معادله‌ی ۱-۱۶۲ این بود که اتلاف انرژی از یک پرتابه می‌تواند به صورت یک سری از رخدادهای پراکندگی زاویه کوچک نشان داده شود، که به عبارتی فرض کوچک باقی ماندن ϕ را مجاز می‌کند. جدول ۱-۶ زاویه‌های پراکندگی و اتلاف انرژی برای یک پرتابه‌ی فرودی سیلیکونی با انرژی ۵۰keV به یک اتم هدف سیلیکونی را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که برای $\rho/a \geq ۱$ این فرض به وضوح صادق است. در ادامه اتلاف انرژی الکترونیکی توضیح داده خواهد شد.

جدول ۱-۶. زاویه‌های پراکندگی و اتلاف انرژی برای یک پرتابه‌ی فرودی سیلیکونی با انرژی ۵۰keV به یک اتم هدف سیلیکونی.

$\rho/a =$	10	1	0.1
ϕ (شعاع)	0.004π	0.26π	0.89π
θ (درجه)	0.36	23.4	80.5
T/E	4×10^{-5}	0.16	0.973
T (keV)	0.002	8	49

توان بازدارندگی الکترونیکی

محاسبه‌ی نظری توان بازدارندگی الکترونیکی نسبت به محاسبه‌ی S_n بسیار پیچیده‌تر است. برای توضیح برخوردهای میان یون‌ها و الکترون‌ها، ممکن است معادله‌ی کلاسیک (معادله‌ی ۱-۱۰۶) استفاده شود؛ اما در این‌جا باید توجه شود که برخورد دوتایی بین یک یون متحرک سنگین و یک الکترون در یک جامد رخ می‌دهد. این رویکرد تا زمانی صادق است که تمام الکترون‌ها در برخورد شرکت کنند و سرعت یون فراتر از سرعت الکترون مقید[1] باشد.

1. Bound electron; الکترونی که از طریق جاذبه‌ی الکتروستاتیکی به هسته‌ی اتم مقید باشد

می‌توان T را به صورت زیر تعریف کرد:

(۱۶۳-۱)

$$\hat{T} \cong \gamma_e E_i ,$$

که $\gamma_e = \frac{4m_e M}{(m_e + M)^2}$ و از آن‌رو $\hat{T}$ بسیار کوچک است. هم‌چنین باید یک حد پایین را برای برهم‌کنش‌های یون ـ الکترون به عنوان میانگین مؤثر برانگیختگی ـ یونش، سطح $\bar{I}$ تعریف کرد (برای یک تقریب اول $\bar{I} = KZ_2$ که k =۱۱٫۵ eV). هم‌چنین یادآوری می‌شود که باید چگالیِ الکترونی استفاده شود که فقط Z_2 برابر چگالی اتمی است.

(۱۶۴-۱)

$$n = NZ_2 .$$

با نوشتن یک عبارت برای توان بازدارندگی ناشی از برهم‌کنش‌های برانگیختگی ـ یونش که برابر با معادله‌ی ۱-۱۳۰ است، نتیجه می‌شود:

(۱۶۵-۱)

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_e &= \frac{n}{Z_2}\int_{\bar{I}}^{\gamma_e E_i} T\sigma_s(E_i, T)\,\mathrm{d}T \\ &= \frac{n}{Z_2}\frac{\pi b_0^2}{4}\gamma_e E_i \ln\left(\frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}}\right) \\ &= N\pi\frac{Z_1^2 Z_2 \varepsilon^4}{E_i}\frac{M}{m_e}\ln\left(\frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}}\right) .\end{aligned}$$

به هرجهت این فرمول فقط تقریبی است. یک عبارت بسیار دقیق‌تر، از یک عملیات مکانیک کوانتومی برپایه‌ی تقریب بورن به‌دست می‌آید و به صورت فیزیکی این‌گونه تفسیر می‌شود که برای پارامترهای برخوردی بزرگ، اختلال ناشی از ذره‌ی فرودی نمی‌تواند به صورت جدی حرکت

الکترونیکی را مختل کند. نتیجه‌ی این تحلیل اضافه شدن یک فاکتور ۲ می‌باشد که از فرایندهای انتقال انرژی کوچک که پتانسیل استتار شده‌ی کولنی آزاد غیرمعتبر است، نتیجه می‌شود. فرمول بت ـ بلوچ[1] یک تقریب خوب است:

$$\left(-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{e}} = \frac{N2\pi Z_1^2 Z_2 \varepsilon^4}{E_{\mathrm{i}}} \frac{M}{m_{\mathrm{e}}} \ln\left(\frac{\gamma_{\mathrm{e}} E_{\mathrm{i}}}{\bar{I}}\right) = \frac{2\pi N Z_1^2 M \varepsilon^4}{m_{\mathrm{e}} E_{\mathrm{i}}} B, \qquad (۱۶۶-۱)$$

که $B = Z_2 \ln(\frac{\gamma_{\mathrm{e}} E_{\mathrm{i}}}{\bar{I}})$ عدد بازدارندگی است. برای سرعت‌های نسبیتی:

$$B = Z_2 \left\{ \ln\left(\frac{\gamma_{\mathrm{e}} E_{\mathrm{i}}}{\bar{I}}\right) - \ln\left(1-\beta^2\right) - \beta^2 \right\}, \qquad (۱۶۷-۱)$$

که $\beta = \upsilon/c$ و c سرعت نور است. قابل ذکر است که در انرژی‌های بالا، S_{n} و S_{e} بسیار تقریبی به صورت $1/E_{\mathrm{i}}$ تغییر می‌کنند.

$$\frac{S_{\mathrm{e}}}{S_{\mathrm{n}}} = \frac{2M_2}{m_{\mathrm{e}} Z_2} \frac{\ln\left(\frac{\gamma_{\mathrm{e}} E_{\mathrm{i}}}{\bar{I}}\right)}{\ln\left(\frac{\gamma E_{\mathrm{i}}}{E_{\mathrm{d}}}\right)}. \qquad (۱۶۸-۱)$$

با اعمال معادله‌ی ۱-۱۶۸ به پروتون‌هایی با انرژی در حد MeV، مقدار تقریبی ۲۰۰۰ برای $\bar{I} \sim ۱۱٫۵Z_2$ eV حاصل می‌شود، یا به عبارت دیگر توان بازدارندگی الکترونیکی ۲۰۰۰ برابر توان بازدارندگی هسته‌ای است.

در سرعت‌های پایین، الکترون‌های موجود در لایه‌های درونی کم‌تر در توان بازدارندگی شرکت می‌کنند. هم‌چنین احتمال خنثی‌سازی چنان بزرگ می‌شود که برخورد میان پرتابه‌ها و الکترون‌های اطراف تقریباً کشسان است. اتلاف انرژی متناسب با سرعت پرتابه می‌شود. لیندهارد، اسچارف، اسچیوت[2] (LSS) و فیرسوف[3] توضیحات تئوری را برای این منطقه‌ی انرژی ارایه کرده‌اند. بیان LSS

1. Bethe–Bloch
2. Schiott
3. Firsov

بر پایه‌ی پراکندگی کشسان الکترون‌های آزاد هدف در میدان استاتیک یک بار نقطه‌ای استتار شده است. لیندهارد و وینتر[1] [۱۹] نشان دادند تا زمانی که سرعت یون نسبت به سرعت یک الکترون دارای انرژی برابر با انرژی فرمی، E_f گاز الکترونی آزاد، کم‌تر باشد، S_e با سرعت یون یا توان $\frac{۱}{۲}$انرژی آن متناسب است. با استفاده از یک پتانسیل به شکل:

$$V(r)=\frac{2(Z_1Z_2)^{1/2}\varepsilon^2}{r}\chi_{TF}\left[1.13\left(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}\right)^{1/2}\frac{r}{a_0}\right], \qquad (۱۶۹-۱)$$

سطح مقطع بازدارندگی لیندهارد ـ اسچارف به صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$S_e(E)=k'E^{1/2}, \qquad (۱۷۰-۱)$$

و

$$k'=3.83\frac{Z_1^{7/6}Z_2}{M_1^{1/2}\left(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}\right)^{3/2}}, \qquad (۱۷۱-۱)$$

که $S_e(E)$ در واحدهایی از $\mathrm{eV\,cm^2/atom}$ ۱۰$^{-۱۵}$ می‌باشد و E در واحد keV است. بیان سطح مقطع بازدارندگی در یک نماد کاهشی عبارتست از:

$$S_e(\in)=\left(\frac{d\in}{d\rho}\right)_e=k\in^{1/2}, \qquad (۱۷۲-۱)$$

$$k=\frac{0.07937Z_1^{2/3}Z_2^{1/2}\left(1+\frac{M_2}{M_1}\right)^{3/2}}{\left(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}\right)^{3/4}M_2^{1/2}}.$$

1. Winther

سطح مقطع کلی بازدارندگی هسته‌ای کلی در شکل ۱-۱۸ نشان داده شده است که در آن یک منحنی واحد تمام برخوردهای ممکن پرتابه- اتم را نشان می‌دهد و سطح مقطع بازدارندگی الکترونیکی معادله‌ی ۱-۱۷۲، یک مجموعه از خطوط یا یک خط برای هر ترکیبی از پرتابه و اتم هدف را نتیجه می‌دهد. یک عملیات تقریبی که منجر به یک عبارت تحلیلی می‌شود، از آنالیز ذیل به‌دست آمده است. یک اتم با جرم M_1 که با سرعت v_1 در حرکت است را در نظر بگیرید. این اتم با یک الکترون متحرک در جهت مخالف و با سرعت v_e برخورد رودررو می‌کند. سرعت اولیه‌ی نسبی دو ذره برابر است با:

(۱۷۳-۱)

$$v_{r0} = v_1 + v_e \,.$$

بعد از برخورد، جهت برداری سرعت تغییر می‌کند؛ اما بزرگی آن تغییر نمی‌کند:

(۱۷۴-۱)

$$v_{rf} = -\left(v_1 + v_e\right) .$$

سرعت اتم پس از برخورد با الکترون برابر است با:

(۱۷۵-۱)

$$\begin{aligned} v_{1f} &= V_{CM} + \left(\frac{m_e}{m_e + M_1}\right) v_{rf} \\ &= \frac{M_1 v_1 - m_e v_e}{M_1 + m_e} - \left(\frac{m_e}{M_1 + m_e}\right)(v_1 + v_e) \\ &\cong v_1 - \frac{2 m_e v_e}{M_1} \end{aligned}$$

که m_e در مقایسه با M_1 قابل چشم‌پوشی است. تغییر در انرژی اتم، ناشی از برخورد برابر است با:

(۱۷۶-۱)

$$\Delta E = \Delta\left(\frac{1}{2} M_1 v_1^2\right) \cong M_1 v_1 \left(v_1 - v_{1f}\right) = 2 m_e v_e v_1 \,.$$

سرعت الکترون بعد از برخورد برابر است با:

$$v_{\mathrm{ef}} = V_{\mathrm{CM}} - \left(\frac{M_1}{M_1 + m_{\mathrm{e}}}\right) v_{\mathrm{rf}} \\ = \frac{M_1 v_1 - m_{\mathrm{e}} v_{\mathrm{e}}}{M_1 + m_{\mathrm{e}}} + \left(\frac{M_1}{M_1 + m_{\mathrm{e}}}\right)(v_1 + v_{\mathrm{e}}) = 2v_1 + v_{\mathrm{e}} \tag{۱۷۷-۱}$$

و افزایش در سرعت الکترون برابر است با:

$$\Delta v_{\mathrm{e}} = v_{\mathrm{ef}} - v_{\mathrm{e}} = 2v_1 \,. \tag{۱۷۸-۱}$$

تعداد الکترون‌های باند هدایت در یک فلز تقریباً با عدد چگالی اتمی، N برابر است؛ اما فقط الکترون‌هایی با سرعت‌هایی در محدوده‌ی $\Delta \upsilon_e$ از سرعت فرمی υ_f، قادر هستند در فرایند کند کردن مشارکت کنند. بنابراین چگالی مؤثر الکترون‌ها در فلز برابر است با:

$$n_{\mathrm{e}} \cong N\left(\frac{\Delta v_{\mathrm{e}}/2}{v_{\mathrm{f}}}\right) = \left(\frac{v_1}{v_{\mathrm{f}}}\right) N \,. \tag{۱۷۹-۱}$$

جریان الکترون‌های مؤثر برخوردکننده با اتم برابر است با:

$$I_{\mathrm{e}} = n_{\mathrm{e}} v_{\mathrm{ro}} = n_{\mathrm{e}}(v_1 + v_{\mathrm{e}}) \cong n_{\mathrm{e}} v_{\mathrm{e}} \,, \tag{۱۸۰-۱}$$

و نرخ برخوردهای الکترون‌های مؤثر با یک اتم تکی برابر با $\sigma_{\mathrm{e}} I_{\mathrm{e}}$ می‌باشد که σ_{e} سطح مقطع برای برهم‌کنش اتم متحرک با الکترون‌های هدایت است. سپس توان بازدارندگی برابر نرخ اتلاف انرژی یک اتم متحرک به الکترون‌های مؤثر تقسیم بر سرعت اتم است:

$$\left(-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_{\mathrm{e}} = \frac{-\sigma_{\mathrm{e}} I_{\mathrm{e}} \Delta E}{v_1} \,. \tag{۱۸۱-۱}$$

با جایگذاری معادله‌های ۱-۱۷۶، ۱-۱۷۹ و ۱-۱۸۰ در عبارت بالا و نوشتن v_e و v_1 به ترتیب به صورت $(\frac{2E_f}{m_e})^{1/2}$ و $(\frac{2E}{M_1})^{1/2}$ می‌توان نوشت:

(۱-۱۸۲)

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = -8\sigma_e N\left(\frac{m_e}{M_1}\right)^{1/2} E^{1/2} = kE^{1/2},$$

که

(۱-۱۸۳)

$$k = 8\sigma_e N\left(\frac{m_e}{M_1}\right)^{1/2},$$

که برای اتم‌های مشابه $k = 0.03NZ^{\frac{2}{3}}\,\mathrm{eV}^{\frac{1}{2}}/\mathrm{nm}$ یا $S_e = k'E^{\frac{1}{2}}$ که برای اتم‌های مشابه $k' = 3\times10^{-15}Z^{\frac{2}{3}}\mathrm{eV}^{\frac{1}{2}}\mathrm{cm}^2$ است. هر دو معادله برای $0 < E(\mathrm{keV}) < 37Z^{\frac{7}{3}}$ صادق است. برای مثال برای M_2 = Si، $k'_{Si} = 0.2\times10^{-15}\mathrm{eV}^{\frac{1}{2}}\mathrm{cm}$ می‌باشد. جدول ۱-۷ توان بازدارندگی هسته‌ای و الکترونیکی را برای انواع مختلفی از برهم‌کنش‌های مورد استفاده در قسمت ۱-۳-۱ نشان می‌دهد.

۱-۳-۲ محاسبات برد

تاکنون عبارت‌هایی برای دو نوع اصلی اتلاف انرژی بیان شده است: (۱) برخوردهای یون با هسته‌های هدف و (۲) برهم‌کنش‌های یون با الکترون‌ها در جامد. اکنون فرض می‌شود که این دو شکل از اتلاف انرژی از یک‌دیگر مستقل باشند. به علت این تقریب، ممکن است که اتلاف انرژی کلی از یک پرتابه‌ی تکی به صورت مجموع مشارکت کننده‌های تکی نوشته شود:

(۱-۱۸۴)

$$S_T = N\left[S_n(E) + S_e(E)\right],$$

برای محاسبه‌ی فاصله‌ی کلی R که یک پرتابه با انرژی اولیه‌ی E_i قبل از رسیدن به حالت سکون طی کرده است، می‌توان از این عبارت انتگرال‌گیری کرد:

$$R = \int_0^R \mathrm{d}x = \frac{1}{N}\int_0^{E_i} \frac{\mathrm{d}E}{[S_n(E) + S_e(E)]}. \qquad (۱-۱۸۵)$$

جدول ۱-۷. خلاصه‌ای از توان بازدارندگی هسته‌ای و الکترونیکی برای انواع مختلفی از برهم‌کنش‌ها.

نوع برهم‌کنش	توان بازدارندگی هسته‌ای NS_n	توان بازدارندگی الکترونیکی NS_e
E بالا / کولنی	$\frac{4N\pi Z^4 a_0^2 E_R^2}{E_i}\ln\left(\frac{a^2E_i^2}{4a_0^2E_R^2Z^4}\right)$ (۱-۱۳۴)	$N\pi\frac{Z_1^2Z_2\varepsilon^4}{E_i}\frac{M}{m_e}\ln\left(\frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}}\right)$ (۱-۱۶۵)
E پایین	بیان کلی $\frac{8.462\times10^{-15}Z_1Z_2M_1S_n(\epsilon)}{(M_1+M_2)(Z_1^{0.23}+Z_2^{0.23})}$ (۱-۱۵۰) مربع معکوس: $\frac{\pi^2}{4}a^2NE_a\gamma$ (۱-۱۵۸) استتار شده توماس ـ فرمی: $K\frac{Z_1Z_2}{Z^{1/3}}\frac{M_1}{M_1+M_2}$ (۱-۱۶۲) $Z^{1/3} = \left(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}\right)^{1/2}$ $K = 1.158\pi\varepsilon^2a_0 = 2.8\times10^{-15}\,\mathrm{eV\,cm}$	$\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_e = k'E_i^{1/2}$ (۱-۱۷۰) $k' = 3.83\frac{Z_1^{7/6}Z_2}{M_1^{1/2}\left(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}\right)^{3/2}}.$ $\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_e = kE^{1/2}$ (۱-۱۸۲) $k = 8\sigma_e N\left(\frac{m_e}{M_1}\right)^{1/2}$ معتبر برای $0 < E(\mathrm{keV}) < 37Z^{7/3}$

این فاصله‌ی متوسط، برد کلی نامیده می‌شود و یک کمیت مفید برای تخمین میانگین عمق نفوذ یون‌ها در هدف‌های آمورف می‌باشد. مثالی از تخمین طول مسیر کلی با استفاده از پتانسیل مربع‌معکوس برابر است با (با توجه به معادله‌ی ۱-۱۵۵):

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = N\int_{\bar{T}}^{\gamma E_i} T\sigma(E_i,T)\,\mathrm{d}T \quad \text{where} \quad \sigma(E_i,T) = \frac{\pi^2a^2E_a\gamma^{1/2}}{8E_i^{1/2}T^{3/2}} \qquad (۱-۱۸۶)$$

$$= \frac{\pi^2}{4}a^2NE_a\gamma,$$

در نتیجه

(۱۸۷-۱)

$$\bar{x} = \bar{R}_{\text{total}} = \int_0^{E_i} \frac{dE'}{(dE/dx)_n} = \int_0^{E_i} \frac{dE'}{\frac{\pi^2}{4} a^2 N E_a \gamma}$$
$$= \frac{4E_i}{\pi^2 a^2 N E_a \gamma} \quad \text{where} \quad E_i \le E_a .$$

به هرجهت، کمیت مورد توجه پیش‌بینی برد کلی در جهت اولیه‌ی مسیر ذره (شکل ۱-۲۱) است. به علاوه، باید انحراف در برد طی شده[1] مشخص شود که ناشی از این حقیقت است که تمام ذره‌ها توالی برخوردی مشابهی را متحمل نمی‌شوند. در نتیجه عبارت‌های زیر تعریف می‌گردد:

$\overline{R_p}$ = میانگین برد طی شده

$\overline{\Delta R_p}$ = انحراف استاندارد برد طی شده

روش‌هایی برای محاسبه‌ی $\overline{R_p}$ به وسیله‌ی لیندهارد و همکارانش توسعه داده شده است [۱۶]. در مواردی که انتقال انرژی T در مقایسه با انرژی کلی ذره کوچک است، معادله‌ی دیفرانسیلی برای $\overline{R_p}$ یک جواب دارد:

(۱۸۸-۱)

$$\overline{R_p} = \int_0^{E_i} \frac{dE'}{\beta_1(E')} \exp\left[\int_{E_i}^{E'} \frac{\alpha_1(x)\,dx}{\beta_1(x)}\right],$$

که در این رابطه $\alpha_1(E) = \frac{\mu}{2} N \frac{S_n(E)}{E}$، و

(۱۸۹-۱)

$$\beta_1(E) = N\left[S_n(E) + S_e(E) - \frac{\mu}{2}\frac{\Omega_n^2(E)}{E}\right],$$

1. Projected range

و $\Omega_n^2(E) = \int_0^\infty T_n^2 2\pi b db$ است.

انحراف استاندارد به وسیله‌ی تعریف مقادیر R_c (برد وتری[1]) و $R_\perp$ (برد عمود بر جهت اولیه) محاسبه شده است، در نتیجه از معادله‌ی ۱-۲۲ می‌توان روابط زیر را نتیجه گرفت:

(۱-۱۹۰)

$$\overline{R_c^2} = \overline{R_p^2} + \overline{R_\perp^2},$$

و یک مقدار مرتبط برابر است با:

(۱-۱۹۱)

$$\overline{R_r^2} = \overline{R_p^2} - \frac{1}{2}\overline{R_\perp^2},$$

و برای مواردی که $T << E$ باشد:

(۱-۱۹۲)

$$\overline{R_r^2(E)} = \int_0^E \frac{2\overline{R_p(E')}\,dE'}{\beta_2(E')} \exp\left[\int_E^{E'} \frac{3\alpha_2(x)}{\beta_2(x)}\,dx\right],$$

و

(۱-۱۹۳)

$$\overline{R_c^2(E)} = \int_0^E \frac{2\overline{R_p(E')}\,dE'}{N[S_n(E') + S_e(E')]},$$

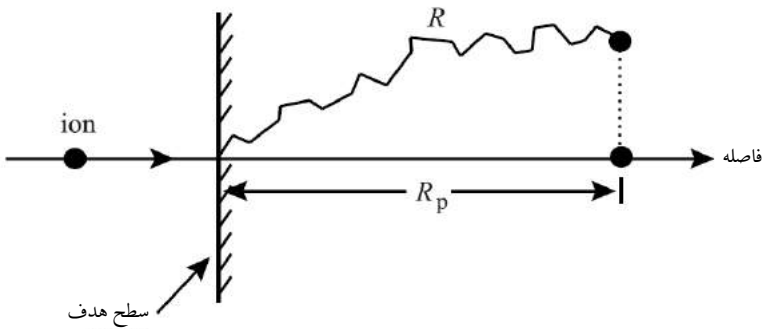
و سپس $\overline{\Delta R_p} =$ به صورت زیر محاسبه می‌شود:

(۱-۱۹۴)

$$\left(\overline{\Delta R_p}\right)^2 = \frac{2\overline{R_r^2}(E) + \overline{R_c^2}(E)}{3} - \left(\overline{R_p}\right)^2,$$

1. Chord range

که $\alpha_2(E)=\alpha_1(E)/2$ و $\beta_2(E)=\beta_1(E)-\frac{N\mu\Omega_n^2(E)}{E}$ است.

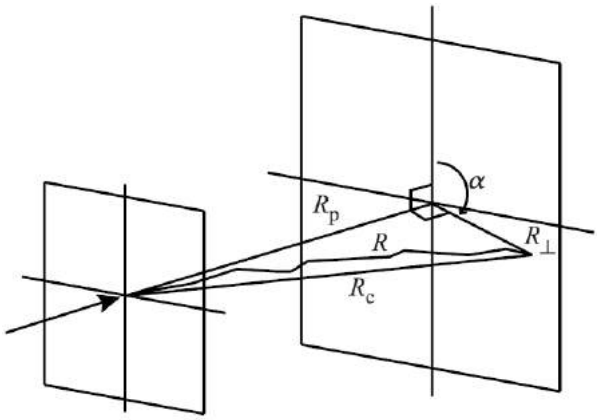


شکل ۱-۲۱. طول مسیر کلی R و برد طی شده R_p برای یک یون فرودی به یک هدف.

انتگرال‌ها می‌توانند به صورت عددی برای پتانسیل توماس ـ فرمی مورد ارزیابی قرار گیرند یا به صورت تحلیلی ارزیابی شوند، اگر مقادیر تقریبی S_n و S_e با هم با مقدار معادله‌ی ۱-۱۹۵ مورد استفاده قرار گیرند:

(۱-۱۹۵)

$$\Omega_n^2(E)=\frac{4M_1M_2}{3(M_1+M_2)}S_n^0E\,.$$



شکل ۱-۲۲. شمایی از پارامترهای برد تعریف شده R، R_p، R_c و $R_\perp$.

در فرمول‌بندی LSS، میانگین طول مسیر کلی به صورت زیر محاسبه می‌شود:

(۱۹۶-۱)

$$\rho_R = \int_0^{\in} \frac{d \in}{[S_n(\in) + S_e(\in)]} = \int_0^{\in} \frac{d \in}{[S_n(\in) + k \in^{1/2}]}.$$

این عبارت باید با استفاده از مقادیر مختلف k به صورت عددی انتگرال‌گیری شود. برای Z_1، Z_2 و E_i مشخص، $\in$ و k محاسبه می‌شوند و سپس مقدار ρ_R از شکل ۱-۲۳ استخراج می‌شود و با استفاده از معادله‌های ۱-۱۴۱ و ۱-۱۳۷ به R تبدیل می‌شود و ε ۳٫۰۶ = ρ_R:

(۱۹۷-۱)

$$R(nm) = \frac{6EM_2(M_1 + M_2)\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{1/2}}{\rho Z_1 Z_2 M_1},$$

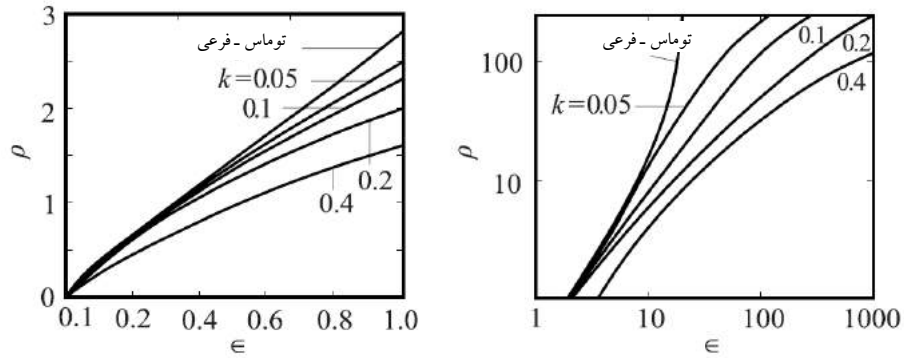
که E بر حسب keV و ρ بر حسب g/cm^3 است. جالب‌ترین مقدار برد مورد توجه، میانگینِ برد طی شده، R_p است و پارامتری که معمولاً اندازه‌گیری می‌شود. در انرژی‌های بالا، $S_n << S_e$ و $R \sim R_p$ است. در انرژی‌های پایین که $S_n \sim S_e$ است، $R_p < R$ می‌باشد. این تفاوت با M_2/M_1 بزرگ‌تر می‌شود. تئوری LSS این مشکل را نیز تحلیل کرده است.
در $\in$ یا ρ_R کوچک (و مقادیر کوچک k):

$$M_2/M_1 = \frac{1}{2}; \quad R/R_p \sim 1.2 \quad (\text{at low} \in, k)$$
$$M_2/M_1 = 1; \quad R/R_p \sim 1.6$$
$$M_2/M_1 = 2; \quad R/R_p \sim 2.2.$$

در انرژی‌های بالا ($\in$ بزرگ)، برای تمام kها، $R/R_p \to 1$. در پایان در معنای یک تقریب کلی [۱۶]:

(۱-۱۹۸)

$$\frac{R}{R_{\mathrm{p}}} \cong 1 + B\frac{M_2}{M_1},$$



شکل ۱-۲۳. منحنی‌های برد ـ انرژی کاهشی برای مقادیر مختلف از ضریب بازدارندگی الکترونیکی، k.

که در این رابطه B به آرامی به صورت تابعی از E و R تغییر می‌کند. در ناحیه‌ای از انرژی که بازدارندگی هسته‌ای غالب و $M_1 > M_2$ است، $B = \frac{۱}{۳}$ می‌باشد. افزایش بازدارندگی الکترونیکی در انرژی‌های بالا منجر به مقادیر کوچک‌تر B می شود. هنگامی که $M_1 < M_2$ است، پراکندگی زاویه بزرگ تفاوت بین R و R_{p} را افزایش می‌دهد. به هرجهت، برای این برخوردها، بازدارندگی الکترونیکی قابل توجه است و تا حدی افزایش در تفاوت‌ها را جبران می‌کند. بنابراین، $B = \frac{۱}{۳}$ یک تقریب منطقی برای محدوده‌ی وسیع از برخوردهاست و می‌توان نوشت:

(۱-۱۹۹)

$$R_{\mathrm{p}} \cong \frac{R}{1 + (M_2/3M_1)}.$$

محدوده‌ی انحراف[1] با استفاده از تئوری لیندهارد و همکارانش [۱۶] قابل محاسبه است. برای مواردی که توان بازدارندگی هسته‌ای غالب و $M_1 > M_2$ است، به عبارت دیگر، پراکندگی با زاویه‌ی کوچک:

1. Range straggling

(۲۰۰–۱)

$$2.5\Delta R_{\mathrm{p}} \cong 1.1 R_{\mathrm{p}} \left[\frac{2(M_1 M_2)^{1/2}}{M_1 + M_2} \right],$$

یا

(۲۰۱–۱)

$$\Delta R_{\mathrm{p}} \cong R_{\mathrm{p}}/2.5 .$$

برای یک یون پرانرژی، مسیر کندشوندگی حتماً یک خط مستقیم در جهت اصلی حرکت است، از این‌رو بازدارندگی، الکترونیکی همراه با مقدار کمی انحراف در پایان است که ناشی از برخوردهای هسته‌ای است (شکل ۱– ۲۴ الف). در انرژی‌های پایین که S_{n} و S_{e} بسیار نزدیک به هم هستند، مسیر یون یک مسیر زیگزاگی با انحراف‌های بسیار بزرگ می‌باشد و فاصله‌ی میان برخوردها هم چنان که انرژی کاهش می‌یابد کم می‌شود و سطح مقطع افزایش می‌یابد (۱–۲۴ ب). مکان‌های کندشوندگی مطابق با توزیع گوسی پراکنده شده‌اند:

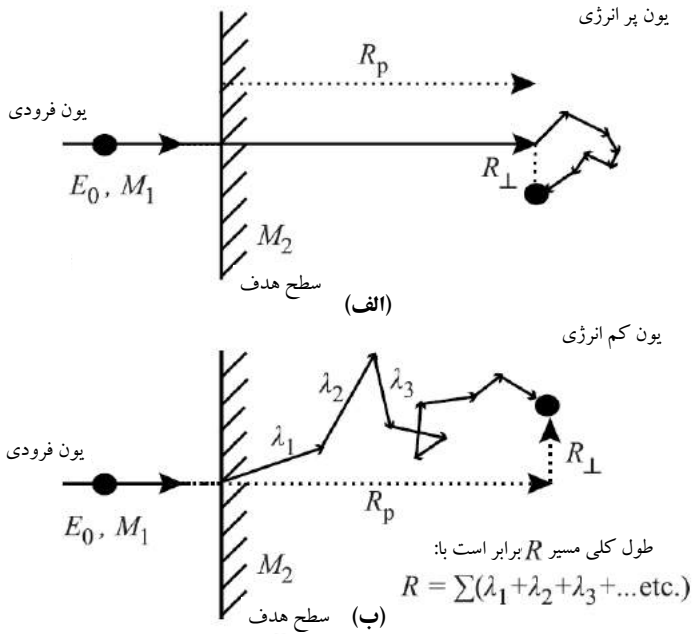
(۲۰۲–۱)

$$N(x) = N_{\mathrm{p}} e^{-1/2X^2},$$

که $x = \dfrac{x - R_{\mathrm{p}}}{\Delta R_{\mathrm{p}}}$ و ΔR_{p} انحراف استاندارد هستند (شکل ۱–۲۵). اگر حداکثر غلظت در R_{p}، N_{p} باشد، در نتیجه این رابطه در فاصله‌ی $x = R_{\mathrm{p}} \pm \Delta R_{\mathrm{p}}$ به $\dfrac{1}{e^{1/2}} N_{\mathrm{P}}$ منجر می‌شود. اگر هدف به صورت عمود بر سطحش دیده شود، در نتیجه تعداد یون‌های کاشته شده در واحد سطح N_{s} خواهد بود که به وسیله‌ی رابطه زیر مشخص می‌شود:

(۲۰۳–۱)

$$N_{\mathrm{S}} = \int_{-\infty}^{+\infty} N(x)\,\mathrm{d}x,$$



شکل ۱-۲۴. طول مسیر کلی، برد طی شده و برد عمودی برای (الف) یون‌های پرانرژی و (ب) یون‌های کم‌انرژی فرودی برروی یک هدف.

یا از آن‌جایی‌که $dx = \Delta R_p dX$ و منحنی گاوسی متقارن است، سپس:

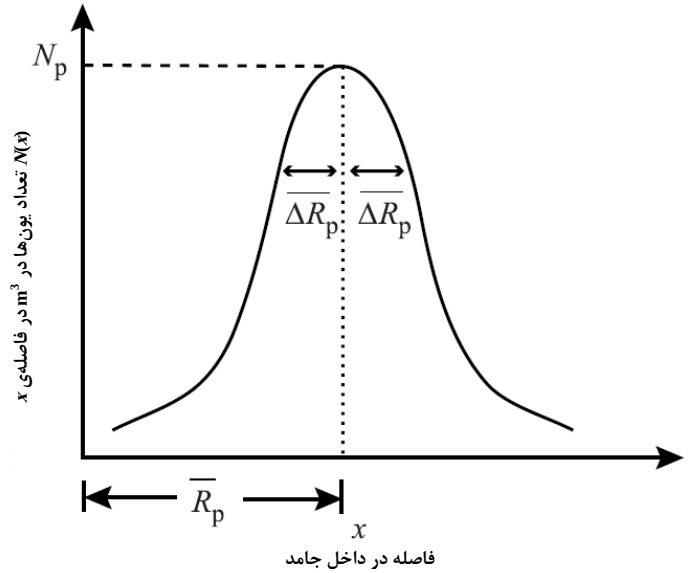
(۲۰۴-۱)

$$N_s = 2\Delta R_p N_p \int_0^\infty e^{-1/2X^2}\, dX\,,$$

که می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۲۰۵-۱)

$$N_s = \Delta R_p N_p \sqrt{2\pi}\left\{\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty e^{-1/2X^2}\, dX\right\}.$$



شکل ۱-۲۵. پارامترهای توزیع گاوسی اعمال شده به یک مقطع کاشت یون که نشان دهنده برد طی شده، $\overline{R_p}$، انحراف استاندارد، $\overline{\Delta R_p}$، و بیشینه‌ی غلظت، N_p یون کاشته شده است.

انتگرال در داخل کروشه تابع خطا است و هم‌چنان که $X \longrightarrow \infty$، به سمت واحد می‌گراید، در نتیجه اگر N_s تعداد یون‌های کاشته شده در واحد سطح (cm^2) هدف باشد، می‌توان نوشت:

(۲۰۶-۱)

$$N_p = \frac{N_s}{\sqrt{2\pi}\Delta R_p} \cong \frac{0.4N_s}{\Delta R_p},$$

در نتیجه چگالی یون‌های کاشته شده برابر است با:

(۲۰۷-۱)

$$N(x) = \frac{0.4N_s}{\Delta R_p} \exp\left(-1/2\left\{\frac{x-R_p}{\Delta R_p}\right\}^2\right).$$

برای مثال، اگر ۵×۱۰^{۱۵} یون در واحد سطح از اتم‌های B با انرژی ۴۰KeV در داخل Si کاشته شود، در نتیجه R_p و ΔR_p به ترتیب تقریباً برابر ۱۶۰nm و ۵۴nm می‌باشند و N_p برابر ۴×۱۰^{۲۰} اتم در واحد سطح است. **قابل ذکر است که با توجه به ویژگی‌های گاوسی، غلظت در** $x \approx R_p \pm 2\Delta R_p$ **یک دهم و در** $x \approx R_p \pm 3\Delta R_p$ **یک صدم کاهش می‌یابد.**

با استفاده از عملیات LSS برای تشریح توان بازدارنده‌های هسته‌ای و الکترونیکی، لیتمارک[1] و زیگلر[2] راه‌حل‌هایی را برای محدوده‌هایی از اتم‌ها با عدد اتمی بین ۱ تا ۹۲ در تمام عناصر، ارایه کردند. کارهای آن‌ها در فصل ۶ کتاب بازدارندگی و بردهای یون‌ها در ماده چاپ شده است [۲۰]. برای هر اتم به‌کارگرفته شده به عنوان هدف، عمق متوسط یون، انحراف طولی و عرضی در نمودارهایی برای پرتابه‌هایی با عدد اتمی بین ۱ تا ۹۲ و در سراسر یک محدوده انرژی وسیع گردآوری شده است. مثال زیر از این مرجع اقتباس شده است.

مثال ۱-۳. *کاشت* MeV He *داخل* Si

زیگلر [۱۸] پارامترهای برد برای گستره‌ی وسیعی از یون‌ها و اتم‌های هدف را طراحی و جدول‌بندی کرد. برای هلیوم فرودی با انرژی ۲MeV برروی یک هدف سیلیسیمی، برد و انحراف به ترتیب ۷٫۳۲ و ۰٫۲۱۵ میکرومتر هستند. اگر یک مقدار پرتوگیری $۱۰^{۱۵}$ یون هلیوم در واحد سطح فرض شود، سپس اعمال معادله‌ی ۱-۲۰۴ یک حداکثر غلظت تقریباً $۱٫۸۶\times۱۰^{۱۹}$ اتم هلیوم در سانتی‌متر مکعب در یک عمق ۷٫۳۲ میکرومتری را نتیجه می‌دهد که تقریباً ۶۲۰ appm می‌باشد. معادله‌ی ۱-۲۰۵ توزیع اتم‌های هلیوم ته نشست شده را نشان می‌دهد به صورتی که:

$$N(x) = 1.86 \times 10^{19} \exp\left(-1/2\left\{\frac{x-7.32}{0.215}\right\}^2\right) \text{He/cm}^3,$$

که x در واحد μm است.

علاوه بر جدول‌بندی اطلاعات برد، زیگلر یک برنامه‌ی کامپیوتری بر پایه‌ی نظریه‌ی مونته کارلو برای محاسبه‌ی انتقال یون‌ها در ماده ارایه کرده است [۱۸]. این برنامه بر روی وب سایت

1. Littmark
2. Ziegler

http://www.srim.org موجود است و توصیه می‌شود که خواننده بعضی از مثال‌ها را با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌ساز SRIM امتحان کند. این برنامه به صورت رایگان قابل پیاده کردن[1] است و این امکان وجود دارد که به راحتی بر روی سیستم‌های شخصی نصب شود. مثالی که در ادامه آورده می‌شود اطلاعات به‌دست آمده از برنامه‌ی SRIM را استفاده کرده است.

مثال ۱-۴. *کاشت* Al *در* Ni

مثال مشابهی می‌تواند برای کاشت انرژی پایین یک عنصر سنگین مانند Al در داخل یک هدف نیکلی مورد بررسی قرار گیرد. در این مورد، خروجی برنامه‌ی TRIM مورد استفاده قرار می‌گیرد. انتخاب Al با انرژی ۲۰۰ keV در Ni منجر به یک برد طی شده تقریباً ۱۳۵nm با یک انحراف طولی ۴۵nm می‌شود. با جایگذاری در معادله‌ی ۱-۲۰۴ یک حداکثر غلظت $۹٫۱ \times ۱۰^{۱۹}$ Al/cm^3 برای یک مقدار پرتوگیری $۱۰^{۱۵}$ Al^+/cm^2 حاصل می‌شود. نرم‌افزار TRIM هم‌چنین کمیتی را ارایه می‌کند که به کاربر اجازه می دهد غلظت را تعیین کند. واحد غلظت در منحنی برد یون برابر با ($atoms/cm^3/atoms\ cm^2$) است و برد توزیع یون کاشته شده بر روی این منحنی یک بیشینه‌ی ۸×۱۰^{۴} $atoms/cm^3/atoms\ cm^2$ دارد. با ضرب این مقدار در مقدار پرتوگیری $۱۰^{۱۵}$ Al^+/cm^2 مقدار ۸×۱۰^{۱۹} Al/cm^3 حاصل می‌شود که نزدیک به راه‌حل تحلیلی است.

1. Download

نام‌گذاری اصطلاحات

a : شعاع استتار

a_o: شعاع بوهر اتم هیدروژن

a_U: طول استتار کلی

A: جرم اتمی

A: ثابت پیش‌نمایی در رابطه‌ی بورن ـ مایر، معادله‌ی ۱-۴۷

b : پارامتر برخوردی

B : ثابت موجود در توان در رابطه‌ی بورن ـ مایر، معادله‌ی ۱-۴۷

C : ثابت در پتانسیل استتار شده‌ی کولنی، معادله‌ی ۱-۴۹ = ۰٫۸۸۵۳

c : سرعت نور

D : نزدیک‌ترین همسایه‌ی فضایی بین اتم‌ها

E_a: مقدار E_i در $\rho_0 = a$

E_b: مقدار E_i که $T \geq E_d$ را در $b = a$ منجر می‌شود

E_d: انرژی جابه‌جایی

E_D: دمای هسته‌ای ماکسولی $= kT$

E_f: انرژی نهایی

E_γ: انرژی پرتو گاما

E_i: انرژی ذره‌ی فرودی

$E_{V,i}^{f}$: انرژی تشکیل جای خالی و بین‌نشینی

$E_{V,i}^{m}$: انرژی مهاجرت جای خالی و بین‌نشینی

E'_m: انرژی جنبشی ذره‌ی فرودی در سیستم مرکز جرم

E''_m: انرژی نوترون بعد از واکنش (n ،۲n)

E'_M: انرژی جنبشی ذره هدف در سیستم مرکز جرم

E''_M: انرژی مرکز جرم بعد از واکنش (n ،۲n)

E_R: انرژی ریدبرگ

E_T: انرژی کلی

$\bar{I}$: سطح برانگیختگی ـ یونش

m : انرژی ذره‌ی فرودی

M : جرم هدف

N : عدد چگالی اتمی

N_p: بیشینه‌ی غلظت یون کاشته شده

N_s: چگالی یون کاشته شده برحسب یون در واحد سطح

p_e: اندازه‌ی حرکت الکترون

Q : انرژی برانگیختگی هسته‌ها

r_e: فاصله‌ی نزدیک‌ترین همسایه میان اتم‌ها

$\dot{r}$: سرعت شعاعی در مختصات قطبی

R : برد یون

R_{eff}: شعاع بازترکیبی

R_p: برد طی شده

ΔR_p: انحراف استاندارد برد طی شده

s : نمای قانون توان

S_e: توان بازدارندگی الکترونیکی

S_n: توان بازدارندگی هسته‌ای

t : زمان

t : پارامتر برخورد بی‌بعد، معادله‌ی ۱-۱۳۶

T : انرژی منتقل شده در برخورد

$\check{T}$: کمینه‌ی انرژی منتقل شده

$\hat{T}$: بیشینه‌ی انرژی منتقل شده

$\bar{T}$: میانگین انرژی منتقل شده

T_1: انرژی منتقل شده به اتم هدف بعد از واکنش (n ،۲n)

$V(r)$: انرژی پتانسیل

υ_c: سرعت ذره‌ی فرودی در سیستم مرکز جرم

V_c: سرعت ذره‌ی هدف در سیستم مرکز جرم

υ_c' : سرعت ذره‌ی فرودی در سیستم مرکز جرم بعد از برخورد

V_c': سرعت ذره‌ی هدف در سیستم مرکز جرم بعد از برخورد

υ_c'' : سرعت نوترون در سیستم مرکز جرم بعد از واکنش (n ،۲n)

V_c'': سرعت ذره‌ی هدف در سیستم مرکز جرم بعد از واکنش (n ،۲n)

V_{CM}: سرعت مرکز جرم در سیستم آزمایشگاهی

υ_l : سرعت ذره‌ی فرودی در سیستم آزمایشگاهی

υ_l' : سرعت ذره‌ی فرودی در سیستم آزمایشگاهی بعد از برخورد

V_l' : سرعت ذره‌ی هدف در سیستم آزمایشگاهی بعد از برخورد

V_l'' : سرعت ذره‌ی هدف در سیستم آزمایشگاهی بعد از واکنش (n ،۲n)

Z : عدد اتمی

β : $\frac{\upsilon}{c}$

$\chi(r)$: تابع استتار

χ_U: تابع استتار کلی

ε: واحد بار

$\in$: پارامتر بی بعد انرژی کاهیده، معادله‌ی ۱-۱۳۷

ϕ : زاویه‌ی پراکندگی مجانبی در فاصله‌ی نامحدود

ϕ : زاویه‌ی پراکندگی در سیستم مرکز جرم

$\dot{\psi}$: سرعت زاویه‌ای در مختصات قطبی

ψ: زاویه پراکندگی اتم ضربه‌خورده در سیستم آزمایشگاهی

λ : مسیر متوسط آزاد میان برخوردها

λ_m: رجوع شود به معادله‌ی ۱-۱۳۹

λ' : ۱-۳۰۹، معادله‌ی ۱-۱۳۸

μ : جرم کاهش یافته، معادله‌ی ۱-۶۳

$\nu(T)$: تابع جابه‌جایی

θ: زاویه‌ی پراکندگی در سیستم آزمایشگاهی

ρ : فاصله‌ی میان مرکز اتم‌ها در یک برخورد

ρ_e: چگالی ابر الکترونی

ρ_0: فاصله‌ی نزدیک‌ترین مسیر برخورد، مقدار r هنگامی که $\psi = \pi/2$

ρ_r: پارامتر بی‌بعد فاصله‌ی کاهشی، معادله‌ی ۱-۱۴۱

$\sigma(E_i)$: سطح مقطع کلی برخورد اتمی

$\sigma(E_i,T)$: سطح مقطع دیفرانسیلی انتقال انرژی

$\sigma(E_i,\phi)$: سطح مقطع دیفرانسیلی برخورد زاویه‌ای

$\sigma(E_i, E_\phi,\Omega)$: دیفرانسیل دوگانه سطح مقطع برخورد

$\sigma(E_i,Q_j,\phi)$: سطح مقطع دیفرانسیلی زاویه‌ای برای برخوردهای غیرکشسان

$\sigma(E_i,Q_j,T)$: سطح مقطع دیفرانسیلی انتقال انرژی برای برخوردهای غیرکشسان

Ω : زاویه‌ی فضایی که ذره‌ی فرودی پراکنده می‌شود

Ω : دیفرانسیل عنصر زاویه‌ای فضایی

$\xi_e : Z_1^{1/6}$

مسایل

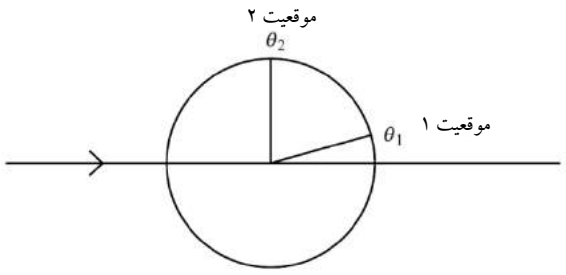
۱-۱ یک نوترون با انرژی ۰٫۵ MeV به یک اتم هدف با جرم A که در ابتدا در حالت سکون بوده است برخورد می‌کند، سرعت و انرژی هر دو ذره را در مرجع آزمایشگاهی بعد از یک برخورد رودررو برای (Al) $A = ۲۷$ و (Pb) $A = ۲۰۷٫۲$ محاسبه کنید؟

۱-۲ یک آشکارساز با راندمان ۱۰۰٪ (به عبارت دیگر هر ذره‌ی فرودی به آشکارساز شناسایی می‌شود) و یک سطح $۱\ cm^۲$ در فاصله‌ی r از یک هدف قرار دارند(بعد را صفر، به عبارت دیگر یک نقطه در نظر بگیرید). هدف با نوترون‌هایی بمباران می‌شود. با فرض این‌که پراکندگی فقط به صورت کشسان رخ دهد، به صورتی که پراکندگی دارای تقارن محوری است و سطح مقطع پراکندگی همسان‌گرد است:

الف) نسبت تعداد ذره‌های شناسایی شده به وسیله‌ی آشکارساز در موقعیت‌های ۱ و ۲ نشان داده شده در شکل چه‌قدر است؟

ب) نسبت تعداد ذره‌های پراکندگی شده در سرتاسر افزایش زاویه‌ای ۱^0 در حدود $\theta_۱ = ۵^0$ و $\theta_۲ = ۸۵^0$ چه‌قدر است؟

ج) بخش‌های (الف) و (ب) را با فرض این‌که به جای همسان‌گرد بودن، سطح مقطع دیفرانسیلی پراکندگی به صورت $\sigma_s(E_i,\theta) = \cos\theta$ باشد، را تکرار کنید.



$d\theta$= افزایش زاویه‌ی پراکندگی

$d\Omega$= افزایش زاویه‌ی فضایی در حدود θ

θ= زاویه‌ی پراکندگی در سیستم مرکز جرم

۱–۳ یک صفحه‌ی تیتانیومی با $۱۰^{۱۴}$ نوترون در سانتی‌متر مربع در ثانیه در برخوردهای عمودی بمباران می‌شود. کل صفحه با پرتو مورد اصابت قرار می‌گیرد.

الف) تعداد ذره‌های پراکنده شده در ثانیه را در

۱) $۸۵^0 \leq \theta = ۸۶^0$ و

۲) $۵^0 \leq \theta = ۶^0$ محاسبه کنید.

اندازه‌ی صفحه‌ی $۱\ cm^۲$ وضخامت $۰/۶\ mm$ می‌باشد. پراکندگی هم‌سانگرد است با سطح مقطع کلی پراکندگی ۲٫۸۷ بارن[1] (۱ بارن = $۱۰^{-۲۴}\ cm^۲$).

ب) یک هدف مشابه، با ذره‌هایی که دیفرانسیل سطح مقطع پراکندگی زاویه‌ای آن‌ها متناسب با $\theta^۲$ است، بمباران می‌شود. نسبت شار اتمی در بازه‌ی (۱) و بازه‌ی (۲) را محاسبه کنید.

در هردو مورد انتگرال‌گیری کامل سطح مقطع دیفرانسیلی را انجام دهید.

ج) انتگرال‌های موجود در قسمت (ب) را با فرض این‌که دیفرانسیل سطح مقطع زاویه‌ای پراکندگی در هر بازه‌ی انتگرالی ثابت باشد و برابر با مقدار مرکز بازه‌ها باشد، تقریب بزنید.

۱–۴ فاکتور جنبشی K، که به صورت $K = E_f/E_i$ تعریف شده است، در این رابطه E_i انرژی پرتابه‌ی قبل از برخورد و E_f انرژی پرتابه‌ی بعد از برخورد را تعیین کنید.

۱–۵ فرمولی که در ادامه نشان داده شده است، زاویه‌های پراکندگی θ و ϕ به ترتیب در سیستم آزمایشگاهی و سیستم مرکز جرمی را به یک‌دیگر مرتبط می‌سازد:

$$\tan\theta = (M/m)\sin\phi\,/\,[1 + (M/m)\cos\phi]$$

که در این رابطه m و M به ترتیب جرم‌های پرتابه و هدف می‌باشند. عبارت بالا را برای سه مورد $M = m$، $M << m$ و $m << M$ مورد بحث قرار دهید.

۱–۶ معادله‌ی ۱–۲۴ در متن را نتیجه‌گیری کنید.

۱–۷ معادله‌ی ۱–۳۹ در متن را نتیجه‌گیری کنید.

۱–۸ برای دو ذره برخورد کننده عبارت‌های زیر را بنویسید:

---

1. Barn

الف) E_T، انرژی کلی یک سیستم از n ذره

ب) E_{CM}، انرژی مرکز جرم (به وسیله‌ی V_{CM} و جرم کلی سیستم تعیین می‌شود)

ج) E، انرژی کلی در سیستم مرکز جرم.

نشان دهید که $E = E_T - E_{CM}$ (معادله‌ی ۱-۶۱).

۱-۹ رابطه‌ای میان b و ϕ از معادله‌ی ۱-۷۶ برای پتانسیل کره‌ی سخت استنتاج کنید:

$$V_{HS}(r) = 0 \qquad r \geq r_0$$
$$= \infty \qquad r < r_0$$

این اطمینان را حاصل کنید که پاسخ شما برای $b > r_0$، صحیح باشد.

۱-۱۰ به عنوان یک ابزار توضیح دهنده برخوردهای اتم ـ اتم در فاصله‌ی جدایش متوسط، به عبارت دیگر میان دافعه‌ی کولنی و دافعه‌ی لایه‌ی نزدیک، پتانسیل توان معکوس اغلب به صورت زیر می‌باشد:

$$V(r) = \text{constant}/r^n .$$

برای مثال، می‌توان با وارد کردن یک تابع مربع‌معکوس ($n = ۲$) به پتانسیل استتار شده‌ی کولنی در $r = a$ شیب، عرض از مبدأ و انحنای مشابهی را به‌دست آورد.

این تابع برابر است با

$$V(r) = z_1 z_2 \varepsilon^2 a / \left(r^2 \exp[1]\right) .$$

سطح مقطع $\sigma_s(E_i,T)$ و $\sigma_s(E_i,\phi)$ را برای برهم‌کنش‌های اتم ـ اتم تحت کنترل تابع پتانسیلی مربع‌معکوس فرمول‌بندی کنید.

۱-۱۱ نتایج به‌دست آمده در سؤال ۱-۱۰ را با نتایج به‌دست آمده با استفاده از پتانسیل بورن ـ مایر و یک پتانسیل کولنی ساده مقایسه کنید. تفاوت‌ها و تشابه‌ها را گزارش کنید.

۱-۱۲ میانگین انرژی منتقل شده از یک اتم نیکل ۱۰۰ keV برخورد کننده با اتم نیکل دیگر را با استفاده از:

الف) پتانسیل کره‌ی سخت و

ب) پتانسیل مربع‌معکوس

محاسبه کنید.

۱-۱۳ به صورت فیزیکی توضیح دهید که چرا سطح مقطع پراکندگی نتیجه شده از دافعه‌ی کولنی به انرژی منتقل شده‌ی، T بستگی دارد درحالی‌که برای برهم‌کنش‌های نوترون ـ هسته این وابستگی وجود ندارد.

۱-۱۴ یک پتانسیل کولنی خالص را فرض کنید، فاصله‌ی نزدیک‌ترین مسیر برای یک اتم بور ۱۰۰ keV بر روی سیلیکون برای یک پارامتر برخوردی، b = ۱nm را تعیین کنید. چه چیزی در جواب شما قابل توجه است؟

۱-۱۵ یون‌های Al^{+} ۱ MeV به سمت یک هدف نیکلی خالص شتاب می‌گیرند. یون‌ها به صورت عمود بر روی سطح نمونه هدایت می‌شوند.

الف) طول مسیر کلی را محاسبه و یک تخمینی برای متوسط برد طی شده یون‌ها ارایه کنید.

ب) برای یک دوز $۱۰^{۱۶}$ یون در واحد سطح ($cm^{۲}$)، بیشینه‌ی غلظت Al و FWHM توزیع آلومینیوم را تخمین بزنید. از رابطه $S_e = kE^{1/2}$ استفاده کنید که در این رابطه $k = ۲ \times ۱۰^{-۱۶}\ eV^{1/2}cm^2$ است.

۱-۱۶ یک یون سیلیسیم با انرژی ۱۰ MeV در یک بلور Si نفوذ می‌کند.

الف) انرژی آن را به صورت تابعی از فاصله‌ی حرکت و عمق نفوذ آن محاسبه کنید. فرض کنید توان بازدارندگی الکترونیکی غالب است.

ب) یک عبارت برای توزیع عمقی یون‌های سیلیسیم کاشته شده بنویسید.

۱-۱۷ آستانه‌ی انرژی که بالای آن سطح مقطع پراکندگی رادرفورد می‌تواند برای (۱) برخوردهای نزدیک رودررو و (۲) تمام برخوردهای He^{++} و H^{+} را در سیلیسیم و پالادیوم که استفاده می‌شود، محاسبه کنید.

۱-۱۸ یون های He^{++} ۲ MeV از یک ورقه‌ی طلای نازک با ضخامت ۲۵nm باز پراکنده می‌شوند (θ=۱۸۰^0). کم‌ترین و بیش‌ترین مقادیرِ انرژی یون‌های باز پراکنده‌شده را تعیین کنید که در یک

آشکارساز قرار گرفته در زاویه‌ی ۱۸۰^0 نسبت به پرتو فرودی اندازه‌گیری شده است.

عبارت $k = ۰/۱۴ \times ۱۰^{-۱۵}\ \mathrm{eV^{1/2}cm^2}$ را استفاده کنید.

توان بازدارندگی را به وسیله‌ی درون‌یابی یا برون‌یابی بر پایه‌ی مقادیری از $1/N\,(\mathrm{d}E/\mathrm{D}x)$ (در واحد $eV/(10^{15}\ \mathrm{atoms/cm^2})$) که در ادامه آورده شده است، تعیین کنید:

انرژی (MeV):	1.6	2.0
Au	122.3	115.5
Al	47.5	44.25

۱-۱۹ فرض کنید که توان بازدارندگی می‌تواند به وسیله‌ی تابع $S = C + KE^{1/2}$ توضیح داده شود، که در این رابطه C و K مقادیر ثابتی هستند.

الف) یک معادله برای برد ذره به صورت تابعی از انرژی به‌دست آورید.

ب) آیا برد با ۱) افزایش انرژی، ۲) افزایش K، ۳) افزایش C، افزایش یا کاهش می‌یابد؟

۱-۲۰ کدام یک توان بازدارندگی الکترونیکی پرانرژی را افزایش می‌دهد، بار، انرژی یا جرم یون پرتابه؟

۱-۲۱ یک پروتون با انرژی ۲ MeV از میان سرب حرکت می‌کند.

الف) با فرض برخوردهای کشسان، بیشینه‌ی انرژی که می‌تواند از پروتون به سرب منتقل شود را محاسبه کنید.

ب) یک یون سرب چه انرژی نیاز دارد تا بیشینه‌ی انتقال انرژیِ مشابه با برخورد پروتون- Pb در قسمت (الف)، در یک برخورد Pb-Pb نیز وجود داشته باشد؟

۱-۲۲ یک ذره‌ی Fe به داخل حجمی از اورانیوم طبیعی پرتاب می‌شود. برای نزدیک شدن Fe به ذره‌ی اورانیوم تا آن‌جایی که ممکن است، استفاده از یک حالت Fe پر بار بهتر است یا استفاده از یک ایزوتوپ سبک‌تر؟ فرض کنید که پتانسیل کولنی قابل استفاده باشد.

۱-۲۳ یک فیلم نازک حاوی F^{19} با پروتون‌هایی با انرژی ۱٫۸۵ MeV بمباران می‌شوند. واکنش زیر رخ می‌دهد:

$$F^{19} + p \rightarrow O^{16} + \alpha .$$

مقدار Q واکنش برابر با ۸٫۱۳ MeV می‌باشد. بعد از واکنش، دیده می‌شود که یک ذره‌ی آلفا در زاویه‌ی قائمه نسبت به پرتو پروتون فرودی ظاهر می‌شود. انرژی‌های ذره‌ی آلفا و اتم اکسیژن چه‌قدر است؟ بیشینه‌ی انرژی هرکدام از این ذره‌ها که می‌تواند به یک اتم آهن ساکن منتقل شود چه‌قدر است؟

۱-۲۴ یک اتم هلیوم با انرژی ۱ MeV به داخل اتم آهن فرستاده می‌شود. با فرض این‌که سطح مقطع توان بازدارندگی مقدار ثابت $(10^{15}\ \text{atoms}/\text{cm}^2)\ eV$ ۸۸ باشد، انرژی اتم هلیوم بعد از حرکت آن به اندازه‌ی ۵۰۰ nm چه‌قدر است؟ اگر اتم هلیوم با یک اتم آهن بعد از طی مسیر ۵۰۰nm برخورد کند، بیشینه‌ی انرژی منتقل شده چه‌قدر است؟ چگالی اتمی برای آهن را $۸٫۵ \times ۱۰^{۲۲}\ \text{atoms/cm}^3$ در نظر بگیرد. آیا فرض توان بازدارندگی ثابت معتبر است؟

مراجع

1. Ullmaier H, Schilling W (1980) Radiation damage in metallic reactor materials. In: Physics of Modern Materials, vol. I. IAEA, Vienna.
2. Lamarsh JR (1971) Introduction to Nuclear Reactor Theory. Addison-Wesley, Reading, MA.
3. Doran DG (1977) Nucl Sci Eng 49:130.
4. Odette GR (1972) Trans Am Nucl Soc 15:464.
5. Segev M (1971) Inelastic Matrices in Multigroup Calculation, ANL-7710. Argonne National Lab, Argonne, IL, p 374.
6. Evans RD (1955) The Atomic Nucleus. McGraw-Hill, New York.
7. Chadderton LT (1965) Radiation Damage in Crystals. Methuen, London.
8. Born M, Mayer JE (1932) Z Physik 75:1.
9. Firsov OB (1957) Zh eksper. teor. Fiz 32:1464.
10. Firsov OB (1957) Zh eksper. teor. Fiz 33:696.
11. Brinkman JA (ed) (1962) Radiation Damage in Solids. Academic, New York.
12. Abrahamson AA (1963) Phys Rev 130:693.
13. Thompson MW (1969) Defects and Radiation Damage in Metals. Cambridge University Press, Cambridge.
14. Lindhard J, Nielsen V, Scharff M (1968) Approximation method in classical scattering by screened Coulomb fields. Mat. Fys. Medd. Dan Vid. Selsk. 36(10).
15. Winterbon KB, Sigmund P, Sanders JB (1970) Spatial distribution of energy deposited by atomic particles in elastic collisions. Mat. Fys. Medd. Dan Vid. Selsk. 37(14).
16. Lindhard J, Scharff M, Schiott HE (1963) Range concepts and heavy ion ranges. Mat. Fys. Medd. Dan Vid. Selsk. 33(14):3.
17. Nastasi M, Mayer JW, Hirvonen JK (1996) Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications. Cambridge University Press, Cambridge.
18. Ziegler JF, Biersack JP, Littmark U (1996) The Stopping and Range of Ions in Solids. Pergamon, New York.
19. Lindhard J, Winther A (1964) Mat. Fys. Medd. Dan Vid. Selsk. 34:1.
20. Littmark U, Ziegler JF (1980) Handbook of Range Distributions of Energetic Ions in all Elements. Pergamon, New York.

۲

جابه‌جایی اتم‌ها

۲-۱ نظریه‌ی مقدماتی جابه‌جایی

اتم ضربه‌خورده‌ی شبکه با انرژی T، اشاره به یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه یا PKA دارد. این اتم در سراسر شبکه حرکت کرده و به دیگر اتم‌های شبکه برخورد می‌کند. چنین برخوردهایی ممکن است منجر به انتقال انرژی کافی برای جابه‌جایی یک اتم شبکه از موقعیتش و در نتیجه تولید دو اتم جابه‌جا شده شود. اگر این توالی برخوردی ادامه یابد، یک‌سری از سومین اتم‌های ضربه‌خورده تولیدشده که منجر به ایجاد یک آبشار برخوردی[1] می‌شود. یک آبشار، یک خوشه‌ی فضایی از جاهای خالی شبکه است و اتم‌ها به صورت بین‌نشین‌هایی در نواحی موضعی ساکن می‌شوند. چنین پدیده‌ای می‌تواند اثر عمیقی برروی ویژگی‌های فیزیکی و مکانیکی آلیاژ داشته باشد که در آینده آشکار خواهد شد. هدف‌نهایی این فصل تعیین مقدار آبشار جابه‌جایی است. یعنی، برای یک نوترون با انرژی E_{i} و در صورتی که به یک اتم شبکه برخورد کند، چه تعداد جابه‌جایی اتم‌های شبکه ممکن است رخ دهد؟ در ادامه ماهیت برخوردهای نوترون ـ هسته و اتم ـ اتم به صورت مفصل بحث خواهد شد. اکنون یک

1. Collision cascade

مدل برای تعیین تعداد اتم‌های جابه‌جا شده به وسیله‌ی یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی T توسعه داده می‌شود.

یادآوری می‌شود که برای تعیین مقدار آسیب تابشی، راه‌حلی برای معادله‌ی نرخ آسیب لازم است:

$$R_{\mathrm{d}} = N \int_{\check{E}}^{\hat{E}} \phi\,(E_{\mathrm{i}})\,\sigma_{\mathrm{D}}\,(E_{\mathrm{i}})\,\mathrm{d}E_{\mathrm{i}}\,, \qquad (۱-۲)$$

که در این رابطه N دانسیته‌ی اتم شبکه است، $\phi(E_{\mathrm{i}})$ وابستگی انرژی شار ذره و $\sigma_{\mathrm{D}}(E_{\mathrm{i}})$ سطح مقطع جابه‌جایی است. سطح مقطع جابه‌جایی، احتمال جابه‌جایی اتم‌های شبکه به وسیله‌ی ذره‌های فرودی است.

$$\sigma_{\mathrm{D}}\,(E_{\mathrm{i}}) = \int_{\check{T}}^{\hat{T}} \sigma\,(E_{\mathrm{i}}, T)\,\nu(T)\,\mathrm{d}T\,, \qquad (۲-۲)$$

که $\sigma(E_{\mathrm{i}},T)$ احتمالی است که یک ذره با انرژی E_{i} یک انرژی پس‌زنی T را به یک اتم ضربه‌خورده‌ی شبکه بدهد و $\nu(T)$ تعداد اتم‌های جابه‌جا شده‌ی ناشی از چنین برخوردی است. فصل یک سطح مقطع انتقال انرژی نشان داده شده در معادله‌ی ۲-۲ برای انواع مختلفی از ذرات در محدوده‌های انرژی مختلف را نشان می‌دهد. این فصل به تبیین عبارت دوم در زیر انتگرال، $\nu(T)$، تعداد اتم‌های جابه‌جا شده‌ی ناشی از یک اتم پس زده‌ی اولیه با انرژی T، ومحدوده‌های T که در بین آن جابه‌جایی‌ها رخ می‌دهد، اختصاص می‌یابد. در پایان سطح مقطع جابه‌جایی و یک عبارت برای نرخ جابه‌جایی ارائه خواهد شد.

۲-۱-۱ احتمال جابه‌جایی

در اولین مرحله، $P_{\mathrm{d}}(T)$ به منزله‌ی احتمالی تعریف می‌شود که یک اتم ضربه‌خورده با دریافت انرژی T جابه‌جا شود. بدیهی است که یک حداقل انرژی وجود دارد که برای تولید یک جابه‌جایی باید منتقل شود. این انرژی به صورت E_{d} تعریف می‌شود. بزرگی E_{d} به ساختار بلورش شبکه، جهت فرود اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و انرژی حرارتی اتم شبکه و غیره بستگی دارد. این ملاحظات در ادامه به صورت دقیق بحث می‌شود. با تعریف E_{d}، احتمال جابه‌جایی برای $T < E_{\mathrm{d}}$ صفر است. اگر E_{d} در تمام

برخوردها مقدار ثابتی باشد در نتیجه احتمال جابه‌جایی برای $T > E_d$ برابر یک است. از آن‌رو ساده‌ترین مدل برای احتمال جابه‌جایی، یک تابع یک مرحله‌ای است:

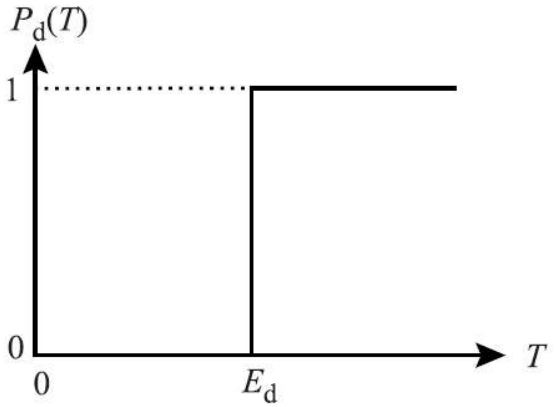
$$\begin{aligned} P_d(T) &= 0 \qquad \text{for} \quad T < E_d \\ &= 1 \qquad \text{for} \quad T > E_d \,. \end{aligned} \tag{۲-۳}$$

و در شکل ۲-۱ نشان داده شده است. در هرصورت، E_d برای تمام برخوردها و به دلیل عواملی که در فصل قبل توضیح داده شد، مقدار ثابتی نیست. انتظار می‌رود که اثر ارتعاشات اتمی اتم‌های شبکه مقدار E_d را کاهش دهد یا یک پهنه‌ی خنثیِ در حدود kT را برای احتمال جابه‌جایی معرفی کند. به علاوه همان طوری که در آینده بحث می‌شود اثر بلورینگی[1] نیز به شدت در اثر پخشیدگی[2] برروی E_d سهیم خواهد بود. در حقیقت شکل ۲-۱ و معادله‌ی ۲-۳ تنها برای جامدهای بی‌شکل در صفر درجه‌ی کلوین صحیح است. یک تصویر واقع‌بینانه در شکل ۲-۲ نشان داده شده است و به صورت زیر بیان می‌شود:

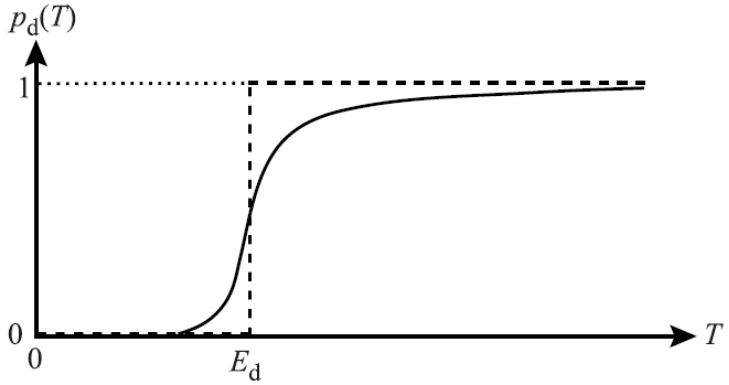
$$\begin{aligned} P_d(T) &= 0 \qquad\quad \text{for} \quad T < E_{d_{min}} \\ &= f(T) \qquad \text{for} \quad E_{d_{min}} < T < E_{d_{max}} \\ &= 1 \qquad\quad \text{for} \quad T > E_{d_{max}} \,, \end{aligned} \tag{۲-۴}$$

که در این رابطه $f(T)$ یک تابع متغیر صاف بین صفر و یک است. با تعیین احتمال جابه‌جایی، وظیفه‌ی بعدی یافتن تعداد جابه‌جایی‌ها به صورت تابعی از انرژی منتقل شده است. کینچین[3] و پیس[4] یک نظریه‌ی ساده برای یافتن تعداد متوسط اتم‌های جابه‌جا شده را ارایه کردند که در آغاز به وسیله‌ی یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی T در یک شبکه‌ی جامد مشخص ایجاد شده‌اند. تحلیل آن‌ها بر پایه‌ی فرضیات زیر بود:

1. Crystallinity
2. Blurring
3. Kinchin
4. Pease



شکل ۲-۱. احتمال جابه‌جایی $P_d(T)$ به صورت تابعی از انرژی جنبشی منتقل شده به یک اتم شبکه با فرض یک آستانه‌ی جابه‌جایی تیز.



شکل ۲-۲. احتمال جابه‌جایی به صورت تابعی از انرژی جنبشی منتقل شده به یک اتم شبکه که یک آستانه‌ی پخشیدگی ناشی از نوسانات اتمی، اتم‌های ناخالصی را نشان می‌دهد.

۱. آبشار به وسیله‌ی یک توالی از برخوردهای کشسان دودویی بین اتم‌ها ایجاد می‌شود.

۲. احتمال جابه‌جایی برای $T > E_d$ همان طوری که به وسیله‌ی معادله‌ی ۲-۴ تعیین شد، برابر ۱ است.

۳. هنگامی یک اتم با انرژی اولیه‌ی T از یک برخورد با انرژی T' ظاهر می‌شود و یک پس‌زنی جدیدی با انرژی ε تولید می‌کند، فرض می‌شود که هیچ انرژی به شبکه منتقل نمی‌شود و $T = T' + \varepsilon$ است.

۴. اتلاف انرژی به واسطه‌ی متوقف شدن الکترون به وسیله‌ی یک انرژی حدی E_c تعیین می‌شود. اگر انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه نسبت به E_c بیش‌تر باشد هیچ‌گونه جابه‌جایی‌های اضافه‌ای رخ نمی‌دهد تا اتلاف‌های انرژی الکترون‌ها، انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه را به انرژی E_c کاهش دهد. برای تمام انرژی‌های کم‌تر از E_c بازدارندگی الکترونیکی نادیده گرفته می‌شود و فقط برخوردهای اتمی رخ می‌دهد.

۵. سطح مقطع انتقال انرژی به وسیله‌ی مدل کره‌ی سخت مشخص می‌شود.

۶. آرایش اتم‌ها در جامد تصادفی است: اثرات ناشی از ساختار بلوری نادیده گرفته می‌شوند.

فرض ۱ پایه‌ی تمام نظریه‌های یک آبشار متشکل از عیوب نقطه‌ای تکی است. حذف این محدودیت اجازه می‌دهد که آبشار به وسیله‌ی یک خوشه‌ی جابه‌جایی که در فصل ۳ بحث خواهد شد، نشان داده شود. فرض ۲ بلورینگی و ارتعاشات اتمی را نادیده می‌گیرد، که یک پهنه‌ی خنثی یا اثر پخشیدگی را به توزیع اضافه می‌کند. در آینده فرض‌های ۳، ۴، ۵ و ۶ نادیده گرفته می‌شوند.

۲-۱-۲ مدل کینچین و پیس برای جابه‌جایی‌های اتمی

دو اتم متحرکی را در نظر بگیرید که در حین برخورد یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه به یک اتم ساکن ایجاد می‌شود. بعد از برخورد، اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه انرژی باقی‌مانده‌ی $T-\varepsilon$ را دارد و اتم ضربه‌خورده یک انرژی برابر با $\varepsilon-E_d$ را دریافت می‌کند که می‌دهد:

$$\nu(T) = \nu(T-\varepsilon) + \nu(\varepsilon - E_d)\,, \tag{۵-۲}$$

که E_d انرژی مصرف شده در واکنش است. با نادیده گرفتن E_d از ε، به عبارت دیگر $E_d<<\varepsilon$، و با توجه به فرض ۳، معادله‌ی ۲-۵ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\nu(T) = \nu(T-\varepsilon) + \nu(\varepsilon)\,. \tag{۶-۲}$$

معادله‌ی ۲-۶ برای تعیین $\nu(T)$ کافی نیست، زیرا انتقال انرژی ε نامشخص است. از آن‌جایی که اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و اتم‌های شبکه مشابه هستند، ε ممکن است که در هر جایی بین ۰ و T قرار گیرد.

به هرجهت، اگر بدانیم احتمال انرژی منتقل شده در یک برخورد در محدوده‌ی $(\varepsilon, \mathrm{d}\varepsilon)$ باشد، می‌توان معادله‌ی ۲-۶ را در این احتمال ضرب کرد و در تمام مقادیر مجاز ε انتگرال‌گیری کرد. این عملیات یک تعداد میانگینی از جابه‌جایی‌ها را مشخص می‌کند.
با استفاده از فرض ۵ مدل کره‌ی سخت سطح مقطع انتقال انرژی برابر است با:

$$\sigma(T,\varepsilon) = \frac{\sigma(T)}{\gamma T} = \frac{\sigma(T)}{T} \qquad \text{برای اتم‌های مشابه} \tag{۲-۷}$$

و احتمال آن‌که یک اتم ضربه زننده‌ی اولیه با انرژی T، انرژی در محدوده‌ی $(\varepsilon, \mathrm{d}\varepsilon)$ را به یک اتم برخورد شده منتقل کند برابر است با:

$$\frac{\sigma(T,\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon}{\sigma(T)} = \frac{\mathrm{d}\varepsilon}{T}\,, \tag{۲-۸}$$

و برای $\gamma = ۱$ (اتم‌های مشابه) است. با ضرب قسمت سمت راست معادله‌ی ۲-۶ در $\mathrm{d}\varepsilon/\mathrm{d}T$ و با انتگرال‌گیری از ۰ تا T می‌دهد که:

$$\begin{aligned} \nu(T) &= \frac{1}{T}\int_0^T [\nu(T-\varepsilon)+\nu(\varepsilon)]\,\mathrm{d}\varepsilon \\ &= \frac{1}{T}\left[\int_0^T \nu(T-\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon + \int_0^T \nu(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon\right]. \end{aligned} \tag{۲-۹}$$

یک تغییر در متغیرها از ε تا $\varepsilon' = T-\varepsilon$ در انتگرال اول و معادله‌ی ۲-۹ نتیجه می‌دهد که:

$$\nu(T) = \frac{1}{T}\int_0^T \nu(\varepsilon')\,\mathrm{d}\varepsilon' + \frac{1}{T}\int_0^T \nu(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon\,, \tag{۲-۱۰}$$

که در واقع یک مجموعه‌ای از دو انتگرال مشابه است. بنابراین:

$$\nu(T) = \frac{2}{T}\int_0^T \nu(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon\ . \qquad (۱۱-۲)$$

قبل از حل معادله‌ی ۲-۱۱، رفتار $\nu(T)$ در نزدیکی آستانه‌ی جابه‌جایی، E_d، را بررسی می‌کنیم. بدیهی است هنگامی که $T < E_\mathrm{d}$ باشد، هیچ‌گونه جابه‌جایی وجود ندارد و در نتیجه:

$$\nu(T) = 0 \quad \text{for} \quad 0 < T < E_\mathrm{d}\ . \qquad (۱۲-۲)$$

اگر T بزرگ‌تر از E_d باشد لیکن از دو برابر E_d کوچک‌تر باشد، دو نتیجه ممکن است. اولی این است که اتم ضربه‌خورده از موقعیتش در شبکه جابه‌جا شود و اکنون اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه موقعیت برخورد را با انرژی کم‌تر از E_d ترک کرده و به مکان خودش باز می‌گردد. به هرجهت اگر اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه انرژی E_d را منتقل نکند، اتم ضربه‌خورده در موقعیتش در شبکه باقی می‌ماند و هیچ‌گونه جابه‌جایی رخ نمی‌دهد. در چنین موردی از یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی بین E_d و $2E_\mathrm{d}$ در کل فقط یک جابه‌جایی محتمل است و:

$$\nu(T) = 1 \quad \text{for} \quad E_\mathrm{d} < T < 2E_\mathrm{d}\ . \qquad (۱۳-۲)$$

با استفاده از معادله‌ی ۲-۱۲ و ۲-۱۳ می‌توان معادله‌ی ۲-۱۱ را به محدوده‌هایی از ۰ تا E_d، E_d تا $2E_\mathrm{d}$ و $2E_\mathrm{d}$ تا E تقسیم‌بندی کرد و می‌توان نوشت:

که در نتیجه:

$$\nu(T) = \frac{2}{T}\left[\int_0^{E_\mathrm{d}} 0\,\mathrm{d}\varepsilon + \int_{E_\mathrm{d}}^{2E_\mathrm{d}} 1\,\mathrm{d}\varepsilon + \int_{2E_\mathrm{d}}^{T} \nu(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon\right]\ ,$$

$$\nu(T) = \frac{2E_d}{T} + \frac{2}{T}\int_{2E_d}^{T} \nu(\varepsilon)\,d\varepsilon\,. \qquad (۱۴-۲)$$

می‌توان معادله‌ی ۲-۱۴ را با ضرب در T و مشتق‌گیری از T حل کرد:

$$T\frac{d\nu}{dT} = \nu\,, \qquad (۱۵-۲)$$

با حل این معادله نتیجه می‌شود که:

$$\nu = CT\,. \qquad (۱۶-۲)$$

با جایگذاری معادله‌ی ۲-۱۶ در معادله‌ی ۲-۱۴، معادله‌ی ۲-۱۷ نتیجه می‌شود:

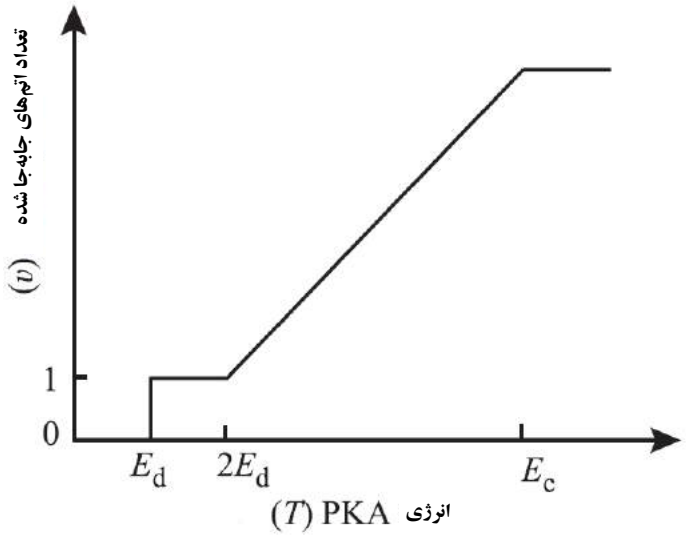
$$C = \frac{1}{E_d}\,, \qquad (۱۷-۲)$$

بنابراین:

$$\nu(T) = \frac{T}{2E_d} \quad \text{for } 2E_d < T < E_c\,. \qquad (۱۸-۲)$$

حد بالا به وسیله‌ی E_c (فرض ۴) تنظیم می‌شود. هنگامی که یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با $T > E_c$ به وجود می‌آید، تعداد جابه‌جایی‌ها برای $T > E_c$ برابر با $\nu(T) = E_c/2E_d$ است. بنابراین نتیجه‌ی کامل کیچین ـ پیس (K-P) برابر است با:

$$\nu(T) = \begin{cases} 0 & \text{for } T < E_d \\ 1 & \text{for } E_d < T < 2E_d \\ \dfrac{T}{2E_d} & \text{for } 2E_d < T < E_c \\ \dfrac{E_c}{2E_d} & \text{for } T \geq E_c \end{cases}\,. \qquad (۱۹-۲)$$



شکل ۲-۳. تعداد اتم‌های جابه‌جا شده در آبشار به صورت تابعی از انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه مطابق با مدل کیچین ـ پیس.

قابل ذکر است که $\frac{T}{2E_d}$ یک میانگین حقیقی است زیرا تعداد نابجایی‌ها می‌تواند از صفر (هیچ‌گونه انرژی در بالای E_d منتقل نمی‌شود) تا $T/E_d - 1$(هر برخورد فقط به اندازه‌ی کافی انرژی منتقل می‌کند) تغییر یابد و برای T بزرگ، ν به T/E_d نزدیک می‌شود. در نتیجه مقدار بیشینه‌ی $\nu(T)$ برابر با $2(\frac{T}{2E_d}) = \frac{T}{E_d}$ است. تابع جابه‌جایی جامع توصیف شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۲-۱۹، در شکل ۲-۳ نشان داده شده است.

۲-۱-۳ انرژی جابه‌جایی

یک اتم شبکه باید یک مقدار حداقلی از انرژی را در برخورد دریافت کند تا از موقعیتش در شبکه جابه‌جا شود. این انرژی جابه‌جایی یا آستانه جابه‌جایی، E_d، است. اگر انرژی منتقل شده، T، کم‌تر از E_d باشد، اتم ضربه‌خورده در اطراف موقعیت تعادلی خود ارتعاش می‌کند و جابه‌جا نخواهد شد. این ارتعاش‌ها ممکن است که از طریق برهم‌کنش میدان‌های پتانسیل، به اتم‌های همسایه منتقل شود و انرژی به صورت گرما ظاهر می‌شود. از آن‌رو، میدان‌های پتانسیلی اتم‌ها در شبکه سدی را ایجاد

می‌کنند که در مقابل اتم ضربه‌خورده باید از شبکه عبور کند و جابه‌جا شود. این منشأ انرژی آستانه‌ی جابه‌جایی است.

از آن‌جایی که فلزات ساختار بلورشناسی دارند، سدهای پتانسیلی مجاور یک موقعیت تعادلی شبکه در تمام جهات یکنواخت نیستند. در حقیقت، جهت‌هایی وجود دارد که در آن‌ها اتم‌های مجاور مقدار زیادی انرژی را از اتم ضربه‌خورده حذف خواهند کرد که یک سد پتانسیلی بالایی را نتیجه می‌دهد. در طول جهت‌های بسیار متقارن، جهت‌های بازی وجود دارد که در طول آن‌ها انرژی آستانه جابه‌جایی اندک است. از آن‌جایی که جهت پس‌زنی از رخداد برخوردی تعیین می‌شود که خود یک فرایند تصادفی است، جهت پس‌زنی نیز کاملاً تصادفی است. اغلب در محاسبات آسیب تابشی برای انرژی جابه‌جایی مقدار منحصر به فردی بیان می‌شود، سپس یک میانگین گرد شده از سد پتانسیلی مجاور موقعیت تعادلی شبکه نشان داده می‌شود.

مقدار E_d به صورت تقریبی با استفاده از استدلال سیتز[1] قابل تخمین است [۲]. انرژی تصعید، E_s برای اکثر فلزات در حدود ۶-۵ eV است. از آن‌جایی که برخلاف درون شبکه، با حذف یک اتم از سطح یک بلور، نیمی از تعداد زیادی از پیوندها شکسته می‌شوند، انرژی برای حذف یک اتم از درون شبکه در حدود ۱۲-۱۰ eV است. اگر یک اتم از موقعیتش در شبکه به یک موقعیت بین‌نشینی در جهتی با کم‌ترین مقاومت حرکت کند و زمان به اتم‌های همسایه این اجازه را بدهد که به حالت آسایش درآیند (جنبش آدیاباتیک)، انرژی معادل $2E_c$ لازم است. از آن‌جا که در واقع اتم ضربه‌خورده همیشه در جهت کم‌ترین مقاومت پیش می‌رود و زمان به اتم‌های مجاور اجازه آسایش نمی‌دهد، مقدار انرژی بیش‌تری مورد نیاز است (شاید $2E_c$ ۵-۴) که در نتیجه این انتظار وجود دارد که E_d برابر ۲۵-۲۰ eV باشد.

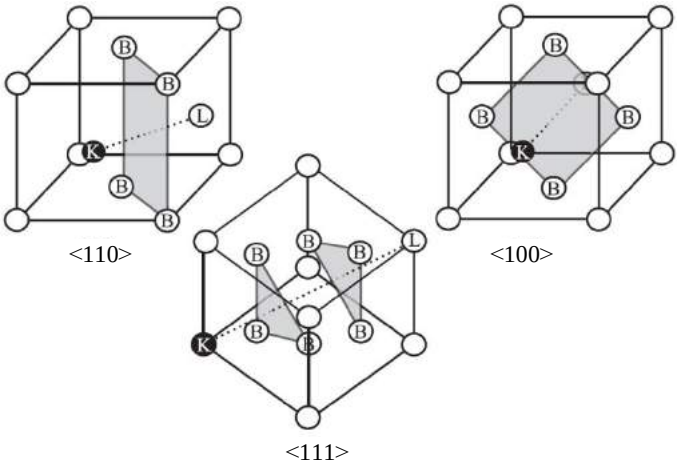
اگر پتانسیل برهم‌کنش بین اتم‌ها شناخته شود، می‌توان اندازه‌گیری دقیقی از انرژی جابه‌جایی انجام داد. این اندازه‌گیری با حرکت اتم در یک جهت مشخص و جمع انرژی‌های برهم‌کنش بین اتم متحرک و تمام همسایه‌های نزدیک دیگر در طول مسیر اتم ضربه‌خورده انجام می‌شود. هنگامی که انرژی پتانسیل کلی به مقدار بیشینه‌ای می‌رسد، موقعیت مطابق با نقطه‌ی زینی‌شکل، تفاوت بین انرژی اتم در نقطه‌ی زینی‌شکل، E^*، و انرژی آن در موقعیت تعادلی، E_{eq} آستانه‌ی جابه‌جایی برای آن جهت مشخص را نشان می‌دهد. از آن‌جایی که انرژی برهم‌کنش در این برخوردها فقط ده‌ها الکترون ولت

1. Seitz

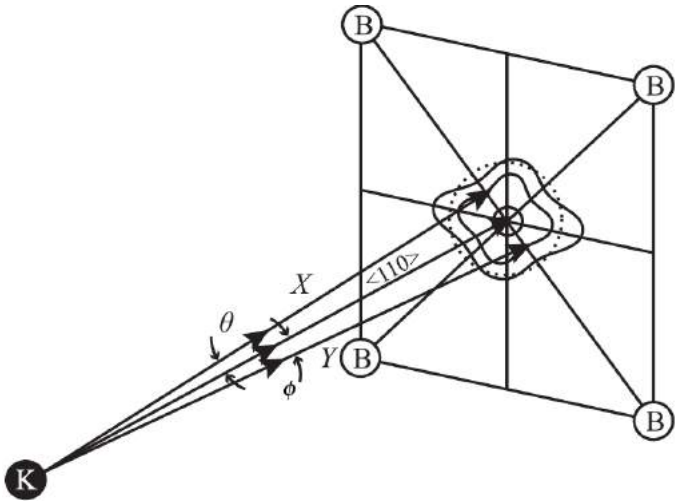
است، پتانسیل بورن ـ مایر مناسب‌ترین پتانسیل برای استفاده در توضیح برهم‌کنش‌ها است. این محاسبات می‌تواند در تمام جهت‌ها انجام شود و برای به‌دست آوردن یک متوسط E_d برای یک جامد مشخص میانگین‌گیری شود.

برای درک اهمیت تغییرات در انرژی‌های برهم‌کنش یا سدهای پتانسیلی با جهت‌های بلوری، نمونه‌ی مس مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در شبکه مکعبی سه جهت بلوری وجود دارد که به عنوان جهت‌های آسان برای جابه‌جایی در نظر گرفته می‌شود: ⟨100⟩، ⟨110⟩و ⟨111⟩. به صورت خاص، جهت ⟨110⟩جهت فشرده در شبکه‌ی fcc است و هم‌چنین جهت ⟨111⟩جهت فشرده در شبکه‌ی bcc است. شکل ۲-۴ نشان می‌دهد که چگونه یک اتم در یک شبکه‌ی fcc در طول هرکدام از این سه جهت جابه‌جا می‌شود. در هر مورد، اتم جابه‌جا شده‌ی K از نقطه‌ی میانی یک سری از اتم‌های مانع B در جهت اتم L، با آرایش اتمی وابسته به جهت، عبور می‌کند. برای اتم K جابه‌جا شده در جهت ⟨110⟩، اتم‌ها در گوشه‌های یک مستطیل قرار گرفته‌اند به‌طوری‌که بر مسیر اتم ضربه‌خورده‌ی K عمود هستند. هنگامی که اتم ضربه‌خورده‌ی K از مانع عبور می‌کند، انرژی جنبشی خودش را در برخوردهای زودگذر از دست می‌دهد که در اصل تبدیل به انرژی جنبشی اتم‌های مانع می‌شود. لازم نیست که انرژی به صورت برابر بین چهار اتم B به اشتراک گذاشته شود. این توضیح به وسیله‌ی طراحی یک دسته از خطوط تراز ثابت E_d در مکان اتم‌های B نشان داده شده است (شکل ۲-۵). سپس اگر اتم ضربه‌خورده فقط مقداری از انرژی ⟨110⟩ E_d را در یک رخداد برخوردی دریافت کند، آن اتم در صورتی جابه‌جا می‌شود که جهت اولیه آن در درون یک مخروط کوچک از زاویه‌ی فضایی قرار گرفته در اطراف جهت ⟨110⟩ باشد. برای انرژی‌های کوچک، مخروط صفحه اتم B را در یک دایره قطع می‌کند لیکن هنگامی که انرژی منتقل شده افزایش یابد، تقاطع به صورت قابل توجهی از یک مخروط مدور قائمه منحرف می‌شود (شکل ۲-۵). خطوط تراز در حقیقت به وسیله‌ی تقاطع یک سطح سه‌بعدی پیچیده ولی متقارن با یک کره در اطراف اتم K به عنوان مرکز تولید شده‌اند. این منحنی تراز می‌تواند با محاسبه‌ی برهم‌کنش بین اتم K و هر یک از اتم‌های B در هر نقطه‌ای در زمان ایجاد گردد درحالی‌که هم‌زمان اطلاعاتی برای برهم‌کنش‌های میان هر یک از این ۵ اتم و دیگر اتم‌ها در نواحی مجاور بلور وجود دارد. این مسئله‌ی بسیار پیچیده‌ای است که راه‌حل آن به شدت به پتانسیل برهم‌کنش بستگی دارد. در اصل، حداقل می‌توان تمام اطلاعات مورد نیاز در مورد وابستگی جهتی آستانه‌ها را به‌دست آورد. تصویر ۲-۶ آستانه‌ی جابه‌جایی را به صورت تابعی از جهت

در مس و طلای fcc نشان می‌دهد. لازم به یادآوری است که انرژی‌های آستانه‌ی جابه‌جایی در طول ⟨100⟩ و ⟨110⟩ پایین هستند، لیکن این مقدار در طول جهت ⟨111⟩ به علت فاصله‌ی زیاد بین اتم‌های مانع در این جهت و دو سری از موانع بین اتم‌ها در روی قطر سلول واحد، زیاد است.



شکل ۲-۴. اتم ضربه‌خورده‌ی، K، و اتم‌های مانع B برای جهت‌های مختلف از اتم ضربه‌خورده در شبکه‌ی fcc.



شکل ۲-۵. خطوط هم‌پتانسیل در صفحه‌ی مانع برای اتم ضربه‌خورده‌ی، K، درحال حرکت در جهت ⟨110⟩ و در حال حرکت به سمت صفحه‌ی مانع که به وسیله‌ی اتم‌های مانع B تعریف شده است[۳].

این وابستگی در آینده در یک مثال با استفاده از شبکه‌ی fcc و یک تابع دافعه سهمی‌وار نشان داده خواهد شد. شکل ۲-۷ یک اتم شبکه را برروی وجه یک سلول واحد در یک بلور fcc دریافت کننده انرژی از یک برخورد نشان می‌دهد. خط سیر حرکت در جهت ⟨100⟩است که از چهار اتم قرار گرفته در وجوح سلول واحد، فاصله‌ی برابری دارد. در یک شبکه fcc، هر اتم به وسیله‌ی ۱۲ همسایه نزدیک احاطه شده است. جابه‌جایی به چندین عامل مهم بستگی دارد. این عامل‌ها عبارت است از تعداد اتم‌های مانع، B، پارامتر فشردگی، Z، (فاصله‌ی نزدیک‌ترین مسیر تا اتم‌های B) و فاصله از اتم K در موقعیتش در شبکه تا مانع، y. این مقادیر در جدول ۲-۱ برای شبکه‌ی fcc داده شده است. انرژی مورد نیاز برای جابه‌جایی یک اتم با B و y افزایش یافته و با z کاهش می‌یابد. از آن‌جایی که z برای جهت ⟨111⟩کم‌ترین مقدار است، این مسیر برای نفوذ بسیار مشکل است.از آن‌جایی‌که $z_{100} < z_{110}$ و $y_{100} > y_{110}$، در نتیجه هر دو عامل، جابه‌جایی در طول ⟨110⟩ را از جابه‌جایی در طول ⟨100⟩ آسان‌تر می‌کند. در ادامه یک مثالی از جابه‌جایی در جهت ⟨100⟩ از یک شبکه‌ی fcc نشان داده می‌شود و یک مقداری برای E_d محاسبه می‌شود.

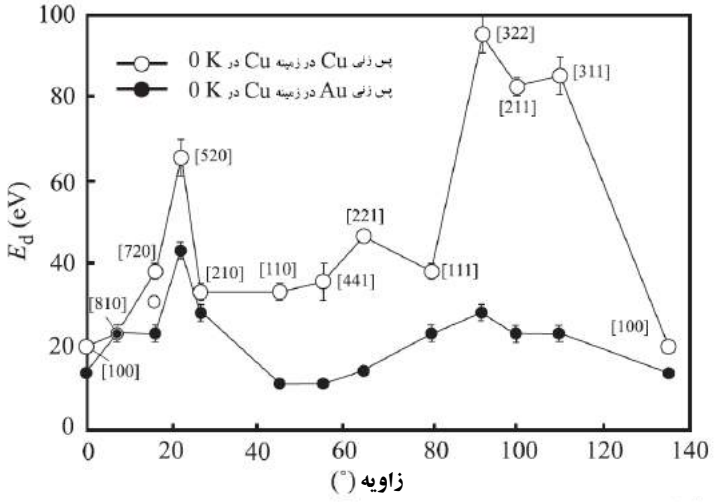
انرژی یک اتم تکی در یک موقعیت نرمال شبکه برابر است با:

$$E_{eq} = -12U \ , \qquad (۲۰-۲)$$

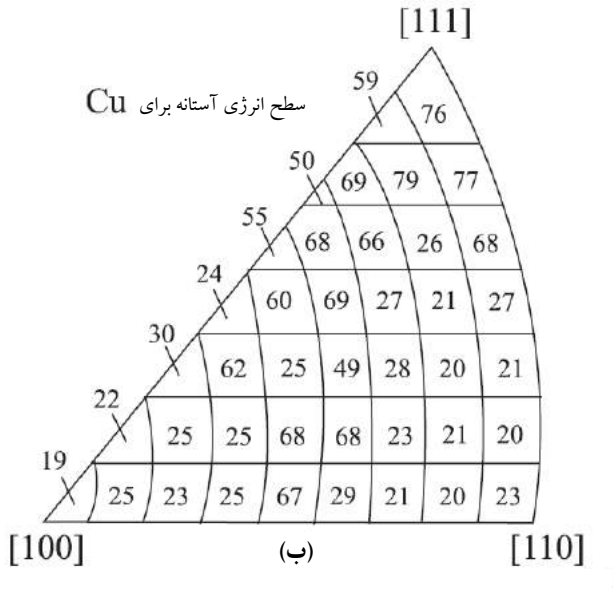
که در این رابطه U انرژی هر اتم بلور است. ازآن‌جایی‌که فقط نیمی از تعداد بسیار زیاد پیوندها در فرایند تصعید شکسته می‌شوند، این انرژی برابر است با:

$$E_s \cong 6U \ , \qquad (۲۱-۲)$$

و از آن‌جایی که $E_s \approx$ ۴-۵ eV، در نتیجه U در حدود ۱eV است.

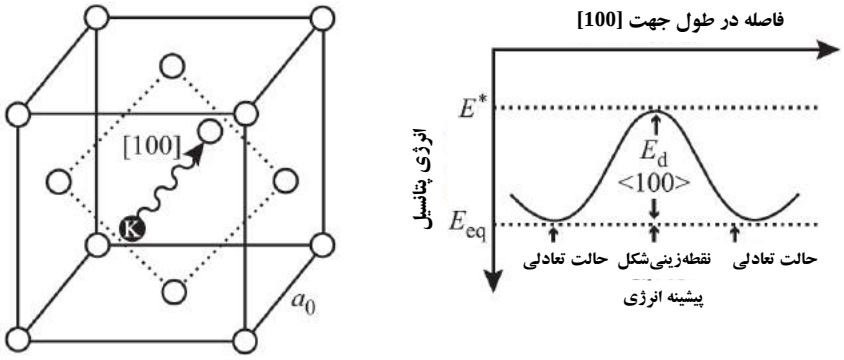


(الف)



(ب)

شکل ۲-۶. انرژی جابه‌جایی به صورت تابعی از جهت در (الف) بلور fcc مس و طلا [۳] و (ب) مس [۴].



شکل ۲-۷. جابه‌جایی یک اتم شبکه در طول جهت $\langle 111 \rangle$ در شبکه‌ی fcc و تغییر انرژی اتم با موقعیت در طول مسیرش[۵].

برای توضیح برهم‌کنش اتم‌های شبکه هنگامی که در جامد به سمت یک‌دیگر هل داده می‌شوند، همان‌طوری‌که در پتانسیل بورن ـ مایر پیشنهاد شده بود، از یک دافعه‌ی سهمی‌وار ساده استفاده می‌شود:

$$V(r) = -U + \frac{1}{2}k(r_{eq} - r)^2 \quad r < r_{eq} \qquad (۲۲-۲)$$
$$V(r) = 0 \quad r > r_{eq} ,$$

که در این رابطه k ثابت نیروی توصیف کننده‌ی حالت دافعه‌ی پتانسیل است. ثابت نیرو می‌تواند به صورت زیر نشان داده شود [۵]:

$$ka^2 = \frac{3v}{\beta} , \qquad (۲۳-۲)$$

که k ثابت نیرو، a ثابت شبکه، $v = a^3/4$ حجم ویژه یک اتم و β تراکم‌پذیری است.
در مثال داده شده فاصله‌ی تعادلی اتم ضربه‌خورده و چهار اتم تشکیل دهنده مربع مانع برابر با $r_{eq} = a/\sqrt{2}$ است. هنگامی که اتم در مرکز مربع باشد، با چهار اتم موجود در گوشه‌ها فاصله‌ی $a/2$ دارد. از آن‌رو، انرژی در نقطه‌ی زینی‌شکل برابر است با:

(۲۴-۲)

$$E^* = 4V\left(\frac{a}{2}\right) = 4\left[-D + \frac{1}{2}(ka^2)\left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}\right)^2\right].$$

در نتیجه انرژی جابه‌جایی در جهت $\langle 100 \rangle$ برابر است با:

(۲۵-۲)

$$E_{\mathrm{d}}\langle 100\rangle = \varepsilon^* - \varepsilon_{\mathrm{eq}} = 8D + 2\left(ka^2\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2}\right)^2.$$

یک مقدار نمونه‌وار برای ka^2 و U برای فلزات به ترتیب برابر با ۶۰ و ۱eV است که یک مقدار $E_{\mathrm{d}}\langle 100\rangle \approx ۱۳٬۱\mathrm{eV}$ را نتیجه می‌دهد. این مقدار در توافق منطقی با مقادیر داده شده برای E_{d} برای فلزات مختلف در شکل ۲-۶ و جدول ۲-۲ است. لازم به ذکر است که برای فلزات انتقالی مقدار پذیرفته شده برای E_{d} برابر ۴۰eV است.

جدول ۲-۱. عوامل مورد استفاده برای تعیین E_{d} در شبکه‌ی fcc.

جهت	اتم‌های B#	پارامتر فشردگی z	فاصله تا مانع، y
$\langle 100\rangle$	4	$\frac{a}{2}$	$\frac{a}{2}$
$\langle 110\rangle$	4	$\frac{\sqrt{6}}{4}a$	$\frac{\sqrt{2}}{4}a$
$\langle 111\rangle$	3	$\frac{a}{\sqrt{6}}$	$\frac{a}{3}$

جدول ۲-۲. مقادیر توصیه شده‌ی انرژی جابه‌جایی مؤثر برای استفاده در محاسبات جابه‌جایی[۶].

فلز	شبکه (c/a)	$E_{d,min}$ (eV)	E_d (eV)
Al	fcc	16	25
Ti	hcp (1.59)	19	30
V	bcc	–	40
Cr	bcc	28	40
Mn	bcc	–	40
Fe	bcc	20	40
Co	fcc	22	40
Ni	fcc	23	40
Cu	fcc	19	30
Zr	hcp	21	40
Nb	bcc	36	60
Mo	bcc	33	60
Ta	bcc	34	90
W	bcc	40	90
Pb	fcc	14	25
پولاد زنگ نزن	fcc		40

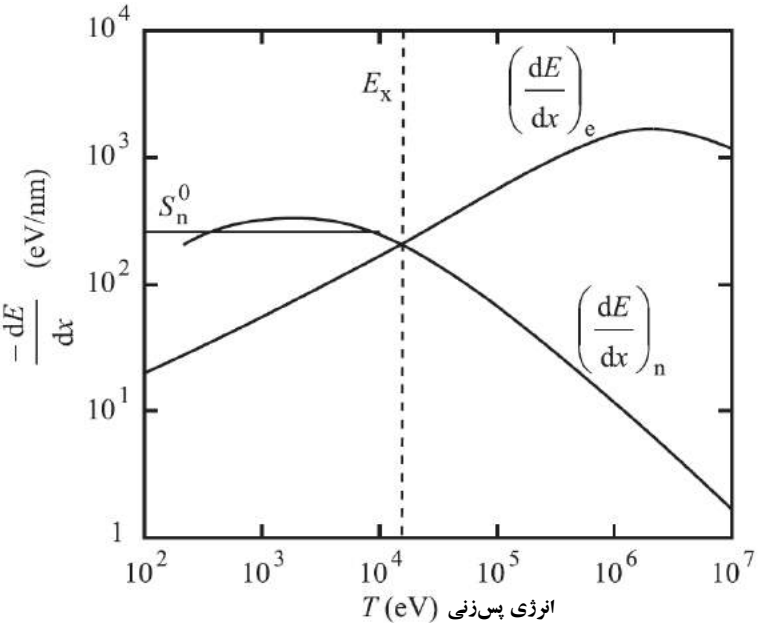
۲-۱-۴ محدوده‌ی اتلاف انرژی الکترونی

اکنون یک حد پایین از انتقال انرژی لازم برای ایجاد یک جابه‌جایی، E_d، البته با توجه به گروه برخوردهای پرانرژی بررسی می‌شود. یادآوری می‌شود که در انرژی‌های پایین ($T < ۱۰^۳$ eV)، $S_n >> S_e$ است و فرض خواهد شد که تقریباً تمام اتلاف انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه متوجه برخوردهای کشسان باشد (شکل ۱-۱۸). به هرجهت هم‌چنان که انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه افزایش می‌یابد، کسری از اتلاف انرژی کلی که ناشی از فرایند برانگیختگی و یونیزانسیون است، تا بالای انرژی نقطه‌ی تقاطع، E_x (که $S_n < S_e$ است)، افزایش می‌یابد. عبارات موجود برای $\nu(T)$ در معادله‌ی ۲-۱۹ برای محاسبه‌ی این تغییرات در مقدار انرژی جنبشی موجود برای برخوردهای جابه‌جا کننده باید اصلاح شود.

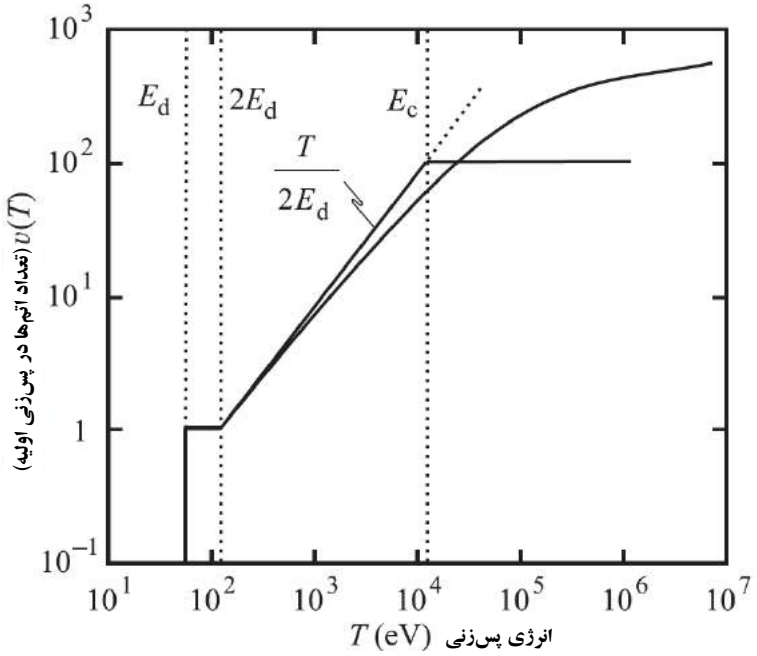
شکل ۲- ۸، $\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)_n$ را برای پس‌زنی‌های کربن در گرافیت با استفاده از معادله‌ی ۱-۱۶۲ و نتیجه‌ی توماس ـ لیندهارد ـ فرمی نشان می‌دهد. آخرین بیان از معادله‌ی ۱-۱۶۲، که یک مقدار ثابت $۲۵۰\,\mathrm{eV/nm}$ را پیش‌بینی می‌کند، یک تقریب خوب برای انرژی‌های بالاتر از حداقل E_a است. یادآوری می‌شود که در انرژی‌های بالا ($T >> E_x$)، اتلاف‌های انرژی الکترونیکی با چندین مرتبه بزرگی غالب هستند. به هرجهت در انرژی‌های پایین ($T << E_x$)، این وضعیت برعکس می‌شود.

خوشبختانه، به علت انحرافات از مدل کره‌ی سخت، پس‌زنی اولیه، پس‌زنی‌های ثانویه‌ای با میانگین انرژی‌های کم‌تر از $\frac{1}{2}\hat{T}$ را تولید می‌کنند. این‌ها معمولاً در محدوده‌ای هستند که برانگیختگی الکترونی می‌تواند نادیده گرفته شود. برای به‌دست آوردن $\nu(T)$ با یک تقریب خوب، انرژی E_c محاسبه می‌شود که در برخوردهای کشسان به وسیله‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه تلف شده است.

$$E_c = \int_0^{\check{T}} \frac{(\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_n \,\mathrm{d}E}{(\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_n + (\mathrm{d}E/\mathrm{d}x)_e} \,. \qquad (۲۶-۲)$$



شکل ۲-۸. اتلاف انرژی از بازدارنده‌های هسته‌ای و الکترونیکی به صورت تابعی از انرژی[۷].



شکل ۲-۹. تعداد اتم‌های جابه‌جا شده در پس‌زنی اولیه در مقایسه با مدل K-P ساده ناشی از $\frac{T}{2E_d}$ [۷].

سپس می‌توان معادله‌ی ۱-۱۸۲ را برای محاسبه‌ی $(\frac{dE}{dx})_e$ و معادله‌ی ۱-۱۳۰ را برای محاسبه‌ی $(\frac{dE}{dx})_n$ و با در نظر گرفتن $\breve{T} = E_a$ استفاده کرد. تابع آسیب اصلاح شده، معادله‌ی اصلی ۲-۱۹ با T جایگزین شده با E_c است:

$$v(T) = \frac{E_c}{2E_d} . \qquad (۲-۲۷)$$

با توجه به تخمین E_c، می‌توان حداکثر انرژی که یک اتم متحرک (با انرژی E) به یک الکترون منتقل کند را به صورت زیر مورد استفاده قرار داد:

$$\frac{4m_e}{M}E , \qquad (۲-۲۸)$$

و با تساوی این عبارت با انرژی یونیزاسیون الکترون ضربه‌خورده متعلق به اتم هدف، می‌توان نوشت:

$$E_c = \frac{M}{4m_e} I \,. \qquad (۲۹-۲)$$

کینچین و پیس[۱]، E_c و E_x را با این الزام که تمام انرژی بالای E_x در برانگیختگی الکترونی از بین می‌رود، مساوی فرض کرده و جابه‌جایی‌ها را برای تمام اتلاف انرژی زیر E_c محاسبه کرده‌اند. شکل ۲-۹، $\nu(T)$ را برای گرافیت با استفاده از $(\frac{dE}{dx})_n$ لیندهارد نشان می‌دهد. قابل ذکر است که برای پس‌زنی‌هایی با انرژی کم‌تر از E_c، تئوری ساده توضیحات خوبی را ارایه می‌دهد لیکن برای $E_c < T$، اتلاف‌ها در برانگیختگی الکترونی بسیار حایز اهمیت هستند.

۲-۲ اعمال اصلاحاتی به مدل جابه‌جایی K-P

۲-۲-۱ بررسی E_d در تعادل انرژی

اسنایدر[1] و نیوفلد[2] [۸] این فرض را مطرح کردند که انرژی E_d در هر برخورد به گونه‌ای مصرف می‌شود که رابطه‌ی موجود در فرض ۳ مدل جابه‌جایی K-P، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$T = T' + \varepsilon + E_d \,, \qquad (۳۰-۲)$$

و هر دو اتم بعد از برخورد به حرکت ادامه داده و هیچ‌گونه کاهش انرژی وجود نخواهند داشت. هنگام مقایسه با مدل کینچین ـ پیس، این انتظار وجود دارد که ممکن است $\nu(T)$ کاهش یابد زیرا یک عبارت اتلاف انرژی اضافه شده است. به هرجهت به علت آن‌که اتم‌ها اجازه می‌یابند که برخورد را با انرژی کم‌تر از E_d ترک کنند، یک افزایش در $\nu(T)$ رخ خواهد داد. از آن‌جایی که این دو تغییر در $\nu(T)$ تقریباً یک‌دیگر را خنثی می‌کنند، نتیجه بسیار شبیه به مدل K-P است:
و برای $T > 4E_d$ می‌توان نوشت:

$$\nu(T) = 0.56\left(1 + \frac{T}{E_d}\right) \qquad (۳۱-۲)$$

1. Snyder
2. Neufeld

۲-۲-۲ سطح مقطع‌های انتقال انرژی واقعی

نقطه ضعف مدل جابه‌جایی K-P، فرض برخوردهای کره‌ی سخت (فرضیه‌ی ۵) است. در حقیقت، هنگامی که تناسب معادله‌ی ۲-۱۹ باقی بماند، سطح مقطع‌های انتقال انرژی واقعی‌تر می‌توانند مورد استفاده قرار گیرند. ساندرس[1] [۹] معادله‌ی ۲-۵ را با استفاده از پتانسیل توان معکوس (r^{-s}) حل کرد و رابطه زیر را به‌دست آورد:

$$\nu(T) = s\left(2^{\frac{1}{s+1}} - 1\right)\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\ , \qquad (۳۲-۲)$$

که برای پتانسیل مربع‌معکوس به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\nu(T) = 0.52\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\ , \qquad (۳۳-۲)$$

که نتایج کیچین ـ پیس را به اندازه‌ی یک ضریب ۲ کاهش می‌دهد.

به هرجهت استفاده از این پتانسیل نواقصی را به همراه دارد؛ زیرا این پتانسیل به تمام برخوردها در آبشار اعمال می‌شود، درحالی‌که ناحیه‌ی اعتبار آن محدود به مقادیری از T است که ۵a $\rho <$ باشد. از لحاظ فیزیکی، اثر پراکندگی واقعی، ایجاد تعداد زیادی برخوردهای تولید کننده T در نواحی زیر حد آستانه‌ی کم‌تر از E_{d} جایی که آن‌ها از زنجیره‌ی تکثیر حذف می‌شوند، است.

تا سال‌ها محققین به صورت دقیق نمی‌دانستند که چرا معادله‌ی ۲-۱۹، $\nu(\mathrm{T})$ را در فلزات با یک ضریب ۲ تا ۱۰ برابری بیش‌تر از حد معمول تخمین می‌زند و تاکنون تلاش‌های آن‌ها برای اندازه‌گیری وابستگی انرژی$\nu(\mathrm{T})$ در یک محدوده انرژی بزرگ (اتم‌های پس‌زنی با انرژی keV ۲۰۰-۵۰ در طلا) یک رابطه‌ی درجه دومی را نسبت به رابطه‌ی خطی نتیجه داده است[۱۰]. در سال ۱۹۶۹ سیگموند[2] [۱۱] با توجه به *دانسیته‌ی پس‌زنی* $F(T,\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon$ یک دیدگاه متفاوتی را برای این مسئله در نظر گرفت که این دانسیته‌ی پس‌زنی به منزله‌ی میانگین تعداد اتم‌های پس‌زده شده با یک انرژی در بازه‌ی $(\varepsilon, \varepsilon + \mathrm{d}\varepsilon)$ و در شکل نتیجه‌ای از یک یون اولیه کند شده از انرژی T تا صفر تعریف شده است.

1. Sanders
2. Sigmund

دانسیته‌ی پس‌زنی می‌تواند به شکلی بیان شود که تقریب قانون توان سطح مقطع دیفرانسیلی توماس ـ فرمی را استفاده کند[۱۲]:

$$\sigma(T,E) \propto T^{-m}\varepsilon^{-1-m}\,, \tag{۳۴-۲}$$

که در صورتی که $0 \leq m \leq 1$ باشد، می‌توان نوشت:

$$F(T,\varepsilon) = \frac{m}{\psi(1)-\psi(1-m)}\frac{T}{(\varepsilon+U)^{1-m}\varepsilon^{1+m}}\,, \tag{۳۵-۲}$$

برای $T >> \varepsilon >> U$ و در صورتی که:

$$\psi(x) = \mathrm{d}[\ln\Gamma(x)]/\mathrm{d}x\,, \tag{۳۶-۲}$$

U اتلاف انرژی پیوندی در هنگام ترک یک موقعیت شبکه از طریق یک اتم است و $\Gamma(X)$ تابع گاما یا تابع فاکتوریل کلی است. از آن‌جایی‌که اتم پس‌زده شده هنگامی جابه‌جا می‌شود که $\varepsilon > E_\mathrm{d}$ باشد، در نتیجه می‌توان نوشت:

$$\nu(T) = \int_{E_\mathrm{d}}^{T}\mathrm{d}\varepsilon F(T,\varepsilon) = \frac{(1+U/E_\mathrm{d})^m - 1}{\psi(1)-\psi(1-m)}\left(\frac{T}{U}\right) \tag{۳۷-۲}$$

برای $T >> E_\mathrm{d} >> U$. مقدار m به صورتی انتخاب می‌شود [۱۳] که $\sigma(T,\varepsilon)$، برخوردها در انرژی‌های پایین را توصیف کند، به عبارت دیگر، $2E_\mathrm{d} \leq T \leq 100\ E_\mathrm{d}$. این شرایط، m را به مقادیر کوچک‌تر یا مساوی ۴ محدود می‌کند. برای $m = 0$ معادله‌ی ۲-۳۷ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\nu(T) = \frac{6}{\pi^2}\frac{T}{U}\ln(1+U/E_\mathrm{d})\,. \tag{۳۸-۲}$$

از آن‌جایی‌که اتلاف عیوب به وسیله‌ی برخوردهای جانشین‌ساز نادیده گرفته می‌شود، این یک حد بالایی برای فرایندهای جابه‌جایی است.

یک خصوصیت جابه‌جایی‌ها در فلزات، حجم بازترکیبی بزرگ (در حدود ۱۰۰ حجم اتمی یا بیش‌تر) یک عیب نقطه ای تکی است. از آن‌رو، E_d اتلاف انرژی به محیط به وسیله‌ی یک اتم در حال تلاش برای فرار از حجم باز ترکیبی است. این توصیف یک نتیجه‌ای را به همراه دارد و این نتیجه به این صورت است که در آبشارها، بسیاری از عیوب به وسیله‌ی برخوردهای جایگزین‌ساز از بین می‌روند [۱۴]. انرژی پیوندی U فقط در حد چند eV است و در نتیجه در مقایسه با E_d قابل چشم‌پوشی است، که معادله‌ی ۲-۳۸ را به صورت زیر کاهش می‌دهد:

$$\nu(T) = \frac{6}{\pi^2}\frac{T}{E_d} = 1.22\left(\frac{T}{2E_d}\right), \qquad (۳۹-۲)$$

که در حدود ۲۲٪ بیش‌تر است از نتیجه‌ی معادله‌ی ۲-۱۹ که برای برخوردهای جایگزین‌ساز محاسبه شده است.

۲-۲-۳ اتلاف انرژی به وسیله‌ی برانگیختگی الکترونیکی

حتی برای $E > E_c$، اتلاف انرژی در برخوردهای اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با الکترون‌ها در رقابت با اتلاف انرژی در اثر برخوردها با اتم‌های شبکه است. این دو فرایند به صورت مستقل قابل بررسی هستند و هرکدام از آن‌ها می‌تواند به وسیله‌ی سطح مقطع‌های انتقال انرژی مجزا توضیح داده شود. فرمول‌هایی که در ابتدا به وسیله‌ی لیندهارد و همکارانش [۱۵] بیان شده بود، در این قسمت همان‌طوری که به وسیله‌ی اولاندر[1] در مرجع [۵] به صورت یک عملیات بسیار واقعی اتلاف انرژی به وسیله‌ی برانگیختگی الکترونیکی (فرضیه‌ی ۴) نشان داده شده بود، به صورت خلاصه آورده شده است.

هم‌چنان‌که اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه فاصله‌ی dx از یک جامد را طی می‌کند، سه حالت ممکن است رخ دهد: (۱) با یک الکترون برخورد کند، (۲) با یک اتم برخورد کند یا (۳) هیچ برخوردی نداشته

1. Olander

باشد.اگر $\rho_e d\varepsilon_e$ احتمال انتقال انرژی در محدوده‌ی $(\varepsilon_e, d\varepsilon_e)$ به یک الکترون در برخورد بین اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و یک الکترون در فاصله‌ی dx در نظر گرفته می‌شود:

$$p_e\, d\varepsilon_e = N\sigma_e(T, \varepsilon_e)\, d\varepsilon_e\, dx\,, \tag{۴۰-۲}$$

که در این رابطه $\sigma_e(T,\varepsilon_e)$ سطح مقطع انتقال انرژی از اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه به الکترون است و به صورت مشابه برای یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و اتم شبکه می‌توان نوشت:

$$p_a\, d\varepsilon_a = N\sigma_a(T, \varepsilon_a)\, d\varepsilon_a\, dx\,, \tag{۴۱-۲}$$

و احتمال آن‌که هیچ‌گونه برخوردی در فاصله‌ی dx رخ ندهد برابر است با:

$$\begin{aligned} p_o &= 1 - \int_0^{\varepsilon_{e,max}} p_e\, d\varepsilon_e - \int_0^{\varepsilon_{a,max}} p_a\, d\varepsilon_a \\ &= 1 - N\, dx[\sigma_e(T) - \sigma_a(T)]\,, \end{aligned} \tag{۴۲-۲}$$

و $\varepsilon_{e,max}$ و $\varepsilon_{a,max}$ بیشینه‌ی انرژی‌های قابل انتقال به یک الکترون و اتم به وسیله‌ی یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی T است. معادله‌ی بقا برای $\nu(T)$ با وزن‌دهی به وسیله‌ی احتمال مناسب برای فرایندی که به وسیله‌ی آن ایجاد شده و انتگرال‌گیری در سراسر محدوده‌های مجاز انتقال انرژی بازنویسی می‌شود:

$$\begin{aligned} \nu(T) = &\int_0^{\varepsilon_{a,max}} [\nu(T - \varepsilon_a) + \nu(\varepsilon_a)] p_a\, d\varepsilon_a \\ &+ \int_0^{\varepsilon_{e,max}} \nu(T - \varepsilon_e) p_e\, d\varepsilon_e + p_0 \nu(T)\,. \end{aligned} \tag{۴۳-۲}$$

با جایگزینی برای P_a، P_e و P_0 نتیجه می‌شود که:

(۴۴-۲)

$$[\sigma_a(T)+\sigma_e(T)]\nu(T)=\int_0^{\varepsilon_{a,max}}[\nu(T-\varepsilon_a)+\nu(\varepsilon_a)]\sigma_a(T,\varepsilon_a)\,d\varepsilon_a + \int_0^{\varepsilon_{e,max}}\nu(T-\varepsilon_e)\sigma_e(T,\varepsilon_e)\,d\varepsilon_e\ .$$

از آن‌جایی که بیشینه‌ی انرژی منتقل شده به یک الکترون در مقایسه با T، بسیار کوچک است، $\nu(T-\varepsilon_e)$ می‌تواند در یک سری تیلور بسط داده شود و از عبارت دوم کوتاه شود:

$$\nu(T-\varepsilon_e)=\nu(T)-\frac{d\nu}{dT}\varepsilon_e\ , \qquad (۴۵-۲)$$

و آخرین عبارت در معادله‌ی ۲-۴۴ می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۴۶-۲)

$$\int_0^{\varepsilon_{e,max}}\nu(T-\varepsilon_e)\sigma_e(T,\varepsilon_e)\,d\varepsilon_e=\nu(T)\int_0^{\varepsilon_{e,max}}\sigma_e(T,\varepsilon_e)\,d\varepsilon_e - \frac{d\nu}{dT}\int_0^{\varepsilon_{e,max}}\varepsilon_e\sigma_e(T,\varepsilon_e)\,d\varepsilon_e\ .$$

اولین انتگرال در سمت راست معادله‌ی ۲-۴۶، سطح مقطع کلی برای برخوردهای اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با الکترون است و بخش مرتبط در سمت چپ معادله‌ی ۲-۴۴ را خنثی می‌کند. دومین انتگرال در سمت راست معادله‌ی ۲-۴۶ توان بازدارندگی الکترونیکی جامد تقسیم بر دانسیته‌ی اتم است. با جایگذاری معادله‌ی ۲-۴۶ با معادله‌ی ۲-۴۵ داریم:

(۴۷-۲)

$$\nu(T)+\left[\frac{(dT/dx)_e}{N\sigma(T)}\right]\frac{d\nu}{dT}=\int_0^{T_{max}}[\nu(T-\varepsilon)+\nu(\varepsilon)]\left[\frac{\sigma(T,\varepsilon)}{\sigma(T)}\right]d\varepsilon\ ,$$

که زیرنویس a در T و σ با علم به آن‌که این مقادیر اشاره به برخوردهای اتمی دارد، حذف شده است. معادله‌ی ۲-۴۷ می‌تواند با استفاده از فرض کره‌ی سخت حل شود، لیکن $(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x})_e$ به وسیله‌ی معادله‌ی ۱-۱۸۲ تعیین شده، به عبارت دیگر $(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x})_e = kE^{1/2}$، که می‌دهد:

$$\nu(T) = \frac{2E_\mathrm{d}}{T} + \frac{2}{T}\int_{2E_\mathrm{d}}^{T} \nu(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon - \frac{kT^{1/2}}{\sigma N}\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}T}\,. \qquad (۴۸-۲)$$

بعد از ساده‌سازی نتیجه‌ی نهایی برابر است با:

$$\nu(T) = \left[1 - \frac{4k}{\sigma N(2E_\mathrm{d})^{1/2}}\right]\left(\frac{T}{2E_\mathrm{d}}\right), \quad \text{for } T \gg E_\mathrm{d}\,, \qquad (۴۹-۲)$$

که k یک ثابت وابسته به عدد دانسیته‌ی اتمی، N، و عدد اتمی است. عبارت σ سطح مقطع مستقل از انرژی برخورد کره‌ی سخت است. قابل ذکر است هنگامی که بازدارندگی الکترونیکی به صورت مناسبی در معادله‌ی انتگرال اصلی محاسبه شود، مفهوم کاملی از یک انرژی معین (E_c)، مناطق مجزای اتلاف انرژی الکترونیکی از برخوردهای اتمی از بین می‌رود.

با وجود این معادله‌ی ۲-۴۹ هنوز به علت استفاده از فرضیه‌ی کره‌ی سخت یک معادله پیچیده است. لیندهارد دریافت که به منظور اطمینان از این‌که پیش‌بینی‌های معتبر به‌دست آید، باید سطح مقطع انتقال انرژی واقعی مورد استفاده قرار گیرد. لیندهارد هم‌چنین دریافت که لازم نیست که فاکتور $\nu(T)$ تنها در جایگاه تعداد جابه‌جایی‌های تولید شده در هر اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه‌ی تفسیر شود، و می‌تواند به منزله‌ی بخشی از انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه‌ی اصلی در نظر گرفته شود که به اتم‌های شبکه (نسبت به الکترون‌ها) در کند شدن منتقل می‌شود. در حقیقت، برخوردهای اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با اتم‌ها در رقابت با برخوردهای با الکترون‌ها هستند. لیکن فرایندها می‌توانند به صورت وقایع مستقلی بررسی شوند. با وجود این، لازم است که عبارتی برای $\nu(T)$ دوباره فرمول‌بندی شود. با توجه به تئوری جزبندی انرژی[1] لیندهارد:

1. Energy partitioning

$$\nu(T) = \xi(T)\left(\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\right), \tag{۵۰-۲}$$

که در این عبارت:

$$\xi(T) = \frac{1}{1+0.13(3.4\varepsilon_{\mathrm{T}}^{1/6}+0.4\varepsilon_{\mathrm{T}}^{3/4}+\varepsilon_{\mathrm{T}})}, \tag{۵۱-۲}$$

ε_T انرژی کاهش یافته‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه است:

$$\varepsilon_{\mathrm{T}} = \frac{T}{2Z^2\varepsilon^2/a}, \tag{۵۲-۲}$$

و a شعاع استتار است که برابر با مقدار زیر است:

$$a = \frac{0.8853a_0}{Z^{1/3}}.$$

تابع راندمان انرژی آسیب $\zeta(T)$ به صورت تابعی از انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه، T، و هم‌چنین تابعی از Z (عناصر مختلف) در شکل ۲-۱۰ نشان داده شده است.

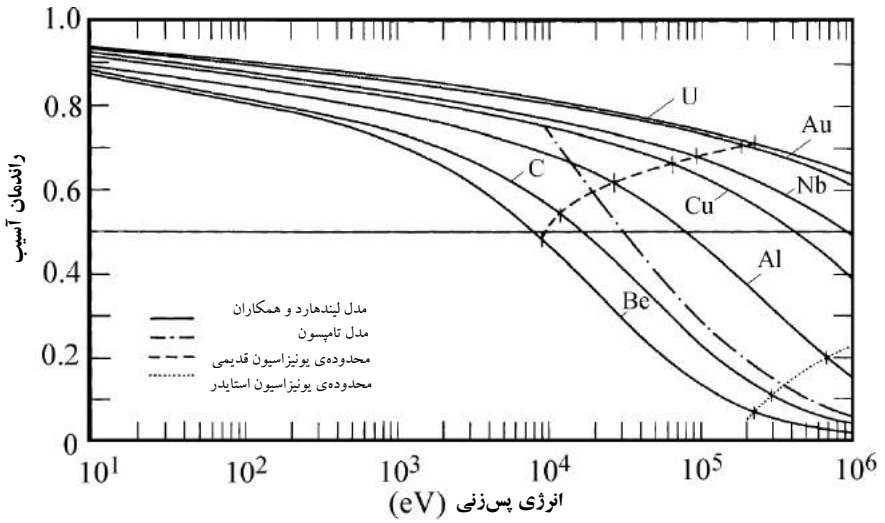
در سال ۱۹۷۵، نورگت[1]، رابینسون[2] و تورنس[3] [۱۷] در اصل این مدل را برای محاسبه‌ی تعداد جابه‌جایی‌ها، N_{d} پیشنهاد کردند، به صورتی که:

$$N_{\mathrm{d}} = \frac{\kappa E_{\mathrm{D}}}{2E_{\mathrm{d}}} = \frac{\kappa(T-\eta)}{2E_{\mathrm{d}}}, \tag{۵۳-۲}$$

که T انرژی کلی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه است و η اتلاف انرژی در آبشار به وسیله‌ی برانگیختگی الکترونی است و E_{D} انرژی موجود برای تولید جابه‌جایی‌های اتمی به وسیله‌ی برخوردهای کشسان

1. Norgett
2. Robinson
3. Torrens

است که به عنوان *انرژی آسیب* شناخته می‌شود. راندمان جابه‌جایی، K در حدود ۰٫۸ است و مستقل از M_2، T یا دما است. مقدار E_D به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:



شکل ۲-۱۰. اثر اتلاف‌های انرژی الکترونیکی برروی انرژی‌های موجود برای جابه‌جایی‌های اتمی [۱۰].

$$E_D = \frac{T}{[1 + k_N g(\varepsilon_N)]}, \qquad (۵۴-۲)$$

و اتلاف انرژی غیرکشسان که مطابق با روش لیندهارد و با استفاده از یک تقریب آماری نسبت به تابع کلی، $g(\varepsilon_N)$، محاسبه شده است، برابر است با:

$$\begin{aligned} g(\varepsilon_N) &= 3.4008\varepsilon_N^{1/6} + 0.40244\varepsilon_N^{3/4} + \varepsilon_N \\ k_N &= 0.1337 Z_1^{1/6}\left(\frac{Z_1}{A_1}\right)^{1/2} \\ \varepsilon_N &= \left(\frac{A_2 T}{(A_1 + A_2)}\right)\left(\frac{a}{Z_1 Z_2 \varepsilon^2}\right) \\ a &= \left(\frac{9\pi^2}{128}\right)^{1/3} a_0 \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{-1/2} \end{aligned} \qquad (۵۵-۲)$$

که در این رابطه a_0 شعاع بوهر و ε واحد بار الکترونیکی است. اگر $E_d \sim ۴۰$ eV، در نتیجه $N_d = ۱۰E_D$ که E_D در واحد keV است.

۲-۲-۴ اثرات بلورینگی

تا این‌جا در تحلیل‌ها فرض شده است که آبشار در یک جامد مرکب از اتم‌هایی با آرایش تصادفی رخ می‌دهد. به هرجهت هنگامی که نظم ساختار بلوری پذیرفته می‌شود(فرضیه‌ی ۶)، دو اثر بسیار مهم رخ می‌دهد که می‌تواند تعداد جابه‌جایی‌های تولید شده به وسیله‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه را تغییر دهد، این دو اثر مهم کانونی شدن[1] و کاناله شدن[2] (فرایندی که مسیر حرکت یک ذره‌ی باردار در یک جامد بلوری را تعیین می‌کند) هستند.کانونی شدن، انتقال انرژی و/یا اتم‌ها به وسیله‌ی برخوردهای رودرروی نزدیک در طول یک ردیف اتمی است. کاناله شدن، جابه‌جایی بلند دامنه‌ی اتم‌ها در طول جهت‌های باز (کانال‌ها) در یک ساختار بلوری است که در آن یک اتم به وسیله‌ی برخوردهای زودگذر و سریع با دیواره‌های یک کانال که فقط ردیف‌هایی از اتم‌ها هستند، حرکت می‌کند. هر دو فرایند می‌توانند در انتقال بلند دامنه‌ی بین‌نشین‌های ایجاد شده توسط اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه یا آبشار ایجاد شوند. هم‌چنین هردو تعداد جابه‌جایی‌های هر اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه، $\nu(T)$، را کاهش می‌دهند که از مدل ساده‌ی کینچین ـ پیس محاسبه شده است.

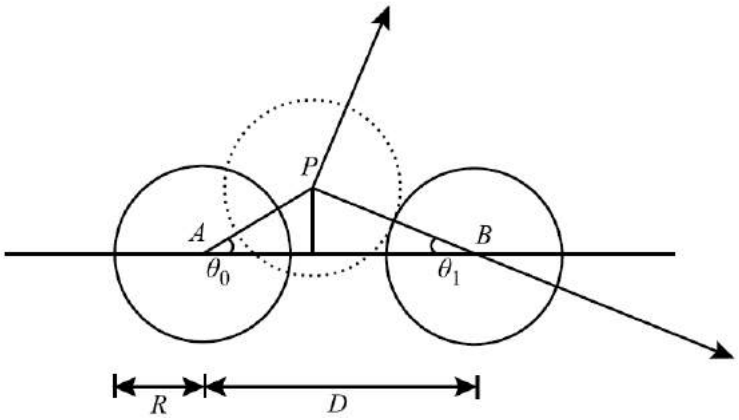
کانونی شدن

اثرات کانونی‌شدن اولین بار در وابستگی جهتی انرژی آستانه، E_d، دیده شد. برای مثال در یک شبکه‌ی fcc، جابه‌جایی‌ها در جهت‌های $\langle 100 \rangle$ و $\langle 110 \rangle$ با کم‌ترین انتقال انرژی نسبت به هر جهت بلوری رخ می‌دهد. از آن‌جایی که جهت برخوردهای اولیه تصادفی است، کانونی شدن باید برای محدوده‌ی بزرگی از زوایه‌های قطبی خارج از جهت‌های فشرده ممکن باشد. اگر برخورد رودرروی کامل برای تولید یک زنجیره‌ی برخوردی خطی مورد نیاز باشد، این پدیده اهمیت عملی کمی دارد؛ زیرا این احتمال بسیار اندک است.

1. Focusing
2. Channeling

کانونی‌شدن در طول یک ردیف اتمی می‌تواند با استفاده از تقریب کره‌ی سخت مورد تحلیل قرار گیرد. فاصله‌ی میان اتم‌ها در طول یک مسیر بلوری مشخص به وسیله‌ی D نشان داده می‌شود. شکل ۲-۱۱ دو اتم از یک چنین ردیف اتمی را نشان می دهد که در آن یک توالی برخوردی به وسیله‌ی اتمی آغاز می‌شود که در ابتدا در مرکز A قرار گرفته است. این اتم، انرژی T را دریافت می‌کند و در یک زاویه‌ی θ_0 نسبت به ردیف اتمی حرکت می‌کند. دایره‌ای که با خط‌چین نشان داده شده است موقعیت اتم در لحظه‌ی برخورد آن به اتم بعدی در ردیف اتمی را نشان می‌دهد. شعاع کره‌ی برخوردی، R، از پتانسیل بورن ـ مایر به‌دست می‌آید. فشردگی، مقداری از T را به اتم دوم منتقل می‌کند که سپس در جهت خط متصل کننده P به B در یک زاویه θ_1 نسبت به ردیف اتمی حرکت می‌کند. با توجه به معادله‌ی ۲-۱۱ می‌توان نشان داد:

$$\overline{AP}\sin\theta_0 = \overline{PB}\sin\theta_1 \ . \qquad (۵۶-۲)$$



شکل ۲-۱۱. اثر کانونی شدن ساده با فرض برخوردهای کره‌ی سخت.

اگر θ_0 و θ_1 کوچک باشند، معادله‌ی ۲-۵۶ می‌تواند به صورت زیر تقریب زده شود:

$$\overline{AP}\theta_0 \approx \overline{PB}\theta_1 \ , \qquad (۵۷-۲)$$

و اگر θ_0 و θ_1 خیلی کوچک باشند، در نتیجه:

$$\overline{AP} \approx \overline{AB} - \overline{PB} = D - 2R\,, \quad \text{and since } \overline{PB} = 2R \tag{۵۸-۲}$$

$$(D-2R)\theta_0 = 2R\theta_1\,, \tag{۵۹-۲}$$
$$\theta_0(D-2R) = \theta_1(2R)\,.$$

اگر یک عامل کانونی‌شدن به صورت زیر تعریف شود:

$$f \equiv \theta_1/\theta_0\,, \tag{۶۰-۲}$$

سپس با توجه به معادله‌ی ۲-۵۹ می‌توان نوشت:

$$f = \frac{D}{2R} - 1\,. \tag{۶۱-۲}$$

با توجه به این تعریف می‌توان نابرابری‌های زیر را نوشت:

$$\begin{aligned} &f > 1 \text{ برای}\,, \quad D > 4R \quad \text{و} \quad |\theta_0| < |\theta_1| \\ &f < 1 \text{ برای}\,, \quad D < 4R \quad \text{و} \quad |\theta_0| > |\theta_1|\,. \end{aligned} \tag{۶۲-۲}$$

با در نظر گرفتن برخوردهای بعدی، با گذشت زمان ضربان اندازه‌ی حرکت به اتم n می‌رسد، رابطه‌ی میان زاویه‌ها به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر داده می‌شود:

$$\begin{aligned} \theta_n &= f\theta_{n-1} \\ &= f^2\theta_{n-2} \\ &= f^3\theta_{n-3} \\ &\vdots \\ &\vdots \\ &= f^n\theta_0 = \left(\frac{D}{2R} - 1\right)^n \theta_0\,, \end{aligned} \tag{۶۳-۲}$$

و در پایان می‌توان نوشت:

$$\theta_n = (f)^n \theta_0 = \left(\frac{D}{2R} - 1\right)^n \theta_0 \,. \qquad (۶۴-۲)$$

آخرین رابطه نشان می‌دهد که اگر $D > 4R$ باشد، پارامتر کانونی شدن f بیش‌تر از واحد است و در نتیجه زاویه‌های θ_n در برخوردهای متوالی افزایش می‌یابد. به صورت عکس، اگر $D < 4R$ باشد، f کم‌تر از واحد است و در نتیجه زاویه‌های θ_n به سمت صفر هم گرا می‌شوند.

یک سری از شرایطی نیز وجود دارد که در آن زاویه‌ی پراکندگی θ_n بعد از برخوردهای متوالی نه هم‌گرا و نه واگرا می‌شود. این‌ها شرایطی برای کانونی شدن‌های بحرانی ($\theta_n = \theta_{n+1} = ۰۰۰$) هستند که می‌تواند به صورت زیر تعیین شود. زاویه پس‌زنی اتم B می‌تواند با اعمال قانون سینوس‌ها به مثلث APB به جهت ابتدایی اتم A مرتبط شود:

$$\frac{\sin(\pi - \theta_0 - \theta_1)}{\sin\theta_0} = \frac{D}{2R} \,, \qquad (۶۵-۲)$$

که به صورت زیر ساده می‌شود:

$$\frac{\sin(\theta_0 + \theta_1)}{\sin\theta_0} = \frac{D}{2R} \,. \qquad (۶۶-۲)$$

شرط برای کانونی شدن بحرانی به صورت $\theta_1 = \theta_0$ است. با اعمال این برابری به معادله‌ی ۲-۶۶ می‌توان نوشت:

$$\frac{\sin 2\theta_0}{\sin\theta_0} = 2\cos\theta_0 = \frac{D}{2R} \,, \qquad (۶۷-۲)$$

و

$$\cos\theta_0 = \cos\theta_c = \frac{D}{4R} \,, \qquad (۶۸-۲)$$

یا کانونی شدن هنگامی رخ می‌دهد که $\cos\theta_0 \le \frac{D}{4R}$ و

$$\cos\theta_c = \frac{D}{4R}\,. \qquad (۶۹-۲)$$

معادله‌ی ۲-۶۰ هم‌چنین نشان می‌دهد که کانونی شدن اندازه‌ی حرکت، در طول ردیف‌هایی از اتم‌ها در جهت‌های $\langle hkl\rangle$ که برای آن‌ها فاصله‌ی جداشدگی D^{hkl} کمینه است، یا جهت‌های فشرده، مطلوب است.

اگر اتم‌ها به صورتی بررسی شوند که تابع انرژی شعاعی باشند، می‌توان بیشینه‌ی انرژی ممکن برای کانونی شدن در هر زاویه‌ی برخوردی را تعیین کرد. نکته‌ی کلیدی این است که پذیرفته شود که پتانسیل بین اتم‌ها با فاصله تغییر می‌کند. انرژی کانونی شدن بحرانی، E_f^{hkl}، به عنوان انرژی‌ای تعریف می‌شود که در زیر آن $f<1$، $D<4R$ است و کانونی شدن ممکن است. در مدل کره‌ی سخت ارتباط بین انرژی جنبشی E و انرژی پتانسیل $V(r)$ برای یک برخورد رودررو به وسیله‌ی معادله‌ی ۱-۸۰ و به صورت $V(r)=\frac{1}{2}E$ داده شده است. اگر $V(r)$ در پتانسیل بورن ـ مایر تعیین شود، معادله‌ی ۱-۴۷، $V(r)=A\exp(-Br)$، سپس نتیجه می‌شود:

$$E = 2A\exp(-2R/B)\,. \qquad (۷۰-۲)$$

برای یک برخورد رودررو، $\theta_c = 0$، در نتیجه $\cos\theta_c = \frac{D}{4R} = 1$ و در نتیجه می‌توان نوشت:

$$E_{fc} = 2A\exp\left(\frac{-D}{2B}\right)\,. \qquad (۷۱-۲)$$

و به این معنی است که هر زاویه‌ای بیش‌تر از صفر برای $E \ge\!> E_c$ منجر به تمرکز زدایی (حالت برعکس کانونی شدن) خواهد شد، یا آن‌که کانونی شدن در انرژی E_{fc} فقط می‌تواند در $\theta = 0^{\circ}$ رخ دهد. سپس به وضوح زاویه‌ی بحرانی کانونی شدن وابسته به انرژی پرتابه است. رابطه‌ی بین زاویه و انرژی به وسیله‌ی نوشتن عبارتی برای E_{fc} بر حسب D بیان می‌شود:

$$D = 2B\ln\left(\frac{2A}{E_{\mathrm{fc}}}\right) . \qquad (۷۲-۲)$$

اکنون، برای هر اتم با انرژی T و یک فاصله جداشدگی $4R$ می‌توان نوشت:

$$4R = 2B\ln\left(\frac{2A}{T}\right) . \qquad (۷۳-۲)$$

با ترکیب این معادلات با یک‌دیگر:

$$\frac{D}{4R} = \cos\theta_{\mathrm{c}} = \frac{\ln(2A/E_{\mathrm{fc}})}{\ln(2A/T)} , \quad T < E_{\mathrm{fc}} . \qquad (۷۴-۲)$$

قابل ذکر است که شرایط بحرانی کانونی شدن می‌تواند به دو صورت زیر بیان شود:

۱. $E\mathrm{fc} = 2A\exp(-\frac{D}{2B})$: این حالت، انرژی E_{fc} را تعیین می‌کند که برای آن کانونی شدن برای یک برخورد رودررو (θ_{c} =0) رخ می‌دهد.

۲. $\cos\theta_{\mathrm{c}} = \frac{\mathrm{In}(2A/E_{\mathrm{fc}})}{\mathrm{In}(2A/T)}$: این بیشینه‌ی انحراف زاویه‌ای از یک برخورد رودررو θ_{c} را بیان می‌کند که در آن یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی T می‌تواند یک توالی کانونی شدن را آغاز کند.

۳. از عبارت اول باید مشخص شود که کانونی شدن یک تابعی از جهت‌های بلورشناسی است؛ زیرا D یک تابعی از ساختار بلوری است. یعنی:

$$E_{\mathrm{f}}^{hkl} = 2A\exp\left(\frac{-D^{hkl}}{2B}\right) . \qquad (۷۵-۲)$$

برای مثال در یک شبکه‌ی fcc می‌توان نوشت:

$$D^{\langle 100\rangle} = a$$
$$D^{\langle 110\rangle} = \frac{\sqrt{2}}{2}a$$
$$D^{\langle 111\rangle} = \sqrt{3}a$$

بنابراین از آن‌جایی که $D^{\langle 111\rangle} < D^{\langle 100\rangle} < D^{\langle 110\rangle}$ است در نتیجه می‌توان نوشت،

$$E_{\mathrm{f}}^{\langle 110\rangle} > E_{\mathrm{f}}^{\langle 100\rangle} > E_{\mathrm{f}}^{\langle 111\rangle}.$$

مقادیر نمونه‌واری برای E_{f}، برای $E_{\mathrm{f}}^{\langle 110\rangle}$ در مس ۸۰ eV و هم‌چنین برای طلا ۶۰۰ eV گزارش شده است. در تمام موارد E_{f} از انرژی اولیه‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه کم‌تر است.

با توجه به بحث‌های قبلی باید آشکار شده باشد که کانونی شدن فقط هنگامی قابل اعمال است که یک اتم پراکنده شده در درون یک زاویه‌ی θ_{c} از یک ردیف اتمی باشد. سپس می‌تواند یک توالی کانونی نتیجه شود. بنابراین تعیین احتمالی که جهت اولیه‌ی یک اتم ضربه‌خورده در درون یک مخروطی با رأس θ_{c} در اطراف یک ردیف اتمی باشد، بسیار حایز اهمیت است. برای یک جهت شروع تصادفی، احتمال تولید یک توالی برخوردی کانونی در انرژی T برابر است با:

$$P_{\mathrm{f}}(T) = \frac{\theta_{\mathrm{c}}^2}{4}\,. \qquad (۷۶-۲)$$

با بسط $\cos\theta_{\mathrm{c}}$ در معادله‌ی ۲-۶۹ برای θ_{c} کوچک نتیجه می‌دهد: $1-\frac{1}{2}\theta_c^2 \approx \frac{D}{4R}$. با جایگذاری از معادله‌ی ۲-۷۵ نتیجه می‌دهد:

$$P_{\mathrm{f}}(T) = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{D}{4R}\right) \qquad (۷۷-۲)$$

یا

$$P_{\mathrm{f}}(T) = \frac{1}{2}\left[1 - \frac{\ln(2A/E_{\mathrm{fc}})}{\ln(2A/T)}\right] = \frac{1}{2}\left[\frac{\ln(2T/E_{\mathrm{fc}})}{\ln(E_{\mathrm{fc}}/2A) + \ln(T/E_{\mathrm{fc}})}\right]. \qquad (۷۸-۲)$$

از آن‌جایی که $E_{fc}/2A >> ۱$ و $T/E_{fc} \sim ۱$ است، در نتیجه:

$$P_f(T) = \frac{1}{2}\frac{\ln(T/E_{fc})}{\ln(E_{fc}/A)} \quad T < E_{fc} \qquad (۷۹-۲)$$
$$= 0 \quad T > E_{fc}$$

برای جهت‌های هم ارز n در بلور:

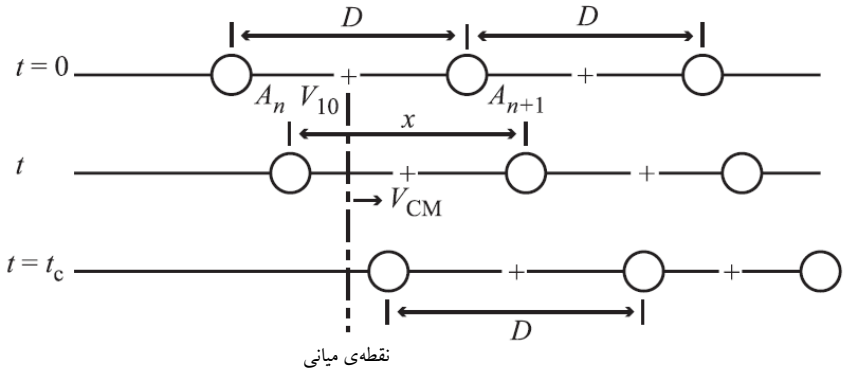
$$P_f(T) = n\frac{\ln(T/E_c)}{\ln(E_c/A)} \,. \qquad (۸۰-۲)$$

برای مثال، در مس $E_{fc} \sim ۸۰$ eV و برای A~ ۲۰۰۰۰ eV، $P_f(۶۰\text{eV}) \sim ۰/۰۲۶n$ است. برای $n = ۱۲$، $P_f \sim ۰/۳$ یا ۳۰٪ است. کانونی شدن به انتقال انرژی به وسیله‌ی برخوردهای کشسان در طول یک خط لیکن بدون همراهی انتقال جرم اشاره دارد. در ادامه درباره‌ی برخوردهای جابه‌جاکننده بحث می‌شود که منجر به انتقال انرژی و جرم می‌شوند.

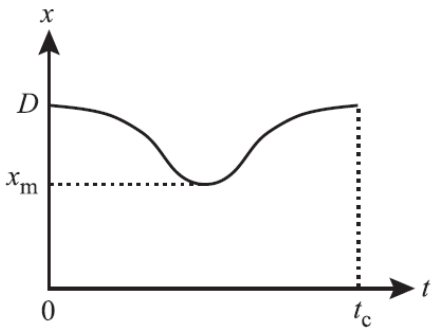
برخوردهای جابه‌جاساز

علاوه بر انتقال انرژی، جرم نیز می‌تواند به وسیله‌ی جایگزینی اتم ضربه‌خورده با اتم ضربه‌زننده منتقل شود، اگر مرکز اتم اول به خارج از نقطه‌ی میانی دو اتم زمانی که در شبکه اقامت داشته‌اند، حرکت کند. در تحلیل کانونی شدن، برخوردها به صورت کره‌ی سخت فرض می‌شوند. به هر حال اگر فرض شود که یک نرمی برای اتم وجود دارد، سه حالت ممکن است رخ دهد:

۱. مدل کره‌ی سخت زاویه‌ی پراکندگی را برای یک پارامتر فشردگی مشخص بیش از اندازه تخمین می‌زند و از آن‌رو اندازه‌ی کانونی شدن باید بیش از اندازه تقریب زده شود.
۲. **اتم‌ها به صورت ردیفی هستند که آشفتگی ناشی از اتم فرودی را قبل از رسیدن آن دریافت کرده و شروع به حرکت می‌کنند. زمانی‌که D کاهش می‌یابد، کانونی شدن افزایش می‌یابد.**
۳. جایگزینی ممکن می‌شود.



(الف)



(ب)

شکل۲-۱۲. برخوردهای رودررو در یک حلقه‌ی کانونی شدن هنگامی که پتانسیل برهم‌کنش به صورت پیوسته در طول برخورد عمل کند. (الف) موقعیت اتم‌ها در طول برخورد آغازشده به وسیله‌ی اتم در سمت چپ.
(ب) فاصله‌ی اتم‌های A_n و A_{n+1} در طول برخورد [۵].

با برگشت به شکل ۲-۱۲، هم‌چنان که برخورد پیش می‌رود، فاصله‌ی x میان اتم‌های A_n و A_{n+1} به صورت پیوسته کاهش می یابد. سرعت مرکز جرم (CM) برابر است با:

$$V_{CM} = \left(\frac{M_1}{M_1+M_2}\right) v_1 + \left(\frac{M_2}{M_1+M_2}\right) v_2 \ ,$$

که در این رابطه‌ی v_1 و v_{2} سرعت‌ها در سیستم آزمایشگاهی هستند. سرعت نسبی به صورت $g = v_1 - v_2$ تعریف می‌شود و می‌توان نوشت:

$$v_1 = V_{\mathrm{CM}} + \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2}\right) g$$
$$v_2 = V_{\mathrm{CM}} + \left(\frac{M_1}{M_1 + M_2}\right) g ,$$

و انرژی جنبشی دو ذره برابر است با:

$$KE = 1/2M_1 v_1^2 + 1/2M_2 v_2^2 ,$$

و برحسب g و V_{CM} می‌توان نوشت:

$$KE = 1/2(M_1 + M_2)V_{CM}^2 + 1/2\mu g^2 ,$$

که در این رابطه μ جرم کاهش یافته است و برابر با $(\frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2})$است. انرژی جنبشی کلی به دو بخش تقسیم می‌شود که یکی ناشی از حرکت سیستم و دیگری ناشی از حرکت نسبی دو ذره است. بقای انرژی کل به صورت $E_r + V(x) = E_{r0}$ تعیین می‌شود که در این رابطه‌ی $V(x)$ انرژی پتانسیل در یک فاصله‌ی جداشدگی رودرروی x است، E_{r0} انرژی جنبشی نسبی در فاصله‌ی نامحدود (ابتدایی) است و E_r انرژی جنبشی نسبی در هر نقطه است. با بازنویسی انرژی جنبشی برحسب g نتیجه می‌شود که:

$$\frac{1}{2}\mu g^2 + V(x) = \frac{1}{2}\mu g_0^2$$

و

$$g_0 = v_{10} ,$$

که g_0 سرعت اولیه است. این معادله باید از تحلیل‌های ابتدایی در فصل ۱، قسمت ۱-۲-۲ قابل تشخیص باشد. یادآوری می‌شود که در $x = x_{\min}$، $V(x_{min}) = 1/2\mu g_0^2$ است و برای $M_1 = M_2$، $V = E/2$ و $g_0 = u_{10}$است.

هم‌چنین فرض خواهد شد که انرژی برهم‌کنش در فاصله‌ی جداشدگی ابتدایی برابر با $V(D) << \frac{1}{2}\mu g_0^2$ است. نرخ زمانی تغییر فاصله‌ی جداشدگی برابر با سرعت نسبی است:

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = -g\,. \tag{۸۱-۲}$$

با در نظر گرفتن زمان برخورد به صورت دو برابر زمان مورد نیاز برای رسیدن به فاصله‌ی نزدیک‌ترین مسیر برخورد می‌توان نوشت:

$$t_c = -2\int_D^{x_m} \frac{\mathrm{d}x}{g} = -2\int_{V(D)}^{V(x_m)} \frac{\mathrm{d}V}{g\,\mathrm{d}V/\mathrm{d}x}\,, \tag{۸۲-۲}$$

که در این رابطه x_m فاصله‌ی نزدیک‌ترین مسیر برخورد است.

از آن‌جایی که $V(x) = A\exp(-\frac{x}{B})$ است، در نتیجه:

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = -\frac{A}{B}\exp(-x/B) = -\frac{V}{B}\,, \tag{۸۳-۲}$$

و

$$\begin{aligned} g &= \left\{\left[\frac{1}{2}\mu g_0^2 - V(x)\right]\frac{4}{M}\right\}^{1/2} \\ &= \left\{\left[\frac{E}{2} - V\right]\frac{4}{M}\right\}^{1/2} \\ &= 2\left\{\frac{E}{2M} - \frac{V}{M}\right\}^{1/2}\,, \end{aligned} \tag{۸۴-۲}$$

که برای اتم‌های مشابه $\mu = \frac{M}{2}$ و $\frac{1}{2}\mu g_o^2 = \frac{1}{4}Mv_{10}^2 = \frac{E}{2}$ هستند. با جایگذاری معادله‌های ۲-۸۳ و ۲-۸۴ در معادله‌ی ۲-۸۲ می‌توان نوشت:

$$t_c = B\left(\frac{2M}{E}\right)^{1/2}\int_{V(D)}^{E/2}\frac{dV}{V(1-2V/E)^{1/2}} \qquad (۸۵-۲)$$

$$= 2B\left(\frac{2M}{E}\right)^{1/2}\tanh^{-1}\left[1-\frac{2V(D)}{E}\right]^{1/2}. \qquad (۸۶-۲)$$

لازم به ذکر است که تعریف یک شعاع کره‌ی سخت برای حد بالایی مورد استفاده قرار گرفته است، به عبارت دیگر x_m برابر با $2R(E)$ گرفته می‌شود. برای $\frac{V(D)}{E} << ۱$،

$$t_c = B\left(\frac{2M}{E}\right)^{1/2}\ln\left[\frac{2E}{V(D)}\right]. \qquad (۸۷-۲)$$

از آن‌جایی که سرعت مرکز جرم برابر $\frac{u_{10}}{2} = (\frac{E}{2M})^{1/2}$ است، فاصله‌ی حرکت به وسیله‌ی مرکز جرم در طول زمان برخورد، t_c، برابر است با:

$$x = t_c\left(\frac{E}{2M}\right)^{1/2}. \qquad (۸۸-۲)$$

اگر $x > D/2$ باشد، اتم A_n در سمت راست نقطه‌ی میانی ابتدایی قرار گرفته و جایگزینی رخ می‌دهد و A_n موقعیت شبکه‌ی اشغال شده توسط اتم A_{n+1} را اشغال می‌کند. با ارتباط دادن فاصله‌ی X

به انرژی با جایگزینی t_c از معادله‌ی ۲-۸۷ در معادله‌ی ۲-۸۸، معادله‌ی ۲- ۸۹ به‌دست می‌آید:

$$\frac{x}{B} = \ln\left(\frac{2E_r}{V(D)}\right) . \qquad (۸۹-۲)$$

برای $x = \frac{D}{2}$:

$$\exp\left(\frac{D}{2B}\right) = \frac{2E_r}{A\exp(-D/B)} ,$$

و انرژی جایگزینی برابر است با:

$$E_r = \frac{A}{2}\exp\left(\frac{-D}{2B}\right) . \qquad (۹۰-۲)$$

بر طبق بحث‌های بالا و با مقایسه‌ی معادله‌ی ۲-۷۱، جایگزینی کانونی شده هنگامی ممکن است که انرژی منتقل شده در زنجیره‌ی برخورد، در حد مطلوب باشد:

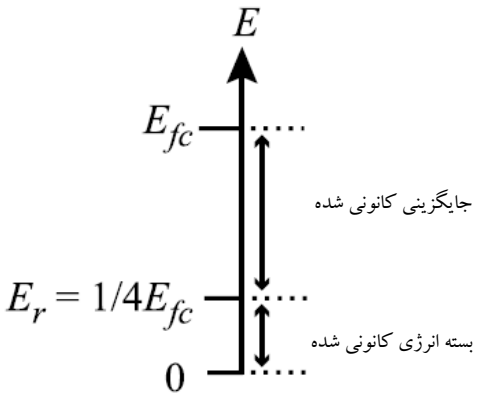
$$E > E_r = \frac{1}{2}A\exp\left(\frac{-D}{2B}\right) = \frac{1}{4}E_{fc} . \qquad (۹۱-۲)$$

بنابراین جایگزینی کانونی شده به‌دست می‌آید، یا

$E_{fc}/4 < T < E_{fc}$: جایگزینی کانونی شده

$T < E_{fc}/4$: اندازه حرکت کانونی شده / بسته‌ی انرژی.

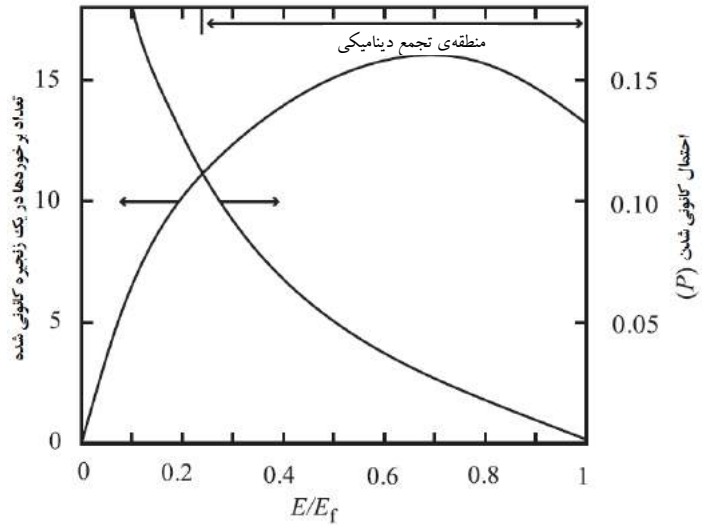
ازاین‌رو انتقال جرم هنگامی که E بین $E_r = E_{fc}/4$ و E_{fc} باشد، رخ می‌دهد که با توجه به مثال‌های قبلی تقریباً مشابه یا اندکی کم‌تر از انرژی جابه‌جایی، E_d، است. شکل ۲-۱۳ نشان می‌دهد که برخوردهای جایگزین کننده و کانونی شده برروی طیف انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه قرار می‌گیرند.



شکل۲-۱۳. مقیاس انرژی برای انتقال انرژی کانونی شده و توالی جایگزینی کانونی شده.

کانونی شدن کمکی

در تحلیل‌های کانونی شدن، هیچ‌گونه محاسبه‌ای برای اثرات اتم‌های مجاور یا همسایه‌های نزدیک وجود ندارد. به علت دافعه‌ی اتم‌های متحرک، آن‌ها تمایل دارند که به صورت یک لنز عمل کرده و در فرایند کانونی شدن کمک کنند. شبکه‌ی نتیجه شده از این کانونی شدن کمکی، انرژی بحرانی برای کانونی شدن، E_{fc} را افزایش می‌دهد و رخداد کانونی شدن را محتمل‌تر می‌کند. دوماً، حلقه‌ی اتم‌های مجاور یک رخداد کانونی شدن نیز متمایل است که انرژی را به وسیله‌ی برخوردهای زودگذر تلف کند. این اثر به وسیله‌ی حرکت نوسانی حلقه‌های زیاد شده که می‌تواند به وسیله‌ی دما افزایش یابد. طول زنجیره‌ی جایگزینی و تعداد برخوردها در حلقه با افزایش دما کاهش می‌یابد. افزایش حرکت اتم‌های مجاور، اتلاف انرژی از توالی برخوردها را افزایش می‌دهد. اثرات دیگر که توالی را تخریب می‌کند، عناصر آلیاژی و عیوبی مانند بین‌نشین‌ها، جاهای خالی و نابجایی‌ها هستند. شکل ۲-۱۴ تعداد برخوردها در یک زنجیره‌ی کانونی شده با انرژی اولیه E در مس و در دمای اتاق را به همراه احتمال کانونی شدن نشان می‌دهد. جدول ۲-۳ که از چادرتون [۱۸] اقتباس شده است، انرژی‌های کانون شدن و جایگزینی را در جهت‌های مختلف در شبکه‌های fcc و bcc را که به وسیله‌ی اتم‌های مجاور تعدیل شده است، (کانونی شدن کمکی) نشان می‌دهد. لازم به یادآوری است در تمام موارد، انرژی‌های کانونی شدن هنگامی که اتم‌های مجاور در فرایند کانونی شدن کمک می‌کنند، بزرگ‌تر است.



شکل ۲-۱۴. طول و احتمال زنجیره‌ی برخورد در یک توالی برخوردی ⟨110⟩در مس در دمای اتاق[۵].

جدول ۲-۳ الف. معادلاتی برای انرژی‌های کانونی شدن (E_{fc}^{hkl}) در شبکه‌های fcc و bcc [۱۸].

$\langle hkl \rangle$	FCC	BCC
$\langle 100 \rangle$	$\frac{A(D^{110})^2}{2D^2}\exp\left(-\frac{D^{110}}{4B}\right)^{\uparrow}$	$2A\exp\left(-\frac{D^{111}}{B\sqrt{3}}\right)$
$\langle 110 \rangle$	$2A\exp\left(-\frac{D^{110}}{2B}\right)$	$\frac{4\sqrt{2}(D^{111})^2A}{15B^2}\exp\left(-\frac{D^{111}\sqrt{5}}{2\sqrt{3}B}\right)^{\uparrow\uparrow}$
$\langle 111 \rangle$	$\left(\frac{6}{19}\right)^{1/2}\frac{A(D^{110})^2A}{D^2}\exp\left(-\frac{D^{110}}{2B}\left(\frac{19}{12}\right)^{1/2}\right)^{\uparrow}$	$2A\exp\left(-\frac{D^{111}}{2B}\right)$

جدول ۲-۳ ب. معادلاتی برای انرژی‌های جایگزینی (E_{fc}^{hkl}) در شبکه‌های fcc و bcc [۱۸].

$\langle hkl \rangle$	FCC	BCC
$\langle 100 \rangle$	$5A\exp\left(-\frac{D^{110}}{D\sqrt{2}}\right)$	$\frac{A}{2}\exp\left(-\frac{D^{100}}{2B}\right)$
$\langle 110 \rangle$	$\frac{A}{2}\exp\left(-\frac{D^{110}}{2B}\right)$	$3A\exp\left(-\frac{D^{110}}{2B}\right)$
$\langle 111 \rangle$	$4A\exp\left(-\frac{D^{110}}{B\sqrt{3}}\right)$	$2A\exp\left(-\frac{D^{111}}{2B}\right)$

$^{\uparrow}$ فقط در صفحه (110)

$^{\uparrow\uparrow}$ کانونی شدن کمکی

کاناله شدن

کاناله شدن، جابه‌جایی طولانی اتم‌های ضربه زننده پرانرژی در عمق یک جهت باز در شبکه‌ی بلوری است. شکل ۲- ۱۵ الف یک شمایی از یک مارپیچ اتمی در حال حرکت به سمت داخل یک کانال باز در یک شبکه‌ی بلوری و شکل ۲-۱۵ب کانال‌های محوری و مسطح در طول جهت‌های بلورشناسی خاص در شبکه fcc را نشان می‌دهد. دیواره‌های دالان‌ها در برگیرنده‌ی ردیف‌های اتمی هستند. اگر ردیف‌های پیرامون کانال فشرده باشند، نیروهای دافعه مجزا بین اتم‌ها به سمت بیرون گسترده شده و به نظر می‌رسد که اتم در حال حرکت در طول یک تیوپ استوانه‌ای با شعاع R_{ch} است. مقدار R_{ch} می‌تواند به وسیله‌ی تساوی πR_{ch}^2 با ناحیه‌ی سطح مقطع کانال تعیین شود. اگر دامنه‌ی نوسان‌های جانبی اتم متحرک در مقایسه با R_{ch} کوچک باشد، پتانسیلی که به وسیله دیوار کانال فراهم می‌شود تقریباً در جهت عرضی (متقاطع) محور کانال، سهمی‌وار است.

برهم‌کنش اتم متحرک با دیوار کانال (شکل ۲-۱۶) می‌تواند به وسیله‌ی یک پتانسیل هارمونیک کانال توضیح داده شود:

$$V_{ch}(r) = kr\,, \tag{۹۲-۲}$$

که r فاصله‌ی جانبی از محور است و k ثابت نیرو است که به تابع پتانسیل توضیح دهنده دافعه‌ی اتم ـ اتم و اندازه‌ی R_{ch} کانال بستگی دارد. با استفاده از پتانسیل بورن ـ مایر برای توضیح برهم‌کنش‌های اتم ـ اتم در این منطقه‌ی انرژی، k برابر است با:

$$k = \frac{A}{DB}\left(\frac{2\pi R_{ch}}{B}\right)\exp\left(\frac{-R_{ch}}{B}\right)\,, \tag{۹۳-۲}$$

که D فاصله‌ی اتمی در ردیف‌های تشکیل دهنده‌ی کانال‌ها است. اتم‌های متحرک با یک مولفه‌ی سرعتی در طول محور کانال (شکل ۲-۱۶)، وارد کانال می‌شوند که این سرعت به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

$$V_{z0} = \left(\frac{2E}{M}\right)^{1/2}\cos\theta_0\,, \tag{۹۴-۲}$$

که در این رابطه $V_o = (\frac{2E}{M})^{\frac{1}{2}}$است. سرعت محوری به تدریج به وسیله‌ی اتلاف انرژی غیرکشسان با ابر الکترونی کاهش می‌یابد. اتم متحرک، حرکت هماهنگ ساده‌ای را در جهت r و با دوره تناوب τ متحمل می‌شود که به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر تعیین می‌شود:

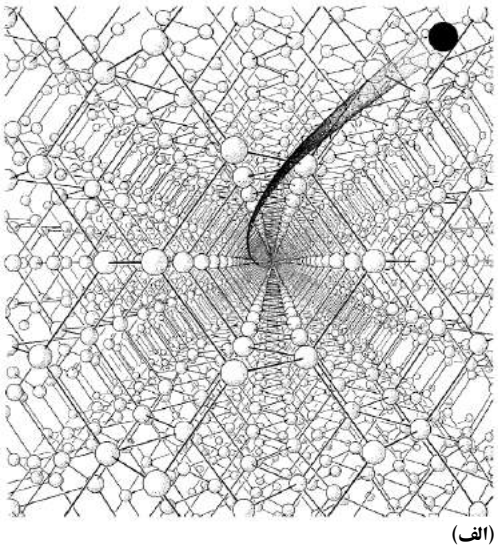
$$\tau = 2\pi \left(\frac{M}{2k}\right)^{1/2} \qquad (۹۵-۲)$$

و طول موج اولیه نوسان برای $\theta_0 = 0$ برابر با τV_{z0} است یا:

$$\lambda = 2\pi \left(\frac{E}{k}\right)^{1/2} . \qquad (۹۶-۲)$$

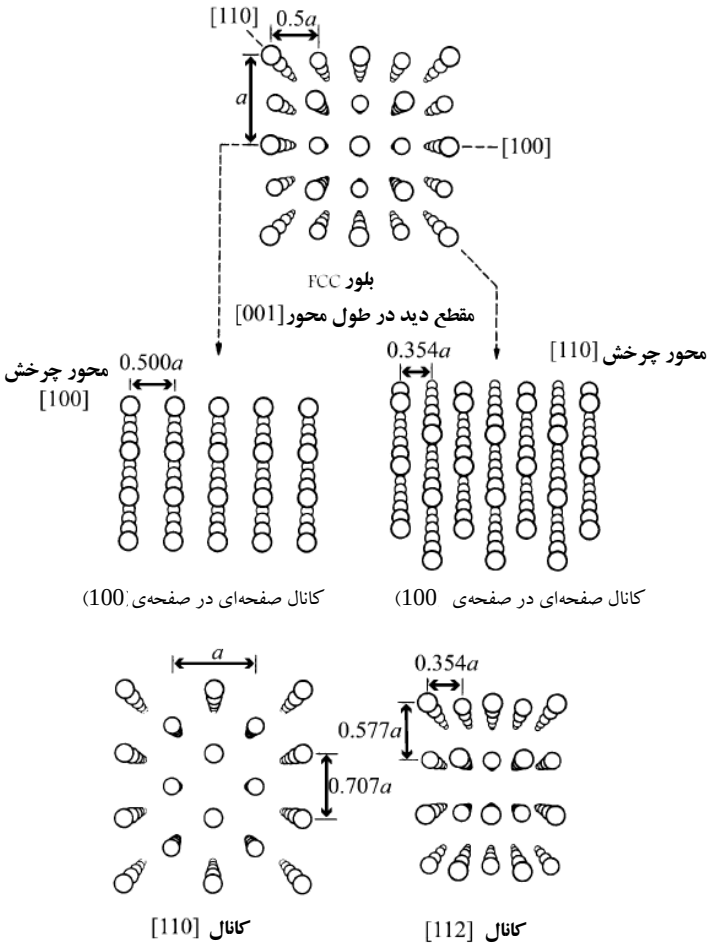
دامنه‌ی نوسان جانبی به وسیله‌ی زاویه‌ی پرتابه،θ_0 و انرژی جنبشی اتم پرتاب شده، E تعیین می‌شود. مولفه‌یr سرعت اتم هم‌چنان که اتم وارد کانال می‌شود، برابر است با:

$$V_{r0} = \left(\frac{2E}{M}\right)^{1/2} \sin\theta_0 \cong \left(\frac{2E}{M}\right)^{1/2} \theta_0 . \qquad (۹۷-۲)$$



(الف)

شکل ۲-۱۵ الف. شماتیکی از یک اتم در حال حرکت در یک کانال در یک شبکه‌ی بلوری[۱۹].



(ب)

شکل ۲-۱۵ب. کانال‌های محوری و صفحه‌ای در شبکه‌ی fcc [۲۰].

بنابراین مولفه‌ی شعاعی انرژی جنبشی $E\theta_o^2$ است که برابر با انرژی پتانسیل در اندازه‌ی عرضی، $kr_{\max}^2$ است. تساوی انرژی‌های جنبشی و پتانسیل و حل برای $r_{\max}$ عبارت زیر را نتیجه می‌دهد:
و خط سیر اتم کاناله شده برابر است با:

$$r_{\max} = \left(\frac{E}{k}\right)^{1/2} \theta_0 \,, \qquad (۹۸-۲)$$

(۹۹-۲)

$$r = \theta_0 \left(\frac{E}{k}\right)^{1/2} \sin\left[\left(\frac{k}{E}\right)^{1/2} Z\right] .$$

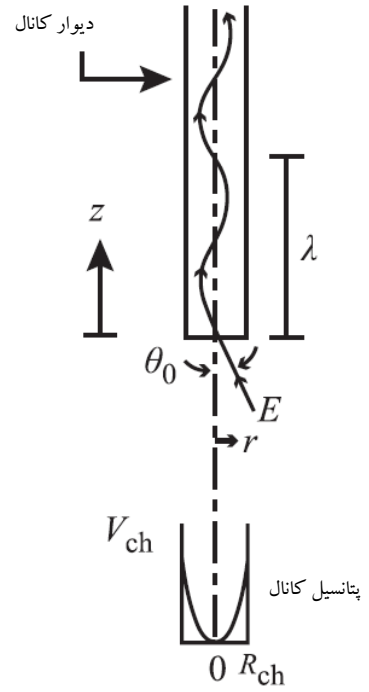
زاویه‌ی بحرانی که کاناله شدن در خارج از آن نمی‌تواند رخ دهد، θ_{ch}، با تساوی اندازه‌ی عرضی، r_{max}، و شعاع کانال، R_{ch}، حاصل می‌شود:

(۱۰۰-۲)

$$\theta_{ch} = R_{ch} \left(\frac{k}{E}\right)^{1/2} .$$

قابل ذکر است، همان‌طوری که انتظار می‌رود، θ_{ch} با افزایش E، کاهش می‌یابد. هنگامی که مسیر متوسط آزاد میان برخوردها در حدود چند فاصله اتمی است، برخوردهای زاویه‌ی بزرگ محتمل‌تر هستند و کاناله شدن ناپدید می‌شود. زمانی که باید یک اتم به کانال برخورد کند لیکن هیچ اتمی در نزدیک محور کانال وجود ندارد، تعیین احتمال کاناله شدن دشوار است. احتمالاً رخداد، با برخورد برروی یک اتم تشکیل دهنده دیواره‌ی کانال شروع می‌شود. اگر زاویه‌ی ورودی به اندازه‌ی کافی کوچک باشد، کاناله شدن آغاز می‌شود.

هیچ‌گونه حد بالایی از انرژی برای کاناله شدن وجود ندارد. در عوض، θ_{ch} فقط هنگامی که E افزایش می‌یابد، کوچک‌تر می‌شود. کم‌ترین انرژی کاناله شدن هنگامی که طول موج تقریباً برابر با nD یا چند فاصله‌ی اتمی ($n \sim ۲$) باشد، رخ می دهد. **در اصل تشدید بین تکانه‌های ناشی از دیواره‌های کانال‌ها و نوسانات عرضی گسترش می‌یابد.** خط سیر در یک برخورد شدید به پایان می‌رسد. یادآوری می‌شود که این رفتار فقط برای $\lambda << D$ صادق است. با حل E در معادله‌ی ۲-۹۶ و در نظر گرفتن $\lambda = 2D$، $E_{ch} \sim 1/kD^{۲}$ نتیجه می‌شود. برای مس E_{ch} در حدود ۳۰۰ eV است. E_{ch} برای جرم‌های بزرگ‌تر، بیش‌تر است؛ زیرا k با افزایش جرم افزایش می‌یابد. کاناله شدن یک پدیده‌ی انرژی بالا است و برای اتم‌های سبک قابل توجه است درحالی‌که کانونی شدن یک پدیده‌ی انرژی پایین است و برای اتم‌های سنگین بسیار حایز اهمیت است.



اثر کانونی شدن و کاناله شدن برروی جابه‌جایی‌ها

احتمال یک اثر بلوری، تابعی از انرژی پس‌زنی است. $P(T)$ برای P_{f} یا P_{ch} استفاده می‌شود، لیکن از آن‌جایی که $E_{\mathrm{f}} \sim ۱۰۰$ eV است، P_{f} کاملاً کوچک است. معادله‌ی حاکم بر اثرات آبشاری می‌تواند برای محاسبه‌ی اثرات بلوری با تغییر جزیی معادله‌ی ۲-۱۴ اصلاح شود:

$$\nu(T) = P(T) + [1 - P(T)] \left[\frac{2E_{\mathrm{d}}}{T} + \frac{2}{T} \int_{2E_{\mathrm{d}}}^{T} \nu(\varepsilon)\, \mathrm{d}\varepsilon \right] . \qquad (۲\text{-}۱۰۱)$$

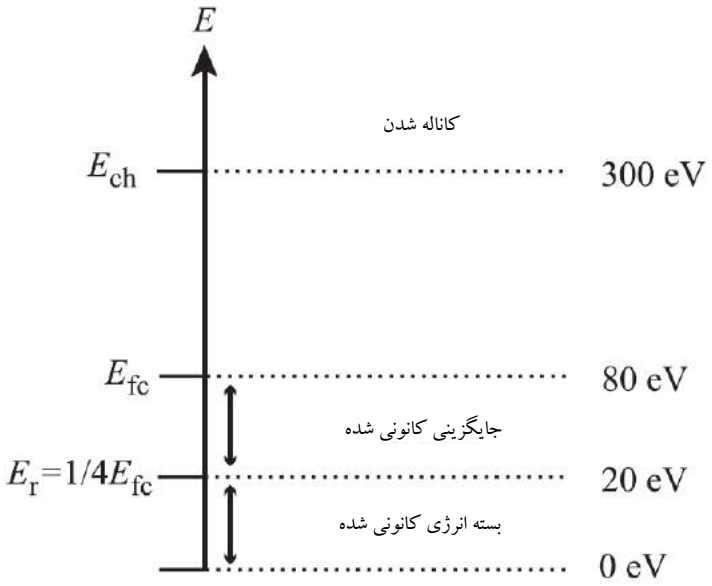
عبارت اول در سمت راست معادله‌ی ۲-۱۰۱ اتم جابه‌جا شده تکی را نشان می‌دهد که اگر اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه در برخورد ابتدایی کاناله یا کانونی شود، نتیجه می‌شود. عبارت دوم تعداد جابه‌جایی‌های ایجاد شده به وسیله‌ی یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه را مشخص می‌کند. که یک

جابه‌جایی معمولی در برخورد اول ایجاد می‌کند. با فرض $P \neq P(T)$، معادله‌ی ۲-۱۰۱ با توجه به T مشتق‌گیری می‌شود و در نتیجه:

$$T\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}t} = (1-2P)\nu + P\,. \qquad (۲\text{-}۱۰۲)$$

با انتگرال‌گیری از این معادله می‌توان نوشت:

$$\nu(T) = \frac{CT^{(1-2P)} - P}{1-2P} \qquad (۲\text{-}۱۰۳)$$



شکل ۲-۱۷. مقیاس انرژی نشان دهنده‌ی انتقال انرژی کانونی شده، توالی جایگزینی کانونی شده و کاناله شدن.

و ثابت C می‌تواند با جایگذاری در معادله‌ی ۲-۸۲ محاسبه شود:

$$C = \frac{1-P}{(2E_{\mathrm{d}})^{(1-2P)}}\,,$$

و با حل نهایی معادله‌ی ۲-۱۰۴ نتیجه می‌شود که:

$$\nu(T) = \frac{1-P}{1-2P}\left(\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\right)^{(1-2P)} - \frac{P}{1-2P}\,. \qquad (۱۰۴-۲)$$

برای P کوچک، $\nu(T)$ می‌تواند به صورت زیر تقریب زده شود:

$$\nu(T) = \left(\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\right)^{(1-2P)}\,. \qquad (۱۰۵-۲)$$

باید ذکر شود که مهم‌ترین اثر بلوری، کاناله شدن است که در انرژی‌های بالا حایز اهمیت است. برای مثال، برای P = ٪۷، یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی ۱۰ keV در آهن، ۱۰۰ جابه‌جایی یا در حدود نصف مقدار با $P = 0$ را تولید می‌کند. شکل ۲-۱۷ نشان می‌دهد که کاناله شدن در مقیاس انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه رخ می‌دهد. قابل ذکر است که کاناله شدن یک پدیده‌ی پرانرژی است و نیز یک فاصله‌ای میان انرژی جایگزینی، که در زیر آن جایگزینی‌ها یا انتقال انرژی کانونی شده رخ می‌دهد، و انرژی کاناله شدن، که بالای آن کاناله شدن رخ می‌دهد، وجود دارد. با تعیین مدل K-P برای جابه‌جایی و اصلاحات مختلف به این مدل اساسی، اکنون می‌توان تعداد اتم‌های جابه‌جا شده را تعیین کرد.

۲-۳ سطح مقطع جابه‌جایی

در این قسمت برای تعریف سطح مقطع جابه‌جایی از نتایج به‌دست آمده در قسمت‌های قبل استفاده می‌شود به‌طوری‌که:

$$\sigma_{\mathrm{D}}(E_{\mathrm{i}}) = \int_{\check{T}}^{\hat{T}} \nu(T)\sigma(E_{\mathrm{i}},Q_j,T)\,\mathrm{d}T\,, \qquad (۱۰۶-۲)$$

که در این رابطه $\nu(T)$ تعداد جابه‌جایی‌های ایجاد شده به وسیله‌ی یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی T است و $\sigma(E_{\mathrm{i}},Q_{\mathrm{j}},T)$ شکل کلی سطح مقطع انتقال انرژی است و $\check{T}$ و $\hat{T}$ کم‌ترین و بیش‌ترین انرژی‌های انتقالی هستند. این کمیت در ابتدا در معادله‌ی ۲-۲ نشان داده شد و تعداد میانگین جابه‌جایی‌های تولید شده به وسیله‌ی یک نوترون ورودی با انرژی E_{i} را مشخص می‌کند. می‌توان این

عبارت را به مناطق مختلفی از پراکندگی به منظور تعیین سهم اختصاصی آن‌ها از تعداد کل جابه‌جایی‌ها اعمال کرد. در ابتدا باید با استفاده از نتیجه‌ی ابتدایی K-P، $\sigma_D(E_i)$ را برای انواع مختلفی از برهم‌کنش‌ها تعیین کرد و سپس به قبل برگشت و اصلاحات را اضافه کرد.

۲-۳-۱ پراکندگی کشسان

$\sigma_s(E_i,T)$ برای پراکندگی کشسان را در نظر بگیرید. از معادله‌ی ۱-۱۹:

$$\sigma_s(E_i,T)=\frac{4\pi}{\gamma E_i}\sigma_s(E_i,\phi)\ .$$

در مورد پراکندگی همسان‌گرد:

$$\sigma_s(E_i,\phi)=\frac{\sigma_s(E_i)}{4\pi}\ ;\quad \sigma_s(E_i,T)=\frac{\sigma_s(E_i)}{\gamma E_i}\ ,$$

بنابراین:

$$\sigma_{Ds}(E_i)=\frac{\sigma_s(E_i)}{\gamma E_i}\int_{E_d}^{\gamma E_i}\nu(T)\,dT\ . \qquad (۱۰۷-۲)$$

برای آن‌که پراکندگی کشسان ناهمسان‌گرد در سیستم‌ها همانند راکتورهای سریع مورد بررسی قرار گیرد، وابستگی زاویه‌ای سطح مقطع پراکندگی کشسان می‌تواند به صورت یک سری لیگاندری چندجمله‌ای[1] نوشته شود:

(۱۰۸-۲)

$$\sigma_s(E_i,\phi)=\frac{\sigma_s(E_i)}{4\pi}\sum_{\ell=0}^{\infty}a_\ell(E_i)P_\ell(\cos\phi)\ ,$$

1. Legendre polynomials

که $\sigma_s(E_i)$ سطح مقطع پراکندگی کشسان کلی برای نوترون‌های فرودی با انرژی E_i، است و P_l، l اُمین چندجمله‌ای لیگاندر است و مقادیر a_l ضرایب وابستگی انرژی بسط سطح مقطع هستند. در مواجه با انرژی‌های نوترونی در رآکتورهای سریع یا حرارتی، فقط کافی است که دو عبارت اول باقی بماند، $l = 0$ و $l = 1$، از آن‌رو $P_0 = 1$ و $P_1 = \cos\phi$:

$$\sigma_s(E_i,\phi) = \frac{\sigma_s(E_i)}{4\pi}\left[1 + a_1(E_i)\cos\phi\right] . \qquad (۱۰۹-۲)$$

هم‌چنین، با تعیین این‌که $\cos\phi = 1 - \frac{2T}{\gamma E_i}$، و با جایگذاری معادله‌ی ۲-۱۰۹ در معادله‌ی ۲-۱۰۶ می‌توان نوشت:

$$\sigma_{Ds}(E_i) = \frac{\sigma_s(E_i)}{\gamma E_i}\int_{E_d}^{\gamma E_i} \nu(T)\left[1 + a_1(E_i)\left(1 - \frac{2T}{\gamma E_i}\right)\right] dT . \qquad (۱۱۰-۲)$$

۲-۳-۲ پراکندگی غیرکشسان

از آن‌جایی که پراکندگی غیرکشسان در سیستم مرکز جرم همسان‌گرد است:

$$\sigma_{sj}(E_i, Q_j, \phi) = \frac{\sigma_{sj}(E_i, Q_j)}{4\pi} . \qquad (۱۱۱-۲)$$

معادله‌ی ۱-۳۰ سطح مقطع انتقال انرژی برای پراکندگی غیرکشسان در ناحیه‌ی تشدیدی را نتیجه می‌دهد به صورتی که:

$$\sigma_{sj}(E_i, Q_j, T) = \frac{\sigma_{sj}(E_i, Q_j)}{\gamma E_i}\left[1 + \frac{Q_i}{E_i}\left(\frac{1+A}{A}\right)\right]^{-1/2} ,$$

در نتیجه:

(۱۱۲-۲)

$$\sigma_{\mathrm{D}sj}(E_\mathrm{i}) = \sum_j \frac{\sigma_{sj}(E_\mathrm{i},Q_j)}{\gamma E_\mathrm{i}} \left[1+\frac{Q_j}{E_\mathrm{i}}\left(\frac{1+A}{A}\right)\right]^{-1/2} \int_{\check{T}_j}^{\hat{T}_j} \nu(T)\,\mathrm{d}T\ ,$$

که کم‌ترین و بیش‌ترین مقادیر $T(E_\mathrm{i},Q_\mathrm{j},\phi)$ به وسیله‌ی معادله‌ی ۱-۲۷ تعیین می‌شوند و با تنظیم $\cos\phi = -1$ و ۱ به ترتیب نتیجه می‌دهد:

$$\hat{T}_j = \frac{\gamma E_\mathrm{i}}{2}\left[1+\frac{1+A}{2A}\frac{Q_j}{E_\mathrm{i}}+\left(1+\frac{Q_j}{E_\mathrm{i}}\frac{1+A}{A}\right)^{1/2}\right]$$
$$\check{T}_j = \frac{\gamma E_\mathrm{i}}{2}\left[1+\frac{1+A}{2A}\frac{Q_j}{E_\mathrm{i}}-\left(1+\frac{Q_j}{E_\mathrm{i}}\frac{1+A}{A}\right)^{1/2}\right]\ .$$

۲-۳-۳ جابه‌جایی‌های (n,2n) و (n,γ)

سطح مقطع جابه‌جایی برای واکنش‌های (n,2n) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۱۱۳-۲)

$$\sigma_{\mathrm{D(n,2n)}}(E_\mathrm{i}) = \int_0^{E_\mathrm{i}-E'_\mathrm{m}} \sigma_{\mathrm{(n,2n)}}(E_\mathrm{i}T)\frac{T}{2E_\mathrm{d}}\,\mathrm{d}T\ ,$$

که $\sigma_{\mathrm{s(n,2n)}}(E_\mathrm{i},T)$ به وسیله‌ی معادله‌ی ۱-۴۰ تعیین می‌شود.

سطح مقطع جابه‌جایی ناشی از واکنش‌های (n,γ) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۱۱۴-۲)

$$\sigma_{\mathrm{D}\gamma}(E_\mathrm{i}) = \sigma_\gamma \int_0^{\hat{T}} \frac{T}{2E_\mathrm{d}}\,\mathrm{d}T\ .$$

به هرجهت از آن‌جایی که فرض می‌شود که اتم شبکه با میانگین انرژی زیر پس‌زده می‌شود:

$$\overline{T} = \frac{\hat{T}}{2} = \frac{E_\gamma^2}{4(A+1)c^2} ,$$

و این‌که E_γ برای یک ایزوتوپ مشخص مقداری معلوم و یا قابل محاسبه است، معادله‌ی ۲-۱۱۴ می‌تواند به صورت زیر ساده شود:

(۲-۱۱۵)

$$\sigma_{D\gamma} = \sigma_\gamma \frac{\overline{T}}{2E_d} = \frac{E_\gamma^2}{8E_d(A+1)c^2} .$$

سطح مقطع جابه‌جایی کلی ناشی از این شکل‌های برهم‌کنش نوترونی برابر است با:

(۲-۱۱۶)

$$\begin{aligned}\sigma_D(E_i) =& \sigma_{Ds}(E_i) + \sigma_{Dsj}(E_i) + \sigma_{D(n,2n)}(E_i) + \sigma_{D\gamma} \\ =& \frac{\sigma_s(E_i)}{\gamma E_i} \int_{E_d}^{\gamma E_i} \frac{T}{2E_d} \left[1 + a_1(E_i)\left(1 - \frac{2T}{\gamma E_i}\right)\right] dT \\ &+ \sum_j \frac{\sigma_{sj}(E_i, Q_j)}{\gamma E_i} \left[1 + \frac{Q_j}{E_i}\left(\frac{1+A}{A}\right)\right]^{-1/2} \int_{\check{T}_j}^{\hat{T}_j} \frac{T}{2E_d} dT \\ &+ \int_0^{E_i - E'_m} \sigma_{(n,2n)}(E_i, T) \frac{T}{2E_d} dT \\ &+ \sigma_\gamma \frac{E_\gamma^2}{8E_d(A+1)c^2} ,\end{aligned}$$

که این عبارت‌ها به ترتیب برای پراکندگی کشسان، پراکندگی غیرکشسان در ناحیه‌ی تشدیدی، واکنش‌های (n,2n) و واکنش‌های (n,γ) هستند.

۲-۳-۴ اصلاحات مدل K-P و سطح مقطع جابه‌جایی کلی

سطح مقطع جابه‌جایی می‌تواند به منظور کاهش فرضیات مختلف سازنده‌ی مدل K-P مطابق با آن‌چه در بخش ۲-۲ گفته شود، اصلاح شود. این اصلاحات در جدول ۲-۴ خلاصه شده است. با اعمال این

عبارت‌های تصحیحی به نتیجه‌ی ابتدایی K-P با یکی کردن فرضیات ۱ و ۳ در داخل یک ثابت C' و با استفاده از معادله‌ی ۲-۱۰۴ برای اثر بلورینگی، معادله‌ی ۲-۱۱۶ به صورت زیر تغییر شکل می‌یابد:

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{D}} = {} & \frac{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}{\gamma E_{\mathrm{i}}} \int_{E_{\mathrm{d}}}^{\gamma E_{\mathrm{i}}} \left[\frac{1-P}{1-2P} \left(C' \xi(T) \frac{T}{2E_{\mathrm{d}}} \right)^{(1-2P)} - \frac{P}{1-2P} \right] \\ & \times \left[1 + a_1(E_{\mathrm{i}}) \left(1 - \frac{2T}{\gamma E_{\mathrm{i}}} \right) \right] \mathrm{d}T \\ & + \sum_j \frac{\sigma_{\mathrm{s}j}(E_{\mathrm{i}}, Q_j)}{\gamma E_{\mathrm{i}}} \left[1 + \frac{Q_j}{E_{\mathrm{i}}} \left(\frac{1+A}{A} \right) \right]^{-1/2} \\ & \times \int_{\hat{T}_j}^{\hat{T}_j} \left[\frac{1-P}{1-2P} \left(C' \xi(T) \frac{T}{2E_{\mathrm{d}}} \right)^{(1-2P)} - \frac{P}{1-2P} \right] \mathrm{d}T \\ & + \int_0^{E_{\mathrm{i}} - E'_{\mathrm{m}}} \sigma_{(\mathrm{n},2\mathrm{n})}(E_{\mathrm{i}}, T) \left[\frac{1-P}{1-2P} \left(C' \xi(T) \frac{T}{2E_{\mathrm{d}}} \right)^{(1-2P)} - \frac{P}{1-2P} \right] \mathrm{d}T \\ & + \sigma_\gamma \left[\frac{1-P}{1-2P} \left(C' \xi(T) \frac{E_\gamma^2}{8E_{\mathrm{d}}(A+1)c^2} \right)^{1-2P} - \frac{P}{1-2P} \right] .\end{aligned}$$

جدول ۲-۴. اصلاحات سطح مقطع جابه‌جایی.

فرضیات	تصحیح $\nu(T)$	معادله در متن
۳: اتلاف	$0.56\left(1+\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\right)$	(2.31)
۴: مرز اتلاف انرژی الکترونیکی	$\xi(T)\left(\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\right)$	(2.50)
۵: سطح مقطع انتقال انرژی واقعی	$C\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}, \quad 0.52 < C \leq 1.22$	(2.33), (2.39)
۶: بلورینگی	$\frac{1-P}{1-2P}\left(\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\right)^{(1-2P)} - \frac{P}{1-2P}$	(2.104)
	$\sim \left(\frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\right)^{(1-2P)}$	(2.105)

با استفاده از بیان بسیار ساده برای اثر بلورینگی معادله‌ی ۲-۱۰۴، معادله‌ی ۲-۱۱۷ را به صورت زیر کاهش می‌دهد:

(۲-۱۱۸)

$$\sigma_{\mathrm{D}} = \frac{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}{\gamma E_{\mathrm{i}}} \int_{E_{\mathrm{d}}}^{\gamma E_{\mathrm{i}}} \left[\left(C' \xi(T) \frac{T}{2E_{\mathrm{d}}} \right)^{(1-2P)} \right] \left[1 + a_1(E_{\mathrm{i}}) \left(1 - \frac{2T}{\gamma E_{\mathrm{i}}} \right) \right] \mathrm{d}T$$
$$+ \sum_j \frac{\sigma_{\mathrm{s}j}(E_{\mathrm{i}}, Q_j)}{\gamma E_{\mathrm{i}}} \left[1 + \frac{Q_j}{E_{\mathrm{i}}} \left(\frac{1+A}{A} \right) \right]^{-1/2} \int_{\hat{T}_j}^{\hat{T}_j} \left(C' \xi(T) \frac{T}{2E_{\mathrm{d}}} \right)^{(1-2P)} \mathrm{d}T$$
$$+ \int_0^{E_{\mathrm{i}} - E'_{\mathrm{m}}} \sigma_{(\mathrm{n},2\mathrm{n})}(E_{\mathrm{i}}, T) \left(C' \xi(T) \frac{T}{2E_{\mathrm{d}}} \right)^{(1-2P)} \mathrm{d}T$$
$$+ \sigma_\gamma \left(C' \xi(T) \frac{E_\gamma^2}{8E_{\mathrm{d}}(A+1)c^2} \right)^{1-2P} ,$$

یا

(۲-۱۱۹)

$$\sigma_{\mathrm{D}} = \sigma_{\mathrm{Ds}} + \sigma_{\mathrm{Di}} + \sigma_{\mathrm{D(n,2n)}} + \sigma_{\mathrm{D}\gamma} .$$

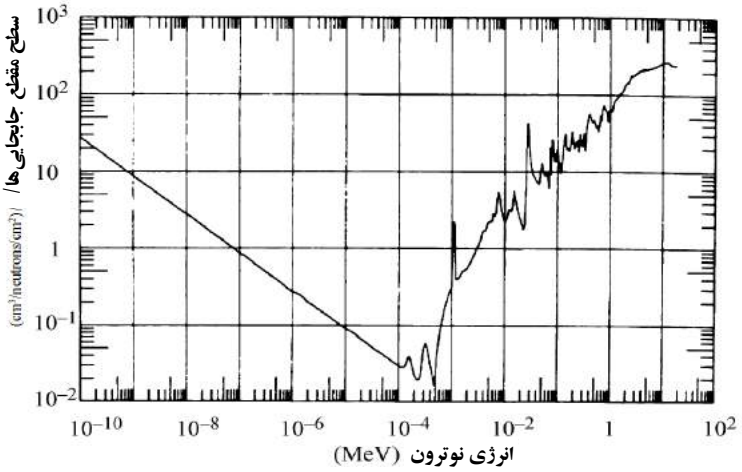
سطح مقطع جابه‌جایی برای فولاد زنگ نزن توسط دوران[1] [۲۱] و با استفاده از تئوری جزبندی انرژی لیندهارد محاسبه شد و در شکل ۲-۱۸ نشان داده شده است.

۲-۴ نرخ‌های جابه‌جایی

یادآوری می‌شود که نرخ جابه‌جایی با توجه به معادله‌ی ۲-۱ به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$R = \int_{\check{T}}^{\hat{T}} N\phi(E_{\mathrm{i}}) \sigma_{\mathrm{D}}(E_{\mathrm{i}}) \, \mathrm{d}E_{\mathrm{i}} .$$

1. Doran



شکل ۲-۱۸. سطح مقطع جابه‌جایی برای فولاد زنگ نزن بر پایه‌ی مدل لیندهارد و سطح مقطع‌های پراکندگی ENDF/B [۲].

این عبارت دانسیته‌ی نرخ جابه‌جایی یا تعداد کلی جابه‌جایی‌ها در واحد حجم در واحد زمان ($\#/cm^3s$) است. برای به‌دست آوردن یک برآورد تقریبی از حدود بزرگی این عدد، سطح مقطع جابه‌جایی همان‌طوری که در ادامه آورده شده، ساده‌سازی می‌شود. با نادیده گرفتن سهم‌های (n,2n) و (n,γ) درجابه‌جایی‌ها، تمام اصلاحات به مدل ساده جابه‌جایی K-P (به عبارت دیگر با استفاده از $\nu(T) = T/2E_d$) و نادیده گرفتن E_d نسبت به E_i، سطح مقطع جابه‌جایی ناشی از نوترون‌های پراکنده شده به صورت کشسان و غیرکشسان به صورت زیر خلاصه می‌شود:

(۱۲۰-۲)

$$\sigma_D(E_i) = \frac{\sigma_s(E_i)}{\gamma E_i}\int_{E_d}^{\gamma E_i}\frac{T}{2E_d}\left[1 + a_1(E_i)\left(1 - \frac{2T}{\gamma E_i}\right)\right]dT + \sum_j \frac{\sigma_{sj}(E_i, Q_j)}{\gamma E_i}\left[1 + \frac{Q_j}{E_i}\left(\frac{1+A}{A}\right)\right]^{-1/2}\int_{\check{T}_j}^{\hat{T}_j}\frac{T}{2E_d}dT\,.$$

با فرض آن‌که پراکندگی کشسان همسان‌گرد است ($a_1=0$)، پراکندگی غیرکشسان نادیده گرفته شده و با انتگرال‌گیری بین محدوده‌های E_d و γE_i می‌توان نوشت:

(۱۲۱-۲)

$$\sigma_{\mathrm{D}}(E_{\mathrm{i}}) = \frac{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}{\gamma E_{\mathrm{i}}} \int_{E_{\mathrm{d}}}^{\gamma E_{\mathrm{i}}} \frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\,\mathrm{d}T\ ,$$

و اگر $\gamma E_{\mathrm{i}} > E_{\mathrm{c}}$ باشد در نتیجه:

(۱۲۲-۲)

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{D}}(E_{\mathrm{i}}) &= \frac{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}{\gamma E_{\mathrm{i}}}\left[\int_{E_{\mathrm{d}}}^{2E_{\mathrm{d}}} \mathrm{d}T + \int_{2E_{\mathrm{d}}}^{E_{\mathrm{c}}} \frac{T}{2E_{\mathrm{d}}}\,\mathrm{d}T + \int_{E_{\mathrm{c}}}^{\gamma E_{\mathrm{i}}} \frac{E_{\mathrm{c}}}{2E_{\mathrm{d}}}\,\mathrm{d}T\right] \\ &= \frac{\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})}{2\gamma E_{\mathrm{i}} E_{\mathrm{d}}}\left[E_{\mathrm{d}} + \frac{(\gamma E_{\mathrm{i}})^2}{2} - \frac{E_{\mathrm{d}}^2}{2} + \gamma E_{\mathrm{i}} E_{\mathrm{c}} - E_{\mathrm{c}}^2\right]\ .\end{aligned}$$

اگر $\gamma \mathrm{E_i} \sim \mathrm{E_c}$ انتخاب شود و با نادیده گرفتن عبارت‌ها در E_{d} یا $E_{\mathrm{d}}^{\,2}$ نتیجه می‌دهد:

(۱۲۳-۲)

$$\sigma_{\mathrm{D}}(E_{\mathrm{i}}) \approx \left(\frac{\gamma E_{\mathrm{i}}}{4E_{\mathrm{d}}}\right)\sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})\ ,$$

و معادله‌ی ۲-۲ به صورت زیر در می‌آید:

(۱۲۴-۲)

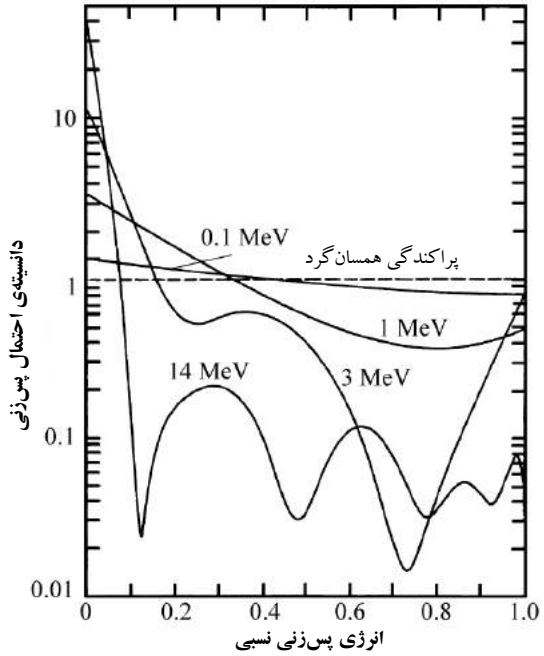
$$R = \frac{N\gamma}{4E_{\mathrm{d}}}\int_{E_{\mathrm{d}}/\gamma}^{\infty} \sigma_{\mathrm{s}}(E_{\mathrm{i}})E_{\mathrm{i}}\phi(E_{\mathrm{i}})\,\mathrm{d}E_{\mathrm{i}}$$

(۱۲۵-۲)

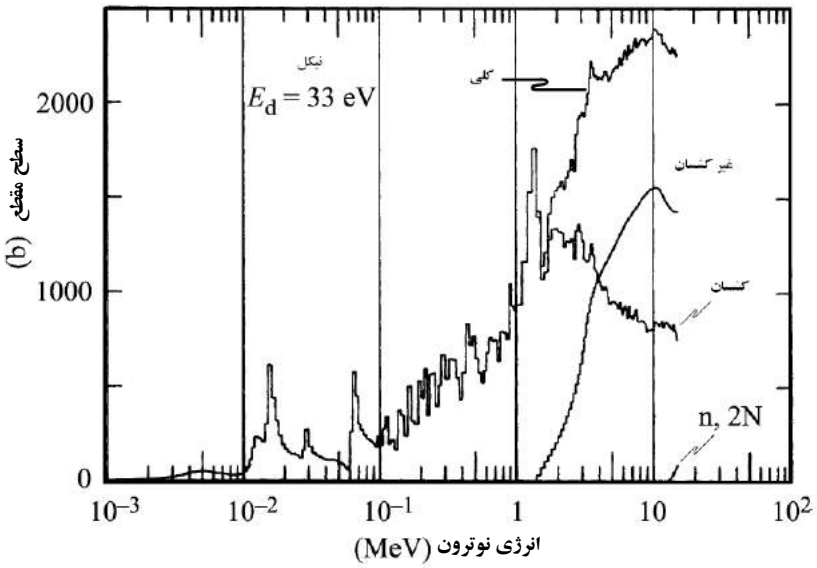
$$= N\sigma_{\mathrm{s}}\left(\frac{\gamma \bar{E}_{\mathrm{i}}}{4E_{\mathrm{d}}}\right)\Phi\ ,$$

که $\bar{E}_{\mathrm{i}}$ میانگین انرژی نوترون و Φ فلاکس کلی نوترون در بالای انرژی E_{d}/γ است و بخش داخل پرانتز تعداد جابه‌جایی‌های تولید شده (تعداد فرانکل‌ها[1]) برای هر نوترون است. اعتبار فرض پراکندگی همسان‌گرد و نادیده گرفتن پراکندگی غیرکشسان در شکل ۲-۱۹ و ۲-۲۰ نشان داده شده است. در اصل هر دو تقریب در انرژی‌های کم‌تر از یک تا چند MeV منطقی هستند.

1. Frenkel pairs



شکل ۲-۱۹. طیف انرژی پس‌زنی از پراکندگی کشسان نوترون‌های سریع با استفاده از اطلاعات پرونده‌های ENDF/B [۲۲].



شکل ۲-۲۰. سطح مقطع جابه‌جای برای نیکل که اجزای کشسان و غیرکشسان را نشان می‌دهد[۲۱].

مثال ۲-۱. *پرتودهی نوترونی آهن.* برای مثال آسیب ایجاد شده به وسیله‌ی نوترون‌های ۰٫۵ MeV در آهن در یک شار سریع بررسی می‌شود که ممکن است معرف هسته‌ی یک رآکتور سریع باشد.

$N = 0.85 \times 10^{23} \text{atoms/cm}^3$
$\sigma_s = 3 \times 10^{-24} \text{cm}^2$
$\Phi = 10^{15}$ نوترون‌ها $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
$\frac{\gamma E_i}{4E_d} = 350$ نوترون/ اتم جابه‌جا شده

R در این رابطه ۹×۱۰^{۱۶} اتم جابه‌جا شده در cm^3 در ثانیه است یا با تقسیم R بر N داریم ۱۰$^{-۶}$dpa/s ~ . این مقدار معادل این است که هر اتم از یک موقعیت نرمال شبکه هر ۱۲ روز یک بار جابه‌جا شده است. مثال دوم می‌تواند برای نرخ جابه‌جایی در صفحات سوخت آلومینیومی در یک رآکتور تحقیقاتی نوترون‌های حرارتی از نوع MTR بیان شود. در این مورد می‌توان نوشت:

$\text{Ei} \approx 0.5 \text{ MeV}$
$\text{N} = 0.6 \times 10^{23} \text{ atoms/cm}^3$
$\sigma_s = 3 \times 10^{-24} \text{cm}^2$
$\Phi = 3 \times 10^{13}$ نوترون‌ها $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
$\frac{\gamma E_i}{4E_d} = 690$ نوترون/اتم جابه‌جا شده

R در این رابطه ۱۰^{۱۵} × ۴ اتم جابه‌جا شده در cm^3 در ثانیه است یا با تقسیم R بر N داریم ۷×۱۰$^{-۸}$dpa/s ~ . این برابر با دو اتم جابه‌جا شده از یک موقعیت نرمال شبکه در سال است. قابل ذکر است که حتی اگرچه تعداد جابه‌جایی‌ها برای هر نوترون در آلومینیوم تقریباً دو برابر بزرگ‌تر از Fe است؛ اما نرخ آسیب به صورت قابل توجهی به علت پایین بودن شار سریع در این نوع از رآکتورها پایین‌تر است.

۲-۵ ارتباط تغییر ویژگی‌ها و مقدار پرتوگیری تابشی

هدف نهایی از محاسبه‌ی R_d تهیه‌ی تخمینی از اندازه‌ی تغییر یک ویژگی مشخص از ماده‌ی تحت تابش است. ویژگی‌های مکانیکی یک ماده‌ی استحکام تسلیم، تورم[1]، درجه تردی و غیره هستند. تا زمان اصلاح واحدهای پرتودهی مانند جریان نوترونی، نرخ جابه‌جایی به تنهایی نمی‌تواند برای تغییرات ماکروسکوپی مشاهده شده به‌کار گرفته شود و یک روش نیمه تجربی از آسیب مرتبط با تغییر ویژگی‌های ماکروسکوپی تکامل یافته است که به منزله‌ی روش تابع آسیب شناخته می‌شود. در این روش، نرخ جابه‌جایی اتم با تغییر در بعضی از ویژگی‌های ماکروسکوپی بعد از زمان پرتودهی t جایگزین می‌شود. سطح مقطع جابه‌جایی به وسیله‌ی تابع آسیب برای ویژگی مکانیکی مشخص، $G_i(E)$، جایگزین شده، از آن‌رو:

$$\Delta P_{ij} = \int\int G_i(E)\phi_j(E,t)\,dE\,dt\,, \qquad (۱۲۶-۲)$$

که در این رابطه ΔP_{ij} تغییر در ویژگی مشخص شده با اندیس i، در طول یک زمان پرتودهی t و در یک شار نوترونی که $\phi_j(E,T)$ برابر است با jاُمین طیف دیفرانسیلی نوترونی، است. با فرض قابلیت تفکیک انرژی ـ زمان، $\phi_j(E,t) = \phi_j(E)t$، معادله‌ی ۲-۱۲۶ می‌تواند به صورت زیر بازنویسی شود:

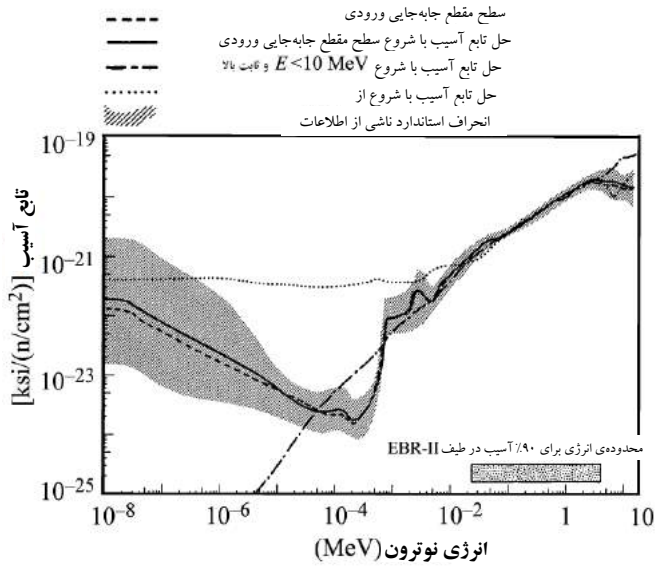
$$\Delta P_{ij}^{(k)} = t \cdot \int G_i^{(k)}(E)\phi_j(E)\,dE\,, \qquad (۱۲۷-۲)$$

که زبر نگاره‌ها اشاره به kاُمین سیکل تکرار دارد.

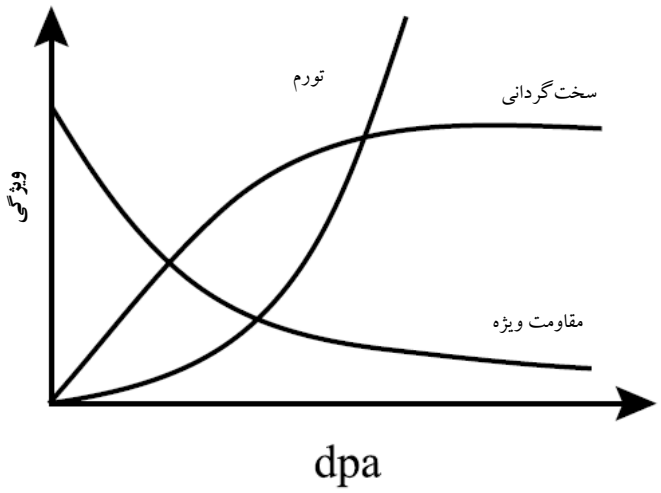
هدف استخراج تابع تکی $G_i(E)$ از مجموعه‌ای از مقادیر ΔP_i اندازه‌گیری شده است. با تعیین $\Delta P_{ij}^{(k)}$ و $\phi_j(E)$ به عنوان ورودی به همراه یک تقریب اولیه از $G_i(E)$ یا $G_i^{(0)}(E)$، یک کد کامپیوتری برای تولید راه‌حل‌های تکراری $G_i^{(k)}(E)$ مورد استفاده قرار می‌گیرد. یک راه‌حل مناسب هنگامی به‌دست می‌آید که انحراف استاندارد از تمام مقادیر اندازه‌گیری و محاسبه شده $\frac{\Delta P_{ij}}{\Delta P_{ij}^{(k)}}$ به یک

1. Swelling

مقدار پایین می‌رسد که منطبق با عدم قطعیت‌های آزمایشگاهی است. همان‌طوری که در شکل ۲-۲۱ نشان داده شده است، تابع آسیب حاصله به تقریب اولیه بسیار حساس است. قابل ذکر است که از آن‌جایی که شکل $G_i(E)$ مشابه تابع جابه‌جایی است، آن‌ها با یک‌دیگر مرتبط هستند. این نتایج نشان می‌دهد که نمی‌توان فهم کاملی از اثرات تابشی را فقط با محاسبه‌ی تعداد اتم‌های جابه‌جا شده به‌دست آورد. نمی‌توان اثرات تابش را به جای یک جعبه‌ی سیاه مورد تحلیل قرار داد. به منظور فهم اثر آسیب روی ویژگی‌های یک ماده، باید سرنوشت عیوب بعد از تشکیل مشخص شود. این فهم به وسیله‌ی وابستگی ویژگی به مقدار پرتوگیری تابشی همان‌طوری که در شکل ۲-۲۲ نشان داده شده است، تقویت می‌شود. قابل ذکر است که وابستگی اساسی مقدار پرتوگیری به شدت میان این سه تغییر ویژگی، مقاومت ویژه، جداشدگی القا شده‌ی تابشی و سخت شوندگی، متفاوت است. تا زمانی‌که تغییر ویژگی مشخصاً به آسیب جابه‌جایی مرتبط است، ماهیت این تغییر یکنواخت نیست و به صورت قابل ملاحظه‌ای بسته به ویژگی اندازه‌گیری شده، تغییر می‌کند. فصل بعد توزیع فضایی و موقتی آسیب تابشی را بررسی می‌کند. لیکن قبل از آن‌که منطقه‌ی آسیب به صورت مفصل بررسی شود، باید تصور ما از تولید جابه‌جایی‌ها، با نشان دادن آسیب ایجاد شده به وسیله‌ی ذرات باردار مانند یون‌ها و الکترون‌ها کامل شود.



شکل ۲-۲۱. (الف) تابع آسیب استحکام تسلیم ksi ۶۰ برای فولاد زنگ‌نزن ۳۰۴ پرتودهی شده و آزمایش شده در دمای C ۴۸۰ [۲۳].



شکل ۲-۲۲. وابستگی تورم، مقاومت ویژه و جداشدگی القا شده در اثر پرتودهی به مقدار پرتوگیری.

۲-۶ جابه‌جایی‌های ایجاد شده به وسیله‌ی پرتودهی ذرات باردار

جابه‌جایی‌های حاصله از ذرات باردار با جابه‌جایی‌های ایجاد شده به وسیله‌ی نوترون‌ها متفاوت است؛ زیرا هم‌چنان که این ذرات در سراسر شبکه حرکت می‌کنند، انرژی خود را از طریق برانگیختگی‌های الکترونی و هم‌چنین از طریق برخوردهای کشسان از دست می‌دهند. شکل ۲-۲۳ نشان می‌دهد که رابطه‌ی جانشینی در سازوکار اتلاف انرژی، با انرژی در محدوده‌ی انرژی مرتبط با برهم‌کنش یون ـ جامد کنترل می‌شود و شکل ۲-۲۴ انرژی باقی‌مانده‌ی یون را به صورت تابعی از عمق نفوذ یون نشان می‌دهد. قابل ذکر است که در عمق‌های کم بازدارنده الکترونیکی غالب است، لیکن در انتهای محدوده‌ی برخوردهای کشسان غالب هستند. یک بیان برای تعداد جابه‌جایی‌های ناشی از یک ذره‌ی باردار می‌تواند از تحلیل اتلاف انرژی از اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه به وسیله‌ی برانگیختگی الکترونیکی که در بخش ۲-۲-۳ تعیین شد و به وسیله‌ی معادله‌ی ۲-۴۰ تا معادله‌ی ۲-۴۹ توضیح داده شد، استنتاج شود. معادله‌ی ۲-۴۴ اتلاف انرژی اتم‌ها و الکترون‌ها در هدف به وسیله‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه را نشان می‌دهد. می‌توان این تحلیل را بازنویسی کرد با فرض آن‌که ذره‌ی در حال ردیابی یون فرودی است. همان‌طوری که در معادله‌ی ۲-۴۵ انجام شد، می‌توان عبارات موجود برای $\nu(T\text{-}\varepsilon_a)$ و $\nu(T\text{-}\varepsilon_e)$

را در سری‌های تیلور بسط داد و این سری‌ها را از قسمت دوم به بعد کوتاه کرد؛ در نتیجه می‌توان نوشت:

$$\nu(T-\varepsilon_{\mathrm{a}})=\nu(T)-\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}T}\varepsilon_{\mathrm{a}}\,,\qquad \nu(T-\varepsilon_{\mathrm{e}})=\nu(T)-\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}T}\varepsilon_{\mathrm{e}}\,, \tag{۱۲۸-۲}$$

و انتگرال‌های در برگیرنده عبارات $\nu(T-\varepsilon_a)$ و $\nu(T-\varepsilon_e)$ می‌تواند به صورت کلی و به صورت زیر نوشته شود.

(۱۲۹-۲)

$$\int_0^{\varepsilon_{\max}}\nu(T-\varepsilon)\sigma(T,\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon=\nu(T)\int_0^{\varepsilon_{\max}}\sigma(T,\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon-\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}T}\int_0^{\varepsilon_{\max}}\varepsilon\sigma(T,\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon$$
$$=\nu(T)\sigma(T)-\frac{\mathrm{d}\nu(T)}{\mathrm{d}T}S(T)\,.$$

ازآن‌جایی‌که در این عملیات، پرتابه ورودی یون است، می‌توان معادله‌ی ۲-۱۲۹ را با استفاده از بحث‌های انجام شده بازنویسی کرد که ذره‌ی ورودی دارای انرژی E_i است و انرژی T را به اتم‌های هدف و الکترون‌ها منتقل می‌کند و بیشینه‌ی انرژی منتقل شده برابر با $\hat{T}$ است:

(۱۳۰-۲)

$$\int_0^{\hat{T}}\nu(E_{\mathrm{i}}-T)\sigma(E_{\mathrm{i}},T)\,\mathrm{d}T=\nu(E_{\mathrm{i}})\int_0^{\hat{T}}\sigma(E_{\mathrm{i}},T)\,\mathrm{d}T-\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}E}\int_0^{\hat{T}}T\sigma(E_{\mathrm{i}},T)\,\mathrm{d}T$$
$$=\nu(E_{\mathrm{i}})\sigma(E_{\mathrm{i}})-\frac{\mathrm{d}\nu(E_{\mathrm{i}})}{\mathrm{d}E}S(E_{\mathrm{i}})\,,$$

که معادله‌ی ۱-۷۹ برای تبدیل انتگرال سطح مقطع انتقال انرژی دیفرانسیلی، $\sigma(E_i,T)$ به سطح مقطع برخورد کلی $\sigma(E_i)$، استفاده می‌شود و معادله‌ی ۱-۱۲۹ برای تبدیل انتگرال $T\sigma(E_i,T)$ به سطح مقطع بازدارندگی $S(E_i)$ استفاده می‌شود.

با اعمال نتایج معادله‌های ۲-۱۲۹ و ۲-۱۳۰ به معادله‌ی ۲-۴۴ می‌توان نوشت:

$$\mathrm{d}\nu(E_i) = \frac{\mathrm{d}E}{S(E_i)} \int_0^{\hat{T}} \nu(T)\sigma(E_i,T)\,\mathrm{d}T\ . \qquad (۱۳۱-۲)$$

از آن‌جایی که در مطالعات، تعداد کل جابه‌جایی‌ها در سرتاسر برد کلی یون بررسی می‌شود تا تعداد خاصی از جابه‌جایی‌ها در سراسر یک فاصله‌ی $\mathrm{d}x$ از نمونه، می‌توان معادله‌ی ۲-۱۳۱ را به منظور به‌دست آوردن تعداد جابه‌جایی‌های نتیجه شده از یک یون فرودی با انرژی اولیه‌ی E_i در سراسر محدوده‌ی کلی اتلاف انرژی یون انتگرال‌گیری کرد:

$$\nu(E_i) = \int_0^{E_i} \frac{\mathrm{d}E'}{S(E')} \int_{E_d}^{\hat{T}} \nu(T)\sigma(E',T)\,\mathrm{d}T \qquad (۱۳۲-۲)$$

و

$$= \int_0^{E_i} \sigma_d(E') \frac{\mathrm{d}E'}{S(E')}\ ,$$

$$\int_{E_d}^{\hat{T}} \nu(T)\sigma(E',T)\,\mathrm{d}T \equiv \sigma_d(E')\ , \qquad (۱۳۳-۲)$$

که $E' = E'(x)$ انرژی یون به صورت تابعی از طول مسیر طی شده x هم‌چنان‌که به سمت انرژی صفر حرکت می‌کند، است. می‌توان با اعمال یک تقریب به معادله‌ی معین بالا مثال ساده‌ای را حل کرد. این علاقه وجود دارد که تعداد برخوردهای ایجاد شده به وسیله‌ی یک یون هم‌چنان‌که یون از یک جامد عبور می کند، مشخص شود. در ادامه I به عنوان فلاکس یون در واحدهایی از یون بر سانتی‌متر مربع در نظر گرفته می‌شود و می‌توان تعداد برخوردها در ثانیه در یک عنصر حجمی از یک

سطح مقطع واحد و ضخامت $\mathrm{d}x$ که انرژیِ در محدوده‌ی $(T, \mathrm{d}T)$ را به اتم‌های این عنصر منتقل می‌کنند، را نوشت به صورتی که:

$$NI\sigma(E,T)\,\mathrm{d}x\,. \qquad (۱۳۴-۲)$$

تعداد برخوردها در واحد حجم در واحد زمان که انرژی را در محدوده‌ی $(T,\mathrm{d}T)$ در عمق x منتقل می‌کند برابر با $NI\sigma(E,T)$ (collisions/cm^{3}s) است. تعداد اتم‌های جابه‌جا شده برای هر برخورد که یک اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی T را تولید می‌کند، برابر با $\nu(T)$ است. بنابراین نرخ تولید اتم‌های جابه‌جا شده در عمق x برابر است با:

$$R_{\mathrm{d}}(x) = NI\int_{E_{\mathrm{d}}}^{\gamma E}\sigma(E,T)\nu(T)\,\mathrm{d}T \quad [\text{displacements/cm}^3\,\text{s}]\,. \qquad (۱۳۵-۲)$$

(قابل ذکر است که محاسبه‌ای برای این حقیقت که I یک تابعی از x (یا E) است و آن‌که $I(x) \neq I_0$ است، در نظر گرفته نشده است). E تابعی از x است؛ زیرا یون با اتلاف انرژی به الکترون‌های هدف کند می‌شود. یک شکل اساسی از $E(x)$ را می‌توان با استفاده از $\dfrac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x} = kE^{1/2}$ و به صورت زیر تخمین زد:

$$E(x) = [(E_{\mathrm{i}})^{1/2} - 1/2kx]^2\,, \qquad (۱۳۶-۲)$$

که E_{i} انرژی اولیه یون هنگام برخورد به هدف است. تعداد اتم‌های جابه‌جا شده در اتم در ثانیه برابر با $\dfrac{R_{\mathrm{d}}(x)}{N}$ است و $\dfrac{\text{dpa}}{(\text{ions/cm}^2)}$ در عمق x، برابر $R_{\mathrm{d}}(x)/NI$ با است.

فرض خواهد شد که $\sigma(E,T)$ می‌تواند به وسیله‌ی پراکندگی رادرفورد و با استفاده از عملیات لیندهارد برای $\nu(T)$ از مدل K-P توضیح داده شود و با فرض آن‌که ۰٫۵ = ζ باشد، می‌توان نوشت:

(۲-۱۳۷)

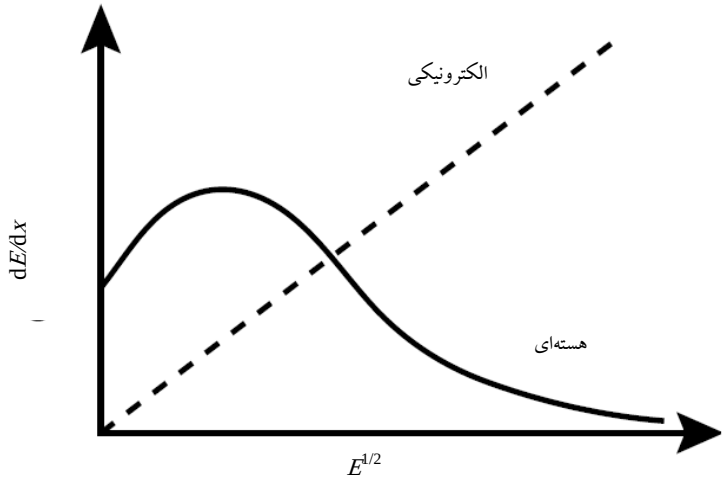
$$\frac{R_d}{NI} = \int_{E_d}^{\gamma E_i} \frac{1}{2} \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 \varepsilon^4}{4} \left(\frac{M + M_i}{M}\right)^2 \frac{1}{E_i} \frac{4 M_i M}{(M + M_i)^2} \frac{1}{T^2} \frac{T}{2E_d} \, dT$$
$$= \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 \varepsilon^4}{4 E_i E_d} \left(\frac{M_i}{M}\right) \ln \frac{\gamma E_i}{E_d} \frac{\text{dpa}}{\text{ion/cm}^2} .$$

با اعمال این نتایج به پروتون‌هایی با انرژی ۰٫۵ MeV در آهن، تقریباً $۱۰^{-۱۸}$dpa/(ions/cm^2) در سطح نتیجه می‌شود. یون‌های C^+ فرودی با انرژی ۲۰ MeV روی نیکل تقریباً ۳×۱۰^{-۱۸}dpa/(ions/cm^2) در سطح تولید می‌کنند، لیکن در حداکثر آسیب ۵۰ برابر این مقدار وجود خواهد داشت. این مقادیر می‌توانند با نرخ آسیب ایجاد شده به وسیله‌ی نوترون‌هایی با انرژی ۰٫۵ MeV در آهن مقایسه شود:

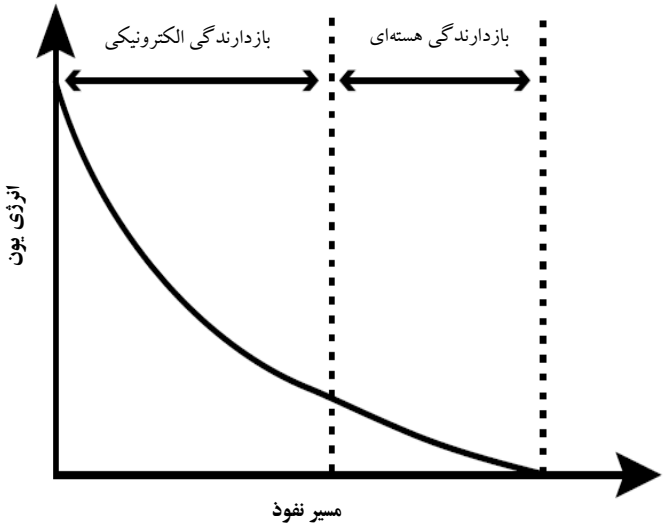
(۲-۱۳۸)

$$\frac{R_d}{N\phi} = \left(\frac{\gamma E_i}{4E_d}\right) \sigma_s$$
$$= 350 \times 3 \times 10^{-24}$$
$$= 1 \times 10^{-21} \frac{\text{displacements}}{\text{n/cm}^2\,\text{s}} .$$

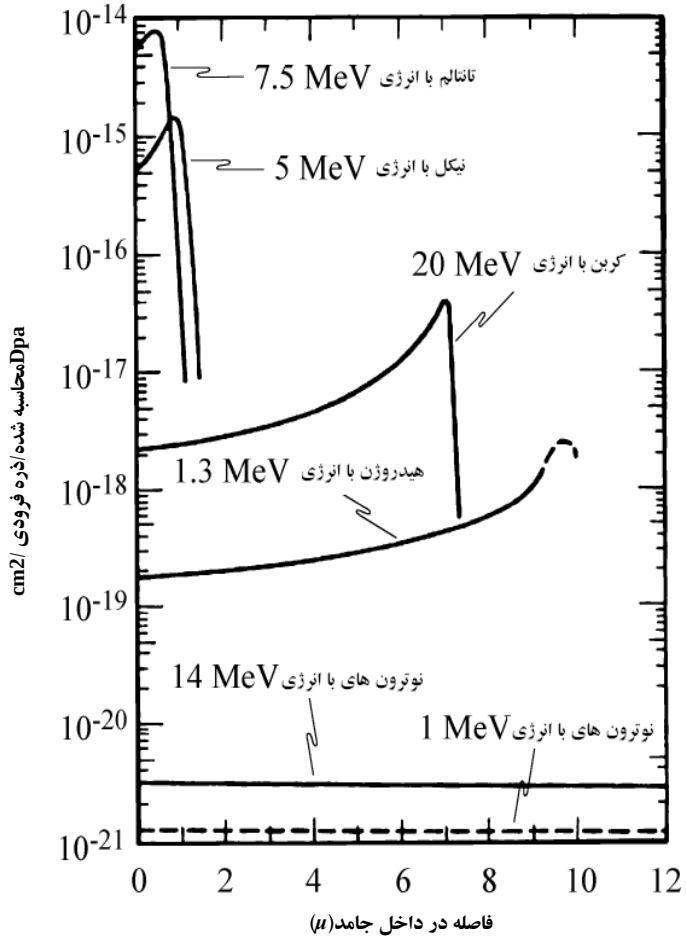
مقایسه‌ی نوترون‌هایی با انرژی ۰٫۵ MeV با یون‌های C^+ فرودی با انرژی ۲۰ MeV نشان می‌دهد که در سراسر این محدوده جابه‌جایی‌های تولید شده به وسیله‌ی یون‌های C^+، ۳۰۰۰ برابر بیش‌تر از نوترون‌ها است. شکل ۲-۲۵ نرخ‌های جابه‌جایی را برای یون‌هایی با انرژی و جرم‌های مختلف به صورت تابعی از عمق نفوذ مقایسه کرده است. همان‌طوری که انتظار می رود، برای انرژی مشابه، یون‌های سنگین‌تر انرژی خودشان را در فاصله‌ی کوتاه‌تری از دست می‌دهند که منجر به نرخ‌های آسیب بالاتری می‌شود. لازم به یادآوری است که به علت بزرگ بودن مسیر متوسط آزاد برخورد یک نوترون در مقایسه با یک یون، انرژی آسیب نوترونی پایین است و در سراسر یک فاصله‌ی چند میلی‌متری مقداری ثابت است.



شکل ۲-۲۳. تغییرات در توان‌های بازدارندگی هسته‌ای و الکترونیکی در سراسر محدوده‌ی انرژی مرتبط با برخوردهای یون ـ جامد.



شکل ۲-۲۴. انرژی باقی‌مانده‌ی یک یون برخوردی برروی یک هدف و مناطق غلبه بازدارندگی الکترونیکی و هسته‌ای.



شکل۲-۲۵. تأثیر آسیب جابه‌جایی برای ذرات پرانرژی مختلف در نیکل [۲۵].

نام‌گذاری اصطلاحات

a: ثابت شبکه

a_o: شعاع بوهر اتم هیدروژن

A: جرم اتمی

A: ثابت پیش‌نمایی در رابطه‌ی بورن ـ مایر، معادله‌ی ۱-۴۷

B: فاصله‌ی بین اتم‌های مانع در شبکه‌ی بلوری

B: ثابت در توان در رابطه‌ی بورن ـ مایر، معادله‌ی ۱-۴۷

c: سرعت نور

D: فاصله‌ی نزدیک‌ترین همسایه میان اتم‌ها

E_c: انرژی آستانه، انرژی بحرانی برای کانونی شدن

E_{ch}: انرژی بحرانی برای کاناله شدن

E_{fc}: انرژی بحرانی کانونی شدن

E_d: انرژی جابه‌جایی

E_D: انرژی آسیب

E_i: انرژی پرتابه

E_r: انرژی بحرانی برای برخوردهای جایگزین کننده، انرژی جنبشی نسبی

E_s: انرژی تصعید

E_γ: انرژی پرتو گاما

$E_{i,}$: انرژی ذره‌ی فرودی

E'_m: انرژی جنبشی ذره‌ی فرودی در سیستم مرکز جرم

E''_m: انرژی نوترون بعد از واکنش (n, 2n)

E^*: انرژی نقطه‌ی زینی‌شکل

E_{eq}: انرژی اتم در موقعیت تعادلی شبکه

f: پارامتر کانونی شدن

g: سرعت نسبی $\upsilon_۱ - \upsilon_۲$

G : تابع آسیب

$\overline{I}$:سطح برانگیختگی ـ یونیزاسیون

k : ثابت نیرو، ثابت موجود در عبارت اتلاف انرژی الکترونیکی، $kE^{1/2}$

m : جرم ذره‌ی فرودی؛ $1/\mathrm{s}$

m_{e}: جرم الکترون

M_1: جرم پرتابه

M_2: جرم هدف

N : عدد دانسیته‌ی اتمی

p ،p_{e}،p_{a} : احتمال، به ترتیب اشاره به احتمال الکترون و اتم

P_{ch}: احتمال کانال‌بندی

P_{d}: احتمال جابه‌جایی

P_{f}: احتمال کانونی شدن

Q : انرژی برانگیختگی هسته

r_{eq}: فاصله‌ی تعادلی میان اتم‌ها

r_{max}: بزرگی عرضی اتم کاناله شده

R : شعاع اتمی

R_{ch}: شعاع کانال

R_{d}: نرخ جابه‌جایی $(\#/\mathrm{cm}^3\mathrm{s})$

S : توان در تقریب قانون توان

S_{n}, S_{e},S : توان بازدارندگی، به ترتیب الکترونیکی و هسته‌ای

t_{c}: زمان برخورد

T : انرژی منتقل شده در برخورد

$\check{T}$:کمینه‌ی انرژی منتقل شده

$\hat{T}$:بیشینه‌ی انرژی منتقل شده

$\overline{T}$:میانگین انرژی منتقل شده

$\mathrm{T_l}$: انرژی منتقل شده به اتم هدف بعد از واکنش (n, 2n)

U : انرژی برای هر اتم در یک بلور

V : انرژی برای هر اتم در یک بلور

$V(r)$: انرژی پتانسیل

ν: حجم ویژه اتم

V_{CM}: سرعت مرکز جرم در سیستم آزمایشگاهی

U_1: سرعت پرتابه در سیستم آزمایشگاهی

U_2: سرعت هدف در سیستم آزمایشگاهی

V_{CM}: سرعت مرکز جرم

Y : فاصله تا اتم مانع

Z : پارامتر فشردگی

Z : عدد اتمی

β : قابلیت فشردگی

ε : انرژی ضربه‌ی اتم ثانویه؛ واحد بار معادله‌ی ۲-۵۲

ε_{eq} : انرژی اتم در یک موقعیت نرمال شبکه

ε : انرژی کاهش یافته اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه

ε^* : انرژی اتم در نقطه‌ی زینی‌شکل

ϕ، Φ: شار نوترون

γ : $\dfrac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}$

η : اتلاف انرژی در برانگیختگی الکترونیکی در مدل NRT

κ : راندمان جابه‌جایی

μ : جرم کاهش یافته

ν : حجم ویژه‌ی یک اتم

$\nu(T)$: تابع جابه‌جایی

θ : زاویه‌ی پراکندگی در سیستم آزمایشگاهی

θ_c: زاویه‌ی بحرانی کانونی شدن

θ_{ch}: زاویه‌ی بحرانی کاناله شدن

$\sigma(E_i)$: سطح مقطع برخورد اتمی کلی

$\sigma(E_i,T)$:سطح مقطع انتقال انرژی دیفرانسیلی

σ_D: سطح مقطع جابه‌جایی

σ_s: سطح مقطع پراکندگی

σ_{sj}: سطح مقطع پراکندگی غیرکشسان برای j اُمین تشدید

$\sigma_{(n,2n)}$: سطح مقطع برای واکنش‌های (n,2n)

σ_γ: سطح مقطع برای واکنش‌های (n,γ)

τ : دوره‌ی زمانی برای نوسان برای یک اتم کاناله شده

ζ : راندمان انرژی آسیب، معادله‌ی ۲-۵۰

مسایل

۲-۱ الف) با استفاده از مدل ساده K-P و با فرض پراکندگی کشسان و همسان‌گرد، تعداد جابه‌جایی‌ها برای هر اتم (dpa) در نیکل در معرض شاری از نوترون‌ها (۲MeV) برابر $۱۰^{۲۲}$ n/cm^2 را محاسبه کنید.

ب) با استفاده از عبارت نسبیتی برای انتقال انرژی الکترون ـ اتم، کم‌ترین انرژی الکترون مورد نیاز برای جابه‌جایی یک اتم در (i) آلومینیوم و (ii) تنگستن را محاسبه کنید.

۲-۲ در یک واکنش (n,2n)، یک نوترون ثانویه فقط در صورتی می‌تواند منتشر شود که برانگیختگی باقی‌مانده هسته‌ها بعد از نشر اولین نوترون از انرژی اتصال یک نوترون در هسته‌ای با جرم M بیش‌تر باشد. انرژی پس‌زنی بعد از انتشار اولین نوترون به صورت مقدار میانگین در نظر گرفته می‌شود $(\cos\phi = 0)$. عبارتی برای انرژی پس‌زنی متعاقب انتشار ثانویه به‌دست آورید.

۲-۳ یک هسته ^{۵۶}Fe که تحت یک واکنش (n,γ) قرار می‌گیرد یک پرتو گامای تکی با انرژی ۷ MeV آزاد می‌کند. اگر یک ترکیب آهنی در یک رآکتور جایی که حداکثر جریان حرارتی ۱×۱۰^{۱۴} n/cm^2 باشد و نسبت شار حرارتی به شار اتم های سریع برابر ۱ باشد (به صورتی‌که $E_{ave}^{fast} \geq ۱$ MeV)، قرار گیرد، نرخ‌های جابه‌جایی نسبی به وسیله‌ی نوترون‌های سریع، هسته‌های پس‌زده شده و پرتوهای گاما که تحت پراکندگی کامپتون قرار می‌گیرند را با فرض $\sigma_{(n,\gamma)} \sim ۴b$ و $\sigma_s \sim ۳b$ تعیین کنید.

۲-۴ یک ورقه‌ای از آهن در معرض یک منبع گاما با انرژی ۲۰ MeV قرار می‌گیرد.

الف) محتمل‌ترین برهم‌کنش میان پرتو گاما و الکترون‌ها در آهن چه چیزی است؟

ب) فرض کنید که واکنش انتخاب شده در قسمت (الف) رخ دهد. آیا این واکنش می‌تواند منجر به جابه‌جایی یک اتم آهن شود، اگر انرژی جابه‌جایی ۴۰eV باشد؟

۲-۵ یک نوترون حرارتی منجر به واکنش زیر می‌شود:

$$^{27}\mathrm{Al} + n \rightarrow {}^{28}\mathrm{Al} + \gamma\,.$$

انرژی گاما برابر با ۱٫۱ keV است. پرتو گاما با الکترون‌های شبکه واکنش خواهد داد. محتمل‌ترین رخداد چیست؟ برای این رخداد، بیشینه‌ی انرژی منتقل شده چه‌قدر است؟ آیا الکترون‌های حاصله

انرژی کافی برای جابه‌جایی یک اتم آلومینیوم (با فرض آن‌که انرژی جابه‌جایی در حدود ۲۵ eV باشد) را دارند؟ آیا اتم Al پس‌زده شده می‌تواند اتم آلومینیوم دیگر را جابه‌جا کند؟

۲-۶ واکنش (n,γ) در ^{56}Fe یک پرتو گامای سریع با انرژی $E_\gamma = ۷\ MeV$ را آزاد می‌کند.

الف) انرژی پس‌زنی هسته‌های تولیدی ^{57}Fe چقدر است؟

ب) تعداد اتم‌های جابه‌جا شده برای هر ^{57}Fe پس‌زده شده با فرض آن‌که $E_d = ۴۰\ eV$ باشد را تعیین کنید.

ج) اگر جزء حرارتی شار نوترونی در یک راکتور سریع $۱۰^{۱۳}\ n/cm^2s$ باشد، نرخ تولید آسیب ناشی از واکنش (n,γ) در ^{56}Fe چه‌قدر است؟

د) اگر شار سریع به وسیله‌ی $\phi_f(E_n) = 10^{15}\delta(E_n - 0.5)$ مشخص شود، که E_n برحسب MeV باشد، نرخ تولید آسیب ناشی از شار سریع در آهن چه‌قدر است؟

فرمول جابه‌جایی K-P در (ج) و (د) را مورد استفاده قرار دهید. سطح مقطع پراکندگی برای نوترون‌های با انرژی ۰٫۵ MeV در حدود ۳ بارن[1] است. هم‌چنین برای بخش (ج)، σ_a^{56} تقریباً برابر ۲٫۵ بارن است.

۲-۷ با فرض آن‌که برهم‌کنش‌های اتم ـ اتم می‌تواند به عنوان برخوردهای سربه‌سر در نظر گرفته شود، تابع پتانسیل مناسب، پتانسیل بورن ـ مایر است. عبارتی برای انرژی آستانه برای کانونی شدن بحرانی غیر کمکی در طول جهت [110] در نیکل fcc برحسب ثابت شبکه، a، بنویسید.

۲-۸ برای آهن (فاز تعادلی برای $۴۰۰\ ^oC$)، فرض کنید که یک برخورد کانونی شده رخ دهد، نزدیک‌ترین مسیر برخورد (شعاع مجاز کره‌ی سخت معادل که با استفاده یک پتانسیل بورن ـ مایرمحاسبه شده است) تغییر میان یک زنجیر برخوردی [100] و یک زنجیر برخوردی [110]چقدر است؟

۲-۹ الف) انرژی کانونی شدن جهت $\langle 111 \rangle$ برای طلا تحت شرایط کانونی شدن کمکی را محاسبه کنید.

ب) آیا کانونی شدن در طول جهت $\langle 111 \rangle$ در غیاب کانونی شدن کمکی رخ می‌دهد؟ چرا؟

1. Barn; واحد سطح برای اندازه‌گیری سطح مقطع هسته‌ی اتم‌ها

ج) انرژی کانونی شدن تجربی طلا برای جهت $\langle 111 \rangle$ در حدود ۲۱۰۰۰ eV است. جواب خودتان را با این مقدار مقایسه کنید.

۲-۱۰الف) انرژی کانونی شدن بحرانی برای جهت‌های $\langle 111 \rangle$، $\langle 110 \rangle$ و $\langle 100 \rangle$ در مس fcc و آهن را تعیین کنید.

ب) θ_c را به صورت تابعی از $T < E_c$ برای جهت‌های $\langle 111 \rangle$ در نیکل و آهن رسم و تفاوت‌ها و شباهت‌ها را بیان کنید.

ج) کار مشابهی را برای جهت $\langle 110 \rangle$ برای هر دو عنصر انجام دهید.

د) بخش (الف) و (ب) را با استفاده از پتانسیل مربع‌معکوس، $V(r) = A/r^2$، را که $A = ۱٫۲۵\ \text{eVnm}^2$ است، تکرار کنید.

هـ) در سراسر چه محدوده انرژی، جایگزینی کانونی شده رخ می‌دهد؟ فقط در مورد بسته‌های انرژی کانونی شده چه‌طور؟

۲-۱۱ برای فرایند کانونی شدن هم‌چنان که در مسئله‌ی ۲-۱۰ توضیح داده شد، یک توضیح فیزیکی ارایه دهید که چرا زاویه‌ی بحرانی برای کانونی شدن، θ_c، باید وابسته به انرژی پرتابه باشد.

۲-۱۲ یک یون با انرژی ۳۰ keV وارد یک کانال در شبکه‌ی جامد می‌شود و انرژی را فقط به وسیله‌ی برانگیختگی الکترونی از دست می‌دهد. با استفاده از فرمول توان بازدارندگی لیندهارد معادله‌ی ۱-۱۷۰، فاصله‌ی طی شده به وسیله‌ی یون قبل از آن‌که از کانال خارج شود را تعیین کنید. کم‌ترین انرژی کاناله شدن ۳۰۰ eV است. از رابطه‌ی $k = 0.003NZ^{2/3}\text{eV}^{1/2}/\text{nm}$ استفاده کنید که در این رابطه‌ی N دانسیته‌ی اتمی فلز در واحد nm^{-3} است.

۲-۱۳ نشان دهید هنگامی که کاناله شدن در آبشار برخورد محاسبه می‌شود، تعداد میانگین اتم‌های جابه‌جا شده $\nu(T)$ برابر است با:

$$\nu(T) - (T/2E_d)^{1-2p},$$

که در این رابطه p احتمالی است که یک اتم کاناله شده با انرژی E در آبشار تلف می‌شود. فرض کنید که $p \neq f(E)$، $T >> E_d$ و $p << ۱$.

با فرض آن‌که تمام انرژی به وسیله‌ی برخوردهای کشسان برای پروتون‌های ۱۰۰ keV در نیکل اتلاف شود، تعیین کنید:

الف) اتلاف انرژی در واحد طول در جامد، $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$

ب) برد در جامد

۲-۱۴ یک بلور مس با نوترون‌های تک انرژی (۲ MeV) بمباران می‌شود.

الف) نرخ متوسط جابه‌جایی اتمی ($\mathrm{displacement/cm^3 s}$) را با استفاده از مدل کینچین ـ پیس و اطلاعات زیر محاسبه کنید:

پارامتر شبکه، Cu = ۰٫۳۶۱ nm

جرم اتمی، Cu = ۶۳٫۵۴ amu

انرژی جابه‌جایی برای Cu = ۴۰ eV

$\phi = ۱۰^{۱۳}\ \mathrm{n/cm^2 s}$ (۲ MeV)

$\sigma = ۰٫۵ \times ۱۰^{-۲۴}\mathrm{cm^2}$ (۲ MeV)

ب) بخش (الف) را به جای نوترون‌های با انرژی ۲ MeV با استفاده از یک پرتو نوترون حرارتی تک انرژی که $\phi_{th} = \phi_{\mathrm{fast}}$، $\sigma_{\mathrm{th}} = ۳٫۷۸ \times ۱۰^{-۲۴}\mathrm{cm^2}$ و انرژی پس‌زنی، $E_R \sim ۳۸۲\ \mathrm{eV}$ تکرار کنید.

ج) در صورتی که تابع انرژی آسیب لیندهارد (ζ(T)) مورد استفاده قرار گیرد چه اثری برروی جواب شما در بخش (الف) دارد؟

د) با فرض آن‌که احتمال کاناله شدن۱، ۵ و ۱۰٪ باشد، جواب شما در بخش (الف) چه‌طور تأثیر می‌پذیرد؟

۲-۱۵ برای مسئله‌ی بمباران نوترونی با انرژی ۲MeV توضیح داده شده در مسئله‌ی ۲-۱۴، چگونه می‌توان انرژی آستانه برای کانونی شدن بحرانی غیرکمکی در طول جهت $[110]$ را محاسبه کرد؟

۲-۱۶ فرض کنید که هدف مسی در مسئله‌ی ۲-۱۴ به جای یک پرتو با نوترون‌های ۲ MeV به وسیله‌ی یک پرتو یونی هلیومی با انرژی ۲ MeV بمباران شود. نرخ جابه‌جایی در سطح نمونه را محاسبه و با جواب به‌دست آمده در مسئله‌ی ۲-۱۴ مقایسه کنید.

مراجع

1. Kinchin GH, Pease RS (1955) Rep Prog Phys 17:1.
2. Seitz F (1949) Disc Faraday Soc 5:271.
3. Bacon DJ, Deng HF, Gao F (1993) J Nucl Mater 205:84.
4. King WE, Merkle KL, Meshii M (1983) J Nucl Mater 117:12–25.
5. Olander DR (1976) Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements.US DOE,Washington, DC.
6. ASTM E521 (1996) Standard Practice for Neutron Radiation Damage Simulation byCharged-Particle Irradiation. Annual Book of ASTM Standards, vol. 12.02.AmericanSociety for Testing and Materials, Philadelphia, PA.
7. Robinson MT (1969) Defects and Radiation Damage in Metals. Cambridge UniversityPress, Cambridge.
8. Snyder WS, Neufeld J (1955) Phys Rev 97(6):1636.
9. Sanders JB (1967) Dissertation, University of Leiden.
10. Kohler W, SchillingW (1965) Nukleonik 7:389.
11. Sigmund P (1969) Appl Phys Lett 14(3):114.
12. Lindhard J, Nielsen V, Scharff M (1968) Kgl Dan Vidnsk Selsk Mat Fyf Medd 36(10).
13. Sigmund P (1969) Rad Eff 1:15–18.
14. Erginsoy C, Vineyard GH, Englert A (1964) Phys Rev 133A:595.
15. Lindhard J, Nielsen V, Scharff M, Thomsen PV (1963) Dan Vidnsk Selsk Mat Fyf Medd33:1.
16. Robinson MT (1972) The dependence of radiation effects on the primary recoil energy. In: Corbett JW, Ianiello LC (eds) Proceedings of Radiation-Induced Voids in Metals, CONF-710601, USAEC Technical Information Center, Oak Ridge, TN, 1972, p 397.
17. Norgett MJ, Robinson MT, Torrens IM (1975) Nucl Eng Des 33:50–54.
18. Chadderton LT (1965) Radiation Damage in Crystals. Wiley, New York.
19. Brandt W (1968) Sci Amer 218:90.
20. Datz S, Noggle TS, Moak CT (1965) Nucl Instr Meth 38:221.
21. Doran DG (1971) Displacement Cross Sections for Stainless Steel and Tantalum Based on A Lindhard Model, USAEC Report, HEDL-TME-71-42.WADCO Corporation, Hanford Engineering Development Laboratory, April 1971.

22. Robinson MT (1996) J Nucl Mater 216:1–28.
23. Simmons RL, McElroy WN, Blackburn LD (1972) Nucl Technol 16:14.
24. McElroy WN, Dahl RE, Gilbert ER (1970) Nucl Eng Des 14:319.
25. Kulcinski GL, Brimhall JL, Kissinger HE (1972) Production of voids in pure metalsby high-energy heavy-ion bombardment. In: Corbett JW, Ianiello LC (eds) Proceedingsof Radiation-Induced Voids in Metals, CONF-710601, USAEC Technical InformationCenter, Oak Ridge, TN, 1972, p 453.

۳

آبشار آسیب

۳-۱ مسیر متوسط آزاد جابه‌جایی

در بحث مربوط به گسترش آبشار، هیچ توجهی به آرایش فضایی اتم‌های جابه‌جا شده نشد. در این فصل فرض خواهد شد که هر جفت فرانکل[1] تولید شده باقی می‌ماند و هیچ‌گونه نابودسازیی رخ نخواهد داد. به هرجهت آرایش فضایی این جفت‌های فرانکل در تعیین تعداد جفت‌هایی که نابودسازی یا عدم تحرک را به وسیله‌ی خوشه‌ای شدن حفظ می‌کنند، بسیار حایز اهمیت است. برای فهم آن‌که ناحیه‌ی آسیب دیده شبیه چیست، لازم است فهمیده شود که آیا جابه‌جایی‌ها متجمع یا پراکنده هستند. یک ابزار مناسب در این مورد مسیر آزاد متوسط برای برخوردهای جابه‌جا کننده است، یعنی برخوردهایی‌که در آن‌ها انرژی منتقل شده بیش‌تر از E_{d} است. مسیر متوسط آزاد مشخص خواهد کرد که جابه‌جایی‌ها چه اندازه جدا از یک‌دیگر رخ می‌دهند و از آن‌رو فاصله‌ی جداشدگی بین جفت‌های فرانکل مشخص می‌شود.

مسیر متوسط آزاد به صورت $\lambda = \frac{1}{N\sigma}$ تعریف می‌شود و سطح مقطع جابه‌جایی مربوطه برابر است با:

1. Frenkel pair

(۱-۳)

$$\sigma'_{\mathrm{d}}(E) = \int_{E_{\mathrm{d}}}^{E} \sigma(E,T)\,\mathrm{d}T\ .$$

این سطح مقطع برای انتقال انرژی در فراتر از E_{d} است و بر حسب سطح مقطع انتقال انرژی دیفرانسیلی بین اتم‌های شبکه مشخص شده است. **لازم به ذکر است که σ'_{d} عبارتی برای محاسبه‌ی پرتابه ندارد و در اصل برای محاسبه‌ی یک نوترون** یا یک یون یا منبعی از آسیب است. با استفاده از معادل‌سازی مدل کره‌ی سخت برای ارزیابی σ'_{d} می‌توان نوشت:

$$\sigma(E,T) = \frac{\sigma(E)}{\gamma E}\ ,$$

لیکن $\gamma = ۱$، در نتیجه با جایگذاری در معادله‌ی ۳-۱ و انتگرال‌گیری نتیجه می‌شود که:

(۲-۳)

$$\sigma'_{\mathrm{d}}(E) = \int_{E_{\mathrm{d}}}^{E} \frac{\sigma(E)}{E}\,\mathrm{d}T = \sigma(E)\left(1 - \frac{E_{\mathrm{d}}}{E}\right)\ ,$$

که $\sigma(E) = 4\pi r^2$ برابر با سطح مقطع کلی برخورد میان اتم‌های شبکه است، در نتیجه:

(۳-۳)

$$\sigma'_{\mathrm{d}}(E) = 4\pi r^2\left(1 - \frac{E_{\mathrm{d}}}{E}\right)\ ,$$

و r وابستگی انرژی، معادل با شعاع کره‌ی سخت است، که با استفاده از پتانسیل بورن ـ مایر می‌توان نوشت:

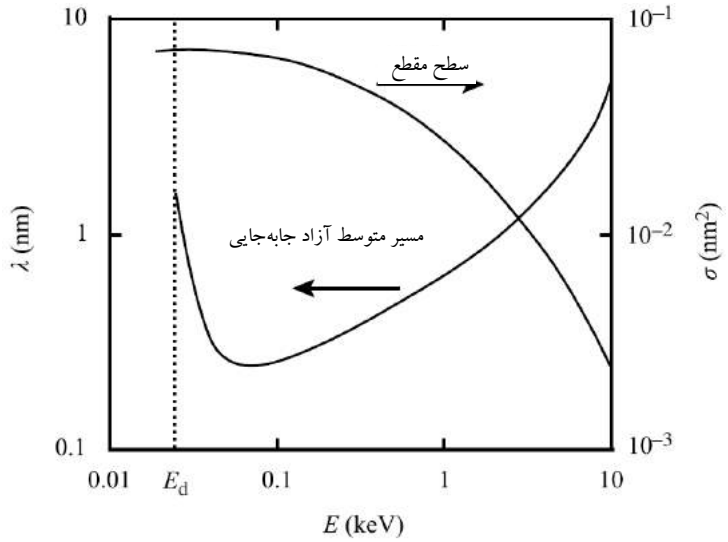
(۴-۳)

$$\sigma'_{\mathrm{d}}(E) = \pi B^2\left[\ln\left(\frac{2A}{E}\right)\right]^2\left(1 - \frac{E_{\mathrm{d}}}{E}\right)\ ,$$

و مسیر متوسط آزاد، λ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\lambda = \frac{1}{N\pi B^2 \left[\ln\left(\frac{2A}{E}\right)\right]^2 \left(1 - \frac{E_d}{E}\right)}. \qquad (۵-۳)$$

مسیر متوسط آزاد و سطح مقطع کلی برخورد در شکل ۳-۱ برای اتم‌های مس در مس رسم شده است و نشان می‌دهد هم‌چنان که انرژی اتم متحرک کاهش می‌یابد، سطح مقطع به تدریج افزایش می‌یابد، لیکن مسیر متوسط آزاد فقط در انرژی‌های بالای E_d بسیار کوچک می‌شود. قابل ذکر است ناحیه‌ی بحرانی ($\lambda \sim$ ۰٫۳ – ۱٫۰ nm)، یا ناحیه‌ای که در آن هر اتم شبکه در مسیر برخورد رودررو، جابه‌جا شده است، در محدوده‌ی انرژی تقریباً ۵۰–۱۰۰ eV است.

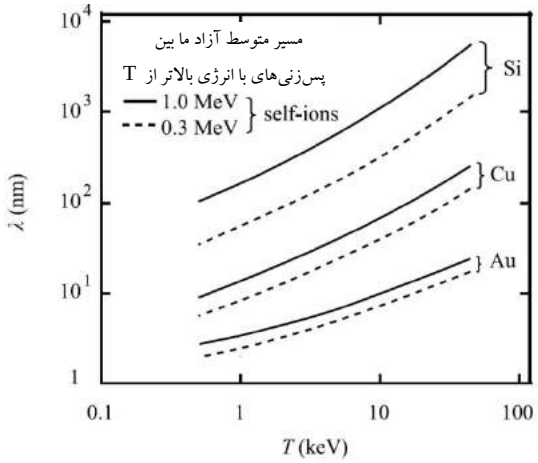


شکل۳-۱. مسیر متوسط آزاد جابه‌جایی و سطح مقطع کلی برخورد برای اتم‌های مس متحرک در هدف مسی[۱].

مسافت‌های آزاد متوسط برای اتم‌های پس‌زده شده‌ی اولیه با انرژی ۳۰۰ keV و ۱ MeV ناشی از خود پرتودهی‌های یونی[1] Si، Cu و Au در شکل ۳-۲ نشان داده شده است. یادآوری می‌شود که

1. Self-ion Irradiations

$\bar{T} = \frac{\gamma E_i}{2} \cong \frac{2E_i}{A}$ (برای برهم‌کنش‌های n-Cu) است، که در این رابطه E_i انرژی نوترون و A جرم اتمی است. به صورت نمونه‌وار $E_i \sim$ ۰٫۵ MeV (برای یک رآکتور حرارتی یا سریع) و A ~ ۶۰ (فولاد زنگ نزن)، $\bar{T} \sim$ ۱۵ keV را نتیجه می‌دهد. در نتیجه در انرژی‌های پس‌زنی بالا، جابه‌جایی‌ها به خوبی مجزا شده‌اند (۱۰۰ nm ~ در ۱۵ keV) لیکن هم‌چنان که انرژی پس‌زنی کاهش می‌یابد، فاصله به فاصله‌های اتمی نزدیک می‌شود که در آن نقطه هر اتم در طول مسیر پس‌زنی جابه‌جا می‌شود.



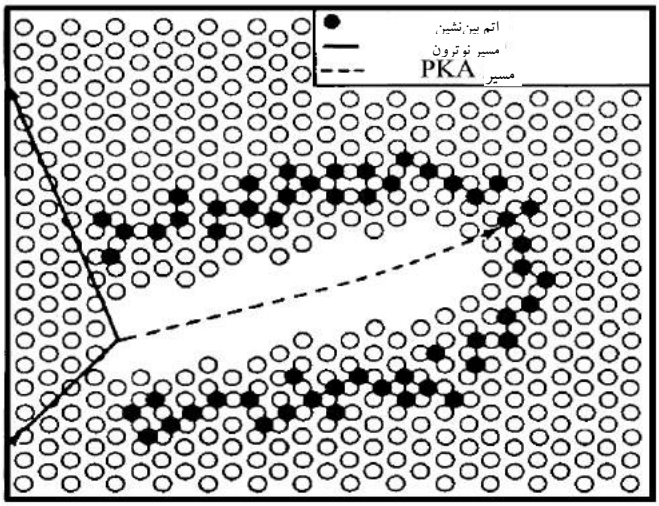
شکل ۳-۲. مسافت‌های آزاد متوسط اتم‌های پس‌زده شده‌ی اولیه ۳۰۰keV و ۱MeV از تابش‌های خود یونی Si، Cu و Au [۲].

۳-۲ طیف پس‌زنی اولیه

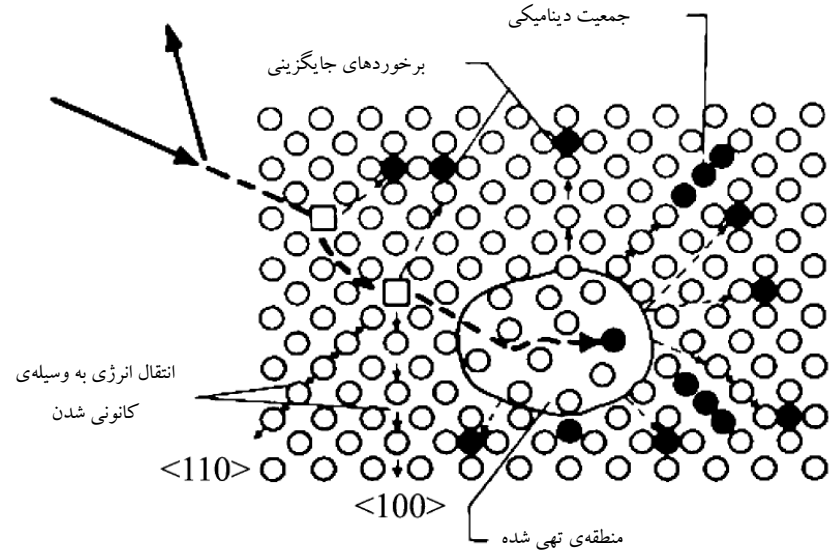
تحلیل مسیر متوسط آزاد جابه‌جایی یک نگاه اجمالی اولیه از آن‌چه که ممکن است توزیع فضایی عیوب شبیه آن باشد، ایجاد می‌کند. برینکمن[1] [۳] اولین نفری بود که آبشار را به صورت میخچه‌ی جابه‌جایی[2] با دانسیته‌ی هسته بالا از جاهای خالی احاطه شده با لایه‌ی بین‌نشینی (شکل ۳-۳) به تصویر کشید. سیگر[3] [۴] این تصویر را برای محاسبه‌ی بلورینگی نظیر بسته‌های انرژی کانونی شده و انتقال

1. Brinkman
2. Displacement Spike
3. Seeger

بلند دامنه‌ی جرم به وسیله‌ی برخوردهای جانشین‌ساز و کاناله شدن اصلاح کرد و هسته جای خالی را یک منطقه‌ی تهی شده نامید (شکل ۳-۴).



شکل۳-۳. نسخه‌ی اصلی از میخچه‌ی جابه‌جایی، همان‌گونه که به وسیله‌ی برینکمن طراحی شده بود[۳].



شکل۳-۴. نسخه‌ی تجدیدنظر شده از میخچه‌ی جابه‌جایی برینکمن همان‌گونه که سیگر [۴] با محاسبه‌ی بلورینگی در آبشار آسیب به تصویر کشیده بود.

دو کمیت دیگر نیز در گسترش تصویری از توزیع انرژی آسیب مفید هستند. اولی توزیع عمقی انرژی ته نشست شده، $F_D(x)$، است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$F_D(x)\,dx = dE = NS_nE(x)\,dx\,. \qquad (۶-۳)$$

استفاده از نیروی بازدارندگی هسته‌ای و برد معین به وسیله‌ی پتانسیل قانون توان، یک شکل ساده برای معادله‌ی $F_D(x)$ را نتیجه می‌دهد:

$$F_D(x) = \frac{T}{2mR}(1 - x/R)^{\frac{1}{2m}-1}\,, \qquad (۷-۳)$$

که T انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و R دامنه‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه هستند و $m = \frac{1}{s}$ است که در این رابطه s نمای قانون توان است. اگر $N_d(x)$ تعداد جابه‌جایی‌ها در واحد عمق در عمق x است، در نتیجه با استفاده از مدل اصلاح شده‌ی K-P یا مدل NRT (به عبارت دیگر معادله‌ی ۲-۵۳) با $\kappa = 0.8$ و $F_D(x)$ جایگزین شده با E_D، می‌توان نوشت:

$$\frac{N_d(x)}{\phi} = \frac{0.8F_D(x)}{2E_d}\,, \qquad (۸-۳)$$

و نرخ جابه‌جایی به صورت تابعی از عمق در واحدهایی از dpa به صورت زیر است:

$$\mathrm{dpa}(x) = \frac{N_d(x)}{N} = \frac{0.4F_D(x)}{NE_d}\phi\,. \qquad (۹-۳)$$

dpa کلی تولید شده در سراسر محدوده‌ی پس‌زنی می‌تواند با جایگزینی $F_D(x)$ با انرژی آسیب E_D از معادله‌ی ۲-۵۴ در سراسر محدوده‌ی پس‌زنی، R تخمین زده شود:

$$\mathrm{dpa} \cong \frac{\phi 0.4 E_{\mathrm{D}}}{N R E_{\mathrm{d}}} . \qquad (۱۰-۳)$$

کمیت مهم دوم، طیف پس‌زنی اولیه است. دانسیته‌ی اتم‌های پس‌زده شده با انرژهای بین T و $T+\mathrm{d}T$ که در طول پرتودهی رخ می‌دهد، یک کمیت بسیار مهم در آسیب تابشی است. دانسیته‌ی پس‌زنی، وابسته به انرژی پرتابه و جرم است و یک اندازه‌ای از دانسیته آسیب جابه‌جایی در هدف را ارایه می‌دهد. دانسیته‌ی پس‌زنی‌ها به صورت تابعی از انرژی پس‌زنی به عنوان طیف پس‌زنی اولیه شناخته می‌شود و به صورت زیر است:

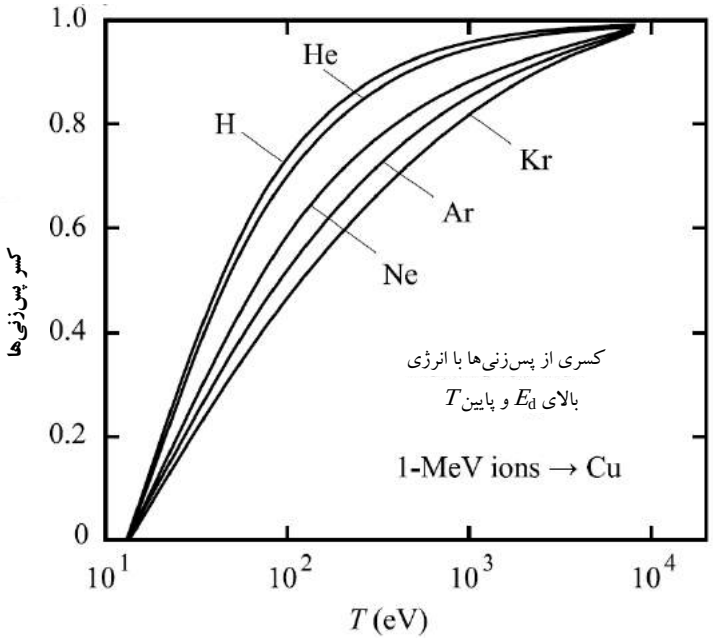
$$P(E_{\mathrm{i}}, T) = \frac{1}{N} \int_{E_{\mathrm{d}}}^{T} \sigma(E_{\mathrm{i}}, T') \, \mathrm{d}T' , \qquad (۱۱-۳)$$

که عددی کسری از پس‌زنی‌ها بین کم‌ترین انرژی جابه‌جایی E_{d}، و انرژی T است، و N تعدادکلی پس‌زنی‌های اولیه است و $\sigma(E_{\mathrm{i}},T)$ سطح مقطع انتقال انرژی برای ذره‌ای با انرژی E_{i} برای ایجاد پس‌زنی با انرژی T است. کسر پس‌زنی‌ها در شکل ۳-۵ برای پرتابه‌هایی با انرژی ۱ MeV و جرم‌های فرودی مختلف برروی یک هدف مسی نشان داده شده است. لازم به ذکر است درحالی‌که پرتابه‌هایی با انرژی بالاتر پس‌زنی‌های بیش‌تری را در انرژی بالاتر تولید می‌کنند، لیکن تفاوت‌ها خیلی زیاد نیستند.

برای تولید عیب، تعداد پس‌زنی‌ها با یک انرژی مشخص خیلی مهم نیستند و در اصل کسر انرژی آسیب که در پس‌زنی‌های با یک انرژی مشخص تولید شده، بسیار حایز اهمیت است. این کمیت با توزین[1] طیف پس‌زنی به وسیله‌ی تعداد عیوب یا انرژی آسیب تولید شده در هر پس‌زنی تعیین می‌شود:

$$W(E_{\mathrm{i}}, T) = \frac{1}{E_{\mathrm{D}}(E_{\mathrm{i}})} \int_{E_{\mathrm{d}}}^{T} \sigma(E_{\mathrm{i}}, T') E_{\mathrm{D}}(T') \, \mathrm{d}T' , \qquad (۱۲-۳)$$

1. Weighting



شکل ۳-۵. انتگرال طیف پس‌زنی اولیه برای ذراتی با انرژی ۱ MeV در مس. منحنی‌های رسم شده کسرهای انتگرالی پس‌زنی‌های اولیه میان انرژی آستانه و انرژی T از معادله‌ی ۳-۱۱ هستند[۲].

که در این رابطه $E_D(T)$ انرژی آسیب ایجاد شده به وسیله‌ی پس‌زنی‌ای با انرژی T است:

(۱۳-۳)

$$E_D(E_i) = \int_{E_c}^{\hat{T}} \sigma(E_i, T') E_D(T')\, dT' ,$$

و $\hat{T} = \gamma E_i$.

برای کرانه‌های برهم‌کنش‌های کولنی و کره‌ی سخت، سطح مقطع انتقال انرژی دیفرانسیلی برابر است با:

(۱۴-۳)

$$\sigma_{Coul}(E_i, T) = \frac{\pi M_1 (Z_1 Z_2 \varepsilon^2)^2}{E_i T^2} ,$$

و

$$\sigma_{\mathrm{HS}}(E_{\mathrm{i}}, T) = \frac{A}{E_{\mathrm{i}}} \,. \tag{۱۵-۳}$$

با نادیده گرفتن برانگیختگی‌های الکترونی و در نظر گرفتن $E_{\mathrm{D}}(T) = T$ و جایگذاری معادله‌های ۳-۱۴ و ۳-۱۵ در معادله‌ی ۳-۱۲ برای هر نوع از برهم‌کنش‌ها، میانگین وزنی طیف پس‌زنی به‌دست می‌آید:

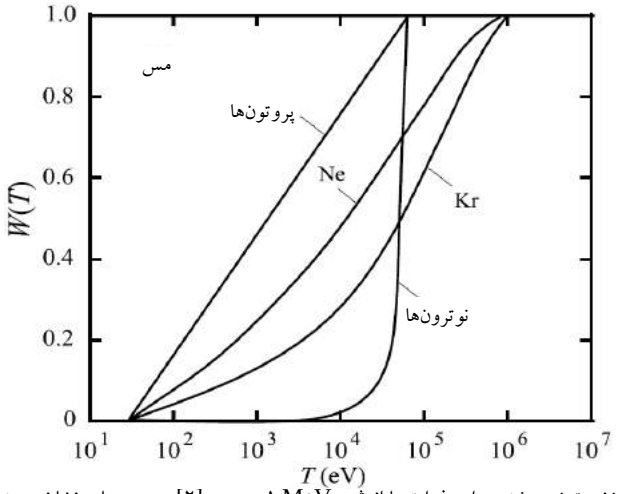
$$W_{\mathrm{Coul}}(T) = \frac{\ln T - \ln \check{T}}{\ln \hat{T} - \ln \check{T}} \,, \tag{۱۶-۳}$$

و

$$W_{\mathrm{HS}}(T) = \frac{T^2 - \check{T}^2}{\hat{T}^2} \tag{۱۷-۳}$$

که $\check{T} = E_{\mathrm{d}}$ است. معادله‌های ۳-۱۶ و ۳-۱۷ در شکل ۳-۶ برای پرتودهی هدف مسی با ذراتی با انرژی ۱ MeV رسم شده است. پتانسیل کولنی یک تقریب خوب برای پرتودهی پروتونی است درحالی‌که پتانسیل کره‌ی سخت یک تقریب خوب برای پرتودهی نوترونی است. نیروهای کولنی تا بی‌نهایت ادامه داشته و هم‌چنان که ذره به هدف نزدیک می‌شود به آرامی افزایش می‌یابند. در یک برهم‌کنش کره‌ی سخت، ذره و هدف یک‌دیگر را لمس نمی‌کنند تا زمانی‌که فاصله‌ی جداشدگی آن‌ها به شعاع کره‌ی سخت در نقطه‌ای برسد که نیروهای دافعه نامحدود می‌شوند. یک تابع استتار شده‌ی کولنی برای پرتودهی یون سنگین بسیار مناسب است. نتیجه به این صورت است که برهم‌کنش‌های کولنی تمایل به ایجاد تعداد زیادی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی پایین دارند درحالی‌که برخوردهای کره‌ی سخت تعداد کم‌تری اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه ولی با انرژی‌های بالاتری را تولید می‌کنند. نکته‌ی قابل توجه، تفاوت زیاد در $W(T)$ میان انواع مختلف پرتودهی‌ها در شکل ۳-۶ است. **درحالی‌که یون‌های سنگین از یون‌های سبک برای باز تولید توزیع انرژی پس‌زنی‌های نوترونی به یک‌دیگر نزدیک‌تر می‌شوند، لیکن هیچ یک از آن‌ها در دنباله‌های**

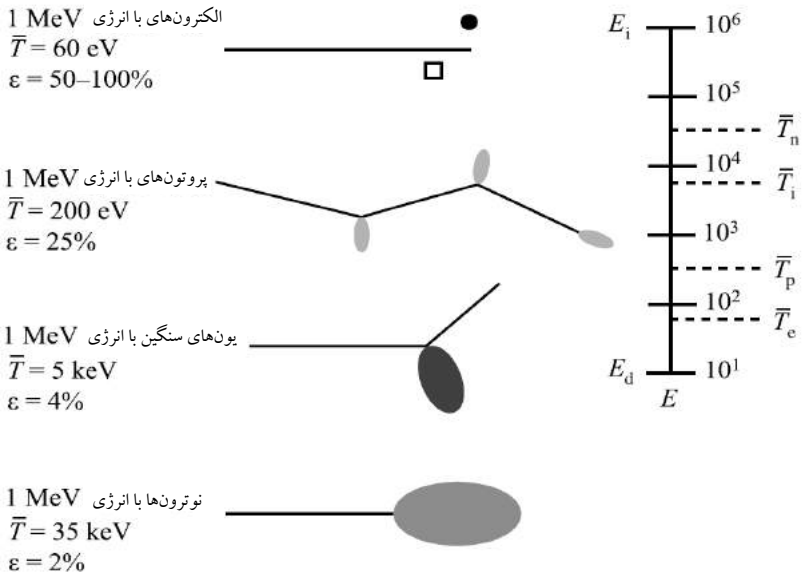
توزیع دقیق نیستند. این مطلب به این معنی نیست که یون‌ها شبیه‌سازهای ضعیفی از آسیب تابشی هستند، بلکه به این معنی است که آسیب به صورت متفاوتی تولید شده است و لازم است که آسیب هنگام تعیین تغییرات ریزساختاری و میکروشیمیایی ناشی از پرتودهی مورد توجه قرار گیرد.



شکل ۳-۶. طیف پس‌زنی توزین شده برای ذرات با انرژی ۱ MeV در مس[۲]. منحنی‌های نشان دهنده‌ی پروتون‌ها و نوترون‌ها، به ترتیب با استفاده از معادله‌های ۳-۱۴ و ۳-۱۵ محاسبه شده‌اند. $W(T)$ برای دیگر ذرات سطح مقطع‌های لیندهارد مورد استفاده قرار گرفته و برانگیختگی‌های الکترونی را دربر می‌گیرد.

شکل ۳-۷ تفاوت بین انواع آسیب را نشان می‌دهد که به وسیله‌ی انواع مختلفی از ذرات تولید شده است. یون‌های سبک مانند الکترون‌ها و پروتون‌ها آسیب را به صورت یک جفت فرانکل تکی یا در خوشه‌های کوچک تولید می‌کنند درحالی‌که یون‌های سنگین و نوترون‌ها آسیب را در خوشه‌های بزرگ ایجاد می‌کنند. برای پرتودهی نیکل با ذراتی با انرژی ۱ MeV، نیمی از پس‌زنی‌ها برای پروتون‌ها، با انرژی‌های کم‌تر از ۱ keV ~ است لیکن با یک میانگین انرژی ۶۰ eV تولید شده است. درحالی‌که تولید تعداد مشابهی از پس‌زنی‌ها برای Kr در انرژی حدوداً ۳۰ keV و با میانگین انرژی ۵ keV رخ می‌دهد. پس‌زنی‌ها به سمت انرژی‌های پایین‌تر توزین شده‌اند؛ زیرا پتانسیل استتار شده‌ی کولنی است که برهم‌کنش‌های ذرات باردار را کنترل می‌کند. برای برهم‌کنش کولنی غربال نشده احتمال ایجاد یک پس‌زنی با انرژی T به صورت $\frac{1}{T^2}$ تغییر می‌کند. از آن‌جایی که نوترون‌ها به

صورت کره‌های سخت برهم‌کنش می‌کنند، احتمال ایجاد پس‌زنی با انرژی T مستقل از انرژی پس‌زنی است.



شکل ۳-۷. تفاوت در ریخت‌شناسی آسیب، راندمان جابه‌جایی و میانگین انرژی پس‌زنی برای ذراتی با انرژی ۱ MeV از انواع مختلفی از ذرات فرودی برروی نیکل[۶].

۳-۳ انرژی آسیب آبشاری و حجم آبشار

دانسیته‌ی انرژی در آبشار با حجم V_{cas} که به وسیله‌ی پرتابه‌ی پرانرژی با انرژی E_i تشکیل شده است به صورت زیر است [۷]:

$$\bar{\Theta}_D \cong \frac{E_D}{NV_{cas}}, \qquad (۱۸-۳)$$

که در این رابطه E_D انرژی آسیب تعریف شده در معادله‌ی ۲-۵۴ و N دانسیته‌ی اتم هدف است. برای تشخیص حجم آبشار اطلاعاتی از توزیع عمقی انرژی آسیب لازم است. آوربک[1] [۲] نشان داد که حجم آبشار می‌تواند به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر تخمین زده شود:

1. Averback

(۱۹-۳)

$$V_{\text{cas}} = \frac{4\pi}{3}((\delta\Delta X)^2 + 2(\delta Y)^2)^{3/2} ,$$

که در این رابطه $(\Delta X)^2$ و Y^2 گشتاورهای طولی و عرضی توزیع انرژی آسیب ته نشست شده برای آبشار مشخص هستند و δ یک عامل مختصر کننده است که برای تفاوت بین یک آبشار تکی و آبشار میانگین تعیین شده به وسیله‌ی تئوری انتقالی محاسبه می‌شود.

درحالی‌که معادله‌های ۳-۱۸ و ۳-۱۹ توضیحاتی را از گستردگی فضایی یک آبشار فراهم می‌کنند، دیگر مشخصات آبشار، دما و عمر موقت آبشار هستند. دمای مؤثر آبشار می‌تواند به وسیله‌ی رابط زیر تخمین زده شود:

(۲۰-۳)

$$3k_{\text{B}}T_{\text{max}} = \bar{\Theta}_{\text{D}} ,$$

که k_{B} ثابت بولتزمان است. عمر آبشار یا میخچه‌ی حرارتی می‌تواند با حل معادله‌ی حرارتی برای نشر انرژی از منبع نقطه‌ای در سه‌بعد تخمین زده شود. انحراف در مقطع دما، R^2، به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود.

(۲۱-۳)

$$R^2 = 4D\tau ,$$

که τ عمر آبشار و D ضریب پخش حرارتی است که برابر با $\kappa_{\text{T}}/C_{\text{p}}$ است که κ_{T} هدایت حرارتی و C_{p} ظرفیت حرارتی ویژه هستند. در نتیجه انرژی آبشار برابر است با:

(۲۲-۳)

$$E_{\text{D}} = \frac{4}{3}\pi R^3 U_{\text{a}} N ,$$

که در این رابطه U_{a} انرژی برای هر اتم است. عمر آبشار به وسیله‌ی ترکیب معادله‌های ۳-۲۱ و ۳-۲۲

و حل برای τ به‌دست می‌آید:

$$\tau = \frac{1}{4D}\left(\frac{3E_{\mathrm{D}}}{4\pi N U_{\mathrm{a}}}\right) . \qquad (۲۳-۳)$$

اگر U_{a} از دمای ذوب هدف تخمین زده شود، در نتیجه $U_{\mathrm{a}} \sim ۰٫۳$ eV و $D \sim ۱۰^{۱۲}$ nm^2/s است، سپس عمر یک آبشار با انرژی ۱ keV در حدود $۱۰^{-۱۲}$ s یا چند دوره‌ی نوسان شبکه است.

۳-۴ شبیه‌سازی کامپیوتری آسیب تابشی

تا این‌جا راه‌حل‌های تحلیلی وابستگی فضایی و زمانی آسیب ایجاد شده به وسیله‌ی ذره‌ی پرانرژی فرودی برروی یک هدف مورد بحث قرار گرفت. و همان‌طوری که در آینده دیده خواهد شد، تجهیزات دقیق برای مشاهده‌ی خوشه‌های عیب مانند میکروسکوپ الکترونی عبوری[۱] (TEM)، پراکندگی اشعه‌ی ایکس[۲]، پراکندگی نوترونی زاویه‌ی کوچک[۳] و اسپکتروسکوپی نابودسازی پوزیترونی[۴] وجود دارند. لیکن این تجهیزات قدرت تفکیک تصویر عیوب تکی را ندارند و آن‌ها نمی‌توانند گسترش موقتی آبشار را ردیابی کنند و به تصویر بکشند. برای به‌دست آوردن فهم بهتر از گسترش‌های فضایی و موقتی آبشار، باید به شبیه‌سازهای کامپیوتری مراجعه شود. سه تکنیک اساسی برای شبیه‌سازی رفتار اتم‌ها در یک آبشار جابه‌جایی وجود دارد: روش تقریب برخورد دوتایی[۵] (BCA)، روش جنبشی مولکولی[۶] (MD) و روش جنبشی مونته کارلو[۷] (KMC) [۸]. هر کدام از این روش‌ها در ادامه به صورت خلاصه توضیح داده می‌شود:

1. Transmission Electron Microscopy
2. X-ray scattering
3. Small angle neutron scattering
4. Positron annihilation spectroscopy
5. Binary Collision Approximation
6. Molecular Dynamics
7. Kinetic Monte Carlo

۳-۴-۱ روش تقریب برخورد دوتایی

شبیه‌سازی‌های تقریب برخورد دوتایی برای بررسی مراحل برخوردی آبشارهای پرانرژی در ارقام معنی‌دار آماری مفید هستند. شبیه‌سازی‌های تقریب برخورد دوتایی فقط برهم‌کنش‌های بین دو اتم برخورد کننده در یک زمان و در توالی را مورد توجه قرار می‌دهد [۸]. محاسبات فقط برای اتم‌های دارای انرژی‌های مشخص انجام می‌شود و در نتیجه بسیار کارآمد است. روش تقریب برخورد دوتایی، تقریب خوبی را برای مرحله‌ی برخورد فراهم می‌کند، زیرا برخوردهای چند بدنه‌ای نادیده گرفته شده سهم کم‌تری را در خط سیر اتمی در انرژی‌های برخوردی بالاتر از انرژی جابه‌جایی اتم دارند. در انرژی‌های نزدیک یا حتی کم‌تر از انرژی جابه‌جایی، ترکیب‌های حرکتی آبشارها مانند توالی‌های جایگزینی ـ برخوردی و توالی‌های کانونی شده ـ برخوردی به صورت منطقی به وسیله‌ی محاسبات تقریب برخورد دوتایی ردیابی می‌شوند. در انرژی‌های پس‌زنی اولیه تقریباً بالاتر از ۲۰ keV، آبشار ممکن است بیش‌تر از یک ناحیه آسیب را داشته باشد. به خاطر آن‌که مسیر متوسط آزاد بین برخوردهای پرانرژی از یک اتم پس‌زده شده با انرژی افزایش می‌یابد، آبشارهای پرانرژی‌تر، متشکل از چند ناحیه‌ی آسیبی یا آبشارهای فرعی هستند که در نتیجه‌ی برخوردهای پرانرژی به خوبی در فضا گسترده شده‌اند. کاناله شدن پس‌زنی‌های اولیه یا پرانرژی ثانویه نیز در تشکیل آبشار فرعی در هنگام اتلاف انرژی پس‌زنی‌های کاناله شده و کانال زدایی شرکت خواهند کرد.

دو نوع مشخص از مدل‌های تقریب برخورد دوتایی وجود دارد. مدل‌هایی که برای هدف‌های بلورین هستند، به صورت BC یا مدل‌های بلورین دوتایی بیان می‌شوند و شبیه به مدل جنبشی مولکولی هستند که در آن تمام اتم‌ها به موقعیت‌های ابتدایی تعریف شده اختصاص داده می‌شوند [۹]. مدل‌های موجود برای مواد بدون نظم بلند دامنه (جامدهای بی‌شکل) به صورت MC یا مدل‌های مونته کارلو تعریف می‌شوند و روش‌های احتمالاتی را برای تعیین موقعیت اتم‌های هدف مورد استفاده قرار داده و عوامل برخورد را تعیین می‌کند. مدل‌های MC شبیه به مدل‌های تئوری انتقالی مورد استفاده در تئوری تحلیلی برای پیدا کردن جمعیت نوترون‌ها در یک محیط است.

مثالی از مدل BC کد MARLOW [۱۰] است. برنامه، هدف‌های بلورین را با هیچ‌گونه محدودیتی برروی تقارن بلوری یا ترکیب شیمیایی مدل‌سازی می‌کند. تمام عوامل برخورد از موقعیت‌های ذره محاسبه می‌شود. چندین پتانسیل بین اتمی انتخابی برای توضیح برخوردهای اتمی موجود است. اتلاف‌های انرژی غیرکشسانی ممکن است که به صورت‌های موضعی یا غیرموضعی به وجود آیند،

لیکن اتلاف‌ها به محدوده سرعت نسبی ($E^{1/2}$) انرژی‌های جنبشی محدود می‌شوند. شکل ۳-۸ آرایش فضایی عیوب از یک شبیه‌سازی کامپیوتری اولیه با استفاده از کد MARLOWE برای موردی از یک آبشار با انرژی ۲۰۰ keV در مس را نشان می‌دهد. این آبشار بسیار پرانرژی است که فقط از نوترون‌های بسیار پرانرژی، مانند نوترون‌هایی که در رآکتورهای شکافت تولید شده‌اند، انتظار می‌رود. اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه در پایین‌ترین گوشه‌ی سمت راست (فلش) تولید شده است و با انرژی جنبشی ۲۰۰ keV به سمت چپ گسترش می‌یابد. کره‌های سیاه اتم‌های جابه‌جا شده هستند و کره‌های روشن‌تر موقعیت‌های خالی شبکه هستند. لازم به ذکر است که آبشار کامل شامل چندین آبشار فرعی است.



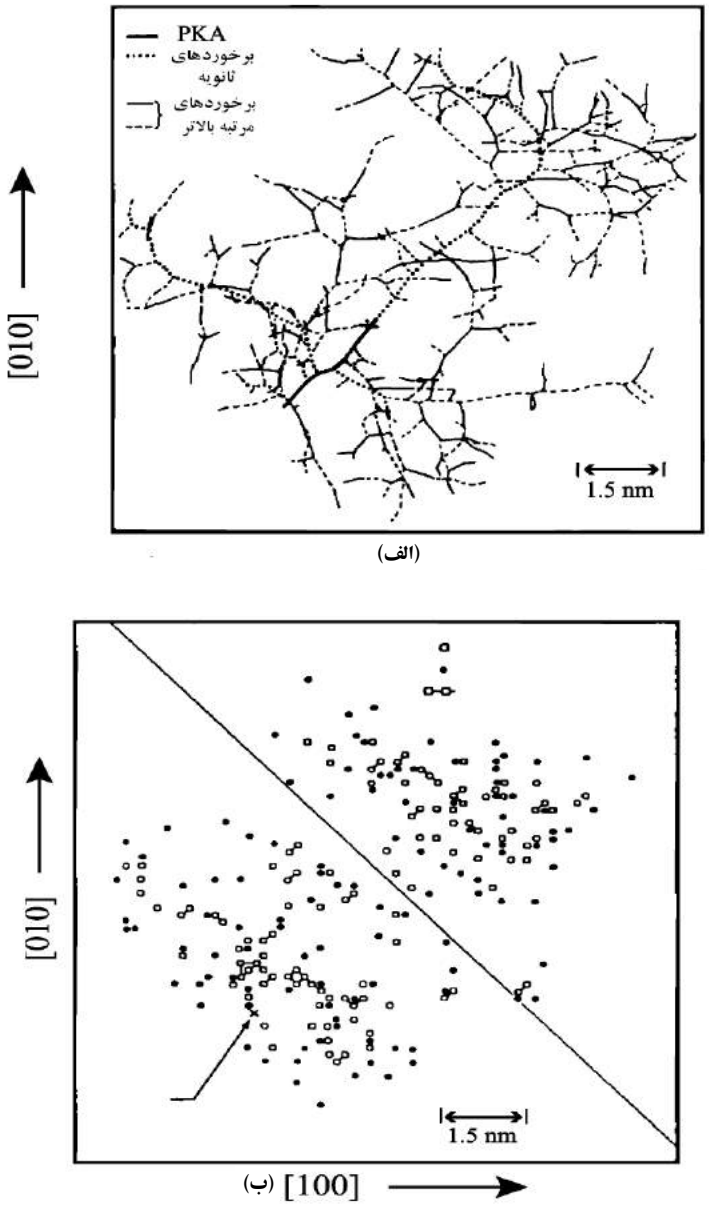
شکل۳-۸. صحنه‌ی برخورد آبشار با انرژی ۲۰۰ keV در مس که با استفاده از تقریب برخورد دوتایی در MARLOWE شبیه‌سازی شده است[۸].

دومین مثال در شکل ۳-۹ نشان داده شده است و مشخص می‌کند که چگونه آبشار می‌تواند در فضا گسترش یابد. مسیرهای پس‌زنی و آرایش بین‌نشین‌ها و جاهای خالی در آهن bcc بعد از برهم‌کنش با اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی ۵ keV در دمای صفر درجه‌ی کلوین نشان داده شده است [۱۱]. فرض شده است که تمام جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در درون کره‌ی حاوی ۳۰ موقعیت اتمی شبکه به صورت خودبه‌خودی بازترکیب می‌شوند. قابل توجه است که در شکل ۳-۹ الف، که برخورد ثانویه در مرکز یک میخچه منجر به تحمیل کاناله شدن می‌شود، گسترش آبشار در بالای نیمه‌ی راست شبکه که در شکل ۳-۹ ب نشان داده شده است را ممکن می‌سازد. در اصل، تمام آسیب در قسمت بالا و سمت راست قطر، ناشی از کاناله شدن برخورد ثانویه است.

TRIM [۱۲] کد دیگری از تقریب برخورد دوتایی است که برای توضیح مسیر ذره‌ی فرودی و آسیب ایجاد شده به وسیله‌ی ذره در جامدات بی‌شکل از روش‌های مونته کارلو استفاده می‌کند و به صورت خلاصه در فصل ۱ توضیح داده شده است. TRIM ضریب فشردگی بیشینه‌ی تنظیم شده به وسیله‌ی دانسیته‌ی محیط واسط و یک مسیر آزاد متوسط ثابت بین برخوردها را استفاده می‌کند که مرتبط با آن است. روش‌های احتمالاتی برای انتخاب ضریب فشردگی برای هر برخورد و برای تعیین صفحه‌ی پراکندگی استفاده می‌شود. زاویه‌ی پراکندگی مرکز جرمی[1] که به وسیله‌ی یک فرمول خاص تعیین شده است، در مقابل جدول‌های انتگرالی منتشر شده آزمایش شد و پراکندگی از پتانسیل کلی ZBL را نشان می‌دهد. اتلاف‌های انرژی غیرکشسانی که برپایه‌ی فرمول‌بندی بار مؤثر هستند، جدول‌های توزیع شده به همراه کدها را استفاده می‌کنند.

شکل ۳-۱۰ یک شبیه‌سازی از پروتون‌های فرودی با انرژی ۳ MeV برروی یک هدف نیکلی را نشان می‌دهد. شکل ۳-۱۰ الف مسیرهای ذرات فرودی برای ۱۰۰۰۰ مورد (اجراهای MC) را نشان می‌دهد و شکل ۳-۱۰ ب مقطع غلظت یون و مقطع نرخ جابه‌جایی را به صورت تابعی از عمق نشان می‌دهد.

1. Barycentric

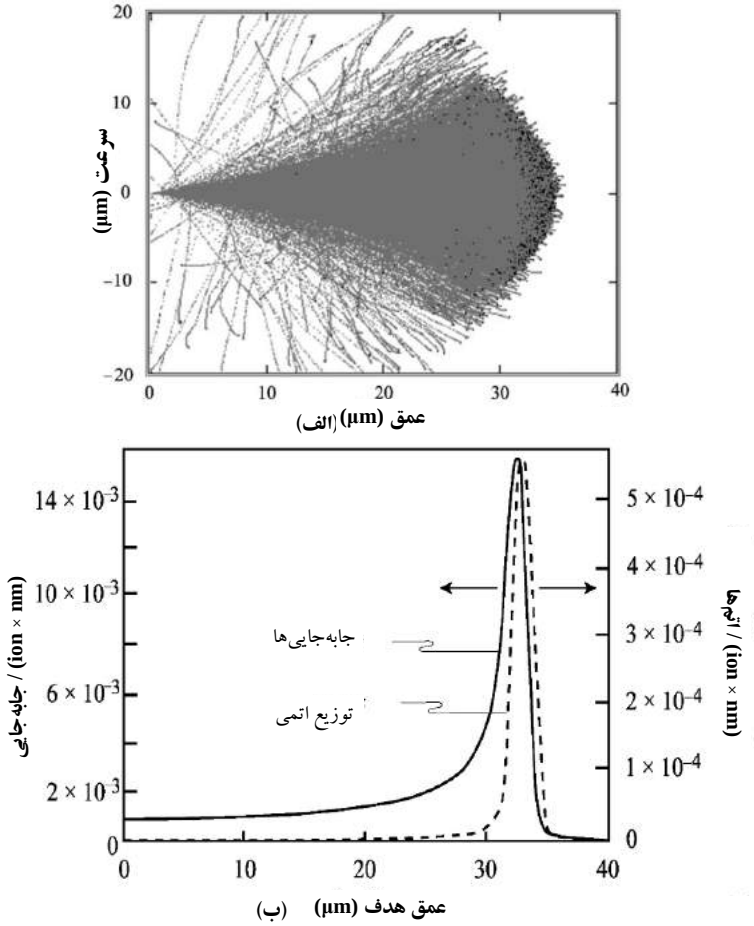


شکل ۳-۹. شبیه‌سازی کامپیوتری میخچه‌ی جابه‌جایی ناشی از اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی ۵ keV در آهن. تمام آسیب خارج از صفحه، برروی صفحه‌ی ⟨001⟩ نشان داده شده در شکل به تصویر کشیده شده است.
(الف) مسیرهای پس‌زنی و (ب) جاهای خالی و اتم‌های بین‌نشین در پایان آبشار برخورد (0 K).
خط قطری در (ب) اثر کاناله شدن اتم‌های ضربه زننده‌ی ثانویه را نشان می دهد[۱۱].

۳-۴-۲ روش جنبشی مولکولی

روش جنبشی مولکولی دومین نوع اصلی از روش‌شناسی مورد استفاده برای توضیح آبشارهای برخورد است. جنبشی مولکولی یک روش به شدت محاسبه‌ای برای مدله کردن سیستم‌های اتمی در مقیاس مناسب، برای شبیه‌سازی آبشارهای جابه‌جایی و فراهم کردن توضیحات واقع گرایانه از برهم‌کنش‌های اتمی در آبشارها است [۸]. با استفاده از پتانسیل‌های بین اتمی واقعی و شرایط مرزی مناسب، سرنوشت تمام اتم‌ها در یک حجم دربرگیرنده آبشار می‌تواند از طریق مراحل مختلف گسترش آبشار توضیح داده شود. توابع پتانسیلی بین اتمی تحلیلی، باید نیروهای روی یک اتم را به صورت تابعی از فاصله بین آن اتم و دیگر اتم‌ها در سیستم تشریح کنند. این عملیات باید به منظور به‌دست آوردن آرایش‌های پایدار شبکه برای نیروهای جاذبه و نیروهای دافعه محاسبه شوند. در شبیه‌سازی جنبشی مولکولی، انرژی کلی سیستم اتم‌های شبیه‌سازی شده، به وسیله‌ی جمع مجموع اتم‌ها محاسبه شده است. نیروهای موجود برروی اتم‌ها برای محاسبه‌ی شتاب مطابق با $F = ma$ مورد استفاده قرار گرفته است و معادلات حرکت برای اتم‌ها را نتیجه داده است. کد کامپیوتری این معادلات را به صورت عددی در مراحل زمانی بسیار کوچکی حل می‌کند و سپس نیروها را در پایان مرحله‌ی زمانی محاسبه کرده و برای محاسبات در مرحله‌ی زمانی بعد به‌کار می‌گیرد. این فرایند تکرار می‌شود تا حالت دلخواه به‌دست آید. مراحل زمانی در شبیه‌سازی جنبشی مولکولی باید بسیار کوچک باشد (۱۰×۱۰^{-۱۵} s)، در نتیجه شبیه‌سازی جنبشی مولکولی در اصل برای بیش‌تر از ۱۰۰ ps به اجرا در نمی‌آید. هم‌چنان که انرژی جنبشی اولیه‌ی E افزایش می‌یابد، از لحاظ عددی بلوریت‌های بسیار بزرگ‌تری برای احاطه‌ی رخداد لازم است. اندازه‌ی بلوریت‌ها تقریباً با E متناسب است. مقیاس‌های زمانی مورد نیاز برای محاسبه تقریباً متناسب با E^2 است. میزان زمان محاسبه به توانایی‌های آماری شبیه‌سازی جنبشی مولکولی محدود می‌شود. به هر جهت، این شبیه‌سازها دیدگاه بسیار مفصلی از گستردگی فضایی فرایند آسیب برروی یک تراز اتمی که از تکنیک‌ها دیگر قابل حصول نیست را فراهم می‌کنند.

شبیه‌سازی آبشار به وسیله‌ی موازنه‌سازی حرارتی بلوک از اتم‌ها آغاز می‌شود که سازنده‌ی سیستم مورد مطالعه هستند. این فرایند تعیین نوسان‌های شبکه برای دمای شبیه‌سازی شده را مجاز می‌کند. بعد از آن، شبیه‌سازی آبشار با دادن مقدار مشخصی از انرژی جنبشی و یک جهت اولیه به یکی از اتم‌های شبکه آغاز می‌شود. چندین آبشار باید اجرا شوند تا نتیجه‌ای حاصل شود که بتوان از آن برای نشان دادن رفتار میانگین سیستم در هر انرژی و دمایی استفاده شود.



شکل ۳-۱۰. یک پروتون فرودی با انرژی MeV ۳ برروی نیکل که با کد TRIM مدل‌سازی شده است: (الف) مسیر فرود، (ب) مقطع غلظت و مقطع جابه‌جایی.

یکی از کدهای مورد استفاده برای شبیه‌سازهای جنبشی مولکولی، کد MOLDY است که به وسیله‌ی فنیس[1] [۱۳] نوشته شده است و پتانسیل‌های درون اتمی توسعه داده شده به وسیله‌ی فنیس و سینکلار[2] [۱۳] را مورد استفاده قرار می‌دهد، و بعدها به وسیله‌ی کالدر[3] و باکون[4] برای شبیه‌سازی‌های آبشاری

1. Finnis
2. Sinclair
3. Calder
4. Bacon

اصلاح شده است [۱۴]. این کد فقط برخوردهای کشسان بین اتم‌ها را توضیح می‌دهد و هیچ‌گونه محاسبه‌ای برای سازوکارهای اتلاف انرژی مانند برانگیختگی الکترونی و یونیزاسیون ندارد.

انرژی داده شده به اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه در شبیه‌سازی جنبشی مولکولی مطابق با مقدار انرژی جابه‌جایی E_D، مشخص شده در معادله‌ی ۲-۵۴، است. استولر[1] [۱۵] یک شبیه‌سازی جنبشی مولکولی را برای آهن اجرا کرد و عوامل آبشار نشان داده شده در جدول ۳-۱ را به‌دست آورد.

جدول ۳-۱. مقادیر نمونه‌وار آبشار جنبشی مولکولی و اندازه‌های حجمی اتمی مورد نیاز [۱۵].

انرژی آبشار $E_{MD} \sim E_D$(keV)	انرژی متناظر با PKA (keV)	عیوب NRT (ν_{NRT})	اندازه‌ی حجم اتم (اتم‌ها)
0.1	0.116	1	3456
0.2	0.236	2	6750
0.5	0.605	5	6750
1.0	1.24	10	54,000
2.0	2.54	20	54,000
5.0	6.61	50	128,000
10.0	13.7	100	250,000
20.0	28.8	200	250,000
50.5	61.3	400	1,024,000

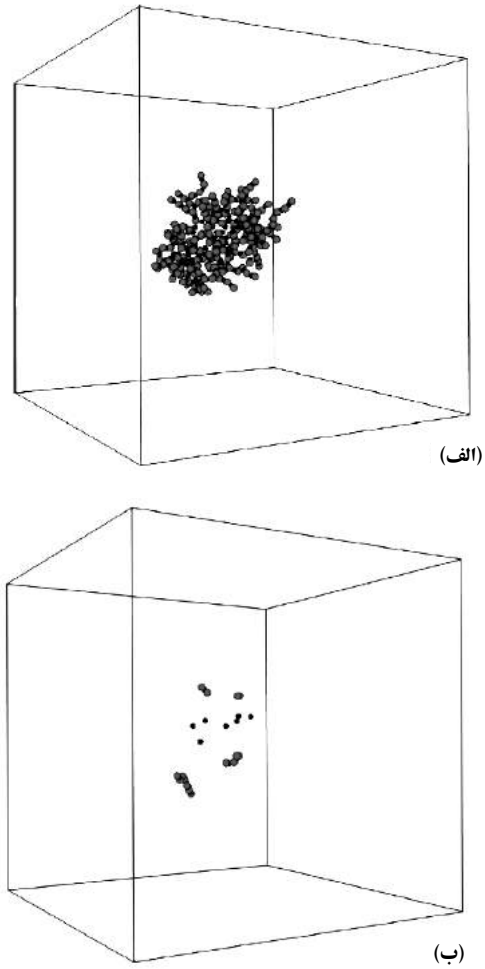
قابل ذکر است که با افزایش انرژی، تفاوت بین انرژی آبشار جنبشی مولکولی و انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه افزایش می‌یابد. شکل ۳-۱۱ آرایش‌های نمونه‌وار عیب نقطه‌ای از یک شبیه‌ساز آبشار جنبشی مولکولی با انرژی keV ۱ در آهن در دمای K ۱۰۰ را نشان می‌دهد. شکل ۳-۱۱ الف آبشار را در نقطه‌ی اوج بی‌نظمی و شکل ۳-۱۱ ب بازترکیبی درون آبشاری را نشان می‌دهند.

لازم به یادآوری است که کاهش قابل ملاحظه‌ای در آسیب باقی‌مانده بین ps ۰٫۱۸ و ps ۹٫۵ وجود دارد. این نتایج نشان می‌دهد که آسیب واقعی ناشی از اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه نسبت به کل تعداد جابه‌جایی‌های محاسبه شده از مدل‌های K-P یا NRT بسیار کم‌تر است. درحالی‌که تصاویر ساکن از صحنه‌های آبشار در فهم چگونگی گسترش آبشار مفید هستند، ارزیابی بسیار بهتری با مشاهده‌ی مستقیم تکامل موقتی آبشار حاصل می‌شود.

این کار می‌تواند با دیدن فیلم ۳-۱ از طریق لوح فشرده‌ی پیوست کتاب انجام شود. این فیلم شبیه‌سازی جنبشی مولکولی برای گسترش یک آبشار از یک پس‌زنی با انرژی keV ۲۰۰ در آهن در K۱۰۰ از

1. Stoller

طریق کوینچ کردن آبشار در ۲۱٫۶ ps را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که گستردگی آبشار به گوشه‌ی سمت راست و پایین شاید ناشی از یک اثر بلورشناسی دربرگیرنده کاناله شدن است. هم‌چنین تفاوت قابل توجهی در دانسیته‌ی عیب بین مرحله حداکثر حرکت (۰٫۷ ps ~) و پایان کوینچ در ۲۱٫۶ ps وجود دارد.



شکل۳-۱۱. آرایش نمونه‌وار عیب نقطه‌ای از یک شبیه‌سازی جنبشی مولکولی با انرژی ۱ keV در آهن در دمای ۱۰۰ K در (الف) زمان حداکثر بی‌نظمی (۰٫۱۸ ps) و (ب) بازترکیبی درون آبشاری (۹٫۵ps). کره‌های بزرگ‌تر و روشن‌تر بین‌نشین‌ها و کره‌های کوچک‌تر و تیره‌تر جاهای خالی هستند[۱۵].

۳-۴-۳ روش جنبشی مونته کارلو (KMC)

هدف محققین شبیه‌سازی سیر تکامل جنبشی سیستم‌های اتمی در طول رخداد و بعد از رخداد جابه‌جایی است. قوی‌ترین ابزار در این گروه از روش‌های شبیه‌سازی اتمی، علم جنبشی مولکولی است. با انتگرال‌گیری معادلات کلاسیک پیشرو در زمان، و بدون نیاز به اطلاعات بیش‌تر، رفتار سیستم به صورت طبیعی مشخص می‌شود. به هر جهت یک‌سری از محدودیت‌هایی وجود دارد که این محدودیت‌ها به این صورت است که انتگرال‌گیری دقیق برای حل نوسانات اتمی، مراحل زمانی به اندازه‌ی کافی کوتاهی ($\sim 10^{-15}$ s) را نیاز دارد. در نتیجه، به صورت نمونه‌وار زمان شبیه‌سازی کلی به کم‌تر از یک نانو ثانیه محدود می‌شود، درحالی‌که فرایندهای مورد مطالعه (به عبارت دیگر نفوذ و نابودسازی عیوب بعد از یک رخداد آبشار) اغلب در زمان‌هایی بیش‌تر از این مقیاس رخ می‌دهند. این «مشکل مقیاس زمانی[1]» است.

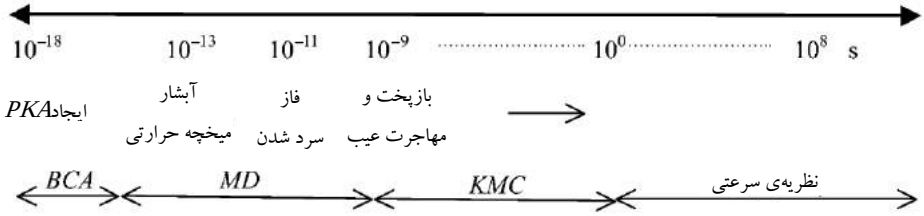
مونته کارلوی جنبشی تلاش می‌کند تا با بهره‌گیری از این حقیقت که حرکت‌های بلند مدت این نوع از سیستم‌ها به صورت معمول مشتمل بر پرش‌های نفوذی از حالتی به حالت دیگر است، بر این محدودیت‌ها غلبه کند. به جای دنبال کردن خط سیر از طریق هر دوره‌ی نوسانی، این گذارهای حالت به حالت به صورت مستقیم مورد بررسی قرار می‌گیرند. با تعیین یک سری از ثابت‌های سرعتی مرتبط با حالت‌های یک سیستم، مونته کارلوی جنبشی راهی را برای گسترش مسیرهای صحیح حرکتی از طریق فضای آن حالت مشخص، پیشنهاد می‌کند. اگر فهرست سرعتی به صورت مناسبی طرح‌ریزی شود، مونته کارلوی جنبشی ارزیابی دقیقی از گذار حالت به حالت سیستم ارایه خواهد داد. مونته کارلوی جنبشی قوی‌ترین دیدگاه موجود برای ایجاد پیشگویی‌های جنبشی در مقیاس‌های مزو[2] و بدون داشتن فرضیات شک برانگیز است.

مثالی از قابلیت مونته کارلوی جنبشی برای ردیابی فرایند در یک مقیاس زمانی بزرگ در فیلم ۳-۲ آورده شده است، که یک شبیه‌سازی مونته کارلوی جنبشی از یک آبشار ۲۰ keV در Fe-0.2Cu-0.6Si-0.7Ni-12.4Mn (شبیه به ترکیب مخازن تحت فشار) در ۳۲۷ درجه‌ی سانتی‌گراد را نشان می‌دهد. شبیه‌سازی نشان می‌دهد که افزایش نیکل (سبز)، منگنز (سیاه)، سیلیسیم

1. Time-scale
2. Mesoscale

(آبی) و مس (قرمز) در بقایای آبشار (جاهای خالی در رنگ زرد)، یک دوره‌ی زمانی بیش‌تر از چندین سال یا چندین برابر بزرگ‌تر از زمان کوینچ کردن آبشار را پوشش می‌دهد.

روش‌های جنبشی مولکولی و مونته کارلوی جنبشی به همراه یک‌دیگر، مقیاس زمانی پرتودهی را همان طوری که در شکل ۳-۱۲ نشان داده شده است، پوشش می‌دهند. شبیه‌سازهای جنبشی مولکولی بالای محدوده‌ی ns کاربردی است و شبیه‌سازهای مونته کارلوی جنبشی محدوده را به ناحیه ثانیه گسترش می‌دهند. بسیاری از اتفاقات بعد از این مقیاس زمانی رخ می‌دهند و آن‌ها در اصل با استفاده از تئوری‌های سرعتی مدل‌سازی می‌شوند که در فصل ۵ مورد بحث قرار خواهد گرفت.



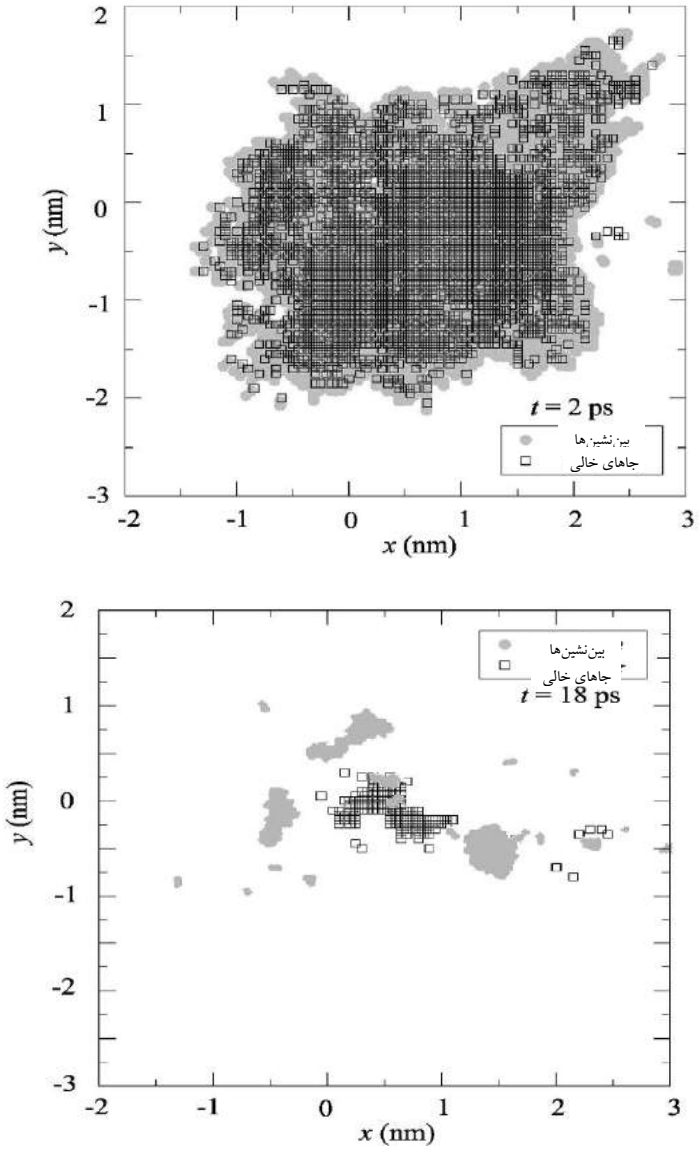
شکل۳-۱۲. مقیاس زمانی برای ارزیابی آسیب تابشی و روش شناسی شبیه‌سازی‌های مرتبط.

۳-۵ مراحل گسترش آبشار

حالت نهایی آبشار بسیار حایز اهمیت است؛ زیرا پایان آبشار نقطه شروع برای نفوذ عیوب، کلوخه‌ای شدن و تخریب است که مبنایی برای اثرات قابل مشاهده‌ی پرتودهی است که در بخش ۲ این کتاب مطرح شده است. شکل ۳-۱۳ مثال دیگری را نشان می‌دهد که در آن سطح مقطع 2D از آبشار در زمان‌هایی که متناسب با مراحل اولیه‌ی آبشار و نزدیک به حالت نهایی است، نشان می‌دهد.

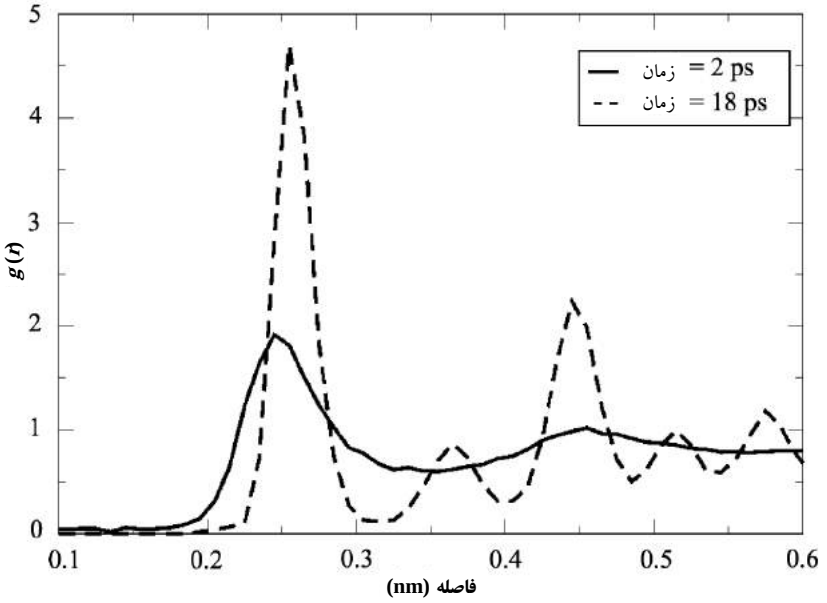
در این‌جا دوباره، حالت آسیب در یک درجه بسیار بزرگی میان 2ps (شکل ۳-۱۳ الف) و 18ps (شکل ۳-۱۳ ب) در نظر گرفته می‌شود. شکل ۳-۱۴ تابع هم‌بستگی دوتایی شعاعی را برای هر دو زمان نشان می‌دهد. تابع هم‌بستگی دوتایی فاصله‌ی جداشدگی میان اتم‌ها را توضیح می‌دهد و به صورت یک‌سری از میخچه‌هایی برای جامدات بلوری (برطبق نظم بلند مدت آن‌ها) و به صورت یک تابع متغیر صاف برای یک مایع یا جامد بی‌شکل (که در آن فقط نزدیک‌ترین همسایه‌ها و دومین همسایه‌های نزدیک هم‌بستگی دارند، نظم کوتاه برد) ظاهر می‌شود. همان‌طوری که در شکل نشان

داده شده است، نظم اتمی در هسته‌ی میخچه جابه‌جایی در زمان‌های کوتاه شبیه به یک مایع است درحالی‌که نظم نهایی، آرایش بلوری خودش را بازیابی می‌کند.



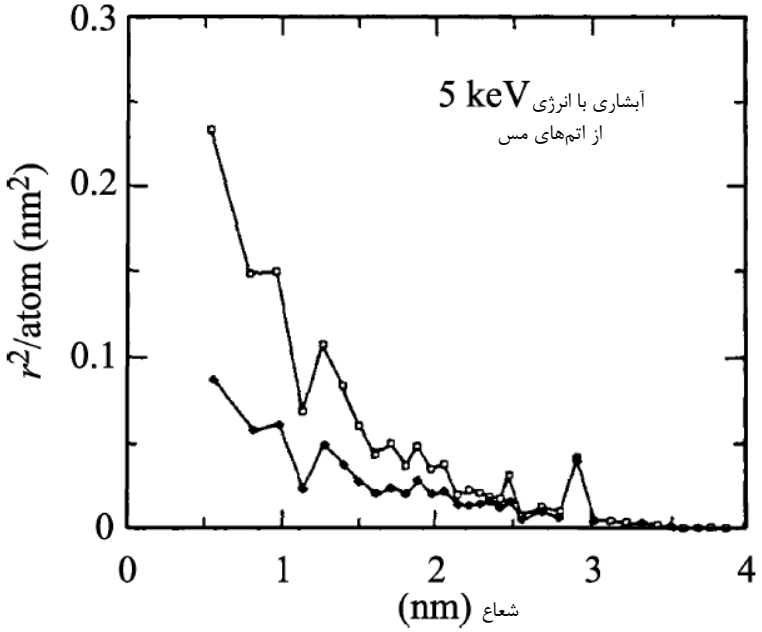
شکل۳-۱۳. شبیه‌سازی جنبشی مولکولی از آبشار جابه‌جایی ۳۰ keV در مس در دمای ۳۰۰K در ۲ و ۱۸ps در برخورد (محاسبات در مرکز ابر کامپیوتر بارسلونا انجام شده است).

شکل ۳-۱۵ نشان می‌دهد که متوسط مربع جابه‌جایی اتمی اتم‌ها در آبشار هم‌چنین به صورت قابل توجهی با زمان افزایش می‌یابد، که مشخص می‌کند قسمت عمده‌ی مجموع تحرکات اتم‌ها در آبشار جابه‌جایی، بعد از زمان رسیدن به اوج آسیب رخ می‌دهد. با در کنار هم گذاشتن نتایج شکل‌های ۳-۱۳ تا ۳-۱۵ مشخص می‌شود که آسیب با گذشت زمان بازپخت[1] می‌شود. فرایند بازپخت هم‌چنان که انرژی آبشار در حال کاهش است، رخ می‌دهد. در حقیقت، بازپخت در قسمت انتهایی دوره زمانی رخ می‌دهد که انرژی آبشار در طول آن کاهش می‌یابد، و مرحله‌ی سرد شدن[2] نامیده می‌شود.



شکل ۳-۱۴. تابع هم‌بستگی دوتایی برای آبشارهای برخوردی در شکل ۳-۱۳، که نشان دهنده‌ی مشخصه‌ی بی‌شکل مانند از منطقه‌ی آبشار جابه‌جایی در ۲ps و درجه‌ی بازیافت قابل توجه به وسیله‌ی ۱۸ps است (محاسبات در مرکز ابر کامپیوتر بارسلونا انجام شده است).

1. Annealing
2. Quench



شکل۳-۱۵. ضریب نفوذ یکپارچه به صورت تابعی از فاصله از مرکز آبشار در پایان فاز برخوردی، t = ۰٫۱۲ ps (لوزی‌های مشکی) و در پایان فاز خنک سازی، t = ۱۰ ps (مربع‌های توخالی) برای آبشار ۵ keV در مس[۱۶].

آبشارها در مراحلی گسترش می یابند که در ادامه توضیح داده می شوند:

۱. برخورد
۲. میخچه‌ی حرارتی
۳. سرد شدن
۴. بازپخت

در مرحله‌ی برخورد (۱)، اتم پس‌زده شده‌ی اولیه یک آبشار از برخوردهای جابه‌جا کننده را ایجاد می‌کند و تا زمانی ادامه پیدا می‌کند که هیچ‌یک از اتم‌ها انرژی کافی برای ایجاد جابه‌جایی‌های بیش‌تر را نداشته باشند. در پایان این مرحله (۱ ps > مدت زمان پایداری)، آسیب اتم‌های جابه‌جا شده پرانرژی و موقعیت‌های خالی شبکه را شامل می‌شود. به هرجهت، عیوب پایدار شبکه‌ی زمان لازم برای

تشکیل را ندارند. در طول مرحله‌ی میخچه حرارتی (۲)، انرژی برخوردی اتم‌های جابه‌جا شده بین اتم‌های نزدیک همسایه در ناحیه‌ی دانسیته‌ی انرژی ته نشست شده‌ی بالا، به اشتراک گذاشته می‌شود. گسترش میخچه نیازمند زمانی در حدود ps ۰٫۱ است و میخچه ممکن است چندین منطقه را اشغال کند که در آن انرژی به اندازه‌ی کافی بالا است و در نتیجه اتم‌ها همانند مواد مذاب هستند. هم‌چنان که انرژی به اتم‌های پیرامون منتقل می‌شود، نواحی مذاب به حالت متراکم باز می‌گردند، یا مرحله‌ی سرد شدن (۳)، و تعادل ترموجنبشی پایدار ایجاد می‌شود (ps ۱۰ ~). مرحله‌ی سرد شدن ممکن است که چندین ps به طول بینجامد و در طول این زمان، عیوب پایدار شبکه یا به صورت عیوب نقطه‌ای یا به صورت عیوب خوشه‌ای تشکیل می‌شوند. لیکن تعداد کلی عیوب در این مرحله از تعداد اتم‌های جابه‌جا شده در مرحله‌ی برخورد بسیار کم‌تر است. مرحله‌ی بازپخت، باز آرایشی و برهم‌کنش بیش‌تر عیوب را دربر می‌گیرد و به وسیله‌ی نفوذ فعال شده‌ی حرارتیِ عیوب متحرک شبکه رخ می‌دهد. با توجه به تعریف مرحله‌ی بازپخت (۴) تا زمانی که تمام عیوب متحرک از ناحیه آبشار فرار کنند یا آبشار دیگری در درون آن رخ دهد، به طول می‌انجامد. در نتیجه مقیاس زمانی وابسته به دما و شرایط پرتودهی، از چند نانوثانیه تا ماه‌ها، متغیر است. مرحله‌ی بازپخت هدف بخش بعدی و در واقع بخش اثرات فیزیکی آسیب تابشی (بخش ۲) است و ارتباطی میان آبشار آسیب و اثرات قابل مشاهده‌ی پرتودهی است.

۳-۶ رفتار عیوب در درون آبشار

تعداد واقعی عیوبی که آبشار جابه‌جایی و توزیع فضایی آن‌ها در جامد را حفظ می‌کنند، برروی ریز ساختار پرتودهی شده تأثیرگذار خواهند بود. راندمان جابه‌جایی به صورت ξ، و به منزله‌ی کسر جفت‌های فرانکل متحرک تولید شده (NRT dpa) تعریف می‌شود که کوینچ آبشار حفظ می‌کنند. شبیه‌سازی جنبشی مولکولی از آبشار جابه‌جایی، وابستگی پس‌زنی راندمان جابه‌جایی در مس پرتودهی شده در دماهای پایین را فراهم می‌کند (شکل ۳-۱۶). مقدار ξ به سرعت در انرژی‌های پس‌زنی بسیار پایین از صفر تا بالای یک افزایش می‌یابد. مقادیر ξ فراتر از یک، به ناتوانی مدل اصلاح شده K-P برای توضیح جابه‌جایی‌ها در یک ماده چند بلوری در انرژی‌های پس‌زنی نزدیک به انرژی جابه‌جایی آستانه، E_d، نسبت داده می‌شود که ناشی از وابستگی قوی E_d به جهت‌گیری‌های بلورشناسی است [۱۷].

با افزایش انرژی، ξ به صورت پیوسته و یکنواخت تا یک مقدار در حدود ۰٫۳ برای آبشارهای با انرژی ۵ keV در مس کاهش می‌یابد. تشکیل چندین آبشار فرعی در انرژی‌های بالای اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه (در حدود ۲۰ keV ~) منجر به ثابت ماندن تقریبی ξ برای انرژی‌های اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه‌ی بالاتر از ۵۰۰ keV می‌شود.

با مقایسه‌ی این منحنی برای پس‌زنی و طیف پس‌زنی توزین شده مشخص در شکل‌های ۳-۵ و ۳-۶ مشخص می‌شود که الکترون‌ها و یون‌های سبک با انرژی پایین اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه، مقادیر ξ نزدیک به یک را تولید می‌کنند درحالی‌که یون‌های سنگین و نوترون‌ها که انرژی‌های اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه‌ی بالایی را تولید می‌کنند مقدار ξ نزدیک به ۰٫۳ را نتیجه می‌دهند.

راندمان آبشار جابه‌جایی، ξ متشکل از چندین جزء است:

$\gamma_{i,v}$: کسر عیوب نقطه‌ای تکی

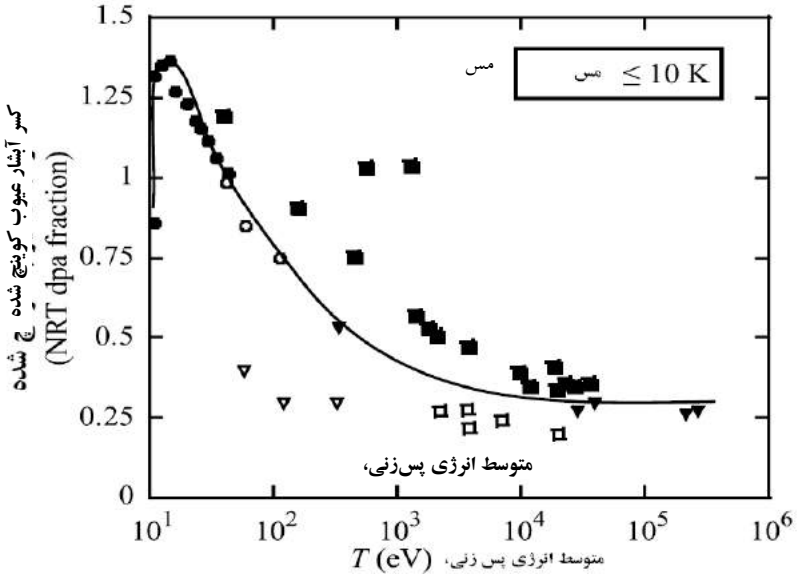
$\delta_{i,v}$: کسر خوشه شده‌ی حاوی خوشه‌های عیوب متحرک مانند بین‌نشین‌های دوتایی

ζ: کسر اولیه در شکل تکی یا خوشه‌ای بعد از کوئنچ آبشار که در طول نفوذ حرارتی درون آبشاری کوتاه مدت بعدی ($> 10^{-11}$s) نابود شده است.

این بخش‌ها به صورت زیر با یک‌دیگر مرتبط هستند:

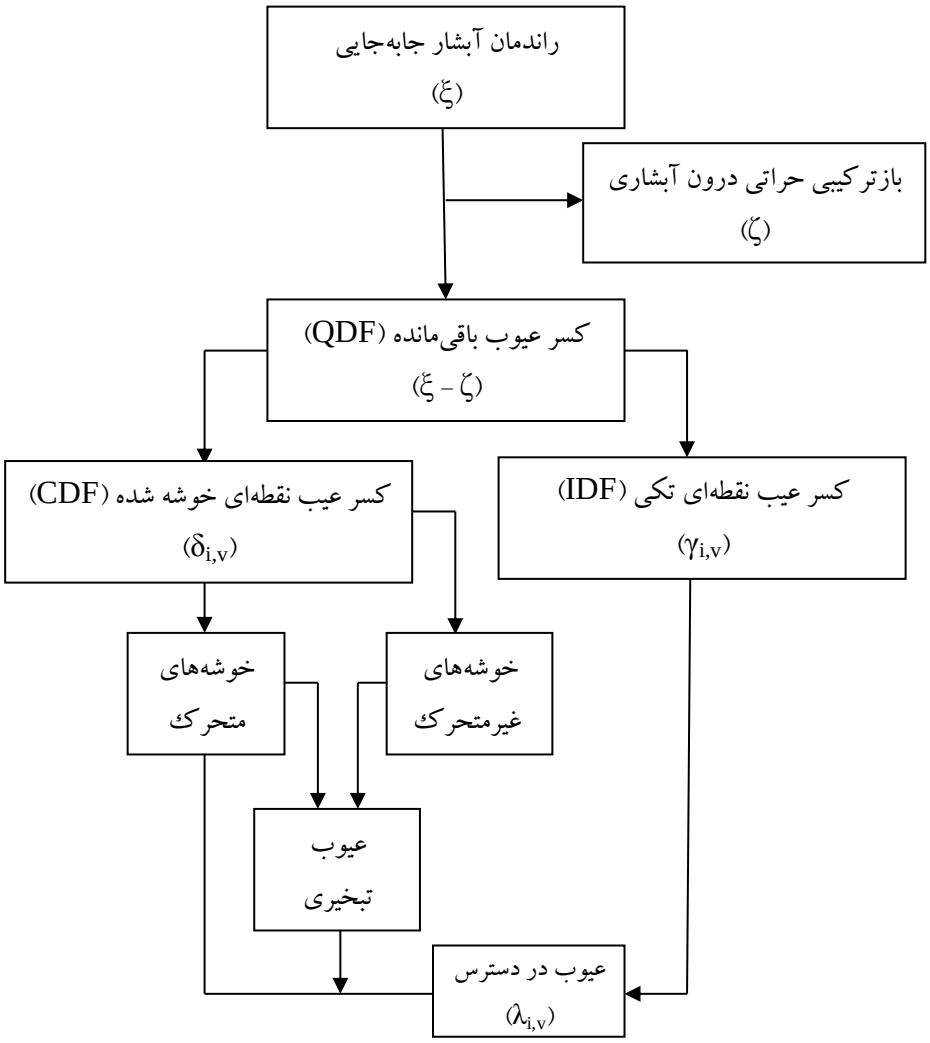
(۲۴-۳)

$$\xi = \delta_i + \gamma_i + \zeta = \delta_v + \gamma_v + \zeta \ .$$



شکل۳-۱۶. وابستگی راندمان جابه‌جایی به متوسط انرژی پس‌زنی در مس. نمادهای توخالی به محاسبات جنبشی مولکولی و نمادهای توپر به اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی اشاره دارد که برای پرتودهی در دمای پایین الکترون‌ها (•)، یون (■)، پاره‌های شکافت (♦) و نوترون (▼) محاسبه شده است[۱۷].

شکل ۳-۱۷ تاریخچه‌ی ایجاد عیوب مطابق با مدل NRT را با توجه به جاهای خالی و بین‌نشین‌ها نشان می‌دهد. کسر عیوبی که بعد از سرد شدن آبشار به وسیله‌ی وقایع بازترکیبی در میان خوشه‌های عیب و عیوب نقطه‌ای در درون آبشار مشابه (بازترکیبی‌های درون آبشاری) نابود می‌شوند، ζ، برای راندمان جابه‌جایی ۰٫۳ در حدود ۰٫۷ است. کسر خوشه شده، δ، خوشه‌های چسبیده و بزرگ و خوشه‌های عیوب کوچک را دربر می‌گیرد و ممکن است که در دمای مشخص پرتودهی متحرک باشد و برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها متفاوت خواهد بود. برای یک آبشار ۵keV، δ_i در حدود ۰٫۶ است و δ_v نزدیک به ۰٫۱۸ است. ممکن است که بعضی از این عیوب قابل تبخیر یا فرار از خوشه باشند و به عیوب در دسترس تبدیل شوند (شکل ۳-۱۷).



شکل ۳-۱۷. وابستگی عیوب نقطه‌ای ایزوله شده، میخچه‌های عیب متحرک، و میخچه‌های عیب تبخیر شده‌ی حرارتی که به کسر عیوب باقی‌مانده که برای اثرات تابشی موجود هستند، نسبت داده می‌شوند.

تاکنون کسر عیوب نقطه‌ای تکی مشخص شد. این عیوب برای مهاجرت به چاهک‌ها[1]، برای تشکیل خوشه‌ها، به منظور واکنش با خوشه‌های موجود و شرکت در شار عیب به مرزدانه‌ها که منجر به

1. Sinks

افزایش جداشدگی القا شده در اثر پرتودهی می‌شود، در دسترس هستند. به علت پتانسیل آن‌ها برای تأثیرگذاری شدید برروی ریز ساختار پرتو دیده، عیوب در این گروه، به همراه عیوب آزاد شده از خوشه‌ها، عیوب آزادانه مهاجرت کننده[1] (FMD) را شکل می‌دهند. یادآوری می‌شود که الکترون‌ها و یون‌های سبک یک کسر بزرگی از عیوبشان را به صورت جفت‌های فرانکل تکی تولید می‌کنند، در نتیجه احتمال آن‌که آن‌ها به صورت عیوب تکی باقی بمانند، نسبت به باقی ماندن به صورت میخچه‌ای، افزایش می‌یابد. با وجود تعادل در انرژی بین چهار نوع ذره توضیح داده شده در شکل ۳-۷، میانگین انرژی منتقل شده و راندمان‌های تولید عیب تقریباً با دو مرتبه بزرگی تغییر می‌یابند. این پدیده به وسیله‌ی تفاوت‌ها در ریخت‌شناسی آبشار میان انواع مختلف ذره توضیح داده می‌شود. نوترون‌ها و یون‌های سنگین، آبشار متراکمی را تولید می‌کنند که منجر به بازترکیبی ذاتی در طول مرحله‌ی خنک‌سازی می‌شود. به هر جهت الکترون‌ها فقط قادر هستند چند جفت فرانکل[2] بسیار فاصله داری را تولید کنند که احتمال بازترکیبی پایینی را دارد. پروتون‌ها به علت برهم‌کنش‌های کولنی، آبشارهای کم فاصله و تعدادی جفت فرانکل تکی را تولید می‌کنند و در نتیجه بین دو کرانه در راندمان جابه‌جایی تعریف شده به وسیله‌ی الکترون‌ها و نوترون‌ها قرار می‌گیرند.

تخمین زده می‌شود که مقدار γ وابسته به انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و دمای پرتودهی، در محدوده‌ی ۰٫۰۱ تا ۰٫۱ تغییر می‌کند که دماهای بالاتر منجر به مقادیر پایین‌تر می‌شود. به علت اهمیت این عامل، در این قسمت کسر عیوبی که به صورت آزادنه مهاجرت می‌کنند با استفاده از یک عملیات تحلیلی به وسیله‌ی نان‌دراف[3] [۱۸]تخمین زده می‌شود که بر پایه دو عامل است. اولین عامل این است که انتقال انرژی به اتم‌ها فقط برای ایجاد یک جفت فرانکل تنها کافی است. دومین عامل به این صورت است که جفت فرانکل در خارج از شعاع بازترکیبی (برهم‌کنش) قرار می‌گیرد، در نتیجه تقریباً جفت فرانکل نه باز ترکیب و نه خوشه‌ای می‌شوند. مدل، هر نسل از برخوردها را دنبال می‌کند و کسری از تمام عیوب تولید شده را که به صورت آزاد باقی می‌مانند، محاسبه می‌کند. با توجه به محاسبات نان‌دراف، جفت فرانکل‌های تکی و آزاد مطابق با نسل i که در آن تولید شده‌اند، طبقه‌بندی می‌شود. به عبارت دیگر، مقدار نسبی η_1 مقداری است که به وسیله‌ی برخوردهای اولیه (نسل اول)

1. Freely Migrating Defects
2. Frenkel pairs
3. Naundorf

تولید شده است درحالی‌که η_2 مقدار نسبی تولید شده به وسیله‌ی برخوردهای ثانویه (نسل دوم) است. در نتیجه تعداد کلی جفت فرانکل‌های تکی و آزاد تولید شده برابر است با:

(۲۵-۳)

$$\eta = \sum_i \eta_i \ ,$$

که محصولات برخوردهای اولیه برابر است با:

(۲۶-۳)

$$\eta_1 = (\beta_p/\sigma_d) \int_{E_d}^{\gamma E} \sigma(E_i, T)\, dT \ ,$$

و محصولات برخوردهای ثانویه برابر است با:

(۲۷-۳)

$$\eta_2 = (1/\sigma_d) \int_{E_d}^{\gamma E} \sigma(E_i, T)[Z(T)\beta_A(T)/\sigma_A(T)]\, dT \int_{E_d}^{2.5E_d} \sigma(T, T')\, dT' \ ,$$

که در این رابطه $\sigma(E_i,T)$ سطح مقطع انتقال انرژی برای ذره‌ی فرودی برروی اتم شبکه و $\sigma(T,T')$ سطح مقطع انتقال انرژی بین اتم‌های مشابه در جامد و $Z(T)$ تعداد کلی برخوردهای ثانویه تولید شده بالای E_d به وسیله‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی T در طول مسیرش است. سطح مقطع جابه‌جایی اولیه برای یون فرودی، σ_p، برابر است با:

(۲۸-۳)

$$\sigma_p = \int_{E_d}^{\gamma E} \sigma(E_i, T)\, dT \ ,$$

و سطح مقطع جابه‌جایی کلی σ_{d} که در مدل کیچن ـ پیچ تعریف شده است برابر است با:

(۲۹-۳)

$$\sigma_{\mathrm{d}} = \int_{E_{\mathrm{d}}}^{\gamma E} \sigma(E_{\mathrm{i}}, T)\nu(T)\,\mathrm{d}T\ .$$

فاصله‌ی λ بین دو برخورد اولیه مطابق با قانون نمایی توزیع شده است:

(۳۰-۳)

$$W(\lambda) = 1/\lambda_{\mathrm{p}} \exp(-\lambda/\lambda_{\mathrm{p}})\ ,$$

که فاصله‌ی متوسط برابر است با:

(۳۱-۳)

$$\lambda_{\mathrm{p}} = \Omega/\sigma_{\mathrm{p}}\ ,$$

که در این رابطه Ω حجم اتمی است. شرایطی که فاصله‌ی میان دو برخورد متوالی باید بزرگ‌تر از شعاع برهم‌کنش مناسب، r_{iv} باشد (در نتیجه جفت فرانکل‌های تولید شده در نزدیک یک‌دیگر نه بازترکیب و نه خوشه‌ای می‌شوند)، مقدار تمام جفت فرانکل‌های تنها و آزاد ممکن را به صورت زیر کاهش می‌دهد:

(۳۲-۳)

$$\beta_{\mathrm{p}} = \exp(-r_{iv}/\lambda_{\mathrm{p}})\ ,$$

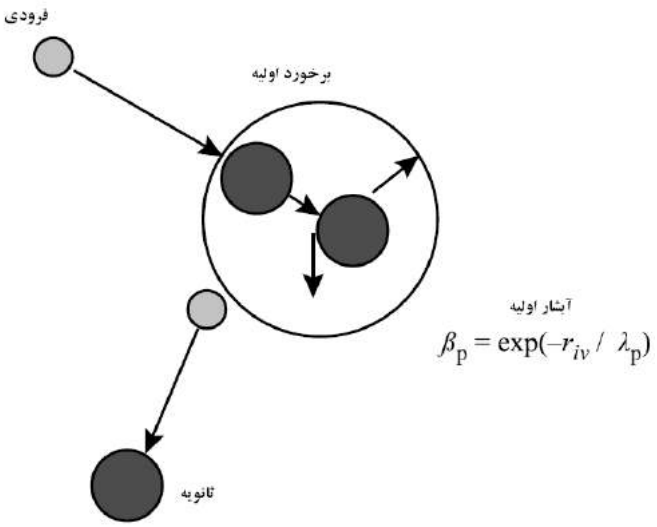
و در شکل ۳-۱۸ نشان داده شده است [۱۹]. مدل، راندمانی را برای تولید عیوب به صورت آزادنه مهاجرت کننده فراهم می‌کند. نتایج این محاسبات در جدول ۳-۲ برای چندین یون با جرم‌ها و

انرژی‌های مختلف نشان داده شده است. مقادیر η بین ۲۴٪ برای پرتودهی پروتونی تا ۳٪ برای پرتودهی یون سنگین (کریپتون) تغییر می‌کند.
با اعمال این مدل به نتایج مشاهده شده در شکل ۳-۷ مقادیر زیر برای η به‌دست می‌آید:

الکترون‌هایی با انرژی MeV : ۱٫۰
پروتون‌هایی با انرژی MeV ۳٫۴ : ۰٫۲
یون‌های Ni^{++} با انرژی MeV ۵٫۰ : ۰٫۰۴
نوترون‌ها (طیف شکافت): ۰٫۰۲

این نتایج می‌تواند با نتایج محاسبه شده به همت رهن[1] و همکارانش [۲۰]مقایسه شود که از تحلیل آزمایشات تعیین شده است و در شکل ۳-۱۹ نشان داده شده است. اطلاعات این شکل به صورت قراردادی برای پروتون‌هایی با MeV ۱ به ۱٫۰ بهینه شده است. این اطلاعات به همراه نتایجی که اندکی پیش نشان داده شده بود مشخص می‌کند که در انرژی‌های پس‌زنی پایین، کسر عیوبی که به صورت آزادانه مهاجرت می‌نمایند به ۱٫۰ نزدیک می‌شود و هم‌چنان که انرژی پس‌زنی افزایش می‌یابد، آن کسر به مقادیری در محدوده‌ی ۰٫۰۲ تا ۰٫۰۵ تنزل می‌یابد.
نتایج اخیر [۲۱] نشان می‌دهند که مقادیر پایین راندمان عیوب آزادانه مهاجرت کننده برای یون سنگین یا پرتودهی نوترونی نمی‌تواند به وسیله‌ی نابودسازی عیب در درون آبشار مادر (نابودسازی‌های درون آبشاری) توضیح داده شود. در حقیقت، آسیب آبشاری خوشه‌های جاهای خالی و بین‌نشین‌ها را تولید می‌کند که به عنوان مکان‌های نابود کننده برای عیوب آزادانه مهاجرت کننده عمل می‌کنند، و در نتیجه راندمان تولید عیوب آزادانه مهاجرت کننده را کاهش می‌دهد. بنابراین، بقایای آبشار منجر به افزایش در شدت چاهک برای عیوب نقطه‌ای می‌شود و به همراه باز ترکیبی در آبشار اصلی، دلیل راندمان پایین عیوب آزادانه مهاجرت کننده که با آزمایش اندازه‌گیری شده است، می‌باشد.

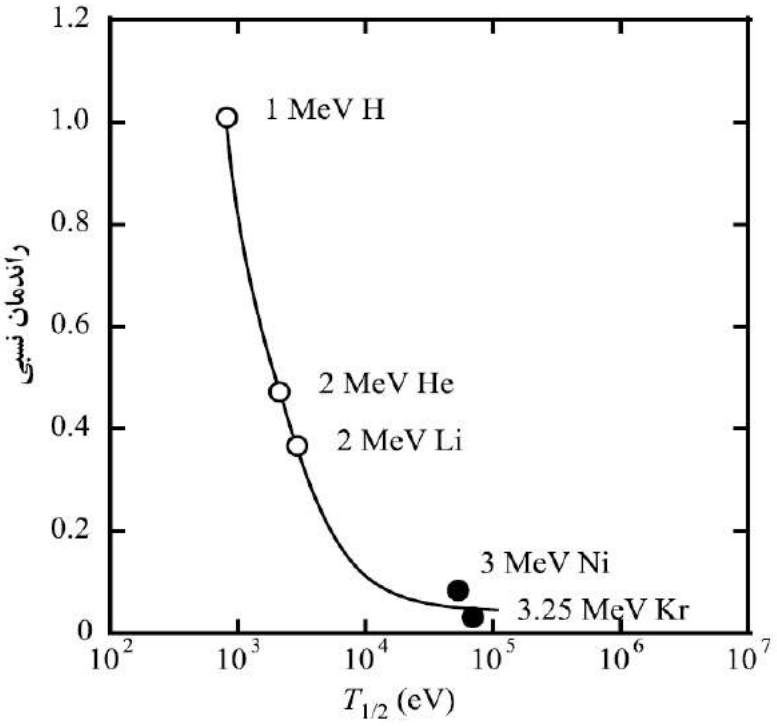
1. Rehn



شکل۳-۱۸. نمایشی از اثر شعاع برهم‌کنش برروی تولید جفت فرانکل تنها.

جدول۳-۲. مقادیر محاسبه شده برای σ_p/σ_d و مقادیر نسبی η_{calc} از جفت فرانکل تولیدی در نیکل به وسیله‌ی انواع مختلفی از پرتودهی‌ها (E_d=۴۰ev ،r_{iv} = ۰٫۷ nm) با استفاده از سطح مقطع برخورد دیفرانسیلی تحلیلی لیندهارد [۱۸].

پرتودهی	σ_p/σ_d (%)	η_{calc} (%)
1 MeV H^+	37.0	24.0
2 MeV H^+	30.0	19.2
2 MeV Li^+	27.0	16.9
1.8 MeV Ne^+	16.0	8.7
300 keV Ni^+	5.1	2.3
3 MeV Ni^+	7.5	3.8
3.5 MeV Kr^+	5.9	3.0
2 keV O^+	42.0	9.8



شکل۳-۱۹. راندمان نسبی تولید عیوب مهاجرت کننده به صورت آزاد برای یون‌هایی با انرژی‌ها و جرم‌های مختلف.

درحالی‌که توصیفات NRT از جابه‌جایی اتم‌ها تخمینی از تعداد جفت‌های فرانکل تولید شده به وسیله‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه را فراهم می‌کند، درنتیجه به صورت دقیق برهم‌کنش‌های اتمی در میخچه‌ی حرارتی را توضیح نمی‌دهد، از آن‌رو برای توضیح شکل دقیق عیوب کافی نیست.

شبیه‌سازی‌های جنبشی مولکولی برای این هدف استفاده می‌شوند و تأیید کرده‌اندکه تولید عیب به وسیله‌ی آبشارهای جابه‌جایی که به وسیله‌ی فرمول‌های NRT پیش‌بینی شده است چندان کارآمد نیست. در حقیقت، ν در حدود ۲۰ تا ۴۰ درصد υ_{NRT} برای آبشارهایی با انرژی بیش‌تر از ۱-۲ keV است. با توجه به نتایج تحلیل جنبشی مولکولی برای چندین فلز [۲۲]، مشخص شده است که تعداد جفت‌های فرانکل وابسته به انرژی جنبشی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه، T است به صورتی که:

(۳-۳۳)

$$\nu_{MD} = AT^n ,$$

که در این رابطه A و n ثابت‌هایی هستند که فقط به صورت ضعیفی وابسته به فلز و دما هستند. شکل ۳-۲۰ وابستگی ν_{MD} به T برای فلزات مختلف را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که رفتار جفت‌های فرانکل تولیدی به خوبی به وسیله‌ی این تابع در محدوده‌ی بزرگی از انرژی آسیب نشان داده شده است. هم‌چنین یادآوری می‌شود که تمام نتایج، در زیر خط سیاه پرنگ قرار گرفته‌اند که مربوط به مقدار NRT است. راندمان پایین، احتمالاً ناشی از تولید SIA در پیرامون هسته بی‌نظم است که در پایان زنجیره‌های برخورد کانونی شده غالب است به گونه‌ای که نزدیکی زیاد جاهای خالی و هسته با انرژی جنبشی بالا در طول خوشه‌ی حرارتی بازترکیبی SIA – جای خالی را کمک می‌کند.

با توجه به نتایج نشان داده شده در شکل ۳-۲۰، هیچ‌گونه وابستگی قابل توجهی به ساختار بلوری وجود ندارد، در این شکل سه فلز fcc (Al, Ni, Cu)، دو فلز hcp (Ti, Zr)، یک فلز bcc (Fe) و یک ساختار بین فلزی منظم (Ni_3Al) وجود دارد، و تاکنون بزرگی ν_{FP} در طول خطوط ساختار بلوری مجزا نشده است. دوماً، همان طوری که در وابستگی ν_{MD} و A به T بیان شد، یک وابستگی به جرم اتمی فلز وجود دارد. با توجه به شواهد، وابستگی n به جرم اتمی ضعیف‌تر است. کاهش در راندمان با جرم اتمی، احتمالاً ناشی از افزایش بازترکیبی ناشی از اثرات میخچه حرارتی است. هم‌چنان که انرژی آبشار افزایش می‌یابد، آبشارها تمایل دارند که به آبشارهای فرعی شکسته شوند. از آن‌جایی که یک آبشار عیوب کم‌تری را از دو آبشار مجزا با انرژی مشابه تولید می‌کند، تشکیل آبشارهای فرعی ممکن است شیب منحنی در شکل ۳-۲۰ را افزایش دهد. تبدیل به آبشارهای فرعی در فلزات سبک‌تر در انرژی‌های پایین‌تر رخ می‌دهد و ممکن است که دلیلی برای وابستگی جرمی به راندمان باشد. لازم به ذکر است که n فقط به صورت ضعیفی وابسته به جرم است.

شبیه‌سازی جنبشی مولکولی هم‌چنین به مطالعه‌ی تولید عیب در آلیاژها نیز اعمال شده است [۲۳، ۲۴]. ممکن است این انتظار وجود داشته باشد که تفاوت جرم بین اتم‌های حل شده در یک آلیاژ، مانع فرایندهای بلورشناسی مانند کانونی شدن و کاناله شدن شود و منجر به تولید جفت‌های فرانکل بیش‌تری نسبت به یک فلز خالص شود. شبیه‌سازی‌های جنبشی مولکولی در مس حاوی بیش‌تر از ۱۵٪ طلا در محلول نشان می‌دهد که اتم‌های Au بزرگ‌تر، اندازه‌ی رخدادهای جابه‌جایی کانونی شده در فاز متحرک را کاهش می‌دهد و شاید شدت و عمر بی‌نظمی و دمای میخچه حرارتی را افزایش دهد. به هرجهت، مشخص شده است که ν_{FP} در سراسر محدوده‌ی وسیعی از T، مستقل از ترکیب آلیاژ است. مطالعات مشابه انجام شده برروی آلیاژهای Fe-Cu به این نتایج مقادیر واقعی داده است. فیلم

۳-۳ تشکیل آبشار و خنک شدن در یک آلیاژ Fe-10%Cr را نشان می‌دهد که در آن توپ‌های زرد، خاکستری و سبز به ترتیب جاهای خالی، اتم‌های بین‌نشین آهن و بین‌نشین‌های کروم هستند. در این شبیه‌سازی کروم به عنوان اتم‌های حل شده‌ی بزرگ‌تر مدله شده‌اند و بعد از خنک‌سازی تعداد بین‌نشین‌های باقی‌مانده غالباً اتم‌های آهن هستند نظر به آن‌که اعوجاج شبکه آن‌ها نسبت به اتم‌های کروم بزرگ اندازه، کم‌تر است.

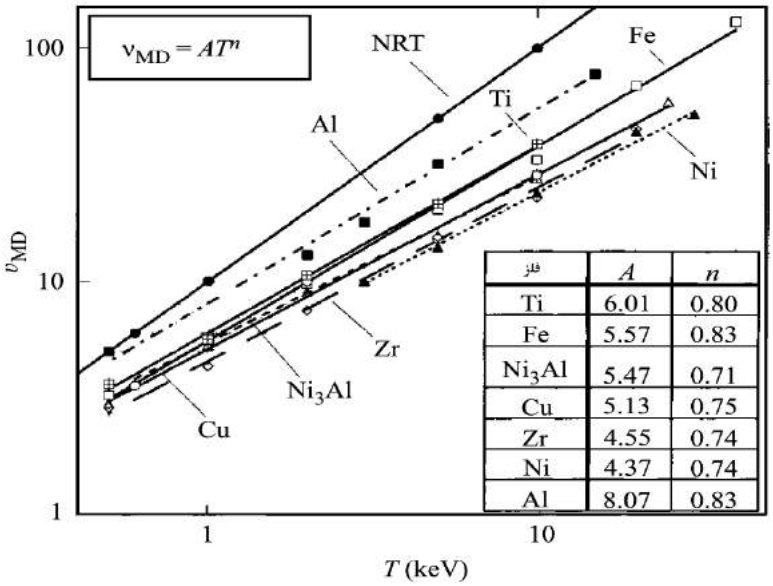
نتایج نشان داده شده در شکل ۳-۲۰ برای محاسبات جنبشی مولکولی در/یا زیر دمای ۱۰۰K است. دمای پرتودهی اثر قوی‌ای برروی ارزیابی آسیب تابشی در فلزات، به علت اثر آن برروی حرکت عیوب و پایداری‌شان به منزله‌ی خوشه‌ها، دارد. دمای پرتودهی هم‌چنین بر روی تشکیل جفت‌های فرانکل نیز تأثیرگذار است. شکل ۳-۲۱ تولید جفت‌های فرانکل به صورت تابعی از دما در آهن آلفا در بالای ۹۰۰K و برای مقادیر مختلفی از انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه را نشان داده است. قابل ذکر است که یک اثر کوچک لیکن پایداری از دما وجود دارد که در آن دماهای پرتودهی بالا، جفت‌های فرانکل اندکی را تولید می‌کند. این اعتقاد وجود دارد که هم‌چنان که T_{irr} افزایش می‌یابد، تولید جفت‌های فرانکل کم‌تر ناشی از افزایش در عمر میخچه حرارتی است، که در نتیجه حرکت بیش‌تر عیوب قبل از سردشدن را مجاز می‌کند و از آن‌رو بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشینی بیش‌تری را در ناحیه‌ی آبشار ایجاد می‌کند. ممکن است که یک عامل سهیم، طول کم‌تر توالی‌های برخوردی کانونی شده باشد (ناشی از انرژی جنبشی بالاتر اتم‌ها) که منجر به کاهش فاصله‌ی جداشدگی بین‌نشین ـ جای خالی می‌شود.

در آلیاژهای منظم شده مانند Ni_3Al (شکل ۳-۲۰)، تولید جفت فرانکل مشابه با فلز خالص است (برای مثال در مقایسه با Ni). علاوه بر جفت‌های فرانکل، عیوب ضد مکان[1] یا بی‌شکل سازی[2] می‌تواند در این سیستم‌ها رخ دهد. عیوب ضد مکان شامل اتم‌هایی از نوع نادرست است که موقعیت‌های منظمی در زیر شبکه را اشغال کرده‌اند. مشاهده شده است که این موقعیت‌های ضد مکان با T و با توان ۱٫۲۵، نسبت به توان ۰٫۷۵ در مورد جفت‌های فرانکل، افزایش می‌یابد. اگر مقدار بی‌نظمی به اندازه‌ی کافی بزرگ باشد، بی‌شکل‌سازی رخ می‌دهد. عیوب ضد مکان تشکیل شده در هسته مذاب تأیید می‌کند که میخچه حرارتی در تشکیل این عیوب مهم هستند. اثر افزایش دمای پرتودهی برروی تولید عیب در

1. Anti-site defects
2. Amorphization

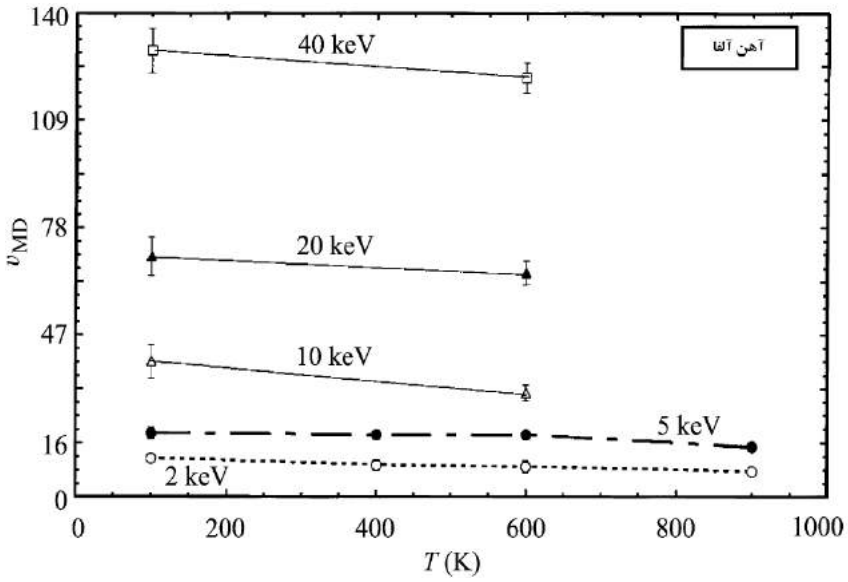
یک ساختار منظم افزایش تعداد عیوب ضد مکان است که در اصل ناشی از کاهش طول توالی‌های برخورد کانونی شده است.

اکنون توضیح حالت آسیب که برای شروع توصیف گسترش اثرات فیزیکی و مکانیکی پرتودهی مورد نیاز است، وجود دارد. مدل‌های K-P/NRT به همراه سطح مقطع‌های انتقال انرژی وسیله‌ای را برای محاسبه‌ی جابه‌جایی‌های رخ داده در یک جامد از یک ذره‌ی فرودی را با مقداری جرم و انرژی فراهم می‌کنند. توضیحات فضایی، موقتی و حرارتیِ آبشار نتیجه شده، ابزاری برای تخمین تعداد عیوب احاطه کننده‌ی فاز سرد شده‌ی آبشار را که برای تأثیرگذاری برروی ریزساختار در زمان‌های زیاد موجود است، فراهم می‌کند. تا این‌جا، برروی گسترش توضیح فیزیکی و کمی حالت مواد در پایان فاز سرد شدن از آبشار که در مدت زمان تقریبی ps ۱۰ از زمان شروع رخداد برخورد کامل می‌شود، تمرکز شد. از این به بعد، برروی گسترش ریزساختار تمرکز خواهد شد. این گسترش ممکن است که تا هفته‌ها، ماه‌ها، و حتی سال‌ها در قلب رآکتور ادامه داشته باشد. این اثرات آسیب‌های تابشی که حتی می‌تواند با گذشت زمان ۱۸ برابر شود در بخش ۲ به صورت مفصل مورد بررسی قرار خواهد گرفت.



فلز	A	n
Ti	6.01	0.80
Fe	5.57	0.83
Ni_3Al	5.47	0.71
Cu	5.13	0.75
Zr	4.55	0.74
Ni	4.37	0.74
Al	8.07	0.83

شکل ۳-۲۰. تعداد جفت‌های فرانکل تولید شده به صورت تابعی از انرژی آسیب، T برای Cu، Fe، Ti، Zr و Ni_3Al در ۱۰۰۰K برای Al و Ni در ۱۰K[۲۲].



شکل ۳-۲۱. تعداد جفت‌های فرانکل تولید شده در آبشار به منزله‌ی تابعی از انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و دمای پرتودهی در آهن آلفا[۲۲].

نام‌گذاری اصطلاحات

A: جرم اتمی، ثابت پیش‌نمایی در رابطه‌ی بورن ـ مایر، معادله‌ی ۱-۴۷.

B: ثابت موجود در توان در رابطه‌ی بورن ـ مایر، معادله‌ی ۱-۴۷.

C_p: ظرفیت گرمایی ویژه

D: ضریب نفوذ حرارتی

E_a: انرژی برای هر اتم

E_d: انرژی جابه‌جایی

E_D: انرژی آسیب

E_i: انرژی پرتابه

F_D: توزیع عمقی انرژی

k_B: ثابت بولتزمان

$m: \frac{1}{s}$

M_1: جرم پرتابه

M_2: جرم هدف

N: عدد دانسیته‌ی اتمی

N_d: تعداد جابه‌جایی‌ها در واحد عمق

$P(E_i,T)$: طیف پس‌زنی اولیه

r_{iv}: شعاع بازترکیبی

R: برد یون/اتم در شبکه

s: نما در رابطه‌ی قانون توان

T: انرژی منتقل شده در برخورد

$\breve{T}$: کم‌ترین انرژی منتقل شده

$\hat{T}$: بیش‌ترین انرژی منتقل شده

$\overline{T}$: میانگین انرژی منتقل شده

U_a: انرژی برای هر اتم

V_{cas}: حجم آبشار

$W(\lambda)$: تابعی برای فاصله‌ی میان برخوردهای اولیه

$W(E_i,T)$: طیف پس‌زنی اولیه‌ی توزین شده

ΔX: حرکت طولی آبشار

Y : حرکت عرضی آبشار

Z : عدد اتمی

$Z(T)$: کسر برخوردهای ثانویه‌ی تولید شده‌ی بالای E_d به وسیله‌ی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه با انرژی T

β_p: ضریب کاهشی در جفت فرانکل‌های ناشی از بازترکیبی در درون r_{iv}

δ : ضریب انقباض آبشار

δ_i,v : کسر خوشه‌ای شده جاهای خالی و بین‌نشین‌ها

ε : واحد بار

ϕ : شار نوترون

γ : $\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}$

$\gamma_{i,v}$: کسر عیوب نقطه‌ای تکی

η : اتلاف انرژی به صورت برانگیختگی الکترونیکی در مدل NRT، تمام جفت فرانکل‌های آزاد تولید شده در آبشار

η_1 : کسر عیوب تولید شده به وسیله‌ی برخوردهای اولیه

η_2 : کسر عیوب تولید شده به وسیله‌ی برخوردهای ثانویه

λ : مسیر متوسط آزاد

$\nu(T)$: تابع جابه‌جایی

ν_{FP}: تعداد جفت‌های فرانکل

Θ : دانسیته‌ی انرژی آبشار

$\sigma(E,T)$: سطح مقطع انتقال انرژی دیفرانسیلی

$\sigma'_D(E)$: سطح مقطع جابه‌جایی برای برخوردهای بین اتم‌ها

σ_d: سطح مقطع جابه‌جایی کلی

σ_p: سطح مقطع جابه‌جایی اولیه برای یون برخوردی

τ : عمر آبشار

ξ : راندمان جابه‌جایی

ζ : کسر جاهای خالی و بین‌نشین‌های اولیه‌ی خوشه شده که متعاقباً در آبشار ناپدید می‌شوند.

مسایل

۳-۱ نمودار مسیر متوسط آزاد برای Ni بین انرژی‌های ۱ و ۱۰۰۰۰eV با انجام محاسبات در هر دهه را طراحی کنید. در کدام انرژی، مسیر متوسط آزاد حداقل است؟ معادله‌ی ۱-۵۰ را برای تعیین ثابت‌های بورن ـ مایر و یک مقدار ۴۰ eV برای E_d مورد استفاده قرار دهید.

۳-۲ دلیل تفاوت در شکل طیف پس‌زنی توزین شده برای نوترون‌ها و پروتون‌ها در ریخت‌شناسی آبشار آسیب چیست؟

۳-۳ برای نوترون‌های برخوردی برروی نیکل با انرژی ۱ MeV، تعیین کنید:

الف) انرژی آسیب

ب) دمای مؤثر آبشار

ج) عمر آبشار

با استفاده از $U_a \sim ۰٫۳$ eV و $D \sim ۱۰^{۱۲}$ nm^2/s.

۳-۴ این تمایل وجود دارد که آبشارهای جابه‌جایی مدل‌سازی شود. ابزار مدل‌سازی مناسب چیست، جنبشی مونته کارلو یا جنبشی مولکولی؟ چرا؟

۳-۵ بر پایه‌ی مهارت شما با استفاده از SRIM، شما تصمیم گرفته‌اید که یک نمونه‌ی فولادی (Fe-18Cr-9Ni) را با یون‌های نیکل پرتودهی کنید. شما این انتخاب را دارید که نمونه را نزدیک به سطح نمونه یا نزدیک به حداکثر آسیب بررسی کنید. شما نگرانید که همه‌ی یون‌های نیکل کاشته شده، شیمی موضعی نمونه را تغییر دهند. برای کم کردن این نگرانی، شما باید نواحی نزدیک‌تر به سطح یا نزدیک به حداکثر آسیب را مورد بررسی قرار دهید؟ چرا؟

مراجع

1. Olander DR (1976) Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements,TID- 26711-P1. Technical Information Service, Springfield, VA.
2. Averback RS (1994) J Nucl Mater 216:49.
3. Brinkman JA (1956) Amer J Phys 24:251.
4. Seeger A (1958) On the theory of radiation damage and radiation hardening. In: Proceedings of the Second United Nations International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva, 1958, Vol. 6, p 250, United Nations, New York.
5. Nastasi M, Mayer JW, Hirvonen JK (1996) Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications. Cambridge University Press, Cambridge.
6. Was GS, Allen TR (1994) Mater Character 32:239.
7. Sigmund P (1981) Sputtering by ion bombardment: theoretical concepts. In: Behrisch R(ed) Sputtering by Particle Bombardment, Springer, Berlin Heidelberg New York, p 9.
8. Heinisch HL (1996) J Metals Dec:38.
9. Robinson MT (1994) J Nucl Mater 216:1.
10. Robinson MT, Torrens IM (1974) Phys Rev B 9:5008.
11. Beeler JR (1966) Phys Rev 150:470.
12. Ziegler JF, Biersack JP, Littmark U (1996) The Stopping and Range of Ions in Solids. Pergamon, New York.
13. Finnis MW, Sinclair JE (1984) Phil Mag A50:45–55; (1986) Erratum Phil Mag A53:161.
14. Calder AF, Bacon DJ (1993) J Nucl Mater 207:25–45.
15. Stoller RE (1996) J Metals Dec:23.
16. Diaz de la Rubia T, Averback RS, Benedek R, King WE (1987) Phys Rev Lett 59(19):1930.
17. Zinkle SJ, Singh BN (1993) J Nucl Mater 199:173.
18. Naundorf V (1991) J Nucl Mater 182:254.
19. Was GS, Allen TR (2007) In: Radiation Effects in Solids, Sickafus KE, Kotomin EA, Uberoage BP, eds, NATO Science Series, Springer 235:65–98.
20. Rehn LE, Okamoto PR, Averback RS (1984) Phys Rev B 30(6):3073.
21. Iwase A, Rehn LE, Baldo PM, Funk L (1996) J Nucl Mater 238:224–236.
22. Bacon DJ, Gao F, Osetsky YuN (2000) J Nucl Mater 276:1–12.
23. Deng HF, Bacon DJ (1996) Phys Rev B 54:11376.
24. Calder AF, Bacon DJ (1997) In: Proceedings of Symposium on Microstructure Evolution During Irradiation, Vol. 439. Materials Research Society, Pittsburgh, PA, p 521.

۴

تشکیل عیوب نقطه‌ای و نفوذ

مرحله‌ی اول در فهم اثرات پرتودهی برروی مواد، فهم ماهیت آسیب تابشی در سطوح اتمی است. در فصل قبل یک توضیح کمّی از فرایند جابه‌جا کننده‌ی اتم از موقعیتش در شبکه به وسیله‌ی انتقال انرژی جنبشی از ذره‌ی پرانرژی ارایه شد. اتم پس‌زده‌ی شبکه در سراسر بلور به حرکت در می‌آید و با اتم‌های همسایه برخورد کرده و این اتم‌ها را از موقعیت‌هایشان در شبکه جابه‌جا می‌کند. آبشاری از برخوردهای اتمی به وسیله‌ی ذره‌ی اولیه ایجاد می‌شود و در پایان منجر به ایجاد تعدادی موقعیت خالی شبکه و یک تعداد برابر اتم جابه‌جا شده که در موقعیت‌های بین‌نشین شبکه وارد شده‌اند، می‌شود. عیوب اصلی (جاهای خالی و بین‌نشین‌ها) بنیان تمام اثرات مشاهده شده تابشی بر روی ویژگی‌های فیزیکی و مکانیکی هستند. تعیین غلظت و نفوذ این عیوب اصلی، هدف این فصل است.

۴-۱ ویژگی‌های عیوب القایی تابشی

انواع مختلفی از عیوب در هر شبکه بلوری وجود دارد. این عیوب عبارتند از:

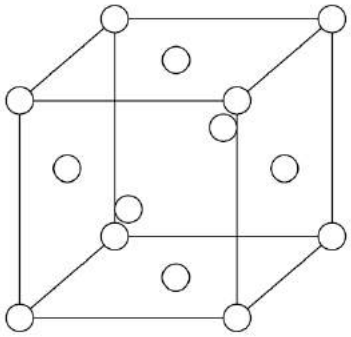
- عیوب نقطه‌ای (صفر بعدی): جاهای خالی و بین‌نشین‌ها

- عیوب خطی (یک بعدی): نابجایی‌های خطی
- عیوب صفحه‌ای (دو بعدی): نابجایی‌های پیچی
- عیوب حجمی (سه بعدی): حفره‌ها، حباب‌ها، چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن[1]

مهمترین این عیوب، عیوب نقطه‌ای هستند. در ادامه انواع مختلف عیوب تشریح شده‌اند:

۴-۱-۱ بین‌نشین‌ها

یک بین‌نشین، اتمی است که در یک موقعیتی از بلور قرار گرفته است که یک موقعیت منظم شبکه نیست. دو دسته‌بندی کلی از موقعیت‌های بین‌نشینی در شبکه‌های بلوری مکعبی مختلف وجود دارد: موقعیت‌های هشت‌وجهی و موقعیت‌های چهاروجهی. شبکه fcc، مکعبی با سلول واحدی به طول a (ثابت شبکه) و با اتم‌هایی که در گوشه‌ها و در وجوح این مکعب قرار گرفته اند، است (شکل ۴-۱).



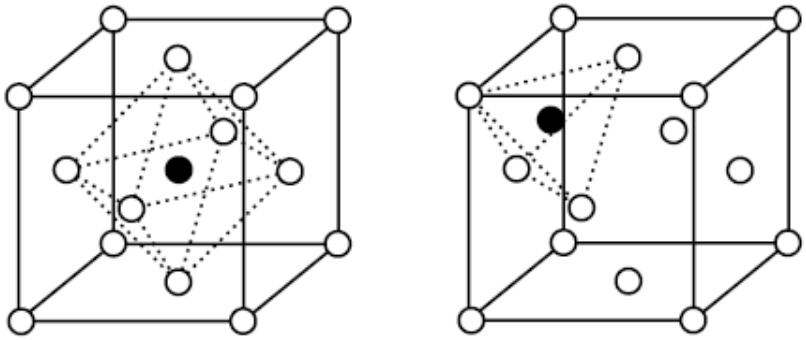
شکل ۴-۱. سلول واحد شبکه‌ی fcc.

هر اتم گوشه مابین هشت سلول واحد و اتم‌های موجود در وجوح مابین دو سلول واحد مشترک هستند در نتیجه تعداد اتم‌ها در سلول واحد برابر است با هشت اتم گوشه $\times \frac{۱}{۸}(\frac{\text{اتم}}{\text{سلول واحد}}) + ۶ \times \frac{۱}{۲}(\frac{\text{اتم}}{\text{سلول واحد}}) = ۴$.

موقعیت‌های هشت‌وجهی موقعیت‌های بین‌نشینی هستند که به وسیله‌ی یک هشت‌ضلعی که اتم‌های شبکه در رئوس آن قرار گرفته‌اند ساخته می‌شود. چهار موقعیت هشت‌وجهی در سلول واحد fcc، مرکز سلول واحد و لبه‌ها، وجود دارد. موقعیت مرکزی کاملاً در درون سلول واحد قرار دارد لیکن

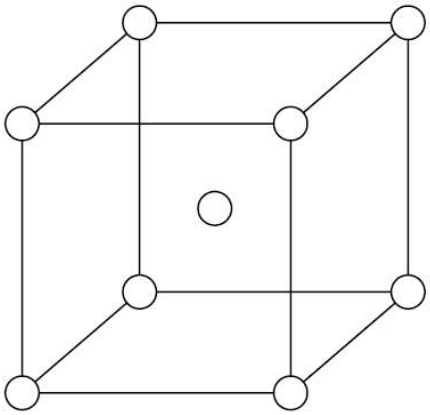
1. Stacking fault tetrahedra

موقعیت‌های لبه بین چهار سلول واحد مشترک هستند (۴-۲ الف). بنابراین تعداد کلی موقعیت‌های بین‌نشین هشت‌وجهی در شبکه‌ی fcc برابر با: ۱ + ۱۲ موقعیت لبه × $\frac{۱}{۴}$ = ۴ است. هم‌چنین موقعیت‌های بین‌نشین چهاروجهی در شبکه‌ی fcc وجود دارد که در آن اتم در داخل یک چهاروجهی تشکیل شده به وسیله‌ی اتم‌های شبکه قرار می‌گیرد. این چهاروجهی‌ها در سمت گوشه‌های سلول واحد (۴-۲ ب) قرار گرفته‌اند. در کل تعداد ۸ موقعیت چهاروجهی (یکی برای هر گوشه) در شبکه‌ی fcc وجود دارد.

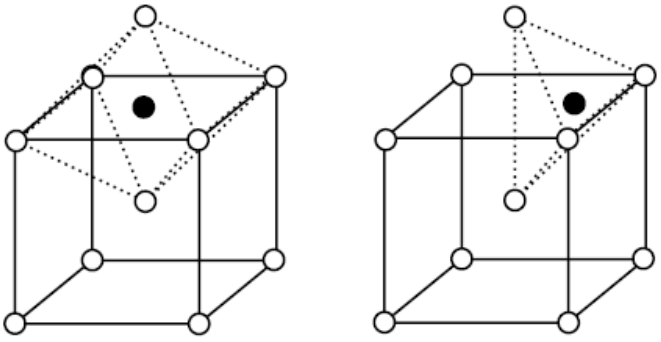


شکل۴-۲. موقعیت‌های بین‌نشین در سلول واحد fcc.

در شبکه‌ی bcc اتم‌ها در گوشه‌های سلول واحد و یک اتم در مرکز قرار گرفته‌اند و در نتیجه در کل دو اتم در یک سلول واحد قرار دارد: ۱ + ۸ موقعیت گوشه × $\frac{۱}{۸}$ $\frac{\text{موقعیت}}{\text{سلول واحد}}$ = ۲ اتم (شکل ۴-۳). موقعیت‌های بین‌نشین هشت‌وجهی در وجوح و لبه‌های سلول واحد برابر با: ۶ وجه × $\frac{۱}{۲}$ موقعیت در وجه + ۱۲ لبه × $\frac{۱}{۴}$ موقعیت در لبه = ۶ موقعیت در سلول واحد است (شکل ۴-۴ الف). موقعیت‌های بین‌نشین چهاروجهی در وجوح و در گوشه‌های وجوح قرار دارند که به این صورت است که: ۶ وجه × ۴ موقعیت در وجه × $\frac{۱}{۲}$ موقعیت در وجه = ۱۲ (شکل۴-۴ ب).



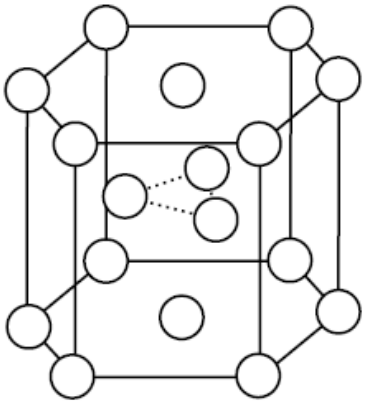
شکل ۴-۳. سلول واحد شبکه‌ی مکعبی bcc.



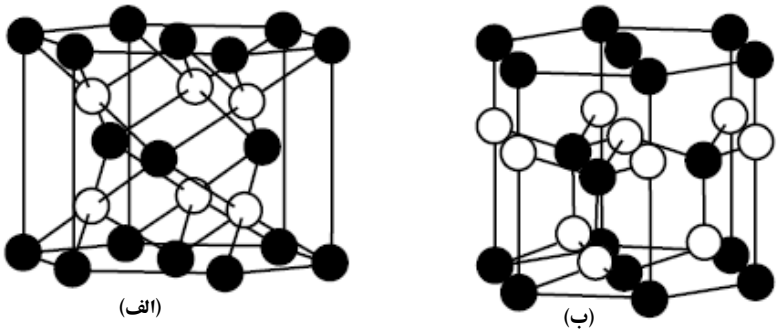
شکل ۴-۴. موقعیت‌های بین‌نشینی در سلول واحد bcc.

سلول واحد hcp مکعبی نیست و شش‌ضلعی است و به وسیله‌ی نسبت $\frac{c}{a}$ که در آن a طول یک وجه از شش‌وجهی قاعده و c ارتفاع سلول واحد هستند (شکل ۴-۵)، تعریف می‌شود. در هر سلول واحد شبکه‌ی hcp، ۶ اتم وجود دارد: دوازده اتم در گوشه‌ها قرار دارد که مابین شش سلول مشترک هستند (= ۲ اتم)، به علاوه دو اتم که در وجوح مشترک مابین دو سلول واحد قرار دارند (= ۱)، به علاوه سه اتم در داخل سلول در ارتفاع $\frac{۱}{۲c}$ (= ۳). شش موقعیت هشت‌وجهی در سلول واحد وجود دارد، که تمام آن‌ها کاملاً در درون سلول واحد قرار گرفته‌اند (شکل ۴-۶ الف). هم‌چنین

شش موقعیت چهاروجهی در درون سلول واحد قرار دارد، که چهار عدد از آن‌ها کاملاً در درون سلول واحد قرار گرفته است و شش‌تای آن‌ها مابین سه سلول واحد مشترک هستند (شکل ۴-۶ ب).



شکل ۴-۵. سلول واحد هگزاگونال فشرده (hcp).

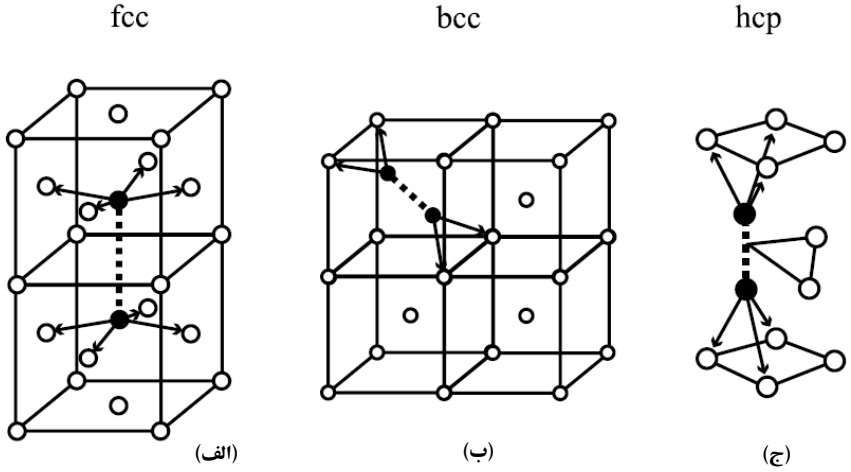


شکل ۴-۶. موقعیت‌های بین‌نشین در سلول واحد hcp.

تصویر ساده ارایه شده از بین‌نشین‌ها یک تصویر فیزیکی حقیقی نیست؛ زیرا آرایش پایدار اتم‌های خود بین‌نشین[1] (اتم‌های خود بین‌نشین) در فلزات به صورت دمبلی[2] یا آرایش بین‌نشینی دو نیم شده که دو اتم یک موقعیت تکی شبکه را به اشتراک گذاشته‌اند، است. با توجه به این‌که هسته‌های اتمی یک‌دیگر را دفع می‌کنند، اتم‌ها خود را در پایین‌ترین سطح انرژی آرایش می‌دهند. این محورهای

1. Self-interstitial
2. Dumbbell

دمبلی شکل در طول جهت ⟨100⟩ برای فلزات fcc، جهت ⟨110⟩ برای فلزات bcc و جهت ⟨0001⟩ برای بلورهای hcp حضور دارند (شکل ۴-۷).

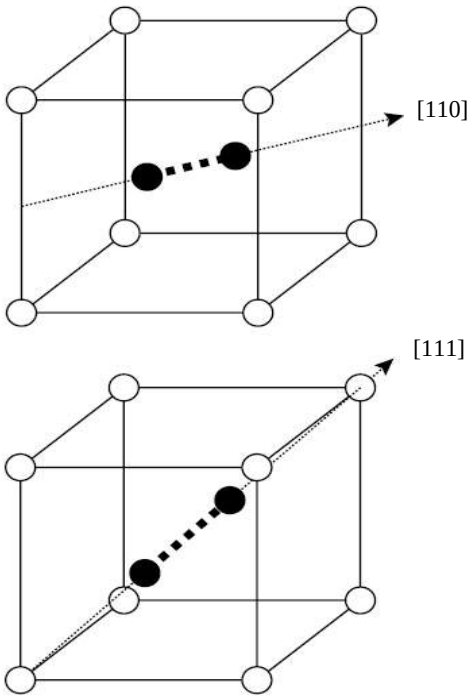


شکل ۴-۷. ترکیب اتم‌های خود بین‌نشین‌ها در شبکه‌های (الف) fcc، (ب) bcc و (ج) hcp.

برای تطبیق دو اتم در یک موقعیت شبکه، اتم‌های نزدیک دمبل به آرامی خارج از موقعیت‌هایشان در شبکه جابه‌جا می‌شوند که در نتیجه اتم‌های همسایه را جابه‌جا کرده (ایجاد آشفتگی در شبکه) و سپس به موقعیت اولیه باز می‌گردند. این جابه‌جایی‌های ایجاد شده از عیب، یک میدان کشسان جابه‌جایی را تشکیل می‌دهند. تقارن میدان جابه‌جایی به واسطه‌ی آرایش اتم‌های خود بین‌نشین در شبکه‌ی bcc ایجاد شده است (شکل ۴-۸).

یک آرایش بین‌نشینی دمبل ⟨100⟩ در آلومینیوم fcc را در نظر بگیرید. فاصله‌ی جداشدگی مابین دو دمبل حدود $۰٫۶a$ است. فاصله‌ی نزدیک‌ترین همسایه در شبکه‌ی fcc در جهت ⟨110⟩ و برابر با $\frac{a}{\sqrt{۲}}$ است. در نتیجه فاصله‌ی جداشدگی یک دمبل ⟨100⟩ در حدود ۲۰٪ نسبت به فاصله‌ی نزدیک‌ترین همسایه در شبکه‌ی غیرآشفته و منظم، کوچک‌تر است. چهار همسایه‌ی نزدیک به هر

دمبل در حدود $0.1a$ به سمت بیرون جابه‌جا می‌شوند و حجم واهلش کلی[1] در حدود 2Ω است که Ω حجم اتمی است. حجم واهلش یافته به وسیله‌ی بررسی بلور به منزله‌ی بدنه‌ی یکپارچه‌ی کشسانی و وارد کردن یک اتم در نقش بین‌نشین (یا حذف یک اتم به منظور ایجاد یک جای خالی) و تعیین مقدار اعوجاج نتیجه شده در شبکه، تعیین می‌شود. حجم‌های واهلش یافته بالای ناشی از اتم‌های خود بین‌نشین‌ها باعث اعوجاج زیاد شبکه می‌شود که منجر به برهم‌کنش‌های قوی با دیگر اتم‌های خود بین‌نشین‌ها و دیگر عیوب شبکه (نابجایی‌ها، اتم‌های ناخالصی) می‌شود. اثر خالص این برهم‌کنش‌های کشسان، جذب اتم‌های خود بین‌نشین‌های متحرک به این عیوب است. مقادیر آزمایشگاهی برای حجم واهلش یافته در چندین فلز در جدول ۴-۱ نشان داده شده است.



شکل ۴-۸. بین‌نشین‌های جدا شده در شبکه‌ی bcc.

1. Total relaxation volume

جدول۴-۱. مقادیر عددی برای توصیف ویژگی‌های کمی عیوب نقطه‌ای ایجاد شده بر اثر تابش در فلزات از منابع مختلفی گردآوری شده است[۱].

	نماد	واحد	Al	Cu	Pt	Mo	W
بین‌نشین‌ها							
حجم واهلیده	$V_{\text{relax}}^{\text{i}}$	حجم اتمی	۱٫۹	۱٫۴	۲٫۰	۱٫۱	
انرژی تشکیل	E_{f}^{i}	eV	۳٫۲	۲٫۲	۳٫۵		
غلظت تعادلی در T_{m}^{*}	$C_{\text{i}}(T_{\text{m}})$	-	$۱۰^{-۱۸}$	$۱۰^{-۷}$	$۱۰^{-۶}$		
انرژی مهاجرت	E_{m}^{i}	eV	۰٫۱۲	۰٫۱۲	۰٫۰۶		۰٫۰۵۴
جاهای خالی							
حجم واهلید ه	$V_{\text{relax}}^{\text{v}}$	حجم اتمی	۰٫۰۵	−۰٫۲	−۰٫۴		
انرژی تشکیل	E_{f}^{v}	eV	۰٫۶۶	۱٫۲۷	۱٫۵۱	۳٫۲	۳٫۸
آنتروپی تشکیل	S_{f}^{v}	k	۰٫۷	۲٫۴			۲
غلظت تعادلی در T_{m}^{*}	$C_{\text{v}}(T_{\text{m}})$	-	۹×۱۰^{-۶}	۲×۱۰^{-۶}			۴×۱۰^{-۵}
انرژی مهاجرت	E_{m}^{v}	eV	۰٫۶۲	۰٫۸	۱٫۴۳	۱٫۳	۱٫۸
انرژی فعال‌سازی برای خود نفوذی	Q_{vSD}	eV	۱٫۲۸	۲٫۰۷	۲٫۹	۴٫۵	۵٫۷
جفت‌های فرانکل انرژی تشکیل	E_{f}^{FP}	eV	۳٫۹	۳٫۵	۵		

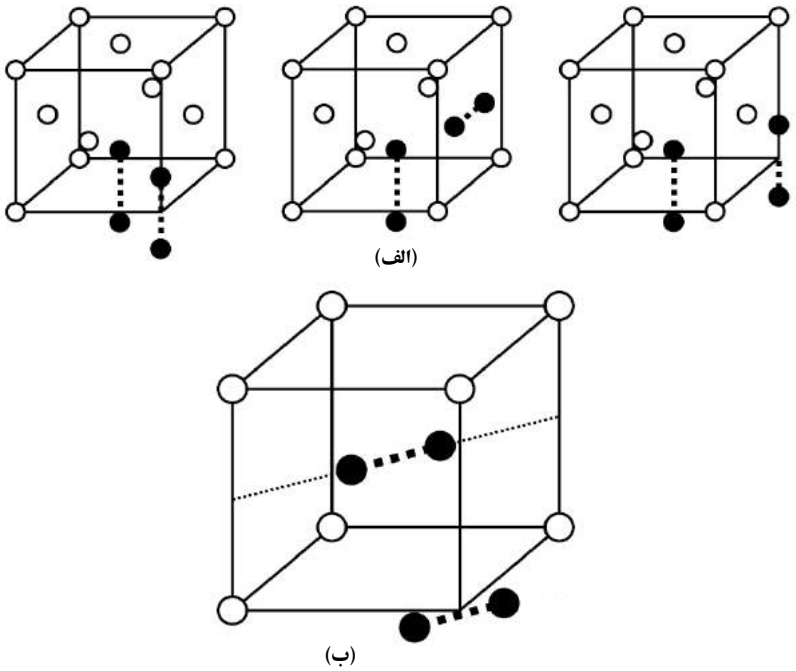
۴-۱-۲ بین‌نشین‌های چندتایی

بین‌نشینی‌های چندتایی به وسیله‌ی کلوخه‌ای شدن[1] اتم‌های خود بین‌نشین‌های متحرک در دماهای بالا شکل می‌گیرند. بین‌نشین‌های چندتایی انرژی اتصال بالا و در حدود ۱ eV دارند. از این‌رو انرژی مورد نیاز برای جداکردن یک اتم‌های خود بین‌نشین از یک خوشه‌ی بزرگ نزدیک به انرژی تشکیل اتم‌های خود بین‌نشین (۲-۴ eV) است. خوشه‌های اتم‌های خود بین‌نشین در دماهای پایین در برابر تجزیه شدن بسیار پایدار است.

شبیه‌سازی‌های کامپیوتری پیش‌بینی می‌کند که آرایش پایدار بین‌نشین دوتایی در فلزات fcc دو دمبل موازی برروی نزدیک‌ترین موقعیت‌های همسایه است (شکل ۴-۹). ساختار پایدار بین‌نشین‌های سه‌تایی

1. Agglomeration

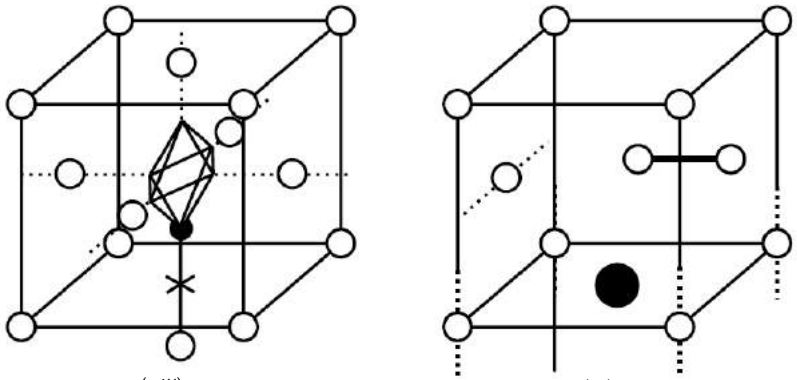
در فلزات fcc که به وسیله‌ی شبیه‌سازهای کامپیوتری پیش‌بینی شده است سه دمبل ⟨100⟩ قائم برروی نزدیک‌ترین مکان‌های همسایه است. پیش‌بینی شده است که ترکیب بین‌نشین‌های دوتایی در شبکه‌ی bcc دو دمبل ⟨110⟩ برروی نزدیک‌ترین موقعیت‌های همسایه است.



شکل ۴-۹. بین‌نشین‌های دوتایی در (الف) شبکه‌ی fcc در موقعیت‌های پایدار، نیمه پایدار و موقعیت‌های پایدار جدید، و (ب) در شبکه‌ی bcc.

۴-۱-۳ ترکیب‌های بین‌نشینی ـ ناخالصی

اتم‌های ناخالصی در فلزات تله‌های مناسبی برای اتم‌های خود بین‌نشین‌ها هستند. ترکیب‌های پایدار مشتمل بر اتم‌های کوچک اندازه و بین‌نشین‌ها، از نظر حراراتی در زیر دمایی که جاهای خالی به حرکت در می‌آیند، تجزیه نمی‌شوند. یک آرایش فضایی ممکن، دمبل ترکیبی است که یکی از اتم‌های دمبل به وسیله‌ی اتم‌های ناخالصی جایگزین شده است (شکل ۴-۱۰ الف). انرژی‌های پیوندی در حدود ۱٫۰ eV – ۰٫۵ هستند. به دام‌اندازی‌های ضعیف‌تر، در صورت وجود ناخالصی‌های بزرگ اندازه مشاهده می‌شود (شکل ۴-۱۰ب).



شکل۴-۱۰. (الف) آرایش فضایی دمبل ترکیبی در شبکه‌ی fcc که به وسیله‌ی یک ناخالصی کوچک و یک اتم از شبکه‌ی میزبان تشکیل شده است. رئوس هشت‌وجهی موقعیت دیگر ناخالصی‌ها هستند که آن‌ها یک دمبل را با دیگر اتم‌های وجه در سلول واحد می‌سازند. (ب) به دام‌اندازی یک بین‌نشین برای ایجاد یک دمبل با یک ناخالصی بزرگ اندازه در شبکه‌ی fcc.

ترکیب‌های ناخالصی ـ بین‌نشینی انرژی فعال‌سازی کوچکی را برای بازآرایشی خود نیاز دارند که به اصطلاح حرکت قفسی[1] نامیده می‌شود. همان‌طوری که در شکل ۴-۱۰ الف نشان داده شد، ناخالصی می‌تواند میان موقعیت‌های مشخص شده‌ی مرکز هشت‌وجهی پرش کند و یک دمبل ترکیبی جدید با اتم میزبان مجاور تشکیل دهد. انرژی فعال‌سازی پرش بازآرایشی در قفس در حدود ۰٫۰۱ eV است.
فیلم‌های ۴-۱ و ۴-۲ رفتار آهن و کروم در یک آلیاژ Fe-10%Cr را نشان می‌دهد که متعاقب آبشار جابه‌جایی به صورت تابعی از اندازه‌ی نسبی اتم‌های حل شده است. در فیلم ۴-۱ کروم در نقش اتم حل شده‌ی بزرگ اندازه مدل‌سازی شده است و در شکل ۴-۲ کروم در نقش اتم کوچک اندازه در نظر گرفته شده است. نکته‌ی قابل توجه تفاوت در خوشه‌های بین‌نشینی متعاقب دوره‌ی سرد شدن آبشار است. اتم‌های کروم کوچک اندازه (فیلم ۴-۲) به دام‌افتادگی قوی‌تری را به وسیله‌ی

1. Cage motion

بین‌نشین‌های آهن از مورد اتم‌های کروم بزرگ (فیلم ۴-۱) متحمل می‌شوند که نتیجه‌ی آن تعداد بیش‌ترِ خوشه‌های بین‌نشینی کوچک حاوی کروم است.

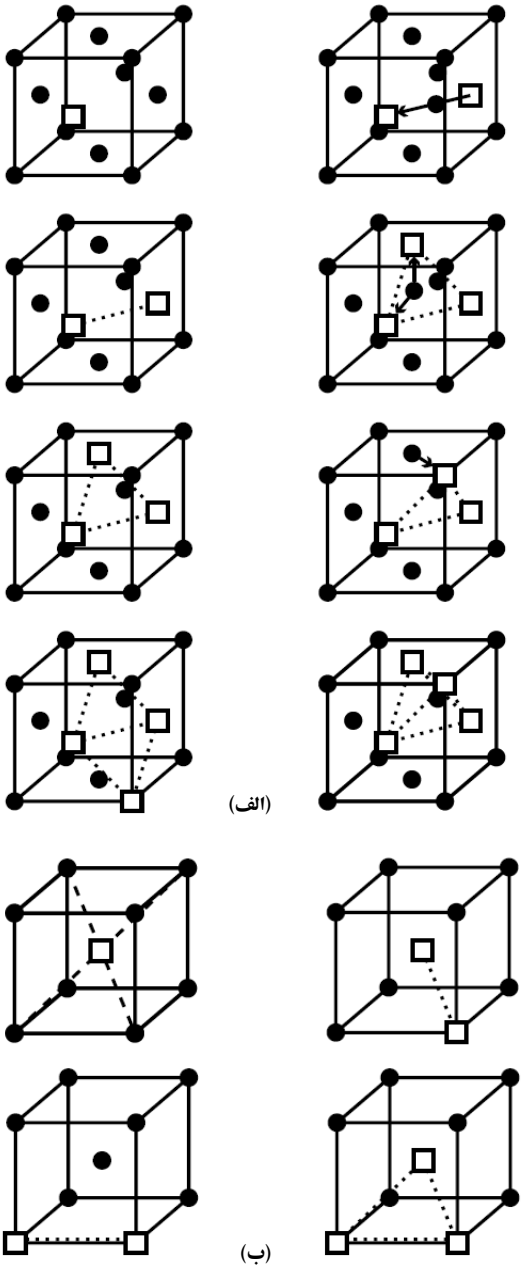
۴-۱-۴ جاهای خالی

جای خالی، یا اتم مفقود شبکه، ساده‌ترین عیب نقطه‌ای در شبکه‌های فلزی است. تمام محاسبات و شبیه‌سازی‌های کامپیوتری نشان می‌دهد که ساختار جای خالی تکی، اتم مفقود شده‌ی شبکه است به گونه‌ای که نزدیک‌ترین همسایه‌ها به سمت جای خالی متمایل می‌شوند.

اتم‌های خود بین‌نشین‌ها انرژی تشکیل بالا (> ۲ eV)، حجم واهلش یافته بزرگ ($\sim ۲\Omega$) و انرژی مهاجرت کوچکی ($< ۰/۱۵$ eV) را دارند که منجر به قابلیت تحرک بالای آن‌ها می‌شود. به عبارت دیگر، جاهای خالی انرژی تشکیل پایین (< ۲ eV)، حجم واهلش یافته پایین ($۰/۱ - ۰/۵\ \Omega$) و انرژی مهاجرت بالایی($> ۰/۵$ eV) را دارند، بنابراین در قبال اتم‌های خود بین‌نشین‌ها قابلیت تحرک کم‌تری دارند (جدول ۴-۱). به علاوه میدان کرنشی جاهای خالی در فلزات مکعبی همسان‌گرد است که در نتیجه آن‌ها را برای بررسی مشکل می‌کند.

۴-۱-۵ جاهای خالی چندتایی

جاهای خالی چندتایی در مقایسه با خوشه‌های بین‌نشینی انرژی‌های پیوندی کوچک‌تری را دارند ($۰/۱$ eV)، لیکن اغلب در فلزات پرتودهی شده مشاهده می‌شوند. آرایش خوشه‌های جای خالی چندتایی برای شبکه‌ی fcc در شکل ۴-۱۱ الف و برای فلزات bcc در شکل ۴-۱۱ب نشان داده شده است. انرژی مهاجرت جاهای خالی دوتایی نسبت به جاهای خالی تکی کم‌تر است ($۰/۹$ eV در مقابل $۱/۳۲$ eV برای نیکل) لیکن با افزایش اندازه‌ی خوشه، افزایش می‌یابد. کاملاً مشخص است که از آن‌جایی که جای خالی چهارتایی فقط می‌تواند به وسیله‌ی تجزیه مهاجرت کند، این عیوب اولین هسته‌ی پایدار برای خوشه‌بندی‌های اضافی است.



شکل ۴-۱۱. آرایش فضایی جاهای خالی چندتایی در شبکه‌های (الف) fcc و (ب) bcc.

۴-۱-۶ خوشه‌های عیب ـ عنصر حل شده و ناخالصی ـ عیب

جاهای خالی می‌توانند به منظور کم‌تر کردن انرژی آزاد کلی جامد به عناصر حل شده‌ی بزرگ اندازه یا اتم‌های ناخالصی بزرگ اندازه بپیوندند. تخمین‌هایی از انرژی پیوندی یک جای خالی به عنصر حل شده‌ی بزرگ اندازه در شبکه‌ی fcc در محدوده‌ی ۰٫۲ تا ۱٫۰ eV متغیر است [۲]. از آن‌رو، این عناصر حل شده می‌توانند به منزله‌ی تله‌های مناسب برای جاهای خالی در شبکه عمل کنند.

۴-۲ ترمودینامیک تشکیل عیب نقطه‌ای

حتی در غیاب پرتودهی فلز بلور نمی‌تواند در دمای محدود در حالت بدون نقص مطلق باقی بماند. از لحاظ آماری، احتمال محدودی وجود دارد که انرژی کافی برای تشکیل عیب نقطه‌ای در شبکه‌ی بلوری به وسیله‌ی نوسانات موضعی تأمین شود. مشکلی نیست که برای اکثر اهداف فرض شود که حجم بلور ثابت است تا تابع انرژی آزاد هلمهولتز قابل کاربرد باشد. با توجه به مرجع [۳] اگر سیستم در یک فشار ثابت باشد در نتیجه:

(۱-۴)

$$F \cong G = U + pV - TS = H - TS\,,$$

که در این رابطه U انرژی داخلی، H آنتالپی کلی و N اتم‌های تشکیل دهنده‌ی سیستم هستند. هم‌چنین S بی‌نظمی (آنتروپی) در سیستم را نشان می‌دهد که می‌تواند به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر توصیف شود:

(۲-۴)

$$S = k \ln w\,,$$

که w تعداد آرایشات متفاوت ممکن اتم‌ها و k ثابت بولتزمان است.

فرض می‌شود که بلور n عیب با N موقعیت را دارد. افزایش در انرژی آزاد برابر است با:

(۳-۴)

$$\Delta G_{\mathrm{f}} = n\Delta H_{\mathrm{f}} - T\Delta S\,,$$

که ΔH_f افزایش آنتالپی به وسیله‌ی ایجاد (تشکیل) عیوب و ΔS تغییر در آنتروپی کلی است که به صورت زیر محاسبه می‌شود.

برای یک عیب، N موقعیت وجود دارد و از آن‌رو N آرایش مختلف امکان‌پذیر است. برای تعداد n عیوب، تعداد N موقعیت برای اولی، (N-۱) برای دومی، (N-۲) برای سومی و به همین ترتیب $(N-n+1)$ برای nامین عیب وجود دارد که در نتیجه منجر به $N(N-1)(N-2)...(N-n+1)$ آرایش مختلف در کل می‌شود. لیکن به علت این‌که تمام این‌ها مجزا نیستند و عیوب غیرقابل تشخیص هستند، عدد بالا، $n!$ راه توزیع N عیب در n موقعیت مجاز را نشان می‌دهد. از آن‌رو تعداد آرایشات ممکن مختلف برابر است با:

(۴-۴)

$$w = \frac{N(N-1)(N-2)\dots(N-n+1)}{n!} ,$$

یا

(۴-۵)

$$w = \frac{N!}{n!(N-n)!} .$$

آنتروپی اختلاط برابر است با:

(۴-۶)

$$\Delta S_{\text{mix}} = k\left[\ln N! - \ln n! - \ln(N-n)!\right] .$$

و با استفاده از تقریب استرلینگ[1] $\ln x! \simeq x\ln x$ برای x های بزرگ می‌توان نوشت:

(۴-۷)

$$\Delta S_{\text{mix}} = k\ln w \cong \left[N\ln N - n\ln n - (N-n)\ln(N-n)\right] .$$

1. Stirling's approximation

علاوه بر ΔS_{mix}، در ΔS سهمی نیز مربوط به بی‌نظمی‌های نوسانی عیوب موجود وجود دارد. با توجه به مدل انیشتن[1] در مورد حرکت شبکه، اتم‌ها به صورت نوسان کننده‌های همساز خطی در سه بعد مستقل در نظر گرفته می‌شوند و آنتروپی مرتبط با آن برابر است با:

(۸-۴)

$$S_f = 3k \ln\left(\frac{kT}{\hbar \nu_E}\right) ,$$

که ν_E بسامد طبیعی نوسان و $\hbar$ ثابت پلانک است. اگر هر عیب بسامد نوسان z همسایه را به ν_r تغییر دهد، آنتروپی برابر است با:

(۹-۴)

$$S'_f = 3kz \ln\left(\frac{kT}{\hbar \nu_r}\right) = 3kz \left[\ln\left(\frac{kT}{\hbar \nu_E}\right) + \ln\left(\frac{\nu_E}{\nu_r}\right)\right] ,$$

و برای n عیب، تغییر کلی آنتروپی ناشی از بی‌نظمی نوسانی برابر است با:

(۱۰-۴)

$$n(S'_f - zS_f) = \Delta S_f = 3nkz \ln\left(\frac{\nu_E}{\nu_r}\right) .$$

با در نظر گرفتن هر دو سهم تغییر آنتروپی و وارد کردن آن‌ها به داخل معادله انرژی آزاد می‌توان نوشت:

(۱۱-۴)

$$\Delta G_f = n\Delta H_f - kT \left[N \ln N - n \ln n - (N-n)\ln(n-N) + n \ln\left(\frac{\nu_E}{\nu_r}\right)^{3z}\right] .$$

1. Einstein model

در تعادل، n به گونه‌ای خواهد بود که $\frac{\mathrm{d}\Delta G_{\mathrm{f}}}{\mathrm{d}n} = 0$ باشد که در نتیجه:

(۱۲-۴)

$$\frac{\Delta H_{\mathrm{f}}}{kT} = \ln\left[\frac{N-n}{n}\left(\frac{\nu_{\mathrm{E}}}{\nu_{\mathrm{r}}}\right)^{3z}\right] .$$

با فرض این‌که $n << N$ و با در نظر گرفتن $C = \frac{n}{N}$ (غلظت) نتیجه می‌دهد که:

(۱۳-۴)

$$C = \left(\frac{\nu_{\mathrm{E}}}{\nu_{\mathrm{r}}}\right)^{3z} \exp\left(\frac{-\Delta H_{\mathrm{f}}}{kT}\right) .$$

با نوشتن $(\frac{\nu_{\mathrm{E}}}{\nu_{\mathrm{r}}})^{3z}$ بر حسب آنتروپی رابطه‌ی مشابهی به‌دست می‌آید:

(۱۴-۴)

$$C = \frac{n}{N} = \exp\frac{\Delta S_{\mathrm{f}}}{k}\exp\frac{-\Delta H_{\mathrm{f}}}{kT} = \exp\left(\frac{-\Delta G_{\mathrm{f}}}{kt}\right) .$$

برای جاهای خالی می‌توان نوشت:

(۱۵-۴)

$$C_{\mathrm{v}} = \exp\left(\frac{S_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}}}{k}\right)\exp\left(\frac{-E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}}}{kT}\right) ,$$

و برای بین‌نشین‌ها به صورت مشابه می‌توان نوشت:

(۱۶-۴)

$$C_{\mathrm{i}} = \exp\left(\frac{S_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}}{k}\right)\exp\left(\frac{-E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}}{kT}\right) ,$$

که در این روابط $E_f^v = \Delta H_f^v$ و $E_f^i = \Delta H_f^i$، E_f^i ،E_f^v و به ترتیب انرژی تشکیل برای عیب‌های ذکر شده هستند و $\Delta S_f^v = S_f^v$ و $\Delta S_f^i = S_f^i$ است. در فلزات مقادیر نمونه‌وار برای E_f^v در حدود ۱ eV و E_f^i در حدود ۴eV هستند. از آن‌رو تشکیل جاهای خالی به صورت قابل توجهی انرژی کم‌تری را از تشکیل بین‌نشین‌ها لازم دارد (جدول ۴-۱) و در نتیجه در حالت تعادلی $C_v >> C_i$ است. در ادامه به مثالی در مورد این بحث پرداخته خواهد شد.

مثال ۴-۱. *غلظت تعادلی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در آلومینیوم در دمای اتاق و ۱۰ °C زیر نقطه‌ی ذوب را محاسبه کنید.*

الف) دمای اتاق ۲۰ °C یا ۲۹۳ K است.

با توجه به جدول ۴-۱، می‌توان نوشت

$$E_f^v \cong 0.66\text{eV} \qquad S_f^v \sim 0.7\text{k}$$
$$E_f^i \cong 3.2\text{eV} \qquad S_f^i \sim 8\text{k}\,,$$

و با جایگذاری در معادله‌های ۴-۱۴ و ۴-۱۵ نتیجه می‌شود که:

$$C_v = \exp(S_f^v/k)\exp(-E_f^v/kT) \sim 1.6\times10^{-11}$$
$$C_i = \exp\left(S_f^i/k\right)\exp\left(-E_f^i/kT\right) \sim 5.0\times10^{-51}\,.$$

ب) در ۱۰ °C زیر نقطه‌ی ذوب یا ۶۵۰ °C (۹۲۳ K) است.

معادله‌های ۴-۱۵ و ۴-۱۶ به صورت زیر نوشته می‌شوند:

$$C_v = \exp(S_f^v/k)\exp(-E_f^v/kT) \sim 5.0\times10^{-4}$$
$$C_i = \exp\left(S_f^i/k\right)\exp\left(-E_f^i/kT\right) \sim 9.8\times10^{-15}\,.$$

در کنار انجام آزمایشات، چگونه می‌توان تخمینی را برای E_f^v به‌دست آورد؟ فرض می‌شود که حفره‌ی کوچک در بلور صلب که حجمی معادل $\Omega = \frac{4}{3}\pi r_a^3$ برابر با حجم اشغال شده به وسیله‌ی اتم دارد، ایجاد شود که Ω حجم اتمی و r_a شعاع اتم هستند. از آن‌جایی که حجم باید ثابت نگاه داشته شود، حفره به صورت یکنواختی در سراسر سطح بلور پهن می‌شود. اگر بلور به صورت کره باشد، می‌توان نوشت:

(۱۷-۴)

$$R' = R + \Delta R\,.$$

از آن‌جایی که بلور واسط صلب است و حجم حفظ می‌شود:

(۱۸-۴)

$$4\pi R^2 \Delta R = 4/3\pi r_a^3\,,$$

و اگر بلور در مقایسه با اندازه‌ی اتم بزرگ باشد، در نتیجه $R >> r_a$ و $\Delta R << R$ و می‌توان نوشت:

(۱۹-۴)

$$\Delta R = r_a^3/3R^2\,.$$

اگر E_f^v تفاوت در انرژی سطحی بلور با و بدون حفره باشد و σ انرژی سطحی در واحد سطح باشد، در نتیجه:

(۲۰-۴)

$$\begin{aligned} E_f^v &= 4\pi r_a^2\sigma + 4\pi\gamma(R+\Delta R)^2 - 4\pi R^2\sigma \\ &\sim 4\pi\sigma(r_a^2 + 2R\Delta R)^2\,, \end{aligned}$$

که دو بخش اول در سمت راست معادله، انرژی‌های مرتبط با سطوح داخلی و خارجی بعد از تشکیل جای خالی هستند و بخش آخر انرژی سطح بلور قبل از تشکیل جای خالی است، و عبارت ΔR^2 نادیده گرفته شده است. با جایگذاری ΔR از معادله‌ی ۴-۱۹ می‌توان نوشت:

(۲۱-۴)

$$E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}} = 4\pi\sigma\left(r_{\mathrm{a}}^2 + \frac{2}{3}\frac{r_{\mathrm{a}}^3}{R}\right)$$
$$= 4\pi\sigma r_{\mathrm{a}}^2\left(1 + \frac{2}{3}\frac{r_{\mathrm{a}}}{R}\right),$$

و از آن‌جایی که $r_{\mathrm{a}} << R$ است، بنابراین نتیجه می‌شود که:

(۲۲-۴)

$$E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}} \sim 4\pi\sigma r_{\mathrm{a}}^2 .$$

در اکثر فلزات $\sigma \sim ۱۰\ \mathrm{eV/nm^2}$ و $r_{\mathrm{a}} \sim ۰/۱۵\ \mathrm{nm}$، در نتیجه $E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}} \sim ۲\mathrm{eV}$ است.

اگر بلور به معنای جسم پیوسته‌ی کشسان در نظر گرفته شود یک عبارت متفاوت برای $E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}}$ به‌دست می‌آید:

(۲۳-۴)

$$E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}} = 4\pi r_{\mathrm{a}}^2\sigma - 12\pi r_{\mathrm{a}}\frac{\sigma^2}{\mu} + 6\pi r_{\mathrm{a}}\frac{\sigma^2}{\mu},$$

که عبارت اول انرژی سطحی حفره است، عبارت دوم نیز کاهش انرژی ناشی از انقباض سطوح به وسیله‌ی کشش سطحی است و عبارت سوم انرژی کشسان ذخیره شده در یک جامد و μ ضریب برشی بلور هستند و $E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}} \sim ۱\mathrm{eV}$ است. لازم به ذکر است که یک بین‌نشین باعث ایجاد جابه‌جایی‌ای می‌شود که بیش‌تر از r_{a} است و همان‌طوری که در ادامه خواهید دید، منجر به انرژی تشکیل بیش‌تری می‌شود.

۴-۳ نفوذ عیوب نقطه‌ای

اتم‌ها در شبکه به علت نوسان‌های حرارتی در یک حالت ثابت حرکتی هستند و به این معنی است که عیوب نقطه‌ای در شبکه در حرکت است. ماهیت تصادفی نوسان حرارتی منجر به افزایش حرکت‌های

تصادفی اتم‌ها از طریق عیوبی که در تعادل حرارتی با محیط اطرفشان هستند، می‌شود و در نقش خودنفوذی[1] شناخته می‌شوند. اگر اتم‌های خارجی در یک فلز خالص حضور داشته باشند، نفوذشان به عنوان نفوذ ناهمگن[2] شناخته می‌شود. خود نفوذی هنگامی افزایش می‌یابد که یک شیب غلظتی موضعی عیوب در بلور ظاهر می‌شود، و اتم‌های متحرک در جهت حذف شیب حرکت می‌کنند. نفوذ به وسیله‌ی نیروهای دیگری از شیب غلظتی، مانند تنش یا کرنش، میدان‌های الکتریکی، دما و غیره تحریک می‌شود. نفوذ در یک چند بلور سازوکار پیچیده‌ای دارد که ناشی از حضور مرزدانه‌ها، سطوح داخلی، نابجایی‌ها و غیره است. در ادامه، مباحث با نفوذ در یک تک بلور شروع می‌شود و سپس بررسی‌های مواد چند بلوری انجام می‌شود [۴].

۴-۳-۱ توضیح ماکروسکوپی نفوذ

نفوذ به وسیله‌ی دو قانون بنیادی کنترل می‌شود که در سال ۱۸۸۰ به کوشش فیک[3] به‌دست آمد. این قوانین به علت مشخصه‌ی کلی آن‌ها در خصوص فرایندهای نفوذ ماکروسکوپی به هر حالتی از ماده اعمال می‌شوند. اولین قانون ارتباط مابین شار، J، و شیب غلظتی گونه‌های نفوذی است:

(۲۴-۴)

$$J = -D\nabla C\,,$$

که در این رابطه D ضریب نفوذ و ∇C شیب ترکیبی است. برای نفوذ در یک بعد:

(۲۵-۴)

$$J = -D\frac{\partial C}{\partial x}\,.$$

علامت منفی مشخص می‌کند که نفوذ در جهت کاهش غلظت گونه‌های نفوذ کننده رخ می‌دهد. D در اصل در واحد cm^2/s یا m^2/s است و برای جامدات مابین دمای ۲۰ تا ۱۵۰۰°C، $۱۰^{-۲۰}\ cm^2/s < D < ۱۰^{-۴}\ cm^2/s$ است.

1. Self-diffusion
2. Heterodiffusion
3. Fick

قانون دوم فیک رابطه‌ی میان شیب غلظتی و نرخ تغییر غلظت ایجاد شده به وسیله‌ی نفوذ در یک نقطه‌ی مشخص از یک سیستم را می‌دهد:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot J = -\nabla \cdot D\nabla C \,,$$

که در یک بعد به صورت زیر ساده‌سازی می‌شود:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}\right) \,. \qquad (۲۶-۴)$$

اگر D تابعی از غلظت نباشد، در نتیجه می‌توان معادله‌ی ۴-۲۶ را به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} &= -D\nabla^2 C \\ &= -D\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \,.\end{aligned} \qquad (۲۷-۴)$$

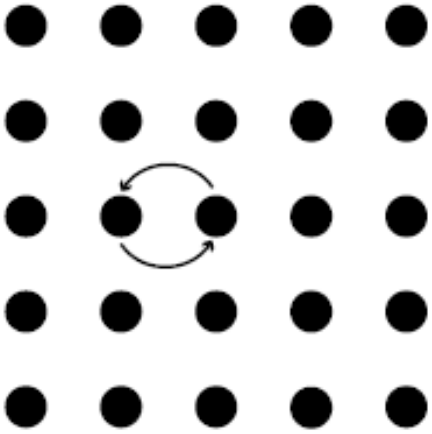
معادله‌های ۲-۲۶ و ۲-۲۷ می‌تواند برای شرایط حدی مشخص، حل شود که این امکان را فراهم می‌سازد که D بر پایه‌ی اندازه‌های مختلف تعیین شود.

درحالی‌که قوانین فیک توضیحی از نفوذ در مقیاس ماکروسکوپی فراهم می‌کند، لیکن این علاقه وجود دارد که نفوذ در سطوح میکروسکوپی نیز به خوبی مورد فهم قرار گیرد. نفوذ به وسیله‌ی چندین سازوکار مختلف رخ می‌دهد که وابسته به ماهیت گونه‌های نفوذ کننده و شبکه‌ی میزبان است. این سازوکارهای نفوذ در ادامه بررسی می‌شوند.

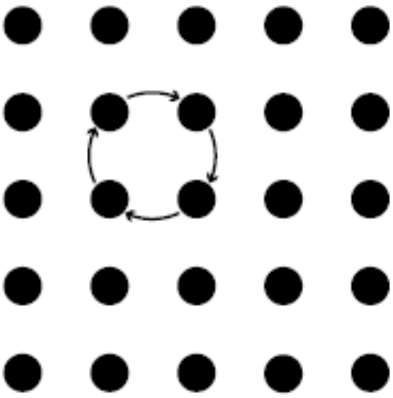
۴-۳-۲ سازوکارهای نفوذ

برای به‌دست آوردن توضیح نظری از نفوذ، در ابتدا باید عمل ابتدایی پرش اتم از موقعیت پایدار شبکه به موقعیت دیگری در شبکه بررسی شود. چندین سازوکار مختلف نفوذ شبکه‌ای وجود دارد که بعضی از آن‌ها نیازمند حضور عیوب و برخی دیگر بدون نیاز به آن هستند. انواع مختلف زیر قابل تشخیص هستند [۵].

سازوکارهای تبادلی و حلقوی: سازوکار تبادلی (شکل ۴-۱۲)، تبادل موقعیت‌های شبکه‌ی دربرگیرنده‌ی دو اتم قرار گرفته در موقعیت‌های مجاور شبکه را شامل می‌شود. این سازوکار به حضور عیوب نیازی ندارد و از آن‌جایی که تغییر شکل قابل توجه‌ای را نیاز دارد و مستلزم انرژی فعال‌سازی بالایی است، در بلورهای فشرده بسیار نامحتمل است. سازوکار حلقوی (شکل ۴-۱۳) از سازوکار تبادلی کم انرژی‌تر است لیکن حرکت‌های هماهنگ سه تا پنج اتم شبکه را نیاز دارد. ازآن‌جایی که احتمال این فرایند پایین است و انرژی مورد نیاز برای آن بالا است، هر دو سازوکار تبادلی و حلقوی در بلورهای حاوی عیوب از اهمیت پایینی برخوردار هستند.

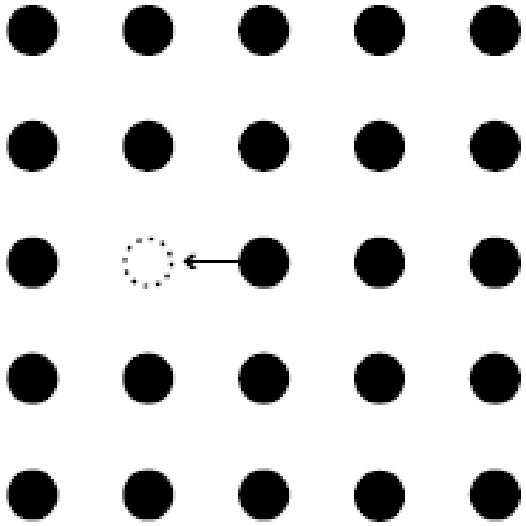


شکل ۴-۱۲. سازوکار نفوذ تبادلی.



شکل ۴-۱۳. سازوکار نفوذ حلقوی.

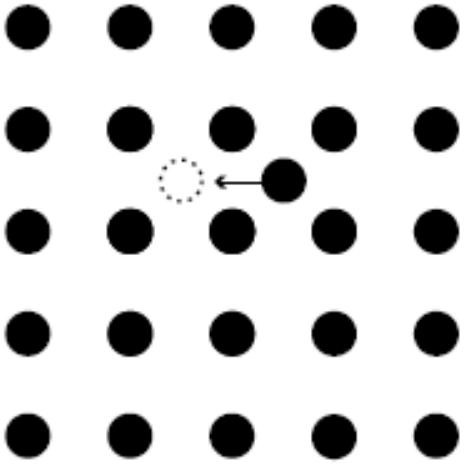
سازوکار جای خالی: این ساده‌ترین سازوکار نفوذ است و در فلزات و آلیاژها رخ می‌دهد (شکل ۴-۱۴). نفوذ به وسیله‌ی پرش اتم از موقعیتش در شبکه به موقعیت جای خالی رخ می‌دهد. برای این‌که یک اتم از طریق این سازوکار حرکت کند حضور یک جای خالی همسایه مورد نیاز است. ازآن‌جایی که حرکت جای خالی برخلاف اتم است، نفوذ نوعی جای خالی و هم‌چنین به منزله‌ی حرکت اتمی یا حرکت معادل جای خالی در نظر گرفته می‌شود. به هرجهت، هم‌چنان که دیده خواهد شد، ضریب نفوذ برای جای خالی برابر با ضریب نفوذ اتم نیست.



شکل۴-۱۴. سازوکار نفوذ جای خالی.

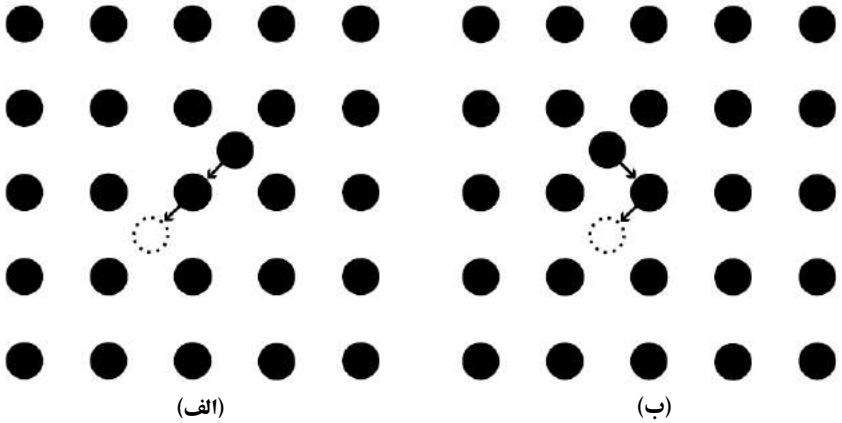
سازوکار بین‌نشینی[1]**:** این سازوکار حرکت یک اتم از یک موقعیت بین‌نشین به موقعیت دیگر را در بر می‌گیرد (شکل ۴-۱۵). این سازوکار، انرژی قابل توجهی را به منظور هل دادن اتم از میان اتم‌های مانع جدا کننده موقعیت‌های بین‌نشین نیاز دارد (نقش اتم‌های مانع در محاسبات انرژی جابه‌جایی در فصل ۲ را یادآوری می‌کند). در واقع، این سازوکار فقط هنگامی رخ می‌دهد که گونه‌ی نفوذی از یک نوع اتمی باشد که از اتم‌های شبکه‌ی میزبان کوچک‌تر است.

1. Interstitial mechanism



شکل ۴-۱۵. سازوکار نفوذ بین‌نشینی.

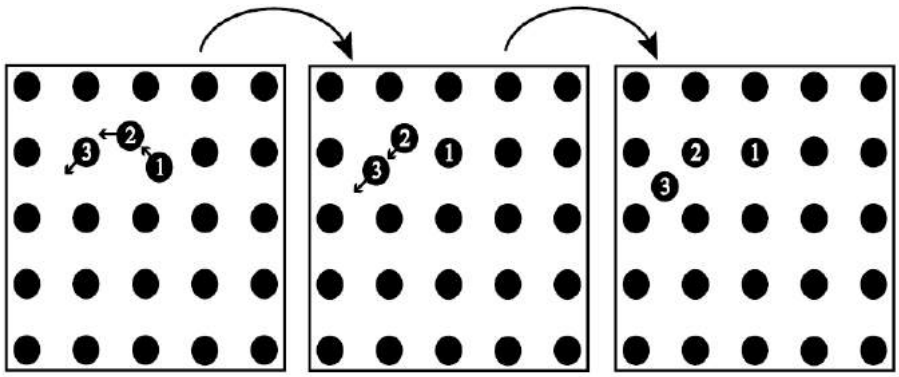
سازوکار بینابینی[1]**:** این سازوکار جابه‌جایی اتم‌های نزدیک شبکه به یک موقعیت بین‌نشینی را شامل می‌شود و اساساً هنگامی رخ می‌دهد که قطرهای اتمی مشابه هستند. دو نوع متفاوت از این سازوکار وجود دارد: نوع خطی که در آن اتم‌های جابه‌جا شده در طول خط مستقیم حرکت می‌کنند (شکل ۴-۱۶ الف) و نوع غیرخطی که در آن اتم جابه‌جا شده در زاویه‌ای از جهت حرکت اتم جابه‌جا شده به سمت موقعیت بین‌نشین حرکت می‌کند (۴-۱۶ب).



شکل ۴-۱۶. سازوکارهای بینابینی نفوذ، (الف) نوع خطی، (ب) نوع غیرخطی.

1. Interstitialcy mechanism

سازوکار بین‌نشینی دمبلی[1]: این فرایند جابه‌جایی متقارن بین‌نشین و اتم شبکه در اطراف موقعیت تکی شبکه را دربر می‌گیرد به گونه‌ای که آن‌ها موقعیت شبکه را به اشتراک می‌گذارند. شکل ۴-۱۷ شمای دو بعدی از به اشتراک گذاشتن یک موقعیت تکی شبکه میان دو اتم را نشان می‌دهد. یادآوری می‌شود که با توجه به بحث‌های بخش ۴-۱، دمبل آرایش بسیار پایدار برای بین‌نشین‌ها است و این‌که جهت‌های ترجیهی برای دمبل‌ها وجود دارد که وابسته به شبکه است و انرژی را حداقل می‌کند.



شکل ۴-۱۷. سازوکار بین‌نشینی دمبلی نفوذ.

سازوکار کراودیون[2]: این سازوکار هنگامی رخ می‌دهد که اتم به صفحه‌ی شبکه اضافه می‌شود ولی در موقعیت بین‌نشین قرار نمی‌گیرد. برای تطبیق اتم، اتم‌های شبکه در حدود ۱۰ ثابت شبکه از موقعیت‌های خودشان در شبکه جابه‌جا می‌شوند. این آرایش می‌تواند به منزله‌ی دمبل گسترده شده در طول ردیف ده‌اتمی از دمبل‌های دواتمی، در نظر گرفته شود (شکل ۴-۱۸). اکنون می‌توان کراودیون را در بحث برخوردهای کانونی شده در نظر گرفت. با بررسی دوباره‌ی شکل ۳-۴، کراودیونی که ناشی از خوشه‌ی جابه‌جایی است، دیده خواهد شد. این آرایش فضایی آرایش پایداری نیست و فقط به صورت موقت هم‌چنان وجود دارد که انرژی برای اتم‌های ضربه‌خورده مصرف می‌شود.

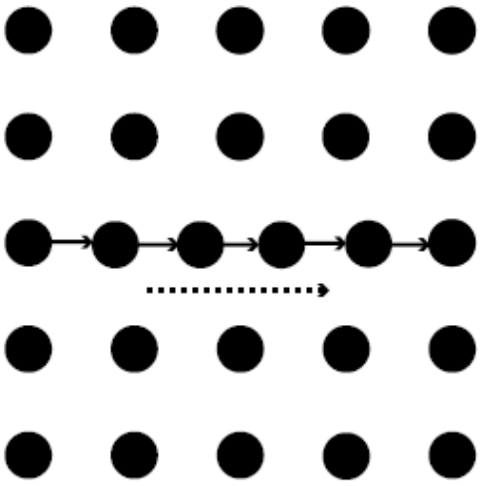
---

1. Dumbbell interstitial mechanism

۲. Crowdion؛ ردیف اتم‌هایی با طول کم در شبکه‌ی محتوی اتم اضافی (یعنی $X+1$ اتم در فواصل X) است. در بعضی شرایط، شقی از وجود یک اتم بین شبکه‌ای است.

علی‌رغم سازوکارهای متعدد برای نفوذ اتم‌ها در جامد نفوذ معمولاً به وسیله‌ی سازوکارهای جای خالی یا بین‌نشینی رخ می‌دهد. نهایتاً هدف این است که روابط ریاضی میان پارامترهای ماکروسکوپی برای نفوذ (به عبارت دیگر ضریب خودنفوذی) و رفتارهای ابتدایی پرش‌های عیوب به وسیله‌ی ضریب‌های نفوذ برای عیوب یا فرایندهای میکروسکوپی استخراج شود. فرض خواهد شد که فرایند خودنفوذی مشتمل بر حرکت کاملاً تصادفی عیوب است، به عبارت دیگر، هیچ‌گونه هم‌بستگی میان پرش‌های موفق عیوب وجود ندارد. اگرچه این برای نفوذ عیب منطقی است، لیکن اکیداً برای نفوذ اتمی درست نیست.

همان‌طوری که قبلاً اشاره شد، پرش‌های عیوب و از آن‌رو اتم‌ها، ناشی از نوسان‌های حرارتی با بسامدهای بسیار بالا است. بسامد دبای[1] در حدود $10^{13}\ S^{-1}$ است. بسامد پرش‌های اتمی در دمای $700\ ^oC$ در حدود چند برابر کوچک‌تر از $10^{8}\ S^{-1}$ ~است. که به معنی این است که از هر 10^{5} نوسان، یک نوسان حرارتی برای غلبه‌ی اتم بر سد انرژی جدا کننده‌ی آن از موقعیت پایدار بعدی، به اندازه‌ی کافی بزرگ است. در ادامه توضیحات دقیق‌تری برای فرایندهای پرشی ارایه خواهد شد.



شکل ۴-۱۸. سازوکار کراودیون نفوذ.

1. Debye frequency

۴-۳-۳ توضیح میکروسکوپی نفوذ

فرض کنید در زمان صفر، یک اتم ناخالصی تنها در موقعیتی در یک بلور قرار داشته باشد که در شکل منبع انتخاب شده است. عملکرد اتم برای پرش از یک موقعیت به موقعیت دیگر کاملاً به یک شیوه تصادفی است. هر پرش فاصله‌ای از λ است لیکن از آن‌جایی که واسط به صورت همسان‌گرد فرض شده است، هر پرش به صورت آزاد و مستقل از پرش قبلی در نظر گرفته می‌شود. بعد از زمان t، جابه‌جایی، r، ذره از مبدأ اندازه‌گیری می‌شود. اگر آزمایشات چندین بار تکرار شود، به علت ماهیت تصادفی فرایند، r شبیه نخواهد بود. نسبتاً، جابه‌جایی‌ها مطابق با یک تابع $P_t(r)$ توزیع می‌شوند $P_t d^3$ که احتمال یافتن اتم در عنصر حجمی d^3r با فاصله‌ی r از مبدأ بعد از زمان t است. کمیتی که به خوبی اندازه‌ی مهاجرت را تشریح می‌کند، متوسط مربع جابه‌جایی، $\overline{r^2}$، است که به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$\overline{r^2} = \int_{\text{all space}} r^2 P_t(r) d^3 r = 4\pi \int_0^\infty r^4 P_t(r) dr \,. \qquad (۲۸-۴)$$

در ابتدا $\overline{r^2}$ بدون اطلاع از $P_t(r)$ محاسبه خواهد شد.

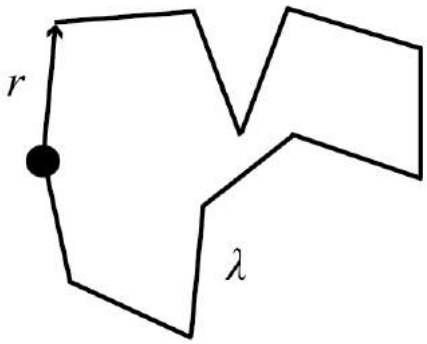
اگر اتم، Γ پرش در واحد زمان انجام دهد، بازه‌ی زمانی t مطابق با تعداد n پرش به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$n = \Gamma t \,. \qquad (۲۹-۴)$$

هر پرش با یک بردار $\underline{\lambda_i}$ نشان داده می‌شود که اندیس i، اشاره به تعداد پرش دارد. بردارها، همگی دارای طول مشابه، λ_i، هستند لیکن جهت‌های تصادفی دارند. موقعیت اتم نفوذی بعد از n پرش (شکل ۴-۱۹)، جمع‌برداری $\underline{\lambda_i}$ ها است یا:

$$\underline{r} = \underline{\lambda}_1 + \underline{\lambda}_2 + .\underline{\lambda}_3 \ldots + \underline{\lambda}_n \,. \qquad (۳۰-۴)$$

بزرگی مربع جابه‌جایی با در نظر گرفتن ضرب نرده‌ای[1] r در خودش محاسبه می‌شود:



شکل۴-۱۹. پرش تصادفی عیب در جامد همسان‌گرد.

(۳۱-۴)

$$r^2 = \underline{r} \cdot \underline{r} = (\underline{\lambda}_1 + \underline{\lambda}_2 + .\underline{\lambda}_3 \ldots + \underline{\lambda}_n) \cdot (\underline{\lambda}_1 + \underline{\lambda}_2 + .\underline{\lambda}_3 \ldots + \underline{\lambda}_n) .$$

ضرب نرده‌ای دو حاصل‌جمع، برابر با مربع حاصل‌جمع‌ها است و در نتیجه:

(۳۲-۴)

$$r^2 = \sum_{i=1}^{n} \underline{\lambda}_i \cdot \underline{\lambda}_i + 2 \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j \neq i}^{n} \underline{\lambda}_i \cdot \underline{\lambda}_j .$$

عبارت اول برابر با $n\lambda^2$ است و عبارت دوم می‌تواند به صورت زیر بازنویسی شود:

(۳۳-۴)

$$\underline{\lambda}_i \cdot \underline{\lambda}_j = \lambda^2 \cos\theta_{ij} ,$$

و

(۳۴-۴)

$$r^2 = n\lambda^2 + 2\lambda^2 \sum_{i-1}^{n-1} \sum_{j \neq i}^{n} \cos\theta_{ij} ,$$

1. Scalar product

یا

(۳۵-۴)

$$r^2 = n\lambda^2 \left(1 + \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j\neq i}^{n}\cos\theta_{ij}\right) .$$

متوسط مربع جابه‌جایی به وسیله‌ی میانگین‌گیری r^2 در تعداد زیادی از آزمایشات به‌دست می‌آید. عبارت $\cos\theta_{ij}$ می‌تواند در محدوده‌ی ۱- تا ۱ تغییر کند و با توجه به ماهیت تصادفی فرایندها، مقدار میانگین $\cos\theta_{ij}$ برای هر ترکیب ij صفر است. از آن‌رو، عبارت آخر از بین رفته و می‌توان نوشت:

(۳۶-۴)

$$\overline{r^2} = n\lambda^2 ,$$

یا

(۳۷-۴)

$$\overline{r^2} = \lambda^2 \Gamma t .$$

معادله‌ی ۴-۳۷ میانگین مجذورات جابه‌جایی برای ویژگی‌های میکروسکوپی فاصله‌ی پرش و بسامد پرش را گزارش می‌کند. اکنون این انتظار وجود دارد که $\overline{r^2}$ از نقطه نظر ماکروسکوپی قابل محاسبه باشد.

در $t = 0$، N اتم ناخالصی به ناحیه‌ی محدود از بلور میزبان وارد می‌شوند. به عنوان نتیجه‌ای از نفوذ (به فرض تصادفی بودن)، N اتم از منبع و به روش توضیح داده شده به وسیله‌ی $C(r,t)$ که به وسیله‌ی حل کردن قانون دوم فیک حاصل می‌شود (با فرض این‌که D تابعی از غلظت نباشد)، منتشر می‌شوند:

(۳۸-۴)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial C}{\partial r}\right) ,$$

با شرایط اولیه‌ی $C(r,0)= 0$ برای $r \neq 0$. از آن‌جایی که N اتم باقی‌مانده در بلور، $C(r,t)$ در معرض فشار قرار دارند:

(۳۹-۴)

$$\int_0^\infty 4\pi r^2 C(r,t)\,\mathrm{d}r = N\ ,$$

با این شرط مرزی که غلظت در بی‌نهایت به صفر کاهش می‌یابد، $C(\infty,t) = 0$ است. با حل معادله‌ی ۳-۴۸ برای شرایط ابتدایی و مرزی معادله‌ی ۴-۴۰ نتیجه می‌شود که:

(۴۰-۴)

$$C(r,t) = N\frac{\exp\left(-r^2/4Dt\right)}{(4\pi Dt)^{3/2}}\ .$$

احتمال یافتن اتم تکی در پوسته‌ی کروی مابین r و $r + dr$ بعد از زمان t، برابر با کسری از N اتم قرار گرفته در عنصر حجمی مشابه بعد از زمان t است. $P_r(r)$ و $C(r,t)$ به صورت زیر با یک‌دیگر مرتبط می‌باشند:

(۴۱-۴)

$$P_t(r) = \frac{C(r,t)}{N} = \frac{\exp\left(-r^2/4Dt\right)}{(4\pi Dt)^{3/2}}\ .$$

متوسط مربع جابه‌جایی برابر است با:

(۴۲-۴)

$$\begin{aligned}\overline{r^2} &= 4\pi\int_0^\infty r^4 P_t(r)\,\mathrm{d}r \\ &= \frac{4\pi}{(4\pi Dt)^{3/2}}\int_0^\infty r^4\exp\left(-r^2/4Dt\right)\ ,\end{aligned}$$

یا

$$\overline{r^2} = 6Dt \ . \qquad (۴۳-۴)$$

با مقایسه‌ی $\overline{r^2} = \lambda^2 \Gamma t$ که از حل میکروسکوپی معادله‌ی ۴-۳۷ به‌دست آمد، می‌توان نوشت:

$$D = 1/6\lambda^2 \Gamma \ , \qquad (۴۴-۴)$$

که فرمول انیشتینی است و ارتباط میان پارامترهای میکروسکوپی نفوذ λ و Γ و پارامتر ماکروسکوپی نفوذ، D را نشان می‌دهد.

۴-۳-۴ بسامد پرش، Γ

Γ در جایگاه تعداد کلی پرش‌ها در ثانیه برای یک اتم تعریف می‌شود. بنابراین، در افزایش زمان δt، تعداد $\Gamma \delta t$ پرش انتظار می‌رود. کمیت $\Gamma \delta t$ متناسب با z، تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها (موقعیت‌ها)، p_v، احتمال این‌که یک موقعیت همسایه نزدیک خالی باشد، و ω، بسامدی که یک اتم به یک موقعیت ویژه پرش می‌کند، است. در نتیجه، بسامدی که اتم با آن به هر موقعیت تعادلی همسایه پرش می‌کند، Γ، حاصل‌ضرب بسامد پرش به یک موقعیت تکی، ω، تعداد نزدیک‌ترین موقعیت‌های همسایه، z ، و احتمال خالی بودن یک موقعیت، p_vاست، یا:

$$\Gamma = z p_v \omega \ , \qquad (۴۵-۴)$$

و

$$D_a^v = 1/6 z \lambda^2 p_v \omega \ . \qquad (۴۶-۴)$$

که زیرنویس و بالانویس a و v مشخص می‌کند که این ضریب نفوذ برای اتم نفوذ کننده از طریق جای خالی است. هم‌چنین لازم به ذکر است که فاصله‌ی پرش λ از طریق رابطه‌ی $\lambda = Aa$ با ثابت

شبکه در ارتباط است که ضریب A وابسته به سازوکار نفوذ و ساختار بلوری است. عبارت $1/6zA^2$ اغلب به صورت پارامتر تکی α نوشته می‌شود، به گونه‌ای که:

(۴۷-۴)

$$D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}} = \alpha a^2 p_{\mathrm{v}} \omega \ ,$$

و اگر حرکت جای خالی تصادفی باشد، در نتیجه $p_{\mathrm{v}} = N_{\mathrm{v}}$ و:

(۴۸-۴)

$$D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}} = \alpha a^2 N_{\mathrm{v}} \omega \ .$$

در ادامه مثالی آورده شده است که مشخص می‌کند که چگونه α برای فرایند نفوذی و ساختار بلوری مشخص تعیین می‌شود.

مثال ۴-۲. نفوذ *جای خالی در شبکه‌های* bcc و fcc

در مورد سازوکار نفوذ جای خالی در ساختار bcc هر اتم هشت موقعیت همسایه نزدیک دارد (z=۸). فاصله‌ی پرش به وسیله‌ی $A = \frac{1}{\sqrt{2}}$ با a در ارتباط است و از آن‌رو α=۱ است. برای سازوکار نفوذی بین‌نشینی ساده در شبکه‌ی bcc، z= ۴ و $A = \frac{1}{2}$ که در نتیجه $\alpha = \frac{1}{6}$ است. برای شبکه‌ی fcc، z=۱۲ و $A = \frac{1}{\sqrt{2}}$ که در نتیجه α=۱ است. برای بین‌نشین‌ها در شبکه‌ی fcc، z=۱۲ و $A = \frac{1}{2}$ بنابراین $\alpha = \frac{1}{2}$ است.

قبل از ادامه بحث، بسیار مفید است که به تفاوت میان نفوذ جای خالی و نفوذ اتم از طریق یک سازوکار جای خای (خودنفوذی جای خالی) اشاره شود. در تعیین اجزای Γ اشاره شد که Γ به احتمالی، p_{v}، که یک موقعیت همسایه خالی شبکه باشد، وابسته است. این یک شرط لازم برای پرش یک اتم از طریق یک جای خالی است. به هر جهت، اگر مهاجرت جای خالی دنبال شود، Γ وابسته به

احتمالی است که یک موقعیت همسایه شبکه یک جای خالی، به وسیله‌ی یک اتم پر شده باشد. از آن‌رو در اکثر موارد این احتمال تقریباً برابر با یک است و معادله برای نفوذ جای خالی به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

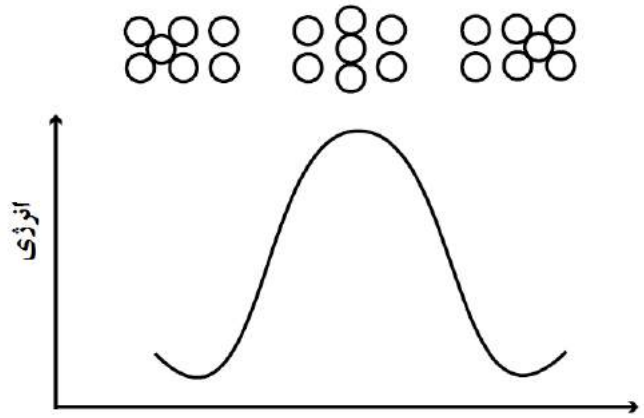
(۴۹-۴)

$$D_{\mathrm{v}} = \alpha a^2 \omega \,,$$

و از خودنفوذی جای خالی با یک ضریب N_{v} متفاوت است.

۴-۳-۵ بسامد پرش، ω

در محاسبه‌ی ω حرکت‌های جزبه‌جز اتمی نادیده گرفته می‌شود و به جای آن کمپلکس‌های فعال شده[1] یا نواحی که نیمه راه اتمی دارند مابین دو موقعیت تعادلی بررسی می‌شود (شکل ۴-۲۰). سپس تعداد اتم‌های نفوذ کننده در ثانیه به وسیله‌ی ضرب کردن تعداد کمپلکس‌های فعال شده (N_{m}) در میانگین سرعت اتم‌های متحرک ($\overline{\nu}$) از طریق این سد تقسیم بر پهنای این مانع (δ) به‌دست می‌آید. در نتیجه بسامد پرش برابر است با:



شکل ۴-۲۰. عبور کمپلکس فعال از موقعیت پایدار از طریق نقطه‌ی زینی‌شکل (سد انرژی) به موقعیت پایدار دیگر.

1. Activated complexes

$$\omega = \frac{N_{\mathrm{m}}\bar{\nu}}{\delta}\ , \tag{۵۰-۴}$$

که N_{m} کسر مولی کمپلکس‌های فعال شده است. کار انجام شده در حرکت اتم از طریق این مانع برابر با تغییر در انرژی آزاد گیبس برای این منطقه، ΔG_{m} است:

$$\Delta G_{\mathrm{m}} = \Delta H_{\mathrm{m}} - T\Delta S_{\mathrm{m}}\ . \tag{۵۱-۴}$$

با استفاده از ΔG_{m}، کسر مولی تعادلی اتم‌ها در منطقه‌ی زینی‌شکل[1] در شکل ۴-۲۰، N_{m} می‌تواند به طریق مشابهی به‌دست آید که برای N_{v} محاسبه شد. به جای اختلاط جاهای خالی به منظور افزایش انرژی آزاد به وسیله‌ی ΔG_{v} برای هر مول، کمپلکس‌ها برای افزایش انرژی آزاد به اندازه‌ی ΔG_{m} برای هر مول مخلوط می‌شوند. آنتروپی ایده‌آل اختلاط برای جاهای خالی و برای کمپلکس‌ها مشابه است و در نتیجه، در حالت تعادل، n_{m} اتم از N اتم در هر لحظه در مجاورت نقطه‌ی زینی‌شکل قرار دارند و:

$$\frac{n_{\mathrm{m}}}{N} = N_{\mathrm{m}} = \exp\left(\frac{-\Delta H_{\mathrm{m}} + T\Delta S_{\mathrm{m}}}{kT}\right) = \exp\left(\frac{-\Delta G_{\mathrm{m}}}{kT}\right)\ . \tag{۵۲-۴}$$

از معادله‌ی ۴-۵۰، $\omega = \dfrac{\bar{\nu}N_{\mathrm{m}}}{\delta}$ و $\dfrac{\bar{\nu}}{\delta}$ بسامدی است (آن را ν بنامید) که در آن اتم‌ها در نقطه‌ی زینی‌شکل به موقعیت جدید پرش می‌کنند. در نتیجه $N_{\mathrm{m}}\nu$ از N اتم از موقعیتی به موقعیت مشخص در ثانیه پرش می‌کنند، و میانگین بسامد پرش برابر است با:

$$\begin{aligned}\frac{n_{\mathrm{m}}\nu}{N} = \omega &= \nu\exp\left(\frac{-\Delta G_{\mathrm{m}}}{kT}\right) = \nu\exp\left(\frac{\Delta S_{\mathrm{m}}}{k}\right)\exp\left(\frac{-\Delta H_{\mathrm{m}}}{kT}\right)\\ &= \nu\exp\left(\frac{S_{\mathrm{m}}}{k}\right)\exp\left(\frac{-E_{\mathrm{m}}}{kT}\right)\ ,\end{aligned} \tag{۵۳-۴}$$

1. Saddle point

که ν بسامد دبی ($\sim 10^{13}\ s^{-1}$)، $E_m = \Delta H_m$ و $S_m = \Delta S_m$ می‌باشند.

۴-۳-۶ معادلاتی برای D

اکنون به اندازه‌ی کافی اطلاعات وجود دارد که معادلاتی برای ضریب‌های نفوذ برای حرکت عیوب، و حرکت اتم‌ها از طریق عیوب نوشته شود:

۱. ضریب نفوذ جای خالی به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$D_v = \alpha a^2 \omega$$

که

$$\omega = \nu \exp\left(\frac{-\Delta G_m^v}{kT}\right) = \nu \exp\left(\frac{S_m^v}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_m^v}{kT}\right),$$

در نتیجه:

(۵۴-۴)

$$D_v = \alpha a^2 \omega = \alpha a^2 \nu \exp\left(\frac{S_m^v}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_m^v}{kT}\right)$$

۲. ضریب خودنفوذی جای خالی حاصل‌ضرب ضریب نفوذ جای خالی و احتمال خالی بودن موقعیت همسایه نزدیک، N_v، است:

$$D_a^v = \alpha a^2 N_v \omega,$$

که

$$N_V = \exp\left(\frac{-\Delta G_f^v}{kT}\right) = \exp\left(\frac{S_f^v}{k}\right) \exp\left(\frac{E_f^v}{kT}\right),$$

و در نتیجه می‌توان نوشت:

(۵۵-۴)

$$D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}} = \alpha a^2 \nu \exp\left(\frac{S_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}} + S_{\mathrm{v}}^{\mathrm{m}}}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}} - E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{v}}}{kT}\right) .$$

۳. ضریب نفوذ بین‌نشین برابر است با:

$$D_{\mathrm{i}} = \alpha a^2 \omega ,$$

یا

(۵۶-۴)

$$D_{\mathrm{i}} = \alpha a^2 \nu \exp\left(\frac{S_{\mathrm{m}}^{\mathrm{i}}}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{i}}}{kT}\right) .$$

۴. ضریب خودنفوذی بین‌نشین‌ها برابر با ضرب ضریب نفوذ بین‌نشین‌ها در احتمال این‌که موقعیت همسایه بین‌نشین دارد، N_{i} است:

$$D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{i}} = \alpha a^2 N_{\mathrm{i}} \omega ,$$

که

$$N_{\mathrm{i}} = \exp\left(\frac{-\Delta G_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}}{kT}\right) = \exp\left(\frac{S_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}}{kT}\right) ,$$

در نتیجه می‌توان نوشت:

(۵۷-۴)

$$D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{i}} = \alpha a^2 \nu \exp\left(\frac{S_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}} + S_{\mathrm{m}}^{\mathrm{i}}}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}} + -E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{i}}}{kT}\right) .$$

تمام ضرایب نفوذ به صورت جزیی متفاوت هستند ولی در شکل کلی مشابه هستند، زیرا شامل دو ضریب هستند، این دو ضریب عبارتست از: یک ثابت که مستقل از دما است و یک توانی از دما که در

برگیرنده‌ی عبارت انرژی است. تمام معادلات برای D می‌تواند به صورت زیر بازنویسی شود:

(۵۸-۴)

$$D = D_0 \exp(-Q/kT) ,$$

که $D_0 = \alpha a^2 v$ عبارت مستقل از دما و Q انرژی فعال‌سازی است. برای نفوذ جای خالی می‌توان نوشت:

(۵۹-۴)

$$Q_{\mathrm{v}} = E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{v}} ,$$

و برای خودنفوذی جای خالی نیز می‌توان نوشت:

(۶۰-۴)

$$Q_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}} = E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}} + E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{v}} .$$

برای بین‌نشین‌ها:

(۶۱-۴)

$$Q_{\mathrm{i}} = E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{i}} ,$$

و هم‌چنین برای خودنفوذی بین‌نشین‌ها نیز معادله‌ی زیر برقرار است:

(۶۲-۴)

$$Q_{\mathrm{a}}^{\mathrm{i}} = E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}} + E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{i}} .$$

انرژی فعال‌سازی برای نفوذ اتم‌ها در یک بلور، وابسته به انرژی تشکیل عیوب و انرژی مورد نیاز برای مهاجرت آن‌ها در میدان تناوبی شبکه‌ی بلوری است. آزمایشاتی می‌توانند برای تأیید وابستگی دمایی D و هم‌چنین مقادیر Q انجام شوند. عبارات موجود در ضریب پیش نمایی برای سازوکارهای نفوذ مختلف برای شبکه‌های bcc و fcc در جدول ۴-۲ مشخص شده است.

جدول ۴-۲. پارامترهای موجود در عبارت ضریب نفوذ، $D = \alpha a^2 N \omega$، که $\alpha = 1/6zA^2$ برای سازوکارهای مختلف نفوذ در شبکه های fcc و bcc.

مکانیزم نفوذ	z	A	α	N	D
		fcc			
جای خالی	12	$1/\sqrt{2}$	1	1	$a^2\omega$
خودنفوذی جای خالی	12	$1/\sqrt{2}$	1	N_v	$a^2 N_v \omega$
بین‌نشینی	12	1/2	1/2	1	$1/2a^2\omega$
خودنفوذی بین‌نشینی	12	1/2	1/2	N_i	$1/2a^2 N_i \omega$
		bcc			
جای خالی	8	$\sqrt{3}/2$	1	1	$a^2\omega$
خودنفوذی جای خالی	8	$\sqrt{3}/2$	1	N_v	$a^2 N_v \omega$
بین‌نشینی	4	1/2	1/6	1	$a^2\omega$
خودنفوذی بین‌نشینی	4	1/2	1/6	N_i	$1/6a^2 N_i \omega$

مثال ۴-۳. D_a^v و D_a^i *را برای مس* fcc *در* ۵۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد تعیین کنید.

برای مس:

$$E_f^v = 1.27\,\text{eV}, \qquad E_f^i = 2.2\,\text{eV}$$
$$E_m^v = 0.8\,\text{eV}, \qquad E_m^i = 0.12\,\text{eV}$$
$$S_f^v = 2.4k, \qquad S_f^i \sim 0$$

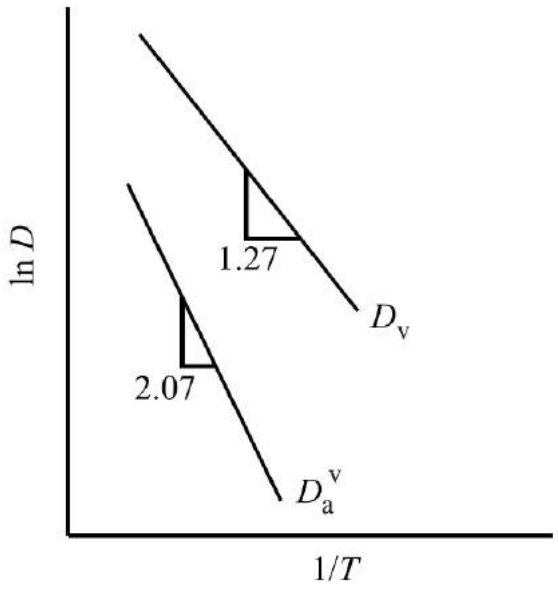
و S_m^v و S_m^i نادیده گرفته می‌شوند.

برای شبکه‌ی fcc، z= ۱۲، $A = \frac{1}{\sqrt{2}}$ و $a \sim$ ۳ nm است و می‌توان نوشت:

$$D_v = \alpha a^2 \nu \exp\left(\frac{-0.8}{kT}\right)$$
$$\cong 5 \times 10^{-6}\,\text{cm}^2/\text{s}$$
$$D_i = \alpha a^2 \nu \exp\left(\frac{-0.12}{kT}\right)$$
$$\cong 7 \times 10^{-2}\,\text{cm}^2/\text{s}$$

$$D_a^v = \alpha a^2 \nu \exp\left(\frac{2.4k}{k}\right)\exp\left(\frac{-1.27-0.8}{kT}\right)$$
$$\cong 3\times10^{-13}\,\mathrm{cm^2/s}$$
$$D_a^i = \alpha a^2 \nu \exp\left(\frac{-2.2-0.12}{kT}\right)$$
$$\cong 3\times10^{-16}\,\mathrm{cm^2/s}$$

لازم به ذکر است که به علت انرژی مهاجرت کوچک برای بین‌نشین‌ها از جاهای خالی، $D_i/D_v \sim ۱۰^{۴}$، لیکن $D_a^i / D_a^v \sim ۱۰^{-۳}$ است؛ زیرا انرژی تشکیل بین‌نشین‌ها در مقایسه با جاهای خالی بسیار بالا است. منحنی‌های ضرایب نفوذ در شکل ۴-۲۱ رسم شده است. لازم به یادآوری است که ضریب نفوذ جای خالی از ضریب خودنفوذی جای خالی بزرگ‌تر است و شیب کوچک‌تری را دارد.



شکل ۴-۲۱. مقایسه‌ی منحنی‌های $\ln D$ بر حسب $1/T$ برای نفوذ جای خالی و خودنفوذی جای خالی.

رفتار اتم‌های خود بین‌نشین در آهن bcc در دمای ۳۲۳ درجه‌ی سانتی‌گراد در فیلم ۴-۳ نمایش داده شده است. در این فیلم، توپ‌های سبز بین‌نشین‌ها هستند و توپ‌های قرمز موقعیت‌های خالی شبکه هستند و جمعاً یک دمبل اتم‌های خود بین‌نشین را تشکیل می‌دهند که در آن دو اتم سبز یک موقعیت تکی شبکه را به اشتراک می‌گذارند. اتم‌های خود بین‌نشین به صورت یک دمبل بین‌نشین دو نیم شده ⟨110⟩ آغاز شده و سپس در یک بین‌نشین ⟨111⟩ دوران کرده و در یک بعد از میان موقعیت زینی‌شکل کراودیون ⟨111⟩ حرکت می‌کند. فیلم ۴-۴ اتم‌های خود بین‌نشین دوتایی مشتمل بر دو دمبل دونیم شده ⟨111⟩ موازی را نشان می‌دهد که در طول جهت ⟨111⟩ مهاجرت کرده و هم‌چنین به آرایش‌های فضایی مختلف نوع ⟨111⟩ دوران می‌کند.

۴-۴ نفوذ هم‌بسته

در ابتدا فرض شد که صرف‌نظر از انواع عیوب موجود در شبکه‌ی بلوری، پرش‌های موفقیت‌آمیز اتم‌ها کاملاً تصادفی یا غیرهم‌بسته است. یعنی بعد از n پرش، تمام جهت‌های ممکن برای $(n+1)$ امین پرش به اندازه‌ای محتمل است. این برای جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها درست است زیرا تمام اجزای ساختاری احاطه کننده‌ی آن‌ها در تمام زمان‌ها مشابه هستند. از آن‌جایی که بسامد نوسانی اتم شبکه از بسامد پرش چندین برابر بزرگ‌تر است، در نواحی پیرامون عیب تعادل سریعاً بین پرش‌های موفقیت‌آمیز برقرار شده و پرش بعدی بدون هیچ اثری از پرش قبلی در جهت خودش رخ می‌دهد. لیکن این وضعیت همیشه برای نفوذ اتم هم‌چنان که در مرجع [۵] و در ادامه توضیح داده خواهد شد، درست نیست.

اگر ردیاب رادیواکتیو برای مسیریابی نفوذ اتم بررسی شود، ردیاب درصورتی که یک موقعیت در نزدیک‌ترین مکان مجاورش خالی باشد، به آن موقعیت پرش می‌کند. اگر احتمال پرش دوم در تمام جهات مشابه باشد، پرش دوم با پرش اول ناهم‌بسته است. به هر جهت، ردیاب از موقعیتی می‌آید که در زمان ورود آن، خالی است. از آن‌رو، هنگامی که ردیاب برای پرش بعدی مهیا می‌شود، شانس اشغال نشدن موقعیتی که ردیاب از آن رسیده، از هر موقعیت دیگر در اطراف اتم بیش‌تر است. دو پرش هم‌بسته هستند، زیرا احتمال برگشتن اتم ردیاب به موقعیت قبلی‌اش نسبت به پرش در هر موقعیت دیگری بیش‌تر است. به عبارت دیگر، ردیاب از جهت‌های دیگر تمایل بیش‌تری به حرکت در جهتی دارد که از آن آمده است یا از معادله‌ی ۴-۳۵، $\overline{\cos\theta_2} < 0$ است.

از آن‌جایی که پرش‌ها در جهتی که از آن آمده‌اند محتمل‌تر هستند، ردیاب مسیر کوتاه‌تری را در داخل شبکه از مسیر طی شده با جای خالی طی می‌کند. بنابراین، ضریب خودنفوذی ردیاب (که اندازه‌ای از نرخ این فرایند است) از اتم‌های سازنده‌ی شبکه کوچک‌تر است؛ زیرا خودنفوذی ردیاب یک حرکت تصادفی هم‌بسته است درحالی‌که حرکت جاهای خالی و در نتیجه اتم‌های سازنده‌ی شبکه هم‌بسته نیستند. اثر هم‌بستگی در سازوکارهای بین‌نشینی ساده حضور ندارد، لیکن هم‌بستگی حرکت در سازوکار بینابینی نیز وجود دارد. در هردو سازوکار جای خالی و بینابینی $D_{\text{tracer}} < D_{\text{lattice}}$ است و در نتیجه:

$$f = \frac{D_{\text{tracer}}}{D_{\text{lattice}}} , \qquad (۶۳-۴)$$

و f در معنای ضریب هاون[1] شناخته می‌شود و یک اندازه‌ای از درجه‌ی تصادفی بودن نفوذ است. یادآوری می‌شود که در بحث‌های ابتدایی فصل، اندازه‌گیری مربع جابه‌جایی به وسیله‌ی حرکت‌های تصادفی به وسیله‌ی معادله‌ی ۴-۳۵ تعیین شد:

$$r^2 = n\lambda^2 \left(1 + \frac{2}{n} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j \neq i}^{n} \cos \theta_{ij} \right) ,$$

که متوسط مربع جابه‌جایی به وسیله‌ی میانگین‌گیری در سراسر مقادیر $\cos \theta_{ij}$ به‌دست می‌آید. در این معادله عبارت داخل پرانتز f است و مقدار f برای حرکت تصادفی ۱ است؛ زیرا میانگین تمام $\cos \theta_{ij}$ برابر با صفر است. لیکن هنگامی که میان پرش‌های موفقیت‌آمیز وجود دارد، f برابر با ۱ نیست. برای سازوکار نفوذ جای خالیِ یک ردیاب در یک شبکه‌ی منظم [۵]:

$$f_{\text{v}} = \frac{1 + \overline{\cos\theta}}{1 - \overline{\cos\theta}} , \qquad (۶۴-۴)$$

1. Haven coefficient

و برای نفوذ بین‌نشینی،

(۶۵-۴)

$$f_{\mathrm{i}} = 1 + \overline{\cos\theta}\ .$$

از آن‌رو در هر دو مورد، $\overline{\cos\theta} < 0$ و در نتیجه $f <$ ۱ است.

یک عملیات ساده‌تر f_{v} برابر با $f_{\mathrm{v}} = \dfrac{1-\mathrm{P}}{1+\mathrm{P}}$ است که P احتمال پرش یک ردیاب به یک جای خالی همسایه است و $P-$ ۱ احتمالی است که یک جای خالی همسایه به عنوان نتیجه‌ای از پرش‌های اتم‌های شبکه، به یک سو حرکت خواهد کرد. با اولین تقریب، P برابر با معکوس تعداد نزدیک‌ترین موقعیت‌های شبکه، z، در اطراف ردیاب است. بنابراین:

(۶۶-۴)

$$f = \frac{1-1/z}{1+1/z} = \frac{z-1}{z+1}\ .$$

برای شبکه‌ی fcc:

$$f = \frac{1-1/12}{1+1/12} = \frac{12-1}{12+1} = 0.85\ .$$

برای شبکه‌ی bcc:

$$f = \frac{1-1/8}{1+1/8} = \frac{8-1}{8+1} = 0.78\ .$$

و برای شبکه‌ی مکعبی ساده:

$$f = \frac{1-1/6}{1+1/6} = \frac{6-1}{6+1} = 0.71\ .$$

در نتیجه، در توضیح میکروسکوپی ضریب نفوذ D، معادله‌ی ۴-۴۴، نفوذ هم‌بسته با وارد کردن ضریب هم‌بستگی محاسبه می‌شود:

(۶۷-۴)

$$D = 1/6 f \lambda^2 \Gamma = f \alpha a^2 \omega \, .$$

در واقع، ضریب هم‌بستگی واقعی، f، در عمل دو بخش را دربر می‌گیرد، f' و f'' به صورتی که $f = f' f''$. کمیت f'' در فصل قبل توضیح داده شد (همانند f) و f' مربوط به تفاوت میان فاصله‌های طی شده در طول فعالیت جزیی یک اتم ردیاب و عیب است:

(۶۸-۴)

$$f' = \frac{\lambda_{\text{tracer}}}{\lambda_{\text{defect}}} \, ,$$

در مورد یک جای خالی، $f' = ۱$ و از آن‌رو $\lambda_{\text{tracer}} = \lambda_{\text{vacancy}}$ است، یا فاصله‌ی طی شده به وسیله‌ی ردیاب و عیب در یک پرش برابر است. چنین چیزی برای سازوکار بین‌نشینی ساده نیز صحیح است. لیکن در مورد سازوکار بینابینی، ردیاب از یک موقعیت بین‌نشین به یک موقعیت شبکه (یا برعکس) حرکت می‌کند. در هردو مورد اتم ردیاب فاصله‌ی λ_{tracer} را طی می‌کند. به هرجهت عبور اتم شبکه از موقعیت بین‌نشین به یک موقعیت شبکه معادل با ظهور یک اتم مشابه جابه‌جا شده از موقعیت شبکه در یک موقعیت بین‌نشین مجاور است. بنابراین، پرش یک اتم شبکه از موقعیت بین‌نشین به یک موقعیت شبکه نیازمند یک جابه‌جایی اتم شبکه به اندازه‌ی λ_{tracer} ۲ یا ۰٫۵ = $f' = \frac{\lambda_{\text{tracer}}}{2\lambda_{\text{tracer}}}$ است. برای موارد غیرخطی، ۲٫۳= $f' = \frac{\lambda_{\text{tracer}}}{1/6\lambda_{\text{tracer}}}$ است. جدول ۴-۳ ضریب هم‌بستگی برای سازوکارهای مختلف نفوذ در شبکه‌های بلوری معمول را به صورت خلاصه نشان داده است.

جدول۴-۳. ضرایب هم‌بستگی برای سازوکارهای نفوذی معمول در شبکه‌های بلوری مختلف[۵].

شبکه‌ی بلوری	سازوکار نفوذ	ضریب هم‌بستگی
مکعبی ساده	جای خالی	۰٫۶۵۳۱۱
	بین‌نشینی	
	خطی	۰٫۸۰۰۰۰
	غیرخطی	۰٫۹۶۹۷۰
مکعبی مرکز وجوح پر (fcc)	جای خالی	۰٫۷۲۷۲۲
	بین‌نشینی	
	خطی	۰٫۶۶۶۶۶
	غیرخطی	۰٫۷۲۷۴۰
مکعبی مرکز پر (bcc)	جای خالی	۰٫۷۲۷۲۲
هگزاگونال فشرده (hcp)	جای خالی	۰٫۷۸۱۲۱

۴-۵ نفوذ در سیستم‌های چند جزیی

بحث‌های انجام شده در مورد نفوذ تاکنون در مورد بلورهای خالص یا تک جزیی بوده است. تاکنون محاسباتی برای ترکیبات چندتایی مانند ناخالصی‌های در یک فلز خالص و آلیاژها انجام نشده است. نفوذ در این سیستم‌ها در آزمایشات انجام شده به وسیله‌ی اسماگلکاس[1] و کرکندال[2] در سال ۱۹۴۷ [۶]بررسی شد و به وسیله‌ی دارکن[3] در سال ۱۹۴۸ مورد آنالیز قرار گرفته است [۷]. نتایج به این صورت بوده است که ضرایب نفوذ برای دو جزء در سیستم دوتایی (A-B) می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

(۶۹-۴)

$$\tilde{D} = D_{\mathrm{A}} N_{\mathrm{A}} + D_{\mathrm{B}} N_{\mathrm{B}} \ ,$$

که $D_{\mathrm{A,B}}$ ضرایب نفوذ ذاتی و توابعی از ترکیب هستند و $\tilde{D}$ ضریب نفوذ داخلی است. از آن‌جایی که ضرایب نفوذ جریی وابسته به ترکیب آلیاژ هستند، $\tilde{D}$ تابع غیرخطی و پیچیده از غلظت است. به

1. Smigelskas
2. Kirkendall
3. Darken

هرجهت، در مورد محلول‌های رقیق ($N_A \rightarrow ۱$، $N_B \rightarrow ۱$)، ضریب نفوذ داخلی تقریباً برابر با ضریب نفوذ جزیی ماده حل شده است.

اهمیت این نتیجه می‌تواند به وسیله‌ی مرور مختصر آزمایش‌های مفهومی و دقیق مورد ارزیابی قرار گیرد. در آزمایش کرکندال، سیم‌هایی از جنس مولیبدن در اطراف بلوک برنجی ($Zn_{۳۰}$ -$Cu_{۷۰}$) پیچیده شد و سپس به وسیله‌ی پوشش ضخیمی از مس آبکاری شد. سیم‌های مولیبدنی در مس غیرمحلول هستند و در نقش نشانگرهای خنثی برای تعیین محل فصل مشترک اصلی عمل می‌کنند. هنگامی که مجموعه در داخل کوره حرارت داده می‌شود، نشانگرهای سیمی در جهت‌های متقابل برنج به سمت یک‌دیگر حرکت می‌کنند که مشخص می‌کند که مواد زیادی برنج را ترک کرده تا این‌که وارد آن شوند، که اشاره می‌کند که ضریب نفوذ روی نسبت به مس بیش‌تر است.

سازوکار جای خالی تنها سازوکاری است که می‌تواند برای حرکت نشانه‌ها مورد محاسبه قرار گیرد. اگر روی به وسیله‌ی سازوکار جای خالی نفوذ کند، سپس شار اتم‌های روی در یک جهت باید برابر با شار جاهای خالی در جهت مخالف باشد و تعداد اتم‌های روی که برنج را ترک می‌کنند به وسیله‌ی تعداد مساوی از جاهای خالی وارد شده به برنج متعادل می‌شوند. لیکن جاهای خالی به وسیله‌ی چاهک‌های داخلی جذب می‌شوند، در نتیجه حجم برنج کاهش می‌یابد و نشانه‌ها به سمت یک‌دیگر حرکت می‌کنند. مفهوم یک شار اتمی که منجر به افزایش یک شار عیوب می‌شود به صورت مفصل در فصل ۶ در جداشدگی القایی تابشی که به وسیله‌ی اثر کرکندال معکوس[1] رخ می‌دهد، توضیح داده خواهد شد.

۶-۴ نفوذ در طول مسیرهایی با ضریب نفوذ بالا

فلزات و آلیاژهای مورد استفاده به عنوان مواد مهندسی ساختمانی، چند بلوری هستند و در نتیجه غیرهمگن، در نتیجه آن‌ها مرزدانه‌ها، نابجایی‌ها، فصل مشترک‌های داخلی ناشی از رسوبات یا فازهای دوم دارند. برای فهم نفوذ در این سیستم‌ها در ابتدا باید اثر این عیوب خطی، صفحه‌ای و ناحیه‌ای روی فرایندهای نفوذ بحث شود. تفاوت اصلی میان چند بلورها و تک بلورها این است که چند بلورها مجموعه‌ای از بلورهای آرایش یافته در جهت‌های تصادفی هستند. در نتیجه این ساختارهای چند

1. Inverse kirkendall effect

بلوری به ندرت ناهمسان‌گردی[1] نفوذ را نشان می‌دهند. تفاوت مهم این است که عیوب خطی و صفحه‌ای مسیرهایی با نفوذپذیری بالا را نشان می‌دهند که نفوذ در طول آن‌ها بسیار سریع‌تر از نفوذ از طریق عیوب نقطه‌ای رخ می‌دهد (نفوذ حجمی).

مرزدانه‌ها مسیرهایی با نفوذپذیری بالا و مهم هستند؛ زیرا در این مسیرها دانسیته‌ی فشردگی اتمی پایین‌تر است. چندین مدل نفوذ مرزدانه‌ای وجود دارد و در تمام آن‌ها فرض می‌شود که مرزدانه پهنای $\delta \sim ۰٫۳ - ۰٫۵\ \text{nm}$ را دارد. یکی از آن مدل‌ها که برپایه‌ی مدل نابجایی مرزدانه‌ها است، شایسته‌ی توجه ویژه است. در این مدل مرزدانه به منزله‌ی تعدادی از نابجایی لبه‌ای در نظر گرفته می‌شود. دانسیته‌ی نابجایی‌ها ($\frac{\#}{\text{واحد طول}}$) با افزایش زاویه‌ی عدم تطابق[2] θ، میان دو دانه در تماس (شکل ۴-۲۲) افزایش می‌یابد. با توجه به شکل، داریم:

(۷۰-۴)

$$d \sin \frac{\theta}{2} = \frac{b}{2} .$$

از آن‌رو، فاصله‌ی میان نابجایی‌های همسایه با افزایش زاویه‌ی عدم انطباق کاهش می‌یابد. مرزدانه‌ی کوچک زاویه‌ای شامل تعداد زیادی نابجایی لبه‌ای، می‌تواند به جای ردیفی از کانال‌های موازی که در آن فشردگی اتم‌ها کاهش یافته در نظر گرفته شود. در این ناحیه، کرنش بالاست و فشردگی اتم‌ها ضعیف است، و ضریب نفوذ در طول خط‌های نابجایی (هسته‌ها) بالا خواهد بود. بر طبق این مدل، نفوذ در طول مرزدانه‌ها باید ناهمسان‌گرد باشد و وابسته به زاویه‌ی θ است. مرزدانه‌ی توصیف شده به منزله‌ی صفحه‌ای با ضخامت یکنواخت δ و ضریب نفوذ D_{gb}، هم‌چنین می‌تواند به صورت آرایه‌ی دو وجهی (مسطح) از لوله‌هایی با شعاع p و فاصله‌ی d در نظر گرفته شود. نفوذ مرزدانه‌ای با توجه به رابطه‌ی زیر با نفوذ در طول هسته‌های نابجایی (که در شکل نفوذ لوله‌ای نیز شناخته می‌شود)، که به وسیله‌ی D_{p} توصیف می‌شوند، مرتبط است:

(۷۱-۴)

$$D_{\text{gb}}\delta = D_{\text{p}}(\pi p^2/d) ,$$

1. Anisotropy
2. Misorientation angle

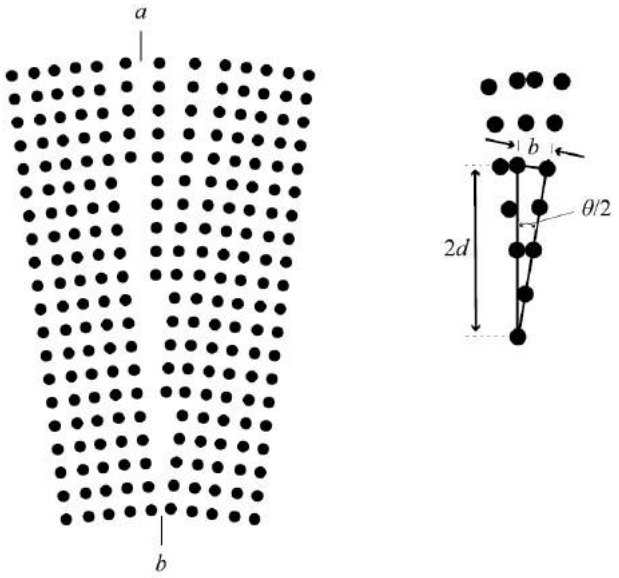
و با جایگذاری d از رابطه‌ی ۴-۷۰ در این معادله، معادله‌ی ۴-۷۲ نتیجه می‌شود:

(۴-۷۲)

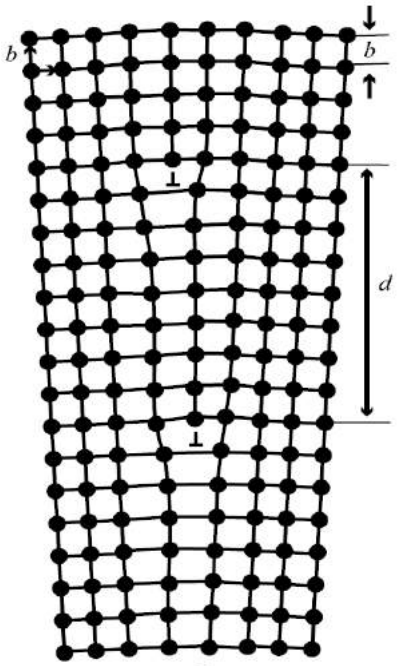
$$= D_p \pi p^2 \left(\frac{2 \sin \theta/2}{b} \right)$$
$$\cong \frac{D_p \pi p^2 \theta}{b} .$$

مدل نابجایی مرزدانه‌ی نشان داده شده در شکل ۴-۲۲ در شکل ۴-۲۳ برای نشان دادن این که نیم‌صفحه‌های اضافی از اتم‌ها می‌توانند به عنوان نابجایی‌های لبه‌ای در نظر گرفته شوند، گسترش یافته است. در حقیقت، نرخ نفوذ در طول مرزدانه با افزایش زاویه‌ی عدم انطباق، θ، و رسیدن به بیشینه‌ی $\theta = 45^o$، افزایش می‌یابد (شکل ۴-۲۴).

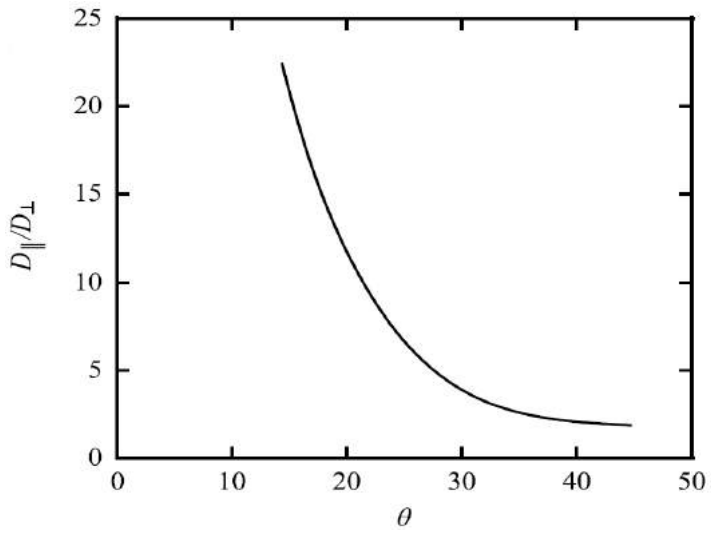
در زاویه‌های بیش‌تر از 45^o، مدل نابجایی مرزدانه‌ها از بین می‌رود؛ زیرا ممکن است که فاصله‌ی میان نابجایی‌ها، d، کوچک‌تر از ثابت شبکه شود.



شکل ۴-۲۲. مدل نابجایی مرزدانه‌ی کوچک زاویه و روابط هندسی میان زاویه‌ی انحراف، θ، بردار برگرز، b، و فاصله‌ی میان نابجایی‌ها، d.



شکل۴-۲۳. نمای توسعه یافته از مدل نابجایی مرزدانه نشان داده شده در شکل ۴-۲۲.



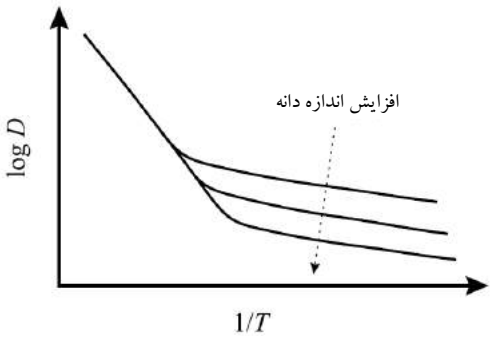
شکل۴-۲۴. اثر زاویه‌ی عدم انطباق مرزدانه برروی نفوذ اتم‌ها در طول مرزدانه‌ها[۵].

این نتیجه هم‌چنین نشان می‌دهد که ارتباطی بین مقدار متوسط ضریب نفوذ، $\bar{D}$ در ماده‌ی چند بلوری و اندازه‌ی دانه‌ی، d، وجود دارد، زیرا هم‌چنان که اندازه‌ی دانه کاهش می‌یابد، مساحت مرزدانه در واحد حجم افزایش می‌یابد. بنابراین، $\bar{D}$ باید با کاهش اندازه‌ی دانه همان‌طوری که در شکل ۴-۲۵ نشان داده شده است، افزایش یابد. می‌توان ضریب نفوذ یک جامد که در آن نفوذ به وسیله‌ی نفوذ حجمی (سازوکار جای خالی) و نفوذ مرزدانه‌ای رخ می‌دهد را به صورت زیر نوشت:

(۷۳-۴)

$$\bar{D} = D_a^{\mathrm{v}} \exp\left(\frac{-Q_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}}}{kT}\right) + D_{\mathrm{gb}} \exp\left(\frac{-Q_{\mathrm{gb}}}{kT}\right) ,$$

که در این رابطه $D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}}$ و $Q_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}}$ اشاره به خودنفوذی جای خالی و D_{gb} و Q_{gb} اشاره به نفوذ مرزدانه‌ای دارند. در اکثر فلزات $Q_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}} \sim ۲Q_{\mathrm{gb}}$ است، در نتیجه در دماهای پایین، نفوذ مرزدانه غالب است و در دماهای بالا نفوذ حجمی غالب است (شکل ۴-۲۵).



شکل ۴-۲۵. اثر اندازه‌ی دانه برروی مشخصه‌ی نفوذ در جامدات پلی بلورین.

نفوذ لوله‌ای در طول هسته‌های نابجایی هم‌چنین می‌تواند نفوذ دما پایین شبکه را تحت تأثیر قرار دهد و ضریب نفوذ کلی به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر می‌تواند تخمین زده شود:

(۷۴-۴)

$$\bar{D} = fD_{\mathrm{p}} + (1-f)D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}},$$

که $\bar{D}$ ضریب نفوذ متوسط، D_{p} ضریب نفوذ برای نابجایی‌ها و $D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}}$ ضریب خودنفوذی هستند و f کسر زمانی است که اتم نفوذ کننده در درون نابجایی سپری می‌کند. هم‌چنان که دانسیته‌ی نابجایی افزایش می‌یابد، f افزایش می‌یابد و از آن‌رو $D_{\mathrm{p}} > D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}}$ و درنتیجه D نیز به همان اندازه افزایش می‌یابد.

این فرمول کلی هم‌چنین می‌تواند به فصل مشترک یا نفوذ سطحی که برروی سطوح داخلی یا خارجی جامدات رخ می‌دهد، نیز اعمال شود. در کل، برای عیوب موجود در شبکه، که به صورت بسیار ضعیفی اتم‌ها را مقید کرده‌اند، انرژی فعال‌سازی کم‌ترین و ضریب نفوذ بیش‌ترین است. در نتیجه نفوذ سطحی، انرژی فعال‌سازی کم‌تری را از دیگر انواع نفوذ دارد؛ زیرا هر اتم سطحی فقط نیمی از نزدیک‌ترین همسایه را از حالتی که در حجم قرار دارد، داراست و در کل:

(۷۵-۴)

$$Q_{\mathrm{surface}} < Q_{\mathrm{gb}} < Q_{\mathrm{p}} < Q_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}}, \quad \text{و در نتیجه} \quad D_{\mathrm{surface}} > D_{\mathrm{gb}} > D_{\mathrm{p}} > D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}}.$$

نام‌گذاری اصطلاحات

a : ثابت شبکه

A : ضریب وابسته به هندسه و سازوکار نفوذ

C : غلظت

$D_{\mathrm{x}}^{\mathrm{y}}$:ضریب نفوذ گونه‌های x از طریق y

D_{gb}: ضریب نفوذ برای نفوذ مرزدانه‌ای

$\tilde{D}$:ضریب نفوذ داخلی

D_{lattice}: ضریب نفوذ اتم شبکه

D_{p}: ضرب نفوذ برای نفوذ لوله‌ای

D_{tracer}: ضریب نفوذ برای اتم ردیاب

E : انرژی

f : نفوذ هم‌بسته (هاون)

F : انرژی آزاد هلمهولتز

G : انرژی آزاد گیبس

H : آنتالپی

J : شار (cm^{-2})

k : ثابت بولتزمان

n : تعداد عیوب

n_{m}: تعداد کمپلکس‌های فعال شده

N : تعداد موقعیت‌ها

p_{v}: احتمال خالی بودن موقعیت شبکه

P : فشار

Q : انرژی فعال‌سازی

R : شعاع

r_{a}: شعاع یک اتم

S : آنتروپی

T : دما

U : انرژی درونی

$\overline{v}$: میانگین سرعت اتم‌های متحرک از میان مانع در کمپلکس فعال شده، معادله‌ی ۴-۵۰

V : حجم

z : تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها

α : $\frac{1}{6zA^2}$

δ : پهنای مانع (نقطه‌ی زینی‌شکل) در کمپلکس فعال، معادله‌ی ۴-۵۰، پهنای مرزدانه

γ : انرژی نقص در چیده شدن

Γ : بسامد پرش

Λ : فاصله‌ی پرش

μ : ضریب برشی

ν : بسامد، نسبت پواسون

ν_E: بسامد طبیعی یک نوسان‌گر

ν_r: بسامد تشویش (اختلال) یک نوسان‌گر

σ : انرژی سطحی

ω : بسامد پرش به یک موقعیت تکی

Ω : حجم یک اتم

زیرنویس‌ها

a : اتمی

E : مؤلفه‌ی خنثی ν

f : تشکیل

gb : مرزدانه

i,v : بین‌نشین‌ها، جاهالی خالی

m : مهاجرت

p : لوله

r : سهم نوسان در v

th : حرارتی

بالانویس‌ها

FP : جفت فرانکل

i,v : بین‌نشین‌ها، جاهای خالی

mix : مخلوط

مخفف‌ها

SIA : اتم خود بین‌نشین تکی

مسایل

۴-۱ بسیاری از فلزات می‌توانند در هر دو ساختار bcc و fcc وجود داشته باشند و مشاهده شده است که گذار از یک ساختار به ساختار دیگر فقط تغییر حجم ناچیزی را باعث می‌شود. با فرض هیچگونه تغییر حجمی، نسبت D_{fcc}/D_{bcc} را که D_{fcc} و D_{bcc} نزدیک‌ترین فواصل بین اتم‌های فلزات در ساختارهای مرتبط هستند، پیدا کنید.

۴-۲ برای شبکه‌ی نیکل، پارامترهای زیر را برای زنجیره‌های اتمی درطول جهت (۱۱۰) محاسبه کنید:

الف) تعداد اتم‌ها در واحد طول زنجیر

ب) تعداد زنجیرها در واحد سطح

ج) حاصل‌ضرب هر دو چه نتیجه‌ای را نشان می‌دهد؟

۴-۳ در گذشته، محققین بعضی از اوقات اتم بین‌نشین را به عنوان محصولی از انتقال یک اتم از یک موقعیت معمول شبکه به یک موقعیت بین‌نشین در نظر می‌گرفتند، در نتیجه یک نسبت یک‌به‌یک مابین غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به‌دست می‌آمد. به هرجهت، تعداد تعادلی جاهای خالی در کل در یک دمای مشخص چند برابر بزرگ‌تر از تعداد بین‌نشین‌ها است. این نظریه را شرح دهید.

۴-۴ بزرگی حجم واهلش، $|V|$ برای بین‌نشین‌ها بیش‌تر از ۱٫۰ و برای جاهای خالی کم‌تر از ۱٫۰ است. این موضوع را شرح دهید.

۴-۵ برحسب بسامد پرش به یک موقعیت مشخص همسایه، ω، و ثابت شبکه، a، ضریب نفوذ برای اتم‌های ناخالصی که مکان تعادلی آن‌ها موقعیت بین‌نشین هشت‌وجهی در **الف)** شبکه‌ی fcc و **ب)** شبکه‌ی bcc است، چیست؟

۴-۶ بلور صلبی به شکل کره‌ای با شعاع R را در نظر بگیرید. حفره‌ی کوچکی با شعاع r (حجم اتمی) در مرکز کره ایجاد می‌شود. موادی که در این حجم بود به صورت یکنواخت در کل سطح کره پخش می‌شود (فرض کنید که بتوان این کار را انجام داد)، و منجر به افزایش شعاع به R' می‌شود.

الف) نشان دهید که برای یک شعاع اتمی ۰٫۱۵ nm و یک انرژی سطحی ذاتی $\sigma \sim 10\ \mathrm{eV/nm^2}$، انرژی تشکیل جای خالی در حدود ۲ eV است.

ب) اگر به جای جامد صلب، بلوری در شکل جسم کشسان پیوسته در نظر گرفته شود، این فرضیه چگونه مقدار E_f^v را که برای بخش (الف) محاسبه شد، تحت تأثیر قرار می‌دهد؟ چرا؟

۴-۷ نفوذپذیری بین‌نشین‌ها و جاهای خالی در یک قطعه‌ی مسی در دمای ^{o}C ۴۸۴ را محاسبه کنید. سهم آنتروپی اختلاط را نادیده بگیرید. ثابت شبکه را معادل با nm ۰٫۳۶۱ در نظر بگیرید. هم‌چنین، ضریب نفوذ برای نفوذ اتم‌ها به وسیله‌ی خودنفوذی جای خالی را محاسبه کنید. چرا این مقدار از نفوذپذیری جاهای خالی بسیار کم‌تر است؟ γ را برابر با ۱ در نظر بگیرید.

۴-۸ در یک تجربه‌ی آزمایشگاهی انجام شده در دمای ۱۰ درجه‌ی سانتی‌گراد زیر نقطه‌ی ذوب مس، ٪۰٫۰۲ موقعیت‌های اتمی خالی بوده‌اند. در دمای ۵۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد، کسر اتم‌های خالی برابر با $۵٫۷ \times ۱۰^{-۸}$ بود.

الف) انرژی تشکیل جای خالی چقدر است؟

ب) چه تعداد جای خالی در cm^{-3} در دمای ۸۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد وجود دارد؟

مراجع

1. Ullmaier H, Schilling W (1980) Radiation damage in metallic reactor materials. In: Physics of Modern Materials, vol. I. IAEA, Vienna.
2. Hackett MJ, Was GS, Simonen EP (2005) J ASTM Int 2(7).
3. Thompson MW (1969) Defects and Radiation Damage in Metals. Cambridge University Press, Cambridge.
4. Shewmon PG (1989) Diffusion in Solids. The Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale, PA.
5. Mrowec S (1980) Defects and Diffusion in Solids, an Introduction. Elsevier, New York.
6. Smigelskas A, Kirkendall E (1947) Trans AIME 171:130.
7. Darken L (1948) Trans AIME 175:184–201.

۵

افزایش نفوذ تابشی و نظریه‌ی سرعتی واکنش عیب

در فصل قبل مفهوم تشکیل عیوب نقطه‌ای، حرکت و نفوذ آن‌ها در جامد و آرایش‌های بعضی از انواع معمول خوشه‌های عیب ایجاد شده در فلزات پرتودهی شده و غیرپرتودهی شده توضیح داده شد. به وضوح، تشکیل، رشد و انحلال عیوب تراکمی مانند حفره‌ها، حلقه‌های نابجایی، و غیره، وابسته به نفوذ عیوب نقطه‌ای و واکنش آن‌ها با توده‌های عیب است. لیکن این فرایندها به غلظت عیوب نقطه‌ای در جامد نیز وابسته هستند. غلظت در هر نقطه و در هر زمان، تعادلی بین نرخ تولید، و نرخ اتلاف عیوب نقطه‌ای است و به اندازه‌ی کافی به وسیله‌ی معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای توضیح داده شد. افزایش در نفوذ یا افزایش در قابلیت تحرک اتم‌ها در یک فلز پرتودهی شده ناشی از دو عامل است: (۱) افزایش غلظت عیوب، و (۲) ایجاد گونه‌های جدید عیب.

یادآوری می‌شود که نفوذ اتم‌های شبکه به وسیله‌ی سازوکار جای خالی با رابطه‌ی زیر تعیین می‌شود:

$$D_{\mathrm{a}}^{\mathrm{v}} = f_{\mathrm{v}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} \ ,$$

که در این رابطه D_v ضریب نفوذ جای خالی، C_v غلظت جای خالی و f_v ضریب هم‌بستگی است. بنابراین، افزایش غلظت جای خالی، ضریب نفوذ اتم‌ها در فلز را افزایش می‌دهد. به هرجهت، اگر دیگر سازوکارهای نفوذ فعال باشند، مانند بین‌نشین‌ها یا جاهای خالی دوتایی، ضریب نفوذ کلی برای اتم‌ها، D_a به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$D_a = f_v D_v C_v + f_i D_i C_i + f_{2v} D_{2v} C_{2v} + \dots$$

و نفوذ اتم‌ها در فلز با باز شدن کانال‌های جدید از طریق گونه‌های عیبی که معمولاً در تعادل حرارتی در غلظت‌های قابل توجهی حضور ندارند، افزایش می‌یابد. تحت پرتودهی، D_a به صورت D_{rad} نیز نوشته می‌شوند.

در این فصل راه‌حل‌های حالت‌های پایدار و ناپایدار معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای در دماها و محدوده‌های ریزساختاری مختلف در چهارچوب افزایش نفوذ تابشی[1]، توسعه داده خواهد شد [۲،۱]. راه‌حل‌های معادلات برای تعیین افزایش نفوذ تابشی مورد استفاده قرار می‌گیرد. سپس تئوری سرعتی واکنش برای گسترش دانش چگونگی واکنش عیوب نقطه‌ای با توده‌های عیوب مختلف نشان داده می‌شود. افزایش نفوذ تابشی و تئوری سرعتی واکنش عیب برای فهم و ارزیابی ریزساختارهای پرتودیده در فصل‌های ۶ تا ۱۰ لازم و ضروری هستند.

۵-۱ معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای

گسترش جای خالی القایی تابشی و غلظت بین‌نشین‌ها به علت فرایندهای رقابتی رخ می‌دهد. عیوب فرانکل از برخوردهای بین ذرات پرانرژی و اتم‌های شبکه ایجاد می‌شوند. این عیوب هم‌چنین می‌توانند با بازترکیب[2] جاهای خالی و بین‌نشین‌ها یا با واکنش با چاهک عیب[3] (حفره، نابجایی، حلقه نابجایی، مرزدانه یا رسوبات) از بین بروند. تغییر موضعی در غلظت عیب گونه‌های مختلف عیوب، می‌تواند به منزله‌ی نتیجه‌ی نهایی از (۱) نرخ تولید موضعی، (۲) واکنش با دیگر گونه‌ها و (۳) نفوذ به

1. Radiation-enhanced diffusion
2. Recombination
3. Defect Sink

داخل یا خارج حجم موضعی یا انحراف از جریان نوشته شود. واکنش‌های اصلی که در این فصل برروی آن‌ها تمرکز خواهد شد بازترکیبی جای خالی- بین‌نشین ($v + i \longrightarrow \square$ که □ یک موقعیت شبکه را نشان می‌دهد) و واکنش‌های عیب نقطه‌ای با چاهک‌ها ($v + s \longrightarrow s$ و $i + s \longrightarrow s$) هستند. این فرایندهای رقابتی می‌تواند به صورت ریاضیاتی به وسیله‌ی معادلات سرعت شیمیایی توضیح داده شود:

(۱-۵)

$$\frac{dC_v}{dt} = K_0 - K_{iv}C_iC_v - K_{vs}C_vC_s$$
$$\frac{dC_i}{dt} = K_0 - K_{iv}C_iC_v - K_{is}C_iC_s \ ,$$

که در این رابطه

C_v = غلظت جای خالی

C_i = غلظت بین‌نشین‌ها

K_0 = سرعت تولید عیب

K_{iv} = ضریب سرعت بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشین

K_{vs} = ضریب سرعت واکنش جای خالی ـ چاهک

K_{is} = ضریب سرعت واکنش بین‌نشین - چاهک

عبارت‌های K_{iv}، K_{vs}، K_{is} ثابت‌های سرعتی از فرم کلی K_{jX}، که سرعت اتلاف عیوب نقطه‌ای، j در واحد غلظت عیب نقطه‌ای به چاهک از نوع X را توصیف می‌کند، هستند. معادلات مشابهی می‌تواند برای توده‌های عیب مانند جاهای خالی دوتایی و سه‌تایی و بین‌نشین‌ها نوشته شود. لازم به ذکر است که معادلات، معادلات دیفرانسیلی غیرخطی هستند و این معادلات به صورت متقابل نسبت به غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها متقارن نیستند؛ زیرا تفاوت در K_{is} و K_{vs} یک راه‌حل تحلیلی دشواری را ایجاد می‌کند. عبارت «شیمیایی» به واکنش‌های همگن که سرعت فقط به غلظت (قانون اثر جرم[1]) و نه به توزیع موضعی $C(r)$ واکنش‌ها وابسته است، اشاره دارد. بنابراین، یکنواختی و به موجب آن جنبش شناسی شیمیایی الزام می‌دارد که $\nabla C \approx 0$ باشد. این مشکل هنگامی که چاهک‌های موضعی یا به

1. Law of mass action

عبارت دیگر نابجایی‌ها، مرزدانه‌ها، حفره‌ها و سطح مشترک رسوبات در نظر گرفته می‌شوند، افزایش می‌یابد. چنین چاهک‌های موضعی، فرضیه‌ی یکنواختی فضایی در فلز میزبان را نقص می‌کند، چون اکنون یک جریان خالص مستقیم از عیوب نقطه‌ای متحرک به سمت نزدیک‌ترین چاهک وجود دارد. در معادلات تعادلی سنتیکی انحراف جریان معادل با عبارت دیگر واکنش، $\nabla.D\nabla C$ است. معادلات سرعتی معتبر موضعی برابرند با:

(۲-۵)

$$\frac{\partial C_{\mathrm{v}}}{\partial t} = K_0 - K_{\mathrm{iv}} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{v}} - K_{\mathrm{vs}} C_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{s}} + \nabla \cdot D_{\mathrm{v}} \nabla C_{\mathrm{v}}$$
$$\frac{\partial C_{\mathrm{i}}}{\partial t} = K_0 - K_{\mathrm{iv}} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{v}} - K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{s}} + \nabla \cdot D_{\mathrm{i}} \nabla C_{\mathrm{i}} \,.$$

راه‌حل این معادلات علاوه بر غلظت موضعی اولیه عیوب متحرک (جاهای خالی و بین‌نشین‌ها)، بیانی از شرایط مرزی را نیز نیاز دارد. به هرجهت، می‌توان فرض کرد که اگر فاصله‌ی جداشدگی متوسط عیب بیش‌تر از فاصله متوسط میان چاهک‌ها باشد، به عبارت دیگر چگالی چاهک‌ها بیش‌تر از چگالی عیب باشد، $\nabla C \approx 0$ است و به این معنی است که چاهک‌ها به صورت یکنواخت توزیع شده‌اند و معادله‌ی ۵-۱ قابل اعمال است.

مدلی که در ادامه توضیح داده می‌شود به عنوان راه‌حلی برای معادله‌ی ۵-۱ در نظر گرفته می‌شود. یک فلز خالص تنها برای تولید جای خالی‌ها و بین‌نشین‌های تکی به تعداد برابر و بدون هم‌بستگی فضایی بین آن‌ها، تحت پرتودهی قرار می‌گیرد. بین‌نشین‌ها و جاهای خالی به وسیله‌ی حرکت‌های نفوذی تصادفی مهاجرت کرده و یک‌دیگر را به وسیله‌ی بازترکیبی متقابل[1] یا در چاهک‌های ثابت غیراشباع خنثی می‌کنند. چاهک‌ها و عیوب به صورت همگن در فلز توزیع شده‌اند. ضریب نفوذ فلز به وسیله‌ی جمع عبارت‌های ناشی از نفوذ به وسیله‌ی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها تعیین می‌شود.

این مدل محدودیت‌های زیر دارد:

۱. این مدل به یک فلز خالص اعمال می‌شود. اتصال عیوب به گونه‌های اتمی و محدودیت حرکت عیب ناشی از اتصال و اثرات هم‌بستگی نادیده گرفته شده است، $f = 1$.

1. Mutual recombination

۲. غلظت چاهک‌ها و شدت‌های آن‌ها وابسته به زمان و غیرقابل اشباع هستند.
۳. به غیر از بازترکیبی متقابل، واکنش‌های عیب ـ عیب (به عبارت دیگر تشکیل جاهای خالی دوتایی و بین‌نشین‌های دوتایی) نادیده گرفته شده‌اند.
۴. فاکتورهای بایاس[1] (گرایش به یکسو) برای نفوذ عیوب به چاهک‌ها به صورت واحد در نظر گرفته شده است (هیچ‌گونه جذب ترجیحی عیوب نقطه‌ای مشخص به چاهک‌های مشخص وجود ندارد).
۵. عبارت‌های نفوذی در و خارج از حجم مشخص در نظر گرفته نشده‌اند.
۶. غلظت جاهای خالی در تعادل حرارتی نادیده گرفته شده است.

ثابت‌های سرعتی به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$K_{\mathrm{iv}} = 4\pi r_{\mathrm{iv}} \left(D_{\mathrm{i}} + D_{\mathrm{v}}\right) \approx 4\pi r_{\mathrm{iv}} D_{\mathrm{i}} \qquad (۳-۵)$$

از آن‌جایی که $D_{\mathrm{v}} << D_{\mathrm{i}}$ است:

$$K_{\mathrm{is}} = 4\pi r_{\mathrm{is}} D_{\mathrm{i}} \qquad (۴-۵)$$

$$K_{\mathrm{vs}} = 4\pi r_{\mathrm{vs}} D_{\mathrm{v}} \ , \qquad (۵-۵)$$

که r_{iv}، r_{vs} و r_{is} شعاع‌های برهم‌کنش برای واکنش میان گونه‌های مشخص شده با اندیس هستند و شعاع سطحی را نشان می‌دهد به گونه‌ای که اگر به وسیله‌ی عیب قطع شود، آن سطح خنثی می‌شود. عبارات D_{i} و D_{v} به ترتیب ضریب‌های نفوذ بین‌نشینی و جای خالی هستند. **عبارت تولید**، K_0، *سرعت* تولید عیب نقطه‌ای مؤثر است، چون به تولید عیوبی که به صورت آزادانه مهاجرت می‌کنند و می‌توانند منجر به افزایش نفوذ بلند دامنه شوند، اشاره دارد (به فصل ۳ مراجعه شود). عبارات استخراج شده در معادله‌های ۵-۳ و ۵-۴ در قسمت ۵-۳ مشخص خواهند شد.

1. Bias factors

لازم به ذکر است که از آن‌جایی که ثابت‌های سرعتی می‌توانند با چندین مرتبه بزرگی متفاوت باشند، این معادلات استیف[1] هستند. یعنی، افزایش زمان مورد نیاز برای دنبال کردن حرکت بین‌نشین‌ها برای نشان دادن هرگونه حرکت جای خالی، در حدود اندازه‌های بسیار کوچکی است. بنابراین، معادلات باید با استفاده از تکنیک‌های عددی برای معادلات استیف حل شوند. لیکن می‌توان با جستجو در راه‌حل‌های تحلیلی در موارد مرزی، یک بینشی را از فرایندها به‌دست آورد. برای مثال غلظت عیوب در ابتدا به صورت خطی با $C_v = C_i = K_0 t$ افزایش می‌یابد. گسترش بیش‌تر در این مورد وابسته به مقادیر دما و غلظت چاهک ، C_s، است. در ادامه راه‌حل‌های تحلیلی معادله‌ی ۵-۱ برای چهار حالت مختلف (ترکیب‌هایی از T و C_s) ارایه خواهد شد. این شرایط مختلف عبارتند از: (۱) T پایین و C_s پایین، (۲) T پایین و C_s متوسط، (۳) T پایین و C_s بالا و (۴) T بالا.

۵-۱-۱ مورد ۱: دمای پایین، چگالی چاهک پایین

راه‌حل‌های تقریبی معادله‌ی ۵-۱ برای دما و چگالی چاهک پایین در شکل ۵-۱ تعیین شده است. در ابتدا، غلظت‌های عیوب مطابق با $\frac{dC}{dt} = K_0$ با $C_i \sim C_v$، افزایش می‌یابد، در نتیجه $C_i = C_v = C = K_0 t$. در ابتدا غلظت‌ها هم برای بازترکیبی و هم برای چاهک‌ها بسیار پایین هستند تا یک اثر افزایشی[2] داشته باشند. هنگامی که نرخ تولید به وسیله‌ی نرخ بازترکیبی موازنه می‌شود، افزایش عیوب نقطه‌ای متوقف شده و برروی یک خط افقی قرار می‌گیرد. در این منطقه زمانی که نرخ تولید به وسیله‌ی نرخ بازترکیبی موازنه شده است، دو عبارت پایانی معادله‌ی ۵-۱ حذف می‌شوند و معادله برای غلظت‌های حالت شبه پایدار حل می‌شود:

$$\frac{dC}{dt} = K_0 - K_{iv} C^2 = 0 \quad (C = C_i = C_v)\,, \tag{۶-۵}$$

---

1. Stiff ؛
این نوع از معادلات عباراتی را دربر می‌گیرند که می‌تواند منجر به تغییر سریع راه‌حل شوند. برای حل این معادلات دیفرانسیلی روش‌های عددی مشخصی مورد نیاز هستند.

2. Buildup

$$C = \left(\frac{K_0}{K_{iv}}\right)^{1/2} . \quad (۷-۵)$$

با معادل‌سازی این غلظت با غلظت در طول فاز افزایشی می‌توان نوشت:

$$K_0 t = \left(\frac{K_0}{K_{iv}}\right)^{1/2} , \quad (۸-۵)$$

که زمانی را که در آن اتلاف‌های ناشی از بازترکیبی، نرخ تولید ناشی از پرتودهی را جبران می‌کنند، نتیجه می‌دهد:

$$t = \tau_1 = (K_0 K_{iv})^{-1/2} , \quad (۹-۵)$$

که در این رابطه τ_1 یک ثابت زمانی یا یک زمان مشخصه برای آغاز بازترکیبی متقابل است.
در نتیجه، بین‌نشین‌ها (در ابتدا) و سپس جاهای خالی (در مرحله‌ی بعد) شروع به یافتن چاهک‌ها کرده و چاهک‌ها شروع به سهیم شدن در خنثی‌سازی می‌کنند. C_i و C_v تا زمان τ_2، که ثابت زمانی برای فرایند فعال‌سازی مجدد بین‌نشین‌ها با چاهک‌ها است، تقریباً به صورت برابر باقی می‌مانند. به علت آنکه $D_i > D_v$ است، بین‌نشین‌های بیش‌تری نسبت به جاهای خالی به وسیله‌ی چاهک‌ها نابود می‌شوند که می‌تواند به صورت زیر توضیح داده شود:

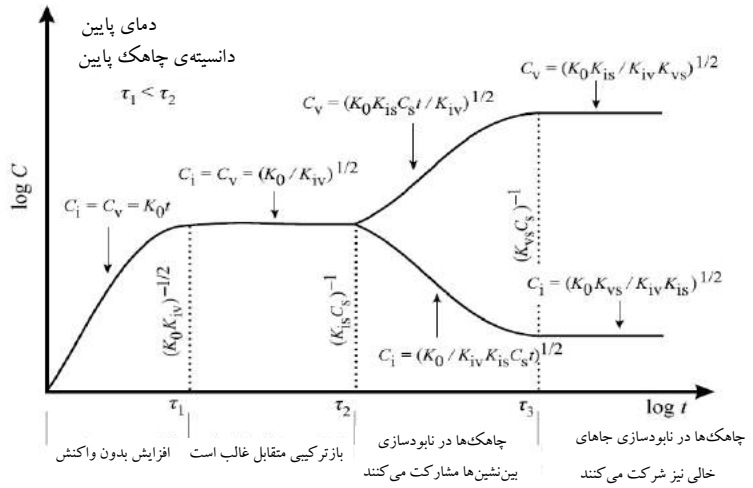
$$\frac{dC_i}{dt} = -K_{is} C_i C_s , \quad (۱۰-۵)$$

در نتیجه غلظت بین‌نشین‌ها کاهش و غلظت جاهای خالی افزایش خواهد یافت و می‌توان نوشت:

$$C_v(t) = \left[\frac{K_0 K_{is} C_s t}{K_{iv}}\right]^{1/2} \quad (۱۱-۵)$$

$$C_i(t) = \left[\frac{K_0}{K_{iv} K_{is} C_s t}\right]^{1/2} .$$

(مشتق‌گیری از معادله‌ی ۵-۱۱ در مسئله‌ی ۵-۱۵ در پایان فصل مطرح شده است.) زمانی که در آن، این برابری رخ می‌دهد به وسیله‌ی تساوی غلظت‌ها در حوزه‌های زمانی مرزی حالت نیمه پایدار و افزایش بین‌نشین کاهش جای خالی به‌دست می‌آید (شکل ۵-۱):



شکل۵-۱. منحنی لگاریتمی ـ لگاریتمی غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برحسب زمان برای مورد (۱) دما و چگالی چاهک پایین[۲].

$$C_v = \left(\frac{K_0}{K_{iv}}\right)^{1/2} = \left[\frac{K_0 K_{is} C_s t}{K_{iv}}\right]^{1/2} \qquad (۱۲-۵)$$

$$C_i = \left(\frac{K_0}{K_{iv}}\right)^{1/2} = \left[\frac{K_0}{K_{iv} K_{is} C_s t}\right]^{1/2},$$

و با حل معادله برای زمان، ثابت زمانی برای آغاز ناحیه‌ی افزایش به‌دست می‌آید:

$$t = \tau_2 = (K_{is} C_s)^{-1}. \qquad (۱۳-۵)$$

بعد از یک دوره‌ی زمانی، در زمان τ_3، حالت پایدار حقیقی به‌دست می‌آید. τ_3 ثابت زمانی برای فرایندهای آرام‌تر است که برابر با برهم‌کنش‌های جاهای خالی با چاهک‌ها است. با حل معادله‌ی ۵-۱

برای غلظت حالت پایدار جاهای خالی و بین‌نشین‌ها و با در نظر گرفتن $\frac{dC_v}{dt} = \frac{dC_i}{dt} = 0$ می‌توان نوشت:

(۱۴-۵)

$$C_v^{ss} = -\frac{K_{is}C_s}{2K_{iv}} + \left[\frac{K_0 K_{is}}{K_{iv}K_{vs}} + \frac{K_{is}^2 C_s^2}{4K_{iv}^2}\right]^{1/2}$$

$$C_i^{ss} = -\frac{K_{vs}C_s}{2K_{iv}} + \left[\frac{K_0 K_{vs}}{K_{iv}K_{is}} + \frac{K_{vs}^2 C_s^2}{4K_{iv}^2}\right]^{1/2} .$$

از آن‌جایی که جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در تعداد برابری تولید شده و در تعداد برابری به وسیله‌ی بازترکیبی از بین می‌روند، در حالت پایدار اتلاف هرکدام در چاهک‌ها باید برابر باشد:

(۱۵-۵)

$$K_{vs}C_v = K_{is}C_i .$$

برای مورد دمای پایین و چگالی چاهک پایین، C_s کوچک است و غلظت‌های جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در معادله‌ی ۵-۱۴ تقریباً به صورت زیر است:

(۱۶-۵)

$$C_v^{ss} \cong \sqrt{\frac{K_0 K_{is}}{K_{iv}K_{vs}}} ; \quad C_i^{ss} \cong \sqrt{\frac{K_0 K_{vs}}{K_{iv}K_{is}}} .$$

با برابر قرار دادن این عبارات با عبارت‌های ناحیه‌ی قبلی (ناحیه‌ی افزایشی) می‌توان نوشت:

(۱۷-۵)

$$C_v = \left[\frac{K_0 K_{is} C_s t}{K_{iv}}\right]^{1/2} = \left[\frac{K_0 K_{is}}{K_{iv}K_{iv}}\right]^{1/2} .$$

و با حل این معادلات برای زمان، ثابت زمانی برای آغاز حالت پایدار به‌دست می‌آید:

$$t = \tau_3 = (K_{vs}C_s)^{-1} \,. \tag{۱۸-۵}$$

افزایش نشان داده شده در شکل ۵-۱ در واقع شماتیک است و افزایش حقیقی نیست. گذار بین این مناطق ناگهانی نیست. برای مثال اگر چگالی چاهک صفر فرض شود، راه‌حل دقیق معادله‌ی ۵-۱ برابر است با:

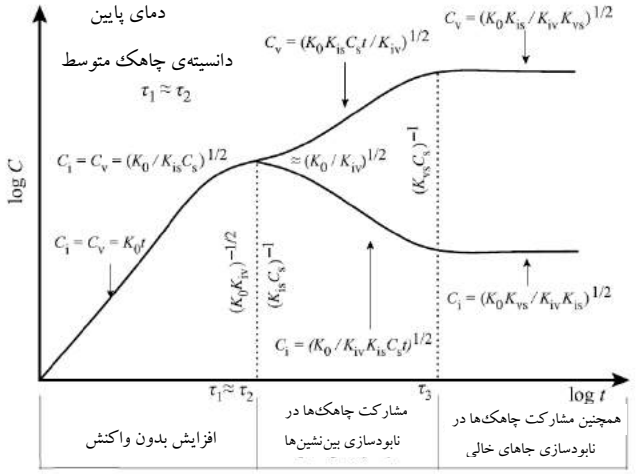
$$C_v(t) = \sqrt{\frac{K_0}{K_{iv}}} \tanh\left(\sqrt{K_{iv}K_0}t\right) \,. \tag{۱۹-۵}$$

۵-۱-۲ مورد ۲: دمای پایین، چگالی چاهک متوسط

افزایش چگالی چاهک بر روی نزدیک کردن τ_2 به τ_1 مؤثر است (شکل ۵-۲). بنابراین، ناحیه‌ی بازترکیبی متقابل به خرج نابودسازی در چاهک‌ها منقبض می‌شود. در حقیقت، هنگامی که:

$$\tau_1 = \tau_2 \text{ or } (K_0K_{iv})^{-1/2} = (K_{is}C_s)^{-1} \,, \tag{۲۰-۵}$$

شرایط پایا ناپدید می‌شود.



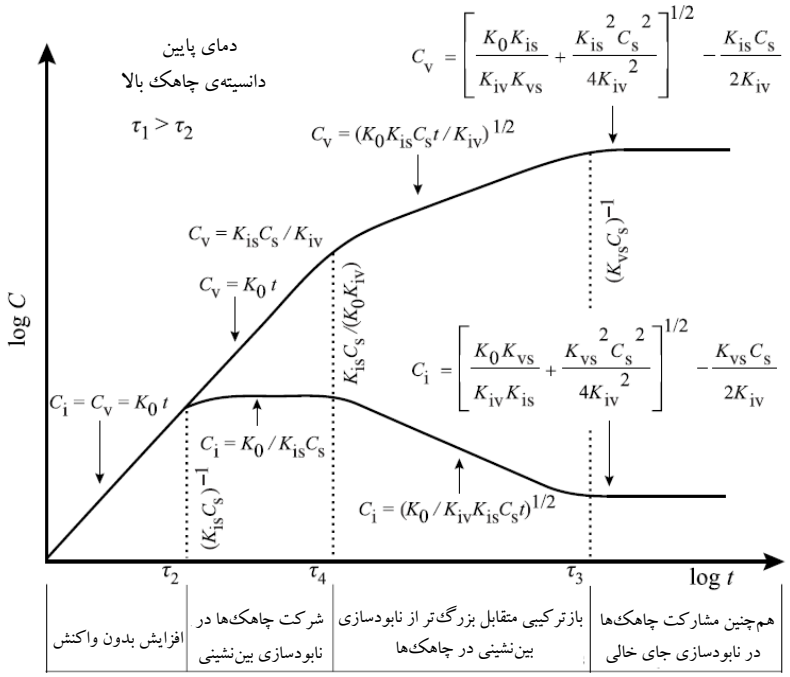
شکل ۵-۲. منحنی لگاریتمی ـ لگاریتمی غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برحسب زمان برای مورد (۲) دما پایین و چگالی چاهک متوسط [۲].

۵-۱-۳ مورد ۳: دمای پایین، چگالی چاهک بالا

اثر اصلی چگالی چاهک بالا به این صورت است که در زمان‌های کوتاه به علت آنکه $C_s >> C_v$ است، بین‌نشین‌ها قبل از آن‌که جاهای خالی را پیدا کنند، چاهک را می‌یابند (شکل ۵-۳). بنابراین، زمان رسیدن به افزایش خطی (اتلاف بین‌نشین‌ها در چاهک‌ها)، τ_2، نسبت به زمان رسیدن به حالت شبه پایدار ناشی از برهم‌کنش جای خالی- بین‌نشین، τ_1، کم‌تر می‌شود. در این مورد، غلظت بین‌نشین‌ها با تولید و نابودسازی در چاهک‌ها به حالت نیمه پایداری می‌رسد:

(۲۱-۵)

$$\frac{dC_i}{dt} = 0 = K_0 - K_{is} C_i C_s \ ,$$



شکل۵-۳. منحنی لگاریتمی ـ لگاریتمی غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برحسب زمان برای مورد (۳) دما پایین و چگالی چاهک بالا[۲].

در نتیجه غلظت در حالت شبه پایدار برابر است با:

$$C_{\mathrm{i}} = \frac{K_0}{K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{s}}} \,. \tag{۲۲-۵}$$

با برابر قرار دادن غلظت بین‌نشین‌ها در ناحیه‌ی افزایش خطی با ناحیه‌ی شبه پایدار می‌توان نوشت:

$$K_0 t = \frac{K_0}{K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{s}}} \,, \tag{۲۳-۵}$$

و با حل برای t، مقدار ثابت زمانی برای τ_2 به‌دست می‌آید:

$$t = \tau_2 = (K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{s}})^{-1} \,. \tag{۲۴-۵}$$

لازم به ذکر است از آن‌جایی که بین‌نشین‌ها قبل از یافتن جاهای خالی آرام‌تر، چاهک‌ها را می‌یابند، غلظت جاهای خالی به صورت پیوسته مطابق با رابطه‌ی $C_{\mathrm{v}} = K_0 t$ افزایش می‌یابد. خیلی زود بین نابودسازی بین‌نشین‌ها در چاهک‌ها و بازترکیبی با جاهای خالی رقابتی به وجود می‌آید:

$$K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{s}} = K_{\mathrm{iv}} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{v}} \cong K_{\mathrm{iv}} C_{\mathrm{i}} K_0 t \,, \tag{۲۵-۵}$$

که ثابت زمانی برای گذار بین مناطقی که بین‌نشین‌ها به چاهک‌ها می‌روند و مناطق غلبه بازترکیبی متقابل را نتیجه می‌دهد:

$$t = \tau_4 = \frac{K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{s}}}{K_{\mathrm{iv}} K_0} \,. \tag{۲۶-۵}$$

در منطقهٔ متعاقب τ_4، مطابق با رابطه‌های زیر، C_{v} به آرامی افزایش می‌یابد و C_{i} به آرامی کاهش می‌یابد:

$$C_{\mathrm{v}} = (K_0 K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{s}} t / K_{\mathrm{iv}})^{1/2} \qquad (۲۷-۵)$$
$$C_{\mathrm{i}} = (K_0 / K_{\mathrm{is}} K_{\mathrm{iv}} C_{\mathrm{s}} t)^{1/2} .$$

حالت پایدار در ثابت زمانی τ_3 به وجود می‌آید:

$$\tau_3 = \frac{1}{K_{\mathrm{vs}} C_{\mathrm{s}}} , \qquad (۲۸-۵)$$

با

$$C_{\mathrm{v}}^{ss} = -\frac{K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{s}}}{2K_{\mathrm{iv}}} + \left[\frac{K_0 K_{\mathrm{is}}}{K_{\mathrm{iv}} K_{\mathrm{vs}}} + \frac{K_{\mathrm{is}}^2 C_{\mathrm{s}}^2}{4K_{\mathrm{iv}}^2}\right]^{1/2} \qquad (۲۹-۵)$$
$$C_{\mathrm{i}}^{ss} = -\frac{K_{\mathrm{vs}} C_{\mathrm{s}}}{2K_{\mathrm{iv}}} + \left[\frac{K_0 K_{\mathrm{vs}}}{K_{\mathrm{iv}} K_{\mathrm{is}}} + \frac{K_{\mathrm{vs}}^2 C_{\mathrm{s}}^2}{4K_{\mathrm{iv}}^2}\right]^{1/2} .$$

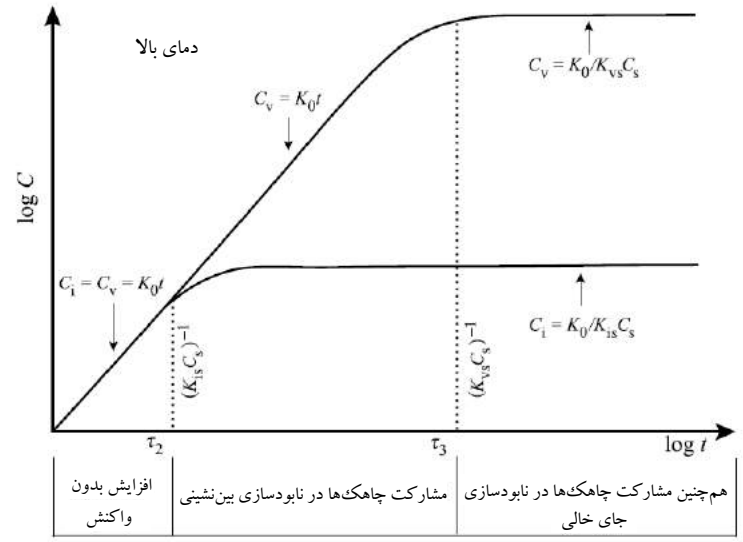
لازم به ذکر است که غلظت‌های حالت پایدار مشابه رابطه‌ی ۵-۱۴ که در ابتدا برای مورد ۱ گزارش شده بود، هستند لیکن بدون ساده کردن و حذف عبارت‌ها در C_{s} زیرا در این مورد، چگالی چاهک بالا است و نمی‌تواند نادیده گرفته شود.

۵-۱-۴ مورد ۴: دمای بالا

در دماهای بالا، نرخ نابودسازی عیب در چاهک‌ها، غلظت بین‌نشین‌ها را پایین نگاه می‌دارد (شکل ۵-۴). از آن‌جایی که در این شرایط بازترکیبی خیلی سهیم نیست، معادلات سرعتی به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۳۰-۵)

$$\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{v}}}{\mathrm{d}t} = K_0 - K_{\mathrm{vs}} C_{\mathrm{s}} C_{\mathrm{v}}$$
$$\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{i}}}{\mathrm{d}t} = K_0 - K_{\mathrm{is}} C_{\mathrm{s}} C_{\mathrm{i}} ,$$



شکل۵-۴. منحنی لگاریتمی ـ لگاریتمی غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برحسب زمان برای مورد (۴) دمای بالا[۲].

با حل برای حالت پایدار می‌توان نوشت:

$$C_v = \frac{K_0}{K_{vs}C_s}\ , \quad C_i = \frac{K_0}{K_{is}C_s}\ , \tag{۳۱-۵}$$

که زمان‌های مشخصه به وسیله‌ی رابطه‌های زیر مشخص می‌شوند:

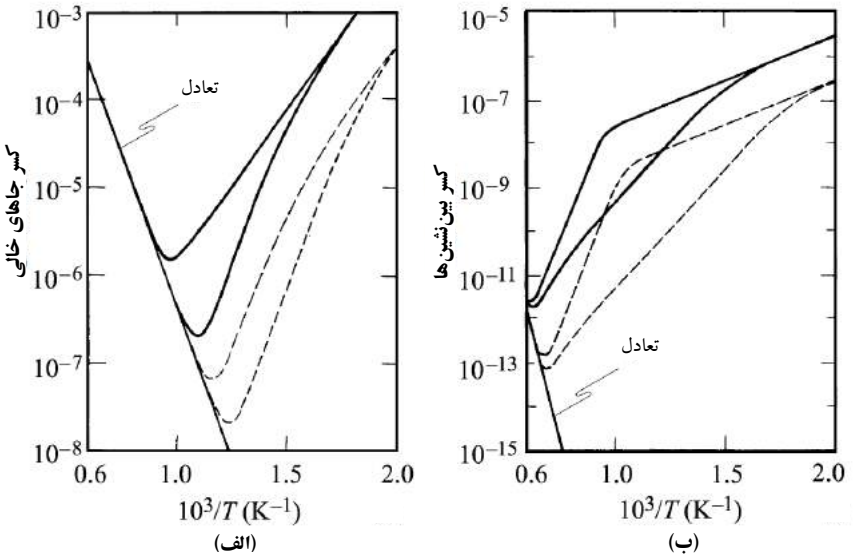
نابودسازی بین‌نشین‌ها در چاهک‌ها

$$K_0 t = \frac{K_0}{K_{is}C_s} \Rightarrow t = \tau_2 = (K_{is}C_s)^{-1} \tag{۳۲-۵}$$

نابودسازی جای خالی در چاهک‌ها

$$K_0 t = \frac{K_0}{K_{vs}C_s} \Rightarrow t = \tau_3 = (K_{vs}C_s)^{-1}\ . \tag{۳۳-۵}$$

ارزیابی زمانی غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها که در شکل ۵-۴ نشان داده شده است، حضور جاهای خالی حرارتی که ممکن است در دماهای بالا قابل توجه باشد، را نادیده گرفته است. افزایش بین‌نشین‌ها و جاهای خالی القایی تابشی در دمای بالا، شامل حضوری ابتدایی از جاهای خالی تعادل حرارتی که در شکل ۵-۵ نشان داده شده است، است. نکته‌ی قابل توجه چگالی چاهک (نابجایی‌ها) و نرخ تولید عیب است.



شکل ۵-۵. غلظت جاهای خالی (الف) و بین‌نشین‌های (ب) حالت پایدار در فلز پرتودهی شده در سرعت تولید عیب بالا (خط ضخیم) و در سرعت تولید عیب پایین (خط نقطه‌چین). منحنی‌های بالایی و پایینی برای هر سرعت تولید عیب، به ترتیب چگالی نابجایی‌های کوچک و بزرگ را نشان می‌دهد [۳].

شکل ۵-۵ الف نشان می‌دهد که افزایش چگالیِ چاهک، غلظت جاهای خالی را کاهش می‌دهد؛ زیرا چاهک‌ها جاهای خالی را جذب می‌کنند(عبارت اتلاف متناسب با K_{vs} است). هم‌چنین برای چگالی چاهک ثابت، سرعت جابه‌جایی بالاتر در غلظت جاهای خالی بالاتر نتیجه می‌شود، زیرا سرعت تولید از سرعت اتلاف در چاهک‌ها بالاتر است. به صورت مشابه و همان‌طوری که در شکل ۵-۵ ب نشان داده شده است، برای بین‌نشین‌ها نیز این مطلب درست است. خمیدگی‌ها[1] در منحنی‌های غلظت

1. Kinks

بین‌نشین‌ها مطابق با دمایی است که در آن جاهای خالی متحرک می‌شوند و در اتلاف بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی بازترکیبی‌های متقابل همان‌طوری که در شکل ۵-۳ نشان داده شده است، سهیم می‌شوند. مقایسه‌ی شکل‌های ۵-۵ الف و ب نشان می‌دهد که غلظت تعادلی بین‌نشین‌ها در سراسر محدوده‌ی دماهای کاری رآکتورها، چشم‌پوشی می‌شود درحالی‌که این مورد برای جاهای خالی قابل چشم‌پوشی نیست.

هدف اصلی از حل معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای به‌دست آوردن مقادیری برای C_i و C_v به منظور تعیین D_{rad} است که مجموع مقادیر C_iD_i و C_vD_v است. بحث قبلی نشان می‌دهد که می‌توان آزمایشات افزایش نفوذ تابشی را بعد از پرتودهی هم دما در شار ثابت برای زمان t برحسب زمان‌های مشخصه تفسیر و تحلیل کرد. جدول ۵-۱، ثابت‌های زمانی برای سازوکارهای مختلف محدود کننده سرعت را به صورت خلاصه نشان می‌دهد. برای چگالی چاهک پایین، بازترکیبی در زمان‌های کوتاه غالب است و به وسیله‌ی نابودسازی بین‌نشینی در چاهک‌ها و سپس نابودسازی جای خالی در چاهک‌ها که فرایند آرام‌تری است و دستیابی به حالت پایدار را کنترل می‌کند، دنبال می‌شود. در چگالی چاهک بالا، در ابتدا نابودسازی بین‌نشین‌ها در چاهک‌ها غالب است، که به وسیله بازترکیبی متقابل و سپس اتلاف جاهای خالی به چاهک‌ها دنبال می‌شود. به عنوان یک قانون، هنگامی که $\tau_1 < \tau_2$ باشد، بازترکیبی متقابل غالب است و هنگامی که $\tau_2 < \tau_1$ باشد، چاهک‌ها غالب هستند. به صورت خلاصه می‌توان گفت که عامل‌های کلیدی تاثیرگذار برروی C_i و C_v، سرعت تولید، قابلیت تحرک عیب و غلظت چاهک‌ها هستند.

جدول ۵-۱. ثابت‌های زمانی برای فرایندهای محدود کننده‌ی سرعت در معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای.

ثابت زمانی	فرایند	مقدار
τ_1	آغاز بازترکیبی متقابل	$(K_0K_{iv})^{-1/2}$
τ_2	آغاز اتلاف بین‌نشینی در چاهک‌ها	$(K_{is}C_s)^{-1}$
τ_3	آغاز اتلاف جای خالی در چاهک‌ها	$(K_{vs}C_s)^{-1}$
τ_4	غلبه بازترکیبی متقابل بر اتلاف بین‌نشینی در چاهک‌ها	$\tau_1^2/\tau_2 = \dfrac{K_{is}C_s}{K_0K_{iv}}$

۵-۱-۵ ویژگی‌های معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای

معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای و راه‌حل آن‌ها ویژگی‌های جالبی دارند که بینش بیش‌تری را از رفتار جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در نفوذ اتم‌های شبکه فراهم می‌کند. این ویژگی‌ها عبارتند از:

۱. غلظت جاهای خالی اشاره شده در آخرین قسمت در واقع $C_v - C_V^0$ است که C_V^0 غلظت تعادل حرارتی جاهای خالی است. در پرتودهی‌های دما بالا ($\frac{T}{T_m} \geq$ ۰٫۵)، این غلظت غیرقابل چشم‌پوشی است. به هرجهت، در سراسر دماهای پرتودهی مورد نظر، $\frac{C_i^0}{C_i} \ll 1$ است.

۲. در غیاب چاهک‌ها و جای خالی‌های حرارتی، C_v می‌تواند با C_i عوض شود، بنابراین در هر لحظه $C_v = C_i$ است:

$$\frac{dC_v}{dt} = K_0 - K_{iv} C_i C_v$$
$$\frac{dC_i}{dt} = K_0 - K_{iv} C_i C_v \ . \qquad (۳۴-۵)$$

از آن‌جایی که $D_{rad} = D_i C_i + D_v C_v$ و $C_i = C_v$ است و با توجه به این که $D_i \gg D_v$، در نتیجه بین‌نشین‌ها از جاهای خالی، خیلی بیش‌تر در تحرک اتم‌ها سهیم هستند.

۳. اگر تنها یک نوع چاهک وجود داشته باشد، در نتیجه در حالت پایدار می‌توان نوشت:

$$K_0 = K_{iv} C_i C_v + K_{vs} C_v C_s$$
$$K_0 = K_{iv} C_i C_v + K_{is} C_i C_s \ , \qquad (۳۵-۵)$$

یا

$$K_{vs} C_v = K_{is} C_i \ , \qquad (۳۶-۵)$$

و سرعت جذب بین‌نشین‌ها و جاهای خالی در چاهک ها برابر است، یا نرخ خالص جذب در چاهک برابر صفر است. حتی برای مورد انواع چاهک‌های چندتایی، اگر چاهک‌ها شدت مشابهی برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها داشته باشند، در نتیجه جریان خالص به هر چاهک برابر صفر است.

۴. ورود عبارت‌های چاهک، به علت مقادیر متفاوت K ($K_{vs} \neq K_{is}$) تقارن را نسبت به C_i و C_v از بین می‌برد. تقارن در حالت پایدار نسبت به D_iC_i و D_vC_v (از آن‌جایی که $K_{is} \propto D_i$ و $K_{vs} \propto D_v$ است) وجود دارد. نتیجه‌ی فیزیکی به این صورت است که جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در مقدار مشابهی در قابلیت تحرک اتم‌ها سهیم می‌شوند و فعالیت آن‌ها نمی‌تواند تمییز داده شود. در حالت پایدار:

$$0 = K_0 - K_{iv}C_iC_v - K'_{vs}D_vC_vC_s$$
$$0 = K_0 - K_{iv}C_iC_v + K'_{is}D_iC_iC_s\ , \qquad (۳۷-۵)$$

که عبارات K به صورت $K = K'D$ نوشته شده است و در نتیجه می‌توان نوشت:

$$D_vC_vK'_{vs}C_s = D_iC_iK'_{is}C_s\ . \qquad (۳۸-۵)$$

در نتیجه اگر $K'_{vs} \sim K'_{is}$ باشد، در نتیجه $D_iC_i = D_vC_v$ است که به این معنی است که بین‌نشین‌ها و جاهای خالی به صورت مساوی در تحرک اتم‌ها سهیم هستند. اگرچه غلظت حالت پایدار بین‌نشین‌ها از غلظت حالت پایدار جاهای خالی بسیار کم‌تر است، لیکن به علت سرعت نفوذ بالاتر بین‌نشین‌ها آن‌ها به صورت مساوی در تحرک اتم‌ها سهیم هستند. برای رشد هر چاهک مشخص، باید گرایش خالص برای جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها وجود داشته داشته باشد. در فلزات واقعی، K_{vs} و K_{is} برابر نیست. چاهک‌های ویژه، گرایشی را برای عیوب نقطه‌ای مشخص دارند که اجازه می‌دهد چاهک رشد کند. این رفتار به صورت مفصل در بخش ۵-۳ توضیح داده می‌شود.

۵-۱-۶ نقایص مدل تعادلی عیب نقطه‌ای ساده

مدل عیب نقطه‌ای ساده چندین جزء اصلی از سیستم‌های واقعی را که برای به‌دست آوردن نتایج دقیق باید مشارکت داده شوند، نادیده می‌گیرد. برای مثال، هیچ‌گونه محاسبه‌ای برای تغییر شدت چاهک‌ها، در زمانی که افزایش دوز به علت تشکیل مناطق تهی شده رخ می‌دهد و خوشه‌های عیب ادامه می‌یابد، در نظر نمی‌گیرند. هم‌چنین در این مدل گرایش چاهک‌ها نادیده گرفته می‌شود. گرایش، یک فاکتور تأثیرگذار روی تکامل و توسعه ریزساختار پرتودهی شده، همان طوری که در فصل‌های ۷ و ۸ توضیح داده خواهد شد، است. برهم‌کنش عیب ـ عیب و برهم‌کنش عیب ـ ناخالصی نیز در این مدل نادیده گرفته شده است. برهم‌کنش عیب ـ عیب در تشکیل حفره و هسته‌های حلقه‌ی بین‌نشینی حایز اهمیت است و اگر خوشه‌های بزرگ‌تر به صورت مناسبی محاسبه شوند، قابل چشم‌پوشی نیست. این خوشه‌های کوچک می‌توانند به عنوان تله‌ها یا چاهک‌هایی برای عیوب متحرک محسوب شوند. در حقیقت، مشخص شده است که خوشه‌های جای خالی، D_{rad} را در محدوده بازترکیبی متقابل افزایش می‌دهند، لیکن برای غلظت‌ها و دماهای بالای چاهک، که بازپخت (آنیلینگ) بر چاهک‌های ثابت تسلط می‌یابد، قابل توجه نیست [۴]. در پایان، معادلات قادر به محاسبه‌ی شیب‌های عیوب (و در شکل ساده‌تر شیب‌های غلظتی) نیستند. این نواقص در فرایندهایی مانند جداشدگی القایی تابشی (فصل ۶) که در آن شارهای عیوب منجر به افزایش شیب‌های غلظتی در عناصر آلیاژی می‌شوند، حایز اهمیت است. چنین فرایندهایی ممکن است به صورت قابل توجهی رفتار و گرایش چاهک‌ها را تغییر دهند.

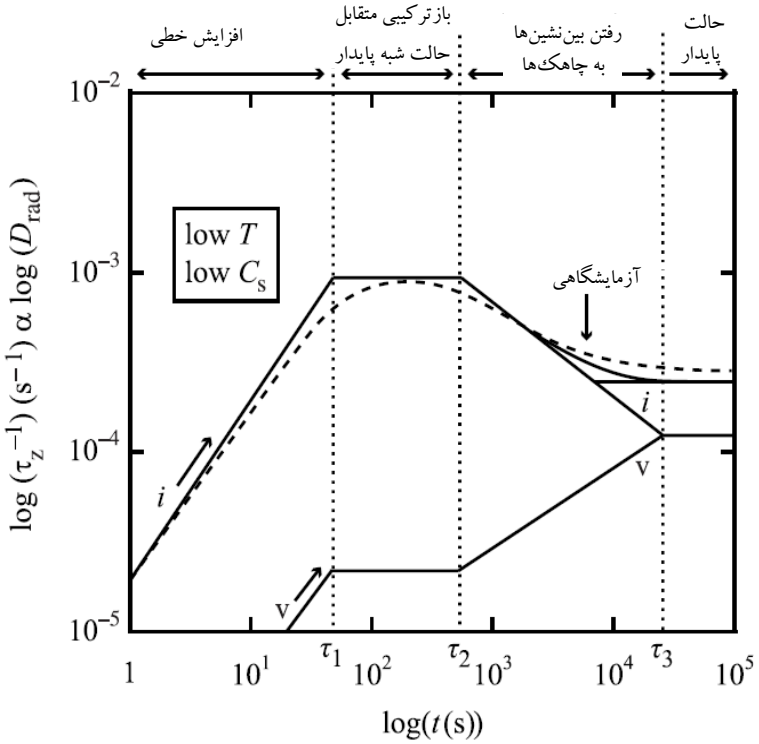
۵-۲ نفوذ افزایشی تابشی

در فلز خالص، ضریب نفوذ تحت پرتو دهی برابر است با:

$$D_{\mathrm{rad}} = D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}} + D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}\,. \qquad (۳۹-۵)$$

به علت آن‌که غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها تحت پرتودهی از غلظت تولید شده به صورت حرارتی بسیار بیش‌تر است، ضرایب نفوذ افزایشی تابشی از ضرایب نفوذ حرارتی بزرگ‌تر است. برخلاف نقص‌های موجود معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای ساده قادرند که اثر تابش روی ضرایب نفوذ را تخمین بزنند. شکل ۵-۶ نمودار $\log D_{\mathrm{rad}}$ را برحسب $\log t$ برای آلیاژ بازپخت شده‌ی

Ag-30%Zn پرتودهی شده با الکترون‌های با انرژی ۲٫۵ MeV و شار $۳٫۷ \times ۱۰^{۱۵}\ m^{-2}s^{-1}$ در دمای ۴۰ درجه‌ی سانتی‌گراد را نشان می‌دهد [۲]. خطوط پررنگ نازک، غلظت‌های بین‌نشین‌ها و جاهای خالی هستند و خطوط پررنگ ضخیم مجموع مقادیر محاسبه شده‌ی آن‌ها از معادله‌ی ۵-۳۵ سیزمن[1] [۲] است و خطوط نقطه‌چین اطلاعات آزمایشگاهی هستند. آزمایش در واقع زمان آسایش زنر[2]، τ_z، [۱] را اندازه‌گیری می‌کند که متناسب با D_{rad} است. نتایج آزمایشگاهی وجود بیشینه‌ای را در D_{rad} همانند مورد (۱) برای دمای پایین و چگالی جاهک پایین تأیید می‌کند. این نتیجه هم‌چنین نشان می‌دهد که مؤلفه‌ی بین‌نشینی در زمان‌های کم‌تری از زمان به‌دست آمده برای حالت پایدار، τ_3، غالب هستند؛ زیرا $D_i > D_v$ (با توجه به فرض) و برای $\tau < \tau_3$، $C_i > C_v$ است.



شکل ۵-۶. وابستگی دمایی D_{rad} برحسب $\ln t$ برای محاسبه (خط ضخیم) و اندازه‌گیری (خط نقطه‌چین)[۲].

1. Sizeman
2. Zener relaxation time ؛ فاصله‌ی زمانی بین از بین بردن آشفتگی و برقراری حالت تعادل

مثال دقیق دیگری از محاسبه‌ی D_{rad} برحسب اندازه‌گیری برای خودنفوذی در مس در دمای ۲۰۰ ^{o}C در بلوری حاوی چگالی نابجایی 10^{11} m^{-2} تحت پرتودهی با یک نرخ آسیب خالص، $K_0 = 10^{-6}$ dpa/s (شبیه به آزمایشاتی که برای مواد ساختمانی قلب رآکتور سریع انجام می‌شود) به وسیله‌ی روتمن[1] [۱] انجام شده است. در این مورد، $D_{rad} \sim 6.5 \times 10^{-21}$ m^2s^{-1} است. مشخص شده است که ضریب نفوذ حرارتی برابر با 1.4×10^{-27} m^2m^{-1} است، که به علت پرتودهی یک افزایش بسیار بزرگی ($> 10^{6}$) را نشان می‌دهد. شکل ۵-۷ نشان می‌دهد که در دماهای زیر ۵۷۵ ^{o}C برای این نرخ تولید عیب (منحنی ۱)، D_{rad} ضریب خودنفوذی تعادل حرارتی را افزایش می‌دهد. منحنی‌های مختلف در شکل ۵-۷ ترکیب‌های مختلفی از نرخ‌های تولید و چگالی‌های عیب را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که در دماهای پایین، بازترکیبی متقابل غالب است و D_{rad} یک انرژی فعال‌سازی برابر با $\frac{E_m^v}{2}$ (تمام منحنی‌ها) را دارد. در چگالی چاهک پایین (10^{11} نابجایی در m^2 (منحنی۱)، که $\rho_d \sim 4\pi r_{vs}C_s = 4\pi r_{is}C_s$ است) با افزایش دما منطقه‌ی بازترکیبی متقابل به صورت غیرمستقیم به وسیله‌ی تعادل حرارتی جاهای خالی با نفوذ برابر می‌شود. در چگالی چاهک‌های بالا (10^{14} m^{-2} (منحنی ۲) و 10^{15} m^{-2} (منحنی ۳))، بازترکیبی متقابل روشی را برای بازپخت در چاهک‌های ثابت در دمای بحرانی ارایه می‌دهد که به صورت زیر مشخص می‌شود:

مطابق با معادله‌ی ۵-۳۶ برای نوع چاهک تکی می‌توان نوشت:

$$C_i K_{is} = C_v K_{vs} \quad \text{or} \quad C_i = \frac{C_v K_{vs}}{K_{is}} . \tag{۴۰-۵}$$

در حالت پایدار معادله‌ی ۵-۲۹ اعمال می‌شود و آن‌ها می‌توانند به صورت زیر بازنویسی شوند:

$$C_v = \frac{K_{is}C_s}{2K_{iv}} \left[\left(1 + \frac{4K_0K_{iv}}{K_{is}K_{vs}C_s^2} \right)^{1/2} - 1 \right] \tag{۴۱-۵}$$

$$C_i = \frac{K_{vs}C_s}{2K_{iv}} \left[\left(1 + \frac{4K_0K_{iv}}{K_{is}K_{vs}C_s^2} \right)^{1/2} - 1 \right] .$$

1. Rothman

یک پارامتر η در ادامه به صورت زیر تعریف می‌شود:

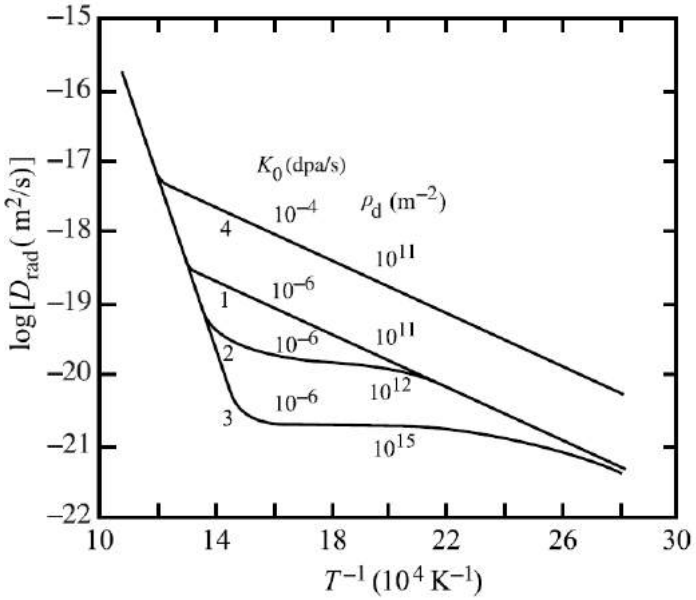
$$\eta = \frac{4K_0K_{iv}}{K_{vs}K_{iv}C_s^2} \ . \qquad (۴۲-۵)$$

در نتیجه با استفاده از معادله‌ی ۵-۴۱، C_v می‌تواند به صورت زیر تعریف شود:

$$C_v = \frac{F(\eta)K_0}{K_{vs}C_s} \ , \text{ or } C_vK_{vs}C_s = F(\eta)K_0 \ . \qquad (۴۳-۵)$$

که

$$F(\eta) = \frac{2}{\eta}[(1+\eta)^{1/2} - 1] \ . \qquad (۴۴-۵)$$



شکل ۵-۷. D_{rad} محاسبه شده برای خودنفوذی مس به عنوان تابعی از دما برای ترکیبات مختلفی از سرعت‌های تولید عیب و چگالی نابجایی‌ها. (۱) $K_0 = ۱۰^{-۶}$ dpa/s، $\rho_d = ۱۰^{۱۱}$ m^{-2} (۲) $K_0 = ۱۰^{-۶}$ dpa/s، $\rho_d = ۱۰^{۱۴}$ m^{-2} (۳) $K_0 = ۱۰^{-۶}$ dpa/s، $\rho_d = ۱۰^{۱۵}$ m^{-2} (۴) $K_0 = ۱۰^{-۴}$ dpa/s، $\rho_d = ۱۰^{۱۱}$ m^{-2} [۱].

معادله‌ی ۵-۴۳ نشان می‌دهد که $F(\eta)$، تعداد عیوب جذب شده به وسیله‌ی چاهک‌ها از نرخ کلی تشکیل عیوب را تعیین می‌کند. اگر $\eta \to 0$، سپس $F(\eta) \to 1$، به عبارت دیگر تمام عیوب به وسیله‌ی چاهک‌ها از بین می‌روند و بازترکیب نمی‌شوند. در محدوده‌ی η بزرگ، $F(\eta) \sim 1.2\eta^{1/2}$ و $F(\eta) \to 0$، که مشخص می‌کند بازترکیبی متقابل اتلاف عیوب را کنترل می‌کند. هنگامی $F(\eta) = 1.2$، اتلاف عیوب به وسیله‌ی چاهک‌ها و بازترکیبی برابر هستند. این برابری در مقدار η زیر رخ می‌دهد:

(۵-۴۵)

$$\eta = 8 = \frac{4K_0K_{iv}}{K_{vs}K_{is}C_s^2}.$$

معادله‌ی ۵-۴۵ می‌تواند برای دمای بحرانی که در زیر آن بازترکیبی متقابل غالب است و بالای دمایی که اتلاف به وسیله‌ی چاهک‌ها غالب است، حل شود. (عبارت η در فصل ۸ در توضیح اثر بازترکیبی روی رشد حفره دوباره بررسی خواهد شد). با استفاده از معادله‌ی ۵-۳، ۵-۴ و ۵-۵ برای K_{iv}، K_{is} و K_{vs} و تعریف‌های $K'_{iv} = 4\pi r_{iv}$، $K'_{is} = 4\pi r_{vs}$ و $K'_{vs} = 4\pi r_{iv}$ می‌توان نوشت:

(۵-۴۶)

$$8 = \frac{4K_0K'_{iv}D_0^i \exp\left(\frac{-E_m^i}{kT}\right)}{K'_{vs}D_0^v \exp\left(\frac{-E_m^v}{kT}\right) K'_{is}D_0^i \exp\left(\frac{-E_m^i}{kT}\right) C_s^2},$$

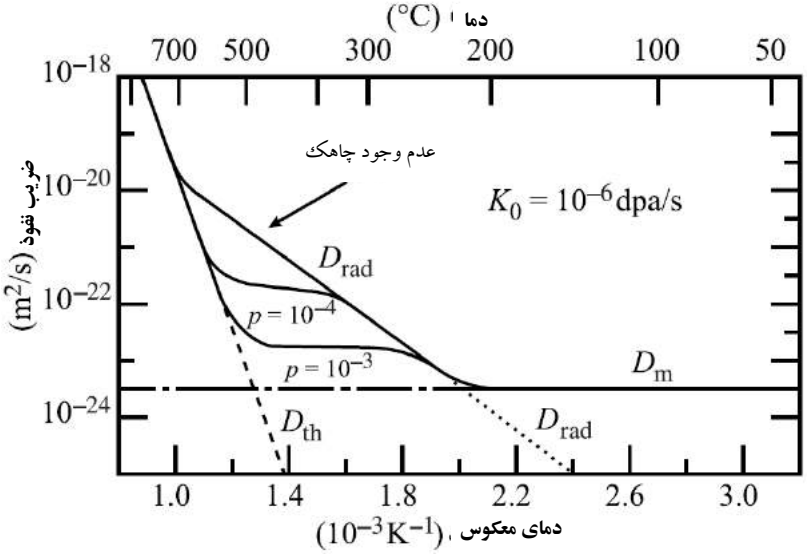
که $E_{i,m}^v$ انرژی مهاجرت و $D_0^{i,v}$ عامل پیش نمایی در ضریب نفوذ به ترتیب برای بین‌نشین‌ها و جاهای خالی است. معادله‌ی ۵-۴۶ به صورت زیر ساده می‌شود:

(۵-۴۷)

$$T_c = \frac{E_m^v}{k \ln\left[\frac{2D_0^v C_s^2 K'_{is} K'_{vs}}{K_0 K'_{iv}}\right]}.$$

در دماهای بالا، D_{rad} به وسیله‌ی جاهای خالی حرارتی کنترل شده (تمام منحنی‌ها در شکل ۵–۷) و افزایش K_0 به dpa/s $۱۰^{-۴}$ (منحنی ۴)، D_{rad} را در محدوده‌ی بازترکیبی در حدود ۱۰ برابر افزایش می‌دهد.

شکل ۵–۸ محاسبه‌ی ضریب نفوذ افزایشی تابشی برای نمونه‌ی نیکلی که با نرخ dpa/s $۱۰^{-۶}$ تحت پرتودهی قرار گرفته و برای احتمالات مختلف نابودسازی چاهک، ρ، را نشان می‌دهد که $\rho^{-۱}$ تعداد میانگین پرش‌های یک عیب بین ایجاد و نابودسازی در چاهک است[۵]. ضریب نفوذ توضیح دهنده نفوذ افزایشی تابشی، D_{rad}، به وسیله‌ی خطوط ضخیم نشان داده شده است. خط‌چین‌ها در سمت چپ ضریب نفوذ حرارتی و خط ضخیم افقی در سمت راست ضریب نفوذ ناشی از اختلاط حرکتی، D_m را نشان می‌دهند [۶]، که در فصل ۱۰ توضیح داده خواهد شد. تفاوت بین منحنی‌های D_{rad} و D_{th} اثر افزایش نفوذ تابشی است. همان طوری که نشان داده شده است، پرتودهی می‌تواند منجر به افزایش چند برابری در ضریب نفوذ شود.



شکل ۵–۸. ضریب نفوذ به صورت تابعی از $1/T$ برای آلیاژ پایه‌ی نیکلی در طول پرتودهی در نرخ جابه‌جایی dpa/s $۱۰^{-۶}$. D_{rad} از نظریه‌ی سرعت برای احتمالات مختلف نابودسازی چاهک‌ها، ρ، محاسبه شده است. ضریب نفوذ ناشی از ترکیب جابه‌جایی، D_m است و ضریب نفوذ حرارتی D_{th} است [۵].

۵-۳ واکنش‌های عیوب

هر عبارت در معادله‌ی تعادلی عیب نقطه‌ای واکنش را نشان می‌دهد. نرخی که در آن واکنش رخ می‌دهد وابسته به ماهیت گونه‌های واکنش دهنده است. در ادامه با توجه به مرجع [۳] عبارت‌هایی برای نرخ‌های هر واکنش در معادله‌ی تعادلی عیب نقطه‌ای توسعه داده می شود هم‌چنان که آن‌ها در فرایندهای توصیف شده مانند رشد حفره، صعود نابجایی‌ها و غیره استفاده می‌شوند. همان‌طوری که دیده شد حرکت عیوب نقطه‌ای متحرک می‌تواند به صورت فرایند تصادفی در نظر گرفته شود. هنگامی که در بلور یکی از این عیوب با گونه‌ای که اتصال محکمی را با بلور ایجاد کرده برخورد می‌کند، مشاهده می‌شود که یکی یا هر دو شرکت کننده‌ی در برخورد از جامد ناپدید می‌شوند. مثال‌هایی از این فرایندها، یک جای خالی یا بین‌نشین متقاطع در یک سطح آزاد، مرزدانه، نابجایی، حفره و غیره، یا یک جای خالی مواجه شده با یک جای خالی، یک بین‌نشین مواجه با یک بین‌نشین، یا یک جای خالی مواجه شده با یک بین‌نشین هستند. به وضوح نرخ چنین واکنش‌هایی متناسب با غلظت هر دوگونه است؛ یا:

$$\text{نرخ واکنش A و B} = K_{AB}C_AC_B \quad \text{reactions/cm}^3\text{s} \qquad (۴۸-۵)$$

که C_A و C_B غلظت گونه‌های A و B در واحدهای ذره در سانتی‌متر مکعب هستند و K_{AB} ثابت سرعتی واکنش در واحد cm^3/s است. واکنش‌ها می‌توانند بین دو ذره‌ی متحرک (جای خالی و بین‌نشین در دمای بالا) یا بین عیب ساکن و عیب متحرک، به عبارت دیگر، دمای پایین که جاهای خالی غیرمتحرک و بین‌نشین‌ها متحرک هستند یا بین بین‌نشین‌ها و نابجایی‌ها، مرزدانه‌ها و حفره‌ها، و غیره، باشند.

در بررسی واکنش میان عیوب نقطه‌ای و چاهک‌ها دو نوع از فرایندها مورد توجه هستند. این فرایندها واکنش‌های کنترل شده سرعتی و کنترل شده نفوذی هستند. در واکنش فرایندهای کنترل شده سرعتی، نباید شیب غلظتی قابل رویتی در شرکت کننده‌ها وجود داشته باشد. اگر یک شرکت کننده در مقایسه با اندازه‌ی اتمی واکنش دهنده بزرگ‌تر باشد یا اگر شرکت کننده، یک چاهک قوی باشد، ممکن است که شیب غلظتی در پیرامون عیب ساکن به وجود آید. واکنش‌های میان عیوب نقطه‌ای مثال هایی از واکنش فرایندهای کنترل شده سرعتی هستند. اگر شیب غلظتی عیب به وجود آید، تمام

فرایند به وسیله‌ی سرعت نفوذ گونه‌های متحرک به چاهک ساکن کنترل می‌شود. این برابر با مواردی مانند سطوح آزاد، حفره‌ها و مرزدانه‌ها است. این عیوب معمولاً به وسیله‌ی نظریه‌ی سرعتی واکنش بررسی نمی‌شوند.

برای مثال از واکنش کنترل شده‌ی سرعتی، واکنش جای خالی ـ جای خالی بررسی می‌شود. واکنش زیر را در نظر بگیرید:

$$\mathrm{v} + \mathrm{v} \rightarrow \mathrm{v}_2 \ , \tag{۴۹-۵}$$

که فقط در جهت مستقیم رخ می‌دهد و با ثابت سرعتی $K_{2\mathrm{v}}$ توصیف می‌شود. در این مثال، فرض شده است که یک جای خالی ثابت و دیگری متحرک باشد. سرعت تشکیل جای خالی دوتایی در هر cm^3 برابر است با:

$$R_{2\mathrm{v}} = P_{2\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} \tag{۵۰-۵}$$

که C_{v} غلظت جاهای خالی تکی است و $P_{2\mathrm{v}}$ میزان احتمال پرش یک جای خالی به داخل موقعیت مجاور یک جای خالی مشخص در یک ثانیه است (شکل ۵-۹). اگر موقعیت مجاور جای خالی به وسیله‌ی جای خالی دیگری اشغال شود، جای خالی دوتایی[1] تشکیل خواهد شد، در نتیجه $P_{2\mathrm{v}}$ وابسته به ساختار بلوری است. با در نظر گرفتن شبکه‌ی fcc، تمام ۱۲ موقعیت مجاور یکسان هستند و در نتیجه:

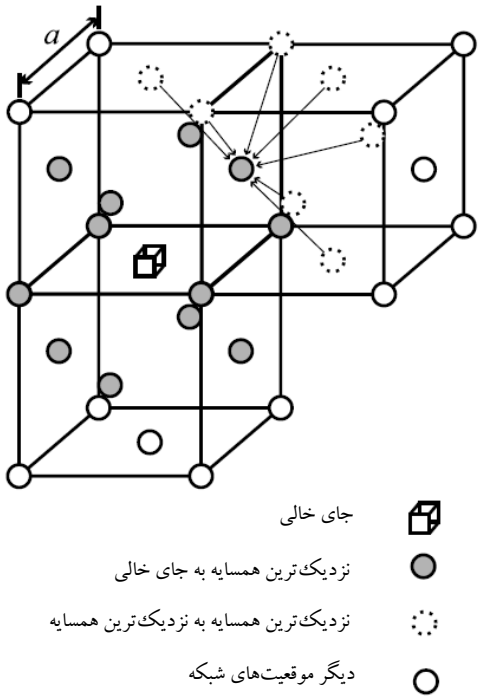
$$P_{2\mathrm{v}} = 12 P_x \ , \tag{۵۱-۵}$$

که P_{x} میزان احتمال در ثانیه است که جای خالی دیگری به یکی از موقعیت‌های مجاور احاطه کننده جای خالی پرش کند. P_{x} متناسب است با:

1. Di-vacancy

۱. تعداد نزدیک‌ترین مکان‌های پیرامون موقعیت مشخص که از آن جای خالی دیگری می‌تواند پرش کند (هفت موقعیت همان‌طوری که به وسیله‌ی اتم‌های نقطه‌چین در شکل ۵-۹ نشان داده شده است).
۲. احتمال آن‌که یکی از این موقعیت‌های شبکه به وسیله‌ی جای خالی اشغال شود، N_v،
۳. فرکانس پرش یک جای خالی، ω، یا

$$P_x = 7N_v\omega_v \ , \qquad (۵۲-۵)$$



شکل۵-۹. موقعیت نزدیک‌ترین همسایه‌ها برای تشکیل جای خالی دوتایی در شبکه‌ی fcc [۳].

و می‌توان کسر موقعیت‌های خالی را به صورت $N_v = C_v\Omega$ نوشت که C_v غلظت حجمی جاهای خالی و Ω حجم اتمی است. با جایگزینی معادله‌های ۵-۵۱ و ۵-۵۲ در معادله‌ی ۵-۵۰ می‌توان نوشت:

$$R_{2v} = 84\omega\Omega C_v^2 \ [\mathrm{cm}^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}] \ . \qquad (۵۳-۵)$$

و در صورت مقایسه با تعریف سرعت واکنش، معادله‌ی ۵-۴۸ ثابت سرعت واکنش K_{2v} به‌دست می‌آید:

$$K_{2v} = 84\omega\Omega \ . \qquad (۵۴-۵)$$

در شبکه‌ی fcc، $D_v = a^2\omega$ است و در نتیجه:

$$K_{2v} = \frac{84\Omega D_v}{a^2} \ . \qquad (۵۵-۵)$$

اگرچه عبارت ثابت سرعت برای واکنش جای خالی- جای خالی به‌دست آمده، ولی فرمولاسیون مشابهی به واکنش‌های بین دیگر گونه‌ها (به عبارت دیگر ناخالصی) که موقعیت‌های جانشینی در شبکه‌ی fcc را اشغال می‌کنند، قابل اعمال است. این عبارت هم‌چنین می‌تواند برای دیگر انواع شبکه نیز استفاده شود، لیکن ضریب ۸۴ که ضریب ترکیبی[1] نامیده می‌شود به ساختار بلوری وابسته است. ضریب ترکیبی یک قیاس حالت جامد از سطح مقطع در برهم‌کنش‌های ذرات است.

در مثال قبل، این اجبار وجود داشت که یکی از واکنش دهنده‌ها ثابت در نظر گرفته شود. هنگامی که واکنش میان دو گونه متحرک رخ می‌دهد، سرعت برابر با $(K_{AB} + K_{BA})C_AC_B$ است که K_{AB} ثابت سرعتی محاسبه شده با فرض غیرقابل حرکت بودن B و به صورت برعکس برای K_{BA} است. بنابراین، اگر هردو جای خالی متحرک باشند، نتیجه در یک عامل ۲ ضرب خواهد شد: $K_{2v} + K_{2v} = 2K_{2v}$. با تعیین این دورنما، اکنون می‌توان عبارت‌های مختلف در معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای را به منظور گسترش عباراتی برای ضرایب سرعت واکنش مورد توجه قرار داد.

1. Combinatorial Factor

۵-۳-۱ تولید عیب

عبارت اول در معادلات تعادلی عیب(معادله‌ی ۵-۱)، سرعت تولید جاهای خالی و بین‌نشین‌ها است که در فصل ۲ تعیین شد، معادله‌ی ۲-۱۲۵، که عبارت داخل کروشه‌ی یکای ν_{FP} است:

$$K_0 = \xi\, \nu_{FP} \sigma_s N \phi \,[\mathrm{cm^{-3}\,s^{-1}}]\,. \qquad (۵۶-۵)$$

برای فولاد زنگ نزن، ν_{FP} تقریباً برابر با ۳۰ جفت فرانکل در هر برخورد، $\sigma_s \sim ۳ \times ۱۰^{-۲۴}\ \mathrm{cm^2}$ و $N \sim ۷\times ۱۰^{۲۲}\ \mathrm{cm^{-3}}$ هستند. عبارت، ξ، راندمان جابه‌جایی است (فصل ۳) که برای کاهش ناشی از بازترکیبی‌ها و خوشه‌ای شدن‌های درون آبشاری در عیوب نقطه‌ای که به صورت آزاد مهاجرت می‌کنند، محاسبه می‌شود.

۵-۳-۲ بازترکیبی

عبارت دوم در معادله‌ی ۵-۱، $K_{iv}C_vC_i$ سرعت بازترکیبی است. ثابت سرعتی K_{iv} برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برابر است؛ زیرا آن‌ها باید در سرعت مشابهی با یک‌دیگر بازترکیب شوند. واکنش‌های بین جاهای خالی و بین‌نشین‌ها اهمیت بسزایی دارد؛ زیرا نتیجه‌ی آن نابودسازی متقابل یا بازگشت به شبکه‌ی کامل است. با فرض جای خالی ساکن و بین‌نشین متحرک، و آن‌که بازترکیبی فقط هنگامی رخ دهد که بین‌نشین به موقعیت جای خالی در همسایه نزدیک پرش کند، می‌توان ثابت سرعت بازترکیبی را برای بین‌نشین هشت‌وجهی در شبکه‌ی fcc تعیین کرد. شش موقعیت هشت‌وجهی به جای همسایه‌های نزدیک به موقعیت خالی شبکه وجود دارند و هر موقعیت شبکه هشت همسایه نزدیک هشت‌وجهی دارد که مقدار ۴۸ را برای ضریب بازترکیبی مشخص می‌کند:

$$K_{iv} = \frac{48\Omega D_i}{a^2}\,. \qquad (۵۷-۵)$$

به هرجهت این عبارت غیرواقعی است؛ زیرا (۱) شکل پایدار بین‌نشین، بین‌نشین دمبلی‌شکل است و (۲) جای خالی و بین‌نشین به واسطه‌ی میدان‌های کرنشی‌شان به سمت یک‌دیگر جذب می‌شوند و

باعث می‌شود که بازترکیبی خودبه‌خودی در سراسر فاصله‌های بیش‌تر از فواصل همسایه‌های نزدیک رخ دهد. بنابراین، یک تخمین واقعی‌تر از ضریب ترکیبی،z_{iv} تقریباً برابر با ۵۰۰ است:

$$K_{iv} = \frac{z_{iv}\Omega D_i}{a^2}\ , \text{ and } z_{iv} \sim 500\ . \qquad (۵۸-۵)$$

۵-۳-۳ اتلاف در چاهک‌ها

عبارت اتلاف، تمام چاهک‌های ممکن برای اتلاف جای خالی و بین‌نشینی را نشان می‌دهد. این چاهک‌ها می‌توانند به سه گروه تقسیم شوند:

۱. چاهک‌های خنثی (غیرگرایشی) هیچ‌گونه ترجیحی را برای به دام‌اندازی یک نوع از عیب در برابر سایر عیوب نشان نمی‌دهند. سرعت جذب متناسب با حاصل‌ضرب ضریب نفوذ عیب نقطه‌ای و تفاوت در غلظت‌های عیب نقطه‌ای در یک فلز حجمی و در سطح چاهک است. انواع چاهک‌ها در این گروه حفره‌ها، رسوبات ناهم‌دوس و مرزدانه‌ها هستند.

۲. چاهک‌های گرایشی، یک جذب ترجیحی را برای یک نوع از عیب نسبت به سایر عیوب نشان می‌دهند. نابجایی‌ها ترجیح قوی‌تری را برای بین‌نشین‌ها از جاهای خالی نشان می‌دهند. گرایش نتیجه‌ی انحراف بین‌نشین‌ها تحت شیب تنشی نزدیک به هسته‌ی نابجایی است. از آن‌جایی که جذب بین‌نشین‌ها صعود نابجایی‌ها را افزایش می‌دهد، نابجایی چاهک غیرقابل اشباعی است. دو نوع از نابجایی‌ها مورد نظر هستند: شبکه‌ها در فلز غیرپرتودیده و از حلقه‌های فرانک بدون نقص و حلقه‌های نابجایی بین‌نشینی.

۳. چاهک‌های گرایش متغیر مانند رسوبات هم‌دوس به منزله‌ی تله‌هایی عمل می‌کنند که عیب را محبوس می‌کند لیکن ویژگی آن را تا زمان نابودسازی به وسیله‌ی عیب نوع مخالف حفظ می‌کند. اتم‌های ناخالصی و رسوبات هم‌دوس به عنوان مراکز بازترکیبی با یک ظرفیت محدود عمل می‌کنند.

۵-۳-۴ شدت چاهک‌ها

ثابت‌های سرعتی واکنش، واکنش را تشریح می‌کنند و نمادهای عیب نقطه‌ای و چاهک (که می‌تواند عیب نقطه‌ای دیگر باشد) هستند و K_{jX} را معرفی می‌کنند که در آن j عیب نقطه‌ای متحرک و X

چاهک است. از این جهت، آن‌ها شامل ضریب نفوذ عیب نقطه‌ای به علاوه‌ی توضیحی از تمایل برای رخداد واکنش هستند. این ثابت‌ها اغلب برای توضیح تمایل یک چاهک به جذب عیوب که مستقل از ویژگی‌های عیوب است، مناسب هستند. شدت چاهک، با واحد cm^{-2}، چنین توصیفی است و آن شدت و میل ترکیبی چاهک برای عیوب را منعکس می‌کند. شدت چاهک برای چاهک‌های خنثی، مستقل از ویژگی‌های عیوب است. شدت چاهک به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\text{سرعت جذب} = K_j K C_j C_X = k^2_{jX} C_j D_j \qquad (۵۹-۵)$$

بنابراین

$$k^2_{jX} = \frac{K_{jX} C_X}{D_j} , \qquad (۶۰-۵)$$

یا

$$k^2_j = \sum_X k^2_{jX} . \qquad (۶۱-۵)$$

هم ثابت سرعتی و هم شدت چاهک عباراتی هستند که اغلب برای توضیح تأثیر چاهک‌ها برروی عیوب در جامد استفاده می‌شوند. از لحاظ فیزیکی، K_j^{-1} فاصله‌ی متوسطی است که عیب آزاد از نوع j در جامد و قبل از آن‌که به دام بیفتد، طی می‌کند.

قبل از آن‌که انواع چاهک‌ها بررسی شوند، ثابت‌های سرعتی برای دو فرایند واکنشی اصلی: فرایندهای کنترل شده‌ی سرعتی و فرایندهای محدود شده‌ی نفوذی بررسی می‌شوند.

۵-۴ واکنش‌های کنترل شده‌ی سرعتی

۵-۴-۱ برهم‌کنش عیب ـ حفره

برای واکنش‌هایی که به دام‌اندازی به وسیله‌ی سرعت وارد شدن عیوب نقطه‌ای به یک موقعیت تله کنترل می شوند، معادله‌ی ۵-۵۸ مورد استفاده قرار می‌گیرد. برای واکنش‌های عیب ـ حفره، عبارتی

که باید تعیین شود فاکتور ترکیبی است. برای یک حفره، تعداد نقطه‌های شبکه برروی سطح کره برابر با $4\pi R^2/a^2$ است که مساحت اشغال شده به وسیله‌ی یک نقطه شبکه‌ی تقریباً برابر a^2 است. در نتیجه ثابت سرعت برابر است با:

(۶۲-۵)

$$K_{vV} = \frac{4\pi R^2 \Omega D_v}{a^4} = \frac{4\pi R^2 D_v}{a}, \quad \text{که} \quad \Omega \sim a^3, k_V^2 = \frac{4\pi R^2 \rho_V}{a},$$

که ρ_v غلظت حفره‌ها در جامد است.

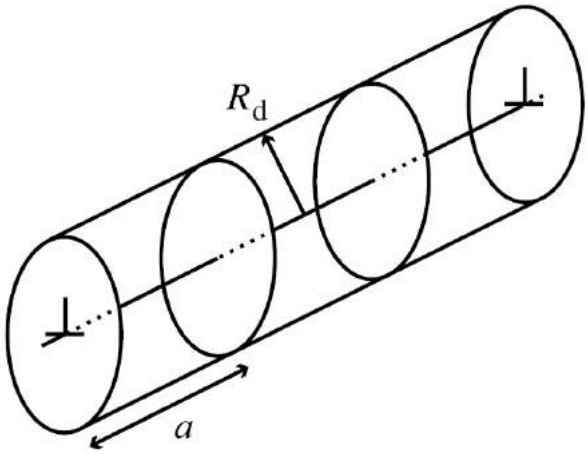
۵-۴-۲ برهم‌کنش عیب ـ نابجایی

استوانه‌ای را در اطراف خط نابجایی در نظر بگیرید که محور آن با خط نابجایی به گونه‌ای منطبق است که به دام‌اندازی برای هر جای خالی وارد شده به استوانه حتمی است. استوانه شامل z_{vd} موقعیت اتمی روی هر صفحه بلوری قطع شده به وسیله‌ی خط نابجایی است. استوانه، شعاع به دام‌اندازی نابجایی یا شعاعی را که در داخل آن عیوب وارد شده با چاهک از بین می‌روند، مشخص می‌کند. اگر فاصله‌ی میان صفحه‌های اتمی در شبکه تقریباً برابر با a باشد، در نتیجه z_{vd}/a موقعیت به دام‌اندازی در واحد طول نابجایی وجود دارد. ρ_d چگالی خطوط نابجایی در بلور است (در واحدهای سانتی‌متری از خط نابجایی در cm^3 از جامد یا (cm^{-2})، در نتیجه $z_{vd}\rho_d/a$ موقعیت به دام‌اندازی در واحد حجم وجود دارد. اگر غلظت جاهای خالی در واحد حجم برابر با C_v باشد، در نتیجه کسر موقعیت‌های جای خالی برابر با $C_v\Omega$ است. برای یک سرعت پرش جای خالی برابر با ω، سرعت به دام‌اندازی جای خالی به وسیله‌ی نابجایی در cm^3 برابر است با:

(۶۳-۵)

$$R_{vd} = \frac{z_{vd}\rho_d}{a} C_v \Omega \omega [\mathrm{cm^{-3}\,s^{-1}}].$$

از آن‌جایی که $\Omega \sim a^3$ و $D_v = a^2\omega$ است، در نتیجه $R_{vd} = D_v z_{vd}\rho_d C_v$ و ثابت سرعت واکنش $K_{vd} = D_v z_{vd}$، $K_{vd}^2 = z_{vd}\rho_d$ است و $R_{id} = D_i z_{id}\rho_d C_i$ و ثابت سرعت واکنش $K_{id} = D_i z_{id}$، $K_{id}^2 = z_{id}\rho_d$ و $z_{vd} \neq z_{id}$ است.



شکل۵-۱۰. حجم به دام‌اندازی در اطراف خط نابجایی، که به صورت استوانه‌ای با شعاع R_d و با موقعیت‌های چاهک قرار گرفته برروی صفحات بلوری جدا شده با فاصله‌ی a تعریف شده است.

۵-۵ واکنش‌های محدود شده‌ی نفوذی

واکنش‌های میان عیوب و چاهک‌ها همیشه نمی‌تواند به صورت واکنش‌های محدود شده‌ی سرعتی توصیف شوند. واکنش‌های ایجاد شده به وسیله‌ی شیب‌های غلظتی عیوب، محدود شده‌ی نفوذی هستند و باید به صورت متفاوتی بررسی شوند. مثال‌هایی از این واکنش‌ها برهم‌کنش‌های عیب - حفره، عیب ـ مرزدانه و بعضی از اوقات عیب ـ نابجایی است. توضیح این واکنش‌ها در ادامه (برگرفته از مرجع [۳]) با برهم‌کنش‌های عیب ـ حفره شروع می‌شود.

۵-۵-۱ واکنش‌های عیب ـ حفره

مورد ρ_V حفره در واحد حجم را در نظر بگیرید، هر شعاع، R، که نوع مشخصی از عیب نقطه‌ای را جذب می‌کند، در جامد و میان چاهک‌های کروی وجود دارد. با تمرکز روی کُره تکی، سلول واحد یا حجم به دام‌اندازی احاطه کننده هر کره به عنوان بخشی از جامد که می‌تواند همراه با هر کره باشد، تعریف می‌شود. شعاع حجم به دام‌اندازیِ (شکل ۵-۱۱) اطراف هر کره به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\left(\frac{4}{3}\pi\mathcal{R}^3\right)\rho_V = 1\,. \qquad (۶۵-۵)$$

معادله‌ی نفوذ برای عیوب نقطه‌ای در پوسته کروی $R \le r \le \mathcal{R}$ حل خواهد شد. غلظت عیوب نقطه‌ای در یک موقعیت شعاعی r در حجم به دام اندازی در زمان t به صورت $C(r,t)$ بیان می‌شود. تعریف حجم به دام‌اندازی الزام می‌دارد که هیچ گونه شار خالصی از عیوب نقطه‌ای در طول مرز در $r = \mathcal{R}$ وجود نداشته باشد که به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial r}\right)_{\mathcal{R}} = 0\,, \qquad (۶۶-۵)$$

و غلظت عیوب نقطه‌ای در سطح کره برابر است با:

$$C(R,t) = C_R\,. \qquad (۶۷-۵)$$

مقدار C_R وابسته به فرایند است. برای اتم‌های گازی نامحلول که به صورت حباب‌های گاز نشان داده می‌شوند، $C_R = 0$ است. برای حباب‌ها یا حفره‌ها که عیوب نقطه‌ای، جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها هستند، $C_{\mathrm{R}} = C^0_{\mathrm{v,i}}$ (غلظت عیوب در تعادل حرارتی) است.

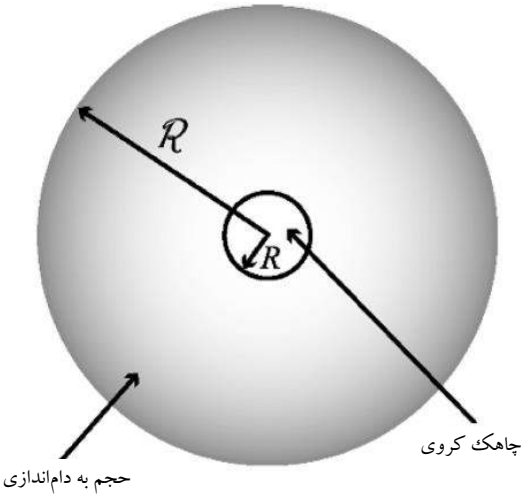
اگر عیوب به صورت یکنواختی در حجم به دام‌اندازی ایجاد شوند و هیچ چاهکی بجز کره موجود نباشد، در نتیجه غلظت $C(r,t)$ با حل معادله‌ی نفوذ حجمی با یک عبارت منبع حجمی تعیین می‌شوند:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial C}{\mathrm{d}r}\right) + K_0\,, \qquad (۶۸-۵)$$

که در این رابطه D ضریب نفوذ عیوب (با فرض آن‌که مستقل از غلظت باشند)، و K_0 نرخ تولید عیب در واحد حجم تعیین شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۵-۵۶ است.

هنگامی که جامد در دمایی پرتودهی می‌شود که عیوب نقطه‌ای آن متحرک هستند، اتلاف ذرات به چاهک‌ها تا اندازه‌ای به وسیله‌ی نرخ تولید جبران می‌شود در نتیجه تغییرات غلظت با زمان کند است $(\frac{\partial c}{\partial t} \sim 0)$ و معادله‌ی ۵-۶۱ می‌تواند به صورت زیر تقریب زده شود:

$$\frac{D}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}r}\right) = -K_0\,. \qquad (۶۹-۵)$$



شکل ۵-۱۱. سلول واحد برای تعیین ثابت سرعت واکنش کنترل شده نفوذی برای جذب عیب به وسیله‌ی چاهک کروی.

راه‌حل معادله‌ی ۵-۶۹ با جایگذاری شرایط مرزی تعیین شده به وسیله‌ی معادله‌های ۵-۶۶ و ۵-۶۷ به‌دست می‌آید و می‌توان نوشت:

$$C(r) = C_R + \frac{K_0}{6D}\left[\frac{2\mathcal{R}^2(r-R)}{rR} - \left(r^2 - R^2\right)\right] . \qquad (۵-۷۰)$$

از آن‌جایی که در بسیاری از موارد، شعاع حجم به دام‌اندازی از شعاع چاهک بسیار بزرگ‌تر است و اثر غلظت به سرعت و فقط در نزدیک چاهک تغییر می‌کند، حجم به دام‌اندازی به دو ناحیه تقسیم می‌شود (شکل ۵-۱۲). در ناحیه‌ی ۱ عبارت نفوذ از عبارت منبع بسیار بزرگ‌تر است و معادله‌ی ۵-۶۹ می‌تواند به صورت زیر تقریب زده شود:

$$\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}r}\right) = 0 , \qquad (۵-۷۱)$$

با استفاده از شرایط مرزی:

$$C(R) = C_R \tag{۵-۷۲}$$

$$C(\infty) = C(\mathcal{R}) \,. \tag{۵-۷۳}$$

معادله‌ی ۵-۷۱ حل خواهد شد و در نتیجه می توان نوشت:

$$C(r) = C_R + [C(\mathcal{R}) - C_R]\left[1 - \left(\frac{R}{r}\right)\right] \,. \tag{۵-۷۴}$$

شار ذرات در سطح حفره به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$J = -D\left(\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}r}\right)_R \,. \tag{۵-۷۵}$$

با استفاده از معادله‌ی ۵-۷۰ می‌توان نوشت:

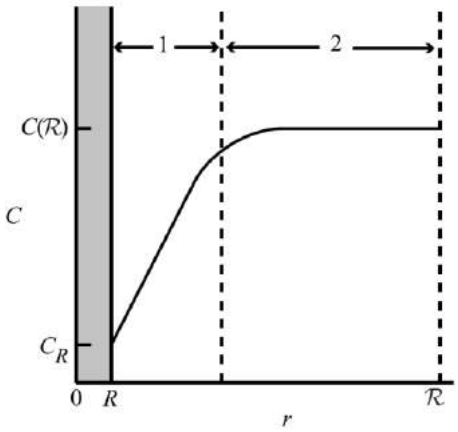
$$J = \frac{-D[C(\mathcal{R}) - C_R]}{R} \,. \tag{۵-۷۶}$$

نرخ جذب عیوب نقطه‌ای به وسیله‌ی حفره برابر است با:

$$-(4\pi R^2)J = 4\pi RD[C(\mathcal{R}) - C_R] \,. \tag{۵-۷۷}$$

لازمه‌ی آن‌که عیوب نقطه‌ای تولید شده در حجم به دام‌اندازی به وسیله‌ی حفره جذب شود این است که:

$$\frac{4}{3}\pi(\mathcal{R}^3 - R^3)K_0 = 4\pi RD[C(\mathcal{R}) - C_R] \,. \tag{۵-۷۸}$$



شکل۵-۱۲. نواحی مورد توجه در حل معادله‌ی نفوذی در لایه‌ی کروی با نرخ تولید یکنواخت حجمی عیوب.

اگر $R^3 << \mathcal{R}^3$ باشد، تعادل به صورت زیر حاصل می شود:

$$C(\mathcal{R}) = C_R + \frac{K_0 \mathcal{R}^3}{3RD} . \qquad (۷۹-۵)$$

با فرض آن‌که در معادله‌ی ۵-۷۸، $C(\mathcal{R}) >> C_R$ باشد و جایگذاری $C(\mathcal{R})$ به وسیله‌ی C، نرخ کلی جذب کنترل شده‌ی نفوذی عیوب نقطه‌ای به وسیله‌ی حفره و ضرب معادله‌ی ۵-۷۷ در تعداد حفره‌ها در واحد حجم ρ_v به‌دست می‌آید:

$$\text{نرخ جذب}/\text{cm}^3 = 4\pi RD\rho_v C$$

ثابت سرعت برای واکنش کنترل شده‌ی نفوذی عیوب نقطه‌ای و یک چاهک کروی کامل با شعاع R برابر است با:

$$K_{iV} = 4\pi RD_i , \qquad (۸۱-۵)$$
$$K_{vV} = 4\pi RD_v ,$$
$$k_V^2 = 4\pi R\rho_V ,$$

که در این رابطه پانویس‌های K به گونه‌های واکنش دهنده، جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها (v, i) و

حفره‌ها، V اشاره دارند.

۵-۵-۲ واکنش‌های عیب ـ نابجایی

واکنش‌های کنترل شده‌ی نفوذی بین عیوب و نابجایی‌ها بسیار مشابه به مورد چاهک‌های کروی است، لیکن این واکنش‌ها در مختصات استوانه‌ای رخ می‌دهند. با در نظر گرفتن آن‌که شعاع به دام‌اندازی چاهک R_{d} و چگالی نابجایی‌ها ρ_{d} باشد، سلول واحد به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$(\pi \mathcal{R}^2)\rho_{\mathrm{d}} = 1\,. \tag{۸۲-۵}$$

معادله‌ی نفوذ برابر است با:

$$\frac{D}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}r}\right) + K_0 = 1 \tag{۸۳-۵}$$

با در نظر گرفتن شرایط مرزی زیر:

$$C(R_{\mathrm{d}}) = C_{\mathrm{Rd}} \tag{۸۴-۵}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}r}\right)_{\mathcal{R}} = 0\,, \tag{۸۵-۵}$$

حل معادله برابر است با:

$$C(r) = C_{R_{\mathrm{d}}} + \frac{K_0 \mathcal{R}^2}{2D}\left[\ln\left(\frac{r}{R_{\mathrm{d}}}\right) - 1/2\left(\frac{r^2 - R_{\mathrm{d}}^2}{\mathcal{R}^2}\right)\right]\,. \tag{۸۶-۵}$$

مشابه با مورد چاهک‌های کروی، در ناحیه‌ی ۱، لیکن در هندسه‌ی استوانه‌ای، معادله‌ی نفوذ برابر است با:

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}r}\right) = 0\,, \tag{۸۷-۵}$$

با شرایط مرزی زیر:

(۸۸-۵)

$$C(R_{\mathrm{d}}) = C_{\mathrm{Rd}}$$

(۸۹-۵)

$$C(\mathcal{R}) = C\,,$$

حل معادله برابر است با:

(۹۰-۵)

$$C(r) = C_{R_{\mathrm{d}}} + [C(\mathcal{R}) - C_{R_{\mathrm{d}}}]\frac{\ln(r/R_{\mathrm{d}})}{\ln(\mathcal{R}/R_{\mathrm{d}})}\,.$$

شار عیوب به خط نابه‌جایی‌ها برابر است با:

(۹۱-۵)

$$J = -D\left(\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}r}\right)_{R_{\mathrm{d}}} = \frac{-D[C(\mathcal{R}) - C_{R_{\mathrm{d}}}]}{R_{\mathrm{d}}\ln(\mathcal{R}/R_{\mathrm{d}})}\,.$$

سرعت جذب در واحد طول خط نابه‌جایی برابر $J(2\pi R_{\mathrm{d}})$- است، در نتیجه می‌توان نوشت:

(۹۲-۵)

$$= \frac{2\pi D[C(\mathcal{R}) - C_{R_{\mathrm{d}}}]}{\ln(\mathcal{R}/R_{\mathrm{d}})}\,.$$

سرعت تولید عیب در حجم به دام‌اندازی برابر است با:

(۹۳-۵)

$$= \pi(\mathcal{R}^2 - R_{\mathrm{d}}^2)K_0\,,$$

و از آن‌جایی که تمام عیوب تولید شده در حجم به دام‌اندازی به وسیله‌ی نابجایی‌ها به دام می‌افتند:

(۹۴-۵)

$$\frac{2\pi D[C(\mathcal{R}) - C_{R_{\mathrm{d}}}]}{\ln(\mathcal{R}/R_{\mathrm{d}})} = \pi(\mathcal{R}^2 - R_{\mathrm{d}}^2)K_0\,,$$

و

$$C(\mathcal{R}) = C_{R_d} + \frac{K_0 \mathcal{R}^2}{2D} \ln(\mathcal{R}/R_d) \text{ for } R_d/\mathcal{R} \ll 1 \,, \tag{۹۵-۵}$$

در نتیجه از معادله‌ی ۵-۹۱ نرخ به دام‌اندازی عیب به وسیله‌ی نابجایی‌ها در واحد حجم برابر با $\frac{2\pi D \rho_d C}{\ln(\frac{\mathcal{R}}{R_d})}$ است و ثابت‌های سرعتی برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برابرند با:

$$K_{vd} = \frac{2\pi D_v}{\ln(\mathcal{R}/R_{vd})}$$
$$K_{id} = \frac{2\pi D_i}{\ln(\mathcal{R}/R_{id})} \,, \tag{۹۶-۵}$$

و

$$k_{vd}^2 = \frac{2\pi \rho_d}{\ln(\mathcal{R}/R_{vd})}$$
$$k_{id}^2 = \frac{2\pi \rho_d}{\ln(\mathcal{R}/R_{id})} \,. \tag{۹۷-۵}$$

لازم به ذکر است که ضریب‌های ترکیبی برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به واسطه‌ی شعاع به دام‌اندازی متفاوت است. شعاع به دام‌اندازی برای بین‌نشین‌ها از جاهای خالی اندکی بالاتر است و منشأ گرایش نابجایی‌ها برای بین‌نشین‌ها است.

۵-۶ کنترل سرعت ترکیبی

کنترلِ سرعتِ ترکیبی هنگامی رخ می‌دهد که نرخ واکنش به وسیله‌ی ترکیبی از فرایندها تعیین شود. ثابت سرعت برای فرایندهای ترکیبی را می‌توان با جمع معکوس ثابت‌های سرعتی به منظور تعیین مقاومت ناشی از مراحل متوالی نفوذ و چسبندگی سطحی تعیین کرد. برای مورد حفره‌ها می‌توان ثابت‌های سرعتی تعیین شده با رابطه‌های ۵-۶۲ و ۵-۸۱ را استفاده کرد و در نتیجه:

$$\frac{1}{K_{eff}} = \frac{1}{K_{reaction}} + \frac{1}{K_{diffusion}} \,, \tag{۹۸-۵}$$

برای به‌دست آوردن ثابت سرعت مؤثر می‌توان نوشت:

$$K_{\text{eff}} = \frac{4\pi RD}{1+\frac{a}{R}}\,, \quad k_{\text{eff}}^2 = \frac{4\pi R\rho_{\text{V}}}{1+\frac{a}{R}}\,. \tag{۹۹-۵}$$

برای کره‌های بزرگ، $\frac{a}{R} \to 0$ میل می‌کند و ثابت سرعتی فقط برای نفوذ است. این نتایج نشان می‌دهد که محدودیت‌های سرعت واکنش نسبت به جنبش‌شناسی به دام‌اندازی برای چاهک‌های کروی فقط هنگامی قابل توجه هستند که شعاع کره‌ی کوچک و نزدیک به ثابت شبکه باشد.

برای نابجایی‌ها، نرخ‌های به دام‌اندازی محاسبه شده از یک فرایند کنترل شده‌ی نفوذی برحسب فرایند کنترل شده‌ی سرعتی برابر هستند با:

$$K_{\text{diffusion}} = \frac{2\pi D}{\ln(\mathcal{R}/R_{\text{d}})} \tag{۱۰۰-۵}$$

$$K_{\text{reaction}} = z_{\text{d}} D\,,$$

که ثابت سرعتی مؤثر برای کنترل ترکیبی را مشخص می‌کند:

$$K_{\text{eff}} = \frac{D}{\frac{1}{z_{\text{d}}}+\frac{\ln(\mathcal{R}/R_{\text{d}})}{2\pi}}\,, \quad k_{\text{eff}}^2 = \frac{\rho_{\text{d}}}{\frac{1}{z_{\text{d}}}+\frac{\ln(\mathcal{R}/R_{\text{d}})}{2\pi}}\,. \tag{۱۰۱-۵}$$

Z_{d} به عنوان مساحتی از ناحیه‌ی استوانه‌ای با شعاع R_{d} تقسیم بر تعداد اتم‌ها در واحد سطح در نظر گرفته می‌شود. برای صفحه‌ی (100) از شبکه‌ی fcc، تعداد اتم‌ها در واحد سطح برابر $\frac{2}{a^2}$ اتم در cm^2 است و در نتیجه برای $R_{\text{d}} \sim ۰٫۶\ \text{nm}$ و $a = ۰٫۳\ \text{nm}$ می‌توان نوشت:

$$K_{\text{reaction}}/D = z_{\text{d}}/D = \frac{2\pi R_{\text{d}}^2}{a^2} = 24 \tag{۱۰۲-۵}$$

برای چگالی خط نابجایی $1.4 \times 10^{10}\ \mathrm{cm}^{-2}$، $\frac{K_{\text{diffusion}}}{D} = \frac{2\pi}{\ln(\frac{\mathcal{R}}{R_{\text{d}}})}$ است. در نتیجه به دام‌اندازی عیوب به وسیله‌ی نابه‌جایی‌ها، کنترل شده‌ی نفوذی است.

۵-۷ واکنش‌های عیب ـ مرزدانه

واکنش‌های بین عیوب نقطه‌ای و مرزدانه‌ها در مورد جداشدگی القایی تابشی، بحث شده در فصل ۶، بسیار حایز اهمیت هستند. با بررسی تحلیل‌های هیلد[1] و هاربوت[2] [۷]، شدت چاهک مرزدانه به وسیله‌ی در نظر گرفتن دانه‌ی کروی با شعاع a، با غلظت عیب مرزدانه‌ای برابر با مقدار موجود در تعادل حرارتی، تعیین می‌شود که در مقایسه با غلظت القایی تابشی ناچیز است. اتلاف در چاهک‌ها در درون دانه برابر است با:

$$k^2 DC = (z_{\text{d}}\rho_{\text{d}} + 4\pi R_{\text{V}}\rho_{\text{V}})DC\ , \qquad (۱۰۳-۵)$$

که k^2 شدت چاهک برای درون دانه ناشی از نابجایی‌ها و حفره‌ها است و معادله‌ی نفوذ برابر است با:

$$\frac{\mathrm{d}^2 C}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}r} + \frac{K_0}{D} - k^2 C = 0\ , \qquad (۱۰۴-۵)$$

و در صورتی که شرایط مرزی به صورت $C(r = a) = 0$ و $C(r = 0) = \text{finite}$ در نظر گرفته شود، راه‌حل معادله‌ی ۵-۱۰۴ برابر است با:

$$C(r) = \frac{K_0}{Dk^2}\left[1 - \frac{a\sinh(kr)}{r\sinh(ka)}\right]\ , \qquad (۱۰۵-۵)$$

1. Heald
2. Harbottle

و جریان کلی عیوب نقطه‌ای به مرزدانه، A برابر است با:

$$A = -4\pi r^2 D \left.\frac{\partial C}{\partial r}\right|_{r=a} = \frac{4\pi K_0 a}{k^2}\left[ka\cot(ka) - 1\right] . \qquad (۱۰۶-۵)$$

با نوشتن به شکل نظریه‌ی سرعتی، معادله‌ی ۵-۱۰۶ برابر است با:

$$A = z_{gb} D C_0 , \qquad (۱۰۷-۵)$$

که z_{gb} شدت چاهک برای یک مرزدانه‌ی ویژه است و C_0 غلظت در مرکز دانه است ($r = 0$):

$$C_0 = C(r=0) = \frac{K_0}{Dk^2}\left[1 - \frac{ka}{\sinh(ka)}\right] . \qquad (۱۰۸-۵)$$

با توجه به معادله‌های ۵-۱۰۶، ۵-۱۰۷ و ۵-۱۰۸ شدت چاهک مرزدانه z_{gb} برابر است با:

$$z_{gb} = 4\pi a\left[\frac{ka\cosh(ka) - \sinh(ka)}{\sinh(ka) - ka}\right] . \qquad (۱۰۹-۵)$$

برای دانه‌های کوچک و چاهک‌های شدت پایین، $ka \to 0$ میل می‌کند و:

$$z_{gb}(ka \to 0) = 8\pi a = 4\pi d , \qquad (۱۱۰-۵)$$

که d ($= 2a$) قطردانه است. هنگامی که شدت چاهک بزرگ است، $ka \to \infty$ میل می کند و در نتیجه می‌توان نوشت:

$$z_{gb}(ka \to \infty) = 4\pi k a^2 = \pi k d^2 . \qquad (۱۱۱-۵)$$

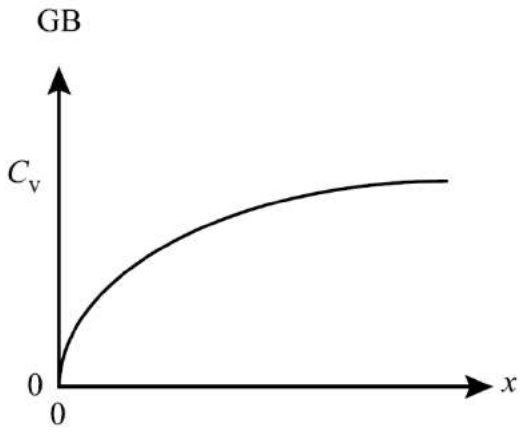
شدت چاهک مرزدانه برابر با حاصل‌ضرب z_{gb} و چگالی دانه در دانه‌ها در واحد حجم، یا $\rho_{gb} = \frac{6}{\pi d^3}$ است و بنابراین:

$$k_{gb}^2(ka \to 0) = 24/d^2 \ , \quad K_{jgb} = 4\pi D_j d \ , \tag{۱۱۲-۵}$$

و

$$k_{gb}^2(ka \to \infty) = 6k/d \ , \quad K_{jgb} = \pi k D_j d^2 \ , \tag{۱۱۳-۵}$$

که j برابر با i یا v است.



شکل۵-۱۳. واکنش کنترل شده‌ی نفوذی بین جاهای خالی و مرزدانه.

معمولاً، $k^2 \sim ۱۰^{۱۱}\ \text{cm}^{-2}$ و $d > ۱۰^{-۳}\ \text{cm}$ است، در نتیجه معادله‌ی ۵-۱۱۳ بیان مناسبی برای شدت چاهک مرزدانه است. در حقیقت، شدت چاهک مرزدانه به وسیله‌ی رابطه‌ی ۵-۱۱۳ تعیین می‌شود هنگامی که $(z_d\rho_d + 4\pi R_V \rho_V) > 1/d$ است.

۵-۸ رسوبات هم‌بسته و عناصر حل شده

این نوع از چاهک‌ها به صورت چاهک‌های گرایش متغیر شناخته می‌شوند؛ زیرا آن‌ها بیش‌تر از آن‌که به شکل چاهک‌های نامحدود که در آن‌ها عیوب ویژگی‌هایشان را بعد از جذب از دست می‌دهند، عمل کنند به منزله‌ی تله‌هایی برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها عمل می‌کنند.

منشأ جذب جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در دام‌ها، آزادسازی میدان‌های کرنشی تولید شده به وسیله‌ی هم‌دوستی بین دام‌ها و شبکه است. رسوب هم‌بسته ساختاری است که در آن صفحات شبکه‌ی رسوب با صفحات زمینه پیوسته هستند لیکن به علت تفاوت در پارامترهای شبکه، میدان کرنشی در فصل مشترکی وجود دارد که صفحات شبکه به منظور تطبیق با یک‌دیگر تحت نیرو قرار گرفته‌اند. عناصر حل شونده‌ی بزرگ یا کوچک یکی از موارد محدود کننده‌ی هم‌بستگی رسوبات هستند. شدت دام به وسیله‌ی ظرفیت سطح مشترک برای نگه‌داری یا به دام‌انداختن عیب تا رسیدن ضدعیب و نابودسازی آن محدود است. از آن‌رو، هیچ ماده‌ای در این عیب ذخیره نمی‌شود و نشر حرارتی رخ نمی‌دهد. فصل مشترک گرایشی را برای عیوب نشان می‌دهد و این گرایش تابعی از چاهک‌های گرایش یافته در جامد است. برای مثال، اگر چاهک‌های گرایش یافته در جامد بین‌نشین‌ها را مورد توجه قرار دهند، در نتیجه $k_{\mathrm{i}}^2 > k_{\mathrm{v}}^2$ است و تله فصل مشترک تعداد بیش‌تری جای خالی را نسبت به بین‌نشین جذب خواهد کرد. این فرایند تعداد جاهای خالی را افزایش می‌دهد و سپس باعث می‌شود سطح تله یک چاهک بسیار مؤثری برای بین‌نشین‌ها از جاهای خالی باشد. گرایش‌ها برای تله با Y_{v} و Y_{i} نشان داده می‌شوند (بریل فورد[1] و بلوگ[2] [۸] و اولاندر[3] [۳] تحلیل‌های بسیار دقیقی از عامل‌های گرایش فراهم کرده‌اند)، و سرعت‌های جذب جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در تله‌ها به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{CP}} = 4\pi R_{\mathrm{CP}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} \rho_{\mathrm{CP}} Y_{\mathrm{v}} = K_{\mathrm{vCP}} C_{\mathrm{v}} \rho_{\mathrm{CP}}$$
$$A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{CP}} = 4\pi R_{\mathrm{CP}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} \rho_{\mathrm{CP}} Y_{\mathrm{i}} = K_{\mathrm{iCP}} C_{\mathrm{i}} \rho_{\mathrm{CP}} \,. \qquad (۱۱۴-۵)$$

اگر در تله‌ها هیچ‌گونه انباشتگی حالت پایداری از عیوب وجود نداشته باشد، هیچ‌گونه شار ماده‌ای به چاهک‌ها یا از چاهک‌ها وجود نخواهد داشت و:

1. Brailsford
2. Bullough
3. Olander

$$4\pi R_{CP}\rho_{CP}C_v Y_v = 4\pi R_{CP}\rho_{CP}C_i Y_i \ , \tag{۱۱۵-۵}$$

بنابراین

$$Y_i = \frac{D_v C_v}{D_i C_i} Y_v \ , \tag{۱۱۶-۵}$$

و ثابت‌های سرعتی و شدت‌های چاهک برابر هستند با:

$$K_{vCP} = 4\pi R_{CP} D_v Y_v \ ; \quad k^2_{vCP} = 4\pi R_{CP}\rho_{CP} Y_v \tag{۱۱۷-۵}$$
$$K_{iCP} = 4\pi R_{CP} D_i Y_i \ ; \quad k^2_{iCP} = 4\pi R_{CP}\rho_{CP} Y_i \ .$$

در نتیجه چاهک‌های گرایش متغیر نقش جالبی ایفا می‌کنند به گونه‌ای که آن‌ها ترجیهشان را برای عیوب نقطه‌ای در پاسخ به شدت‌های نسبی چاهک در حجم تنظیم می‌کنند.
ثابت‌های سرعت واکنش برای واکنش‌های مختلف در جدول ۵-۲ برای هم‌کنش‌های مختلف عیب ـ عیب و عیب ـ چاهک به صورت خلاصه آورده شده است.

جدول ۵-۲. ثابت‌های سرعت واکنش برای واکنش‌های مختلف عیب ـ چاهک.

واکنش	ثابت سرعتی	شدت چاهک	معادله
v + v	$K_{2v} = \frac{z_{2v}\Omega D_v}{a^2}$	–	Eq. (5.55)
i + i	$K_{2i} = \frac{z_{2i}\Omega D_i}{a^2}$	–	Eq. (5.55)
v + i	$K_{iv} = \frac{z_{iv}\Omega D_i}{a^2}$	–	Eq. (5.58)
حفره + V,i			
واکنش کنترلی سرعتی	$K_{vV} = \frac{4\pi R^2 D_v}{a}$ $K_{iV} = \frac{4\pi R^2 D_i}{a}$	$k_V^2 = \frac{4\pi R^2 \rho_V}{a}$	Eq. (5.62)
کنترل نفوذی	$= 4\pi R D_v$ $= 4\pi R D_i$	$= 4\pi R \rho_V$	Eq. (5.81)
کنترل سرعتی ترکیبی	$= \frac{4\pi R D_v}{1+\frac{a}{R}}$ $= \frac{4\pi R D_i}{1+\frac{a}{R}}$	$= \frac{4\pi R \rho_V}{1+\frac{a}{R}}$	Eq. (5.99)
نابجایی + V,i			
کنترل نفوذی	$K_{vd} = \frac{2\pi D_v}{\ln(\mathcal{R}/R_{vd})}$ $K_{id} = \frac{2\pi D_i}{\ln(\mathcal{R}/R_{id})}$	$k_{vd}^2 = \frac{2\pi \rho_d}{\ln(\mathcal{R}/R_{vd})}$ $k_{id}^2 = \frac{2\pi \rho_d}{\ln(\mathcal{R}/R_{id})}$	Eqs. (5.96), (5.97)
واکنش کنترلی سرعتی	$= z_{vd} D_v$ $= z_{id} D_i$	$= z_{vd}\rho_d$ $= z_{id}\rho_d$	Eq. (5.64)
کنترل سرعتی ترکیبی	$= \frac{D_v}{\frac{1}{z_{vd}} + \frac{\ln(\mathcal{R}/R_{vd})}{2\pi}}$ $= \frac{D_i}{\frac{1}{z_{id}} + \frac{\ln(\mathcal{R}/R_{id})}{2\pi}}$	$= \frac{\rho_d}{\frac{1}{z_{vd}} + \frac{\ln(\mathcal{R}/R_{vd})}{2\pi}}$ $= \frac{\rho_d}{\frac{1}{z_{id}} + \frac{\ln(\mathcal{R}/R_{id})}{2\pi}}$	Eq. (5.101)
مرزدانه + V,i			
کنترل نفوذی	$k_{vgb} = \frac{2}{3} D_v d^4$ $k_{igb} = \frac{2}{3} D_i d^4$	$k_{gb}^2 = 24/d^2, d < 10^{-3}\,\text{cm}$	Eq. (5.112)
	$K_{vgb} = 6k D_v d^5$ $K_{igb} = 6k D_i d^5$	$k_{gb}^2 = 6k/d, d > 10^{-3}\,\text{cm}$	Eq. (5.113)
رسوبات هم‌بسته + V,i	$K_{vCP} = 4\pi R_{CP} D_v Y_v,$ $K_{iCP} = 4\pi R_{CP} D_i Y_i$	$k_{vCP}^2 = 4\pi R_{CP}\rho_{CP} Y_v,$ $k_{iCP}^2 = 4\pi R_{CP}\rho_{CP} Y_i$	Eq. (5.117)

نام‌گذاری اصطلاحات

A: نرخ جریان عیوب به چاهک

a: ثابت شبکه، شعاع دانه

C: غلظت

C_{iv}: غلظت بین‌نشین، جای خالی

C_R: غلظت جای خالی در مرز حفره

C_s: غلظت چاهک

D: قطر دانه

D_{rad}: ضریب نفوذ افزایشی تابشی

D_{th}: ضریب نفوذ حرارتی

D_m: ضریب نفوذ اختلاط حرکتی

D_0^y: ضریب پیش‌نمایی در ضریب نفوذ از طریق y

D_x^y: ضریب نفوذ برای گونه‌های x از طریق y

E_m^y: انرژی مهاجرت عیب y

f: ضریب هم‌بستگی

i: نماد بین‌نشین

v: نماد جای خالی

s: نماد چاهک

J_x: شار اتم یا عیب x در طول صفحه‌ی نشان‌گر

k: ثابت بولتزمان

k_x^2: شدت چاهک از چاهک X

K_0: نرخ تولید عیب

K_{gb}: ثابت سرعتی برای واکنش عیب ـ مرزدانه

K_{id}: ثابت سرعتی برای واکنش بین‌نشین ـ نابجایی

K_{iv}: ثابت سرعت بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشینی

K_{is}: ثابت سرعت واکنش بین‌نشین ـ چاهک

K_{vd}: ثابت سرعتی برای واکنش جای خالی ـ نابجایی

K_{vs}: ثابت سرعت واکنش جای خالی ـ چاهک

K_{2v}: ثابت سرعت تولید جای خالی دوتایی

N: کسر اتمی

r_{iv}: شعاع بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشین

r_{is}: شعاع بازترکیبی بین‌نشین ـ چاهک

r_{vs}: شعاع بازترکیبی جای خالی ـ چاهک

p: احتمال نابودسازی چاهک

P_{2v}: احتمال تشکیل مجدد جای خالی دوتایی

P_x: احتمال/ احتمال مجددی که یک جای خالی به یک همسایه‌ی نزدیک به یک جای خالی پرش کند

R_d: شعاع هسته نابجایی

R_{id}: سرعت واکنش میان بین‌نشین‌ها و نابجایی‌ها

R_{vd}: سرعت واکنش میان جاهای خالی و نابجایی‌ها

R_{2v}: سرعت تشکیل جای خالی دوتایی

R: شعاع سلول واحد یا حجم به دام‌اندازی پیرامون یک چاهک کروی

t: زمان

T: دما

T_c: دمای بحرانی تعریف شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۵–۴۷

v_2: نماد جای خالی دوتایی

z_{gb}: شدت چاهک برای یک مرزدانه‌ی ویژه

z_{xy}: عدد ترکیبی برای یک واکنش میان x و y

ϕ: شار ذره

ρ_d: دانسیته‌ی نابجایی

η : مقدار ثابت تعریف شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۵–۴۵

σ_s: سطح مقطع پراکنش میکروسکوپی

τ_x: ثابت زمانی برای فرایند x

ω : فرکانس پرش

Ω : حجم اتمی

ξ : عبارت بازده تولید

زیرنویس‌ها

a : اتم‌ها

CP : رسوبات هم‌دوست

d : نابجایی

gb : مرزدانه

i, v : جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

m : مهاجرت

rad : تحت پرتودهی

R : شعاع حفره

s : چاهک

V : حفره

بالا نویس‌ها

i, v : جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

مسایل

۵-۱ افزایش غلظت عیب نقطه‌ای در طول پرتودهی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\frac{dC_v}{dt} = K_0 - K_{iv}C_iC_v - K_{vs}C_vC_s + \nabla\cdot(D_v\nabla C_v)$$
$$\frac{dC_i}{dt} = K_0 - K_{iv}C_iC_v - K_{is}C_iC_s + \nabla\cdot(D_i\nabla C_i)$$

اگر شما یک تک بلور بدون عیبی را پرتودهی کنید، این معادلات چگونه ساده می‌شوند؟ در این مورد، رابطه‌ی میان غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها چیست؟ اگر شما فرایند را با نمونه‌ای که حاوی عیب باشد شروع کنید، آیا غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها متفاوت می‌شود؟

۵-۲ برای نیکل پرتو دهی شده در ^{o}C ۵۰۰:

الف) غلظت حالت پایدار جاهای خالی و بین‌نشین‌ها را محاسبه کنید.

$$K_0 = 5\times10^{-4}\,\text{dpa/s} \qquad \Delta H_m^v = 0.82\,\text{eV}$$
$$C_s = 10^9\,\text{cm}^{-3} \qquad \Delta H_m^i = 0.12\,\text{eV}$$
$$r_{iv} = r_{is} = r_{vs} = 10a \qquad \Delta S_m^v = \Delta S_m^i = 0$$
$$\nu = 10^{13}\,\text{s}^{-1}$$

ب) برای چگالی نابجایی ^{12}۱۰cm^{-2}، دمایی را تعیین کنیدکه در آن بازترکیبی متقابل راهی برای بازپخت در چاهک‌های ثابت فراهم می‌کند.

۵-۳ یک سیم تک بلور بدون نقص مسی (استوانه‌ای) با شعاع R = ۱۰ nm و طول $L \gg R$ در دمای ۴۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد تحت پرتودهی قرار می‌گیرد. فقط چاهک برروی سطح وجود دارد.

الف) با فرض بازترکیبی قابل چشم‌پوشی، معادله‌ی نفوذی

$$\frac{\partial C_x}{\partial t} = K_0 + D_x\nabla^2 C_x$$

را در حالت پایدار برای x = بین‌نشین یا جای خالی، برای به‌دست آوردن سطح مقطع‌های غلظت بین‌نشین و جای خالی حل کنید. چه شرایط مرزی را در سطح مورد استفاده قرار داده‌اید؟ هنگامی که معادله را حل می‌کنید، به تقارن مسئله برای حذف عبارات در بیان $\nabla^2 C_x$ دقت فرمایید.

ب) سرعت‌های جذب (تعداد عیوب در واحد مساحت و زمان) در سطح را محاسبه کنید (نکته: به یاد داشته باشید که $\nabla^2 C_x$ پیوسته است).

۵-۴ ضریب افزایش نفوذ تابشی حالت پایدار را برای مس در T/T_m = ۰٫۵ برحسب K_0، نرخ تولید عیب، و ρ_d چگالی چاهک نابجایی محاسبه کنید.

۵-۵ فرض کنید که برای یک فلز مشخص شعاع واکنش بین‌نشین ـ چاهک و شعاع واکنش جای خالی ـ چاهک برابر باشد. دو پرتودهی در چگالی چاهک پایین لیکن نه قابل چشم‌پوشی انجام می‌شوند. نرخ جابه‌جایی برای هر دو پرتودهی مشابه است. در پرتودهی دوم، یک افزودنی آلیاژی کوچک، ضریب نفوذ بین‌نشین‌ها را دو برابر می‌کند لیکن ضریب نفوذ جاهای خالی را تغییر نمی‌دهد. با چه نسبتی غلظت حالت پایدار جاهای خالی به بین‌نشین‌ها تغییر می‌کند؟ به صورت فیزیکی توضیح دهید که چه اتفاقی برای عیوب نقطه‌ای رخ می‌دهد؟

۵-۶ نمونه‌ی آلومینیومی در دمای اتاق نگاه داشته شده و با یک پرتو تک انرژی از نوترون‌هایی با انرژی ۱ MeV با یک شار 10^{14} n/cm^2s پرتودهی می‌شود. فرض کنید که همه‌ی شعاع‌های به دام‌اندازی $r_{iv} = r_{is} = r_{vs}$ تماماً تقریباً برابر $10a$ است.

الف) در چه چگالی چاهکی اثر نابودسازی در چاهک‌ها بر بازترکیبی غلبه می‌کند؟

ب) مقدار ضریب افزایش نفوذ تابشی حالت پایدار اتم‌های آلومینیوم چه‌قدر است؟ چگونه این مقدار با ضریب نفوذ در غیاب پرتودهی مقایسه می‌شود؟

ج) بررسی کنید که محاسبات شما در بخش (ب) آیا حقیقتاً شرط حالت پایدار یا به عبارت دیگر $dC_v/dt = dC_i/dt = 0$ را نشان می‌دهد.

۵-۷ یک بلور آلومینیوم بدون عیب با نرخ جابه‌جایی 10^{-5} dpa/s پرتودهی می‌شود.

الف) غلظت حالت پایدار عیوب نقطه‌ای در دمای ۱۰۰ و ۵۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد را محاسبه کنید.

ب) زمانی که حالت پایدار فرامی‌رسد پرتودهی متوقف می‌شود. ثابت زمانی برای بازترکیبی را به صورت تابعی از دما محاسبه کنید.

ج) فردی می‌خواهد که غلظت عیوب در Al پرتودهی شده‌ی، یک فرایند مفروضی را محاسبه کند که ۱۰۰s زمان می‌برد. برای حفظ غلظت عیوب در حدود ۱ درصد از مقدار آن در پایان پرتودهی در طول این مدت زمانی چه محدوده‌ی دمایی لازم است. فرض کنید که ضریب ترکیبی Z = ۵۰۰ باشد.

۵-۸ با پیگیری تحلیل برای سرعت نفوذ عیوب نقطه‌ای به چاهک‌های کروی، عبارتی را برای سطح مقطع غلظت جای خالی در اطراف یک نابجایی استخراج کنید. نرخ به دام‌اندازی جای خالی به وسیله‌ی نابجایی‌ها چه‌قدر است؟

۵-۹ برای نیکل fcc، تعیین کنید که آیا به دام‌اندازی جای خالی فرایند کنترل شده‌ی سرعتی یا کنترل شده‌ی نفوذی است. در مورد به دام‌اندازی بین‌نشین‌ها کدام فرایند کنترل کننده است؟

z_d = مساحتی از ناحیه‌ی مدور در اطراف نابجایی (تعریف شده به عنوان شعاع به دام‌اندازی) تقسیم بر تعداد اتم‌ها در واحد مساحت

r_{vd} = شعاع به دام‌اندازی برای جای خالی = ۰٫۶ nm

r_{id} = شعاع به دام‌اندازی برای بین‌نشین‌ها = ۰٫۷ nm

۵-۱۰ مشاهده شده است که ثابت زمانی (مشخصه‌ی زمانی) برای فرایند $v + s \longrightarrow s$ برابر با $t_3 = (K_{vs}C_s)^{-1}$ است. در دماهای به اندازه‌ی کافی بالا، جاهای خالی ممکن است به اندازه‌ی کافی متحرک باشند در نتیجه ممکن است که واکنش $v + v \longrightarrow v_2$ افزایش در غلظت جاهای خالی با زمان را محدود کند. اگر نرخ مصرف جاهای خالی در تشکیل جاهای خالی دوتایی $K_{vv}C_v^2$ باشد، ثابت زمانی برای آغاز حالت پایدار را تعیین کنید.

۵-۱۱ یک نمونه مسی fcc با یک چگالی چاهک پایین ($\tau_1 < \tau_2$) در دمای پایین (T/T_m = ۰٫۳) تا رسیدن به حالت پایدار پرتودهی می‌شود. اندک زمانی بعد، تمام چاهک‌ها فوراً ناپدید می‌شوند و به یک حالت پایدار جدید می‌رسند. بزرگی تغییر در C_v و C_i را بین دو حالت پایدار تعیین کنید.

۵-۱۲ دلیل مشاهدات زیر (یا دلایل احتمالی) را توضیح دهید:

الف) نرخ جابه‌جایی در سطح نمونه‌ی مسی هنگامی که با یون های Cu^+ با انرژی ۱ MeV پرتودهی می‌شود، ۱۰۰۰ برابر بیش‌تر از زمانی است که با پروتون‌هایی با انرژی ۱ MeV و در شار مشابه پرتودهی می‌شود.

ب) یک آزمایش پراکنش با استفاده از یون‌های B^+ با انرژی MeV ۳ برروی مس نتایجی را به بار می‌آورد که در عدم توافق کامل با محاسبات انجام شده با استفاده از فرمول پراکنش رادرفورد است. چرا؟

ج) یک تک بلور مسی با یون‌های He^+ با انرژی MeV ۲ پرتودهی می‌شود و راندمان پراکنش فقط ۵٪ یک چند بلور است.

د) پرتودهی یک فلز با شار نوترونی بالا یک افزایش قابل اندازه‌گیری را در ضریب نفوذ اتمی ایجاد نمی‌کند.

ه) دو فلز به یک‌دیگر پرس شده و تا دمای $0.5\ T_m$ حرارت‌دهی می‌شوند. مشاهده می‌شود که اتم‌های فلزات در سطح در یک‌دیگر اختلاط می‌کنند. تلاش‌ها برای تعیین عیوب مسئول برای اختلاط درونی مشخص می‌کند که جاهای خالی دلیل ۱۰۰٪ اختلاط اتمی هستند. این عبارت درست است یا غلط؟ چرا؟

۵-۱۳ دو مهندس روی آن‌که چگونه اثر غلظت بالای عیوب نقطه‌ای در طول پرتودهی روی نرخ تغییر شکل نیکل در دمای $500\ ^oC$ تأثیرگذار است، بحث می‌کنند. مهندس شماره (۱) عقیده دارد که یک نفر می‌تواند نمونه را تا یک جریان مناسب در یک دمای دلخواه پرتودهی کند و آرام از رآکتور بیرون آورده و آن را تا دمای انجام تست سرد کند. مهندس شماره (۲) اصرار دارد که غلظت عیوب نقطه‌ای تقریباً بسیار سریع بعد از پرتودهی نمونه کاهش می‌یابد و بنابراین تست باید به صورت درجا انجام شود. کدام یک درست می‌گویند؟ چرا؟

(نکته: توجه کنید که معادله‌ی عیوب نقطه‌ای برای عیوب آرام‌تر (جای خالی) فقط بازترکیبی را نادیده می‌گیرد و توجه کنید که تنها چاهک‌های حاضر، نابجایی‌ها در یک غلظت $10^9\ cm^{-2}$ هستند).

$$D_v^{Ni}(500\,^\circ C) \sim 10^{-8}\,cm^2/s$$
$$a \sim 0.3\,nm$$

۵-۱۴ فرض کنید که جامدی حاوی چاهک‌های عیب در دمای T_0 پرتودهی شود که در آن فقط جاهای خالی متحرک هستند.

الف) برای مورد چگالی چاهک بالا، زمان t_1 را تخمین بزنید که در آن چاهک‌ها در نابودسازی جاهای خالی سهیم هستند. بازترکیبی را نادیده بگیرید.

ب) برای مورد چگالی چاهک پایین، زمان t_2 را تخمین بزنید که در آن بازترکیبی در نابودسازی جاهای خالی سهیم است. اثر چاهک‌ها را نادیده بگیرید.

ج) توضیح دهید که چه تغییراتی می‌تواند در فرایند پرتودهی یا ریزساختار مواد تا جریان $t_1 = t_2$ ایجاد شود.

فرض کنید که شرایط شبه پایدار در آغاز t_1 در بخش (الف) و در t_2 در بخش (ب) وجود دارد.

۵-۱۵ نشان دهید برای یک فلز با چگالی چاهک پایین، که پرتودهی نوترونی در دمای پایین ($T/T_m < ۰/۲$) را متحمل می‌شود، هنگامی که چاهک‌ها در نابودسازی بین‌نشین‌ها سهیم می‌شوند، غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به صورت تابعی از زمان می‌تواند به صورت معادله‌ی ۵-۱۱ و به فرم زیر نوشته شود:

$$C_v = (K_0 K_{is} C_s t / K_{iv})^{1/2}$$
$$C_i = (K_0 / K_{iv} K_{is} C_s t)^{1/2}$$

(نکته: در نظر بگیرید که این مورد یک متوسطی از حالت شبه پایدار و حالت پایدار باشد به گونه‌ای که $dC_i/dt < 0$ و $dC_v/dt > 0$ است و معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای را به صورت نابرابری بنویسید.)

۵-۱۶ دو نمونه‌ی دولایه‌ای با یک شدت چاهک پایین در دماهای پایین به عنوان بخشی از آزمایش نفوذ افزایشی تابشی، پرتودهی می‌شوند. اگر نرخ جابه‌جایی نمونه‌ی دوم ۵ برابر نمونه‌ی اول باشد، تفاوت در ضریب نفوذ افزایش یافته در اثر تابش چیست؟

مراجع

1. Rothman SJ (1983) Effects of irradiation and diffusion in metals and alloys. In: Nolfi FV (ed) Phase Transformations During Irradiation. Applied Science, New York, pp 189–211.
2. Sizemann R (1978) J Nucl Mater 69/70:386–412.
3. Olander DR (1976) Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements, TID-
4. 26711-P1. Technical Information Service, Springfield, VA.
5. Lam NQ (1975) J Nucl Mater 56:125–135.
6. Wiedersich H (1986) In: Johnson RA, Orlov AN (eds) Physics of Radiation Effects in
7. Crystals. Elsevier Science, New York, p 237.
8. Matteson S, Roth J, Nicolet M (1979) Rad Eff 42:217–226.
9. Heald PT, Harbottle JE (1977) J Nucl Mater 67:229–233.
10. Brailsford AD, Bullough R (1972) J Nucl Mater 44:121–135.

بخش ۲

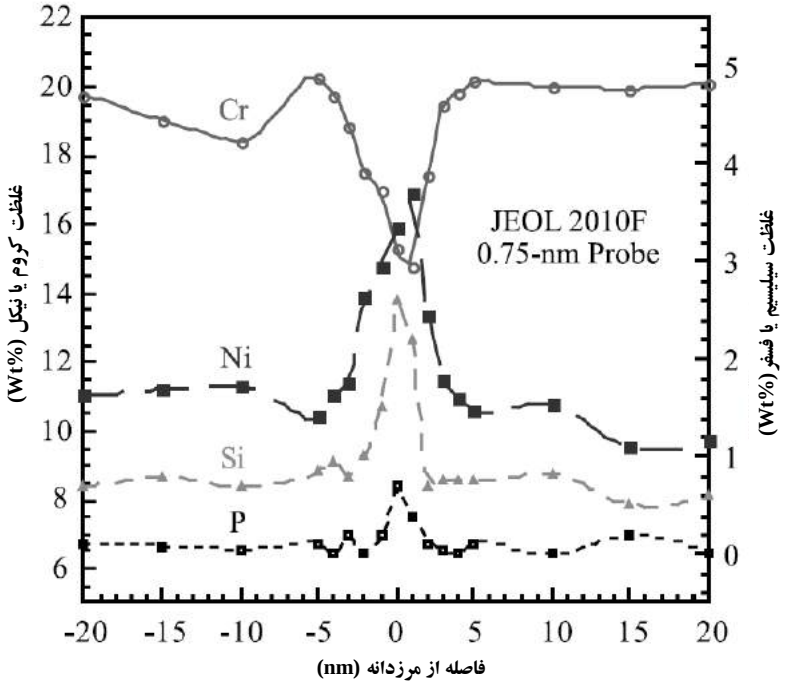
اثرات فیزیکی آسیب تابشی

۶

جدایش القایی تابشی

نتیجه‌ی بسیار حایز اهمیت در مورد پرتودهی در دماهای بالا باز توزیع فضایی عناصر حل شده و ناخالصی‌ها در فلز است. این پدیده منجر به غنی شدن یا تهی شدن عناصر آلیاژی در نواحی نزدیک به سطح، نابجایی‌ها، حفره‌ها، مرزدانه‌ها و مرزهای فازی می‌شود. شکل ۶-۱ نموداری از سطح مقطع عناصر حل شده در طول یک مرزدانه در فولاد زنگ نزن پرتودهی شده در یک رآکتور با مقدار مجازی برابر با چندین dpa در دمای در حدود $۳۰۰^{o}C$ را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که تهی‌شدگی قابل توجهی از کروم، مولیبدن و آهن و غنی‌شدگی از نیکل و سیلیکون وجود دارد. چنین تغییرات مؤثری در مرزدانه، تغییراتی را در ویژگی‌های موضعی جامد ایجاد خواهد کرد و ممکن است امکان رخداد برای گروهی از فرایندهایی را فراهم کند که می‌توانند یک‌پارچگی ترکیب را کاهش دهند. به همین دلیل فهم جدایش القایی تابشی[1] برای عملکرد رآکتورها بسیار حایز اهمیت است.

1. Radiation-Induced Segregation (RIS)

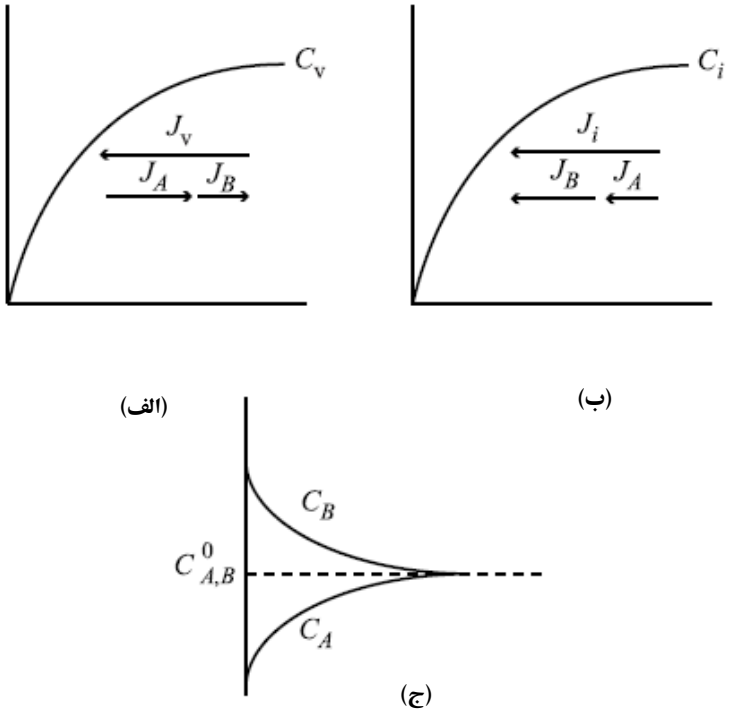


شکل۶-۱. جدایش القایی تابشی کروم، نیکل، سیلیسیم و فسفر در مرزدانه در فولاد زنگ نزن سری ۳۰۰ در قلب رآکتور آب سبک با چندین dpa در دمای تقریبی $300^{o}C$ [۱].

آنتونی[1] در سال ۱۹۷۲ [۲] و سپس اوکاماتو و ویدرسیچ[2] در سال ۱۹۷۳ [۳] مشاهده کردند که منشأ جدایش القایی تابشی در تزویج شارهای عیب و شارهای عناصر آلیاژی است. پرتودهی، عیوب نقطه‌ای و خوشه‌های عیوب با توزیع و پراکندگی تقریباً تصادفی را در سراسر ماده ایجاد می‌کند. عیوبی که متحرک هستند و از بازترکیبی فرار کرده‌اند به داخل ساختار بلوری در نابجایی‌ها، مرزدانه‌ها و دیگر چاهک‌های عیوب ملحق می‌شوند. همان‌طوری که در فصل ۵ توضیح داده شد، عیوب نقطه‌ای به چاهک‌های مجزای فضایی جریان می‌یابند. از آن‌جایی که حرکت اتم‌ها منجر به حرکت عیوب می‌شود، شارهای اتمی وابسته به شارهای عیوب هستند. هرگونه پیوستگی ترجیحی عیوب با جزء آلیاژی مشخص و/ یا شرکت ترجیحی یک جزء در نفوذ عیب، یک شار خالص از عناصر آلیاژی را

1. Anthony
2. Okamoto and Weidersich

به شارهای عیوب پیوند می‌دهد. شاری از یک عنصر منجر به افزایش یا کاهش آن در پیرامون چاهک‌های عیوب می‌شود و بنابراین شیب‌های غلظتی را در فازهای آلیاژی ایجاد می‌کند که در ابتدا همگن بوده‌اند. شیب‌های غلظتی نفوذ معکوس عناصر جدایش یافته را القاء می‌کنند و حالت شبه پایداری را درطول پرتودهی تا زمانی که شارهای عیوب تحریک شده به وسیله‌ی عناصر آلیاژی به وسیله‌ی نفوذ معکوس تحریک شده به وسیله‌ی نفوذ متعادل شوند، تنظیم خواهد کرد.



شکل۶-۲. شماتیکی از جدایش القایی تابشی در سیستم دوتایی ۵۰٪B - ۵۰٪A که نشان می‌دهد که (الف) گسترش سطح مقطع غلظت جای خالی با جریانی از جاهای خالی به مرزدانه‌ها با یک جریان برابر ولی در خلاف جهت اتم‌های A و B و نه ضرورتاً در تعداد برابر بالانس شده است، (ب) گسترش سطح مقطع غلظت بین‌نشینی با جریانی از بین‌نشین‌ها به مرزدانه‌ها به وسیله‌ی یک جریان برابر و در جهت اتم‌های مهاجرت کننده A و B به عنوان بین‌نشین‌ها اما نه ضرورتاً در تعداد برابر، متعادل شده است، (ج) سطح مقطع‌های غلظتی نتیجه شده از A و B.

شکل ۶-۲ شماتیکی از فرایندهای محرک جدایش در یک آلیاژ دوتایی ٪۵۰B - ٪۵۰A و تحت پرتودهی در یک دمای بالا را نشان می‌دهد. همان‌طوری که در فصل ۵ توضیح داده شد، جریان جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به مرزدانه‌ها منجر به گسترش سطح مقطع غلظتی می‌شود. در مورد جاهای خالی (شکل ۶-۲ الف) شار جاهای خالی به مرزدانه‌ها با یک شار برابر از اتم‌ها در جهت مخالف متعادل می‌شود. به هر جهت، اگر سهم اتم‌های A در شار جای خالی بزرگ‌تر از کسر اتمی در آلیاژ باشد (و بنابراین سهم اتم‌های B کمتر باشد)، در نتیجه اتلاف خالصی از اتم‌های A و افزایش خالصی از اتم‌های B در مرزدانه‌ها وجود خواهد داشت که افزایشی را در شیب‌های غلظتی همان‌طوری که در شکل ۶-۲ج نشان داده شده است، نتیجه خواهد داد. با در نظر گرفتن بین‌نشین‌ها، شار آن‌ها به مرزدانه‌ها نیز یک شاری از اتم‌های A و B را ایجاد خواهد کرد. اگر سهم اتم‌های B در شار بین‌نشینی از کسر اتمی در آلیاژ بیش‌تر باشد (و ضرورتاً سهم اتم‌های A در شار نسبت به کسر اتمی کم‌تر است)، در نتیجه یک افزایش خالصی در اتم‌های B وجود خواهد داشت و یک کاهش خالص برابر نیز در اتم‌های A نتیجه خواهد شد. این فرایندها در شکل ۶-۲ب نشان داده شده است. این مثال نشان می‌دهد که هم جریان بین‌نشین‌ها و هم جاهای خالی به مرزدانه‌ها می‌تواند منجر به یک انباشت خالصی از یک عنصر آلیاژی و تهی‌سازی عنصر آلیاژی دیگر شود. این‌که عنصر A در زمان وجود هر دو فرایند غنی یا تهی شود، به شدت‌های نسبی ارتباط اتمی با شارهای عیب مربوطه وابسته است.

در این فصل روی جدایش القایی تابشی در سیستم‌های آلیاژی دوتایی و سه‌تایی غنی شده تمرکز خواهد شد و وابستگی جدایش القایی تابشی به دما، دوز و نرخ دوز بررسی خواهد شد.

۶-۱ جدایش القایی تابشی در آلیاژهای دوتایی غنی شده

برای تشخیص آلیاژ غلیظ شده از آلیاژ رقیق، فرض خواهد شد که آلیاژ غلیظ شده، آلیاژی است که در آن غلظت عنصر حل شده‌ی جانشینی بالاتر از چند درصد باشد. مدل جدایشی که در ادامه تشریح خواهد شد، برای توضیح سیستم‌های آلیاژی با تفاوت‌های قابل توجه در اندازه‌ی اتمی، شامل محدوده‌ای که در آن اجزای ریز اندازه در محلول رقیق موجود باشند، نیز مفید است.

مدلی برای جدایش ماده‌ی حل شده به وسیله‌ی ویدرسیچ[1] [۴] به صورتی که در ادامه آورده شده است، گسترش یافته است. یک محلول جامد دوتایی از عناصر A و B را در نظر بگیرید که به صورت

1. Wiedersich

تصادفی در سراسر یک جامد توزیع شده‌اند. به علت پرتودهی، غلظت‌های جاهای خالی و بین‌نشین‌ها با زمان و مطابق با معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای تغییر می‌یابد:

(۱-۶)

$$\frac{\partial C_{\mathrm{v}}}{\partial t} = -\nabla J_{\mathrm{v}} + K_0 - R$$
$$\frac{\partial C_{\mathrm{i}}}{\partial t} = -\nabla J_{\mathrm{i}} + K_0 - R\,,$$

که در این رابطه $-\nabla J_{\mathrm{v}}$ و $-\nabla J_{\mathrm{i}}$ به ترتیب انحراف شارهای جای خالی و بین‌نشین است و K_0 نرخ تولید جفت‌های فرانکل و $R = K_{\mathrm{iv}} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{v}}$ نرخ بازترکیبی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها است. لازم به ذکر است که برای سادگی علامت بردار حذف شده و در نتیجه لازم است که خط سیر جهت حفظ شود. معادله‌ی ۶-۱ در غیاب چاهک‌ها و به همراه عبارت‌های مربوط به شیب غلظتی مشابه با معادله‌ی ۵-۱ هستند. معادله‌های بقا برای عناصر آلیاژی A و B عبارتند از:

(۲-۶)

$$\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial t} = -\nabla J_{\mathrm{A}}$$
$$\frac{\partial C_{\mathrm{B}}}{\partial t} = -\nabla J_{\mathrm{B}}\,.$$

شارهای عیوب و اتم‌ها در معادله‌های ۶-۱ و ۶-۲ از نیروهای ناشی از شیب‌های پتانسیل شیمیایی ناشی می‌شوند. در حقیقت معادله‌ها باید برای پتانسیل شیمیایی حل شوند؛ اما برای سادگی روابط بین شارها و شیب‌های غلظتی مورد استفاده قرار خواهند گرفت. ارتباط بین شارهای اتمی و عیب برپایه‌ی مدل‌های فیزیکی ساده است. لازم به ذکر است که در مورد بمباران خود یونی[1]، یک عبارت تولید که ناشی از غلظت عناصر کاشته شده است نیز در نظر گرفته خواهد شد.

فرض می‌شود که تحرک‌های نفوذی اتم‌های A و B فقط به وسیله‌ی جای خالی و به وسیله‌ی پرش‌های بین‌نشینی رخ می‌دهد. یک ارتباط مهم بین شارهای اتم و عیوب به این صورت است که

1. Self-ion bombardment

یک شاری از بین‌نشین‌ها، یک شاری از اتم‌های A و B را در اندازه و جهت برابر با بین‌نشین‌ها در سراسر هر صفحه‌ی ثابت یا صفحه‌ی نشان‌گر تحریک می‌کند:

(۳-۶)

$$J_{\mathrm{i}} = J_{\mathrm{A}}^{\mathrm{i}} + J_{\mathrm{B}}^{\mathrm{i}} ,$$

و به صورت مشابه یک شاری از جاهای خالی، شاری از اتم‌های A و B را در اندازه‌ی برابر ولی در جهت مخالف به حرکت در آورده و از صفحه‌ی نشان‌گر عبور می‌دهد:

(۴-۶)

$$J_{\mathrm{v}} = -\left(J_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} + J_{\mathrm{B}}^{\mathrm{v}}\right) .$$

در معادله‌های ۶-۳ و ۶-۴ و در نمادهای فرعی، زیر نویس‌ها گونه‌های شار مورد بررسی را مشخص می‌کنند و بالانویس‌ها گونه‌های مکملی را نشان می‌دهند که به وسیله‌ی آن‌ها شار ایجاد شده است. در کل تقسیم‌بندی شارهای جای خالی و بین‌نشین‌ها از طریق اتم‌های A و B در نسبت‌های مشابه با کسرهای اتمی در آلیاژ، N_{A}، N_{B} نخواهد بود. یعنی جاهای خالی ممکن است به صورت ترجیحی از طریق اتم‌های B و بین‌نشین‌ها از طریق اتم‌های A، هم‌چنان که قبلاً توضیح داده شد و در شکل ۶-۲ نشان داده شده است، مهاجرت کنند.

شارهای اتم‌ها و عیوب می‌تواند برحسب شیب غلظتی گونه‌های متفاوت به وسیله‌ی ضریب نفوذ جزیی بیان شوند:

(۵-۶)

$$D_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} = \frac{1}{6}\lambda_{\mathrm{v}}^{2} z_{\mathrm{v}} N_{\mathrm{v}} \omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} f_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} ,$$

که $\omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}}$ بسامد پرشی است که با آن اتم A موقعیتش را با یک جای خالی در یک موقعیت مشخص همسایه عوض می‌کند و N_{v} کسر اتمی جاهای خالی، z_{v} تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها به اتم A و λ_{V}

فاصله‌ی پرش است. عبارت $f_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}}$ ضریب هم‌بستگی برای اتم‌های A مهاجرت کننده به وسیله‌ی جاهای خالی است که برای احتمال‌های بزرگ‌تر از احتمال تصادفی محاسبه می‌شودکه بعد از پرش ابتدایی، پرش‌های بعدی اتم A مؤلفه‌ی جابه‌جایی مخالف با پرش ابتدایی خواهد داشت. در آلیاژها f به شدت به ترکیب وابسته است و در ادامه به منظور سادگی نادیده گرفته می‌شود و می‌توان نوشت:

$$D_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} = \frac{1}{6}\lambda_{\mathrm{v}}^{2} z_{\mathrm{v}} N_{\mathrm{v}} \omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} , \qquad (۶-۶)$$

و ضریب نفوذ جزیی برای جاهای خالی از طریق اتم‌های A برابر است با:

$$D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{A}} = \frac{1}{6}\lambda_{\mathrm{v}}^{2} z_{\mathrm{v}} N_{\mathrm{v}} \omega_{\mathrm{v}}^{\mathrm{A}} . \qquad (۶-۷)$$

از آن‌جایی که هر بسامد پرش شامل تبادل یک جفت اتم A ـ جای خالی مشخص است، در نتیجه $\omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} = \omega_{\mathrm{v}}^{\mathrm{A}} (= \omega_{\mathrm{Av}})$ است. با ترکیب این عامل‌ها روی RHS معادله‌های ۶-۶ و ۶-۷، ضریب نفوذپذیری به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$d_{\mathrm{Av}} = \frac{1}{6}\lambda_{\mathrm{v}}^{2} z_{\mathrm{v}} \omega_{\mathrm{Av}} , \qquad (۶-۸)$$

در نتیجه:

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} &= d_{\mathrm{Av}} N_{\mathrm{v}} \\ D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{A}} &= d_{\mathrm{Av}} N_{\mathrm{A}} . \end{aligned} \qquad (۶-۹)$$

برای اتم‌های B معادلات تکمیلی عبارتند از:

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{B}}^{\mathrm{v}} &= d_{\mathrm{Bv}} N_{\mathrm{v}} \\ D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{B}} &= d_{\mathrm{Bv}} N_{\mathrm{B}} \end{aligned} \qquad (۶-۱۰)$$

با

$$d_{\mathrm{Bv}} = \frac{1}{6}\lambda_{\mathrm{v}}^2 z_{\mathrm{v}} \omega_{\mathrm{Bv}} \ , \tag{۱۱-۶}$$

که ω_{Bv} بسامد مؤثر پرش‌های تبادلی یک جفت اتم B ـ جای خالی است که شامل ضریب جهت محاسبه‌ی پیوندهای ممکن یا دافعه‌ی بین جاهای خالی و اتم‌های B است.

ضرایب نفوذ جزیی اتم‌های A و B از طریق بین‌نشین‌ها و بین‌نشین‌ها از طریق عناصر، به شرط آن‌که مهاجرت به وسیله‌ی سازوکار بین‌نشینی رخ دهد، مشابه هستند:

$$D_{\mathrm{A}}^{\mathrm{i}} = \frac{1}{6}\lambda_{\mathrm{i}}^2 z_{\mathrm{i}} N_{\mathrm{i}} \omega_{\mathrm{A}}^{\mathrm{i}} \ , \tag{۱۲-۶}$$

که مشابه معادله‌ی ۶-۶ است. به هر جهت، این حقیقت نادیده گرفته شده است که مهاجرت بین‌نشین‌ها بسیار پیچیده است زیرا در هر پرش بین‌نشینی به صورت قابل توجهی بیش‌تر از یک اتم حضور دارد. ضرایب نفوذ جزیی برای بین‌نشین‌ها عبارتند از:

$$D_{\mathrm{A}}^{\mathrm{i}} = d_{\mathrm{Ai}} N_{\mathrm{i}} \tag{۱۳-۶}$$
$$D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{A}} = d_{\mathrm{Ai}} N_{\mathrm{A}}$$

و

$$D_{\mathrm{B}}^{\mathrm{i}} = d_{\mathrm{Bi}} N_{\mathrm{i}} \tag{۱۴-۶}$$
$$D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{B}} = d_{\mathrm{Bi}} N_{\mathrm{B}} \ .$$

عبارت‌های d_{Ai} و d_{Bi} به سازوکار بینابینی وابسته خواهد بود و از معادله‌های ۶-۸ و ۶-۱۱ بسیار پیچیده‌تر خواهد بود. در نوشتن ضرایب نفوذ جزیی در فرم $D = dN$، فرض خواهد شد که وابستگی فضایی در فاکتور N قرار دارد درحالی‌که dها مستقل از ترکیب هستند.

میانگین یا ضرایب نفوذ کلی برای گونه‌های مختلف برابر است با:

(۱۵-۶)

$$D_{\mathrm{v}} = d_{\mathrm{Av}}N_{\mathrm{A}} + d_{\mathrm{Bv}}N_{\mathrm{B}}$$
$$D_{\mathrm{i}} = d_{\mathrm{Ai}}N_{\mathrm{A}} + d_{\mathrm{Bi}}N_{\mathrm{B}}$$

(۱۶-۶)

$$D_{\mathrm{A}} = d_{\mathrm{Av}}N_{\mathrm{v}} + d_{\mathrm{Ai}}N_{\mathrm{i}}$$
$$D_{\mathrm{B}} = d_{\mathrm{Bv}}N_{\mathrm{v}} + d_{\mathrm{Bi}}N_{\mathrm{i}}\ .$$

با استفاده از ضرایب نفوذ جزیی و کلی می‌توان شارهای اتمی و عیوب را با توجه به سیستم مختصات ثابت شده روی شبکه‌ی بلوری نوشت:

(۱۷-۶)

$$J_{\mathrm{A}} = -D_{\mathrm{A}}\chi\nabla\mathrm{C}_{\mathrm{A}} + d_{\mathrm{Av}}N_{\mathrm{A}}\nabla C_{\mathrm{v}} - d_{\mathrm{Ai}}N_{\mathrm{A}}\nabla C_{\mathrm{i}}$$
$$J_{\mathrm{B}} = -D_{\mathrm{B}}\chi\nabla\mathrm{C}_{\mathrm{B}} + d_{\mathrm{Bv}}N_{\mathrm{B}}\nabla C_{\mathrm{v}} - d_{\mathrm{Bi}}N_{\mathrm{B}}\nabla C_{\mathrm{i}}$$

(۱۸-۶)

$$\begin{aligned} J_{\mathrm{v}} &= d_{\mathrm{Av}}N_{\mathrm{v}}\chi\nabla C_{\mathrm{A}} + d_{\mathrm{Bv}}N_{\mathrm{v}}\chi\nabla C_{\mathrm{B}} - D_{\mathrm{v}}\nabla C_{\mathrm{v}} \\ &= (d_{\mathrm{Av}} - d_{\mathrm{Bv}})N_{\mathrm{v}}\chi\nabla C_{\mathrm{A}} - D_{\mathrm{v}}\nabla C_{\mathrm{v}} \\ J_{\mathrm{i}} &= -d_{\mathrm{Ai}}N_{\mathrm{i}}\chi\nabla C_{\mathrm{A}} - d_{\mathrm{Bi}}N_{\mathrm{i}}\chi\nabla C_{\mathrm{B}} - D_{\mathrm{i}}\nabla C_{\mathrm{i}} \\ &= -(d_{\mathrm{Ai}} - d_{\mathrm{Bi}})N_{\mathrm{i}}\chi\nabla C_{\mathrm{A}} - D_{\mathrm{i}}\nabla C_{\mathrm{i}} \end{aligned}$$

که $\chi = \left(1+\frac{\partial \ln\gamma_{\mathrm{A}}}{\partial \ln N_{\mathrm{A}}}\right) = \left(1+\frac{\partial \ln\gamma_{\mathrm{B}}}{\partial \ln N_{\mathrm{B}}}\right)$، برای تفاوت بین شیب پتانسیل شیمیایی (نیروی محرکه واقعی برای نفوذ اتم های A و B) و شیب غلظتی محاسبه می‌شود و γ_{A} و γ_{B} ضریب‌های فعالیت هستند. تساوی دوم در عبارت‌های موجود برای J_{v} و J_{i} به واسطه‌ی نادیده گرفتن آشفتگی کوچکِ ناشی از حضور عیوب به‌دست می‌آید در نتیجه $\nabla C_B = -\nabla C_A$ است. این تساوی به ترتیب اثر

کرکندال[1] از سازوکارهای جای خالی و بین‌نشینی را توصیف می‌کند. یعنی تفاوت در شارهای اتمی A و B در جهات مخالف بعد از صفحه‌ی نشان‌گر باید به وسیله‌ی شار عیب مناسب تکمیل شود.
از چهار معادله‌ی شار، معادله‌های ۶-۱۷ تا ۶-۱۸، فقط سه‌تا مستقل هستند زیرا شارهای اتمی و شارهای عیوب در سراسر صفحه‌ی نشان‌گر باید متعادل شوند:

(۶-۱۹)

$$J_{\mathrm{A}} + J_{\mathrm{B}} = -J_{\mathrm{v}} + J_{\mathrm{i}} \,.$$

برای به‌دست آوردن توزیع اتم‌ها و عیوب در زمان و فضا، مجموعه معادلات دیفرانسیلی جزیی دوتایی در معادله‌ی ۶-۱ باید برای شرایط ابتدایی و مرزی مناسب حل شود. با وارد کردن شارهای تعیین شده در معادله‌های ۶-۱۷ تا ۶-۱۹ در معادله ۶-۱ می‌توان نوشت:

(۶-۲۰)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial C_{\mathrm{v}}}{\partial t} &= \nabla\left[-\left(d_{\mathrm{Av}} - d_{\mathrm{Bv}}\right)\chi\Omega C_{\mathrm{v}}\nabla C_{\mathrm{A}} + D_{\mathrm{v}}\nabla C_{\mathrm{v}}\right] + K_0 - R \\
\frac{\partial C_{\mathrm{i}}}{\partial t} &= \nabla\left[\left(d_{\mathrm{Ai}} - d_{\mathrm{Bi}}\right)\chi\Omega C_{\mathrm{i}}\nabla C_{\mathrm{A}} + D_{\mathrm{i}}\nabla C_{\mathrm{i}}\right] + K_0 - R \\
\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial t} &= \nabla\left[D_{\mathrm{A}}\chi\nabla C_{\mathrm{A}} + \Omega C_{\mathrm{A}}\left(d_{\mathrm{Ai}}\nabla C_{\mathrm{i}} - d_{\mathrm{Av}}\nabla C_{\mathrm{v}}\right)\right] \,.
\end{aligned}$$

لازم به ذکر است که عبارات داخل کروشه فقط شارهای، J، گونه‌های مربوط به خود هستند. کسرهای اتمی، N مطابق با رابطه‌ی $N = \Omega C$ که در آن Ω حجم اتمی میانگین آلیاژ است، به صورت غلظت‌های حجمی تصحیح شده است. هنگامی که غلظت‌های کوچک عیب نادیده گرفته شوند معادله برای عنصر B برابر با $C_{\mathrm{B}} = 1 - C_{\mathrm{A}}$ است.
با فرض این‌که حالت پایدار حاصل شده باشد، می‌توان بعضی نتایج کیفی را در مورد معادلات شار در معادله‌های ۶-۱۷ تا ۶-۱۹ به‌دست آورد. از آن‌جایی که در حالت پایدار:

1. Kirkendall

(۶-۲۱)

$$J_{\mathrm{A}} = J_{\mathrm{B}} = 0\,,$$

و با نادیده گرفتن اثرات گرایش عیب در جامد می‌توان نوشت:

(۶-۲۲)

$$J_{\mathrm{i}} = J_{\mathrm{v}}\,,$$

نظر به این‌که جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در تعداد برابر تولید و بازترکیب می‌شوند. با حذف ∇C_i در رابطه برای $\mathrm{J_A}$ در معادله‌ی ۶-۱۷ با استفاده از معادله‌های ۶-۱۹، ۶-۲۱ و ۶-۲۲ معادله‌ی ۶-۲۳ حاصل می‌شود:

(۶-۲۳)

$$\nabla C_{\mathrm{A}} = \frac{N_{\mathrm{A}} N_{\mathrm{B}} d_{\mathrm{Bi}} d_{\mathrm{Ai}}}{\chi\left(d_{\mathrm{Bi}} N_{\mathrm{B}} D_{\mathrm{A}} + d_{\mathrm{Ai}} N_{\mathrm{A}} D_{\mathrm{B}}\right)} \left(\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}} - \frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}}\right) \nabla C_{\mathrm{v}}\,.$$

معادله‌ی ۶-۲۳ یک رابطه بین‌شیب غلظت جای خالی و شیب غلظت اتم A است. واضح است که وابستگی بین جهت شیب غلظتی جزء آلیاژی A و شیب غلظتی جای خالی به وسیله‌ی بزرگی نسبی نسبت‌های $\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}}$ و $\frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}}$ تعیین می‌شود. با یادآوری از معادله‌های ۶-۸ و ۶-۱۱ می‌توان نوشت:

$$d_{\mathrm{Av}} = \frac{1}{6}\lambda_{\mathrm{v}}^2 z_{\mathrm{v}} \omega_{\mathrm{Av}}$$
$$d_{\mathrm{Bv}} = \frac{1}{6}\lambda_{\mathrm{v}}^2 z_{\mathrm{v}} \omega_{\mathrm{Bv}}\,,$$

و

$$\omega_{\mathrm{Av}} = \nu \exp\left(\frac{\Delta S_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Av}}}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Av}}}{kT}\right)\,, \quad \omega_{\mathrm{Bv}} = \nu \exp\left(\frac{\Delta S_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bv}}}{k}\right) \exp\left(\frac{-E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bv}}}{kT}\right)\,,$$

بنابراین:

(۶-۲۴)

$$\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}} \approx \exp\left(\frac{E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bv}} - E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Av}}}{kT}\right),$$

نظر به این‌که تفاوت‌ها در ΔS_{m} بین اتم‌های A و B کوچک هستند. به صورت مشابه می‌توان نوشت:

(۶-۲۵)

$$\frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}} \approx \exp\left(\frac{E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bi}} - E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Ai}}}{kT}\right).$$

در طول پرتودهی، همیشه غلظت جای خالی به سمت یک چاهک عیب کاهش می‌یابد و معادله‌ی ۶-۲۳ پیش‌بینی می‌کند که اگر $\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}} < \frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}}$ باشد، عنصر A در چاهک غنی می‌شود به عبارت دیگر، اگر انتقال ترجیحی اتم‌های A از طریق بین‌نشین‌ها بیش‌تر از انتقال ترجیحی از طریق جاهای خالی و برعکس باشد، غلظت عنصر A در درون چاهک افزایش می‌یابد.

مثال ۶-۱. *جدایش در آلیاژ* $\mathrm{B-25\%A}$

یک آلیاژ دوتایی $\mathrm{B-25\%A}$ (که B = Ni و A = Cu) را در نظر بگیرید و فرض کنید که هیچ‌گونه تجمع ترجیحی از عیوب با اتم‌های A یا B وجود نداشته باشد. مقادیر زیر برای انرژی‌های مهاجرت دو جزء از طریق جاهای خالی و بین‌نشین‌ها وجود دارد:

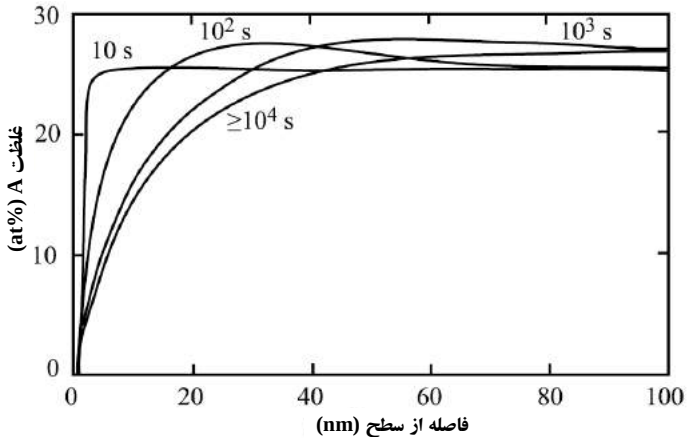
$E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Ai}} \sim ۰٫۱۰\ \mathrm{eV}$ و $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Av}} \sim ۰٫۷۷\ \mathrm{eV}$

$E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bv}} \sim ۰٫۱۵\ \mathrm{eV}$ و $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bv}} \sim ۱٫۲۸\ \mathrm{eV}$

در نتیجه از معادله‌های ۶-۲۴ و ۶-۲۵ می‌توان نوشت:

$$\left(\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}}-\frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}}\right)=\exp\left(\frac{1.28-0.77}{kT}\right)-\exp\left(\frac{0.15-0.1}{kT}\right)$$
$$=\exp\left(\frac{0.51}{kT}\right)-\exp\left(\frac{0.05}{kT}\right)$$
$$>>0$$

از آن‌جایی که $\left(\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}}-\frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}}\right)$ مثبت است و شیب غلظتی A از جاهای خالی تبعیت می‌کند، تهی‌شدگی A در چاهک وجود دارد. اگر این چاهک یک سطح آزاد باشد، در نتیجه A در سطح تهی می‌شود. اگر چاهک مرزدانه باشد، در نتیجه در مرزدانه تهی می‌شود. بیش‌تر اتم‌های A از طریق جاهای خالی و تعداد کم‌تری از طریق بین‌نشین‌ها از چاهک دور می‌شوند. شکل ۶-۳ رفتار غلظت A در یک دمای ^{o}C ۵۰۰ و نرخ مقدار پرتوگیری 10^{-3} dpa/s را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که کاهش در غلظت A در سطح چاهک به وسیله‌ی افزایش در پشت ناحیه تهی شده متعادل می‌شود. با افزایش مقدار پرتوگیری، ناحیه‌ی تهی شده در عمق و پهنا افزایش می‌یابد تا نفوذ معکوس ناشی از شیب غلظتی بالا منجر به هم‌ترازی و ایجاد یک شرایط حالت پایدار در $t > 10^{4}$ s شود.



شکل ۶-۳. سطح مقطع غلظتی عنصر A در آلیاژ دوتایی B – 25%A به صورت تابعی از زمان پرتودهی در دمای ^{o}C ۵۰۰ و برای نرخ جابه‌جایی 10^{-3}dpa/s، $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Ai}}$ = ۰٫۱۰ eV، $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Av}}$ = ۰٫۷۷ eV، $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bv}}$ = ۱٫۲۸ eV و $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bi}}$ = ۰٫۱۵ eV [۴].

۶-۱-۱ راه‌حل معادلات دیفرانسیلی جزیی دوتایی

راه‌حل سیستم معادلات دیفرانسیلی جزیی تعیین شده در معادله‌ی ۶-۲۰ باید به صورت آماری محاسبه شود. راه‌حل‌ها می‌توانند در هندسه‌ی صفحه‌ای (سطح آزاد) یا هندسه‌ی کروی (مرزدانه) به‌دست آید. در کد پرکس[1] [۵]، جدایش عناصر آلیاژی مجاور به یک صفحه که یک چاهک کامل برای عیوب نقطه‌ای مانند یک مرزدانه یا یک سطح آزاد است، مدل‌سازی شده است. صفحه‌ی دیگر به اندازه‌ی کافی برای مدله کردن شرایط در وسط دانه جایی که هیچ‌گونه شیب غلظتی وجود ندارد، دور است. مدل، غلظت عناصر اصلی را با توجه به شارهای هرگونه محاسبه می‌کند که به وسیله‌ی مهاجرت عیوب نقطه‌ایِ خلق شده به صورت حرارتی و تابشی ایجاد شده است. اتلاف‌های عیوب نقطه‌ای به علت بازترکیبی متقابل و نابودسازی در چاهک‌های ثابت، سطوح مرزی و یک توزیع یکنواخت و مستقل از زمان نابجایی‌ها رخ می‌دهد. جزییات ریزساختار القایی تابشی به صورت واضح مورد بررسی قرار نگرفته است لیکن شدت چاهک می‌تواند به منظور شبیه‌سازی افزایش چاهک‌ها در ریز ساختار، با دوز تنظیم شود.

زمانی که شارها محاسبه می‌شوند، انحراف‌ها می‌توانند برای اجرای انتگرال‌گیری زمانی مورد نیاز به وسیله‌ی معادلات پیوستگی در معادله‌ی ۶-۲۰ مورد استفاده قرار گیرند. برنامه، غلظت هرگونه را به صورت مستقل محاسبه می‌کند. مزیت این روش به این صورت است که هر خطایی در محاسبات، هنگامی که غلظت‌های جزیی جمع می‌شوند، مشخص می‌شود.

شرایط مرزی عمیق معرف مواد حجمی است که هیچ‌گونه شیب غلظتی برای گونه‌های اتمی و عیب وجود ندارد در نتیجه شار جانبی هرگونه، همیشه صفر است. سطح یا مرزدانه به عنوان یک چاهک کامل برای عیوب نقطه‌ای ایجاد شده است، در نتیجه غلظت آن‌ها در چاهک در مقدار ابتدایی باقی می‌ماند ($\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{k}}}{\mathrm{dt}}=0$). به منظور حفظ اتم‌ها در جامد، شارهای اتمی در مرز همگی صفر هستند.

۶-۱-۲ پیوند بین‌نشین‌ها

عناصر حل شده‌ی کوچک اندازه می‌تواند به صورت محکمی به بین‌نشین‌ها پیوند خورده و ترکیب عنصر حل شده ـ بین‌نشین را تشکیل دهند که به صورت بین‌نشین‌های حل شده مهاجرت می‌کنند. مدل

1. Perks code

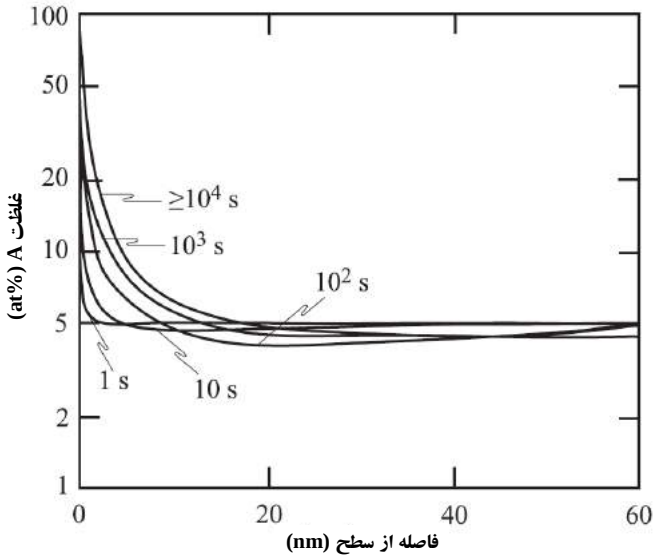
جدایش القایی تابشی توضیح داده شده در بخش ۶-۱ می‌تواند برای پیوند عنصر حل شده ـ بین‌نشین با محاسبه اشغال‌های غیرتصادفی بین‌نشین‌ها با اتم‌های A و B با ضرایب نفوذپذیری به ترتیب d_{Ai} و d_{Bi} مورد محاسبه قرار گیرد [۴]. غلظت بین‌نشین‌های A و B به صورت زیر است:

$$C_{Ai} = C_i \frac{C_A \exp(E_b^{Ai}/kT)}{C_A \exp(E_b^{Ai}/kT) + C_B}, \qquad (۲۶-۶)$$

و

$$C_{Bi} = C_i \frac{C_B}{C_A \exp(E_b^{Ai}/kT) + C_B}, \qquad (۲۷-۶)$$

که E_b^{Ai} انرژی میانگین به‌دست آمده به وسیله‌ی تبدیل بین‌نشین B به بین‌نشین A است. عبارت E_b^{Ai} به انرژی پیوندی مؤثر بین‌نشین A اشاره می‌کند. به وضوح عناصر حل شده که به بین‌نشین‌ها متصل شده‌اند، به واسطه‌ی جریان بین‌نشین‌ها به چاهک متحمل یک غنی‌شدگی در چاهک‌ها می‌شوند.



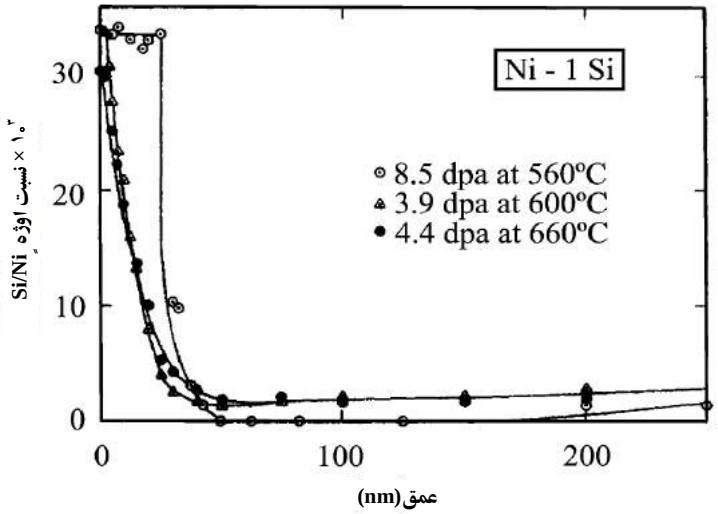
شکل ۶-۴. سطح مقطع غلظتی عناصر A در آلیاژ دوتایی B-5%A به صورت تابعی از زمان پرتودهی در دمای ۵۰۰ °C و برای نرخ جابه‌جایی 10^{-3} dpa/s: $E_m^{Av} = E_m^{Bv} = 1{,}28$ eV، $E_b^{Ai} = 1{,}0$ eV، $E_m^{Ai} = 0{,}90$ eV و $E_m^{Bi} = 0{,}15$ eV [۴].

مثال ۶-۲. *جدایش با پیوند بین‌نشینی در* Ni-Si

جدایش در سیستم‌هایی به وجود می‌آید که پیوند قوی بین‌نشین‌ها به اتم‌های کوچک اندازه رخ می‌هد. سیستم B-5%A را در نظر بگیرید که در آن B عنصر نیکل و A عنصر سیلیسیم است و بین‌نشین‌های ترجیحی با اتم‌های A پیوند برقرار کرده‌اند. شکل ۶-۴ مقطع غلظت محاسبه شده جزء آلیاژی A (Si) برای یک دمای پرتودهی ۵۰۰°C را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که عنصر A به شدت به سمت سطح جدایش می‌یابد. این مسئله می‌تواند با برگشت به پارامترهای معادله‌ی ۶-۲۷ درک شود. با انتخاب $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Av}}=E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bv}}=۱٫۲۸\mathrm{eV}$، $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Ai}}=۰٫۹\mathrm{eV}$، $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bi}}=۰٫۱۵\mathrm{eV}$ و انرژی پیوندی $E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{Ai}}=۱٫۰\ \mathrm{eV}$ می‌توان نوشت:

$$\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}}-\frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}}=1-\exp\left[(E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{Ai}}-E_{\mathrm{mi}}^{\mathrm{Ai}}+E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Bi}})/kT\right]<0$$

و از معادله‌ی ۶-۲۳ سطح به شدت غنی از سیلیسیم می‌شود. انرژی پیوندی تا حدی از تفاوت اندازه‌ی بین نیکل و سیلیسیم ناشی می‌شود. در این سیستم اتم حل شده، سیلیکون به صورت قابل توجهی کوچک‌تر است و انتظار می‌رود که مطابق با بحث تعیین شده در بخش ۶-۱-۳ به سمت سطح جدایش پیدا کند. نتایج با محاسبات پیش رفته پشتیبانی و به وسیله‌ی آزمایشات تأیید شده‌اند. شکل ۶-۵ نشان می‌دهد که جدایش سیلیکون به سطح در واقع در یک آلیاژ Ni-1%Si پرتودهی شده در یک دمای متوسط رخ می دهد. هم‌چنین باید ذکر شود که در سیستم Ni-Si، حد انحلال پذیری برای سیلیکون تقریباً ۱۰٪ اتمی است و جدایش سیلیکون به مقادیر بالای حد انحلال‌پذیری منجر به رسوب‌گذاری Ni_3Si می‌شود. از آن‌رو یک نتیجه‌ی مهم از جدایش القایی تابشی این است که منجر به تمرکز موضعی عناصر حل شونده می‌شود و در نتیجه حد انحلال‌پذیری افزایش یافته و در نتیجه منجر به رسوبگذاری می‌شود. پرتودهی هم‌چنین می‌تواند منجر به پایدارسازی یک فاز ثانویه شود که ممکن است آن فاز در تعادل ترمودینامیکی وجود نداشته باشد. این فرایند در فصل ۹ توضیح داده خواهد شد.



شکل ۶-۵. مقطع غلظت اندازه‌گیری شده بر حسب عمق برای یک آلیاژ Ni-1%Si پرتودهی شده در مقادیر مجاز بین ۳٫۹ تا ۸٫۵dpa در دماهای بین ۵۶۰ و ۶۶۰°C با یون‌های $^{58}Ni^{+}$ با انرژی ۳٫۵MeV در نرخ جابه‌جایی تقریباً 10^{-3}dpa/s در سطح نمونه [۶].

۶-۱-۳ اثر اندازه‌ی عنصر حل شده

تفاوت اندازه‌ی بین اتم‌های حل شده نقش مهمی را در تعیین بزرگی و جهت جدایش ایفا می‌کند [۶]. برای کاهش انرژی کرنش ذخیره شده در شبکه، اتم‌های جانشینیِ حل شده‌ی کوچک اندازه به صورت ترجیحی با اتم‌های حلال در موقعیت‌های بین‌نشینی عوض می‌شوند درحالی‌که اتم‌های عناصر حل شده‌ی بزرگ اندازه تمایل دارند که در موقعیت‌های جانشینی باقی بمانند یا به آن‌ها بازگردند. ملاحظات کرنش ـ انرژی هم‌چنین پیش‌بینی می‌کند که جاهای خالی به صورت ترجیحی با اتم‌های حل شده‌ی بزرگ اندازه تعویض می‌شوند. در طول پرتودهی در دماهای بالا، کسر اتم‌های حل شده‌ی کوچک اندازه‌ی مهاجر به عنوان بین‌نشین‌ها، یا کسر اتم‌های حل شده‌ی بزرگ اندازه‌ی مهاجرت کننده برخلاف شار جای خالی، ممکن است که به شدت کسر عناصر حل شده در آلیاژ را افزایش دهد. به عبارت دیگر، هرگونه تغییری در اندازه‌ی بین اتم‌های حل شده و حلال باعث می‌شود که ترکیب شیمیایی شارهای بین‌نشینی و جای خالیِ القایی تابشیِ متحرک به سمت چاهک از ترکیب شیمیایی آلیاژ تغییر کند. این مشارکت نامتناسب اتم‌های حل شده‌ی غیر هم‌اندازه در شارهای عیب به چاهک‌ها منجر به توزیع مجدد عناصر حل شده می‌شود که منجر به غنی‌سازی عناصر حل شده

کوچک اندازه و یک تهی‌شدگی از عناصر بزرگ اندازه در نزدیک چاهک‌های عیوب می‌شود. از آن‌جایی که سطح جامد پرتودهی شده، به عنوان چاهک غیراشباع برای عیوب از نوع بین‌نشین و جای خالی محسوب می‌شود، شیب‌های غلظتی نزدیک به سطح آلیاژ ایجاد می‌شود که حاوی اتم‌های حل شده‌ی نامناسب در طول پرتودهی در دماهای مناسب است. جدول ۶-۱ عدم تطابق حجمی برای چندین ترکیب حل شده ـ حلال را نشان می‌دهد و جهت جدایش مشاهده شده تحت پرتودهی را پیش بینی می‌کند. قابل توجه است که عدم انطباق‌های مثبت منجر به تهی‌شدگی (-) در چاهک می‌شوند در حالی که عدم انطباق‌های منفی منجر به افزایش غلظت (+) در چاهک می‌شوند.

مثال ۶-۳. *جدایش تحریک شده به وسیله‌ی اثر اندازه در* Ni-1%Al

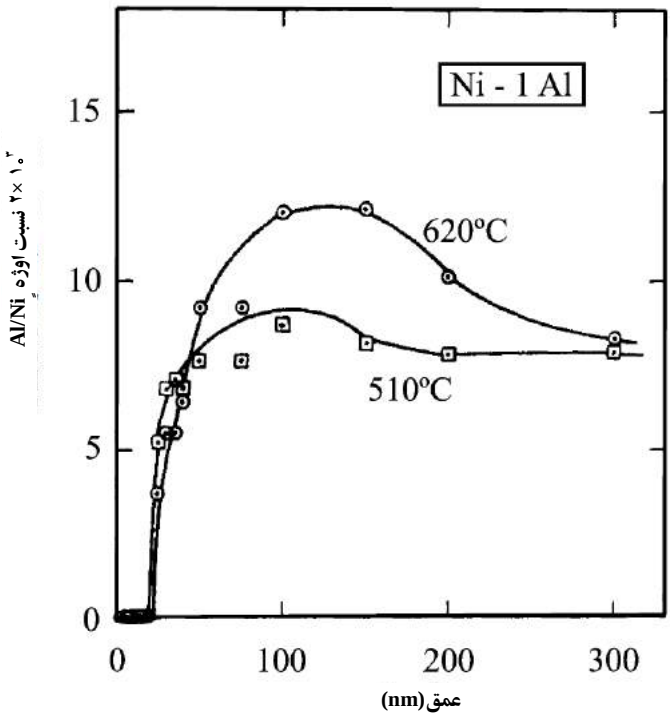
مثالی از اثر اندازه، سیستم Ni-Al است. با توجه به جدول ۶-۱، Al یک عنصر حل شده‌ی بزرگ اندازه در شبکه‌ی Ni است و، $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Al-v}}$ کم‌تر از $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Ni-v}}$ خواهد بود؛ زیرا اتم‌های Al بزرگ اندازه به صورت ترجیحی با جاهای خالی تعویض می‌شوند. بر طبق معادله‌های ۶-۲۴ و ۶-۲۵،

$\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}} > \frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}}$ است و تهی‌سازی در سطح پیش‌بینی می‌شود. در حقیقت، اندازه‌گیری جدایش Al در Ni-1%Al پرتودهی شده تا ۱۰٫۳ dpa در ۵۱۰ °C و ۱۰٫۷dpa در ۶۲۰°C، تهی‌شدگی شدیدی از Al در سطح را نشان می‌دهد که به وسیله‌ی توزیع مجدد در پشت سطح دنبال می‌شود (شکل ۶-۶). افزایش Al فقط در زیر سطح در غلظتی از آلومینیوم نتیجه می‌شود که حد انحلال افزایش یابد و تشکیل فاز دوم را همان‌طوری که در بر می‌گیرد به صورت مفصل در فصل ۹ توضیح داده خواهد شد.

۶-۱-۴ اثر دما

وابستگی دمایی جدایش القایی تابشی در شکل ۶-۷ برای یک آلیاژ B-25%A همان‌طوری که به وسیله‌ی حل معادله‌ی ۶-۲۰ تعیین شد، نشان داده شده است. باید ذکر شود که با افزایش دما منحنی صاف می‌شود؛ زیرا با افزایش دما تفاوت بین $\frac{d_{\mathrm{Av}}}{d_{\mathrm{Bv}}}$ و $\frac{d_{\mathrm{Ai}}}{d_{\mathrm{Bi}}}$ کاهش می‌یابد. شکل ۶-۸ نشان می‌دهد که غلظت حالت پایدار در سطح چاهک به صورت تابعی از دما از نقطه‌ی کمینه عبور می‌کند و می‌تواند به صورت زیر شرح داده شود. در دماهای بالا، غلظت بالای جاهای خالی حرارتی منجر به نرخ بالای

نفوذ عناصر آلیاژی به علاوه نرخ بالای بازترکیبی عیوب می‌شود، که متعاقباً شارهای عیوب به چاهک‌ها را کاهش می‌دهد و از آن‌رو مقدار جدایش عناصر حل شده کاهش پیدا می‌کند درحالی‌که نرخ بالای نفوذ عناصر آلیاژی نفوذ معکوس عناصر آلیاژی جدایش یافته را افزایش می‌داد. در دماهای پایین، تحرک جاهای خالی پایین است، افزایش غلظت جاهای خالی القایی تابشی به همان نسبت بالا است، در نتیجه بازترکیبی عیوب غالب می‌گردد و از آن‌رو شارهای عیوب به چاهک‌ها کاهش یافته و در نتیجه جدایش کاهش می‌یابد. در دمای‌های متوسط، غلظت جای خالی حرارتی ناچیز می‌شود و افزایش غلظت جای خای القایی تابشی نسبتاً پایین است. در این دماها نرخ بازترکیبی پایین است و از آن‌رو عیوب سریعاً به چاهک‌ها مهاجرت کرده و جدایش قابل ملاحظه‌ای رخ می‌دهد.

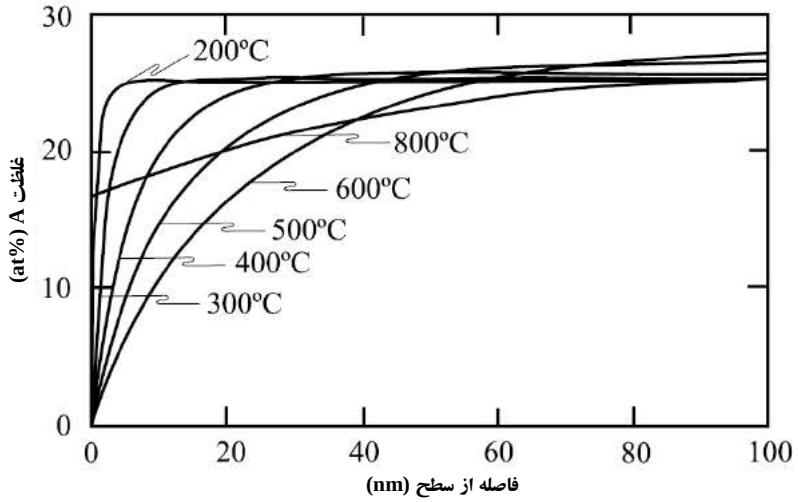


شکل ۶-۶. مقطع غلظت اندازه‌گیری شده بر حسب عمق برای آلیاژ Ni-1%Al پرتودهی شده تا ۱۰٫۳dpa در دمای ۵۱۰ و تا ۱۰٫۷ dpa در ۶۲۰°C با یون های $^{58}Ni^{+}$ با انرژی ۳٫۵MeV در نرخ جابه‌جایی تقریباً 10^{-3}dpa/s در سطح نمونه [۶].

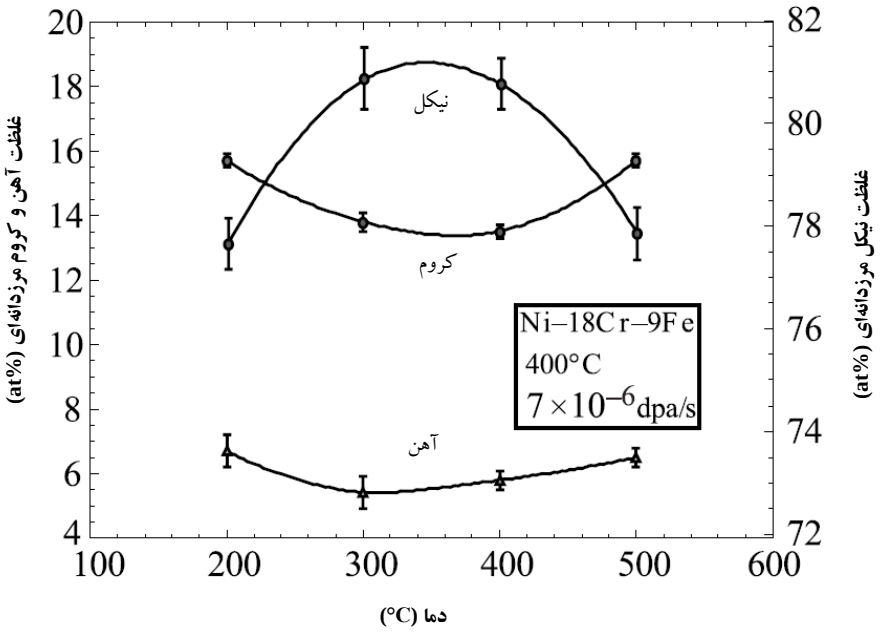
جدول ۶-۱. اثر اندازه‌ی عنصر حل شده روی جدایش القایی تابشی [۷،۸،۹].

حلال ـ حل شونده	عدم انطباق حجمی (٪)	جهت پیش‌بینی شده جدایش	جهت مشاهده شده جدایش
Pd–Cu	−20	+	+
Pd–Fe	−27	+	+
Pd–Mo	−3	+	+
Pd–Ni	−26	+	+
Pd–W	−2	+	+
Al–Ge	−37	+	+
Al–Si	−45	+	+
Al–Zn	−19	+	+
Fe–Cr	+4	–	–
Mg–Cd	−19	+	+
Ti–Al	−3	+	+
Ti–V	−26	+	+
Ni–Al	+52	–	–
Ni–Au	+55	–	–
Ni–Be	−29	+	+
Ni–Cr	+1	–	–
Ni–Ge	−5	+	+
Ni–Mn	+32	–	–
Ni–Mo	+31	–	–
Ni–Sb	+21	–	–
Ni–Si	−16	+	+
Ni–Ti	+57	–	–
Cu–Ag	+44	–	–
Cu–Be	−34	+	+
Cu–Fe	−8	+	+
Cu–Ni	−7	+	+
*SS–Ni	−3	+	+
*SS–Cr	+5	–	–
*SS–Si	−3	+	+
*SS–C	+54	–	
*SS–Mn	+3	–	–
*SS–Mo	+36	–	–
*SS–Cu	+9	–	

SS* اشاره به فولاد زنگ نزن ۳۱۶ [۸] .



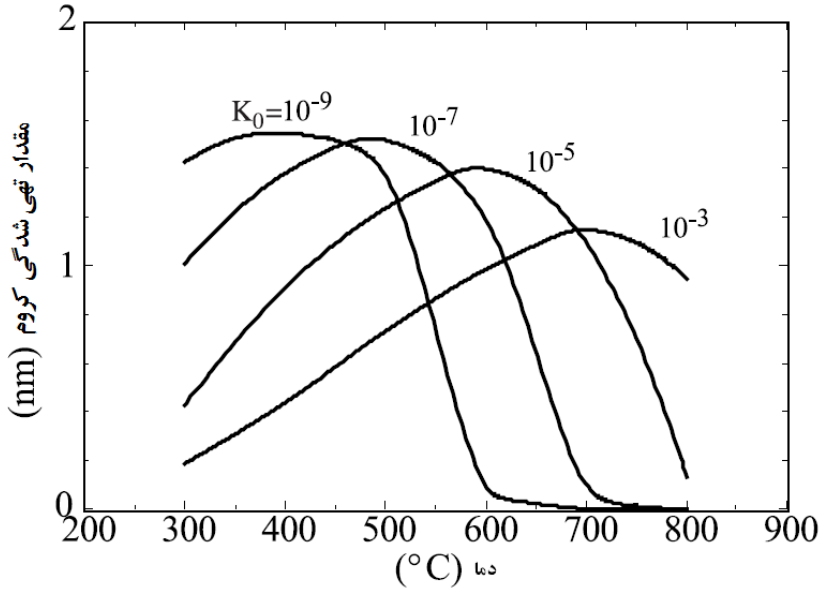
شکل ۶-۷. مقطع غلظت حالت پایدار عنصر A به صورت تابعی از دما برای آلیاژ مشابه و شرایط پرتودهی نشان داده شده در شکل ۶-۳ [۴].



شکل ۶-۸. وابستگی دمایی جدایش مرزدانه‌ای نیکل، کروم و آهن در آلیاژ Ni-18Cr-9Fe پرتودهی شده با پروتون‌های با انرژی ۳٫۴ MeV در دمای ^{o}C ۴۰۰ تا ۱dpa و در نرخ جابه‌جایی ۷×۱۰^{-۶} dpa/s [۱۰].

۶-۱-۵ اثر نرخ دوز

همان‌طوری که در شکل ۶-۹ نشان داده شده است، ممکن است که کاهش نرخ دوز وابستگی دمایی جدایش القایی تابشی را به دماهای پایین‌تر انتقال دهد. انتقال منحنی به سمت دماهای پایین‌تر برای نرخ‌های جابه‌جایی پایین‌تر می‌تواند به صورت زیر توضیح داده شود. در یک دمای مشخص، نرخ تولید عیب نقطه‌ای پایین‌تر K_0، به این معنی است که جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به تدریج به شبکه اضافه شده‌اند، یا از یک‌دیگر بسیار فاصله‌دار هستند. به هرجهت، تحرک حرارتی آن‌ها تغییر نمی‌یابد و با تعداد کم‌تر عیوب در شبکه، احتمال یافتن یک چاهک بر حسب بازترکیبی افزایش می‌یابد. در نتیجه، در یک دمای مشخص، نرخ‌های جابه‌جایی پایین‌تر تمایل به افزایش نقش چاهک نسبت به نقش بازترکیبی را زیاد کرده که منجر به جدایش بیش‌تر می‌شود. در دماهای بالاتر، نرخ جابه‌جایی پایین‌تر به این معنی است که جاهای خالی تولیدی شده در اثر پرتودهی اثر کم‌تری را خواهند داشت، در نتیجه اثر آن‌ها روی جدایش از مقدار دوز بالاتر کم‌تر است و مقدار جدایش با کاهش میزان دوز کاهش می‌یابد.



شکل ۶-۹. وابستگی نرخ مقدار تهی‌شدگی کروم مرزدانه‌ای که با استفاده از مدل MIK برای جدایش القایی تابشی محاسبه شده [۱۲،۱۱].

۶-۲ جدایش القایی تابشی در آلیاژهای سه‌تایی

آلیاژهای مهندسی به ندرت آلیاژهای دوتایی ساده هستند. اکثر آلیاژی‌های ساختمانی حاوی تعداد زیادی عناصر حل شده هستند که هر یک نقش به خصوصی در ویژگی‌های آلیاژ دارند. به علت اهمیت فولادهای ساختمانی زنگ نزن که غالباً ترکیبی از آهن، کروم و نیکل هستند، در ادامه‌ی گسترش زمانی و وابستگی مکانی معادلات غلظتی برای آلیاژ سه‌تایی تحت پرتودهی بررسی خواهد شد. توضیحاتی که در ادامه آورده شده خلاصه‌ای از مطالب ارایه شده به کوشش لام[1] و همکارانش[۱۳] برای آلیاژ سه‌تایی که ترکیب‌های A، B و C با غلظت‌های C_A، C_B و C_C (تعداد اتم‌ها در واحد حجم) را دارد. در ابتدا شارهای عیوب به وجود آمده از طریق اتم‌های A، B و C در آلیاژ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۶-۲۸)

$$J_i = J_i^A + J_i^B + J_i^C$$
$$J_v = J_v^A + J_v^B + J_v^C ,$$

که زیر نویس‌ها گونه‌های شارها (بین‌نشینی یا جای خالی) و بالانویس‌ها گونه‌های مکمل که شار به واسطه‌ی آن‌ها رخ می‌دهد (A، B و C) را مشخص می‌کنند. شارهای بین‌نشینی جزیی در جهت مشابه با شارهای اتمی نظیر به نظیر هستند درحالی‌که شارهای جای خای جزیی در جهت مخالف شارهای اتمی هستند.

(۶-۲۹)

$$J_i^A = J_A^i ; \quad J_i^B = J_B^i ; \quad J_i^C = J_C^i$$
$$J_v^A = -J_A^v ; \quad J_v^B = -J_B^v ; \quad J_v^C = -J_C^v ,$$

و معادله‌ی ۶-۲۵ می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

1. Lam

$$J_{\mathrm{i}} = J_{\mathrm{A}}^{\mathrm{i}} + J_{\mathrm{B}}^{\mathrm{i}} + J_{\mathrm{C}}^{\mathrm{i}}$$
$$J_{\mathrm{v}} = -\left(J_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} + J_{\mathrm{B}}^{\mathrm{v}} + J_{\mathrm{C}}^{\mathrm{v}}\right) . \qquad (۳۰-۶)$$

این معادلات ارتباط بین عیوب و شارهای اتمی در طول هر صفحه ثابت شبکه را نشان می‌دهند.
مشابه ترکیبات عیوب، ترکیب آلیاژ در زمان و مکان می‌تواند به وسیله‌ی معادلات بقا توضیح داده شود:

$$\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial t} = -\nabla \cdot J_{\mathrm{A}}$$
$$\frac{\partial C_{\mathrm{B}}}{\partial t} = -\nabla \cdot J_{\mathrm{B}}$$
$$\frac{\partial C_{\mathrm{C}}}{\partial t} = -\nabla \cdot J_{\mathrm{C}} , \qquad (۳۱-۶)$$

که J_{A}، J_{B} و J_{C} شارهای کلی عناصر آلیاژی هستند که می‌تواند به شارهای جزیی رخ داده به وسیله‌ی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها جزبندی شوند:

$$J_{\mathrm{A}} = J_{\mathrm{A}}^{\mathrm{v}} + J_{\mathrm{A}}^{\mathrm{i}}$$
$$J_{\mathrm{B}} = J_{\mathrm{B}}^{\mathrm{v}} + J_{\mathrm{B}}^{\mathrm{i}}$$
$$J_{\mathrm{C}} = J_{\mathrm{C}}^{\mathrm{v}} + J_{\mathrm{C}}^{\mathrm{i}} . \qquad (۳۲-۶)$$

شارهای اتمی و عیوب برحسب شیب‌های غلظتی گونه‌های مختلف به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$J_k^{\mathrm{i}} (\equiv J_{\mathrm{i}}^{\mathrm{k}}) = -D_k^{\mathrm{i}} \chi \nabla C_k - D_{\mathrm{i}}^k \nabla C_{\mathrm{i}}$$
$$J_k^{\mathrm{v}} (\equiv -J_{\mathrm{v}}^k) = -D_{\mathrm{k}}^{\mathrm{v}} \chi \nabla C_k + D_{\mathrm{v}}^k \nabla C_{\mathrm{v}} , \qquad (۳۳-۶)$$

که C یا B، k = A و χ عامل ترمودینامیکی است که شیب‌های غلظتی را به شیب پتانسیل شیمیایی اتم‌ها مرتبط می‌سازد (همانند معادله‌های ۶-۱۷ و ۶-۱۸) و $D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{k}}$، $D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{k}}$ و $D_{\mathrm{k}}^{\mathrm{i}} D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{k}}$، به ترتیب ضرایب

نفوذ جزیی اتم‌های k به وسیله‌ی بین‌نشین‌ها، و جاهای خالی، و بین‌نشین‌ها و جاهای خالی به وسیله‌ی اتم‌ها هستند. ضرایب نفوذ جزیی به صورت شکل زیر هستند:

$$D_k^j = d_{kj} N_j \qquad (۳۴-۶)$$
$$D_j^k = d_{kj} N_k \ ,$$

که j = i یا v است و $N_j = \Omega C_j$ و $N_k = \Omega C_k$ به ترتیب کسرهای اتمی عیوب و اتم‌های k هستند و Ω حجم اتمی میانگین در آلیاژ و d_{kj} ضرایب نفوذ پذیری برای ترکیب جفت‌های kj اتم ـ عیب است:

$$d_{kj} = \frac{1}{6}\lambda_k^2 z_k \omega_{kj}^{\text{eff}} \ . \qquad (۳۵-۶)$$

در این رابطه λ_k فاصله پرش، z_k عدد همسایگی و ω_{kj}^{eff} بسامد پرش مؤثر یا تبادل جفت است. ضرایب نفوذ کلی برای بین‌نشین‌ها و جاهای خالی به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$D_{\text{i}} = \sum_k d_{k\text{i}} N_k \qquad (۳۶-۶)$$
$$D_{\text{v}} = \sum_k d_{k\text{v}} N_k \ ,$$

و برای اتم‌ها:

$$D_k = d_{k\text{i}} N_{\text{i}} + d_{k\text{v}} N_{\text{v}} \ . \qquad (۳۷-۶)$$

برای سیستم‌های آلیاژی که در آن اتم‌های ترکیب آلیاژی با بین‌نشین‌ها برای تشکیل ترکیب‌های مقید اتم ـ بین‌نشین واکنش می‌دهند، اشغال غیرتصادفی بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی اتم‌های A، B و C به شیوه‌ای مشابه با یک سیستم آلیاژی دوتایی مورد محاسبه قرار می‌گیرد. برای پیوند ترجیحی اتم A ـ بین‌نشین با مقایسه‌ی معادله‌های ۶-۲۶ و ۶-۲۷ می‌توان نوشت:

(۶-۳۸)

$$C_{\mathrm{Ai}} = C_{\mathrm{i}} \frac{C_{\mathrm{A}} \exp(E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{Ai}}/kT)}{C_{\mathrm{A}} \exp(E_{\mathrm{b}}^{Ai}/kT) + C_{\mathrm{B}} + C_{\mathrm{C}}} ,$$
$$C_{\mathrm{Bi}} = C_{\mathrm{i}} \frac{C_{\mathrm{B}}}{C_{\mathrm{A}} \exp(E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{Ai}}/kT) + C_{\mathrm{B}} + C_{\mathrm{C}}} ,$$
$$C_{\mathrm{Ci}} = C_{\mathrm{i}} \frac{C_{\mathrm{C}}}{C_{\mathrm{A}} \exp(E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{Ai}}/kT) + C_{\mathrm{B}} + C_{\mathrm{C}}} ,$$

که $E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{Ai}}$ میانگین انرژی کسب شده به وسیله‌ی تبدیل یک بین‌نشین B یا یک بین‌نشین C به یک بین‌نشین A است. از معادله‌های ۶-۳۱، ۶-۳۳، ۶-۳۴، ۶-۳۵ و ۶-۲۸، شارهای عیب و اتم با توجه به سیستم مختصات ثابت شده روی شبکه بلوری برابر هستند با:

(۶-۳۹)

$$J_{\mathrm{i}} = -(d_{\mathrm{Ai}} - d_{\mathrm{Ci}})\Omega C_{\mathrm{i}} \chi \nabla C_{\mathrm{A}} - (d_{\mathrm{Bi}} - d_{\mathrm{Ci}})\Omega C_{\mathrm{i}} \chi \nabla C_{\mathrm{B}} - D_{\mathrm{i}} \nabla C_{\mathrm{i}}$$
$$J_{\mathrm{v}} = (d_{\mathrm{Av}} - d_{\mathrm{Cv}})\Omega C_{\mathrm{v}} \chi \nabla C_{\mathrm{A}} + (d_{\mathrm{Bv}} - d_{\mathrm{Cv}})\Omega C_{\mathrm{v}} \chi \nabla C_{\mathrm{B}} - D_{\mathrm{v}} \nabla C_{\mathrm{v}}$$
$$J_{\mathrm{A}} = -D_{\mathrm{A}} \chi \nabla C_{\mathrm{A}} + d_{\mathrm{Av}} \Omega C_{\mathrm{A}} \nabla C_{\mathrm{v}} - d_{\mathrm{Vi}} \Omega C_{\mathrm{A}} \nabla C_{\mathrm{i}}$$
$$J_{\mathrm{B}} = -D_{\mathrm{B}} \chi \nabla C_{\mathrm{B}} + d_{\mathrm{Bv}} \Omega C_{\mathrm{B}} \nabla C_{\mathrm{v}} - d_{\mathrm{Vi}} \Omega C_{\mathrm{B}} \nabla C_{\mathrm{i}}$$
$$J_{\mathrm{C}} = -D_{\mathrm{C}} \chi \nabla C_{\mathrm{C}} + d_{\mathrm{Vv}} \Omega C_{\mathrm{C}} \nabla C_{\mathrm{v}} - d_{\mathrm{Ci}} \Omega C_{\mathrm{C}} \nabla C_{\mathrm{i}} .$$

آشفتگی‌های اندک ناشی از حضور عیوب نقطه‌ای نادیده گرفته می‌شود در نتیجه $C_{\mathrm{A}} + C_{\mathrm{B}} + C_{\mathrm{c}} = 1$ و $\nabla C_{\mathrm{C}} = -(\nabla C_{\mathrm{A}} + \nabla C_{\mathrm{B}})$ است. از پنج شار موجود در معادله‌ی ۶-۳۹، فقط چهارتا مستقل هستند؛ زیرا شارهای عیوب و اتم درطول صفحه‌ی نشان‌گر باید موازنه شوند:

(۶-۴۰)

$$J_{\mathrm{A}} + J_{\mathrm{B}} + J_{\mathrm{C}} = J_{\mathrm{i}} - J_{\mathrm{v}} .$$

سیستمی از چهار معادله‌ی دیفرانسیلی جزیی دوتایی توضیح دهنده وابستگی مکانی و زمانی اتم‌ها و عیوب در جامد به وسیله‌ی جایگزینی شارهای اتم و عیوب با معادله ۶-۳۹ در معادله‌های ۶-۳۱ و ۶-۱ تعیین می‌شود:

(۶-۴۱)

$$\frac{\partial C_{\mathrm{v}}}{\partial t} = \nabla \cdot [-(d_{\mathrm{Av}} - d_{\mathrm{Cv}})\Omega C_{\mathrm{v}} \chi \nabla C_{\mathrm{A}} - (d_{\mathrm{Bv}} - d_{\mathrm{Cv}})\Omega C_{\mathrm{v}} \chi \nabla C_{\mathrm{B}} + D_{\mathrm{v}} \nabla C_{\mathrm{v}}] + K - R$$
$$\frac{\partial C_{\mathrm{i}}}{\partial t} = \nabla \cdot [(d_{\mathrm{Ai}} - d_{\mathrm{Ci}})\Omega C_{\mathrm{i}} \chi \nabla C_{\mathrm{A}} + (d_{\mathrm{Bi}} - d_{\mathrm{Ci}})\Omega C_{\mathrm{i}} \chi \nabla C_{\mathrm{B}} + D_{\mathrm{i}} \nabla C_{\mathrm{i}}] + K - R$$
$$\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial t} = \nabla \cdot [D_{\mathrm{A}} \chi \nabla C_{\mathrm{A}} + \Omega C_{\mathrm{A}} (d_{\mathrm{Ai}} \nabla C_{\mathrm{i}} - d_{\mathrm{Av}} \nabla C_{\mathrm{v}})]$$
$$\frac{\partial C_{\mathrm{B}}}{\partial t} = \nabla \cdot [D_{\mathrm{B}} \chi \nabla C_{\mathrm{B}} + \Omega C_{\mathrm{B}} (d_{\mathrm{Bi}} \nabla C_{\mathrm{i}} - d_{\mathrm{Bv}} \nabla C_{\mathrm{v}})] \ .$$

راه‌حل‌های عددی معادله‌ی ۶-۴۱، برای نمونه‌ی مسطح تحت پرتودهی حاصل می‌شود. مرزدانه معادل با سطح آزاد در نظر گرفته شده است و محاسبات فقط برای یک دانه تنها، با در نظر گرفتن مزیت تقارن مسئله، انجام شده است. شرایط ابتدایی، شرایط تعادل ترمودینامیکی آلیاژ هستند. شرایط در مرزدانه نیز به صورت زیر تعریف می‌شود. در مرکز دانه، تمام شیب‌های غلظتی برابر با صفر در نظر گرفته می‌شوند. در مرزدانه غلظت بین‌نشین‌ها و جاهای خالی در مقادیر تعادل حرارتیشان ثابت در نظر گرفته می‌شوند. غلظت‌های مرزدانه‌ای اتم‌ها به وسیله‌ی بقای تعداد اتم‌ها در نمونه تعیین می‌شوند. فرض شده است که غلظت‌های اتمی در ابتدا یکنواخت باشند. پارامترهای مورد استفاده در محاسبات جدایش در آلیاژهای Fe-Cr-Ni در مرجع [۱۳] برای مدل لام و در مرجع [۵] برای مدل پرکس مشخص شده‌اند. معادله‌ی ۶-۴۱ می‌تواند در حالت پایدار برای تهیه‌ی رابطه‌ای بین‌شیب جای خالی و شیب اتمی حل شود. این رابطه به عنوان یک دترمینان، M شناخته می‌شود و تابعی از غلظت‌ها و نفوذپذیری‌ها است. دترمینان برای یک آلیاژ سه‌جزیی مشابه با روش مورد استفاده برای آلیاژهای دوتایی معادله‌ی ۶-۲۳ تعیین می‌شود و به صورت زیر مشخص می‌شود [۱۴]:

$$M_j = \frac{\nabla C_j}{\nabla C_v} = \frac{\dfrac{d_{jv}C_j}{D_j}\sum_{k\neq j}\dfrac{d_{ki}C_k}{D_k} - \dfrac{d_{ji}C_j}{D_j}\sum_{k\neq j}\dfrac{d_{kv}C_k}{D_k}}{\chi\sum_k \dfrac{d_{ki}C_k}{D_k}} \quad (۴۲-۶)$$

دترمینان می‌تواند برای تعیین سازوکار اولیه جدایش در آلیاژهای Fe-Cr-Ni مورد استفاده قرار گیرد. جدول ۶-۲ دترمینان محاسبه شده برای کروم، آهن و نیکل برای تمام هفت آلیاژ را با فرض این‌که اتصال ترجیحی با شار جای خالی منجر به جدایش می‌شود، نشان می‌دهد. به عبارت دیگر شدت ضرایب نفوذ بین‌نشینی برای کروم، آهن و نیکل با یکدیگر برابر هستند. گرایش‌های جدایشی (غنی‌شدگی یا تهی‌شدگی در مرزدانه) برای کروم، آهن و نیکل که روی مرزدانه‌های سه آلیاژ به وسیله‌ی اسپکتروسکوپی الکترون اوژه[1] (AES) و اسپکتروسکوپی پراکنش انرژی در میکروسکوپ الکترونی عبوری[2] (STEM/EDS) اندازه گیری شده است نیز در این جدول ارایه شده است. برای هر آلیاژ که دترمینان برای عنصری مثبت است، تهی‌شدگی رخ می‌دهد و هنگامی که دترمینان منفی است غنی‌شدگی رخ می‌دهد. لازم به ذکر است که برای هر عنصر در هر هفت آلیاژ مورد مطالعه، علامت دترمینان با اندازه‌گیری‌ها (به وسیله‌ی STEM/EDS یا AES) و محاسبات در توافق است. این مثال هم‌چنین نشان می‌دهد که کروم همواره تهی شده و نیکل همواره غنی می‌شود و آهن که وابسته به غلظت‌های نسبی نیکل و کروم است می‌تواند تهی یا غنی می‌شود.

جدول۶-۲. رفتار جدایش در آلیاژهای Ni-Cr-Fe و Fe-Cr-Ni در مقایسه با پیش‌بینی‌های کرکندال معکوس. دترمینان‌ها (M) با استفاده از معادله‌ی ۶-۴۲ محاسبه شده است.

روش آنالیز	Ni	Fe	Cr	Ref.	M_{Ni}	M_{Fe}	M_{Cr}	آلیاژ
AES&STEM/EDS	غنی شدگی	——	تهی شدگی	[14]	−3.9	—	3.9	Ni–18Cr
AES&STEM/EDS	غنی شدگی	تهی شدگی	تهی شدگی	[15]	−5.4	0.4	5.0	Ni–18Cr–9Fe
AES	غنی شدگی	تهی شدگی	تهی شدگی	[16]	−7.6	3.6	4.0	Fe–16Cr–24Ni
AES&STEM/EDS	غنی شدگی	تهی شدگی	تهی شدگی	[16]	−7.4	2.4	5.0	Fe–20Cr–24Ni
AES	غنی شدگی	تهی شدگی	تهی شدگی	[16]	−8.5	1.8	6.3	Fe–24Cr–24Ni
AES	غنی شدگی	تهی شدگی	تهی شدگی	[16]	−4.7	−1.8	6.5	Fe–24Cr–19Ni
AES&STEM/EDS	غنی شدگی	تهی شدگی	تهی شدگی	[16]	−2.0	−3.0	5.0	Fe–20Cr–9Ni

1. Auger Electron Spectroscopy
2. Energy Dispersive Spectroscopy in Scanning Transmission Electron microscopy

در سیستم Fe-Cr-Ni، کروم نفوذ کننده‌ی سریعی است و نیکل یک نفوذ کننده‌ی کند است و آهن بین این دو عنصر قرار دارد. هنگامی که میزان نیکل در مقایسه با میزان کروم نسبتاً بالا است، مقدار زیاد غنی‌سازی نیکل در مرزدانه، نمی‌تواند به صورت کامل با تهی‌شدگی کروم جبران شود، در نتیجه آهن نیز باید تهی شود؛ اما هنگامی که میزان کروم نسبت به نیکل بالاتر باشد، فرایند به صورت معکوس رخ می‌دهد و آهن غنی می‌شود. قابل ذکر است که کروم و نیکل نمی‌توانند به صورت کامل حذف شوند، همان طوری که در مورد آلیاژ Fe-24Cr-24Ni دیده می‌شود در آن غنی‌سازی نیکل نسبت به تهی‌شدگی کروم قوی‌تر است و آهن نیز باید تهی شود.

این مثال یک فرایند کلیدی در جدایش القایی تابشی را که نقش ترکیب در رفتار جدایش است، نشان می‌دهد. هنگامی که ترکیب نزدیک به چاهک شروع به تغییر کند، نفوذپذیری و متعاقب آن ترکیب عناصر در آن منطقه، از آن‌جایی که نفوذ وابسته به ترکیب است، تغییر خواهد کرد. لازم است که به منظور تعیین مناسب اندازه جدایش القایی تابشی، اثر تغییر موضعی ترکیب نیز محاسبه شود. این مبحث در فصل بعد مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۶-۱۳ اثر تغییر ترکیب موضعی روی جدایش القایی تابشی

این موضوع محقق شده است که جدایش القایی تابشی به علت تفاوت‌های موجود در اتصال عناصر حل شده‌ی مختلف با عیوب ایجاد می‌شود. به علاوه، تفاوت در شدت اتصال، درجه‌ی جدایش را تحت تأثیر قرار می‌دهد. بنابراین، هنگامی که غلظت نزدیک چاهک به صورت قابل توجهی با غلظت در حجم متفاوت باشد، نفوذپذیری عناصر حل شده نیز به همان اندازه تغییر می‌کند و لازم است که این تغییر به منظور تعیین دقیق مقطع ترکیب محاسبه شود [۱۲]. مدل پرکس می‌تواند برای گنجاندن هر دو وابستگی ترکیبی نفوذپذیری اصلاح شود.

در مدل پرکس، نرخ جدایش عنصر k توسط عیب j به وسیله‌ی یک شکل کلی نفوذپذیری تعیین شده است و با معادله‌ی ۶-۲۴ توضیح داده می‌شود:

$$d_{kj} = 1/6\lambda_j^2 z_j \nu \exp\left(\frac{S_m^j}{k}\right)\exp\left(\frac{-E_m^{kj}}{kT}\right),$$

و به صورت کوتاه می‌توان نوشت:

(۴۳-۶)

$$d_{\mathrm{kj}} = d_0^{\mathrm{kj}} \exp\left(\frac{-E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{kj}}}{kT}\right),$$

که عبارت پیش‌نمایی به صورت یک عبارت تکی d_0^{kj} خلاصه شده است. در اکثر راه‌حل‌های معادله‌ی ۶-۴۱، انرژی‌های مهاجرت برای هر عنصر به صورت برابر و با تفاوت‌هایی در نرخ‌های جدایش فرض شده است که ناشی از تفاوت در ضریب‌های پیش‌نمایی است. برای محاسبه‌ی نفوذ در یک محلول با ترکیب متغیر، عبارت انرژی مهاجرت در توان باید به صورت تابعی از ترکیب و همان‌طوری که در بند بعد توضیح داده خواهد شد، توصیف شود [۱۶،۱۵،۱۱].

برای مهاجرت یک اتم (برای مثال مهاجرت کروم در شبکه‌ی Fe-Cr-Ni)، اتم باید از موقعیت تعادلیش در شبکه (با انرژی تعادلی $d_{\mathrm{kj}} = d_0^{\mathrm{kj}}\exp\left(\frac{-E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{kj}}}{kT}\right)$) حرکت کند و قبل از حرکت به موقعیت جدید باید از موقعیت پتانسیل بیشینه (که به‌جای نقطه‌ی زینی‌شکل شناخته می‌شود و انرژی نقطه‌ی زینی‌شکل برابر با $d_{\mathrm{kj}} = d_0^{\mathrm{kj}}\exp\left(\frac{-E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{kj}}}{kT}\right)$است) عبور کند. این رابطه‌ی بین انرژی‌ها به صورت شماتیک در شکل ۶-۱۰ نشان داده شده است. برای تبادل اتم ـ جای خالی، انرژی مهاجرت برابر با تفاوت بین انرژی نقطه‌ی زینی‌شکل و انرژی تعادلی است:

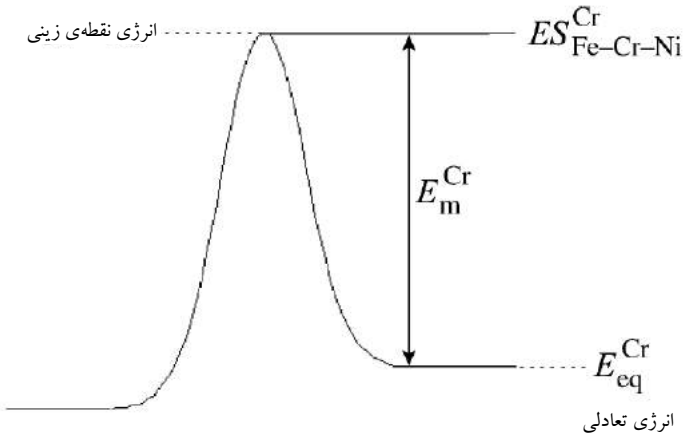
(۴۴-۶)

$$E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Cr\text{-}v}} = ES_{\mathrm{Fe\text{-}Cr\text{-}Ni}}^{\mathrm{Cr}} - E_{\mathrm{eq}}^{\mathrm{Cr}}.$$

در یک مدل ساده انرژی تعادلی می‌تواند به عنوان انرژی برهم‌کنش بین نزدیک‌ترین همسایه‌ها توصیف شود:

(۴۵-۶)

$$E_{\mathrm{eq}}^{\mathrm{Cr\text{-}v}} = Z\left[C_{\mathrm{Cr}}E_{\mathrm{CrCr}} + C_{\mathrm{Ni}}E_{\mathrm{NiCr}} + C_{\mathrm{Fe}}E_{\mathrm{FeCr}} + C_{\mathrm{v}}E_{\mathrm{Cr\text{-}v}}\right],$$



شکل۶-۱۰. تعیین انرژی مهاجرت برای تبادل اتم ـ جای خالی در آلیاژ Fe-Cr-Ni [۱۲].

که در این رابطه Z تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها، C غلظت اتمیِ اتم‌ها و/یا عیوب و E_{kj} انرژی برهم‌کنش دوتایی[1] بین اتم k و اتم یا جای خالی j است. انرژی‌های برهم‌کنش دوتایی بین اتم‌های غیرمشابه به صورت میانگین خطی از انرژی جفت اتم‌های مشابه منهای هرگونه انرژی آرایشی تعریف می‌شوند:

(۶-۴۶)

$$E_{NiCr} = \frac{E_{NiNi} + E_{CrCr}}{2} - E^{ord}_{NiCr} .$$

با ترکیب معادله‌های ۶-۴۴ و ۶-۴۶ و الزام آن‌که $C_{Fe} + C_{Cr} + C_{Ni} = ۱$ است، انرژی مهاجرت برای کروم، نیکل و آهن از طریق جاهای خالی می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

(۶-۴۷ الف)

$$E^{Cr\text{-}v}_{m} = ES^{Cr}_{Fe-Cr-Ni} - Z\left[\frac{1}{2}(C_{Cr}+1)E_{CrCr} + \frac{C_{Ni}}{2}E_{NiNi} + \frac{C_{Fe}}{2}E_{FeFe} + C_{v}E_{Cr\text{-}v}\right] + ZC_{Ni}E^{ord}_{NiCr} + ZC_{Fe}E^{ord}_{FeCr}$$

1. Pair interaction

(۶-۴۷ ب)

$$E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Ni\text{-}v}} = ES_{\mathrm{Fe\text{-}Cr\text{-}Ni}}^{\mathrm{Ni}} - Z\left[\frac{1}{2}(C_{\mathrm{Ni}}+1)E_{\mathrm{NiNi}} + \frac{C_{\mathrm{Cr}}}{2}E_{\mathrm{CrCr}} + \frac{C_{\mathrm{Fe}}}{2}E_{\mathrm{FeFe}} + C_{\mathrm{v}}E_{\mathrm{Ni\text{-}v}}\right] + ZC_{\mathrm{Cr}}E_{\mathrm{NiCr}}^{\mathrm{ord}} + ZC_{\mathrm{Fe}}E_{\mathrm{FeNi}}^{\mathrm{ord}}$$

(۶-۴۷ ج)

$$E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Fe\text{-}v}} = ES_{\mathrm{Fe\text{-}Cr\text{-}Ni}}^{\mathrm{Fe}} - Z\left[\frac{1}{2}(C_{\mathrm{Fe}}+1)E_{\mathrm{FeFe}} + \frac{C_{\mathrm{Cr}}}{2}E_{\mathrm{CrCr}} + \frac{C_{\mathrm{Fe}}}{2}E_{\mathrm{NiNiFe\text{-}v}} + C_{\mathrm{v}}E_{\mathrm{Ni\text{-}v}}\right] + ZC_{\mathrm{Fe}}E_{\mathrm{FeCr}}^{\mathrm{ord}} + ZC_{\mathrm{Ni}}E_{\mathrm{FeNi}}^{\mathrm{ord}}$$

به منظور تعیین انرژی‌های مهاجرت در معادله‌ی ۶-۴۷، انرژی‌های برهم‌کنش‌های دوتایی و انرژی‌های نقطه‌ی زینی‌شکل باید مورد محاسبه قرار گیرند. برای اتم‌های مشابه انرژی برهم‌کنش دوتایی برابر است با انرژی چسبندگی، E_{coh} تقسیم بر تعداد جفت باندهای نزدیک‌ترین همسایه‌ها:

(۶-۴۸ الف)

$$E_{\mathrm{CrCr}} = E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Cr}}/(Z/2)\,,$$

(۶-۴۸ ب)

$$E_{\mathrm{FeFe}} = E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Fe}}/(Z/2)\,,$$

(۶-۴۸ ج)

$$E_{\mathrm{NiNi}} = E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Ni}}/(Z/2)\,.$$

از آن‌جایی که آهن و کروم خالص در ساختار bcc به وجود می‌آیند، انرژی مورد نیاز برای تبدیل آهن و کروم به ساختار fcc برای کاربرد در فولاد زنگ نزن و برای تشریح مناسب انرژی تعادلی، ریال باید در دترمینان E_{CrCr} و E_{FeFe} گنجانده شود:

(۶-۴۹ الف)

$$E_{\mathrm{CrCr}}^{fcc} = E_{\mathrm{CrCr}}^{bcc} + \Delta G_{\mathrm{Cr}}^{bcc\rightarrow fcc}\,,$$

(۶-۴۹ ب)

$$E_{\mathrm{FeFe}}^{fcc} = E_{\mathrm{FeFe}}^{bcc} + \Delta G_{\mathrm{Fe}}^{bcc \rightarrow fcc} \ .$$

انرژی برهم‌کنش‌های دوتایی بین اتم‌های غیرمشابه از کم کردن انرژی آرایشی اتم‌ها از مقدار میانگین انرژی جفت اتم‌های مشابه تعیین می‌شود:

(۶-۵۰ الف)

$$E_{\mathrm{NiCr}} = \frac{(E_{\mathrm{NiNi}} + E_{\mathrm{CrCr}})}{2} - E_{\mathrm{NiCr}}^{\mathrm{ord}} \ ,$$

(۶-۵۰ ب)

$$E_{\mathrm{FeCr}} = \frac{(E_{\mathrm{FeFe}} + E_{\mathrm{CrCr}})}{2} - E_{\mathrm{FeCr}}^{\mathrm{ord}} \ ,$$

(۶-۵۰ ج)

$$E_{\mathrm{FeNi}} = \frac{(E_{\mathrm{FeFe}} + E_{\mathrm{NiNi}})}{2} - E_{\mathrm{FeNi}}^{\mathrm{ord}} \ .$$

در پایان، انرژی برهم‌کنش دوتایی برای اتم‌ها و جاهای خالی بر انرژی تشکیل فلز خالص منطبق شده و با روابط زیر تعیین می‌شود:

(۶- ۵۱ الف)

$$E_{\mathrm{Cr\text{-}v}} = \left(\frac{E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Cr}} + E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Cr\text{-}v}}}{Z} \right) \ ,$$

(۶- ۵۱ ب)

$$E_{\mathrm{Ni\text{-}v}} = \left(\frac{E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Ni}} + E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Ni\text{-}v}}}{Z} \right) \ ,$$

(۶- ۵۱ ج)

$$E_{\mathrm{Fe\text{-}v}} = \left(\frac{E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Fe}} + E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Fe\text{-}v}}}{Z} \right) \ ,$$

که $E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{k\text{-}v}}$ انرژی تشکیل جای خالی در k خالص است.

آخرین کمیت تعیین نشده، انرژی نقطه‌ی زینی‌شکل است که با استفاده از انرژی نقطه‌ی زینی‌شکل آهن، کروم و نیکل خالص محاسبه شده است. انرژی نقطه‌ی زینی‌شکل در فلز خالص برای تعیین انرژی انتقال جای خالی نیز محاسبه می‌شود. مثلاً برای این‌که در کروم خالص یک اتم و یک جای خالی از موقعیت خود خارج شوند و در نقطه‌ی زینی‌شکل قرار بگیرند، باید انرژی لازم برای خارج کردن اتم کروم از نقطه‌ی زینی‌شکل برابر باشد با:

(۵۲-۶)

$$E_{\mathrm{Cr}} = Z(C_{\mathrm{Cr}}E_{\mathrm{CrCr}} + C_{\mathrm{v}}E_{\mathrm{Cr\text{-}v}})\ .$$

و انرژی لازم برای خارج کردن جای خالی برابر باشد با:

(۵۳-۶)

$$E_{\mathrm{v}} = Z(C_{\mathrm{v}}E_{\mathrm{vv}} + C_{\mathrm{Cr}}E_{\mathrm{Cr\text{-}v}})$$

از آن‌جایی که در فلز خالص $C_{\mathrm{Cr}} + C_{\mathrm{v}} = ۱$ است و از آن‌جایی که $C_{\mathrm{v}} \ll C_{\mathrm{Cr}}$ است، مجموع $E_{\mathrm{Cr}} + E_{\mathrm{v}}$ برابر است با:

(۵۴-۶)

$$E_{\mathrm{Cr}} + E_{\mathrm{v}} = Z(E_{\mathrm{CrCr}} + E_{\mathrm{Cr\text{-}v}})\ .$$

معادله‌ی ۶-۵۴ انرژی تعادلی برای Cr خالص را نشان می‌دهد. می‌خواهیم اتمی را با انرژی مشخص در نقطه‌ی زینی‌شکل قرار دهیم به گونه‌ای که:

(۵۵-۶)

$$E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Cr\text{-}v}} = ES_{\mathrm{pure}}^{\mathrm{Cr}} - (E_{\mathrm{Cr}} + E_{\mathrm{v}}) = ES_{\mathrm{pure}}^{\mathrm{Cr}} - Z(E_{\mathrm{CrCr}} + E_{\mathrm{Cr\text{-}v}})\ .$$

سپس انرژی نقطه‌ی زینی‌شکل در فلز خالص به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۵۶-۶)

$$ES_{\text{pure}}^{\text{Cr}} = E_{\text{m}}^{\text{Cr-v}} + Z(E_{\text{CrCr}} + E_{\text{Cr-v}}) .$$

این دیدگاه، توصیف شده در مدل اصلاح شده کرکندال معکوس (پرکس) با نام مدل MIK [۱۲]، برای مدله کردن جدایش القایی تابشی مورد استفاده قرار گرفته است و نتایج با اندازه‌گیری‌های انجام شده روی تعدادی از آلیاژهای آستنیتی پایه‌ی آهن و پایه‌ی نیکل پرتودهی شده در دماهای بین ۲۰۰ تا ۶۰۰°C و مقدار مجاز پرتودهی بالای ۳ dpa مقایسه شده‌اند. نتایج جدایش القایی تابشی نشان داده شده در شکل ۶-۱۱ به وضوح اهمیت تغییرات ترکیبی محاسبه شده‌ی نزدیک چاهک‌ها در تعیین مقطع ترکیبی جدایش القایی تابشی را نشان می‌دهد. مطابقت محاسبات مدل MIK با اندازه‌گیری‌های AES غلظت نیکل مرزدانه‌ای در Fe-20Cr-24Ni پرتودهی شده، نسبت به مدل اصلی پرکس بسیار بهتر است. هم‌چنین، در محدوده‌ی وسیعی از آلیاژها، دوزها و دماهای پرتودهی (شکل ۶-۱۲)، گنجاندن تغییرات موضعی ترکیب بر روی نتایج جدایش القایی تابشی در توافق بهتری با اطلاعات است. این اطلاعات هم‌چنین برای نشان دادن اهمیت جاهای خالی در جدایش القایی تابشی در آلیاژهای Fe-Cr-Ni در دماهای متوسط به‌کار گرفته می‌شود. محاسبات مدل MIK، پیوند بین‌نشینی (یعنی، $E_{\text{b}}^{\text{ik}} = 0$) یا رسوب‌گذاری ترجیحی از هر نوع عناصر آلیاژی در شار بین‌نشین‌ها را در بر نمی‌گیرد. توافق خوب بین مدل و اندازه‌گیری تنها با رسوب‌گذاری ترجیحی عناصر آلیاژی در شار جای خالی به‌دست می‌آید. از آن‌رو به نظر می‌رسد که در سیستم Fe-Cr-Ni، مهاجرت اتم از طریق جاهای خالی سازوکار غالب در جدایش القایی تابشی باشد.

۶-۴ اثر عناصر حل شده روی جدایش القایی تابشی

حضور ناخالصی‌ها در یک جامد تمایل برای جدایش القایی تابشی در مرزدانه را تحت تأثیر قرار می‌دهد. فرض شده است که عناصر حل شده که در مقایسه با اتم‌های شبکه بزرگ اندازه یا کوچک اندازه هستند، می‌توانند در نقش تله‌هایی برای جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها عمل کنند. به دام‌اندازی عیوب نقطه‌ای به وسیله‌ی عناصر حل شده می‌تواند کسر جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها را که تحت بازترکیبی متقابل هستند، افزایش دهد، در نتیجه کسر جاری به سمت چاهک‌ها را کاهش داده و از

آن‌رو درجه‌ی جدایش را کاهش می‌دهد. منصور[1] و یو[2] [۱۷] معادلات تعادلی عیب نقطه‌ای را برای گنجاندن به دام‌اندازی عیوب نقطه‌ای تعمیم دادند. به دام‌اندازی با کم کردن و اضافه کردن عبارات مرتبط با به دام‌اندازی یا بازترکیبی در دام‌ها اصلاح شده است و عیوب نقطه‌ای از دام‌ها را آزاد می‌سازد. به علاوه، معادلات توضیح دهنده‌ی بقای عیوب به دام افتاده نیز اضافه شده‌اند. در نتیجه تعادل‌های عیب نقطه‌ای از معادله‌ی۶-۱ به صورت زیر مشخص می‌شود:

جاهای خالیِ آزاد:

(۵۷-۶)

$$\frac{\partial C_{\mathrm{v}}}{\partial t} = \nabla \cdot D_{\mathrm{v}} \nabla C_{\mathrm{v}} + K_0 - K_{\mathrm{iv}} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{v}} + \sum_l \tau_{\mathrm{v}l}^{-1} C_{\mathrm{v}l} - C_{\mathrm{v}} \sum_l K_{\mathrm{i}l} C'_{\mathrm{i}l} - C_{\mathrm{v}} \sum_l \kappa_{\mathrm{v}l} (C_{\mathrm{l}}^t - C'_{\mathrm{v}l} - C'_{\mathrm{i}l}) - K_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} \, .$$

بین‌نشین‌هایِ آزاد:

(۵۸-۶)

$$\frac{\partial C_{\mathrm{i}}}{\partial t} = \nabla \cdot D_{\mathrm{i}} \nabla C_{\mathrm{i}} + K_0 - K_{\mathrm{iv}} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{v}} + \sum_l \tau_{\mathrm{i}l}^{-1} C_{\mathrm{i}l} - C_{\mathrm{i}} \sum_l K_{\mathrm{v}l} C'_{\mathrm{v}l} - C_{\mathrm{i}} \sum_l \kappa_{\mathrm{i}l} (C_{\mathrm{l}}^t - C'_{\mathrm{v}l} - C'_{\mathrm{i}l}) - K_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} \, .$$

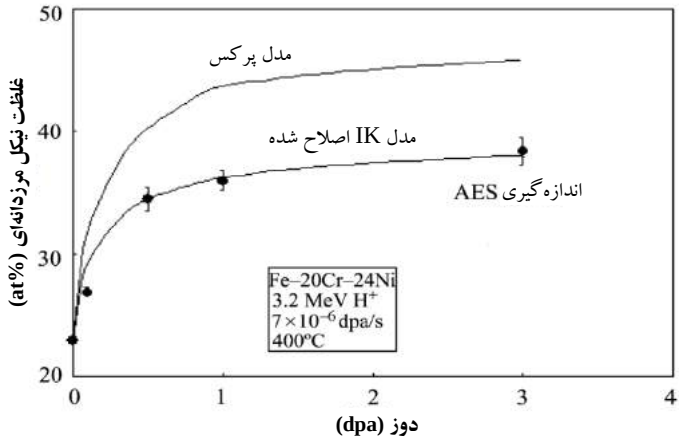
در معادله‌های ۶-۵۷ و ۶-۵۸، مجموعه‌ها در سراسر $l = 1, 2, \ldots, n$ نوع از تله‌ها بسط داده می‌شود. به صورت مشابه معادلاتی بعدی به هر $l = 1, 2, \ldots, n$ نوع از عیوب اعمال می‌شود.

تله‌ها (غلظت در کل تابعی از زمان و مکان است):

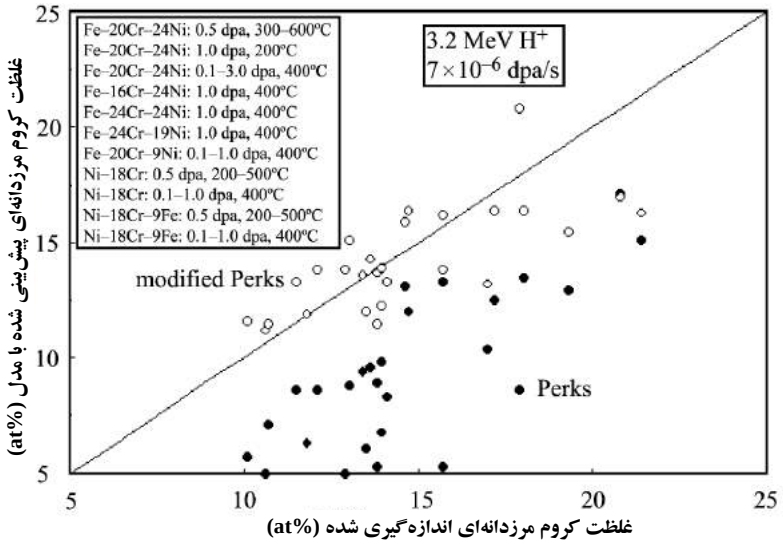
(۵۹-۶)

$$\frac{\partial C_{\mathrm{l}}^t}{\partial t} = f_{\mathrm{l}}(r,t) \, .$$

1. Mansur
2. Yoo



شکل۶-۱۱. نتیجه‌ی مدل اصلاح شده‌ی کرکندال معکوس (MIK) در مقایسه با نتایج مدل پرکس و اندازه‌گیری‌ها که نشان دهنده‌ی اهمیت محاسبه‌ی تغییرات موضعی ترکیب در چاهک‌ها در جدایش القایی تابشی است. آزمایشات روی آلیاژ Fe-20Cr-24Ni و با استفاده از پروتون‌هایی با انرژی ۳٫۲ MeV در دمای ۴۰۰°C و نرخ جابه‌جایی 7×10^{-6}dpa/s انجام شده است[۱۲].



شکل۶-۱۲. مدل اصلاح شده‌ی کرکندال معکوس اعمال شده به چندین آلیاژ تحت محدوده‌ای از مقادیر مجاز پرتودهی و دماها و مقایسه با اندازه‌گیری‌ها [۲].

جاهای خالیِ به دام افتاده:

(۶۰-۶)

$$\frac{\partial C_{\mathrm{v}l}^{t}}{\partial t}=C_{\mathrm{v}}\kappa_{\mathrm{v}l}(C_{\mathrm{l}}^{t}-C_{\mathrm{v}l}^{\prime}-C_{\mathrm{i}l}^{\prime})-\tau_{\mathrm{v}l}^{-1}C_{\mathrm{v}l}^{\prime}-C_{\mathrm{i}}K_{\mathrm{v}l}C_{\mathrm{v}l}^{\prime}\ .$$

بین‌نشین‌هایِ به دام افتاده:

(۶۱-۶)

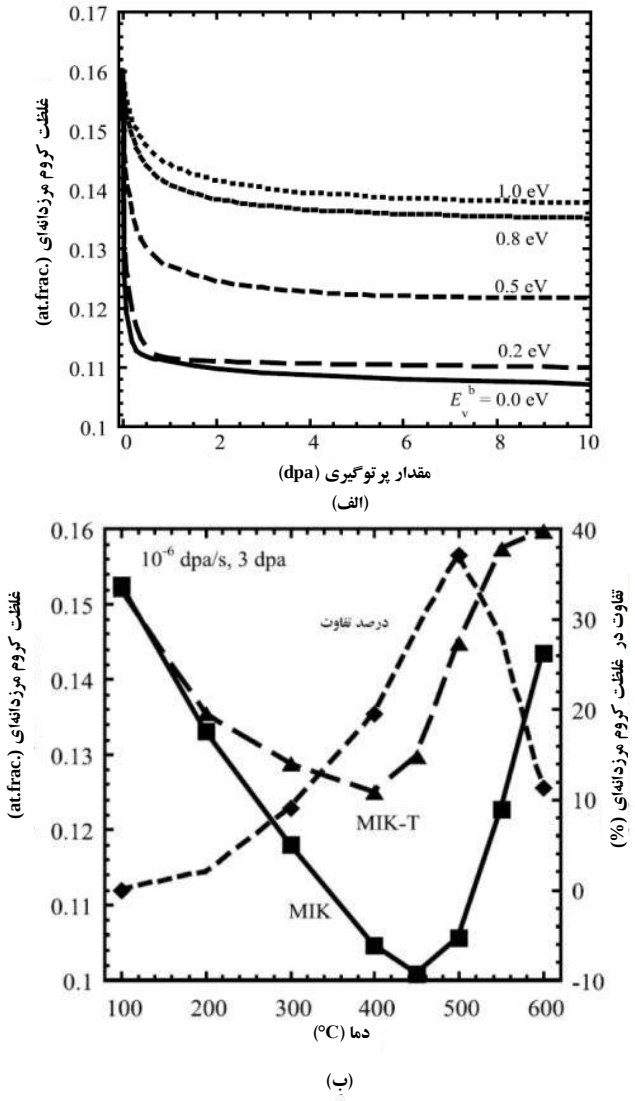
$$\frac{\partial C_{\mathrm{i}l}^{t}}{\partial t}=C_{\mathrm{i}}\kappa_{\mathrm{i}l}(C_{l}^{t}-C_{\mathrm{v}l}^{\prime}-C_{\mathrm{i}l}^{\prime})-\tau_{\mathrm{i}l}^{-1}C_{\mathrm{i}l}^{\prime}-C_{\mathrm{v}}K_{\mathrm{i}l}C_{\mathrm{i}l}^{\prime}\ .$$

در معادله‌های ۶-۵۷ و ۶-۵۸، سه عبارات اول مشابه با معادله‌ی ۶-۱ هستند. عبارات باقی‌مانده معانی زیر را دارند. با استناد به معادله‌های موجود برای جاهای خالی آزاد، عبارت چهارم مربوط به آزادسازی جاهای خالی به دام افتاده از چاهک است و متغیر τ_{vl}^{-1} زمان متوسطی است که جای خالی در jاُمین موقعیت به دام‌اندازی، به دام می‌افتد. زمان به دام‌اندازی متوسط به صورت $\tau_{jl}=\left(\frac{b^2}{D_j^0}\right)\exp\left[\frac{E_b^{jl}+E_{\mathrm{m}}^{j}}{kT}\right]$ نشان داده می‌شود که j دلالت برi یا v دارد. D_j^0 پیش‌نمایِ ضریب نفوذ [$D_j=\mathrm{D}_j^0\exp\left(-\frac{E_{\mathrm{m}}^{j}}{kT}\right)$] است، b بزرگی فاصله‌ی اتمی است، E_{b}^{jl} انرژی اتصال عیب نقطه‌ای در lاُمین نوع عیب و E_{m}^{j} انرژی مهاجرت عیب نقطه‌ای است. عبارت پنجم نرخ بازترکیبی جاهای خالی با بین‌نشین‌های به دام افتاده است، که K_{il} ثابت سرعت بازترکیبی برای آن واکنش است و به وسیله‌ی رابطه‌ی $K_{il}=4\pi r_{il}D_{\mathrm{v}}$ یا $K_{\mathrm{v}l}=4\pi r_{\mathrm{v}l}D_i$ تعیین می‌شود که r_{il} و $r_{\mathrm{v}l}$ به ترتیب شعاع‌های حجم‌های بازترکیبی را مشخص می‌کنند. عبارت ششم به دام‌اندازی جاهای خالی در یک تله از نوع l را نشان می‌دهد. تفاوت غلظتی ($C_l^t-C_{\mathrm{v}l}^{\prime}-C_{\mathrm{i}l}^{\prime}$) برای این حقیقت محاسبه می‌شود که در حال حاضر کسر $\frac{C_{\mathrm{v}l}^{\prime}}{C_l^t}+\frac{C_{\mathrm{i}l}^{\prime}}{C_l^t}$ تله از نوع l توسط جاهای خالی و بین‌نشین‌ها اشغال شده است و از آن‌رو به منزله‌ی تله‌هایی برای عیوب آزاد در دسترس نیستند. تفاوت غلظتی به این علت نیز محاسبه می‌شود که ممکن است یک تله مشخص یک انرژی اتصالی را هم برای جاهای خالی و هم برای بین‌نشین‌ها

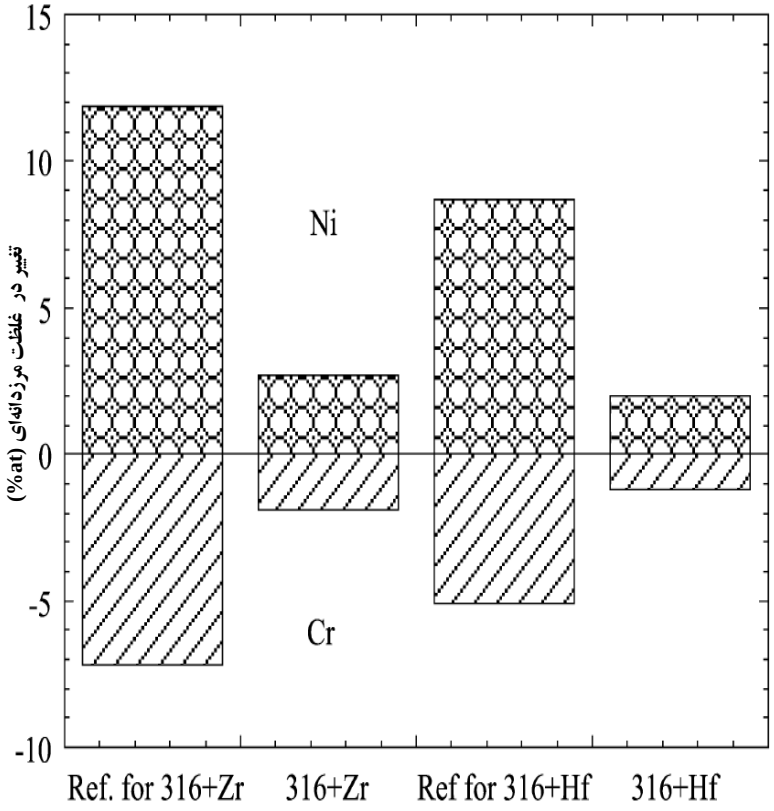
داشته باشد ولی ممکن نیست که هر دو در یک زمان به دام بیفتند، زیرا هنگامی که یکی از آن‌ها به دام می‌افتد، سپس آن موقعیت تبدیل به یک مرکز بازترکیبی می‌شود. عبارت‌های $\kappa_{vl} = 4\pi r'_{il} D_v$ و $\kappa_{il} = 4\pi r'_{il} D_i$ ضرایب به دام‌اندازیِ مشابه به ضرایب بازترکیبی را نشان می‌دهند و r'_{vl} و r'_{il} شعاع‌های به دام‌اندازی تله نوع l برای عیوب نقطه‌ای مربوطه هستند. سرانجام عبارت هفتم اتلاف عیوب به تمام چاهک‌های داخلی است و K_v ثابت سرعتی برای تمام چاهک‌ها را نشان می‌دهد.

معادله‌های ۶-۵۷ تا ۶-۶۱ برای غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در معادله‌ی ۶-۴۱ جانشین می‌شوند و با روش مشابه به روش کد MIK به جای MIK-T، حل می‌شود که قبلاً توضیح داده شد. نتایج به دام‌اندازی در آلیاژ Fe-16Cr-13Ni حاوی عناصر حل شده‌ی بزرگ اندازه با غلظت ۱٪ و پرتودهی شده در یک نرخ دوز 10^{-5} dpa/s در دمای ۴۰۰°C و برای انرژی‌های پیوندی بین‌نشین‌ها و جاهای خالی بالاتر از ۱٫۰ eV، در منحنی مقدار کروم مرزدانه‌ای برحسب مقدار مجاز دریافتی نشان داده شده است (شکل ۶-۱۳ الف). قابل ذکر است که برای به دام‌اندازی به منظور کاهش مقدار جدایش القایی تابشی انرژی‌های به دام‌اندازی بالا و در حدود ۱٫۰ eV مورد نیاز است. اثر اصلی کاهش در مقدار تهی‌سازی کروم مرزدانه‌ای است؛ اما اثر ثانویه کاهش نرخ جدایش با مقدار مجاز پرتوگیری است. شکل ۶-۱۳ ب نشان می‌دهد که به دام‌اندازی دمایی را که در آن جدایش القایی تابشی بیشینه است به دماهای نسبتاً پایین‌تری جابه‌جا می‌کند. شکل ۶-۱۴ اثر افزایش عناصر حل شده‌ی بزرگ اندازه روی تهی‌سازی کروم مرزدانه‌ای و غنی‌سازی نیکل در آلیاژهای Fe-Cr-Ni پرتودهی شده با پروتون‌ها را نشان می‌دهد و هم‌چنین نشان می‌دهد که نتایج آزمایشگاهی از لحاظ کیفی مدل را دنبال می‌کنند.

حتی با وجود موفقیت این مدل‌ها در پیش‌بینی جهت و بزرگی جدایش این مدل‌ها بسیار ناقص هستند. مدل‌ها برای آلیاژهای دوتایی و سه‌تایی گسترش پیدا کرده‌اند، درحالی‌که آلیاژهای واقعی مهندسی حاوی ۱۰ تا ۲۰ عنصر آلیاژی هستند. اگرچه بعضی از آن‌ها در مقادیر بسیار کمی در آلیاژ وجود دارند؛ اما می‌توانند تأثیرات زیادی را روی رفتار آلیاژ داشته باشند. مدل‌های پرکس و MIK فقط به اتم‌های عناصر حل شده قابل اعمال هستند و به اتم‌های بین‌نشین کوچک مانند بور، کربن و نیتروژن قابل اعمال نیستند. به علاوه، بسیاری از فاکتورهای ترمودینامیکیِ مورد نیاز برای شبیه‌سازی‌های دقیق جدایش القایی تابشی ناشناخته مانده‌اند و باید تخمین زده شوند و با قطعیت به نتایج اعمال شوند. علاوه بر این نقایص، این مدل‌ها می‌توانند با استدلال‌های عقلی برای جدایش القایی تابشی در سیستم‌های واقعی به کار گرفته شوند.



شکل ۶-۱۳. ترکیب کروم مرزدانه‌ای محاسبه شده‌ی (الف) به عنوان یک تابعی از انرژی پیوند برای مدل MIK-T در دمای ۴۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد و نرخ جابه‌جایی 1×10^{-5} dpa/s برای Fe-16Cr-13Ni و (ب) به صورت تابعی از دما در نرخ مقدار مجاز پرتوگیری ثابت 10^{-5} dpa/s در ۳ dpa. درصد تفاوت به صورت $\frac{(\text{MIK-T-MIK})}{\text{MIK}}\times100\%$ محاسبه شده است [۱۸].



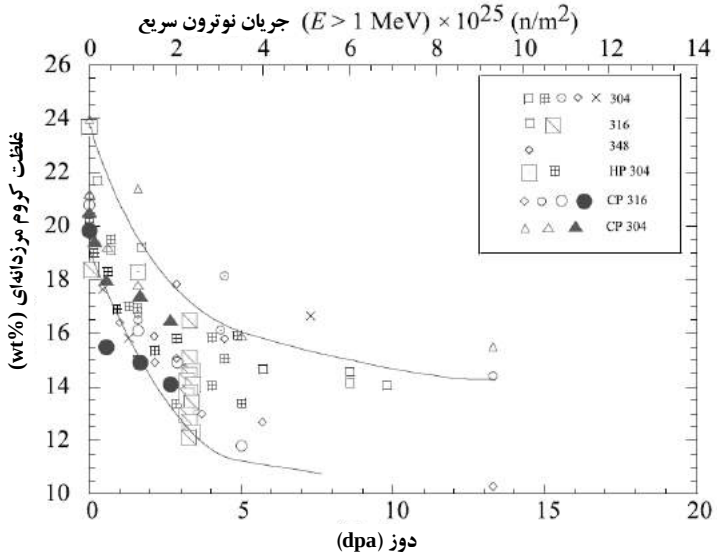
شکل ۶-۱۴. ترکیب Cr و Ni مرزدانه‌ای برای آلیاژهای Fe-Cr-Ni مرجع و ترکیب شده با ناخالصی‌های بزرگ اندازه که در دمای ^{o}C ۴۰۰ تا ۳٫۰ dpa (Zr) و ۲٫۵ dpa (Hf) پرتودهی شده‌اند [۱۹،۱۸].

۶-۵ مثال‌هایی از جدایش القایی تابشی در آلیاژهای آستنیتی

همان‌طوری که قبلاً بیان شد جدایش القایی تابشی مسئله‌ی بسیار حایز اهمیت در مواد ساختمانی در معرض پرتودهی در دماهای بالا است. تغییرات در ترکیب مرزدانه می‌تواند منجر به افزایش تغییرات ریزساختاری (رسوب‌گذاری، ساختار حلقه‌ی نابجایی، ساختار حفره) به علاوه تغییر در حساسیت به فرایندهایی مانند خوردگی بین‌دانه‌ای و ترک‌های خوردگی تنشی[1] (ترک خوردن ناشی از خوردگی همراه با تنش) شود. برای مثال، مشخص شده است که کروم همیشه در فولادهای زنگ نزن پرتودهی

1. Stress Corrosion Cracking

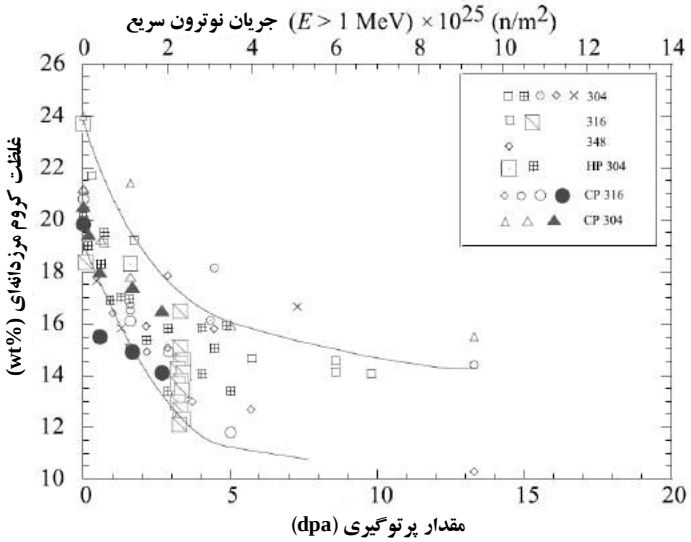
شده تهی می‌شود و اتلاف کروم در مرزدانه‌ها می‌تواند منجر به افزایش حساسیت در برابر خوردگی بین دانه‌ای و ترک‌های خوردگی تنشی بین دانه‌ای[1] (IGSCC) شود، زیرا کروم از طریق تشکیل یک لایه‌ی بسیار نازک و محافظ از جنس Cr_2O_3، واکنش‌پذیری فلز را کاهش می‌دهد. همان‌طوری که در آینده در فصل ۱۵ بحث خواهد شد، با افزایش مقدار مجاز پرتوگیری به مقداری بالاتر از سطح شبه آستانه[2]، مقدار ترک‌های خوردگی تنشی بین‌دانه‌ای که به صورت درصدی از سطح شکست که سطوح بین‌دانه‌ای را نمایان می‌کنند اندازه‌گیری می‌شود، به سرعت در آزمون‌های نرخ کرنش پایین در شیمی آب معمولیِ ۲۸۸^oC مورد استفاده در رآکتورهای آب جوشان[3] (BWR) افزایش می‌یابد. شکل ۶-۱۵ نشان می‌دهد که مقدار کروم مرزدانه‌ای هم‌چنین به سرعت با مقدار مجاز پرتوگیری ناشی از جدایش القایی تابشی کاهش می‌یابد. ممکن است که اتلاف کروم حساسیت آلیاژ به IASCC را افزایش دهد اگرچه در زمان مشابه تغییرات دیگری در ریزساختار درحال رخداد هستند.



شکل ۶-۱۵. وابستگی غلظت مرزدانه‌ای کروم به مقدار مجاز پرتوگیری برای تعدادی از فولادهای زنگ نزن سری ۳۰۰ پرتودهی شده در شرایط مختلف. لازم به ذکر است که جدایش القایی تابشی با مقدار مجاز پرتوگیری در محدوده‌ی 5dpa افزایش می‌یابد و بعد از آن تغییرات اندک است[۲۰].

1. Intergranular Stress Corrosion Cracking
2. Pseudo-Threshold
3. Boiling Water Reactors

همان‌طوری که در شکل ۶-۱۶ نشان داده شده است، سیلیکون نیز به شدت با مقدار مجاز پرتوگیری در فولادهای زنگ نزن آستنیتی پرتودهی شده در دمای تقریباً ۲۸۸ درجه‌ی سانتی‌گراد جدایش می‌یابد. این اندازه‌گیری‌ها از میزان بالای سیلیسیم با استفاده از STEM/EDS انجام شده است. به علت محدودیت تفکیک فضایی این روش ممکن است که میزان سیلیسیم مرزدانه‌ای واقعی در حدود ۳ تا ۵ برابر کم‌تر تخمین زده شود و غلظت‌هایی بیش‌تر از ۲۰٪ سیلیسیم در مرزدانه را تعیین می‌کند. از آن‌جایی که سیلیسیم در آب دما بالا قابل حل است، ممکن است که انحلال در مرزدانه‌ها را افزایش دهد و منجر به افزایش نرخ‌های خوردگی بین‌دانه‌ای و ترک‌های خوردگی تنشی بین‌دانه‌ای شود.



شکل۶-۱۶. جدایش مرزدانه‌ای سیلیکون در آلیاژهای آستنیتی سری ۳۰۰ پرتودهی شده با نوترون‌ها یا پروتون‌ها تا dpa ۱۳.

۶-۶ جدایش القایی تابشی در آلیاژهای فریتی

جدایش القایی تابشی در فولادهای فریتی به خصوص فولادهای مخازن تحت فشار که جدایش مرزدانه‌ایِ ناخالصی‌های بین‌نشین مانند فسفر پیامدهای ویژه‌ای برای تردی مرزدانه‌ای دارد، نیز قابل توجه است. در مقایسه با فولادهای آستنیتی، کارهای کم‌تری روی جدایش عناصر آلیاژی در آلیاژهای فریتی انجام شده است. مدل‌های جدایش برای ناخالصی‌هایِ بین‌نشینی به خوبی برای عناصر

حل شده جانشینی توسعه داده نشده است. فالکنر[1] [۲۱] اطلاعات جدایش و سازوکارها را مورد بازبینی قرار داد و پیشنهاد کرد که جدایش القایی تابشی در فولادهای فریتی به وسیله‌ی ترکیب‌های عیب ـ ناخالصی رخ می‌دهد و رقابت مکانی به وسیله‌ی دیگر عناصر در مرز یک نقش تعیین کننده‌ی ویژه در مقدار جدایش ناخالصی مشخص ایفا می‌کند. با تمرکز روی رفتار فسفر، فرض شده است که مهاجرت به وسیله‌ی ترکیب‌های خود بین‌نشین فسفر بسیار سریع است به گونه‌ای که غلظت در طول صفحه‌ی مرزدانه یکنواخت باقی می‌ماند. بیشینه‌ی غلظت مرزدانه‌ای فسفر به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۶۲-۶)

$$C_{\mathrm{P}}^{\max}=C_{\mathrm{g}}\frac{E_{\mathrm{b}}}{E_{\mathrm{f}}}\left[\frac{C_{\mathrm{g}}^{j}\exp\left(E_{\mathrm{b}}^{j}/kT\right)}{\sum_{j}C_{\mathrm{g}}^{j}\exp\left(E_{\mathrm{b}}^{j}/kT\right)}\right]\left[1+\frac{\xi K_0F(\eta)}{ADk^2}\exp\left(E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}/kT\right)\right],$$

که در این رابطه C_{g} غلظت کلی ناخالصی‌ها در دانه، E_{b}^{j} انرژی پیوندی بین عیب نقطه‌ای، خود بین‌نشین و اتم ناخالصی است و $\mathrm{E_f}$ انرژی تشکیل بین‌نشین‌ها و C_{g}^{j} غلظت اتم ناخالصی j در مرزدانه است. مخرج کروشه‌ی اول، مجموع عبارت‌های انرژی پیوندی عیوب نقطه‌ای برای همه‌ی عناصر وارد شونده به داخل فرایند رقابت مکانی است. در کروشه‌ی دوم، ξ راندمان تولید عیب، $F(\eta)$ یک عبارت بازترکیبی، K_0 نرخ تولید عیب، A وابسته به بی‌نظمی نوسانی اتم‌های احاطه کننده‌ی عیب نقطه‌ای، D ضریب نفوذ عیب و k^2 راندمان چاهک است.

پیرو جدایش مرزدانه‌ای غلظت ناخالصی به وسیله‌ی رقابت مکانی در مرزدانه جایی که غلظت فسفرها به صورت زیر مشخص می شود، تعیین خواهد شد:

(۶۳-۶)

$$C_{\mathrm{P}}^{*}=C_{\mathrm{P}}^{\max}\frac{C_{\mathrm{g}}^{\mathrm{P}}\exp(Q_{\mathrm{P}}/kT)}{C_{\mathrm{g}}^{j}\exp(Q_j/kT)+C_{\mathrm{g}}^{\mathrm{P}}\exp(Q_{\mathrm{P}}/kT)},$$

که $C_{\mathrm{g}}^{\mathrm{P}}$ غلظت فسفر و C_{g}^{j} غلظت دیگر عناصر ناخالصی در دانه‌ها است، و Q_{P} و Q_{j} به ترتیب انرژی‌های پیوندی مرزدانه‌ای عناصر حل شده برای فسفر و دیگر عناصر آلیاژی هستند. مقدار C_{P}^{*}

1. Faulkner

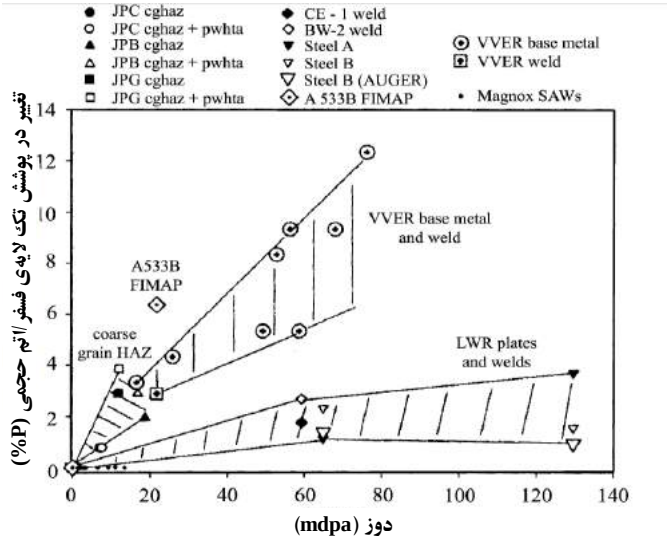
بیشینه‌ی جدایش مورد انتظار در حالت پایدار است. قبل از آن‌که حالت پایدار فرا برسد، غلظت مرزدانه وابسته به زمان و به صورت زیر است:

(۶۴-۶)

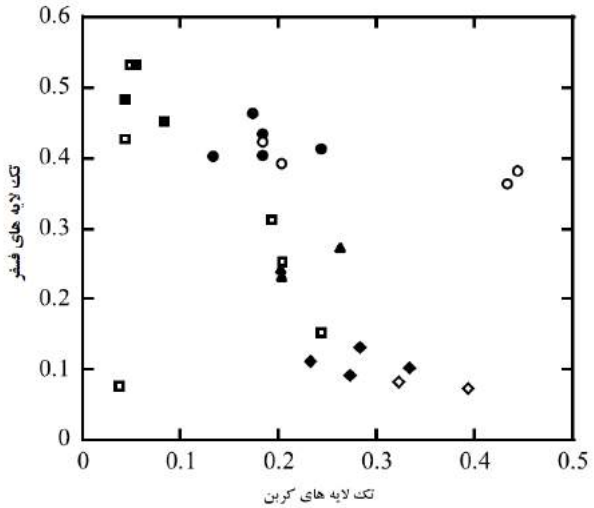
$$\frac{C_{\mathrm{P}}(t)-C_{\mathrm{g}}}{C_{\mathrm{P}}^{*}-C_{\mathrm{g}}}=1-\exp\left(\frac{4D_{\mathrm{c}}t}{\alpha^{2}d^{2}}\right)\operatorname{erfc}\left(\frac{2\sqrt{D_{\mathrm{c}}t}}{\alpha d}\right),$$

که D_c ضریب نفوذ ترکیب ناخالصی ـ عیب نقطه‌ای است و α نسبت غنی‌شدگی و d پهنای مرزدانه است. اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی از جدایش فسفر در فولادهای فریتی در شکل ۶-۱۷ نشان داده شده است. قابل ذکر است که درحالی‌که غلظت فسفر با افزایش میزان مقدار مجاز پرتوگیری افزایش می‌یابد، هم‌چنین به صورت قابل توجهی با نوع آلیاژ نیز تغییر می‌کند. این تغییر احتمالاً ناشی از رقابت مکانی با دیگر ناخالصی‌ها و از همه مهم‌تر کربن است. مشاهده شده است که فولاد A533 B سطح فسفر مرزدانه‌ای بالایی دارد زیرا این آلیاژ مقدار کربن پایینی دارد. شکل ۶-۱۸ رقابت بین فسفر و کربن در مرزدانه را نشان می‌دهد و جدایش فسفر هنگامی که میزان کربن پایین است، بالا است.

در آلیاژهای کروم بالا مانند آلیاژهای فریتی ـ مارتنزیتی Cr ۱۲-۹٪، رفتار کروم در مرز دانه یک نگرانی تلقی می‌شود زیرا این عنصر پتانسیل بالایی برای تشکیل فازهای ترد و غنی از کروم دارد. درحالی‌که Cr در آلیاژهای آستنیتی تهی می‌شود، نتایج اخیر نشان داده است که این عنصر در آلیاژهای فریتی ـ مارتنزیتی غنی می‌شود و مانند عنصر حل شده‌ی کوچک اندازه عمل می‌کند [۲۲]. اگرچه این رفتار تاکنون درک نشده است لیکن آزمایشات نشان داده‌اند که غنی‌شدگی کروم در مرزدانه می‌تواند ذاتی باشد.



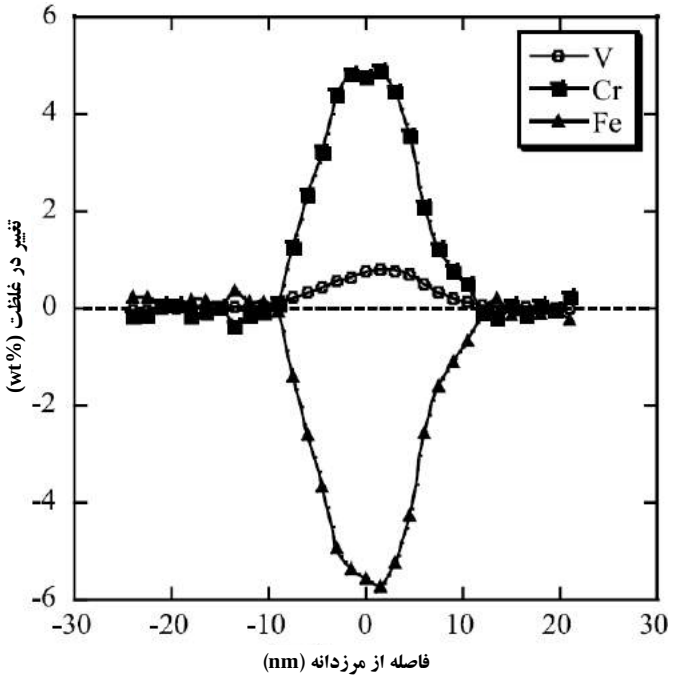
شکل ۶-۱۷. وابستگی تغییر القایی تابشی به مقدار مجاز پرتوگیری در پوشش تک لایه‌ی فسفرهای مرزدانه‌ای که با توجه به غلظت حجمی فسفرهای اتمی برای صفحات C-Mn LWR، جوش‌ها و ساختار HAZ درشت و فلز پایه‌ی VVER و جوش بهنجار شده است. تمام دماهای پرتودهی در محدوده‌ی ^{o}C ۲۹۰-۲۷۰ هستند بجز اره‌های مگنوس[1] که در محدوده‌ی ^{o}C ۳۱۱-۱۸۶ هستند[۲۱].



شکل۶-۱۸. تغییر پوشش تک لایه‌ی فسفر و کربن در مرزدانه‌های آلیاژهای فریتی سخت گردانی شده‌ی حرارتی و پرتودهی شده[۱۲].

1. Magnox SAWs

شکل ۶-۱۹ نشان می‌دهد که کروم در مرزدانه آلیاژ Fe-9Cr (T91) بعد از پرتودهی با پروتون‌های ۲MeV تا ۱۰ dpa در ۴۵۰°C غنی می‌شود. اگر چنین غنی‌سازی منجر به تشکیل فازهای غنی از Cr شود، می‌تواند تردی مرزدانه‌ای نتیجه شود.



شکل ۶-۱۹. ترکیب مرزدانه‌ای از فولاد Fe-9Cr فریتی ـ مارتنزیتی حاوی ۰٫۲٪ V و پرتودهی شده با پروتون‌های ۲ MeV در دمای ۴۵۰°C تا ۱۰dpa [۲۲].

نام‌گذاری اصطلاحات

A: عبارت مرتبط با بی‌نظمی نوسانی، معادله‌ی ۶-۶۲

C_x: غلظت گونه‌ی x

C_{P}^{*}: بیشینه‌ی جدایش مرزدانه‌ای فسفر در حالت پایدار در فولادهای فریتی

d: اندازه‌ی دانه

d_{xy}: ضریب نفوذ جزیی تقسیم بر N_y

d_0^x: عبارت پیش نمایی برای نفوذ گونه‌ی x

D: ضریب نفوذ

D_x^y: ضریب نفوذ جزیی برای مهاجرت گونه‌ی x از طریق y

E_{eq}^x: انرژی تعادلی برای گونه‌ی x

E_{b}^{xz}: انرژی اتصال گونه‌ی x به عیب z

E_{f}^x: انرژی تشکیل گونه‌ی x

E_{m}^{xz}: انرژی مهاجرت گونه‌ی مهاجرت کننده‌ی x از طریق عیب z

E_{xy}: انرژی برهم‌کنش بین گونه‌ی x و y

E_{xy}^{ord}: انرژی منظم شدن برای گونه‌های x و y

ES_{alloy}^x: انرژی نقطه‌ی زینی‌شکل برای عنصر x در آلیاژ

f: ضریب هم‌بستگی

$F(\eta)$: عبارت بازترکیبی در معادله‌ی ۶-۶۲

i: نماد بین‌نشین

k: ثابت بولتزمان

k^2: راندمان چاهک

v: نماد جای خالی

s: نماد چاهک

J_x: شار اتم یا عیب x در طول صفحه‌ی نشان‌گر

K_0: نرخ تولید عیب

K_{xy} : ثابت سرعت واکنش برای x و y

M_j : دترمینان برای گونه‌ی j (تعریف شده در معادله‌های ۶-۲۳ و ۶-۳۹)

N_x : کسر اتمی گونه‌ی x

Q_{sj} : انرژی اتصال مرزدانه برای عنصر حل شده‌ی j

r_{xy} : شعاع به دام‌اندازی برای عیب x به وسیله‌ی چاهک/تله y

R : نرخ بازترکیبی

S_{m}^{x}: بی‌نظمی مهاجرت برای گونه‌ی x

t : زمان

T : دما

z : تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها

α : نسبت غنی‌سازی

γ_x : ضریب فعالیت برای گونه‌ی x

κ_{xy} : ضریب به دام‌اندازی عیب x به وسیله‌ی چاهک/تله y

λ : فاصله‌ی پرش

ω : بسامد پرش

Ω : حجم اتمی

τ : ثابت زمانی

ξ : راندمان تولید عیب

زیرنویس‌ها

eq : تعادل

f : تشکیل

g : ناخالصی

l : نوع تله

m : مهاجرت

بالانویس‌ها

j: گونه یا عیب

k: عنصر حل شده

ord: نظم

t: تله

مخفف‌ها

AES: اسپکتروسکوپی الکترون اوژه

BWR: رآکتور آب جوشان

F-M: فریت ـ مارتنزیت

IASCC: ترک ناشی از خوردگیِ تنشی با کمک پرتودهی

IGSCC: ترک ناشی از خوردگیِ تنشی بین‌دانه‌ای

IGC: ترک‌های بین‌دانه‌ای

IK: کرکندال معکوس

MIK: کرکندال معکوس اصلاح شده

MIK-T: کرکندال ـ به دام‌اندازی معکوسِ اصلاح شده

RIS: جدایش القایی تابشی

STEM-EDS: میکروسکوپ الکترونی روبشی عبوری ـ اسپکتروسکوپی پراکنش انرژی

مسایل

۶-۱ نمونه‌ای از Cu-20%Al پرتودهی شده در دمای $۵۰۰^{o}C$ موجود است.

الف) آیا آلومینیوم در سطح یا به سمت سطح دچار جدایش می‌گردد؟ *توضیح.* (فرض کنید که پیوند عیوب با اتم‌های Al و Cu غیرترجیحی باشد.)

ب) اگر یک پیوند قوی (یک پیوند ترجیحی) از بین‌نشین‌ها به اتم‌های کوچک اندازه وجود داشته باشد، جواب قسمت اول چگونه تغییر خواهد کرد؟ ($E_{b}^{Cu\text{-}i}$ را برابر با ۱ eV در نظر بگیرید.)

ج) بخش (الف) را برای دمای $۱۰۰\ ^{o}C$ تکرار کنید (در این دما جاهای خالی غیرمتحرک هستند).

۶-۲ آلیاژ Ni-18Cr در دمای ۴۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد پرتودهی می‌شود.

الف) غلظت کروم در مرزدانه اندازه‌گیری و مشخص شد که تهی شده است. نشانه دترمینان برای کروم چیست؟

ب) غلظت حجمی نیکل از ۸۲ به ۷۰ درصد کاهش می‌یابد. با فرض هیچ‌گونه تغییر دیگری برای دترمینان کروم چه اتفاقی رخ می‌دهد؟ فرضیات خود را بیان کنید.

ج) اگر ضریب نفوذ جاهای خالی کروم کاهش یابد، برای مقطع جدایش کروم چه اتفاقی رخ می‌دهد؟

۶-۳ آلیاژ Fe-18Cr-8Ni پرتودهی شده است و جدایش القایی تابشی ترکیب مرزدانه را تغییر می‌دهد. معادلات نیکل و کروم برای آلیاژ حجمی و در مرزدانه با فرض $\Delta Cr = -۵$ و $\Delta Ni = +۳$ را محاسبه کنید. برحسب دیاگرام اسچیفلر[1]، تفاوت سطح مرزدانه نسبت به حجم چگونه است؟ اگر یک آلیاژ Fe-18Cr-20Ni در شرایط مشابهی پرتودهی شود، چه تغییراتی رخ می‌دهد؟

۶-۴ برای آلیاژ سه‌تایی Fe-18Cr-20Ni، تعیین کنید که آهن در طول پرتودهی در دمای $۵۰۰^{o}C$ غنی یا تهی می‌شود؟

1. Schaeffler diagram

۶-۵ برای آلیاژ Fe-18Cr-20Ni در مسئله‌ی ۶-۴، انرژی مهاجرت برای کروم از طریق جاهای خالی، $E_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Cr-v}}$ در مرزدانه هنگامی را که ترکیب مرزدانه برابر با Fe-10Cr-30Ni است، تعیین کنید.

$$E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Cr}} = -4.10\,\mathrm{eV}$$
$$E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Fe}} = -1.28\,\mathrm{eV}$$
$$E_{\mathrm{coh}}^{\mathrm{Ni}} = -4.44\,\mathrm{eV}$$
$$E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Cr\text{-}v}} = 1.60\,\mathrm{eV}$$
$$E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Fe\text{-}v}} = 1.40\,\mathrm{eV}$$
$$E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Ni\text{-}v}} = 1.79\,\mathrm{eV}$$
$$E_{\mathrm{NiCr}}^{\mathrm{ord}} = 0.005\,\mathrm{eV}$$
$$E_{\mathrm{FeCr}}^{\mathrm{ord}} = 0.003\,\mathrm{eV}$$

مراجع

1. Bruemmer SM, Simonen EP, Scott PM, Andresen PL,Was GS, Nelson LJ (1999) J Nucl Mater 274:299–314.
2. Anthony TR (1972) In: Corbett JW, Ianniello LC (eds) Radiation-Induced Voids in Metals and Alloys, AEC Symposium Series, Conf-701601, p 630.
3. Okamoto PR, Harkness SD, Laidler JJ (1973) ANS Trans 16:70.
4. Wiedersich H, Okamoto PR, Lam NQ (1979) J Nucl Mater 83:98–108.
5. Perks JM, Marwick AD, English CA (1986) AERE R 12121 (June).
6. Rehn LE, Okamoto PR, Potter DI, Wiedersich H (1978) J Nucl Mater 74:242–251.
7. Rehn LE (1982) In: Picraux ST, Choyke WJ (eds) Metastable Materials Formation by Ion Implantation. Elsevier Science, New York, p 17.
8. Okamoto PR, Wiedersich H (1974) J Nucl Mater 53:336–345.
9. Kornblit L, Ignatiev A (1984) J Nucl Mater 126:77–78.
10. Was GS, Allen TR, Busby IT, Gan I, Damcott D, Carter D, Atzmor M, Konik EA (1999) J Nucl Mater 270:96–114 .
11. Was GS, Allen TR (1993) J Nucl Mater 205:332–338.
12. Allen TR, Was GS (1998) Acta Metal 46:3697.
13. Lam NQ, Kumar A, Wiedersich H (1982) In: Brager HR, Perrin JS (eds) Effects of Radiation onMaterials, 11th Conference, ASTMSTP 782, American Society for Testing and Materials, pp 985–1007.
14. Watanabe S, Takahashi H (1994) J Nucl Mater 208:191.
15. Grandjean Y, Bellon P, Martin G (1994) Phys Rev B 50:4228.
16. Nastar M, Martin G (1999) Mater Sci Forum 294–296:83.
17. Mansur LK, Yoo MH (1978) J Nucl Mater 74:228–241.
18. Hackett MJ, Was GS, Simonen EP (2005) J ASTM Int 2(7).
19. Fournier L, Sencer BH,Wang Y,Was GS, Gan J, Bruemmer SM, Simonen EP, Allen TR, Cole JI (2002) In: Proceedings of the 10th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors, NACE International, Houston, TX.
20. Was GS (2004) Recent developments in understanding irradiation assisted stress corrosion cracking. In: Proceedings of the 11th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems:Water Reactors, American Nuclear Society, La Grange Park, IL, pp 965–985.
21. Faulkner RG, Jones RB, Lu Z, Flewitt PEJ (2005) Phil Mag 85(19):2065–2099.
22. Gupta G, Jiao Z, Ham AN, Busby JT, Was GS (2006) J Nucl Mater 351 (1–3):162–173.

۷

ریزساختار نابجایی

یکی از نتایج شگرف پرتودهی روی ریزساختار مواد، تشکیل حلقه‌های نابجایی است. حلقه‌های نابجایی گرایشی برای بین‌نشین‌ها دارند و در نتیجه اثر شدیدی روی تکامل ریزساختار پرتودیده دارند. هم‌چنین آن‌ها رفتار تشکیل ریزساختار و عیوب را تحت تأثیر قرار می‌دهند و روی انعطاف‌پذیری[1] و سخت‌شوندگی[2] مواد پرتودیده، همان‌طوری که در فصل ۱۲ بحث خواهد شد، تأثیرگذار خواهند بود. در این فصل منشأ و مشخصه‌ی نابجایی‌ها، تحرک و تکثیر آن‌ها و هم‌چنین تنش‌ها، کرنش‌ها و انرژی‌های آن‌ها مورد بررسی قرار خواهد گرفت. مشخصات حلقه‌های نابجایی در ادامه نیز بررسی خواهد شد و مدل‌هایی برای جوانه‌زنی و رشد نشان داده خواهد شد و در پایان، چهاروجهی نقص در چیده شدن مورد بحث قرار می‌گیرد. برای مطالعات بسیار عمیق‌تر می‌توان مرجع‌های [۱، ۲، ۳، ۴] را مطالعه کرد.

1. Ductility
2. Hardening

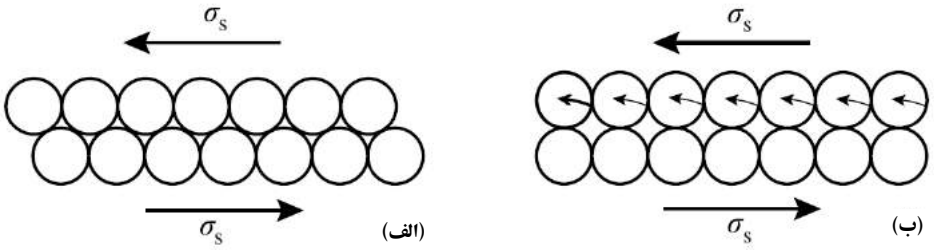
۷-۱ خط‌های نابجایی[1]

منشأ کشف نابجایی در بلورها به تفاوت میان تنش‌های نظری و اندازه‌گیری شده مورد نیاز برای ایجاد برش در یک بلور بر می‌گردد. تنش مورد نیاز برای برش دادن یک بلور در طول یک صفحه‌ی اتمی مشخص را در نظر بگیرید. برای آن‌که اتم‌های بالای صفحه به اندازه‌ی یک فاصله‌ی شبکه از اتم‌های زیری حرکت کنند، برشی به اندازه‌ی یک فاصله‌ی اتمی نیاز است (شکل ۷-۱). برای رسیدن به نقطه‌ی زینی‌شکل، هر اتم باید به صورت افقی و به اندازه‌ی یک شعاع اتمی، a، حرکت کند. از آن‌جایی که فاصله‌ی دو صفحه تقریباً برابر با $2a$ است، کرنش برشی در نقطه‌ی زینی‌شکل برابر $\gamma \approx \frac{a}{2a} \sim \frac{1}{2}$ است. در یک بلور کشسان بدون نقص، نسبت تنش برشی به کرنش برشی برابر با ضریب برشی است:

(۷-۱)

$$\frac{\sigma_s}{\gamma} = \mu .$$

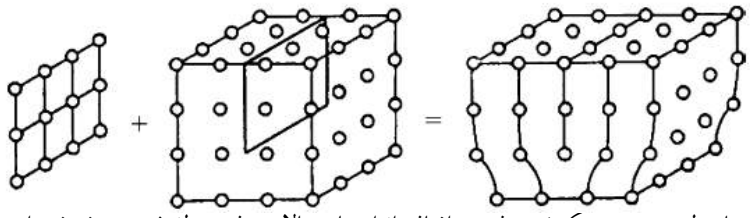
برای یک ضریب برش نمونه‌وار ۱۷ GPa و یک کرنش برشی $\frac{1}{2}$، تنش برشی با توجه به معادله‌ی ۷-۱ برابر با ۸٫۵ GPa است. به هرجهت آزمایشات، برای مثال روی منگنز، در تنش برشی تقریباً ۱ MPa تغییر شکلی را نشان می‌دهند که از نتایج نظری در حدود 10^{-4} برابر کم‌تر است. دلیل، وجود نابجایی‌هایی است که منجر به تنش‌های برشی کم‌تری در بلور می‌شود.



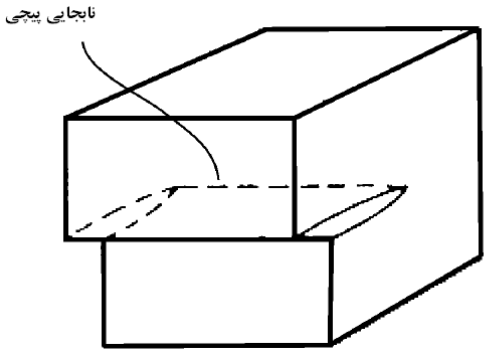
شکل ۷-۱. موقعیت ابتدایی اتم‌های بالا و پایین یک صفحه‌ی لغزشی، و برای ایجاد لغزش حرکت اتم‌های بالای صفحه‌ی لغزشی لازم است.

1. Dislocation Lines

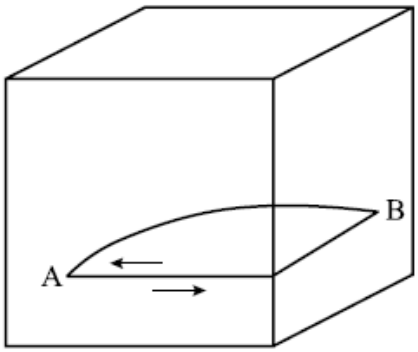
نابجایی، خطی است که مرزی را میان یک منطقه از بلور که لغزیده و ناحیه‌ای که لغزش نداشته است، ایجاد می‌کند. دو نوع اصلی از خط‌های نابجایی، نابجایی‌های لبه‌ای و پیچی هستند. در *نابجایی لبه*، اتم‌ها در سراسر صفحه‌ی برش‌خورده در جهت عمود بر خط نابجایی تغییر مکان پیدا می‌کنند. هم‌چنین نابجایی لبه‌ای می‌تواند به صورت یک نیم صفحه‌ی اضافی از اتم‌ها در داخل ساختار بلوری در نظر گرفته شود (شکل ۷-۲). در *نابجایی پیچی*، اتم‌ها در سراسر صفحه‌ی برش‌خورده در جهت *موازی* با خط نابجایی تغییر مکان پیدا می‌کنند (شکل ۷-۳). هم‌چنین *نابجایی‌های مختلط* که در آن‌ها تغییر مکان نه موازی و نه عمود بر خط نابجایی است و در واقع در بعضی زوایای اختیاری رخ می‌دهد، نیز وجود دارند. شکل ۷-۴ یک نابجایی مختلط در یک بلور را که در آن خط نابجایی منحنی است، نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که در این نوع از نابجایی‌ها مرز جداکننده‌ی ناحیه‌ی لغزیده و غیرلغزیده مدور است. در نقطه‌ی A (سطح جلویی)، نابجایی ویژگی لبه‌ای خالص دارد. در نقطه‌ی B (سطح کناری)، نابجایی مشخصه‌ی پیچیِ خالص دارد. در وسط، نابجایی ویژگی *آمیخته‌ای* از لبه‌ای و پیچی دارد و به صورت پیوسته در طول خط با فاصله تغییر می‌کند. شکل ۷-۵ ساختمان نابجایی مخلوط را نشان می‌دهد.



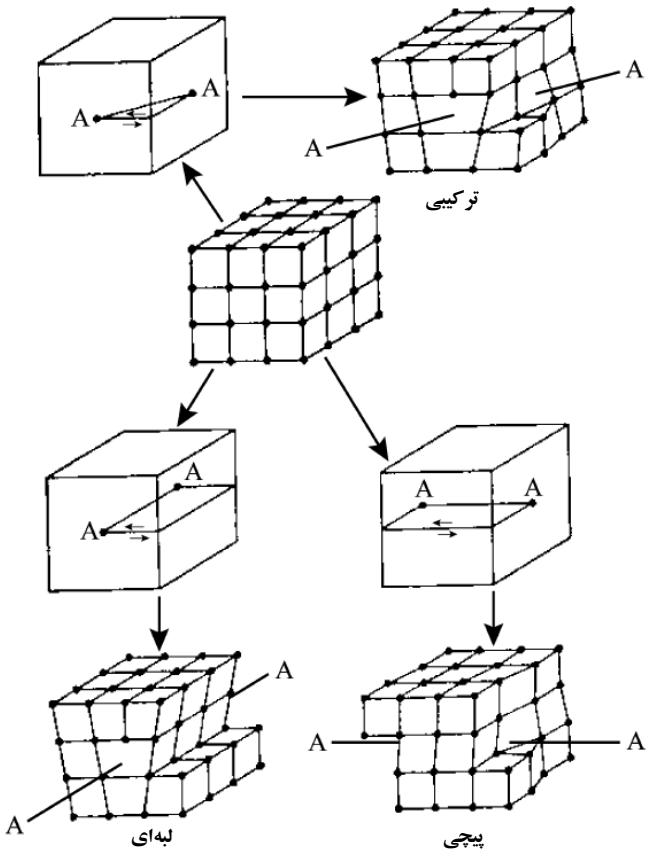
شکل۷-۲. نابجایی لبه به صورت یک نیم صفحه‌ی اضافی از اتم‌ها در بالای صفحه‌ی لغزش توصیف شده است.



شکل۷-۳. یک نابجایی پیچی به وسیله‌ی یک برش و تغییر مکان اتم‌ها در جهت موازی با خط برش تشکیل شده است.

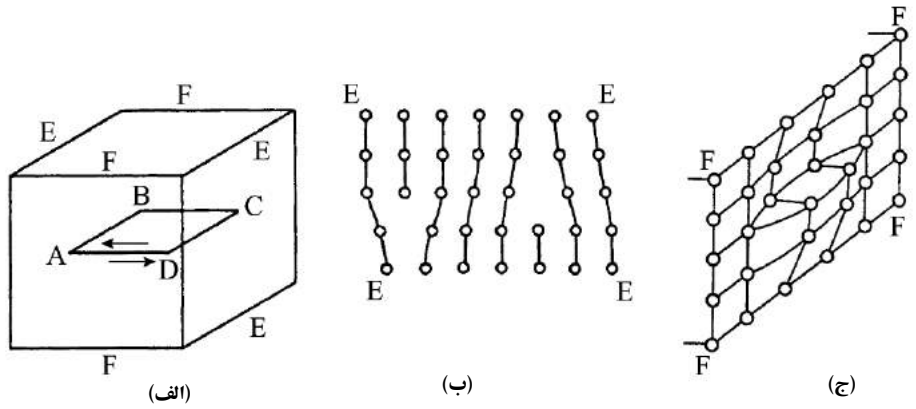


شکل۷-۴. خط نابجایی خمیده با مشخصه‌ی پیچشی خالص در نقطه A، مشخصه‌ی لبه‌ای خالص در نقطه‌ی B و مشخصه‌ی ترکیبی در طول خط نابجایی.



شکل ۷-۵. ساختمان یک خط نابجایی با مشخصه‌ی ترکیبی.

یک خط نابجایی می‌تواند به جای آن‌که به صورت یک خط که در سطح بلور به پایان می‌رسد، به شکل یک حلقه‌ی بسته نیز ایجاد شود. با توجه به شکل ۷-۶ برشی در طول ABCD ایجاد شده و اتم‌ها موازی با صفحه انتقال داده شده و سپس دوباره به ساختار متصل می‌شوند. لازم به ذکر است که تکه‌های AB و DC ویژگی لبه‌ای و تکه‌های BC و AD ویژگی پیچشی دارند. تکه‌های AB و DC علامت‌های مخالفی دارند که در آن‌ها یکی، یک نیم صفحه‌ی بالای سطح برش و دیگری نیم صفحه‌ای در زیر آن دارد. به صورت مشابه این موارد برای BC و AD نیز صدق می‌کند. این حلقه به منزله‌ی یک حلقه نابجایی *کامل* در نظر گرفته می‌شود.



شکل ۷-۶. یک حلقه‌ی نابجایی کامل در یک بلور که در آن ویژگی حلقه با موقعیت در طول حلقه تغییر می‌یابد.

اکنون فرض می‌شود که به جای انتقال اتم‌های موازی با صفحه همان‌طوری که در مثال حلقه‌ی کامل انجام شد، مقطع برش‌خورده با اتم‌های زیادی پر شود. انتقال اتم‌ها بر روی هر سمت از برش، عمود بر سطح است. شکل ۷-۷ نشان می‌دهد که با وارد کردن یک صفحه از اتم‌ها به داخل برش، هر بخش از حلقه نابجایی ویژگی لبه‌ای خالص دارد. این حلقه، از حلقه‌ی کامل با ویژگی لبه‌ای و پیچشی بسیار متفاوت است. این حلقه نابجایی، یک حلقه *منشوری* یا حلقه‌ی *فرانک* نامیده می‌شود. یک اختلاف این حلقه‌ها با حلقه‌های کامل این است که به جای حذف یک صفحه‌ی از اتم‌ها از برش، یک صفحه‌ی اضافی از اتم‌ها وارد شده است.

۷-۱-۱ حرکت نابجایی

نابجایی‌ها می‌توانند به دو صورت لغزش[1] و صعود[2] حرکت کنند. لغزیدن حرکت نابجایی روی صفحه‌ی لغزش خودش است و از این جهت که این فرایند جهت رخداد نیاز به هیچ‌گونه انتقال جرم بلند دامنه ندارد، یک حرکت پایستار[3] محسوب می‌شود. آزمایش‌ها نشان می‌دهند که لگاریتم سرعت نابجایی متناسب با لگاریتم تنش برشی ایجاد کننده لغزش است:

(۷-۲)

$$\ln v_g \alpha \ln \sigma_S ,$$

که یک رابطه‌ی قانون توانی[4] بین تنش برشی و سرعت نابجایی را ایجاب می‌کند:

(۷-۳)

$$v_g = \left(\frac{\sigma_S}{\sigma_D}\right)^m ,$$

که m توان تنش (۱٫۶۵ ~) است و σ_D مقدار تنشی است که سرعت نابجایی ۰٫۰۱ m/s را نتیجه می‌دهد [۵]. آزمایش‌ها هم‌چنین نشان داد که لگاریتم سرعت نابجایی متناسب با معکوس دمای مطلق، T، است:

(۷-۴)

$$\ln v_g \alpha \frac{1}{T} ,$$

که منجر به توصیف زیر از سرعت یک نابجایی لغزنده بر حسب تنش و دما می‌شود:

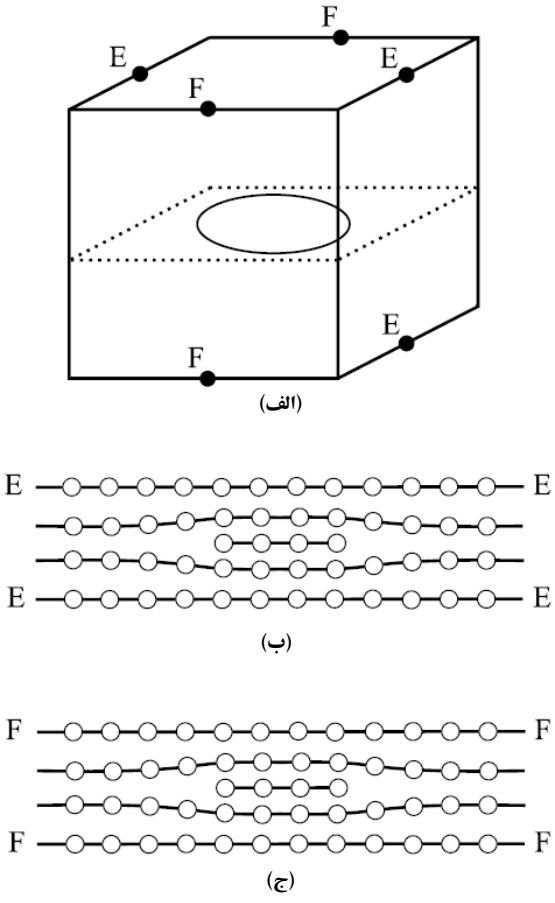
(۷-۵)

$$v_g = f(\sigma)\exp(-E/kT) .$$

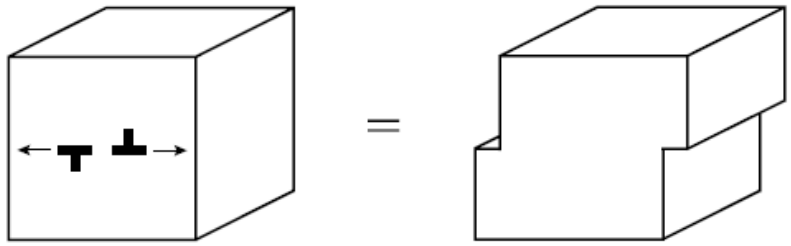
---

1. Glide
2. Climb
3. Conservative motion
4. Power law

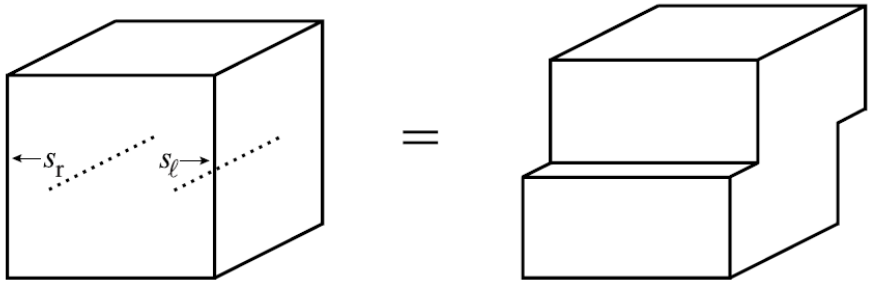
هنگامی که نابجایی‌ها می‌لغزند، اتم‌های بلور در بالای صفحه‌ی لغزش را از اتم‌های بلور در پایین صفحه لغزش جابه‌جا می‌کنند. شکل ۷–۸ نشان می‌دهد که اگر یک نابجایی لبه به سطح لغزیده شود (سُر بخرد)، نتیجه آن ایجاد یک پله روی سطح به بزرگی بردار بُرگرز است. نابجایی‌های پیچی نیز روی سطح یک پله ایجاد می‌کنند، بنابراین پله روی وجهی تشکیل می‌شود که عمود بر خط نابجایی است (شکل ۷–۹). حلقه‌ی کامل توضیح داده شده در فصل قبل نیز هنگامی که به سطح می‌رسد منجر به جابه‌جایی بلور خواهد شد. شکل ۷–۱۰ جابه‌جایی بلور بالای صفحه‌ی لغزش را نسبت به پایین آن نشان می‌دهد. قابل ذکر است که جابه‌جایی‌ها تماماً با مشخصه‌ی نابجایی مطابق هستند که به سطح اضافه شده است (همان‌طوری که شکل‌های ۷–۸ و ۷–۹ نشان می‌دهد).



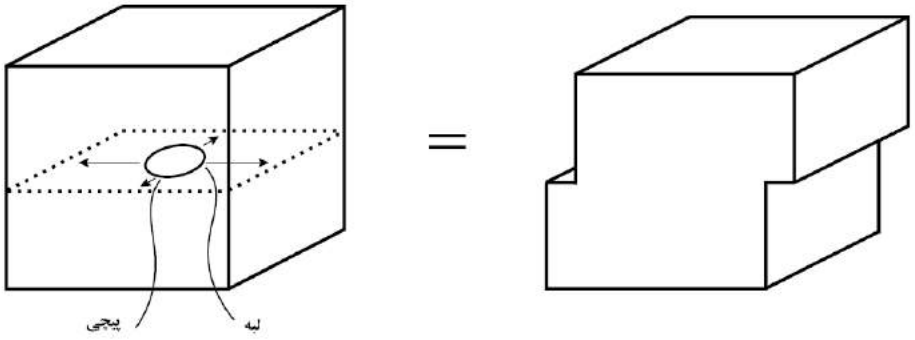
شکل ۷–۷. حلقه‌ی نابجایی فرانک به وسیله‌ی اضافه کردن صفحه‌ی مدور از اتم‌ها بین صفحات موجود در شبکه تشکیل شده است.



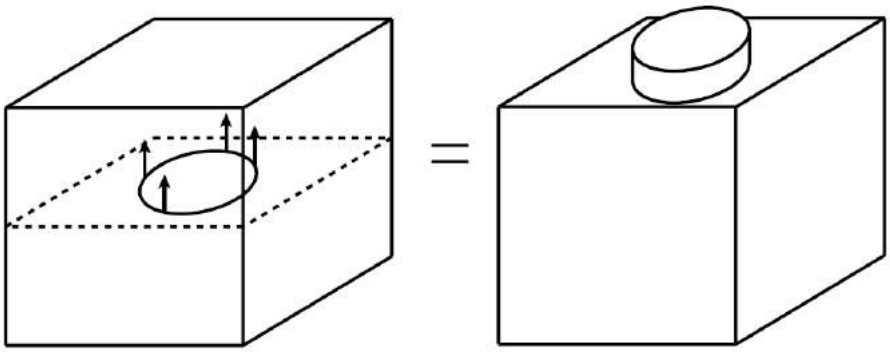
شکل۷-۸. لغزش به وسیله‌ی حرکت نابجایی‌های لبه‌ای به سطح یک بلور ایجاد شده است.



شکل۷-۹. لغزش به وسیله‌ی حرکت نابجایی‌های پیچی به سطح یک بلور ایجاد شده است.



شکل۷-۱۰. لغزش به وسیله‌ی حرکت حلقه‌ی نابجایی کامل به سطح بلور ایجاد شده است.



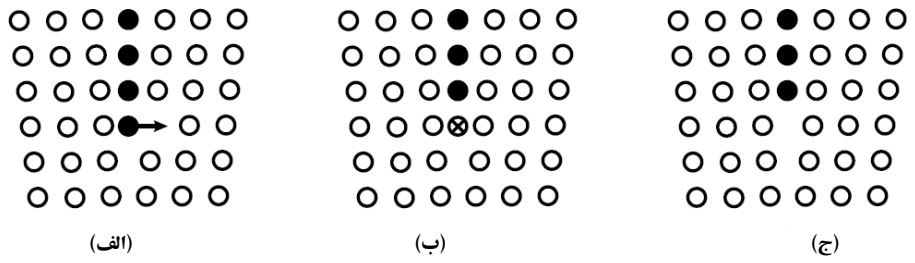
شکل۷-۱۱. لغزش به وسیله‌ی حرکت حلقه‌ی فرانک به سطح بلور ایجاد شده است.

یک حلقه‌ی فرانک در اصل نابجایی لبه‌ای است. صفحه‌ی لغزش برای این نوع حلقه به وسیله‌ی تقاطع لبه‌ی حلقه و بلور مجاور تعریف می‌شود و شامل یک صفحه‌ی استوانه‌ای سه بعدی بالا و پایین صفحه‌ی حلقه است. شکل ۷-۱۱ نشان می‌دهد که اگر حلقه به سطح بلغزد، چگونه ممکن است اتم‌های سطحی جابه‌جا شوند. به هرجهت، این شیوه‌ی حرکت از لحاظ انرژی مطلوب نیست و بسیار محتمل‌تر است که این حلقه به وسیله‌ی صعود و نه به وسیله لغزیدن به حرکت درآید.

نابجایی‌ها با یک فرایند غیرپایستار که *صعود* نامیده می‌شود، نیز حرکت می‌کنند. صعود یک فرایند بسیار مهم برای نابجایی‌های لبه‌ای و حلقه‌های منشوری است، زیرا نابجایی‌های پیچشی مختلف می‌توانند روی هر صفحه حاوی نابجایی بلغزند، درحالی‌که برای لغزیدن یک نابجایی لبه‌ای فقط یک صفحه‌ی لغزشی ممکن وجود دارد. صعود، **گسترش یا پس‌روی** نیم صفحه‌ی اضافی از اتم‌ها با جذب یا نشر یک جای خالی، جذب یک اتم بین‌نشین یا نشر/جذب خوشه‌هایی از جاهای خالی یا اتم‌های خود بین‌نشین تکی است. شکل ۷-۱۲ صعود مثبت یک نابجایی لبه با جذب یک جای خالی در هسته‌ی نابجایی را نشان می‌دهد. برای آن‌که نابجایی لبه‌ای به اندازه‌ی یک فاصله شبکه به بالا حرکت کند، تمام اتم‌های در طول لبه (در داخل کاغذ) باید یک نابجایی را جذب کنند. صعود مثبت منجر به کاهش در اندازه‌ی نیم صفحه‌ی اضافی می‌شود، درحالی‌که صعود منفی منجر به افزایش در اندازه‌ی نیم صفحه‌ی اضافی می‌شود. صعود مثبت همراه با یک کرنش فشاری است و با یک مؤلفه‌ی تنش فشاری عمود بر صفحه‌ی اضافی پیش می‌رود. به صورت مشابه، یک تنش کششی اعمال شده‌ی عمود بر صفحه اضافی، رشد صفحه و در نتیجه صعود منفی را افزایش می‌دهد. از آن‌جایی که حلقه‌های فرانک در اصل نابجایی‌های لبه‌ای هستند، آن‌ها نیز به روش مشابهی صعود می‌کنند به گونه‌ای که

صعود مثبت منجر به انقباض حلقه و صعود منفی منجر به رشد حلقه می‌شود. قابل ذکر است که یک تفاوت اساسی بین ماهیت تنش تولید شده در لغزش و تنش‌هایی وجود دارد که به وسیله‌ی صعود تولید می‌شوند. لغزش به منزله‌ی نتیجه‌ای از یک تنش برشی و صعود به منزله‌ی نتیجه‌ای از یک تنش عمود رخ می‌دهد.

از آن‌جایی که صعود، حرکت جاهای خالی از طریق شبکه یا از نیم صفحه اضافی را لازم دارد، نرخ صعود وابسته به ضریب نفوذ جاهای خالی و هم‌چنین غلظت آن‌ها است. بنابراین در جامدات پرتودهی نشده، صعود در دماهای بالا بسیار حایز اهمیت است. به هر جهت به علت افزایش تعداد جاهای خالی در جامدات پرتودهی شده، صعود در دماهای پایین نیز مهم است. به علاوه، افزایش غلظت بین‌نشین‌ها به این معنی است که آن‌ها می‌توانند در صعود در جهتی مخالف با جاهای خالی، سهیم شوند.



شکل۷-۱۲. صعود مثبت یک نابجایی لبه به وسیله‌ی جذب جاهای خالی در هسته‌ی خود.

۷-۱-۲ توصیف یک نابجایی

توصیفی از یک نابجایی شامل مشخصه‌ی بردار معرف نابجایی خطی، s و بردار بُرگرز[1] معرف تغییر مکان اتم، b است. بردار برگرز به صورت زیر تعریف می‌شود:

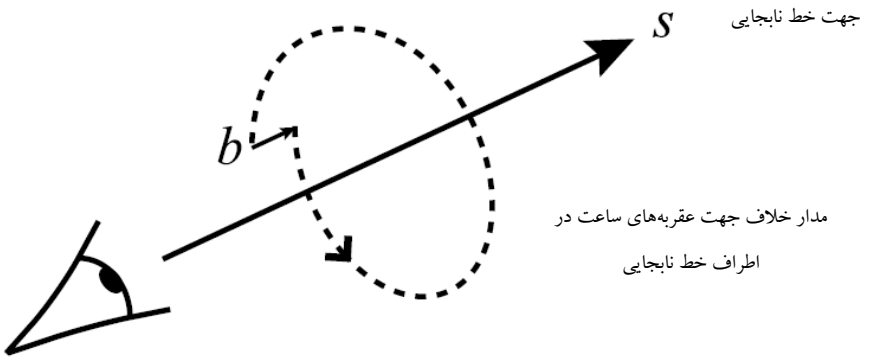
۱. تعریف جهت مثبت، s، در طول خط نابجایی (به عبارت دیگر در داخل کاغذ)،
۲. ایجاد صفحه‌ی عمود بر خط نابجایی،پ
۳. آغاز حرکت در یک منطقه از بلور کامل (دور از هسته‌ی نابجایی)، انجام یک گردش کامل در خلاف جهت عقربه‌های ساعت در اطراف خط نابجایی (در صفحه‌ی کاغذ)،
۴. بردار برگرز، b بردار مورد نیاز برای بستن مسیر است.

1. Burgers vector

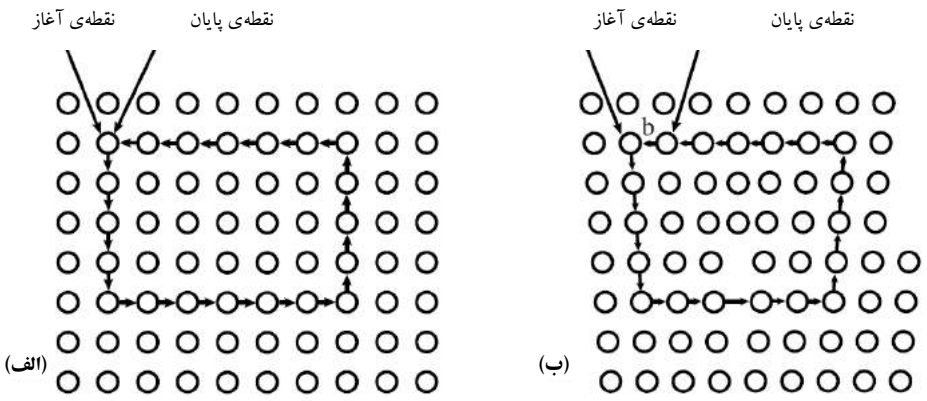
این قوانین به صورت شماتیک در شکل ۷-۱۳ برای یک نابجایی پیچی نشان داده شده است. با توجه به این قرارداد، بردار برگرز یک نابجایی لبه‌ای عمود بر خط نابجایی است و بردار برگرز نابجایی پیچی موازی با خط نابجایی است.

برای یک نابجایی لبه، می‌توان بردار برگرز را به صورت زیر تعیین کرد. با در نظر گرفتن خط نابجایی در طول جهت مثبت s، یک دایره در خلاف جهت عقربه‌های ساعت در اطراف نابجایی ایجاد می‌شود. بردار ارتباط دهنده‌ی نقطه‌ی پایان به شروع، بردار برگرز است. شکل ۷-۱۴ یک مثال از تعیین بردار برگرز با استفاده از قوانین ترسیمی را نشان می‌دهد (لازم به ذکر است که مهم نیست که جهت، مثبت نامیده شود ولی لازم است که یک قراردادی به منظور تعیین جهت خط و نیم صفحه‌ی اضافی در بلور پذیرفته شود. اگر در جهت مخالف دیده شود، $\boldsymbol{b}$ در جهت مخالف خواهد بود. چیزی که حایز اهمیت است تعیین s نسبت به $\boldsymbol{b}$ است). در ادامه قرارداد، شکل ۷-۱۵ الف یک نابجایی با جهت خط s به سمت داخل کاغذ و جهت $\boldsymbol{b}$ به سمت چپ را نشان می‌دهد. نابجایی در شکل ۷-۱۵ب مشابه با نابجایی نشان داده در شکل ۷-۱۵الف است زیرا رابطه‌ی بین s و $\boldsymbol{b}$ مشابه است. ولی نابجایی نشان داده شده در شکل ۷-۱۵ج دارای علامت مخالف است.

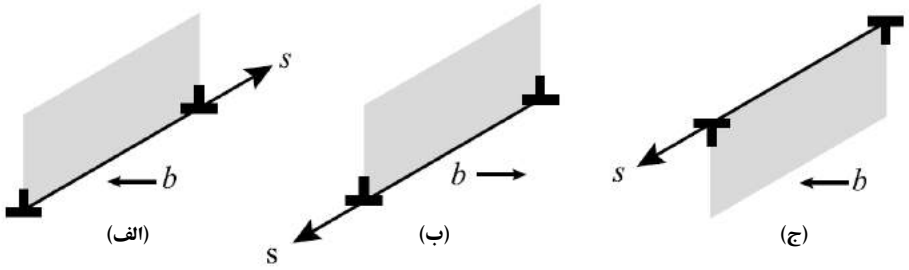
برای یک نابجایی پیچی، قانون دست چپ پیچشی مورد بررسی قرار می‌گیرد (چرخش در خلاف جهت عقربه‌های ساعت، شکل ۷-۱۶). با این قرار داد، s و $\boldsymbol{b}$ در جهت مشابه هستند. شکل ۷-۱۷ الف یک نابجایی پیچی با بردار برگرز در جهت مشابه با s را نشان می‌دهد.



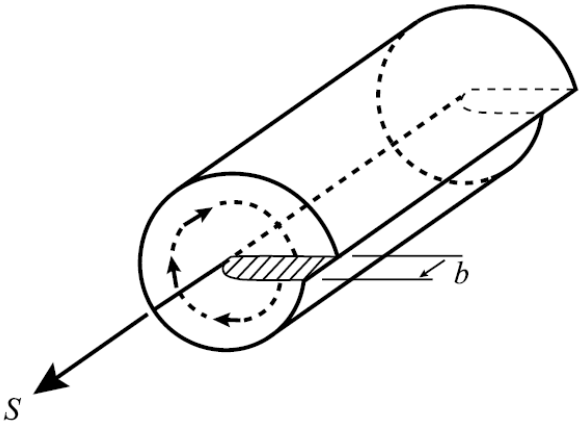
شکل ۷-۱۳. قراردادی برای پیدا کردن بردار برگرز یک خط نابجایی تشریح شده به وسیله‌ی جهت s.



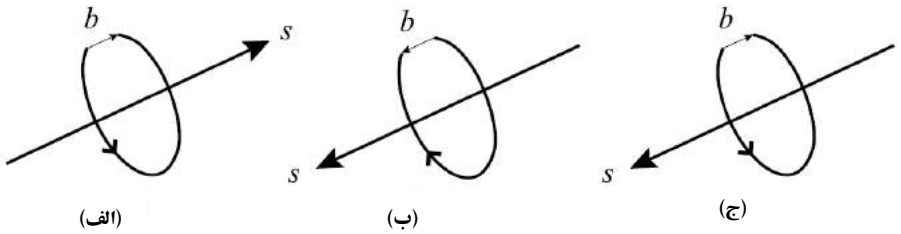
شکل۷-۱۴. مسیر برگرز برای نابجایی لبه مطابق با قرار داد نشان داده شده در شکل ۷-۱۳.



شکل۷-۱۵. مثال‌هایی از نابجایی‌های لبه‌ای مشابه (الف) و (ب) و یک نابجایی لبه‌ای با علامت مخالف (ج).



شکل ۷-۱۶. مسیر برگرز برای یک نابجایی پیچی مطابق با قرار داد نشان داده شده در شکل ۷-۱۳.



شکل۷-۱۷. مثال‌هایی از نابجایی‌های پیچی مشابه (الف) و (ب) و نابجایی پیچی با علامت مخالف (ج).

نابجایی نشان داده شده در شکل ۷-۱۷ب مشابه با نابجایی نشان داده شده در شکل ۷-۱۷ الف است، بنابراین نابجایی نشان داده شده در شکل ۷-۱۷ج علامت مخالف با دو نابجایی دیگر دارد.

یک نابجایی لبه در جهت بردار برگزش می‌لغزد در حالی که یک نابجایی پیچی در جهت عمود بر بردار برگزش می‌لغزد. قانونی که در ادامه توضیح داده می‌شود برای تعیین جهت حرکت یک خط نابجایی پذیرفته شده است. جهت مثبت حرکت با چرخش در خلاف جهت عقربه‌های ساعت روی یک صفحه‌ی موازی با صفحه‌ی لغزش و از طریق زاویه‌ی ۹۰ درجه‌ای از جهت مثبت خط نابجایی خودش به‌دست می‌آید. این قانون در شکل ۷-۱۸ الف نشان داده شده است. شکل ۷-۱۸ب و ج به ترتیب جهت مثبت حرکت برای یک نابجایی لبه و پیچی را نشان می‌دهد. شکل ۷-۱۹ جهت حرکت برای یک حلقه‌ی نابجایی را نشان می‌دهد که با یک بردار برگرز تکی (حلقه‌ی کامل) و مشخصه‌های متغیر در طول خط نابجایی توصیف شده است.

۷-۱-۳ جابه‌جایی‌ها، کرنش‌ها و تنش‌ها

نابجایی‌ها از طریق میدان‌های تنشی خود با یک‌دیگر و با دیگر ترکیب‌های ریزساختاری واکنش می‌دهند. بنابراین بسیار حایز اهمیت است که میدان‌های تنشی و کرنشی اطراف یک نابجایی و هم‌چنین انرژی مربوط به خط نابجایی مورد بررسی قرار گیرد. توضیحات در ابتدا با نابجایی پیچی شروع می‌شود و سپس نابجایی لبه‌ای مورد بررسی قرار می‌گیرد. یادآوری می‌شود که جهت نابجایی پیچی، جهتی است که در آن بردار برگرز موازی با خط نابجایی باشد که به این معنی است که جابه‌جایی اتم‌ها در جهت خط نابجایی است. اگر نابجایی در مختصات استوانه‌ای شرح داده شود، شکل ۷-۲۰، در نتیجه هیچ‌گونه جابه‌جایی در طول جهت‌های r یا θ وجود نخواهد داشت، بنابراین:

(۶-۷)

$$u_r = u_\theta = 0 .$$

در سیستم مختصات کارتزین[1]، جابه‌جایی در صفحه‌ی x-y برابر با صفر است. تنها جابه‌جایی در جهت z است و با توجه به بررسی‌ها در مختصات استوانه‌ای می‌توان نوشت:

(۷-۷)

$$u_z = \frac{b}{2\pi}\theta , \quad u_r = u_\theta = 0 ,$$

و در مختصات کارتزین:

(۸-۷)

$$u_z = \frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\frac{y}{x} ,$$

که در این رابطه b بزرگی بردار برگرز است. با توجه به نظریه‌ی کشسانی، می‌توان کرنش را از جابه‌جایی محاسبه کرد:

(۹-۷)

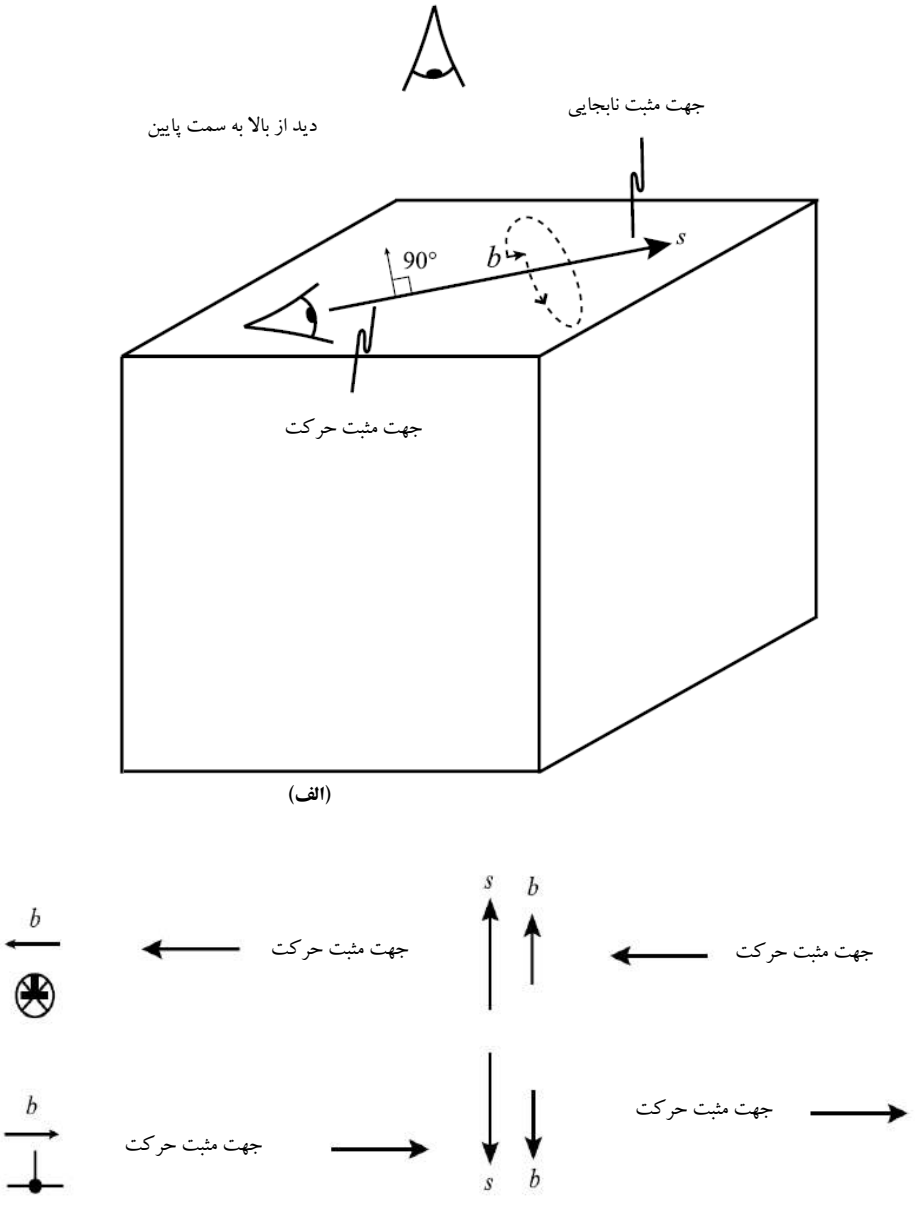
$$\varepsilon_{\theta z} = \frac{1}{r}\left(\frac{\partial u_z}{\partial \theta}\right) = \frac{b}{2\pi r} , \quad \varepsilon_{rr} = \varepsilon_{\theta\theta} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{r\theta} = \varepsilon_{rz} = 0 ,$$

و در مختصات کارتزین:

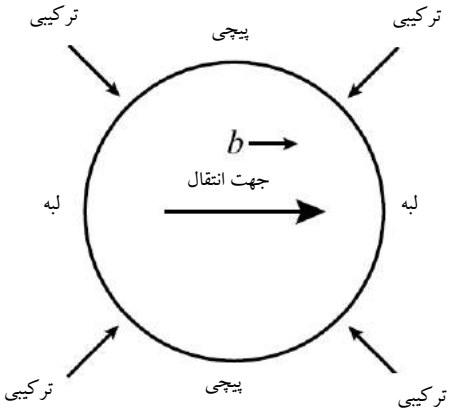
(۱۰-۷)

$$\varepsilon_{xz} = \frac{b}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2} = \frac{b}{2\pi r}\sin\theta$$
$$\varepsilon_{yz} = -\frac{b}{2\pi}\frac{x}{x^2+y^2} = -\frac{b}{2\pi r}\cos\theta$$
$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xy} = 0 .$$

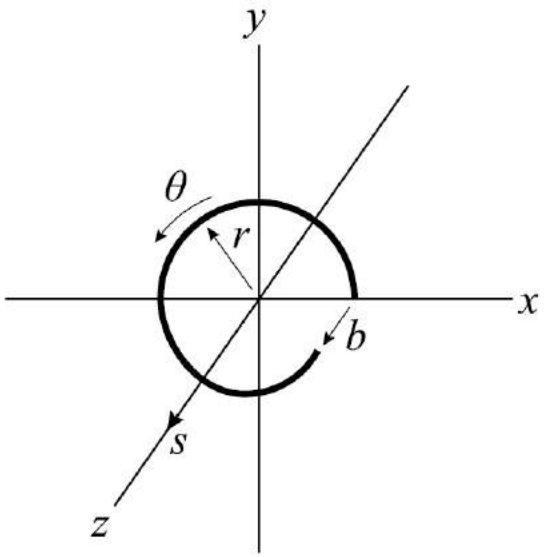
1. Cartesian coordinates



شکل ۷-۱۸. (الف) قانون برای تعیین جهت حرکت یک نابجایی روی صفحه‌ی لغزش و مثال‌هایی از جهت مثبت برای (ب) نابجایی لبه و (ج) نابجایی پیچی.



شکل۷-۱۹. جهت مثبت حرکت یک حلقه‌ی کامل که با یک بردار برگرز تکی تشریح شده است.



شکل۷-۲۰. نابجایی پیچی در سیستم مختصات کارتزین.

میدان تنشی نابجایی پیچی از رابطه‌ی میان تنش و کرنش تعیین می‌شود:

(۷-۱۱)

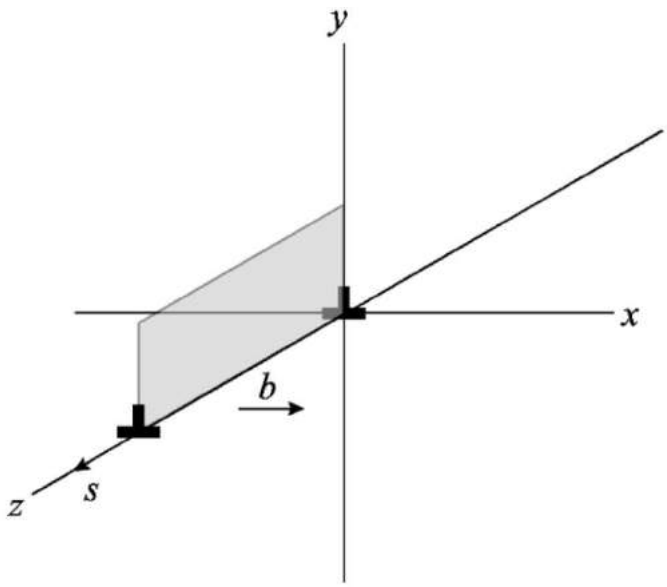
$$\sigma_{\theta z} = \mu \varepsilon_{\theta z} = \frac{\mu b}{2\pi r}\,, \quad \sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \sigma_{zz} = \sigma_{r\theta} = \sigma_{rz} = 0\,,$$

و

(۱۲-۷)

$$\sigma_{xz} = \frac{\mu b}{2\pi}\frac{y}{x^2+y^2} = \frac{\mu b}{2\pi r}\sin\theta$$
$$\sigma_{yz} = -\frac{\mu b}{2\pi}\frac{x}{x^2+y^2} = -\frac{\mu b}{2\pi r}\cos\theta$$
$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \sigma_{xy} = 0\,.$$

برای یک نابجایی لبه نشان داده شده در شکل ۷-۲۱، جابه‌جایی اتم‌ها در جهت x است. جابه‌جایی در این‌جا خیلی ساده نیست؛ ولی مشخص شده است که نابجایی در هر نقطه‌ای در طول محور z مشابه خواهد بود و از آن‌رو، حالت تنش، تنش صفحه‌ای خواهد بود. میدان جابه‌جایی در اطراف نابجایی لبه در مختصات کارتزین برابر خواهد بود با:



شکل ۷-۲۱. نابجایی لبه در سیستم مختصات کارتزین.

(۱۳-۷)

$$u_x = \frac{b}{2\pi}\left[\tan^{-1}\frac{y}{x} + \frac{\lambda+\mu}{\lambda+2\mu}\frac{xy}{x^2+y^2}\right]$$
$$u_y = \frac{b}{2\pi}\left[\frac{-\mu}{2(\lambda+2\mu)}\log\frac{x^2+y^2}{c} + \frac{\lambda+\mu}{\lambda+2\mu}\frac{y^2}{x^2+y^2}\right]$$
$$u_z = 0\,,$$

که ثابت c برای بدون بُعد کردن عبارت log اضافه شده است؛ اما از آن‌جایی که تنش‌ها و کرنش‌ها از نابجایی‌ها استخراج شده‌اند چندان مرتبط نیست. کرنش‌های نتیجه شده برابر هستند با:

(۱۴-۷)

$$\varepsilon_{xx} = -\frac{by}{2\pi}\frac{\mu y^2 + (2\lambda+3\mu)x^2}{(\lambda+2\mu)(x^2+y^2)^2}$$
$$\varepsilon_{yy} = \frac{by}{2\pi}\frac{(2\lambda+\mu)x^2 - \mu y^2}{(\lambda+2\mu)(x^2+y^2)^2}$$
$$\varepsilon_{xy} = \frac{b}{2\pi(1-\nu)}\frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2}$$
$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0\,,$$

که ν نسبت پواسان، λ ثابت لامه[1] و $\nu = \dfrac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}$ هستند. در نتیجه تنش‌ها در اطراف یک نابجایی لبه برابر هستند با:

(۱۵-۷)

$$\sigma_{xx} = \frac{-\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} = \frac{-\mu b}{\pi(1-\nu)r}\sin\theta(2+\cos 2\theta)$$
$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{y(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} = \frac{\mu b}{\pi(1-\nu)r}\sin\theta\cos 2\theta$$
$$\sigma_{xy} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} = \frac{\mu b}{\pi(1-\nu)r}\cos\theta\cos 2\theta$$
$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx}+\sigma_{yy}) = \frac{\mu\nu by}{\pi(1-\nu)(x^2+y^2)} = \frac{-2\mu\nu b}{\pi(1-\nu)r}\sin\theta$$
$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0\,.$$

1. Lam´e constant

تنش‌ها در مختصات استوانه‌ای برابر هستند با:

(۱۶-۷)

$$\sigma_{rr} = \sigma_{\theta\theta} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{\sin\theta}{r}$$
$$\sigma_{r\theta} = \frac{-\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{\cos\theta}{r}$$
$$\sigma_{zz} = \frac{-\mu \nu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{\sin\theta}{r}$$
$$\sigma_{\theta z} = \sigma_{rz} = 0\,.$$

۷-۱-۴ انرژی یک نابجایی

انرژی در هر محیط کشسانی که تحت تنش است ذخیره می‌شود. با اعمال یک تنش کششی به یک میله یک کرنش کششی تولید می‌شود که متناسب با تنش در یک جامد کشسان است. یک مکعب واحد را در درون میله‌ای در نظر بگیرید. تنش، σ برابر با کل نیروی اعمال شده به یک وجه مکعب است. کرنش، فاصله‌ی جزیی افزایش طول مکعب در جهت اعمال تنش است. در نتیجه کار انجام شده (انرژی / واحد حجم) روی مکعب برابر نیرو ضرب‌در فاصله است، یا:

(۱۷-۷)

$$W = \int_0^{\varepsilon_{\max}} \sigma\, d\varepsilon\,,$$

و از شکل ۷-۲۲، می‌توان نوشت:

(۱۸-۷)

$$W = 1/2\sigma_{\max}\varepsilon_{\max}\,.$$

برای یک میدان تنشی کلی، انرژی ذخیره شده در واحد حجم برابر است با:

(۱۹-۷)

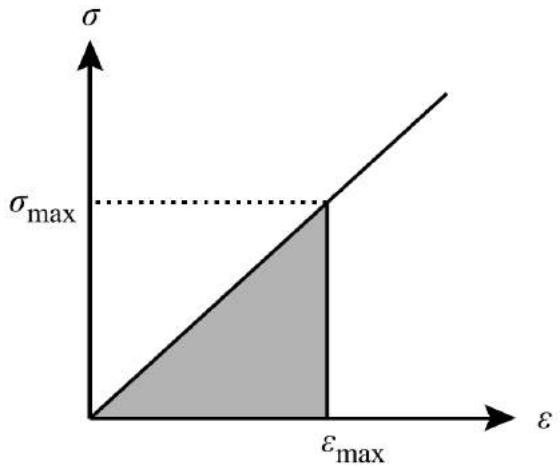
$$W = 1/2(\sigma_{xx}\varepsilon_{xx} + \sigma_{yy}\varepsilon_{yy} + \sigma_{zz}\varepsilon_{zz} + \sigma_{xy}\varepsilon_{xy} + \sigma_{xz}\varepsilon_{xz} + \sigma_{yz}\varepsilon_{yz})\,,$$

و در مختصات استوانه‌ای برابر است با:

(۲۰-۷)

$$W = 1/2(\sigma_{rr}\varepsilon_{rr} + \sigma_{\theta\theta}\varepsilon_{\theta\theta} + \sigma_{zz}\varepsilon_{zz} + \sigma_{r\theta}\varepsilon_{r\theta} + \sigma_{rz}\varepsilon_{rz} + \sigma_{\theta z}\varepsilon_{\theta z}) ,$$

که $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ است.



شکل۷-۲۲. منحنی تنش ـ کرنش کشسان نشان دهنده‌ی انرژی ذخیره شده در میدان کرنشی.

با اعمال معادله‌ی ۷-۲۰ به نابجایی پیچی عبارت ۷-۲۱ نتیجه می‌شود:

(۲۱-۷)

$$W = 1/2(\sigma_{\theta z}\varepsilon_{\theta z}) = \frac{\mu b^2}{8\pi^2 r^2} .$$

انرژی کشسان در واحد طول خط نابجایی برابر است با:

(۲۲-۷)

$$E_l = \int_{r_c}^{R} W 2\pi r \, dr = \frac{\mu b^2}{4\pi} \int_{r_c}^{R} \frac{dr}{r} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{r_c}\right) + \varepsilon_c .$$

حدود انتگرال شعاع‌های هسته‌ی نابجایی، r_c و R هستند. شعاع هسته‌ی نابجایی فاصله‌ای است که در زیر آن کشسانی خطی حفظ نمی‌شود و در کل چند برابر بزرگ‌تر از بردار برگرز در نظر گرفته می‌شود. R ابعاد بیرونی بلور است، یا برای مواد چندبلوری، R می‌تواند شعاع دانه در نظر گرفته شود. با وجود این، یک حالت بسیار پیچیده‌تر، حضور دیگر نابجایی‌ها است که در مواری مانند فلزات آنیل‌شده دانسیته‌ی آن‌ها در حدود $10^{8}\ \mathrm{cm}^{-2}$ است. در نتیجه R معمولاً نیمی از فاصله تا جابه‌جایی بعدی در نظر گرفته می‌شود. عبارت ε_c انرژیِ شعاعِ هسته‌ی نابجایی است که در انتگرال وجود ندارد؛ زیرا تنظریه‌ی پیوستگیِ خطی کشسانی در این منطقه از بین می‌رود. با فرض آن‌که سطح تنش در هسته برابر با $\frac{\mu}{30}$ باشد در نتیجه برای یک هسته‌ی نابجایی با شعاع $5b$، مقدار ε_c تقریباً برابر با $\frac{\mu b^2}{10}$ است که تقریباً در حدود ۱۰ الی ۲۰٪ مقدار آن در میدان کرنشی کشسان است (عبارت ln).

برای یک نابجایی لبه، انرژی کشسان در واحد طول به طریق مشابه با نابجایی پیچی تعیین می‌شود:

(۲۳-۷)

$$E_l = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{R}{r_c}\right) + \varepsilon_c \ ,$$

که از نابجایی پیچی با ضریب (۷-۱) در مخرج عبارت اول متفاوت است که برای $\nu \sim 0{,}3$ در حدود ۱٫۶ می‌شود. برای مقادیر نمونه‌واری از r_c و R می‌توان نوشت: $\frac{\mu b^2}{2} \le E_l \le \mu b^2$. انرژی کشسان در واحد طول خط نابجایی، کشش خطی نیز نامیده می‌شود و به صورت Γ نشان داده می‌شود. در اصل Γ مقداری برابر با $\frac{\mu b^2}{2}$ در نظر گرفته می‌شود.

۷-۱-۵ کشش خطی یک نابجایی

تحت یک تنش برشی یکنواخت اعمال شده، σ_s، یک جزء از خط نابجایی، ds، در جهت عمود بر ds با یک مقدار درحدود $\mathrm{d}l$ جابه‌جا می‌شود (شکل ۷-۲۳). مسافت پیموده شده به وسیله‌ی جزء خط نابجایی، ds، برابر با $\mathrm{ds}\mathrm{d}l$ است. جابه‌جایی میانگین بلور بالای صفحه‌ی لغزش نسبت به پایین صفحه‌ی لغزش برابر است با:

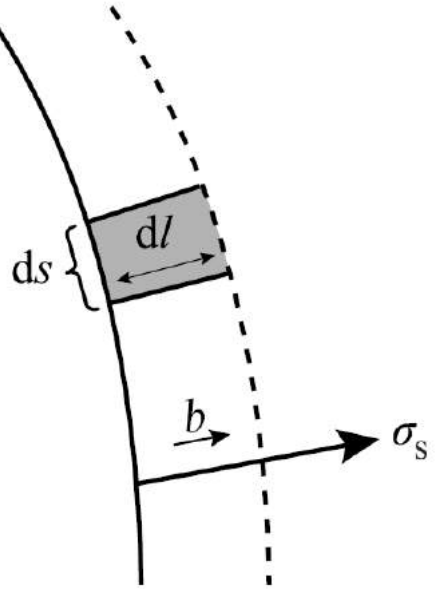
(۲۴-۷)

$$\mathrm{d}x = \left(\frac{\mathrm{d}s\,\mathrm{d}l}{A}\right) b\ ,$$

که A مساحت صفحه‌ی لغزش است. نیروی ایجاد کننده‌ی تنش برشی برابر با $\sigma_s A$ است و کار انجام شده برابر است با:

(۲۵-۷)

$$\begin{aligned}\mathrm{d}W = F\,\mathrm{d}x &= \sigma_s A\left(\frac{\mathrm{d}s\,\mathrm{d}l}{A}\right) b \\ &= \sigma_s\,\mathrm{d}s\,\mathrm{d}l b\ .\end{aligned}$$



شکل ۷-۲۳. قطعه‌ی ds از خط نابجایی که مساحت $\mathrm{d}s\mathrm{d}l$ را در جهت بردار برگرز طی کرده است.

از آن‌جایی که نیرو برابر با کار تقسیم بر فاصله‌ی اعمال نیرو است، بنابراین می‌توان نوشت:

(۲۶-۷)

$$F = \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}l} = \sigma_s\,\mathrm{d}s b\ ,$$

و نیرو در واحد طول برابر است با:

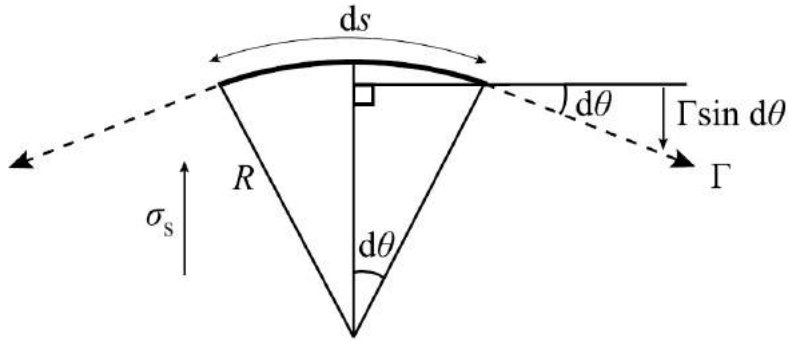
(۲۷-۷)

$$F_l = \frac{\mathrm{d}W/\mathrm{d}l}{\mathrm{d}s} = \sigma_s b\ .$$

یک خط نابجاییِ خمیده را در نظر بگیرید. کشش خطی یک نیروی شعاعی درونی تولید می‌کند که تمایل دارد خط نابجایی را به صورت مستقیم در آورد. نابجایی فقط در صورتی خمیده باقی می‌ماند که یک تنش برشی وجود داشته باشد که در برابر کشش خطی مقاومت کند. در ادامه تنش برشی مورد نیاز برای حفظ انحنا محاسبه خواهد شد. یک قطعه از خط نابجایی را همان‌طوری در نظر بگیرید که در شکل ۷-۲۴ نشان داده شده است. نیروی به سمت خارج ناشی از تنش برشی برابر است با:

(۲۸-۷)

$$\sigma_s b\,\mathrm{d}s = 2\sigma_s bR\,\mathrm{d}\theta\ .$$



شکل ۷-۲۴. نیروی درونی مهارکننده روی قطعه‌ی ds از خط نابجایی ناشی از تنش برشی σ_s.

نیروی درونی مهارکننده‌ی تنش برشی برابر است با:

(۲۹-۷)

$$\Gamma \sin(\mathrm{d}\theta) \sim 2\Gamma\,\mathrm{d}\theta\ .$$

از معادله‌های ۷-۲۸ و ۷-۲۹ تعادل نیروها برابر خواهند بود با:

(۷-۳۰)

$$2\Gamma\,\mathrm{d}\theta = 2\sigma_s bR\,\mathrm{d}\theta\,,$$

و با حل برای σ_s، تنش برشی برحسب کشش خطی به‌دست خواهد آمد:

(۷-۳۱)

$$\sigma_s = \frac{\Gamma}{bR}\,.$$

برای:

(۷- ۳۲ الف)

$$\Gamma \approx \frac{\mu b^2}{2}\,, \quad \text{then} \quad \sigma_s = \frac{\mu b}{2R}\,,$$

و برای

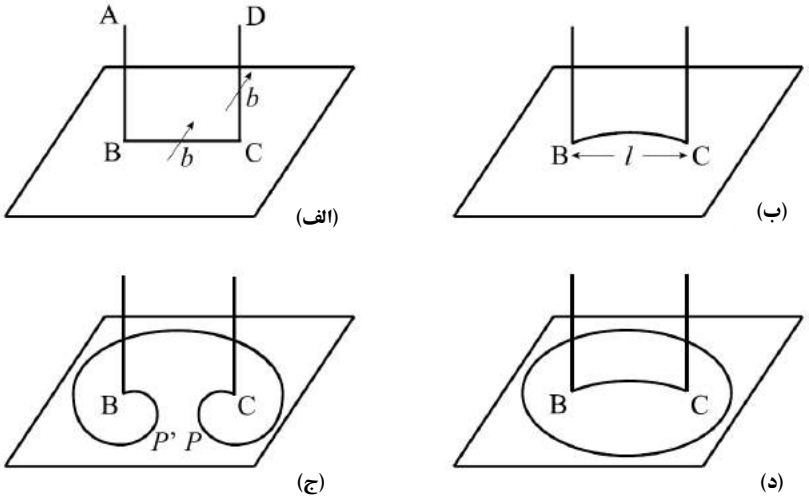
(۷-۳۲ ب)

$$\Gamma \approx \mu b^2\,, \quad \text{then} \quad \sigma_s = \frac{\mu b}{R}\,.$$

سازوکار تشکیل نابجایی‌ها در جامدات، سازوکار فرانک ـ رید[1] است. این سازوکار در شکل ۷-۲۵ نشان داده شده است و به صورت زیر رخ می‌دهد. یک قطعه خط نابجایی به صورت $ABCD$ تعریف شده است و بردار برگرز b به گونه‌ای است که قطعات AB و DC غیرمتحرک هستند و فقط قطعه‌ی BC بر روی صفحه‌ی لغزش قرار دارد. قطعه‌ی BC نابجایی در نقطه‌ی B و C ثابت شده است. دما به اندازه‌ای پایین در نظر گرفته شده است که امکان رخداد پدیده‌ی صعود وجود نداشته باشد. تحت یک تنش اعمالی، قطعه‌ی BC در واکنش به تنش اعمال شده به سمت بیرون کمانه کرده و انحنایی را

1. Frank–Read

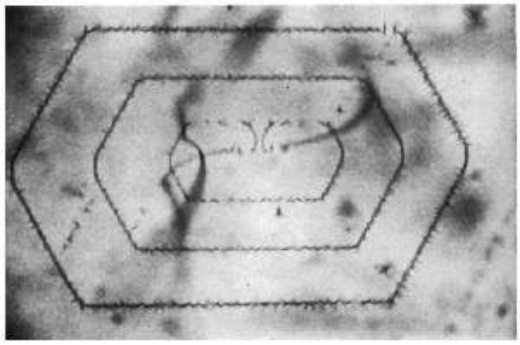
متحمل می‌شود که با کشش خطی روی نابجایی تعیین شده در معادله‌ی ۷-۳۲ ب ($\sigma_s = \frac{\mu b}{2R}$) و برای $l = 2R$، $\sigma_s \approx \frac{\mu b}{l}$ پیش‌بینی می‌شود. هنگامی که نیروی ناشی از انحنای خط نابجایی نتواند نیروی بیش‌تر تولید شده به وسیله‌ی تنش اعمالی را متعادل کند، خط نابجایی ناپایدار شده و برای پذیرش آرایش فضایی نشان داده شده در۷-۲۵ج خمیده می‌شود. قابل ذکر است که در این نقطه، قطعات P و P' خط، مشخصه‌ی مخالفی را دارند و هم‌چنان که نابجایی به سمت بیرون خمیده می‌شود، آن‌ها در تماس با یک‌دیگر قرار می‌گیرند و ناپدید می‌شوند و منجر به ایجاد ناحیه‌ای از یک بلور کامل و یک حلقه‌ی کامل می‌شوند. تنش برشی اعمال شده باعث گسترش حلقه می‌شود و هم‌چنین فرایند ایجاد یک حلقه‌ی جدید از قطعه‌ی BC مشابه را آغاز می‌کند. این فرایند می‌تواند به صورت مداوم رخ دهد و یک چنین نابجاییِ قفل شده‌ای می‌تواند حلقه‌های بسیاری را تولید کند و تا زمانی ادامه پیدا خواهد کرد که حلقه‌ها قادر باشند تا جدا از منبع گسترش یابند. شکل ۷-۲۶ شماتیکی از میکروگراف[1] فرانک ـ رید در یک بلور سیلیکون را نشان می‌دهد. درنهایت تنش معکوس ایجاد شده به وسیله‌ی حلقه‌های قبلی، یک نیروی کندکننده‌ای را روی منبع تولید کرده و آن را متوقف می‌کند. تنش معکوس ناشی از سپرکوبی[2] نابجایی‌ها در فصل ۱۲ مورد بحث قرار خواهد گرفت.



شکل۷-۲۵. منبع فرانک ـ رید برای تولید نابجایی‌ها.

۱. رونوشت برداری دایمی از ظاهر یک تصویر درحالی‌که با میکروسکوپ مشاهده می‌شود.

2. Pileup



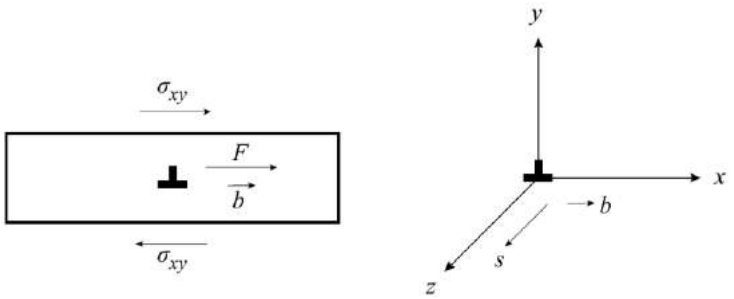
شکل۷-۲۶. میکروگرافی از یک منبع فرانک ـ رید در یک بلور سیلیکون[۶].

۷-۱-۶ نیروهای روی یک نابجایی

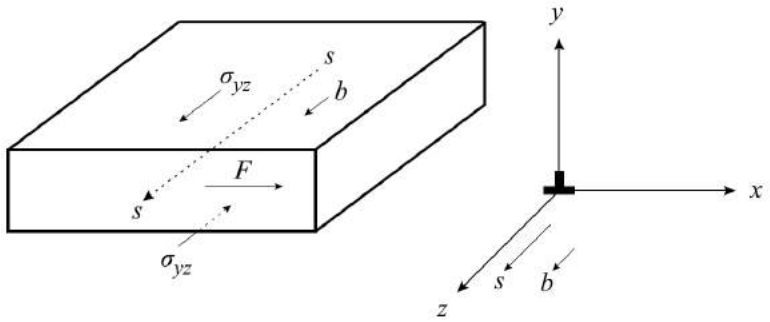
اعمال یک تنش برشی، σ_{xy}، به یک جامد حاوی یک نابجایی لبه (شکل ۷-۲۷) حرکتی را در جهت $x+$ تولید می‌کند. در حرکت یک نابجایی به اندازه‌ی فاصله L، تنش خارجی اعمال شده مقدار کاری برابر با $\sigma_{xy}bL$ در واحد طول خط نابجایی انجام می‌دهد. در نتیجه نیرو برابر با $F = \sigma_{xy}b$ است. لازم به ذکر است که نیرو در جهت $x+$ است.

برای یک نابجایی پیچی، اعمال یک تنش برشی ،σ_{yz} ، منجر به یک نیروی$\sigma_{yz}b$ می‌شود که نیرو در جهت $x+$ است (شکل ۷-۲۸). اعمال یک تنش برشی σ_{xz}، یک نیروی برابر با $-\sigma_{xz}b$ تولید می‌کند که نیرو در جهت $y-$ است و حرکت، عمود بر صفحه لغزش است.

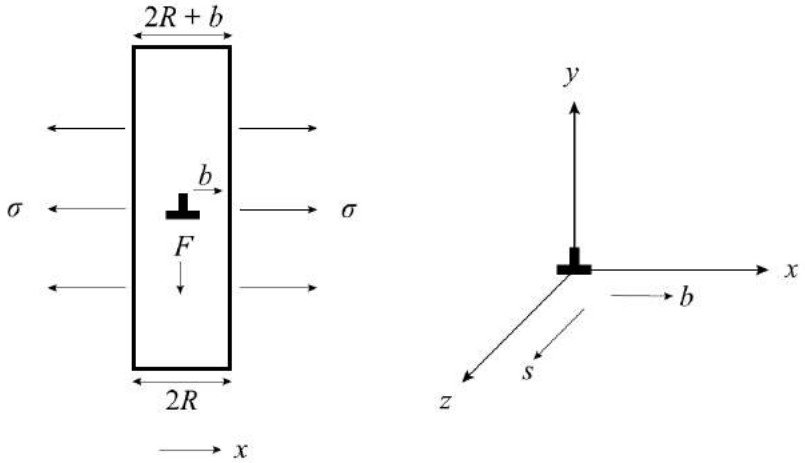
چقدر تنش باید به یک نابجایی لبه اعمال شود تا نیرویی در جهت عمود بر صفحه‌ی لغزش ایجاد کند؟ یک تنش کششی، σ_{xx}، اعمال شده به نابجایی لبه در شکل ۷-۲۹، یک نیروی متمایل به پایین معادل با $-\sigma_{xx}b$ روی نابجایی تولید می‌کند. تنها راهی که نابجایی می‌تواند به وسیله‌ی آن در برابر این تنش واکنش نشان دهد، صعود است.



شکل۷-۲۷. نیروی روی یک نابجایی لبه‌ای با مشخصه‌ی $|001|s$، $|100|\boldsymbol{b}$ ناشی از یک تنش برشی σ_{xy}.



شکل۷-۲۸. نیروی روی یک نابجایی پیچی با مشخصه‌ی $|001|s$، $|100|\boldsymbol{b}$ ناشی از یک تنش برشی σ_{yz}.



شکل ۷-۲۹. نیروی روی یک نابجایی لبه‌ای با مشخصه$|001|s$، $|100|\boldsymbol{b}$ ناشی از یک تنش برشی σ_{xx}.

نیروهای وارد بر نابجایی‌های مخلوط بسیار پیچیده هستند. اگر یک نابجایی در طول جهت z+ آرایش پیدا کند و صفحه‌ی لغزش آن عمود بر محور y باشد، در نتیجه بردار برگرز آن می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۳۳-۷)

$$\boldsymbol{b} = b_x\boldsymbol{i} + b_z\boldsymbol{k} ,$$

که b_x و b_z مؤلفه‌های لبه‌ای و پیچی بردار برگرز هستند و i و k به ترتیب بردارهای واحد در جهت‌های x و z هستند. یک تنش خارجی اعمال شده روی سطوح یک بلور حاوی یک نابجایی شش مؤلفه

دارد: σ_{xx}، σ_{yy}، σ_{zz}، σ_{xy}، σ_{xz} و σ_{yz}. از این شش مؤلفه‌ی تنشی فقط σ_{yz} و σ_{xy} می‌توانند نیرویی را روی یک نابجایی لبه اعمال کنند که باعث حرکت در صفحه‌ی لغزش شود. مؤلفه‌های تنش σ_{xz} و σ_{xx} باعث حرکت عمود بر صفحه‌ی لغزش می‌شوند. عبارت σ_{zz} و σ_{yy} هیچ‌گونه کاری انجام نمی‌دهند. در نتیجه نیروی کلی وارد بر واحد طول خط نابجایی برابر است با:

(۳۴-۷)

$$\boldsymbol{F} = (\sigma_{xy} b_x + \sigma_{yz} b_z)\boldsymbol{i} - (\sigma_{xx} b_x + \sigma_{xz} b_z)\boldsymbol{j} \,,$$

که عبارت اول مؤلفه‌ی نیروی موازی با صفحه‌ی لغزش و عبارت دوم مؤلفه‌ی نیروی عمود بر صفحه‌ی لغزش هستند و $\boldsymbol{n} = (i, j, k)$ بردارهای واحد هستند.

برای مثالی از نیروهای بین نابجایی‌ها، نابجایی‌های پیچی موازی بررسی می‌شوند. نیروی، $\boldsymbol{F}$ که یک نابجایی پیچی قرار گرفته در مبدأ (با بردار برگرز $\boldsymbol{b}$) روی یک نابجایی پیچی موازی در یک موقعیت (r,θ) (با بردار برگرز $\boldsymbol{b}'$) اعمال می‌کند، برابر است با:

(۳۵-۷)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F} &= \sigma_{yz} b_z \cdot \boldsymbol{i} - \sigma_{xz} b_z \cdot \boldsymbol{j} \\ &= \frac{\mu b r \cos\theta}{2\pi r^2} b' + \frac{\mu b r \sin\theta}{2\pi r^2} b' \\ &= \frac{\mu b b' r}{2\pi r^2} (\cos\theta \cdot \boldsymbol{i} + \sin\theta \cdot \boldsymbol{j}) \,.\end{aligned}$$

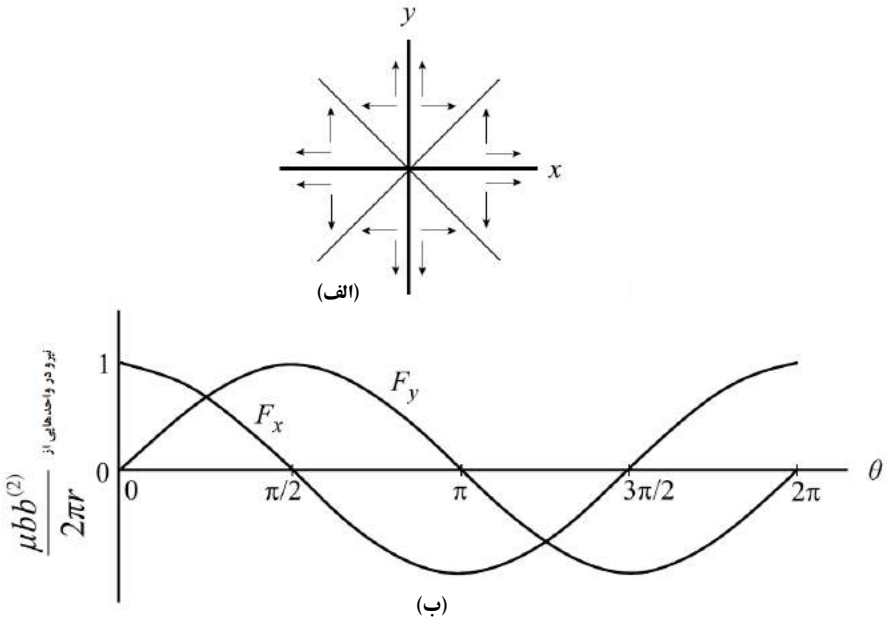
نیرو در جهتی است که عمود بر خطوط نابجایی است. اگر نابجایی‌ها علامت مشابه داشته باشند، این نیرو دافعه است و در صورتی که نیروها علامت مخالف داشته باشند، جاذبه است. نیروی ناشی از نابجایی قرار گرفته در موقعیت(r,θ) که بر نابجایی قرار گرفته در مبدأ وارد می‌شود، مقدار مشابه ولی با علامت مخالف را دارد. مؤلفه‌های نیرو در صفحه‌ی xy در شکل ۷-۳۰ الف نشان داده شده است و بزرگی نیروها به صورت تابعی از θ در شکل ۷-۳۰ ب نشان داده شده است.

یک نابجایی با مشخصه‌ی مختلط، حالت کلی از نیروی وارد بر یک نابجایی را نشان می‌دهد. برای یک نابجایی مختلط، بردار برگرز به صورت زیر است:

(۳۶-۷)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{b} &= b_x\boldsymbol{i} + b_y\boldsymbol{j} + b_z\boldsymbol{k} \\ &= b_1\boldsymbol{i} + b_2\boldsymbol{j} + b_3\boldsymbol{k}\ .\end{aligned}$$

بنابراین، کار نهایی انجام شده روی یک نابجایی با بردار برگرز توضیح داده شده در رابطه‌ی ۷-۳۶ ، ناشی از یک تنش اختیاری σ_{ij} برابر است با:



شکل۷-۳۰. مؤلفه‌های x و y از نیروهای وارد بر یک نابجایی پیچی ناشی از نابجایی دیگر (الف) در صفحه‌ی y-x و (ب) به صورت تابعی از θ.

(۳۷-۷)

$$\delta W = \sum_{\substack{i=1\\j=1}}^{3} b_i \sigma_{ij} n_j \, \mathrm{d}A\ ,$$

و در یک نماد ماتریکسی برابر است با:

(۳۸–۷)

$$\mathrm{d}W = \underline{b}\,\underline{\underline{\sigma}}\,\underline{n}\,\mathrm{d}A\ ,$$

که $\underline{\underline{\sigma}}$ تانسور تنش، $\underline{n}$ بردار واحد عمود بر صفحه‌ی لغزش و $\underline{b}$ بردار برگرز است. در واقع، $\underline{b}$ یک بردار ستونی است در نتیجه معادله‌ی ۷–۳۸ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۳۹–۷)

$$\mathrm{d}W = \underline{\boldsymbol{b}}^T\,\underline{\underline{\sigma}}\cdot\underline{n}\,\mathrm{d}A\ .$$

عبارت $\underline{n}\mathrm{d}A$ می‌تواند با توجه به مقدار $\mathrm{d}A$ که دقیقاً به صورت زیر است، نوشته شود:

(۴۰–۷)

$$L(\boldsymbol{s}\times\mathrm{d}\boldsymbol{l})\ ,$$

که $\boldsymbol{s}$ بردار واحد در جهت خط نابجایی، L طول خط نابجایی و $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ (= $\mathrm{d}x\boldsymbol{i} + \mathrm{d}y\boldsymbol{j} + \mathrm{d}z\boldsymbol{k}$) بردار واحد در صفحه‌ی لغزش و عمود بر $\boldsymbol{s}$ و $\boldsymbol{n}$ است. یادآوری می‌شود که $\boldsymbol{b} = b_x\boldsymbol{i} + b_y\boldsymbol{j} + b_z\boldsymbol{k}$ است، در نتیجه $\boldsymbol{b}$ فقط یک مؤلفه در جهت $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ دارد. از آن‌جایی که $\boldsymbol{A}.\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}.\boldsymbol{C}$ است، در نتیجه:

(۴۱–۷)

$$\mathrm{d}W = \underline{\boldsymbol{b}}^T\,\underline{\underline{\sigma}}\times\boldsymbol{s}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}L\ ,$$

و

(۴۲–۷)

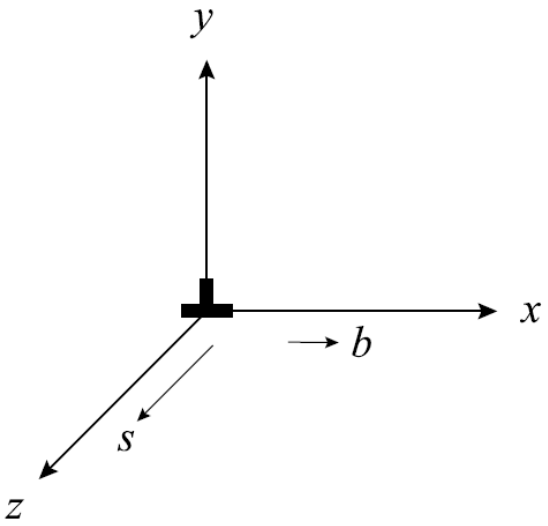
$$\frac{1}{L}\mathrm{d}W = \underline{\boldsymbol{b}}^T\,\underline{\underline{\sigma}}\times\boldsymbol{s}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}\ .$$

عبارت $\underline{b}^T \underline{\underline{\sigma}} \times s$ در معادله‌ی ۷-۴۲ برابر با نیرو در واحد طول روی یک نابجایی ناشی از یک تنش خارجی است که تمایل دارد نابجایی را جابه‌جا کند و به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۴۳-۷)

$$\boldsymbol{f} = \underline{\boldsymbol{b}}^{\boldsymbol{T}} \underline{\underline{\sigma}} \times \boldsymbol{s} \,,$$

و به معادله‌ی پیچ ـ کلر[1] معروف است.



شکل ۷-۳۱. آرایش یک نابجایی لبه برای تعیین نیروهایِ ناشی از میدان تنشی کلی.

در ادامه معادله‌ی پیچ ـ کلر به یک نابجایی لبه با بردار برگرز و جهت با مشخصات $\boldsymbol{b}|001|$ ، $s|001|$ که در شکل ۷-۳۱ نشان داده شده، اعمال می‌شود. کمیت اول در معادله‌ی ۷-۴۳ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۴۴-۷)

$$\underline{\boldsymbol{b}}^{\boldsymbol{T}} \underline{\underline{\sigma}} = b|100| \begin{vmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{vmatrix} = b|\sigma_{xx}\sigma_{xy}\sigma_{xz}| \,,$$

1. Peach–Koehler

و با ضرب در s، معادله‌ی ۷-۴۵ حاصل می‌شود:

(۴۵-۷)

$$\underline{\boldsymbol{b}}^T\underline{\underline{\sigma}}\times\boldsymbol{s}=b\begin{vmatrix}\boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k}\\ \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz}\\ 0 & 0 & 1\end{vmatrix}.$$

حاصل‌ضرب یا دترمینان برابر با $b\sigma_{xy}\boldsymbol{i}-b\sigma_{xx}\boldsymbol{j}$ است و نیروی وارد بر نابجایی برابر است با:

(۴۶-۷)

$$\boldsymbol{f}=b\sigma_{xy}\boldsymbol{i}-b\sigma_{xx}\boldsymbol{j}\,.$$

قابل ذکر است که $f_x = b\sigma_{xy}$ یک نیروی لغزشی در جهت $x+$ است و مؤلفه‌ی $f_y = -b\sigma_{xx}$ نیروی صعود در جهت $y-$ است. فقط σ_{xy} و σ_{xx} می‌توانند نیروهایی را بر یک نابجایی با بردار برگرز و جهت تعریف شده در این مثال، وارد کنند.

برای یک نابجایی پیچی با مشخصات $s|001|$، $\boldsymbol{b}|001|$ و نشان داده شده در شکل ۷-۳۲ می‌توان نوشت:

(۴۷-۷)

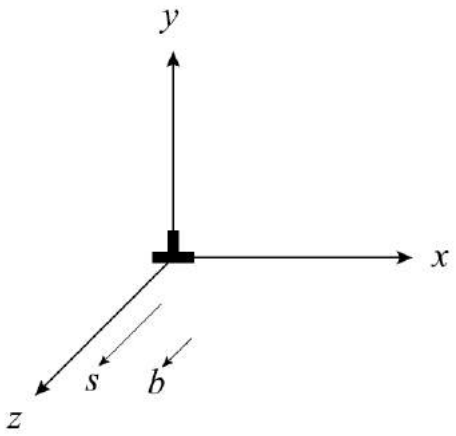
$$\underline{\boldsymbol{b}}^T\underline{\underline{\sigma}}=b|001|\begin{vmatrix}\sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz}\\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz}\\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz}\end{vmatrix}=b|\sigma_{xz}\sigma_{yz}\sigma_{zz}|\,,$$

و با ضرب‌در s می‌توان نوشت:

(۴۸-۷)

$$\boldsymbol{f}=\underline{\boldsymbol{b}}^T\underline{\underline{\sigma}}\times\boldsymbol{s}=b\begin{vmatrix}\boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k}\\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz}\\ 0 & 0 & 1\end{vmatrix}=b\sigma_{yz}\boldsymbol{i}-b\sigma_{xz}\boldsymbol{j}\,,$$

که $f_x = b\sigma_{yz}$ و $f_y = -b\sigma_{xz}$ است. قابل ذکر است که فقط مؤلفه‌های σ_{xz} و σ_{yz} می‌توانند نیرویی را بر یک نابجایی تعریف شده در این مثال وارد کنند.



شکل۷-۳۲. آرایش یک نابجایی پیچی برای تعیین نیروهای ناشی از میدان تنشی کلی.

۷-۱-۷ برهم‌کنش بین نابجایی‌ها

در ادامه بحث برهم‌کنش بین نابجایی‌های لبه‌ای ـ لبه‌ای، پیچی ـ پیچی و لبه‌ای ـ پیچی بررسی خواهد شد. در ابتدا برهم‌کنش لبه ـ لبه را بررسی می‌کند.

برهم‌کنش لبه ـ لبه

برای تعیین نیروی وارد بر نابجایی (۲) ناشی از حضور نابجایی (۱)، نابجایی (۱) را روی مبدأ محورهای مختصات قرار داده و نابجایی (۲) در یک موقعیت دلخواه قرار داده می‌شود (شکل ۷-۳۳ الف). با توجه به معادله پیچ ـ کلر، نیرو برابر است با: $\boldsymbol{f} = \underset{(2)}{\underline{\boldsymbol{b}}^T} \underline{\underline{\sigma}} \times s$، که مؤلفه‌های این رابطه بردار برگرز و جهت نابجایی (۲) و تنش نابجایی (۱) هستند. حاصل‌ضرب عبارت اول برابر است با:

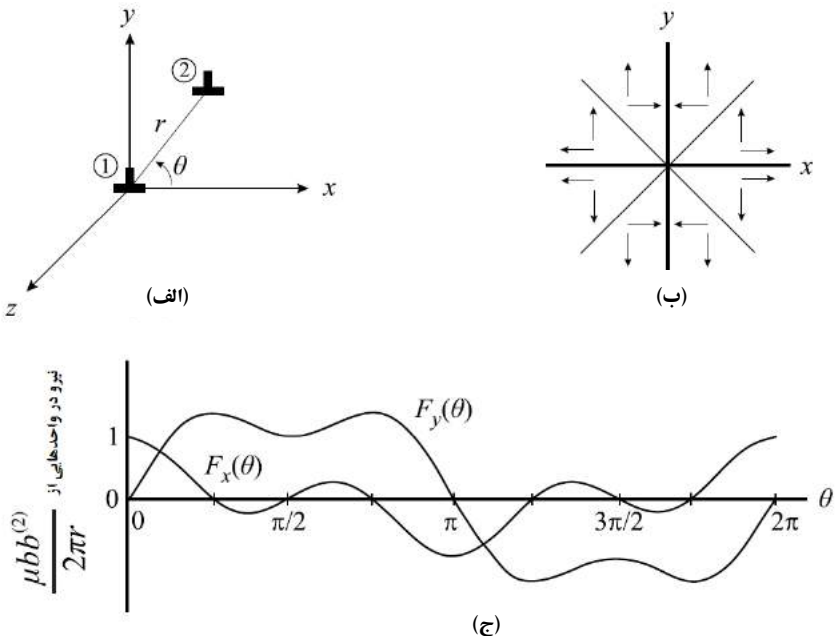
(۴۹-۷)

$$\underline{b}^T \underline{\underline{\sigma}} = \underbrace{b|100|}_{(2)} \underbrace{\begin{vmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{vmatrix}}_{(1)} = b|\sigma_{xx}\sigma_{xy}0|;,$$

و

(۵۰-۷)

$$f = \underset{(2)}{\underline{\boldsymbol{b}}^T \underline{\underline{\boldsymbol{\sigma}}} \times \underline{\boldsymbol{s}}} = b \begin{vmatrix} \boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k} \\ \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = b\sigma_{xy}\boldsymbol{i} - b\sigma_{xx}\boldsymbol{j} .$$



شکل ۷-۳۳. (الف) آرایش نابجایی‌ها برای تعیین نیرو روی نابجایی لبه (۲) ناشی از نابجایی لبه (۱)، و مؤلفه‌های x و y از نیرو (ب) در صفحه‌ی x-y و (ج) به صورت تابعی از θ.

نیروی وارد بر نابجایی (۲) به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۵۱-۷)

$$\boldsymbol{F} = \underbrace{\frac{\mu b b^{(2)}}{2\pi(1-\nu)r}(\cos\theta\cos 2\theta)\boldsymbol{i}}_{F_x(\theta)} - \underbrace{\frac{\mu b b^{(2)}}{2\pi(1-\nu)r}\sin\theta(2+\cos 2\theta)\boldsymbol{j}}_{F_y(\theta)} ,$$

و مؤلفه‌های نیرو در صفحه‌ی x-y در شکل ۷-۳۳ ب و هم‌چنین به صورت تابعی از θ در شکل ۷-۳۳ ج نشان داده شده است.

لازم به ذکر است که اگر نابجایی (۲) s مشابه ولی بردار برگرز در جهت مخالف دارد، در نتیجه اثر برآیند روی نیروی نتیجه شده تنها تغییر در علامت عبارت‌های موجود در معادله‌ی ۷-۵۱ اما با همان مقدار بزرگی است. اگر نابجایی (۲) بردار برگرز $\boldsymbol{b}|010|$ باشد، در نتیجه تحلیل موجود در معادله‌ی ۷-۴۹ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۷-۵۲)

$$\underset{(2)}{\underline{\boldsymbol{b}}^T}\underline{\underline{\sigma}} = \underbrace{b|010|}_{(2)}\underbrace{\begin{vmatrix}\sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0\\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0\\ 0 & 0 & \sigma_{zz}\end{vmatrix}}_{(1)} = b|\sigma_{xy}\sigma_{yy}0|\ ,$$

(۷-۵۳)

$$\boldsymbol{f} = \underset{(2)}{\underline{\boldsymbol{b}}^T}\underline{\underline{\sigma}} \times \underset{(2)}{\boldsymbol{s}} = b\begin{vmatrix}\boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k}\\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{vmatrix} = b\sigma_{yy}\boldsymbol{i} - b\sigma_{xy}\boldsymbol{j}\ .$$

در این مورد مؤلفه‌ی x نیرو، یک نیروی صعودی مثبت به سمت راست و مؤلفه‌ی y نیرو یک نیروی لغزشی منفی (به سمت پایین) تولید می‌کنند.

برهم‌کنش پیچی - پیچی

برای دو نابجایی پیچی نشان داده شده در شکل ۷-۳۴، نیروی وارد بر نابجایی (۲) ناشی از نابجایی (۱) برابر است با:

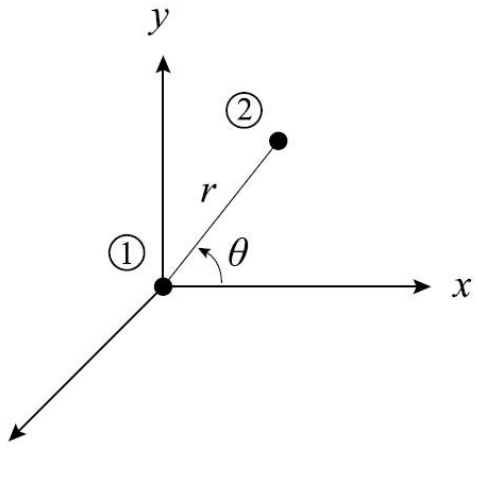
(۷-۵۴)

$$\boldsymbol{f} = \underset{(2)}{\underline{\boldsymbol{b}}^T}\underline{\underline{\sigma}} \times \underset{(2)}{\boldsymbol{s}} = b\begin{vmatrix}\boldsymbol{i} & \boldsymbol{j} & \boldsymbol{k}\\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{vmatrix} = b\sigma_{yz}\boldsymbol{i} - b\sigma_{xz}\boldsymbol{j}\ ,$$

که در شکل ۷-۳۴ مؤلفه‌ی x نیرو، $b\sigma_{yz}$ به سمت راست است و مؤلفه‌ی y نیرو، $-b\sigma_{xz}$ به سمت پایین است. نیروی وارد بر نابجایی (۲) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۵۵-۷)

$$\boldsymbol{F} = \frac{\mu b b^{(2)}}{2\pi r}\cos\theta \boldsymbol{i} + \sin\theta \boldsymbol{j}\,,$$

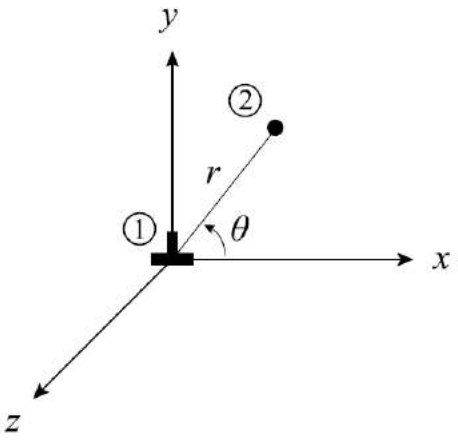


شکل۷-۳۴. آرایش نابجایی‌ها برای تعیین نیروی وارد بر نابجایی پیچی (۲) ناشی از نابجایی پیچی (۱).

و مؤلفه‌های نیرو در صفحه‌ی x-y پیش از این در شکل ۷-۳۰ الف و به صورت تابعی از θ در شکل ۷-۳۰ ب نشان داده شده‌اند.

برهم‌کنش لبه ـ پیچی

آخرین مثال تعیین نیروی بین یک نابجایی لبه و یک نابجایی پیچی است، همان‌طوری که در شکل ۷-۳۵ نشان داده شده است. یک نابجایی لبه‌ای هیچ کدام از مؤلفه‌های تنشی xz یا yz که برای به حرکت درآوردن یک نابجایی پیچی لازم است را ندارد. در نتیجه می‌توان قوانین زیر را تعیین کرد:
برای یک نابجایی لبه با مشخصات $\boldsymbol{b}|100|$ ، $s|001|$ تنها تنش‌های σ_{xx} و σ_{xy} نیرویی را روی خط نابجایی تولید می‌کنند. میدان تنشی اطراف نابجایی، مؤلفه‌های σ_{xx}، σ_{yy}، σ_{zz} و σ_{xy} را دارد. برای یک نابجایی پیچی با مشخصات $\boldsymbol{b}|001|$ ، $s|001|$ تنها تنش‌های σ_{xz} و σ_{yz} نیرویی را روی آن تولید می‌کنند. میدان تنشی اطراف نابجایی مؤلفه‌های σ_{xz} و σ_{yz} را دارد.



شکل۷-۳۵. آرایش نابجایی‌ها برای تعیین نیروی وارد بر نابجایی پیچی (۲) ناشی از نابجایی لبه (۱).

۷-۱-۸ نابجایی‌های گسترش یافته[1]

لغزش در ساختار fcc روی صفحات (111) و در جهت $\langle 110 \rangle$ رخ می‌دهد. بردار برگرز برابر با $\frac{a}{2}[110]$ است که کوچک‌ترین بردار شبکه است که ارتباط دهنده‌ی یک اتم در گوشه‌ی مکعب با یک اتم همسایه در مرکز یک وجه مکعب است. به هرجهت آرایش اتمی روی صفحه‌ی لغزش $\{111\}$ به گونه‌ای است که لغزش در جهت $[\,111\,]$ آسان‌ترین مسیر نیست. شکل ۷-۳۶ الف آرایش اتمی روی صفحه‌ی فشرده (111) را نشان می‌دهد. صفحات $\{111\}$ در ردیف‌های ABC, ABC,... به گونه‌ای که مراکز صفحه‌های اتمی A بر بالای یک‌دیگر قرار گیرند، و به صورت مشابه برای صفحات اتم‌های B و C روی یک‌دیگر انباشته می‌شوند. بردار $b_1 = \frac{a}{2}[10\bar{1}]$ نشان داده شده در شکل ۷-۳۶ الف، جهت لغزش مشاهده شده است. به هرجهت، اگر اتم‌ها در شکل کره‌های سخت در نظر گرفته شوند، این جهت یک مسیر پرانرژی را نشان می‌دهد زیرا در حرکت یک اتم از یک موقعیت B به موقعیت دیگر، اتم باید از روی اتم‌های A صعود کند. یک مسیر ساده‌تر راه فرعی بردارهای b_2 و b_3 است که در طول دره‌های[2] میان اتم‌های A است. این واکنش نابجایی به صورت

1. Extended Dislocations
2. Valleys

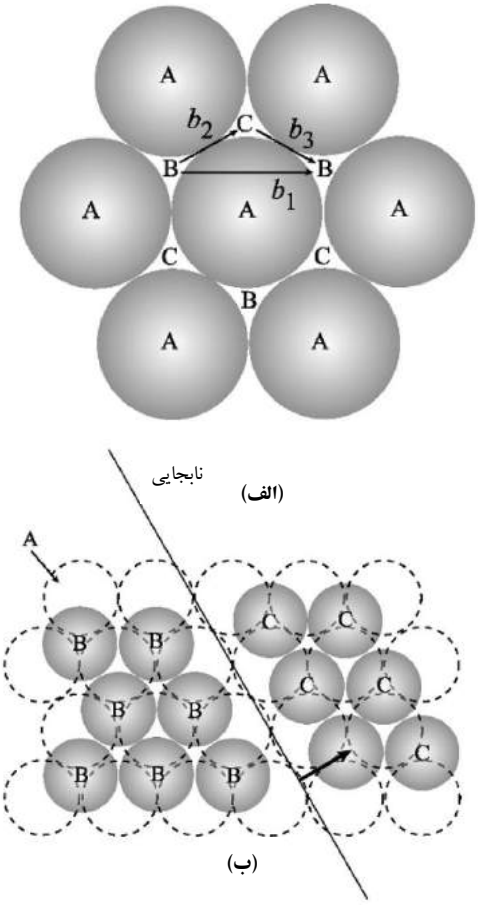
$b_1 \rightarrow b_2+b_3$، $\frac{a}{2[10\bar{1}]} \rightarrow \frac{a}{6[2\bar{1}\bar{1}]}+\frac{a}{6[11\bar{2}]}$ تعیین می‌شود. در اصل بردار برگرز نابجایی کلی b_1، به دو بردار برگرز جزیی b_2 و b_3 تجزیه شده است. شکل ۷-۳۶ ب آرایش اتمی نابجایی‌های جزیی روی صفحه $\{111\}$را نشان می‌دهد و شکل ۷-۳۶ ج نمودار برداری تجزیه نابجایی کلی به دو نابجایی جزیی را نشان می‌دهد. نابجایی‌های جزیی معمولاً نابجایی‌های جزیی شاکلی[1] نامیده می‌شوند و ترکیب این دو نابه‌جایی جزیی، نابه‌جایی گسترش یافته نامیده می‌شود. تجزیه‌ی مستقل از مشخصه‌ی نابه‌جایی است و نابجایی‌های جزیی به صورت یک واحد حرکت می‌کنند تا پهنای تعادلی میان آن‌ها حفظ شود. فاصله‌ی میان نابجایی‌های جزیی به یک ناحیه نقص‌دار یا نقص در چیده شدن[2] اشاره دارد و اندازه‌ی آن به وسیله‌ی انرژی نقص در چیده شدن، SFE تعیین می‌شود. انرژی نقص در چیده شدن پایین‌تر، جدایش بیش‌تر نابجایی‌های جزیی و انرژی بالاتری (انرژی نزدیک کردن آن‌ها به یک‌دیگر) را به همراه دارد. نقص در چیده شدن در لغزش متقاطع بسیار حایز اهمیت است زیرا برای آن‌که لغزش متقاطع رخ دهد، نابجایی‌های جزیی باید بازترکیب شوند. نابجایی‌های توسعه یافته در شبکه‌های hcp نیز رخ می‌دهد، لیکن معمولاً در فلزات bcc دیده نمی‌شود.

۷-۱-۹ کینگ‌ها و جاگ‌ها[3]

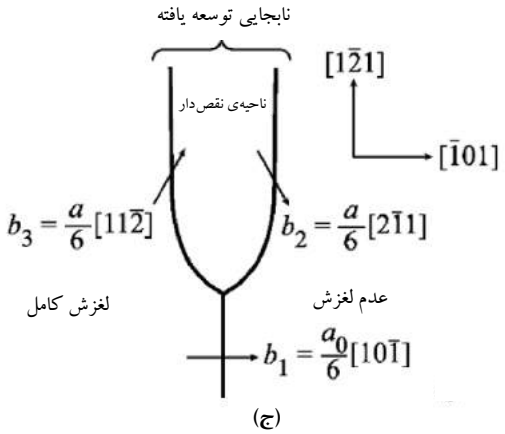
هم نابجایی‌های لبه‌ای و هم نابجایی‌های پیچی می‌توانند با برهم‌کنش با دیگر نابجایی‌ها، جاگ‌ها یا پله‌هایی را در خط نابجایی ایجاد کنند. جاگ‌ها دو نوع هستند. جاگی که به جای عمود بودن بر صفحه‌ی لغزش، روی آن قرار می‌گیرد، کینگ نامیده می‌شود. شکل ۷-۳۷ الف یک نابجایی لبه‌ای با یک کینگ با مشخصه‌ی پیچی را نشان می‌دهد که روی صفحه‌ی لغزش نابجایی لبه قرار گرفته است و شکل ۷-۳۷ ب یک نابجایی پیچی با یک کینگ با آرایش لبه‌ای را نشان می‌دهد. کینگ‌ها ناپایدار هستند زیرا آن‌ها می‌توانند در یک خط قرار گرفته و در طول لغزیدن نابود شوند. نوع دوم از جاگ‌ها در شکل ۷-۳۷ج نشان داده شده است که در آن جاگ و نابجایی آرایش لبه‌ای دارند. تنها تفاوت میان حرکت نابجایی لبه‌ای جاگ‌دار و نابجایی لبه‌ای معمولی این است که به جای لغزیدن در طول یک صفحه تکی، روی یک صفحه‌ی پله دار می‌لغزد. نوع دیگر جاگ، در تغییر شکل پلاستیک بسیار حایز

1. Shockley Partials
2. Stacking Fault
3. Kinks and Jogs

اهمیت است و در شکل ۷-۳۷ د نشان داده شده است. این یک نابجایی پیچی حاوی یک جاگ با یک آرایش لبه‌ای است. تنها راهی که یک نابجایی پیچی می‌تواند به وسیله‌ی آن به یک موقعیت جدید حرکت کند و جاگش را از بین ببرد، به وسیله‌ی صعود جاگ است. شکل ۷-۳۷ هـ نشان می‌دهد که حرکت یک نابجایی پیچی جاگ‌دار هم‌چنان که قطعات بین جاگ‌ها تحت یک تنش اعمالی در صفحه‌ی لغزشی خمیده می‌شوند، یک ردیفی از نابجایی‌ها را در پشت جاگ‌ها چنان تولید می‌کند که نابجایی‌ها در صفحه‌ی لغزششان حرکت می‌کنند.

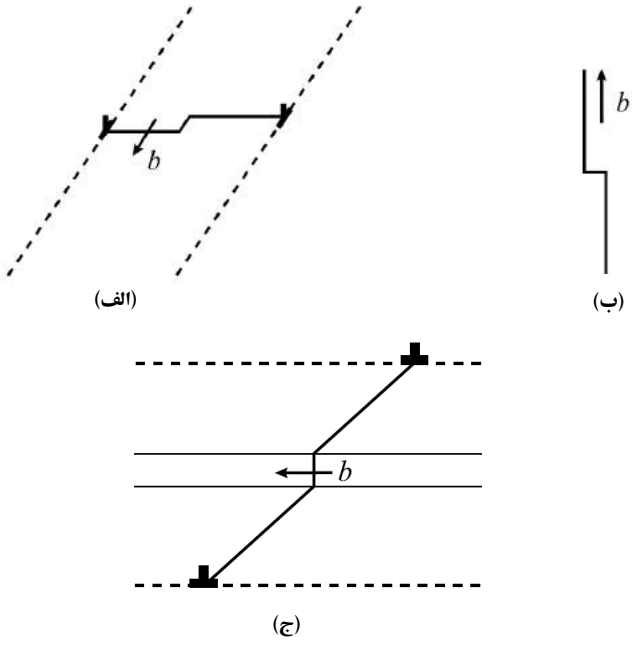


شکل ۷-۳۶. لغزش روی صفحه‌ی فشرده (111) در شبکه‌ی fcc. (الف) جهات لغزش، (ب) موقعیت اتم‌ها در یک شاکلی جزیی

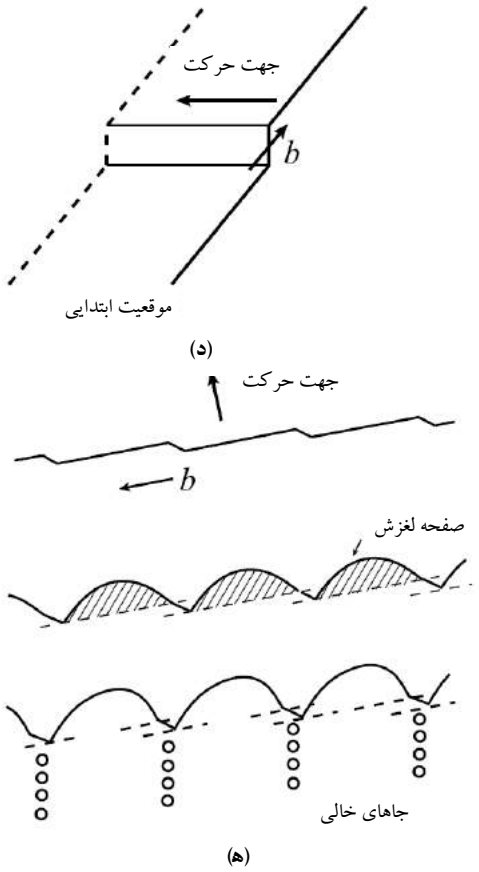


(ج)

شکل ۷-۳۶. لغزش روی صفحه‌ی فشرده (111) در شبکه‌ی fcc. (ج) تجزیه‌ی نابجایی‌ها به دو نابجایی جزیی.



شکل ۷-۳۷. کینگ‌ها و جاگ‌ها در نابجایی‌ها. (الف) نابجایی لبه‌ای با یک کینگ با مشخصه‌ی پیچی، (ب) نابجایی پیچی با یک کینگ با آرایش لبه‌ای، (ج)جاگ لبه‌ای در یک نابجایی لبه‌ای، (د) جاگ لبه‌ای در یک نابجایی پیچی و جهت حرکت نابجایی،



شکل۷-۳۷. کینگ‌ها و جاگ‌ها در نابجایی‌ها. (هـ) حرکت یک بخش از نابجایی پیچی لبه دار و خمیدگی بخش‌های بین جاگ‌ها و ردیفی از جاهای خالی در پشت ردیفی از جاگ‌ها [۷].

۷-۲ حلقه‌های نقص‌دار و چهاروجهی نقص در چیده شدن

به علت اهمیت حلقه‌های فرانک در فلزات آسیب دیده، این موضوع بیش‌تر مورد بحث قرار خواهد گرفت. حلقه‌های فرانک در فلزات پرتودیده از این جهت حایز اهمیت هستند که آن‌ها اغلب در یک آبشار جابه‌جایی جوانه می‌زنند. یادآوری می‌شود که آبشار شامل یک هسته از نابجایی‌ها است که لایه‌ای از بین‌نشین‌ها آن‌ها را احاطه کرده است (شکل‌های ۳-۳ و ۳-۹). اگر هسته‌ی جای خالی یا لایه‌ی بین‌نشین روی یک صفحه‌ی فشرده متراکم شود، ممکن است که حلقه‌های فرانک تولید شوند.

در هر دو مورد، یک نقص در چیده شدن نتیجه می‌شود. چگالش[1] جای خالی یک نقص ذاتی و چگالش بین‌نشین‌ها یک نقص در چیده شدن غیرذاتی را نتیجه می‌دهد. این نقایص در ادامه توضیح داده شده است.

اصولاً در شبکه‌های فشرده‌ای مانند fcc و bcc، لایه‌های اتمی یک توالی چیده شدن منظمی را دنبال می‌کنند. در شبکه‌ی fcc، توالی چیدمان به صورت ...ABCABCABC است که نشان می‌دهد که ساختار بعد از هر سه لایه تکرار می‌شود. حذف یک لایه از اتم‌ها منجر به توقف یا یک نقص در توالی چیدمان می‌شود. حذف یک صفحه از اتم‌ها یک نقص در چیده شدن ذاتی تولید می‌کند که یک نقص تکی نیز شناخته می‌شود، و نابجایی‌های چسبیده به نقص تکی، نابجایی‌های S، و در واقع یک نابجایی فرانک S، هستند (شکل ۷-۳۸ الف). برای مثال، توالی به صورت ...ABCAB/ABCABC تغییر می‌یابد که (/) نقص یا صفحه مفقود شده از اتم‌ها را نشان می‌دهد. وارد کردن یک صفحه‌ی اضافی از اتم‌ها یک نقص دوتایی در توالی چیدمان تولید می‌کند ...ABCAB/A/CABC (شکل ۷-۳۸ ب). این یک نقص دوتایی یا غیرذاتی است و نابجایی‌ها، نابجایی‌های D، و در واقع یک حلقه‌ی فرانک D، هستند. بردار برگرز حلقه‌های فرانک S و حلقه‌های فرانک D مشابه هستند. از آن‌جایی که یک حلقه‌ی فرانک از اضافه شدن یا حذف صفحات فشرده به وجود می‌آیند، b باید در جهت عمود بر صفحه (111) باشد و طولی برابر با فاصله‌ی بین صفحات، $\frac{a}{\sqrt{3}}$، داشته باشد، در نتیجه بردار برگرز به صورت $b=\frac{a}{3[111]}$ توصیف می‌شود. از آن‌جایی که بسیار سخت است که حلقه روی صفحه‌ی لغزش حرکت کند (صفحه‌ی لغزش در واقع یک استوانه‌ی تعریف شده به وسیله‌ی لبه‌ی حلقه است)، حلقه‌ی فرانک غیرمتحرک و ثابت فرض شده است زیرا صفحه‌ی لغزش آن یک استوانه‌ی تعریف شده به وسیله‌ی تقاطع محیط حلقه در یک جهت عمود بر بالا یا زیر صفحه‌ی حلقه است. حلقه‌ی فرانک هم‌چنین می‌تواند به صورت اتوکاتالیستی[2] یا با واکنش با یک خط نابجایی به منظور تشکیل یک حلقه‌ی کامل، بدون نقص شود. این فرایند در فصل ۱۲ توضیح داده می‌شود.

دیگر آرایش نابجایی که می‌تواند در فلزات پرتودیده تشکیل شود، چهاروجهی نقص در چیده شدن است. یک چهاروجهی نقص در چیده شدن یک آرایش نقص در چیده شدن سه‌بعدی است که به

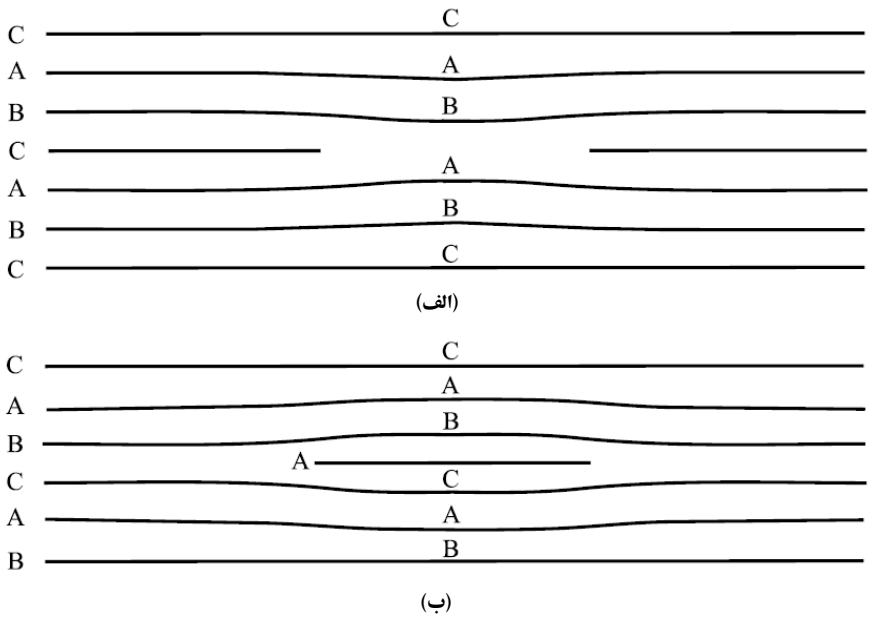
1. Condensation
2. Autocatalytically

شکل چهاروجهی است. این اعتقاد وجود دارد که چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن به صورت مستقیم از خوشه‌های جاهای خالی تولید شده در آبشارها ظاهر می‌شوند. یک حلقه‌ی فرانک همیشه خطی روی یک صفحه‌ی (111) در یک شبکه‌ی fcc خواهد بود. شکل ۷-۳۹ الف یک حلقه‌ی مثلثی شکل روی یک صفحه‌ی (111) با لبه‌های موازی با جهت‌های [110] را نشان می‌دهد. یک نابجایی فرانک که موازی با جهت [111] است، می‌تواند به وسیله‌ی تقسیم شدن به یک نابجایی شاکلی، $\frac{a}{6[110]}$ و یک نابجایی میله‌ای راه پله‌ای[1] انرژی خود را کاهش دهد. صفحه‌ی لغزش نابجایی شاکلی نیز یک صفحه‌ی (۱۱۱) است لیکن از صفحه‌ی حاوی حلقه‌ی فرانک متفاوت است. شکل ۷-۳۹ ب دوتا از سه‌تا نابجایی شاکلی تشکیل شده از سه‌وجه حلقه‌ی فرانک متحرک بالای صفحات (111) را نشان می‌دهد. هر شاکلی در پشت خودش یک نابجایی میله‌ای راه پله‌ای را، $\frac{a}{6[110]}$ ، در موقعیتی که پیش‌تر به وسیله‌ی یک طرف حلقه‌ی نابجایی فرانک اشغال شده بود (لبه‌ی مثلث)، باقی‌می‌گذارد. نقص در چیده شدن موجود در حلقه‌ی فرانک اکنون در نابجایی میله‌ای خمیده شده و روی صفحات فشرده (۱۱۱) نابجایی‌های شاکلی گسترش می‌یابد. هم‌چنان که نابجایی‌های شاکلی بالای صفحات نشان داده شده در شکل ۷-۳۹ ب حرکت می‌کنند، سرانجام در تقاطع صفحات لغزشیشان با یک‌دیگر روبرو شده و تقاطع نابجایی‌های شاکلی منجر به نابجایی‌های میله‌ای دیگر در طول سه لبه‌ی باقی‌مانده‌ی چهاروجهی می‌شود. آرایش نهایی، چهاروجهی‌ای است که کناره‌های آن نقص در چیده شدن و لبه‌های آن نابجایی‌های میله‌ای است (شکل ۷-۳۹ج). نابجایی فرانک و نابجایی‌های شاکلی بعد از این مرحله وجود ندارد.

نابجایی هم‌چنین می‌توانند با چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن واکنش دهند. شبیه‌سازی جنبشی مولکولی از برهم‌کنش یک نابجایی تجزیه شده $\frac{a}{6[120]}$ (به دو نابجایی جزیی شاکلی $\frac{a}{6[120]}$) روی صفحه‌ی لغزش (111) نشان می‌دهد که چندین نوع از برهم‌کنش‌ها موجود است [۸]. هنگامی که چهاروجهی نقص در چیده شدن در صفحه‌ی لغزش نابجایی است، ممکن است که به وسیله‌ی نابجایی برش خورده و با یک انتقال ساختاری در بالای صفحه‌ی لغزش به شکل اولیه‌اش بازیابی شود. برهم‌کنش هم‌چنین می‌تواند لبه‌هایی را در چهاروجهی نقص در چیده شدن ایجاد کند که پایداری را

1. Stair-rod dislocation

کاهش داده و منجر به انحلال شود. مشاهدات میکروسکوپ الکترونی عبوری نشان می‌دهد که چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن می‌توانند چندین بار به وسیله‌ی نابجایی‌ها در کانال‌ها برش داده شوند.

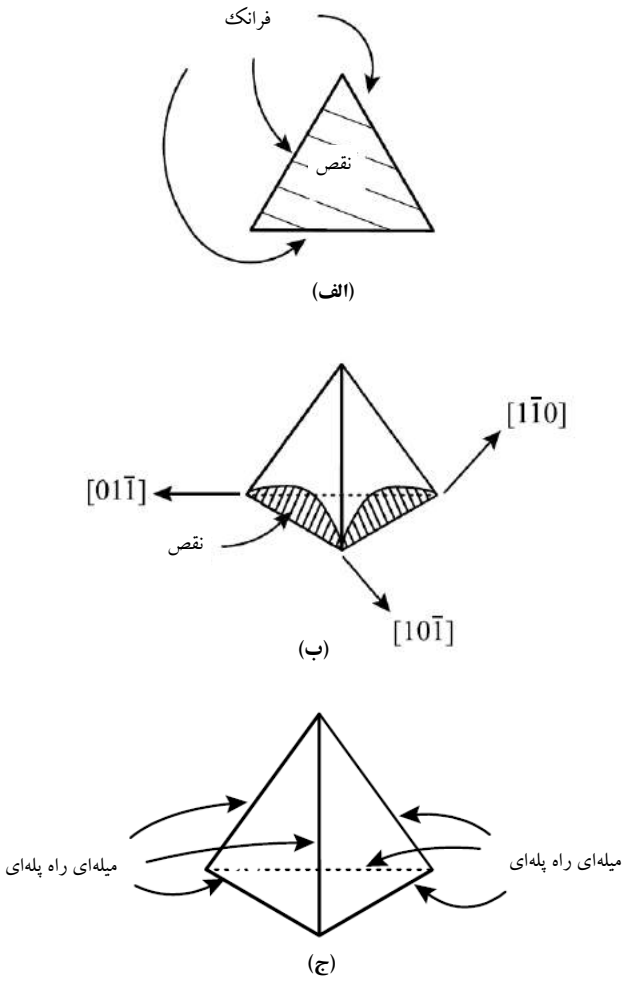


شکل۷-۳۸. نمایی از یک (الف) نقص در چیده شدن ذاتی و یک (ب) نقص در چیده شدن غیرذاتی.

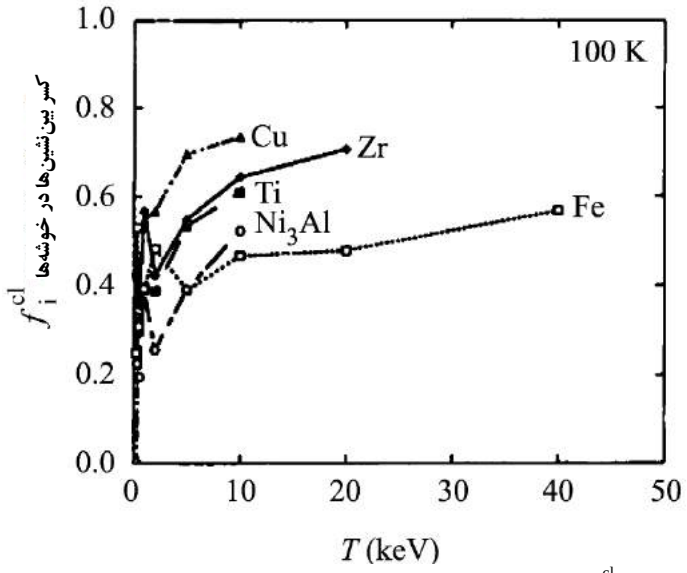
۷-۳ خوشه‌های عیب

همان‌طوری که در فصل ۳ توضیح داده شد، کسر عیوب تولید شده در یک آبشار به علت بازترکیبی درون آبشاری بین ۲۰ تا ۴۰٪ از مقداری است که به وسیله‌ی مدل NRT پیش‌بینی شده است. این عیوب تولید شده تماماً به صورت اتم‌های بین‌نشین تکی یا جاهای خالی ایزوله شده ظاهر نمی‌شوند. در قبال تولید عیوب به صورت تکی، کسر قابل توجهی از عیوب به شکل خوشه‌های عیب تولید می‌شوند. ممکن است خوشه‌های جاهای خالی به صورت حفراتی رشد کنند که شکل ریزساختاری مهمی هستند که ویژگی‌های ابعادی (فصل ۸) و مکانیکی (فصل ۱۲) مواد را تحت تأثیر قرار می‌دهند. اگر خوشه‌ها پایدار باشند، ممکن است که از ناحیه‌ی آبشار به دیگر مناطق مهاجرت کنند و در چاهک‌هایی همانند نابجایی‌ها و مرزدانه‌ها جذب شوند. خوشه‌های بین‌نشینی و جای خالی باید به

صورت جداگانه بررسی شوند زیرا در اصل خوشه‌های بین‌نشین پایدار و خوشه‌های جای خالی ناپایدار هستند. تفاوت تحرک آن‌ها با خوشه‌های بین‌نشینی نیز نشان دهنده‌ی تحرک بیش‌تر بین‌نشین‌ها در مقایسه با جاهای خالی است.



شکل۷-۳۹. چهاروجهی نقص در چیده شدن که به وسیله‌ی نقص‌هایی روی هر یک از وجوه چهاروجهی تشکیل شده است[۱].



شکل۷-۴۰. کسر f_i^{cl} از اتم‌های خود بین‌نشین تکی که به صورت خوشه‌های حاوی حداقل دو بین‌نشینی در چندین فلز و Ni_3Al در دمای ۱۰۰K باقی مانده‌اند[۱۰].

۷-۳-۱ کسر عیوب تشکیل دهنده‌ی خوشه‌ها

خوشه‌بندی درون آبشاری یک از عیوب مهم است زیرا جوانه‌زنی عیوب گسترش یافته را افزایش می‌دهد. خوشه‌بندی بین‌نشینی به یک یا دو روش انجام می‌گردد. در روش اول، خوشه‌های بین‌نشینی در تغییر حالت بین فازهای میخچه‌ای[1] برخوردی و حرارتی ایجاد می‌شوند که در آن اتم‌هایی که از مرکز آبشار به علت موج برخوردی اولیه جابه‌جا شده‌اند به داخل موقعیت‌های بین‌نشینی هل داده می‌شوند. به صورت تناوبی، خوشه‌ها در طول فاز میخچه حرارتی با نفوذ کوتاه دامنه‌ی تحریک شده با برهم‌کنش‌های کشسان میان بین‌نشین‌های همسایه به وجود می‌آیند. احتمال خوشه‌ای شدن و اندازه‌ی خوشه‌ها با افزایش انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و نسبت بالاتر اتم‌های خود بین‌نشین تکیِ تشکیل دهنده خوشه‌ها از جاهای خالی افزایش می‌یابد [۹]. شکل ۷-۴۰ کسر بین‌نشین‌های تشکیل دهنده‌ی خوشه‌ها به صورت تابعی از انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه در چندین فلز در دمای ۱۰۰K را نشان می‌دهد که با شبیه‌ساز جنبشی مولکولی تعیین شده است[۱۰]. لازم به ذکر است که هم‌چنان که آسیب از جابه‌جایی‌های تکی به ریخت‌شناسی آبشاری تغییر حالت می‌دهد، کسر خوشه شده به صورت سریع

1. Spike Phases

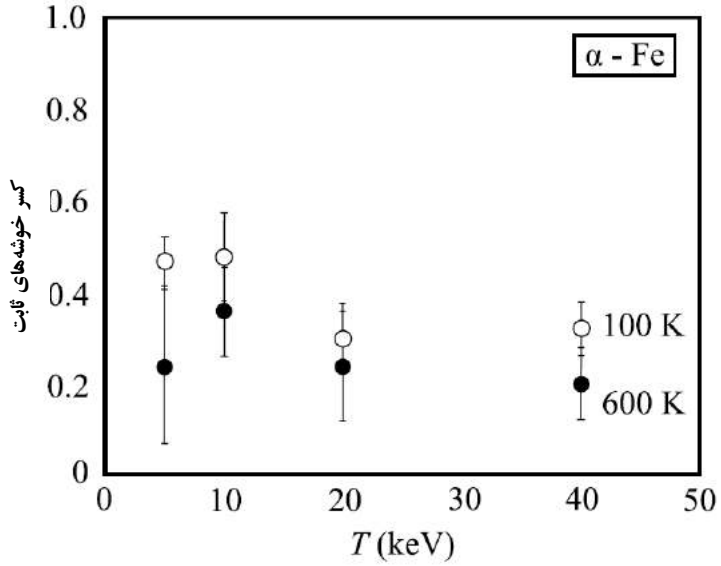
با دما افزایش می‌یابد. برخلاف راندمان تولید جفت فرانکل (شکل ۳-۲۰)، کسر خوشه‌ای شده با فلز تغییر می‌یابد، و درحالی‌که در این‌جا فقط ۵ فلز نشان داده شده است، خوشه‌ای شدن مطابق با ساختار بلوری رخ می‌دهد به نحوی که بالاترین کسر خوشه‌ای شدن برای ساختار fcc و کم‌ترین برای ساختار bcc رخ می‌دهد و کسر خوشه‌ای شدن در ساختار hcp در بین این دوساختار قرار دارد.

درحالی‌که نتایج جنبشی مولکولی نشان می‌دهد که برای انرژی‌های بالاتر از ۵keV، کسر بین‌نشین‌ها در خوشه‌ها در مس از آهن آلفا در حدود ۷۰ تا ۴۵٪ در ۱۰۰ و ۶۰۰K بزرگ‌تر است [۱۱]، مشاهدات آزمایشگاهی نشان می‌دهد که دانسیته‌ی خوشه در مس به اندازه‌ی 10^{3} از آهن بیش‌تر است [۱۲]. درحالی‌که اندازه‌ی این تفاوت مشخص نشده، همان‌طوری که در قسمت بعد بحث خواهد شد ممکن است که این تفاوت منشأ در ماهیت خوشه‌ها داشته باشد.

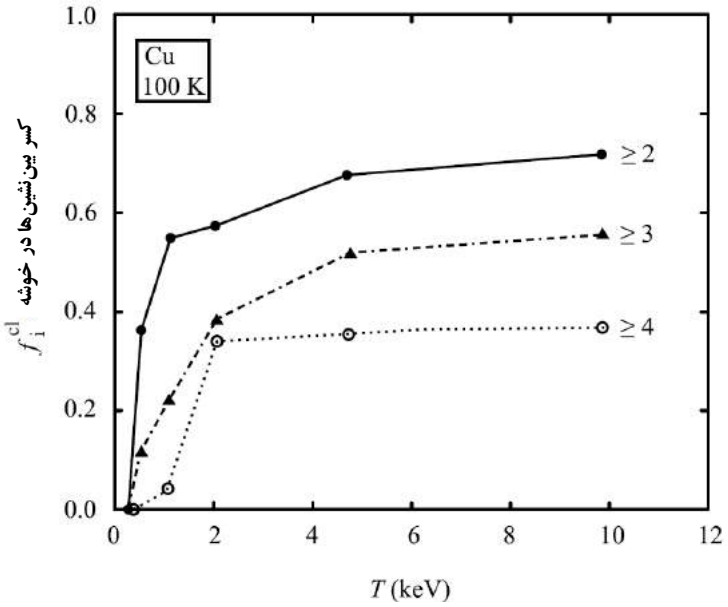
خوشه‌ای شدن بین‌نشینی به دمای پرتودهی وابسته است [۱۳،۹،۱۰]. شکل ۷-۴۱ نشان می‌دهد که با افزایش دما، کسر بین‌نشین‌ها در خوشه‌ها در آهن آلفا برای انرژی‌های بین ۵ تا ۴۰keV کاهش می‌یابد. در واقع، خوشه‌ای شدن بین‌نشینی در دماهای بالا به علت ماهیت فشرده‌تر و عمر بیش‌تر آبشار افزایش می‌یابد که زمان بیش‌تری را برای نفوذ و برهم‌کنش بین‌نشین فراهم می‌کند. از شکل‌های ۳-۶ و ۳-۲۱ یادآوری می‌شود که تولید جفت فرانکل به تدریج با دما کاهش می‌یابد. با ترکیب این نتایج اثر دما می‌تواند به صورت نتیجه‌ی کسر فزاینده از جمعیت نزولی بین‌نشین‌های تشکیل دهنده‌ی خوشه‌ها هم‌چنان که دما افزایش می‌یابد، تشریح شود که منجر به کاهش خالص در $f_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}$ می‌شود.

در پایان، کسر خوشه شده مطابق با اندازه‌ی خوشه به منظور آشکارسازی وابستگی خوشه‌ای شدن به اندازه‌ی خوشه از هم پاشیده می‌شود. شکل ۷-۴۲ کسر اتم‌های خود بین‌نشین تکی در خوشه‌های ۲، ۳ و ۴ تایی در مس به صورت تابعی از انرژی آسیب برای یک دمای پرتودهی ۱۰۰K را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که کسر خوشه‌ای شده به اندازه کوچک‌ترین خوشه بسیار حساس است، به خصوص در انرژی‌های آسیب پایین منجر به کاهش خالصی در $f_{\mathrm{i}}^{\mathrm{cl}}$ می‌شود.

خوشه‌ای شدن جاهای خالی در درون هسته آبشار رخ می‌دهد و اندازه‌ی خوشه‌ای شدن با شبکه‌ی میزبان تغییر می‌کند. بر پایه‌ی اندازه‌گیری های مقدار و عدد دانسیته‌ی خوشه‌های جای خالی در فلزات پرتو دیده، تخمین زده شده که کسر جاهای خالی در خوشه‌ها کم‌تر از ۱۵٪ باشد. ممکن است که به علت نامریی بودن خوشه‌های کوچک، کسر واقعی بزرگ‌تر باشد لیکن این حقیقت که خوشه‌های جای خالی تقریباً پایدارتر از خوشه‌ای بین‌نشینی نیستند در فصل بعد نشان داده می‌شود.



شکل۷-۴۱. کسر خوشه‌های اتم خود بین‌نشین تکیِ تشکیل شده در آرایش ثابت در آهن آلفا در پایان میخچه‌ی حرارتی به صورت تابعی از انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه و دمای پرتودهی [۱۰].

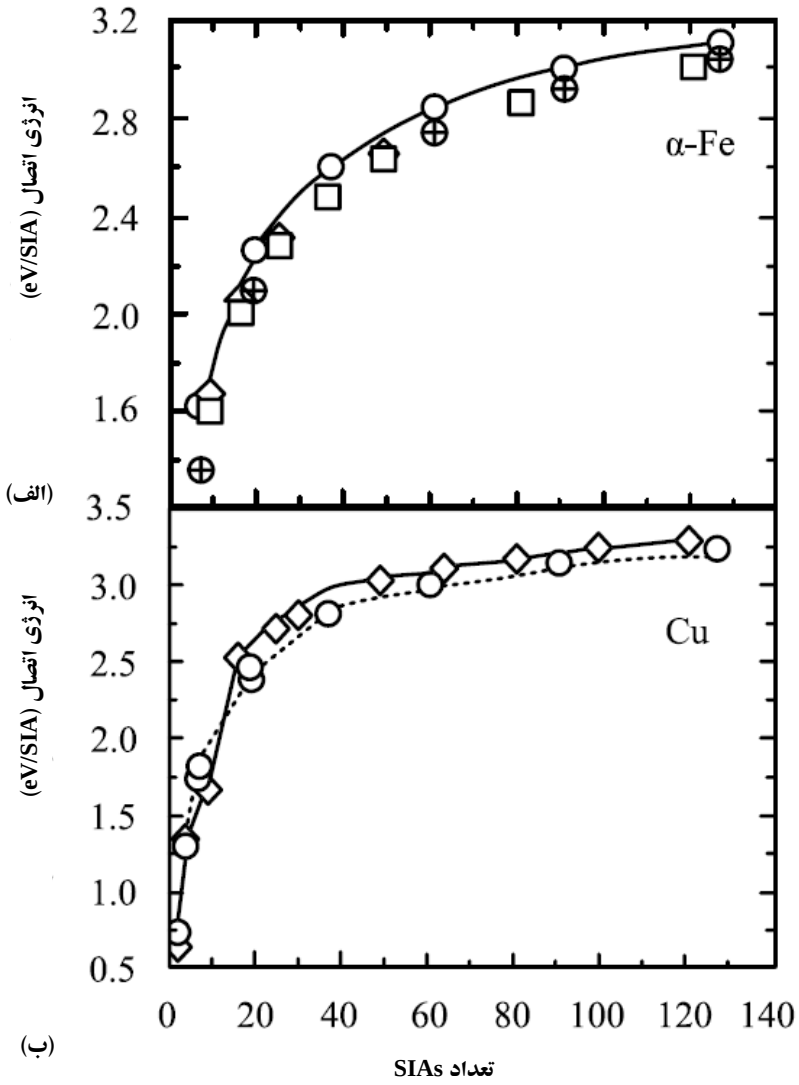


شکل۷-۴۲. کسر f_i^{cl} از اتم خود بین‌نشین‌های تکی که در خوشه‌های دوتایی یا بیش‌تر، سه‌تایی یا بیش‌تر و چهارتایی یا بیش‌تر در مس در ۱۰۰۰K باقی‌مانده‌اند [۱۰].

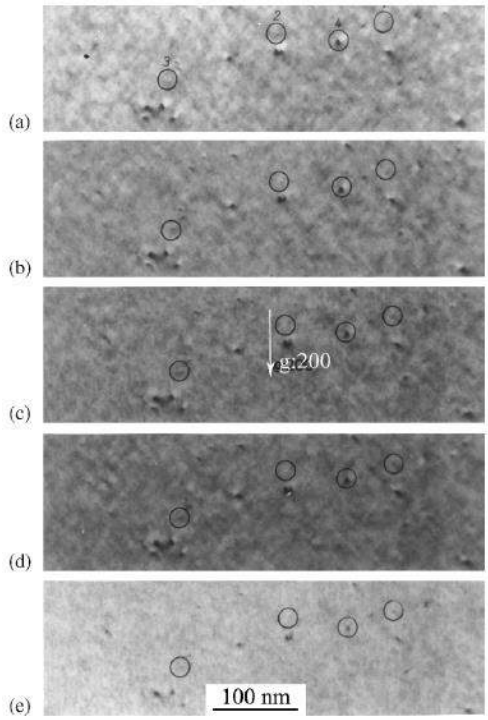
۷-۳-۲ انواع خوشه‌ها

ساختار خوشه تابعی قوی از ساختار بلوری است [۱۴،۱۲]. در α–Fe شبیه‌سازی جنبشی مولکولی نشان داد که اکثر شکل‌های پایدار خوشه‌های کوچک (< ۱۰ SIAs)، یکسری از جهت‌های پر تراکم $\langle 111 \rangle$ هستند. شکل پایدار بعدی جهت‌های پر تراکم $\langle 110 \rangle$ است. هم‌چنان که اندازه‌ی خوشه افزایش می‌یابد (> ۷ SIAs) فقط دو شکل پایدار هستند، جهت‌های پر تراکم $\langle 111 \rangle$ و $\langle 110 \rangle$. این جمعیت‌ها ممکن است که به جای جوانه‌ای برای تشکیل حلقه‌های نابجایی بین‌نشینی کامل با بردار برگرز به ترتیب $\frac{1}{2\langle 111 \rangle}$ یا $\frac{1}{2111}$ نیز عمل کنند.

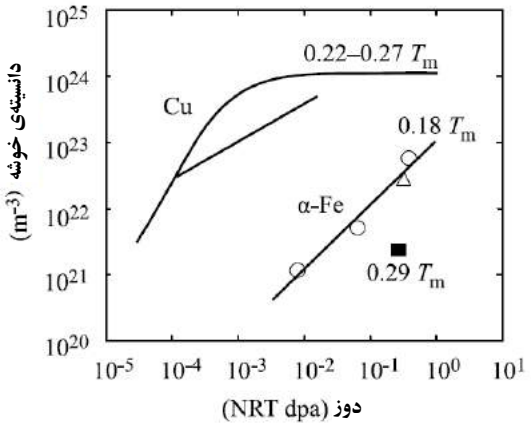
در مس fcc، دمبل $\langle 110 \rangle$ شکل پایدار اتم خود بین‌نشین تکی است و کوچک‌ترین خوشه به شکل دو دمبل $\langle 100 \rangle$ است. خوشه‌های بزرگ‌تر می‌توانند دو آرایش داشته باشند: یکسری از دمبل‌های $\langle 100 \rangle$ یا یکسری از جهت‌های پر تراکم $\langle 110 \rangle$ که هرکدام به همراه یک صفحه $\langle 111 \rangle$ هستند. در طول رشد خوشه‌ها به حلقه‌های فرانک نقص‌دار با بردار برگرز $\frac{1}{3\langle 111 \rangle}$ و حلقه‌های کامل با بردار برگرز $\frac{1}{2\langle 110 \rangle}$ تبدیل می‌شوند. انرژی پیوندی حلقه‌های اتم خود بین‌نشین تکی در آهن و مس به ترتیب در شکل ۷-۴۳ الف و ب نشان داده شده است. لازم به ذکر است که انرژی پیوندی برای حلقه‌های اتم خود بین‌نشین تکی در مس اندکی بیش‌تر از حلقه‌های اتم خود بین‌نشین تکی در آهن آلفا است که در توافق با کسر خوشه‌ای شدن بالاتر پیش‌بینی شده به وسیله‌ی شبیه‌سازی جنبشی مولکولی است. شکل ۷-۴۴ میکروگراف خوشه‌های بین‌نشینی و حلقه‌های بین‌نشینی کوچک در ورقه‌ی مسی پرتودهی شده با یون های Cu^{+} با انرژی ۳۰keV را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که این خوشه‌های عیب از لحاظ اندازه فقط چندین نانومتر هستند. دانسیته‌ی خوشه‌ها همان‌طوری که در شکل ۷-۴۵ نشان داده شده است، می‌تواند به سطوح بالایی برسد.



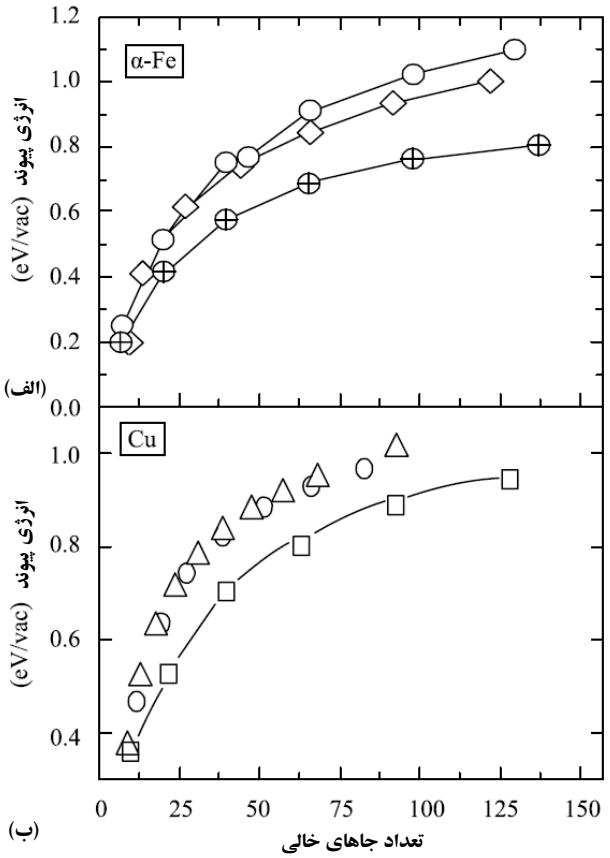
شکل ۷-۴۳. انرژی پیوندی برای حلقه‌های اتم خود بین‌نشین تکی با شکل‌ها و بردارهای برگرز متفاوت (الف) در آهن آلفا، (ب) در مس [۱۲].



شکل ۷-۴۴. میکروگراف خوشه‌های بین‌نشینی و حلقه‌های بین‌نشینی کوچک در ورقه‌ی مسی پرتودهی شده با یون‌های Cu^{+} با انرژی ۳۰keV. عیوب به وسیله‌ی دایره‌هایی در تصویر نشان داده شده است [۱۵].



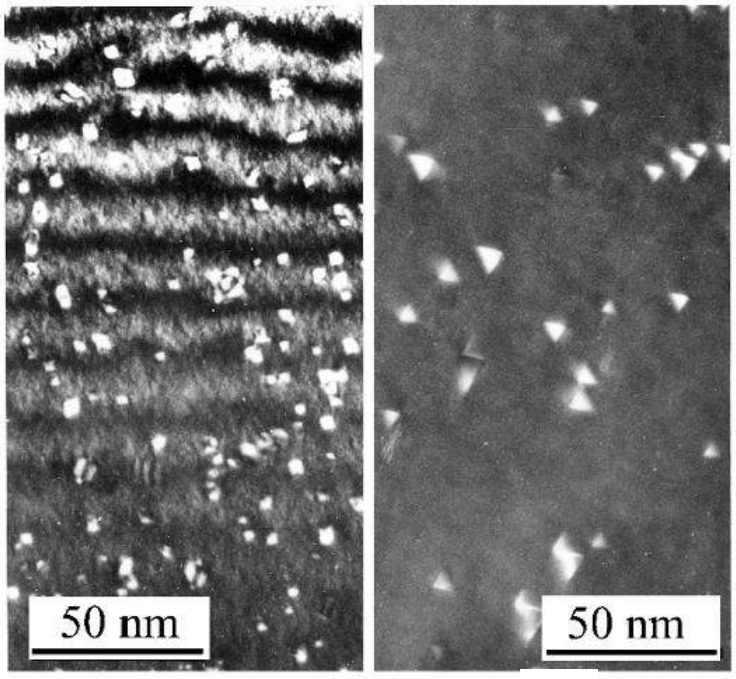
شکل۷-۴۵. وابستگی دانسیته‌ی خوشه‌ها به دوز پرتودهی در آهن آلفا پرتودهی شده با نوترون‌های شکافت در دمای زیر $0,3\ T_m$ [۱۲].



شکل ۷-۴۶. انرژی پیوندی حلقه‌های جای خالی با شکل‌ها و بردارهای برگرز متفاوت در (الف) آهن آلفا، و (ب) مس [۱۲].

پایداری خوشه‌های جاهای خالی در مقایسه با خوشه‌های بین‌نشین‌ها نسبتاً پایین است. اکثر شکل‌های پایدار برای خوشه‌های جای خالی در آهن آلفا، یا یکسری از جاهای خالی دوتایی متمرکز شده روی دو صفحه‌ی مجاور $\{100\}$ یا یکسری از نزدیک‌ترین جا خالی‌های همسایه روی صفحه‌ی $\{110\}$ هستند. در طول رشد خوشه، نوع اول در یک حلقه نابجایی کامل با بردار برگرز $\langle 100\rangle$ نتیجه می‌شود و نوع دوم در داخل حلقه‌ی کامل با بردار برگرز $\frac{1}{2}\langle 111\rangle$ بی‌نقص می‌شود. حلقه‌های جای خالی در آرایش‌های نقص‌دار نیز می‌توانند وجود داشته باشد. حلقه‌ها عموماً هنگامی که تعداد جاهای خالی به حدود ۴۰ می‌رسد، به منظور تشکیل حلقه‌های کامل بی‌نقص می‌شوند [۱۲].

در مس fcc، اکثر ترکیبات پایدار از خوشه‌ی جای خالی، چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن و خوشه‌های نقص‌دار روی صفحات $\{111\}$ هستند که حلقه‌های فرانک با بردارهای برگرز $\frac{1}{3}\langle 111\rangle$ را تشکیل می‌دهند. انرژی پیوندیِ اشکال مختلف جاهای خالی در آهن آلفا و در مس در شکل ۷-۴۶ الف و ب نشان داده شده است. لازم به ذکر است که انرژی پیوندی جاهای خالی در خوشه‌ها نسبت به بین‌نشین‌ها که در شکل‌های ۷-۴۳ الف و ب نشان داده شده است، بسیار کم‌تر است. انرژی پیوندی در هر عیب برای خوشه‌ی چهارعیبی، برای جاهای خالی کم‌تر از ۰٫۴eV و برای بین‌نشین‌ها کم‌تر از ۱٫۲eV است. مشاهدات انجام شده به وسیله‌ی میکروسکوپ الکترونی عبوری [۱۶] مشخص کرده است که حلقه‌های نابجایی جای خالی و چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن در اندازه‌های چند نانومتری به وسیله‌ی آبشارها در بسیاری از فلزات تشکیل می‌شوند (شکل ۷-۴۷).



(الف) (ب)

شکل ۷-۴۷. تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری از (الف) خوشه‌های عیب در طلای پرتودهی شده تا $1{,}1\times10^{22}$ n/m^2 در دمای ۲۰۰°C و (ب) چهاروجهی نقص در چیده شدن در نقره‌ی پرتودهی شده شده تا $4{,}4\times10^{21}$ n/m^2 در دمای ۴۰۰°C[۱۶].

۷-۳-۳ تحرک خوشه

خوشه‌های اتم خود بین‌نشین تکی تشکیل شده در آبشارها تحرک بالایی را نشان می‌دهند و در طول عمر آبشار (~۱۰ ps) می‌توانند بیش از مقیاس فاصله‌های اتمی مهاجرت کنند. به هر جهت تمام خوشه‌ها قابلیت تحرک ندارند. در کنار حلقه‌های فرانک نقص‌دار پایدار ممکن است که اتم‌های خود بین‌نشین تکی آرایش شبه پایداری از اتم‌های خود بین‌نشین تکی را تشکیل دهند که نمی‌تواند به یک شکل پایدار بازسازی شوند و با پایان میخچه‌ی حرارتی به شکل لغزنده در می‌آیند. این آرایش‌ها مهم هستند زیرا آن‌ها از آبشار مهاجرت نمی‌کنند و ممکن است که به منزله‌ی موقعیت‌های جوانه‌زنی برای رشد عیوب گسترش‌یافته عمل کنند. شکل ۷-۴۱ مشخص می‌کند که کسر خوشه‌های اتم خود بین‌نشین تکی در آرایش نیمه پایدار غیرمهاجر با پایان فاز میخچه‌ی حرارتی در ۱۰۰K و تا حدی پایین‌تر از ۶۰۰K، بین ۳۰ تا ۸۰ درصد هستند. شکل این خوشه‌ها با ساختار بلوری تغییر می‌کند. در فلزات hcp، خوشه‌های کم‌تحرک، آرایش مثلثی از اتم‌های فشرده شده روی صفحه‌ی قاعده را شکل می‌دهند. در آهن آلفا، سه اتم خود بین‌نشین تکی می‌توانند مثلثی را تشکیل دهند که موازی ولی خارج از صفحه $\{111\}$ است. اگر خوشه‌ها به صورت حلقه‌های نابجایی نقص‌دار تشکیل شده باشند، مانند $b=\frac{1}{3}\langle 111\rangle$ در fcc، $\frac{1}{2}\langle 110\rangle$ در bcc و $\frac{1}{2}\langle 0001\rangle$ در hcp، در نتیجه آن‌ها به صورت ذاتی غیرمهاجر هستند و نمی‌توانند لغزشی را نشان دهند. توانایی آن‌ها در حرکت ناشی از شکل جهت‌های پر تراکم خوشه‌ای شده‌ی این عیوب گسترش یافته است. آن‌ها آرایشی دارند که بهترین توصیف از این آرایش به صورت حلقه‌های کامل نابجایی‌های بین‌نشینی کوچک با بردارهای برگرز $b=\frac{1}{2}\langle 110\rangle$ در fcc، $\frac{1}{2}\langle 111\rangle$ و $\langle 100\rangle$ در bcc و $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0\rangle$ در hcp است. جدول ۷-۱، بردارهای برگرز حلقه‌های نابجایی لغزنده و ثابت تشکیل شده به وسیله‌ی خوشه‌های جاهای خالی و بین‌نشینی را به صورت خلاصه گزارش کرده است.

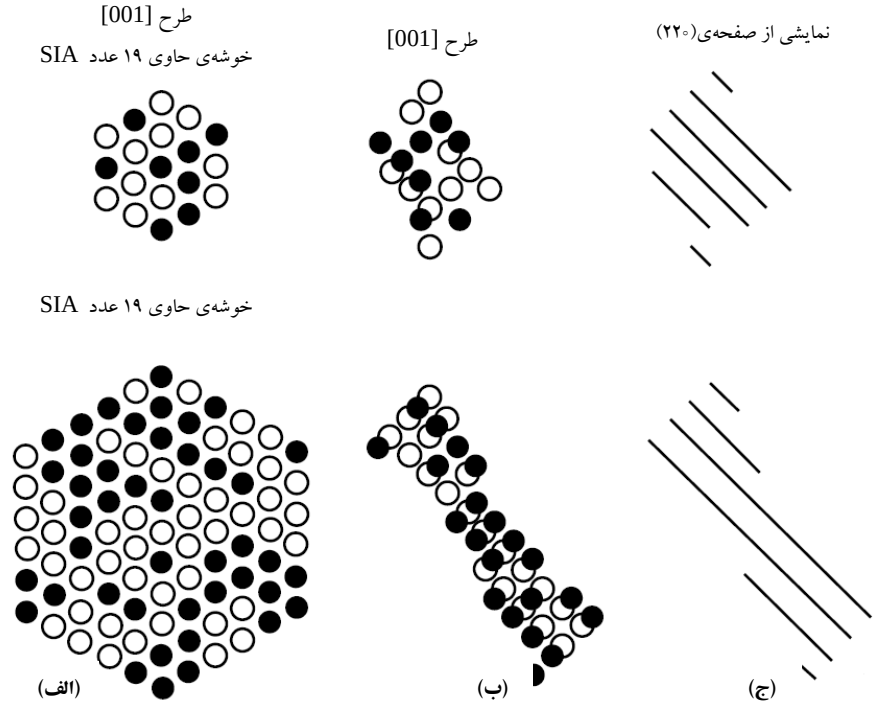
جدول۷-۱. خلاصه‌ای از بردارهای برگرز حلقه‌های لغزنده وثابت در شبکه‌های fcc، bcc و hcp [۱۰].

ساختار بلوری	بردار برگرز	تحرک خوشه
fcc	$\boldsymbol{b} = 1/2\langle 110\rangle$	لغزنده
	$\boldsymbol{b} = 1/3\langle 111\rangle$	ثابت
	SFT (vacancy)	لغزنده
bcc	$\boldsymbol{b} = 1/2\langle 111\rangle, \langle 100\rangle$	ثابت
	$\boldsymbol{b} = 1/2\langle 110\rangle$	لغزنده
hcp	$\boldsymbol{b} = 1/3\langle 11\bar{2}0\rangle$	ثابت
	$\boldsymbol{b} = 1/2\langle 10\bar{1}0\rangle, 1/2\langle 0001\rangle$	ثابت

خوشه‌های متحرک می‌توانند با دیگر خوشه‌ها یا با اتم‌های ناخالصی مانند هلیوم واکنش دهند. رفتار خوشه‌های بین‌نشینی در حضور اتم‌های ناخالصی هلیوم و جاهای خالی در فیلم‌های ۷-۱ تا ۷-۳ نشان داده شده است. در فیلم ۷-۱ یک اتم خود بین‌نشین تکی (کره‌های سبز رنگ) در آهن bcc با دو اتم جانشینی هلیوم (کره‌های آبی روشن) واکنش می‌دهد و برهم‌کنش منجر به بازترکیبی و دفع هلیوم به داخل موقعیت بین‌نشینی می‌شود که از آن مهاجرت کرده و دیگر اتم‌های جانشینی هلیوم را به دام می‌اندازد. شکل ۷-۲ برهم‌کنش میان یک خوشه‌ی حاوی ۶ اتم خود بین‌نشین تکی و سه اتم هلیوم را نشان می‌دهد. در این مورد، بازترکیبی و خروج هلیوم با دوتا از سه‌تا اتم هلیوم رخ می‌دهد و منجر به خوشه‌ی حاوی ۴ اتم خود بین‌نشین تکی و اتم هلیوم بین‌نشینی وخوشه‌ی حاوی هلیوم بین‌نشینی و هلیوم جانشینی می‌شود. شکل ۷-۳ برهم‌کنش میان خوشه‌ی حاوی ۶ اتم خود بین‌نشین تکی و خوشه‌ی حاوی ۴ اتم هلیوم و ۶ جای خالی را نشان می‌دهد. جای خالی‌ها به وسیله‌ی کره‌های قرمز نشان داده شده است. برهم‌کنش منجر به بازترکیبی و خارج شدن اتم هلیوم و در نتیجه خوشه‌ی حاوی ۱ اتم خود بین‌نشین تکی و ۴ اتم هلیوم می‌شود.

اکثر خوشه‌های حاوی اتم خود بین‌نشین تکی لغزنده هستند. خوشه‌های بین‌نشینی دوتایی و سه‌تایی در آهن آلفا و مس لغزش یک بعدی را در طول جهت‌های پر تراکم متحمل می‌شوند [۱۲]. در این خوشه‌های کوچک، جهت‌های پر تراکم می‌توانند بچرخند به گونه‌ای که لغزش در جهت معادل رخ دهد. این چرخش دراصل، حرکت سه‌بعدی را نتیجه می‌دهد. بسامد چرخش برای بین‌نشین‌های سه‌تایی، پایین است و برای هر دو عیب با دما افزایش می‌یابد. خوشه‌های بزرگ‌تر در اصل حلقه‌های

نابجایی کامل با بردار برگرز در طول محور جهت‌های پر تراکم هستند، در نتیجه تحرکات آن‌ها می‌تواند در جایگاه لغزش فعال شده‌ی حرارتی[1] در یک بعد در نظر گرفته شود. شکل ۷-۴۸ خوشه‌های بین‌نشینی ۱۹ و ۹۱تایی در آهن آلفا را نشان می‌دهد. هر دو حلقه در سراسر شش صفحه (220) و همان‌طوری گسترش یافته‌اند که در شکل در سمت راست هر خوشه نشان داده شده است. حرکت این خوشه‌ها، یک‌بعدی و در طول جهت ⟨111⟩است. مشخصه‌ی حرکت خوشه به این صورت است که ضریب هم‌بستگی مؤثر بیش‌تر از واحد است، بنابراین خوشه‌ای که در یک مرحله حرکت می‌کند احتمال بالایی دارد که در مرحله‌ی بعد نیز در همان جهت حرکت کند. فیلم ۷-۴ یک شبیه‌سازی جنبشی مولکولی از یک خوشه‌ی حاوی نوزده اتم خود بین‌نشین تکی در آهن bcc در دمای $۲۸۷^{o}C$ را نشان می‌دهد. خوشه حرکت یک‌بعدی در جهت بردار برگرز را نشان می‌دهد.



شکل ۷-۴۸. یک خوشه‌ی بین‌نشینی ۱۹ و ۹۱ تایی در جهت‌های (الف) $[1\bar{1}1]$ و (ب) $[001]$. دایره‌های پر و خالی به ترتیب مرکز جرم‌های جهت‌های پرتراکم ⟨111⟩ و دمبل‌های شکاف‌دار را نشان می‌دهد. (ج) صفحات اضافی (220) شبکه که با خوشه‌ها اشغال شده است [۱۷].

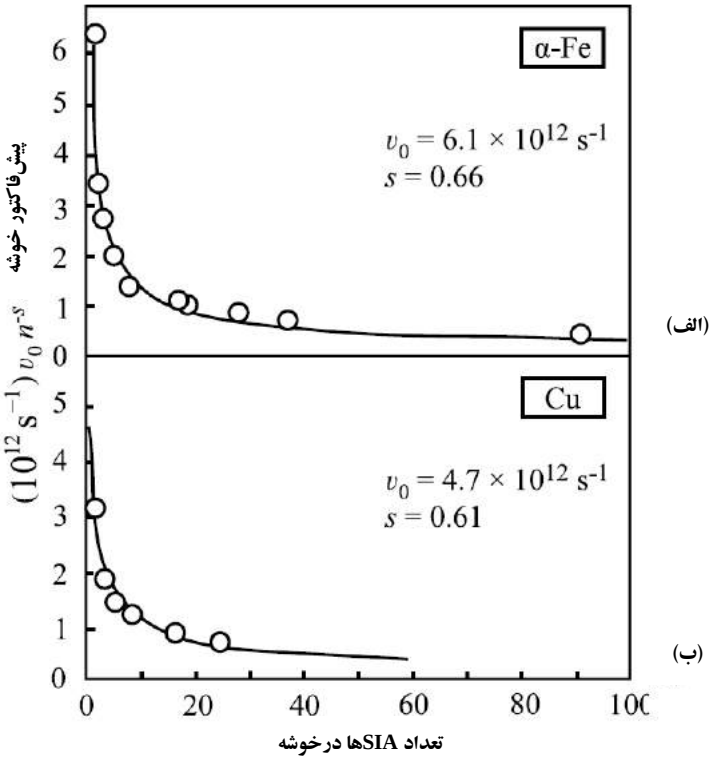
1. Thermally-assisted

انرژی فعال‌سازی برای حرکت خوشه بین ۰٫۰۲۲ و ۰٫۰۲۶ eV در آهن آلفا و بین ۰٫۰۲۴ و ۰٫۰۳۰ eV در مس است [۱۲]. انرژی فعال‌سازی به صورت ضعیفی وابسته به اندازه‌ی خوشه است، که این امکان را فراهم می‌آورد که بسامد پرش خوشه به صورت زیر نشان داده می‌شود:

(۵۶-۷)

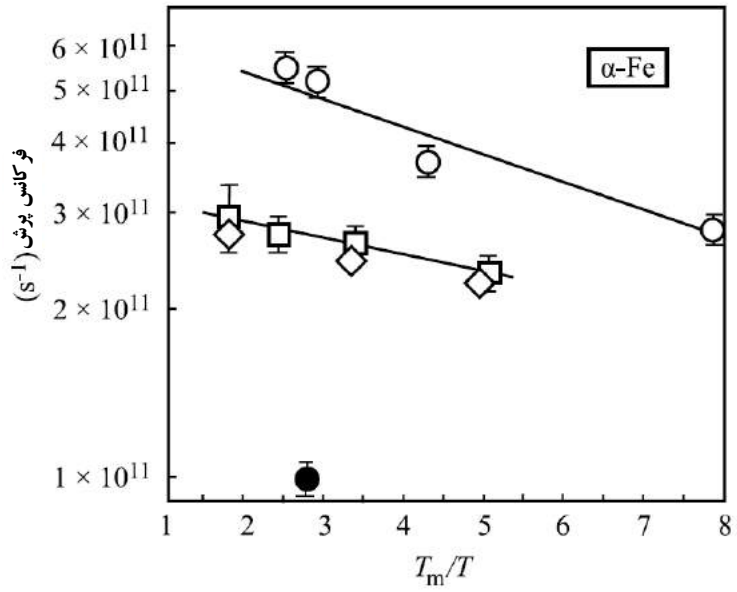
$$\nu_n = \nu_0 n^{-S} \exp(-\langle E_m \rangle / kT) ,$$

که $\langle E_m \rangle$ میانگین انرژی فعال‌سازی مؤثر، ν_0 ضریب پیش‌نماییِ مستقل از اندازه و عبارت n^{-S} وابستگی اندازه‌ی خوشه است، که یک مقدار تقریبی ۰٫۶۵ برای s، وابستگی اندازه‌ی خوشه‌ی ضریب پیش‌نمایی برای آهن آلفا و مس را توضیح می‌دهد.



شکل ۷-۴۹. وابستگی اندازه‌ی ضریب پیش‌نمایی در معادله‌ی ۷-۵۶ در (الف) آهن آلفا و (ب) Cu [۱۲].

شکل ۷-۴۹ تابع پیش‌نمایی کلی را به صورت تابعی از اندازه‌ی خوشه نشان می‌دهد. این وابستگی احتمالاً ناشی از کانونی شدن پیشرفته‌ی آرایش جهت‌های پر تراکم برای اتم‌های خود بین‌نشین تکی در یک خوشه است که منجر به افزایش احتمال پرش‌های موفق می‌شود. خوشه‌های جای خالی که حلقه‌های نابجایی کامل را تشکیل می‌دهند به صورت ذاتی متحرک هستند. شبیه‌سازی جنبشی مولکولی نشان می‌دهد که تحرک حلقه‌های جای خالی کامل با بردارهای برگرز $\frac{1}{2}\langle 110\rangle$ و $\frac{1}{2}\langle 111\rangle$ به ترتیب در مس و آهن آلفا، فقط اندکی از یک خوشه با تعداد مشابه جهت‌های پر تراکم بین‌نشینی کم‌تر است [۱۲]. نتایج در شکل ۷-۵۰ برای یک خوشه ۳۷ عیبی نشان داده شده است. تا زمانی که آن‌ها به شکل حلقه‌های کامل هستند، متحرک هستند. خوشه‌های جای خالی که نمی‌توانند به یک ساختار نابجایی تجزیه شوند یا آن‌که یک حلقه‌ی فرانک یا انرژی نقص در چیده شدن را تشکیل دهند، غیرمتحرک هستند.



شکل ۷-۵۰. بسامد پرش برحسب دما برای حلقه‌های جای خالی (چهارگوش و لوزی) و حلقه‌های اتم‌های خود بین‌نشین تکی (دایره‌ها) در آهن در دمای ۳۷۵ درجه‌ی سانتی‌گراد [۱۲].

۴-۷ عیوب گسترش یافته

همان‌طوری که در قسمت قبل تشریح شد جاهای خالی و نابجایی‌ها می‌توانند برای تشکیل دیگر انواع عیوب خوشه‌ای شوند که در تعریف اثر پرتودهی روی ویژگی‌های فیزیکی و مکانیکی جامد مهم هستند. در اصل یک خوشه از عیوب نقطه‌ای می‌تواند یک‌بعدی (خط)، دوبعدی (دیسک یا صفحه) یا سه‌بعدی (حفره) باشد. جاهای خالی و بین‌نشین‌هایی که در تعدادی بیش‌تر از آن چیزی که در ابتدا بحث شد، خوشه‌ای شوند به اشکال ویژه‌ای در شبکه‌ی بلوری انباشته خواهند شد. به ویژه، آن‌ها آرایش حداقل انرژی را به خود خواهند گرفت که این آرایش در سه بعد، حفره است و در دو بعد حلقه یا صفحه‌ی کوچک با ضخامتی به بزرگی برابر با بردار برگرز است و بین صفحات فشرده مجاور قرار می‌گیرند.

ممکن است که تشکیل دیسک جای خالی در اثر تجزیه‌ی هسته‌ی میخچه[1] جابه‌جایی (انقباض جاهای خالی) روی صفحه $\{111\}$ در ادامه رخداد آسیب تابشی دور از دسترس باشد. انرژی دیسک می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۵۷-۷)

$$E_{\mathrm{d}} = 2\pi r_{\mathrm{d}}^2 \gamma ,$$

که r_{d} شعاع دیسک و γ انرژی سطحی فلز است. برای تعداد اندک جاهای خالی، شکل توده‌ای با حداقل انرژی به صورت حفره‌ی کروی است. انرژیِ حفره‌ی کروی با شعاع r_{V} برابر است با:

(۵۸-۷)

$$E_{\mathrm{V}} = 4\pi r_{\mathrm{V}}^2 \gamma .$$

اگر Ω حجم اتمی باشد، سپس تعداد جاهای خالی در حفره برابر است با:

(۵۹-۷)

$$n_{\mathrm{V}} = \frac{4}{3}\frac{\pi r_{\mathrm{V}}^3}{\Omega} .$$

1. Spike

انرژی حفره برحسب تعداد جاهای خالی به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۶۰-۷)

$$E_S = 4\pi \left(\frac{3n_v\Omega}{4\pi}\right)^{2/3} \gamma = (6n_v\Omega\sqrt{\pi})^{2/3}\gamma\,.$$

برای تعداد زیاد جاهای خالی، حلقه‌ی مسطح یک آرایش بسیار پایدار است که در ادامه به صورت مختصر مورد بحث قرار خواهد گرفت.

دیگر آرایش ممکن خوشه از جاهای خالی همان‌طوری که در بخش ۷-۲ توضیح داده شد، چهاروجهی نقص در چیده شدن است. انرژی چهاروجهی نقص در چیده شدن، با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود [۴، ۱۸، ۱۹]:

(۶۱-۷)

$$E_{SFT} = \frac{\mu L b^2}{6\pi(1-\nu)}\left[\ln\left(\frac{4L}{a}\right) + 1.017 + 0.97\nu\right] + \sqrt{3}L^2\gamma_{SFE}\,,$$

که ν نسبت پواسان، a ثابت شبکه و γ_{SFE} انرژی نقص در چیده شدن هستند و L طول لبه‌ی چهاروجهی و برابر با $L = a(n/3)^{1/2}$ است.

یک فرایند مشابه که شامل تراکم بین‌نشین‌ها است، در اطراف لبه‌های منطقه‌ی تهی‌شده رخ می‌دهد که ممکن است غلظت بالایی از بین‌نشین‌ها را داشته باشد. تراکم بین‌نشین‌ها روی صفحه‌ی فشرده، لایه‌ی اضافی از اتم‌ها و دو شکست در توالی چیدمان را همان‌طوری تولید می‌کند که در بخش ۷-۲ برای یک دیسک با شعاع r_L توضیح داده شده است. انرژی یک حلقه‌ی نقص‌دار (جای خالی یا بین‌نشین) برابر است با:

$$E_L = 2\pi r_L\Gamma + \pi r_L^2\gamma_{SFE}\,, \qquad (۶۲-۷)$$

که عبارت اول انرژی خط نابجایی و عبارت دوم انرژی مرتبط با نقص در چیده شدن هستند و Γ انرژی در واحد طول خط نابجایی است. در شبکه‌ی fcc، حلقه‌های نقص‌دار روی صفحات $\{111\}$

قرار می‌گیرند که دانسیته‌ی اتمی $\frac{4}{\sqrt{3}a^2}$ را دارند یا سطح در اتم برابر با $\frac{\sqrt{3}a^2}{4}$ است. در نتیجه شعاع یک حلقه شامل n جای خالی (یا بین‌نشینی) برابر است با:

(۶۳-۷)

$$r_{\mathrm{L}} = \left(\frac{\sqrt{3}a^2 n}{4\pi}\right)^{1/2} .$$

با تقریب‌سازی Γ با μb^2، معادله‌ی ۷-۳۲ ب، که μ ضریب برشی و b بردار برگرز است، معادله‌ی ۷-۶۲ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۶۴-۷)

$$E_{\mathrm{L}} = 2\pi\mu b^2 \left(\frac{\sqrt{3}a^2 n}{4\pi}\right)^{1/2} + \pi\left(\frac{\sqrt{3}a^2 n}{4\pi}\right)\gamma_{\mathrm{SFE}} .$$

عبارات بسیار دقیق برای انرژی حلقه‌های نقص‌دار و کامل در مرجع‌های [۶،۴، ۱۸، ۱۹، ۲۰] ارایه شده است و با توجه به مرجع [۲۰] انرژی حلقه‌ی فرانک نقص‌دار برابر است با:

(۶۵-۷)

$$E_{\mathrm{F}} = \frac{2}{3}\frac{1}{(1-\nu)}\mu b^2 r_{\mathrm{L}} \ln\left[\frac{4r_{\mathrm{L}}}{r_{\mathrm{c}}} - 2\right] + \pi r_{\mathrm{L}}^2 \gamma_{\mathrm{SFE}} .$$

انرژی حلقه‌ی کامل [۱۶] برابر است با:

(۶۶-۷)

$$E_{\mathrm{P}} = \frac{2}{3}\frac{1}{(1-\nu)} + \frac{1}{3}\left(\frac{2-\nu}{2(1-\nu)}\right)\mu b^2 r_{\mathrm{L}} \ln\left[\frac{4r_{\mathrm{L}}}{r_{\mathrm{c}}} - 2\right] ,$$

که r_c شعاع هسته‌ی نابجایی است. معادله‌های ۷-۶۵ و ۷-۶۶ به حلقه‌های بین‌نشینی و جای خالی اشاره می‌کند و با توجه به این معادلات، تفاوت بین انرژی حلقه‌ی کامل و حلقه‌ی فرانک برابر است با:

(۶۷-۷)

$$\Delta E = \pi r_L^2 \gamma_{SFE} - \frac{1}{3}\left(\frac{2-\nu}{2(1-\nu)}\right)\mu b^2 r_L \ln\left[\frac{4r_L}{r_c} - 2\right] .$$

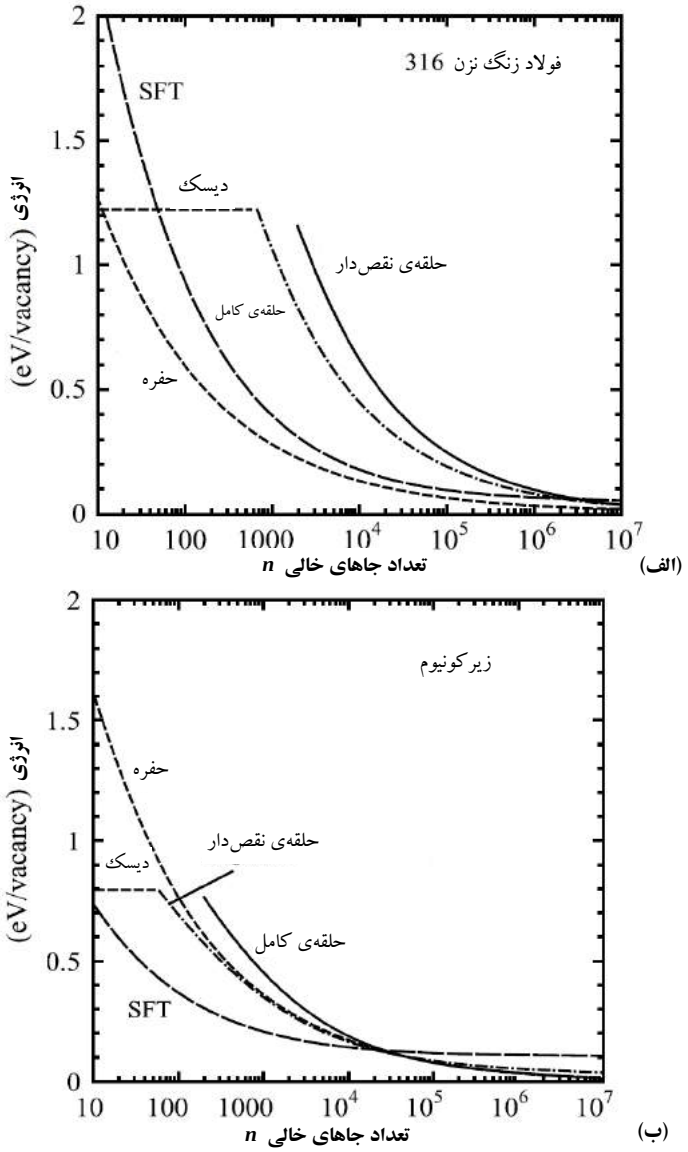
بنابراین بی‌نقص شدن در صورتی مطلوب است که:

(۶۸-۷)

$$\gamma_{SFE} > \frac{\mu b^2}{3\pi r_L}\left(\frac{2-\nu}{2(1-\nu)}\right)\ln\left[\frac{4r_L}{r_c} - 2\right] .$$

معادله‌ها برای دیسک، حفره، حلقه‌ی کامل، حلقه‌ی نقص‌دار و نقص در چیده شدن در شکل ۷-۵۱ الف و ب به ترتیب برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ و زیرکونیوم رسم شده است. مقادیر ثابت برای این مواد در زیرنویس شکل مشخص شده است. لازم به ذکر است که در کل، عیوب نقص‌دار در زیرکونیوم از آهن بسیار پایدارتر هستند و حفرات در فولاد زنگ نزن از زیرکونیوم بسیار پایدارتر هستند.

در فولاد زنگ نزن، حفرها تا اندازه‌های نسبتاً بزرگی پایدار هستند و انرژی حلقه‌های نقص‌دار تا اندازه‌های بزرگ عیوب، کم‌تر از حلقه‌ی کامل باقی می‌ماند. در زیرکونیوم، حلقه‌های نقص‌دار و نقص‌های در چیده شدن از حفرها بسیار پایدارتر هستند. حساسیت بالا به تورم حفره‌ای در فولاد زنگ نزن و غیاب حفرات در زیرکونیوم در توافق کیفی با انرژی‌های تشکیل برای این عیوب گسترش‌یافته مطابق با شکل ۷-۵۱ است.



شکل ۷-۵۱. انرژی تشکیل برای عیوب مختلف خوشه‌ی جای خالی در (الف) فولاد زنگ نزن ۳۱۶، و (ب) زیرکونیوم به صورت تابعی از Log تعداد جاهای خالی در خوشه. پارامترهای ماده برای فولاد زنگ نزن برابر است با: γ_{SFE} = ۳۵ mJ/m^2، γ = ۱٫۷۵ J/m^2، μ = ۸۲ GPa. پارامترهای ماده برای زیرکونیوم برابر است با: γ_{SFE} = ۱۰۲ mJ/m^2، γ = ۱٫۴۰ J/m^2، μ = ۳۳ GPa.

از آن‌جایی که فقط برای تعداد کمی از جاهای خالی، حفره یک آرایش پایدار است، چه‌طور می‌توان حفرات بزرگ با تعداد بسیار زیادی جاهای خالی را مشاهده کرد؟ به خوبی محرز شده است که برای اکثر فلزات، پرتودهی در دماهای پایین (T/T_m < ۰٫۲) منجر به تجمع جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به منظور تشکیل خوشه‌هایی که با نابجایی‌ها مقید شده‌اند، به عبارت دیگر حلقه‌ها و چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن (در فلزاتی با انرژی نقص در چیده شدن پایین) می‌شود. در دماهای بالاتر، جاهای خالی می‌توانند به صورت حفره‌ها متجمع شوند. حفره‌ها در باریکه‌ی دمایی متغیر در حدود $\frac{1}{3} < T/T_m < \frac{1}{2}$ ظاهر می‌شوند که گازهای انحلال‌ناپذیر مانند هلیوم اثر شدیدی روی پایدارسازی حفره‌ها دارند. در دماهای کم‌تر از $1{,}3T/T_m$، جاهای خالی به اندازه‌ی کافی متحرک نیستند تا قبل از نابودسازی با بین‌نشین‌های مهاجر به حفره‌ها برسند. هم‌چنین حلقه‌های تشکیل شده به وسیله‌ی تجزیه‌ی جای خالیِ آبشارها، برخلاف حلقه‌های تشکیل شده به وسیله‌ی تجزیه‌ی حرارتی در دماهای پایین پایدار هستند و از آن‌رو، تعداد جاهای خالی موجود برای رشد حفره را کاهش می‌دهند. در دماهای بسیار بالا، غلظت جاهای خالی تعادل حرارتی با غلظت جاهای خالی القایی تابشی قابل مقایسه هستند و حفره‌ها تمایل دارند که به وسیله‌ی نشر جای خالی منقبض شوند. بحث جوانه‌زنی حفره و حباب و رشد به صورت کامل در فصل ۸ ارایه خواهد شد.

۷-۵ تولید عیب مؤثر

با فهم بهتر از اهمیت خوشه‌های عیب، می‌توانیم توصیف خود از تولید عیب را گسترش داده و آن را پالایش کنیم. تکامل ریزساختاری نهایتاً به وسیله‌ی کسر عیوب مهاجر بین‌نشین و جای خالی، $MDF_{v,i}$ کنترل می‌شود. ساده‌ترین مؤلفه‌ی کسر عیوب مهاجر بین‌نشین و جای خالی، کسر عیوب نقطه‌ای تکی، $IDF_{v,i}$ (که در فصل ۳ تشریح شد) است، که به صورت مستقیم در آبشار جابه‌جایی تولید شده است. مؤلفه‌ی دوم کسر متحرک خوشه، $MCF_{i,v}$ (بحث شده در بخش ۷-۳-۳) است و ترکیبی از خوشه‌های عیوب بین‌نشینی متحرک و خوشه‌های جای خالی متحرک است. مؤلفه‌ی سوم عیوب آزاد شده از خوشه‌ها به وسیله‌ی تبخیر، $EDF_{v,i}$ است و در دماهای بسیار بالا برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها بسیار حایز اهمیت است. در مجموع، این سه منبع عیوب تکی کسر عیوب مهاجر، کسر عیوب مهاجر بین‌نشین و جای خالی را تشکیل می‌دهند.

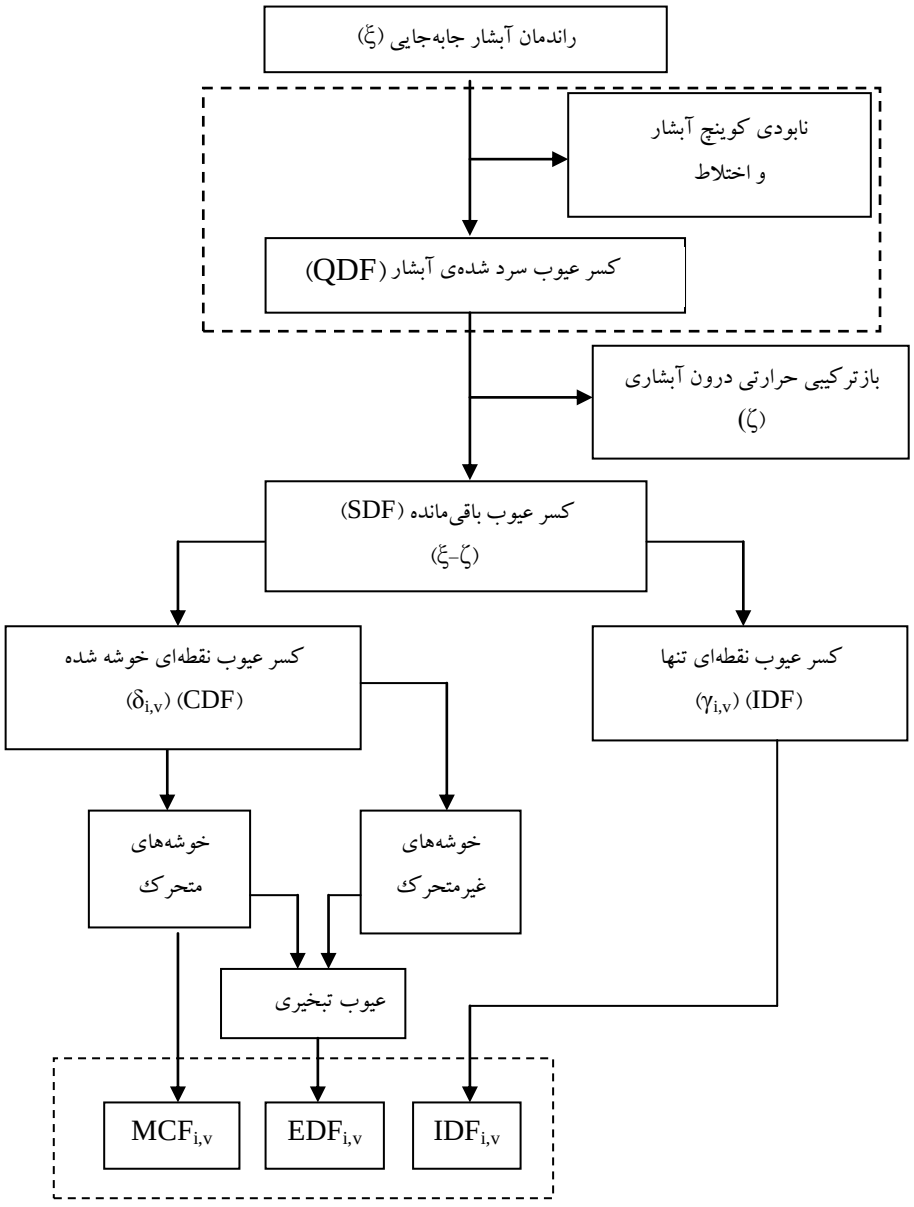
زینکل[1] و سین[2] [۲۱] نموداری را برای نشان دادن سیر تکامل اشکال مختلف عیب طرح‌ریزی کردند (شکل ۷-۵۲) که یک گسترش از مورد بسیار ساده نشان داده شده در شکل ۳-۱۷ است. زینکل و سین آزمایشاتی را انجام دادند که از آن‌ها مقادیر کسر عیوب مهاجر بین‌نشین و جای خالی قابل تعیین بود و دریافتند که در کل $\%۱۰ < MDF_i < \%۳$ و $\%۱۰ < MDF_v < \%۱$ هستندکه درصدها به نرخ تولید NRT محاسبه شده اشاره دارد. درحالی‌که تردیدهای قابل توجهی در خصوص مقادیر کمی استنباط شده از آزمایشات وجود دارد که می‌توان برای محدود کردن کسر عیوب موجود منتظر محدوده‌ای را استفاده کرد.

اهمیت این فرایندها به این صورت است که آن‌ها اغلب در مدل‌های تئوری سرعتیِ سنتی تکامل ریزساختاری بیان نشده‌اند. برای ایجاد مدل فیزیکی دقیق از تولید و انباشتگی عیب تحت شرایط آسیب آبشاری موارد زیر باید در نظرگرفته شود:

۱. تولید همگن کسر بزرگی از عیوب به شکل خوشه‌های جای خالی و بین‌نشینی با باقی‌مانده‌هایی چون جاهای خالی و بین‌نشین‌های تکی،
۲. گرایش برای جذب خوشه‌های بین‌نشینی متحرک و مهاجرت آزادانه‌ی بین‌نشین‌ها در چاهک‌ها،
۳. کسر بین‌نشین‌ها و جاهای خالی در شکل‌های خوشه شده یا تکی لزوماً برابر نیستند، که معادل با تولید نامتقارنی از کسرهای جاهای خالی و بین‌نشین‌هایِ مهاجرت کننده به صورت آزاد است.
۴. تبخیر جای خالی از خوشه‌ها در طول سرد شدن آبشار شکل می‌گیرد که منجر به یک سهمِ وابسته به دما در کسر جاهای خالیِ مهاجرت کننده به صورت آزاد می‌شود.

همان‌طوری که در فصل بعد و در بحث تشکیل حفره و رشد در فصل ۸ دیده خواهد شد، خوشه‌بندی درون آبشاری و پایداری حرارتی خوشه‌های بین‌نشین و جای خالی باعث ایجاد یک بی‌تقارنی در جاهای خالی مهاجر و بین‌نشین‌های موجود می‌شود، که در واقع گرایش تولید نامیده می‌شود و این گرایش یک نیروی محرکه‌ی قوی برای جوانه‌زنی و رشد حلقه‌ها است.

1. Zinkle
2. Singh



شکل ۷-۵۲. نمودار نشان دهنده‌ی اجزای سهیم در کسر عیوب مهاجر از عیوب تکی، خوشه‌های عیوب متحرک و عیوب تبخیری [۱۹].

۷-۶ جوانه زنی و رشد حلقه‌های نابجایی

حلقه‌های نابجایی نتیجه شده از چگالش جای خالی و بین‌نشین از خوشه‌های عیوب مربوطه ایجاد شده‌اند و انقباض یا رشد وابسته به شار عیوب رسیده به جوانه هستند. زمانی که آن‌ها به اندازه‌ی بحرانی می‌رسند، حلقه‌ها پایدار می‌شوند و رشد آن‌ها تا زمانی ادامه می‌یابد که با برهم‌کنش با دیگر حلقه‌ها یا با دانسیته‌ی نابجایی شبکه‌ی بی‌نقص شوند. بخشی که در ادامه آورده شده است فرایند جوانه‌زنی، رشد و بی‌نقص شدن حلقه را توضیح می‌دهد که ریز ساختار نابجایی و فلز تحت پرتودهی را تعیین می‌کند.

۷-۶-۱ جوانه‌زنی حلقه

تلاش‌های زیادی برای تعیین نرخ جوانه‌زنی حلقه‌های نابجایی و حفره‌ها انجام شده است. در ادامه، عملیاتی که بر پایه‌ی غلظت حالت پایدار جاهای خالی و بین‌نشین‌ها است، بحث و فرضیات ترمودینامیک محلول رقیق استفاده می‌شود که به وسیله‌ی راسل[1] و همکارانش توسعه داده شده است[۲۲]. در این عملیات اثرات آبشارها نادیده گرفته شده است. سپس نظریه‌ی خوشه‌ای شدن معرفی خواهد شد و نشان داده می‌شود که چگونه این نظریه به مسئله‌ی جوانه‌زنی حلقه‌ها برای محاسبه‌ی خوشه‌های عیب تشکیل شده است و هم‌چنین عیوب نقطه‌ای اعمال می‌شود.

در ابتدا نرخ جوانه‌زنی خوشه‌ی عیب با اندازه‌ی n در نقش شار خوشه‌های بین دسته اندازه‌های مجاور در فضای فازی از اندازه‌ی خوشه بیان می‌شود. با در نظر گرفتن فقط نوع عیب (برای مثال جاهای خالی)، شار بین دو دسته اندازه‌ی مجاور به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۶۹-۷)

$$J_n = \beta_v(n)\rho(n) - \alpha_v(n+1)\rho(n+1)\,,$$

که در این رابطه $\rho(n)$ و $\rho(n+1)$ تعداد مدارهای nتایی (حلقه‌های حاوی n جای خالی) و مدارهای $(n+1)$ تایی در واحد حجم است. $\beta_v(n)$ نرخ به دام‌اندازی جاهای خالی به وسیله‌ی مدار n، و $\alpha_v(n+1)$ نرخ اتلاف جای خالی به وسیله‌ی مدار $(n+1)$ است. عبارت اول در معادله‌ی ۷-۶۹ یک

1. Russell

افزایش به دسته‌ی اندازه‌ی $n+1$ با به دام‌اندازی جای خالی به وسیله‌ی حفره‌ی دسته‌ی اندازه‌ی مدار n را نشان می‌دهد. عبارت دوم، اتلاف از دسته‌ی اندازه‌ی مدار $n+1$ با نشر یک جای خالی است. شکل ۷-۵۳ فرایندهای مختلف توضیح داده شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۷-۶۹ در فضای فازی را نشان می‌دهد. در حالت پایدار، $J_n = 0$ و معادله‌ی ۷-۶۹ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۷۰-۷)

$$\alpha_v(n+1) = \beta_v(n)\frac{\rho^0(n)}{\rho^0(n+1)} ,$$

که $\rho^0(n)$ غلظت تعادلی حلقه‌های جای خالی مدار n است. با جایگذاری $\alpha_v(n+1)$ از معادله‌ی ۷-۶۹ در عبارت نرخ جوانه‌زنی، معادله‌ی ۷-۷۰ می‌توان نوشت:

(۷۱-۷)

$$\begin{aligned} J_n &= \beta_v(n)\left[\rho(n) - \rho(n+1)\frac{\rho^0(n)}{\rho^0(n+1)}\right] \\ &= -\beta_v(n)\rho^0(n)\left[\frac{\rho(n+1)}{\rho^0(n+1)} - \frac{\rho(n)}{\rho^0(n)}\right] , \end{aligned}$$

و عبارت داخل براکت مشتقِ نسبت $\frac{\rho(n)}{\rho^0(n)}$ یا $\frac{\partial\left[\frac{\rho(n)}{\rho^0(n)}\right]}{\partial n}$ است. در نتیجه نرخ جوانه‌زنی برابر است با:

(۷۲-۷)

$$J_n = -\beta_v(n)\rho^0(n)\frac{\partial\left[\rho(n)/\rho^0(n)\right]}{\partial n} ,$$

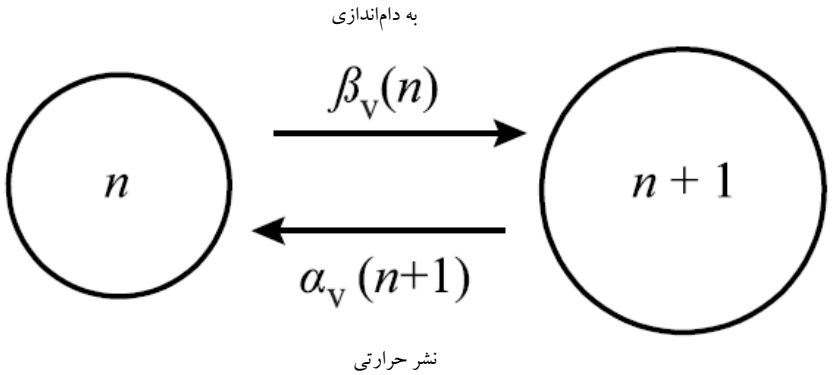
که

(۷۳-۷)

$$\rho^0(n) = N_0 \exp(-\Delta G_n^0/kT) ,$$

و N_0 تعداد موقعیت‌های جوانه‌زنی در واحد حجم و ΔG_n^0 انرژی آزاد تشکیل حلقه‌ی جای خالی مدار n است.

نرخ جوانه‌زنی حالت پایدار حلقه‌های جای خالی (شامل k جای خالی) می‌تواند به صورت حاصل‌ضرب غلظت حلقه‌ها، بسامد پرش جای خالی به حلقه‌ها و فاصله‌ی پرش توضیح داده شود و به صورت رابطه‌ی زیر نوشته می‌شود:



شکل ۷-۵۳. تشریح فرایند به دام‌اندازی و نشر حاکم بر شار خوشه‌ها بین دسته اندازه‌های مجاور در فضای فازیِ اندازه‌ی خوشه.

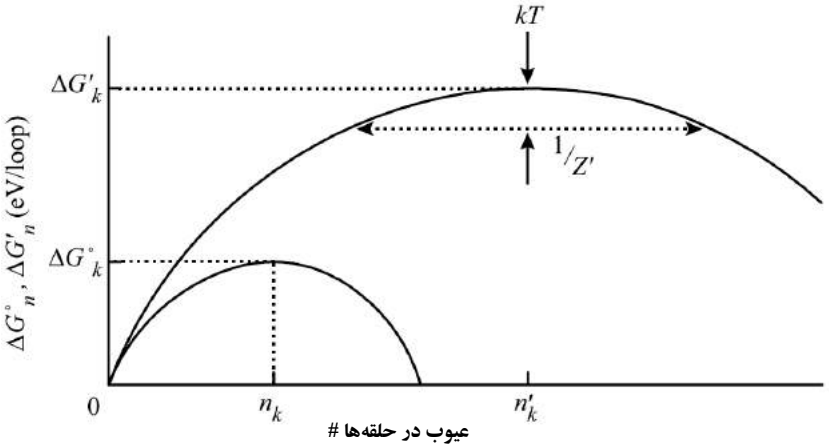
$$J_k = \rho_k^0 \beta_k Z \,, \tag{۷۴-۷}$$

که ρ_k^0 و β_k مقادیر $\rho^0(n)$ و $\beta_v(n)$ در اندازه‌ی بحرانی، k، هستند و Z ضریب زلدویچ[1] است که وابسته به انحنای ΔG_n^0 نزدیک به بیشینه در اندازه‌ی بحرانی است. اگر ΔG_n^0 در این ناحیه به صورت سهمی تخمین‌زده شود (انحنای کم‌تر در شکل ۷-۵۴)، در نتیجه:

$$Z = \left[-\frac{1}{2\pi kT} \frac{\partial^2 \Delta G_n^0}{\partial n^2} \right]_{n_k}^{1/2} , \tag{۷۵-۷}$$

1. Zeldovich factor

که مشتق در اندازه‌ی حلقه‌ی بحرانی، n_k، مورد ارزیابی قرار گرفته است. مقدار آن پهنای ΔG_k^0 در واحدهای kT زیر نقطه‌ی بیشینه است و در حدود ۰٫۰۵ است.



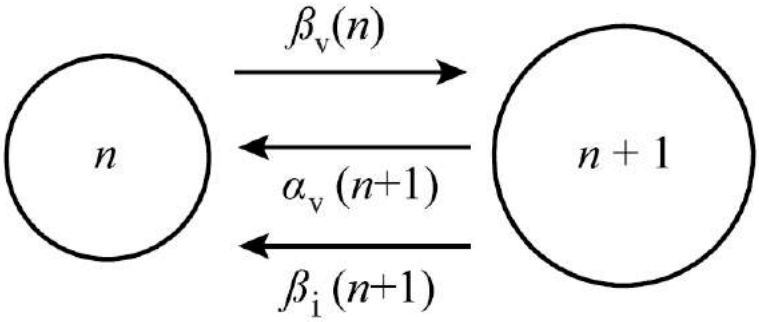
شکل ۷-۵۴. شماتیک منحنی‌های جوانه‌زنی عوامل مختلفی را که در جوانه زنی خوشه مهم هستند نشان می‌دهد. اگر بین‌نشین‌ها وجود نداشته باشند، ΔG_k^0 سد فعال‌سازی جوانه‌زنی است درحالی‌که است اگر بین‌نشین‌ها در طول فرایند جوانه‌زنی حضور داشته باشند $\Delta G_k^{'}$ کمیت مشابه است[۲۲].

اکنون حضور بین‌نشین‌ها در فرمول‌بندی جوانه‌زنی حلقه‌ی جای خالی بررسی می‌شود. شار بین هر دو دسته‌ی اندازه، مثلاً n و $n+1$، برابر است با:

(۷۶-۷)

$$J_n = \beta_v(n)\rho(n) - \alpha_v(n+1)\rho(n+1) - \beta_i(n+1)\rho(n+1)\,,$$

که تمام عبارت‌ها قبلاً تعریف شده‌اند و $\beta_v(n+1)$ نرخ به دام‌اندازی بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی مدار $n+1$ است. نشر بین‌نشین‌ها احتمال پایینی دارد و نادیده گرفته می‌شود. شکل ۷-۵۵ فرایندهای مختلف توصیف شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۷-۷۶ در فضای فازی را نشان می‌دهد.



شکل ۷-۵۵. تصویری از فرایندهای به دام‌اندازی و نشر حاکم بر شار خوشه‌ها بین دسته‌ی اندازه‌های مجاور در فضای فازیِ اندازه‌ی خوشه و دربرگیرنده‌ی اثر به دام‌اندازی بین‌نشین‌ها.

نرخ نشر جای خالی از حلقه‌ی جای خالی به وسیله‌ی دما، اندازه و انرژی‌های شبکه تأثیر می‌پذیرد. از آن‌جایی که کسر عیوب بالاتر از $۱۰^{-۴}$ است، خوشه‌ی عیب را فقط در کسر کوچکی از زمان در مجاورتش دارد. احتمال نشر در طول این بازه‌ی زمانی باید به آرامی و نه طور دیگری تأثیر بپذیرد. بنابراین نتیجه گرفته می‌شود که α_v یک مشخصه‌ی مقداری از یک سیستم بدون بین‌نشین‌ها است. با قرار دادن $J = 0$ در معادله‌ی ۷-۷۶، دسته اندازه‌های تعادلی حاصل می‌شود زیرا هیچ‌گونه شار خالصی بین دسته‌های اندازه وجود ندارد. اگر بین‌نشین‌ها نادیده گرفته شود در نتیجه معادله‌ی ۷-۷۶ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۷۷-۷)

$$\alpha_v(n+1) = \frac{\beta_v(n)\rho^0(n)}{\rho^0(n+1)} .$$

با ترکیب معادله‌های ۷-۷۶ و ۷-۷۷ می‌توان نوشت:

(۷۸-۷)

$$J_n = \beta_v(n)\left\{\rho(n) - \rho(n+1)\left[\frac{\rho^0(n)}{\rho^0(n+1)} + \frac{\beta_i(n+1)}{\beta_v(n)}\right]\right\} .$$

از آن‌جایی که $\rho^0(n) = N_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_n^0}{kT}\right)$ در نتیجه می‌توان نوشت:

(۷۹-۷)

$$\frac{\rho^0(n)}{\rho^0(n+1)} = \exp\left(\frac{\delta G_n^0}{kT}\right),$$

که $\delta G_n^0 \equiv \Delta G_{n+1}^0 - \Delta G_n^0$ است. عبارت δG_n^0 تفاوت بین انرژی‌های آزاد ایجاد حلقه‌های j + 1 و j جای خالی از جاهای خالی تکی در فوق اشباع متداول است. اکنون تابع جدیدی از n، $\rho'(n)$ و $\delta G_n'$ به گونه‌ای با معادله‌ی ۷-۷۹ مقایسه و تعریف می‌شود:

(۸۰-۷)

$$\frac{\rho'(n)}{\rho'(n+1)} = \frac{\rho^0(n)}{\rho^0(n+1)} + \frac{\beta_i(n+1)}{\beta_i(n)} = \exp(\delta G_n'/kT),$$

که

(۸۱-۷)

$$\delta G_n' = \Delta G_{n+1}' - \Delta G_n',$$

و $\Delta G_n'$ به علت عبارت $\frac{\beta_i(n+1)}{\beta_i(n)}$ در معادله‌ی ۷-۸۱ در اصل انرژی آزاد نیست. با استفاده از بیان موجود در معادله‌ی ۷-۸۱، می‌توان با استفاده از جایگذاری معادله‌ی ۷-۸۰ در معادله‌ی ۷-۷۸ رابطه‌ای را برای J_n برحسب $\frac{\rho'(n)}{\rho'(n+1)}$ بازنویسی کرد:

(۸۲-۷)

$$J_n = \beta_v(n)\left\{\rho(n) - \rho(n+1)\frac{\rho'(n)}{\rho'(n+1)}\right\}.$$

باز آرایشی معادله‌ی ۷-۸۲ برابر است با:

(۷-۸۳)

$$J_n = -\beta_v(n)\rho'(n)\frac{\rho(n+1)}{\rho'(n+1)} - \left[\frac{\rho(n)}{\rho'(n)}\right] ,$$

و لازم به ذکر است که:

(۷-۸۴)

$$\frac{\left[\frac{\rho(n+1)}{\rho'(n+1)} - \frac{\rho(n)}{\rho'(n)}\right]}{\Delta n} = \frac{\partial\left(\frac{\rho(n)}{\rho'(n)}\right)}{\partial n} ,$$

که نتیجه می‌دهد:

(۷-۸۵)

$$J_n = -\beta_v(n)\rho'(n)\frac{\partial\left[\rho(n)/\rho'(n)\right]}{\partial n} ,$$

که معادله‌ی اصلی شار است. با بازآرایشی معادله‌ی ۷-۸۵ با گرفتن لگاریتم طبیعی از هر دو طرف و جمع از $j = 0$ تا $n-1$ نتیجه می شود که:

(۷-۸۶)

$$\sum_{j=0}^{n-1} \ln\left(\frac{\rho'(j)}{\rho'(j+1)}\right) = \sum_{j=0}^{n-1}\left\{-\ln\left[\frac{\beta_i(j+1)}{\beta_v(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT}\right)\right]\right\} ,$$

و

(۷-۸۷)

$$\ln\left(\frac{\rho'(n)}{\rho'(0)}\right) = \sum_{j=0}^{n-1}\left\{-\ln\left[\frac{\beta_i(j+1)}{\beta_v(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT}\right)\right]\right\} .$$

می‌توان هر دو شرط مرزی را تعیین کرد. اولی کمیت $\rho'(n)$ است که می‌تواند به این صورت مورد ارزیابی قرار گیرد که هم‌چنان که $\frac{\beta_i(n)}{\beta_v(n)} \to 0$ میل می‌کند، $\rho'(0) = \rho^0(0)$ است و آن‌که $\rho^0(0) \to N_0$ به سادگی تعداد موقعیت‌های جوانه‌زنی در واحد حجم را نشان می‌دهد و از آن‌جایی که N_0 (و از آن‌رو $\rho'(0)$) مستقل از غلظت حفره‌ها هستند می‌توان نوشت:

(۸۸-۷)

$$\ln\left(\frac{\rho'(n)}{\rho'(0)}\right) = \sum_{j=0}^{n-1}\left\{-\ln\left[\frac{\beta_i(j+1)}{\beta_v(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT}\right)\right]\right\} = \frac{-\Delta G_n'}{kT},$$

و

(۸۹-۷)

$$\Delta G_n' = kT\sum_{j=0}^{n-1}\ln\left[\frac{\beta_i(j+1)}{\beta_v(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT}\right)\right].$$

از آن‌جایی که $\frac{\beta_i(n)}{\beta_v(n)} \to 0$ میل می‌کند، $\rho'(0) = \rho^0(0)$ میل خواهد کرد و $\rho^0(0)$ دقیقاً برابر با N_0، تعداد موقعیت‌های جوانه‌زنی در واحد حجم است، در نتیجه می‌توان نوشت:

(۹۰-۷)

$$\rho'(n) = N_0\exp\left(\frac{-\Delta G_n'}{kT}\right),$$

و ΔG_n^0 سد فعال‌سازی بدون بین‌نشین‌ها و $\Delta G_n'$ سد فعال‌سازی با بین‌نشین‌ها است.

منحنی بالایی در شکل ۷-۵۴، $\Delta G_n'$ را به صورت تابعی از n نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که $\Delta G_n'$ از ΔG_k^0 بزرگ‌تر است و به علت اثر ممانعت کنندگی بین‌نشین‌ها روی فرایند جوانه‌زنی حلقه، یک اندازه حلقه‌ی بزرگ‌تری را نیاز دارد. بیشینه در دو منحنی در n_k، ΔG_k^0 و n_k'، $\Delta G_k'$ رخ

می‌دهد. هم اکنون نرخ جوانه‌زنی حلقه حالت پایدار از عبارت J_n در معادله‌ی ۷-۵۸ قابل محاسبه است:

(۹۱-۷)

$$J_k = Z'\beta_k\rho'_k ,$$

که نرخی است که در آن حلقه‌ها از روی سد پتانسیلی به ارتفاع $\Delta G'_k$ در واحدهایی از حلقه در سانتی‌متر مکعب در ثانیه ($\mathrm{loops/cm^3 s}$) عبور می‌نمایند. عبارت β_k، نرخ برخورد جای خالی تنها روی حلقه با اندازه‌ی n'_k است. عبارت Z' برابر است با:

(۹۲-۷)

$$Z' = \left[-\frac{1}{2\pi kT}\frac{\partial^2 \Delta G'_n}{\partial n^2}\right]^{1/2}_{n'_k} .$$

زیرنویس‌ها مشخص می‌کند که مشتق دوم در $n = n'_k$ ارزیابی می‌شود. همانند Z در معادله‌ی ۷-۷۵، مقدار آن برابر با پهنای $\Delta G'_k$ در واحدهای kT کوچک‌تر از بیشینه و در حدود ۰٫۰۵ است. مشتق دوم محاسبه شده از معادله‌ی ۷-۶۹ برابر است با:

(۹۳-۷)

$$\frac{1}{kT}\left(\frac{\partial^2 \Delta G'_n}{\partial n^2}\right)_{n'_k} = \left\{\left[\frac{1}{kT}\frac{\partial^2 \Delta G^0_n}{\partial n^2}\right]\left[\exp\left(\frac{1}{kT}\frac{\partial \Delta G^0}{\partial n}\right)\right]\right\}_{n'_k} ,$$

و:

(۹۴-۷)

$$\rho'_k = N_0 \exp\left(-\Delta G'_k / kT\right) ,$$

که $\Delta G'_k$ به وسیله‌ی ارزیابی معادله‌ی ۷-۸۹ در n'_k به‌دست می‌آید.

نرخ جوانه‌زنی حالت پایدار سریعاً بعد از تغییر ناگهانی در فوق اشباع یا دما برقرار نخواهد شد، و تأخیری دارد که برابر با یک زمان مشخصه، τ، که در معنای زمان تولید و تکثیر[1] شناخته می‌شود و با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود [۲۲]:

(۹۵-۷)

$$\tau = 2(\beta_k Z'^2)^{-1} .$$

معادله‌های ۷-۸۹ و ۷-۹۴ برای جوانه‌زنی حلقه‌ی بین‌نشینی نیز اعمال می‌شود بجز این که Z'، β_k و ρ'_k برای حلقه‌های بین‌نشینی از حلقه‌های جای خالی تا اندازه‌ای بیش‌تر هستند و $\Delta G'_n$ برای حلقه‌های بین‌نشینی برابر است با:

(۹۶-۷)

$$\Delta G'_n = kT \sum_{j=0}^{n-1} \ln \left[\frac{\beta_v(j+1)}{\beta_i(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT} \right) \right] ,$$

که در این‌جا δG_j^0 تفاوت بین انرژی‌های آزاد تشکیل دهنده‌ی حلقه‌های نابجاییِ $j+1$ و j بین‌نشین (در غیاب جاهای خالی) است، β_k نرخ ناخالص به دام‌اندازی بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی حلقه‌ای با اندازه‌ی بحرانی است و $1/Z'$ پهنای $\Delta G'_n$ (برای بین‌نشین‌ها) در فاصله‌ی kT کم‌تر از بیشینه در $\Delta G'_k$ است و تعداد خالص بین‌نشین‌ها در هسته‌های بحرانی به وسیله‌ی n'_k نشان داده می‌شود. اندازه‌ی حلقه‌ی بحرانی، n'_k در بیشینه‌ی $\Delta G'_n$ رخ می‌دهد و با حل رابطه‌ی $\frac{\partial \Delta G'_n}{\partial n} = 0$ برای n'_k تعیین می‌شود.

اکثر بررسی‌های اخیرِ نرخ جوانه‌زنی، تمام شارها در معادله‌ی ۷-۶۹ را برابر با شار حالت پایدار، J_{ss} در نظر گرفته‌اند که منجر به یک‌سری از معادلات به صورت زیر شده است:

1. Incubation time

$$J_1 = \beta_v(1)\rho(1) - \alpha(2)\rho(2) = J_{ss} \quad (۹۷-۷)$$

$$J_2 = \beta_v(2)\rho(2) - \alpha(3)\rho(3) = J_{ss} \quad (۹۸-۷)$$

$$J_3 = \beta_v(3)\rho(3) - \alpha(4)\rho(4) = J_{ss} \quad (۹۹-۷)$$

$$\vdots$$

$$J_{n-1} = \beta_v(n-1)\rho(n-1) - \alpha(n)\rho(n) \quad (۱۰۰-۷)$$

که $n = n_v^{max}$ است. با در نظر گرفتن نسبت انقباض به رشد، $\frac{\alpha_k}{\beta_v^k} = r_k$ برای تمام $k \leq ۲$، و در نظر گرفتن $r_1 = 1$، سیستم معادلات می‌تواند با ضرب معادلات J_k در تمام r_kهای با $k \leq i$ حل شود. بنابراین معادله‌ی ۷-۹۸ در r_2 ضرب می‌شود، معادله‌ی ۷-۹۹ در r_2 و r_3 ضرب می‌شوند و به همین ترتیب این عملیات برای دیگر معادلات نیز انجام می‌شود. اگر نتایج تمام معادلات جمع شود، تمام r_kها بجز r_1 و r_n برای به‌دست آوردن رابطه‌ی زیر حذف می‌شوند:

$$J_1 = J_{ss} = \frac{\beta_v(1)\rho(1) - \alpha(n)\rho(n)\prod_{j=2}^{n-1} r_j}{1 + \sum_{k=2}^{n-1}\prod_{j=2}^{k} r_j}. \quad (۱۰۱-۷)$$

عبارت ضرب در صورت کسر با ذکر آن‌که (۱) برای مسئله‌ی جوانه‌زنی، غلظت عیب تکی، $\rho(1)$ از $\rho(n)$ بیش‌تر است و (۲) نسبت عبارات انقباض به رشد r_j برای $n > n_v^*$ کم‌تر از واحد است، حذف می‌شود. بنابراین معادله‌ی ۷-۱۰۱ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$J_{ss} = \beta_v(1)\rho(1)\left[1 + \sum_{k=2}^{n-1}\prod_{j=2}^{k} r_j\right]^{-1}. \quad (۱۰۲-۷)$$

مزیت این روش برای محاسبه‌ی J_{ss} حذف ضریب زلدویچ و فرضیاتی است که برای محاسبه‌ی آن باید ایجاد شوند.

راسل [۲۲] تعیین کرد که براساس ضرایب ثابت جای خالی و بین‌نشینی و فوق اشباع‌های احتمالی آن‌ها در جامد تحت پرتودهی، جوانه‌زنی حلقه‌ی بین‌نشینی نسبت به جوانه‌زنی حلقه‌ی جای خالی آسان‌تر است، زیرا جوانه‌زنی حلقه‌ی بین‌نشینی به احاطه‌ی جای خالی حساس است درحالی‌که جوانه‌زنی حلقه‌ی جای خالی به احاطه‌ی بین‌نشینی کم‌تر حساس است. دلیل اول این است که انتظار می‌رود که S_i در طول پرتودهی به علت غلظت‌های تعادلی بسیار پایین بین‌نشین‌ها، چندین برابر بزرگ‌تر از S_v باشد. با وجود این مشخص شده است که جوانه‌زنی با این سازوکار هم برای حلقه‌های جای خالی و هم برای بین‌نشین‌ها، برخلاف مشاهدات رشد حلقه‌ی پایدار بعد از مقادیر مجاز پرتوگیری نسبتاً پایین سخت است.

۷-۶-۲ نظریه‌ی خوشه‌ای شدن

جوانه‌زنی حلقه‌ها در اصل یک فرایند خوشه‌ای شدن است که در آن تعداد کافی از نوع عیب در حضور عیوب دیگر برای ایجاد خوشه لازم است. این تعداد کافی از عیوب نطفه[1] با اندازه‌ی بحرانی را تشکیل می‌دهند که می‌تواند باقی‌مانده و سپس رشد کند. خوشه‌ی وابسته به نرخ خالص چگالش عیوب روی خوشه‌ها می‌تواند کوچک شده یا رشد کند. توضیحات کلی رفتار خوشه در فضای فازی در انتهای فصل ارایه خواهد شد و برای مثال با در نظر گرفتن حلقه‌ی جای خالی، خوشه‌های جای خالی، ν_j در برگیرنده‌ی j جای خالی مطابق روابط زیر کوچک شده یا رشد می‌کنند:

(۱۰۳-۷)

$$\frac{d\nu_j}{dt} = K_{0j} - \sum_{n-1}^{\infty}[\beta_{\nu_n}(j) + \beta_{i_n}(j)]\nu_j - \sum_{n=1}^{j}\alpha_{\nu_n}(j)\nu_j + \sum_{n=1}^{j-1}\beta_{\nu_n}(j-n)\nu_{j-n} + \sum_{n=1}^{\infty}\beta_{i_n}(j-n)\nu_{j+n} + \sum_{n=1}^{\infty}\alpha_{\nu_n}(j+n)\nu_{j+n} + \text{عبارت‌های اتلاف اضافه}$$

1. Embryo

که β_{v_n} و β_{i_n} نرخ‌های به دام‌اندازی خوشه‌های عیوب مهاجر v_n یا i_n به وسیله‌ی یک خوشه‌ی v_j اندازه هستند و α_{v_n} نرخ انحلال نشری یا حرارتی متناظر است. عبارت اول در سمت راست، تولید مستقیم خوشه‌های j اندازه است. عبارت دوم، اتلاف خوشه‌ها از دسته اندازه‌ی j به علت جذب یک جای خالی یا یک خوشه‌ی بین‌نشینی n اندازه است که $1 \approx n \approx \infty$ است. عبارت سوم، اتلاف خوشه‌ها از دسته اندازه‌ی j به علت نشر خوشه‌های جای خالی n اندازه است. عبارت‌های چهارم و پنجم، خوشه‌های اضافه شده به دسته اندازه‌ی j ناشی از جذب خوشه‌های جای خالی به وسیله‌ی دسته‌های کوچک اندازه و جذب خوشه‌های بین‌نشین به وسیله‌ی دسته‌های بزرگ اندازه هستند. عبارت ششم، خوشه‌های اضافه شده به دسته اندازه‌ی j به وسیله‌ی اتلاف خوشه‌های جای خالی از دسته‌های بزرگ اندازه هستند و عبارات اتلاف اضافی به دیگر سازوکار ها اجازه می‌دهد که در تعداد خوشه‌ها در دسته اندازه‌ی j سهیم باشند.

معادله‌ی ۷-۱۰۳ به صورت آماری بدون ساده‌سازی بیش‌تر قابل حل است. لیکن برای خوشه‌های بزرگ‌تر و زمان‌های پرتودهی بالاتر، تعداد معادلات مورد نیاز ممکن است که بی‌نهایت زیاد باشد. یک ساده‌سازی کلی برای رشد یا انقباض خوشه‌ها فقط با اضافه شدن یا اتلاف یک عیب نقطه‌ای تکی عبارت زیر را نتیجه می‌دهد:

$$\frac{\mathrm{d}v_j(t)}{\mathrm{d}t} = K_{0j} + \beta(j-1,j)v_{j-1}(t) + \alpha(j+1,j)v_{j+1}(t) - [\beta(j,j+1) + \alpha(j,j-1)]v_j(t)\,, \quad j \geq 2\,. \tag{۷-۱۰۴}$$

اگر فرض شود که j یک متغیر پیوسته باشد و بسط تیلوری در معادله‌ی ۷-۱۰۴ برای ارتباط همه‌ی توابع به مقادیرشان در j اندازه مورد استفاده قرار گیرد، توضیح ساده شده، تقریب نفوذی پیوسته در فضای اندازه است که در معنای معادله‌ی فوکر ـ پلانک[1] شناخته می‌شود:

$$\frac{\partial v_j(t)}{\partial t} = K_{0j}(t) - \frac{\partial}{\partial j}\left\{v_j(t)\left[\beta(j,j+1) - \alpha(j,j-1)\right]\right\} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial j^2}\left\{v_j(t)[\beta(j,j-1) + \alpha(j,j+1)]\right\}\,, \tag{۷-۱۰۵}$$

1. Fokker–Planck

که به صورت زیر ساده می‌شود:

$$\frac{\partial \nu_j(t)}{\partial t} = K_{0j}(t) - \frac{\partial}{\partial j} F_{\nu_j} \nu_j(t) + \frac{\partial^2}{\partial j^2} D_{\nu_j} \nu_j(t) \qquad (۱۰۶-۷)$$
$$= K_{0j}(t) - \frac{\partial}{\partial j}\left(F_{\nu_j} \nu_j(t) - \frac{\partial}{\partial j} D_{\nu_j} \nu_j(t) \right) .$$

عبارت اول در سمت راستِ معادله‌ی ۷-۱۰۶، نرخ تولید مستقیم خوشه‌های jاندازه است. عبارت دوم، رانش[1] در فضایِ اندازه‌ی تحریک شده با چگالش اضافی یک نوع عیب نقطه‌ای روی دیگری است:

$$F_{\nu_j} = (z_\nu D_\nu C_\nu - z_i D_i C_i) \qquad (۱۰۷-۷)$$

عبارت رانش، مسئول انتقال توزیع اندازه‌ی خوشه به اندازه‌های بزرگ‌تر است. عبارت رانش تضمین می‌کند که خوشه‌ی بزرگ‌تر به ناچار در میدان تابشی رشد می‌کند؛ اما به علت ریز ساختار کامل سهم رانش با دوز ثابت نیست. تکامل خوشه‌ها هم‌چنین به نسبت غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها بسیار حساس است، زیرا F_ν دربرگیرنده‌ی تفاوت در سهم‌های آن‌ها است و می‌تواند علامت را تغییر دهد. در نتیجه علامت F_ν وابسته به ریزساختار کلی است.

عبارت سوم، نفوذ در فضای اندازه است و $D_{\nu j}$ ضریب نفوذ افزایشی تابشی است که به صورت زیر مشخص می‌شود:

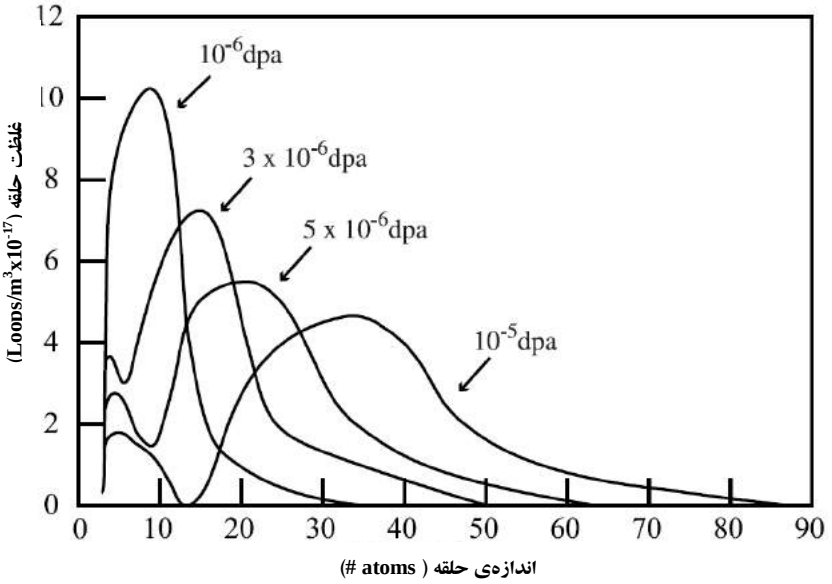
$$D_{\nu_j} = 1/2(z_\nu D_\nu C_\nu + z_i D_i C_i) . \qquad (۱۰۸-۷)$$

عبارت نفوذی باعث می‌شود که توزیع اندازه‌ی خوشه با مقدار مجاز پرتوگیری گسترده‌تر شود. عبارت نفوذی به علت این امر محاسبه می‌شود که ممکن است که دو خوشه معرفی شده در یک زمان و یک اندازه، به علت برخوردهای تصادفی با عیوب نقطه‌ای در زمان‌های بعدی تغییر اندازه دهند.

1. Drift

الگوریتم‌هایی برای حل تقریبی معادله‌ی ۷-۱۰۶ به وسیله‌ی گالبو[1] و همکارانش بحث شده است [۲۴]. شکل‌هایی از معادله‌ی فوکر ـ پلانک در شکل ۷-۵۶ برای افزایش توزیع اندازه‌ی حلقه‌ی بین‌نشینی برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ با دانسیته‌ی نابجایی $۱۰^{۱۳}m^{-2}$ که در دمای $۵۵۰^{o}C$ در نرخ مقدار مجاز $۱۰^{-۶}$ dpa/s پرتودهی شده، نشان داده شده است.

لازم به ذکر است که با افزایش مقدار مجاز، اندازه‌ی حلقه‌ی میانگین افزایش می‌یابد (عبارت رانش در معادله‌ی ۷-۱۰۶) و توزیع اندازه‌ی پهن‌تر می‌شود (عبارت نفوذی در معادله‌ی ۷-۱۰۶). هم‌چنان که خوشه‌های کوچک رشد می‌کنند و هندسه‌ی آن‌ها تغییر می‌یابد، در نتیجه راندمان آن‌ها برای عیوب مهاجرت کننده به صورت آزاد نیز تغییر می‌یابد. از آن‌جایی که تولید عیوب و رشد خوشه وابسته به ریزساختار است، برای اندازه‌ی خوشه‌های بسیار بزرگ معادله‌ی فوکر ـ پلانک بسیار ساده است. اثر ریزساختار آسیب در تکامل خوشه‌های عیب باید برای پیش‌بینی دقیق رفتار آن‌ها محاسبه شود.



شکل ۷-۵۶. گسترش توزیع اندازه‌ی حلقه‌ی بین‌نشینی با مقدار مجاز پرتوگیری در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده در نرخ مقدار مجاز $۱۰^{-۶}$dpa/s و دمای $۵۵۰^{o}C$ با $\rho_d = ۱۰^{۱۳}\ m^{-2}$ [۲۵].

1. Golubov

۷-۶-۳ گرایش تولید ـ تحریک جوانه‌زنی خوشه

همان‌طوری که در فصل ۳ و در قسمت‌های ۷-۳ و ۷-۴ این فصل توضیح داده شد، کسر قابل توجهی از عیوب نقطه‌ای تولید شده تحت آسیب آبشاری تابشی به صورت جای خالی‌های متحرک و غیرمتحرک و خوشه‌های بین‌نشینی هستند به گونه‌ای که بین‌نشین‌های مهاجرت کننده به صورت آزاد و جای خالی‌ها در تعداد نابرابری تولید می‌شوند. این منجر به یک تصور کلی از گرایش تولید در نقش نیروی محرکه‌ی اصلی برای تکامل ریزساختاری آبشارهای تابشی می‌شود و بر پایه‌ی این اصل بنا شده است که عیوب در خوشه‌ها به منزله‌ی عیوب مهاجرت کننده به صورت آزاد رفتار نمی‌کنند. در حقیقت، همان‌طوری که خواهیم دید، خوشه‌های بین‌نشینی می‌توانند متحرک باشند و لغزش‌های یک‌بعدی و سه‌بعدی را نشان دهند. در بعضی از موارد خوشه‌ها تا اندازه‌های بسیار بزرگ متحرک باقی می‌مانند، اگرچه در کل با افزایش اندازه تمایلی به سمت حالت ثابت وجود دارد. این تصویر از تشکیل عیب یک بی‌تقارنی یا گرایش در تولید عیوب نقطه‌ای مهاجرت کننده به صورت آزاد تحت شرایط آسیبِ آبشاریِ ناشی از دو منبع را توصیف می‌کند: (۱) تفاوت در نسبت جاهای خالی و بین‌نشین‌هایی که در خوشه‌های اولیه انباشته شده‌اند، و (۲) تفاوت در پایداری حرارتی و تحرک خوشه‌های جای خالی و بین‌نشین‌ها. تحت شرایط آبشاری، علاوه بر ماهیت احتمالاتی پرش عیوب نقطه‌ای، تولید تصادفیِ (در فضا و زمان) خوشه‌ها نیز نوساناتی را در شارهای عیوب نقطه‌ای به چاهک‌ها به وجود می‌آورد. مدل گرایش تولید[1] (PBM) یک چهارچوبی برای در نظر گرفتن این پیچیدگی اضافی در تکامل ریزساختاری، تحت پرتودهی است.

سمنو[2] و وو[3] [۲۶] عملیات فوکر ـ پلانک حرکت‌های خوشه‌ای نشان داده شده در قسمت قبل را برای تولید یک توصیف اصلاح شده از نرخ جوانه‌زنی حلقه استفاده می‌کنندکه اثر تولید خوشه‌ی بین‌نشینی کوچک در آبشار برخوردی تولید شده به صورت تصادفی در زمان و فضا را دربر می‌گیرد. این محققین در نظر گرفتند که خوشه‌های بین‌نشینی کوچک و غیرمتحرک به صورت پیوسته در آبشارهای برخوردی تولید می‌شوند و آن‌که این خوشه‌ها می‌توانند به‌منزله‌ی حلقه‌های نابجایی کوچک بررسی شوند. دانسیته‌ی احتمالِ، P، این‌که یک خوشه‌ی بین‌نشینی با اندازه‌ی n_0 بین‌نشین در زمان t_0، به اندازه‌ی n بین‌نشین در زمان t رشد کند، برابر است با:

1. Production Bias Model
2. Semenov
3. Woo

(۱۰۹-۷)

$$\frac{\partial P_{\mathrm{i}}(n,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial n}\left(F_{\mathrm{i}}(n) - \frac{\partial}{\partial n}D_{\mathrm{i}}(n)\right)P_{\mathrm{i}}\ ,$$

که عبارت نفوذ، $D_{\mathrm{i}}(n)$ انتشار توزیع اندازه‌ی حلقه‌های بین‌نشینی در زمان به علت نوسانات تصادفی در شارهای عیب نقطه‌ای خوشه شده و تکی را توصیف می‌کند که برابر است با:

(۱۱۰-۷)

$$D_{\mathrm{i}}(n) = D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{s}}(n) + D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{cl}}(n)\ ,$$

که بالانویس‌های s و cl به ترتیب به عیوب تکی و خوشه‌ها اشاره می‌کند، و:

(۱۱۱-۷)

$$D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{s}}(n) = \left(\frac{\pi n}{\Omega b}\right)^{1/2}\left(z_{\mathrm{v}}D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{i}}D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}\right)\ ,$$

(۱۱۲-۷)

$$D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{cl}} = \frac{N_{\mathrm{d}}K_0 n}{4b}\left(z_{\mathrm{v}}^2\frac{\langle N_{\mathrm{dv}}^2\rangle}{k_{\mathrm{v}}N_{\mathrm{d}}^2} + z_{\mathrm{i}}^2\frac{\langle N_{\mathrm{di}}^2\rangle}{k_{\mathrm{i}}N_{\mathrm{d}}^2}\right)\ .$$

که K_0 نرخ تولید مؤثر عیب نقطه‌ای (خوشه‌ای و آزاد)، N_{d} تعداد میانگین عیوب نقطه‌ای تولید شده در آبشار است و $N_{\mathrm{dv,i}}^2>$میانگینِ مربع مقدار عیوب است، $k_{\mathrm{v,i}}^2$ شدت کلی چاهک‌ها برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها، z_{vi} ضرایب گرایش برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها و b بزرگی بردار برگرز هستند.

عبارت رانش دو مؤلفه دارد، $F_{\mathrm{i}}^{\mathrm{s}}(n)$ و $\mathrm{F}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{c}}(n)$.

(۱۱۳-۷)

$$F_{\mathrm{i}}^{\mathrm{s}}(n) = \frac{2\pi r_{\mathrm{i}}(n)}{\Omega}\left(z_{\mathrm{i}}D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}}\right)\ ,$$

که معادله‌ی ۷-۱۱۳ عبارتی است که نرخ رشد حلقه‌ها را نشان می‌دهد و شعاع حلقه برابر با $r_{\mathrm{i}}=(\frac{ni\Omega}{\pi b})^{\frac{1}{2}}$ است و $C_{\mathrm{i,v}}$ و $D_{\mathrm{i,v}}$ به ترتیب غلظت میانگین و ضریب نفوذ عیوب هستند.

$$F_{\mathrm{i}}^{\mathrm{c}}(n)=\frac{2\pi r_{\mathrm{i}}(n)}{\Omega}\int_{n_0}^{n}xf_{\mathrm{il}}(x,t)W(x,n)\,\mathrm{d}x\,, \tag{۱۱۴-۷}$$

و این عبارت نرخ تغییر در اندازه‌ی حلقه به علت جذب حلقه‌های بین‌نشینی کوچک‌تر به وسیله‌ی ترکیب و آمیزش است. تابع $f_{\mathrm{il}}(n,t)$ توزیع حلقه‌های بین‌نشینی است که مرتبط با دانسیته‌ی کل تعداد حلقه، $N_{\mathrm{il}}(t)$ است:

$$N_{\mathrm{il}}(t)=\int_{n_{\min}}^{n_{\max}}f_{\mathrm{il}}(n,t)\,\mathrm{d}n\,, \tag{۱۱۵-۷}$$

و $n_{\min}$ اندازه‌ی خوشه‌های بین‌نشینی است که در آن بین‌نشین‌ها متحرک هستند و $n_{\max}$ اندازه‌ای است که در آن بین‌نشین‌ها به شبکه متصل می‌شوند. عبارت $W(n',n)$ به هم پیوستگی میان حلقه‌هایی با اندازه n' و n ($n'<n$) را توصیف می‌کند:

$$W(n',n)=\frac{4r_{\mathrm{i}}(n')}{\lambda_{\mathrm{d}}}\left[D_{\ell}(n)+\left(D_{\ell}^{2}(n)+\frac{v_{\ell}^{2}(n)\lambda_{\mathrm{d}}^{2}}{4}\right)^{1/2}\right]\,, \tag{۱۱۶-۷}$$

که λ_{d} مسیر متوسط آزاد میان دو رخداد به هم پیوستگی متوالی است، v_l سرعت صعود و $D_l\left(n\right)$ ضریب نفوذ صعود به علت نوسانات شارهای عیوب نقطه‌ای است و به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$D_{\ell}(n)=D_{\ell}^{\mathrm{s}}(n)+D_{\ell}^{\mathrm{cl}}(n)\,, \tag{۱۱۷-۷}$$

با

$$D_{\ell}^{\mathrm{s}}(n)=\frac{\Omega}{4\pi b^{2}r_{\mathrm{i}}(n)}\left(z_{\mathrm{v}}D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}}-z_{\mathrm{i}}D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}\right)\,, \tag{۱۱۸-۷}$$

(۱۱۹-۷)

$$D_\ell^{\mathrm{cl}} = \frac{N_{\mathrm{d}} K_0 \Omega}{16\pi b^2} \left(z_{\mathrm{v}}^2 \frac{\langle N_{\mathrm{dv}}^2 \rangle}{k_{\mathrm{v}} N_{\mathrm{d}}^2} + z_i^2 \frac{\langle N_{\mathrm{di}}^2 \rangle}{k_{\mathrm{i}} N_{\mathrm{d}}^2} \right) .$$

که شرایط مرزی زیر را دارد:

(۱۲۰-۷)

$$P_{\mathrm{i}}(n_{\min}, t)|_{n_0, t_0} = P_{\mathrm{i}}(n_{\mathrm{m}}, t)|_{n_0, t_0} = 0 ,$$

حل معادله‌ی ۷-۱۰۹ به وسیله‌ی سمنو و وو [۲۶] مشخص می‌کند که:

(۱۲۱-۷)

$$P_{\mathrm{m}} = \frac{\int_{n_{\min}}^{n_0} \exp\left(- \int_{n_{\min}}^{x} \frac{F_{\mathrm{i}}^{\mathrm{s}}(x')}{D_{\mathrm{i}}(x')} \mathrm{d}x' \right) \mathrm{d}x}{\int_{n_{\min}}^{n_0} \exp\left(-(1-\alpha^*) \int_{n_{\min}}^{x} \frac{F_{\mathrm{i}}^{\mathrm{s}}(x')}{D_{\mathrm{i}}(x')} \mathrm{d}x' \right) \mathrm{d}x} ,$$

که

(۱۲۲-۷)

$$\alpha^* = \frac{F_{\mathrm{i}}^{c}(n_\ell)}{F_{\mathrm{i}}^{\mathrm{s}}(n_\ell)} (n_{\min} < n_\ell < n^* < n_{\mathrm{m}}) .$$

عبارت α^* نسبت نرخ تغییر اندازه‌ی حلقه به علت به هم پیوستگی خوشه‌ها به نرخ تغییر اندازه‌ی حلقه به علت جذب عیب نقطه‌ای، یا در اصل، اهمیت نسبی به هم پیوستگی خوشه‌ها در مقایسه با جذب عیوب است. سمنو انتگرال‌های موجود در توابع توانی در معادله‌ی ۷-۱۲۱ را به صورت زیر نوشته است:

(۱۲۳-۷)

$$\int_n \frac{F_{\mathrm{i}}^{\mathrm{s}}(x)}{D_{\mathrm{i}}(x)} \mathrm{d}x = \frac{2 f_{\mathrm{s}}}{d_{\mathrm{cl}}} \left[n^{1/2} - \frac{d_{\mathrm{s}}}{d_{\mathrm{cl}}} \ln\left(\frac{d_{\mathrm{s}}}{d_{\mathrm{cl}}} n^{1/2} + 1 \right) \right] ,$$

که

(۱۲۴-۷)

$$f_s = \frac{F_i^s(n)}{n^{1/2}}\ , \quad d_s = \frac{D_i^s(n)}{n^{1/2}}\ , \quad d_{cl} = \frac{D_i^{cl}(n)}{n^{1/2}}\ .$$

دو مورد محدود کننده مواقعی هستند که جذب عیب مهم نیست، $d_{cl} \to 0$، و هم‌چنین هنگامی که به هم پیوستگی خوشه‌ها حداقل باشد، $d_s \to 0$. برای مورد $d_{cl} \to 0$، معادله‌ی ۷-۱۲۱ به صورت زیر است:

(۱۲۵-۷)

$$P_m = (1-\alpha^*)\frac{\exp(-f_s n_0/d_s) - \exp(-f_s n_{min}/d_s)}{\exp(-f_s n_m(1-\alpha^*)/d_s) - \exp(-f_s n_{min}(1-\alpha^*)/d_s)} \times \exp(\alpha^* f_s n_{min}/d_s)\ ,$$

و برای مورد $d_s \to 0$ معادله‌ی ۷-۱۲۱ برابر است با:

(۱۲۶-۷)

$$\begin{aligned} P_m = \Big\{ &(1-\alpha^*)^2 \exp\left(2\alpha^* f_s n_{min}^{1/2}/d_{cl}\right)\Big[\left(1+2f_s n_0^{1/2}/d_{cl}\right)\exp\left(-2f_s n_0^{1/2}/d_{cl}\right) \\ &-\left(1+2f_s n_{min}^{1/2}/d_{cl}\right)\exp\left(-2f_s n_{min}^{1/2}/d_{cl}\right)\Big]\Big\} \\ &/\Big\{\left(1+2(1-\alpha^*)f_s n_{min}^{1/2}/d_{cl}\right)\exp\left(-2(1-\alpha^*)f_s n_{min}^{1/2}/d_{cl}\right) \\ &-\left(1+2(1-\alpha^*)f_s n_{min}^{1/2}/d_{cl}\right)\exp\left(-2(1-\alpha^*)f_s n_{min}^{1/2}/d_{cl}\right)\Big\}\ . \end{aligned}$$

رفتار P_m به صورت تابعی از تعداد بین‌نشین‌ها در خوشه در شکل ۷-۵۷ نشان داده شده است. در این مورد، $\alpha^* = 0$ و خط ضخیم برای موردی است که $d_s \to 0$ میل می‌کند، معادله‌ی ۷-۱۲۶، و خط‌چین برای موردی است که $d_{cl} \to 0$ میل می‌کند، معادله‌ی ۷-۱۲۵. خط چین موجود در سمت چپ و پایین شکل، در هنگام نادیده گرفتن خوشه‌ها نتیجه می‌شود. به هر جهت هنگامی که خوشه‌بندی قابل توجه

است (خطوط ضخیم)، اساساً احتمال جوانه‌زنی افزایش می‌یابد. در حقیقت، اگر ε_{i0} به جای کسر بین‌نشین‌های تولید شده در آبشارها به صورت خوشه‌های متحرک تعریف شود، و K_0 نرخ تولید بین‌نشین‌ها باشد، در نتیجه $\varepsilon_{i0}K_0/n_0$، نرخ تولید خوشه‌های بین‌نشینی در آبشار است و نرخ جوانه‌زنی حلقه‌های بین‌نشینی برابر است با:

$$J_\ell = \frac{\varepsilon_{i0} K_0 P_{\mathrm{m}}}{\Omega n_0} \,. \qquad (۱۲۷-۷)$$

با انتخاب مقادیر $\varepsilon_{i0} = ۰/۴$، $P_{\mathrm{m}} \sim ۱۰^{-۶}$، $\Omega \sim ۱۰^{-۲۹}\ \mathrm{m}^3$، $n_0 \sim ۸$، تقریباً ۵×۱۰^{۲۱} حلقه در متر مکعب در هر NRT dpa به‌دست می‌آید. درصورتی که دانسیته‌ی حلقه‌ها در حدود این مقدار در نظر گرفته شود، در نتیجه مقدار مجاز تولید و تکثیر[1] در حدود ۱ NRT dpa است. به هر جهت این مقدار برای زمان تولید و تکثیر جوانه بالا است؛ زیرا حلقه‌های کوچک به آسانی در میکروسکوپ الکترونی عبوریِ فلزات پرتودیده در کسرهایی از یک dpa مشاهده می‌شوند.

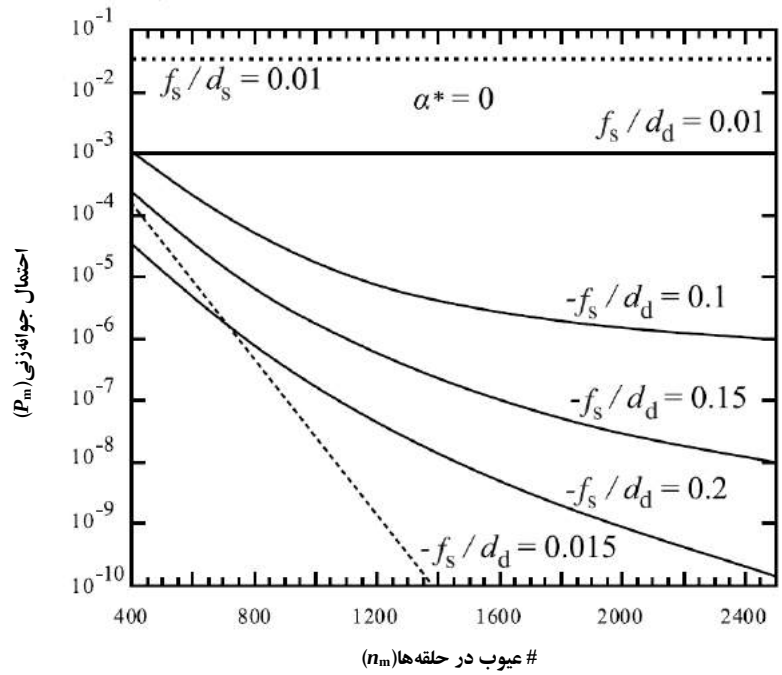
۷-۷ رشد حلقه‌ی نابجایی

رشد حلقه‌ها از معادلات فوکر ـ پلانک که توزیع اندازه‌ی حلقه‌هایی از تمام اندازه‌ها را فراهم می‌کند (شکل ۷-۵۷)، نیز می‌تواند تعیین شود. با اعمال معادله‌ی ۷-۱۰۴ به مورد حلقه‌های بین‌نشینی، معادله‌ای به صورت زیر به‌دست می‌آید:

(۱۲۸-۷)

$$\frac{\mathrm{d}i_j}{\mathrm{d}t} = K_{0j} + [\beta_{\mathrm{v}}(j+1) + \alpha_{\mathrm{i}}(j+1)]i_{j+1} - [\beta_{\mathrm{v}}(j) + \beta_{\mathrm{i}}(j) + \alpha_{\mathrm{i}}(j)]i_j + \beta_{\mathrm{i}}(j-1)i_{j-1} \,,$$

1. Incubation dose



شکل ۷–۵۷. احتمال جوانه‌زنی خوشه‌های بین‌نشینی به صورت تابعی از اندازه‌ی حلقه. در این شکل، $\alpha^* = 0$ و خط ضخیم برای موردی است که $d_s \rightarrow 0$، معادله‌ی ۷–۱۲۶ و خط‌چین برای موردی است که $d_{cl} \rightarrow 0$، معادله‌ی ۷–۱۲۵. خط‌چین در سمت چپ و پایین شکل زمانی نتیجه می‌شود که خوشه‌ها نادیده گرفته می‌شوند[۲۶].

که در این رابطه i_j غلظت حلقه‌های بین‌نشینی با اندازه‌ی j است و عبارت سمت چپ معادله‌ی ۷–۱۲۸ نرخ زمانی تغییر جمعیت حلقه‌های بین‌نشینی با اندازه‌ی j است. عبارات $\beta_k(j)$ و $\alpha_k(j)$ نرخ‌های جذب و نشر عیوب نوع k از حلقه‌های j اندازه هستند. عبارت اول در سمت راست تساوی، نرخ تولید مستقیم خوشه‌های j اندازه است. در عمل این عبارت از صفر تا خوشه‌ی چهارضلعی ($j = ۴$) تغییر می‌کند. عبارت اول در براکت، تولید خوشه‌های j اندازه به وسیله‌ی نشر یک بین‌نشین یا جذب یک جای خالی به وسیله خوشه $j+1$ اندازه است. عبارت دوم در داخل براکت، اتلاف خوشه‌های j اندازه به وسیله‌ی جذب یک جای خالی یا یک بین‌نشین یا نشر یک بین‌نشین است. عبارت آخر افزایش خوشه‌های j اندازه به وسیله‌ی به دام‌اندازی بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی خوشه‌های j-1 اندازه است. حل معادله‌ی ۷–۱۲۸، توزیع اندازه‌ی حلقه را به صورت تابعی از زمان نشان می‌دهد که تکامل تدریجی حلقه‌های بین‌نشینی با مقدار مجاز پرتوگیری یا زمان را تشریح می‌کند.

پوکر[1] و همکارانش [۲۷] فرمول‌بندی فوکر ـ پلانک را برای مدله کردن تکامل جمعیت حلقه‌ها از طریق نظریه‌ی سرعت شیمیایی در یک محیط همگن مورد استفاده قرار دادند. این محققین در عملیاتشان تولید خوشه‌ها در آبشار حاوی بیش‌تر از چهار عیب را مجاز دانستند و یک‌سری از معادله‌ها را برای غلظت خوشه‌های عیب، مشتمل بر دو معادله برای جاهای خالی یا بین‌نشین‌های تکی و معادلات $2N$ برای جمعیت حلقه‌های بالاتر از N اندازه را حل کردند. فیزیکِ فرمول‌بندی آن‌ها شامل عباراتی برای نرخ‌های به دام‌اندازی عیوب، β، نرخ‌های نشر، α برای هر نوع عیب، k به منزله‌ی یک تابع از اندازه خوشه است و:

(۱۲۹–۷)

$$\beta_{\mathrm{k}}(j) = 2\pi r(j) z_{\mathrm{c}}(j) D_{\mathrm{k}} C_{\mathrm{k}} \ ,$$

(۱۳۰–۷)

$$\alpha_{\mathrm{k}}(j) = 2\pi r(j) z_{\mathrm{c}}(j) \frac{D_{\mathrm{k}}}{\Omega} \exp(-E_{\mathrm{bk}}(j)/kT) \ ,$$

که $r(j)$ شعاع یک حلقه‌ی بین‌نشینی j اندازه، D_{k} و C_{k} ضریب نفوذ و غلظت عیب k، $z_{\mathrm{c}}(j)$ ضریب گرایش برای حلقه‌ی بین‌نشینِ j اندازه و $E_{\mathrm{bk}}(j)$ انرژی پیوندی برای یک خوشه شامل j عیب از نوع k است. پوکر معادله‌های زیر را برای $z_{\mathrm{c}}(j)$ و $E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{i}}$ ارایه نموده است:

(۱۳۱–۷)

$$z_{\mathrm{c}}(j) = z_{\mathrm{i}} + \left(\sqrt{\frac{b}{8\pi a}} z_{\mathrm{li}} - z_{\mathrm{i}} \right) \frac{1}{j^{a_{\mathrm{li}}/2}} \ ,$$

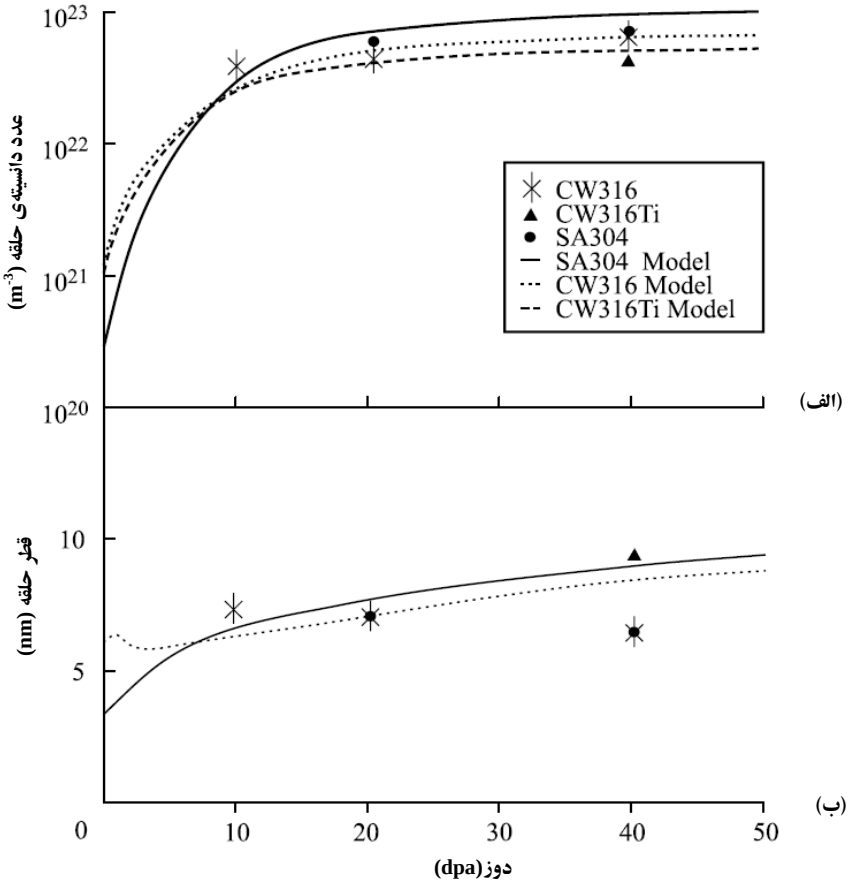
$$E_{\mathrm{b}}^{\mathrm{i}} = E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}} + \frac{E_{\mathrm{b}}^{2i} - E_{\mathrm{f}}^{i}}{2^{0.8} - 1} (j^{0.8} - (j-1)^{0.8}) \ ,$$

که z_{i} ضریب گرایش برای یک خط نابجایی مستقیم برای بین‌نشین‌ها، a پارامتر شبکه و b بردار برگرز هستند، z_{li} و a_{li} ضرایب مورد استفاده برای تشریح تکامل گرایش با اندازه‌ی خوشه است [۲۸]. برای

1. Pokor

عبارت انرژی پیوندی، $E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{i}}$ انرژی تشکیل عیب نقطه‌ای بین‌نشین، معادله‌ی ۴-۱۶، است، $E_{\mathrm{b}}^{2\mathrm{i}}$ انرژی پیوند خوشه‌ی دو بین‌نشینی و j تعداد عیوب در یک خوشه‌ی j اندازه است و این عبارت از شبیه‌سازی جنبشی مولکولی به‌دست می‌آید [۲۹، ۳۰].

به منظور بررسی اثر نابودسازی دانسیته‌ی نابجایی شبکه با مقدار مجاز پرتوگیری، آن‌ها فرض کردند که نرخ تغییر دانسیته‌ی متناسب با $\rho^{3/2}$ باشد که در نتیجه $\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}=-Kb^2\rho^{\frac{3}{2}}$ است و یک دانسیته‌ی نابجایی را نتیجه می‌دهد که به صورت $\frac{1}{t^2}$ کاهش می‌یابد (قسمت بعد را ملاحظه فرمایید). دانسیته‌ی نابجایی شبکه در فلزات پرتودیده با افزایش مقدار مجاز پرتوگیری به مقدار اشباع می‌رسد. مشاهده شده است که فولاد زنگ نزن در یک محدوده‌ی دمایی ۴۰۰ تا ۶۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد، به مقدار اشباع تقریباً $۶\times۱۰^{-۱۰}\ \mathrm{cm}^{-2}$ می‌رسد [۳۱]. دانسیته‌ی حلقه‌ی و اندازه‌ی نتیجه شده از مدل خوشه‌ای برای سه نوع از فولادهای زنگ نزن در دمای ۳۳۰ درجه‌ی سانتی‌گراد و مقدار مجاز دریافتی بالای ۴۰dpa که با معادله‌های ۷-۱۲۸ و ۷-۱۳۲ محاسبه شده، در شکل ۷-۵۸ با مقادیر اندازه‌گیری شده مقایسه شده است و نتایج توافقات خوبی را نشان می‌دهند. بازیابی نابجایی نقش مهمی را در تکامل ریزساختاری ایفا می‌کند؛ زیرا تغییری در دانسیته‌ی چاهک‌ها ایجاد می‌کند. عدم محاسبه برای بازیابی نابجاییِ اولیه‌ی شبکه ممکن است منجر به اشباع سریع ساختار حلقه در آلیاژهای ۳۱۶ شود. عوامل بسیار حساسِ کنترل کننده‌ی ریزساختار پرتودیده: دما، مقدار مجاز پرتوگیری (دوز)، ثوابت مواد و دانسیته‌ی نابجایی اولیه‌ی شبکه هستند.



شکل۷-۵۸. تکامل (الف) دانسیته و (ب) اندازه‌ی حلقه‌ی فرانک برای پرتودهی در دمای $۳۳۰^{o}C$ تا مقادیر مجاز پرتوگیری بالا مطابق با مدل جنبشی خوشه‌های پوکر و همکارانش [۲۷].

عملیات‌های ساده‌تر برای تعیین توزیع اندازه‌ی حلقه می‌تواند با نادیده گرفتن تشکیل خوشه‌های عیب بزرگ‌تر از بین‌نشین چهارتایی، محدود کردن تعداد دسته‌های اندازه و ساده کردن توضیح خوشه ایجاد شود. استولر[1] و همکارانش [۳۲] تکامل حلقه‌های بزرگ‌تر را با روابط زیر توضیح داده‌اند:

1. Stoller

(۱۳۲-۷)

$$\frac{\mathrm{d}i_j}{\mathrm{d}t} = i_{j-1}\tau_j^{-1} - i_j\tau_{j+1}^{-1} ,$$

که i_j تعداد حلقه‌ها در دسته اندازه‌ی مشخص با شعاع r_L است و τ_j عمر حلقه‌ی j اندازه در برابر رشد به دسته‌ی بزرگ اندازه‌ی بعدی است:

(۱۳۴-۷)

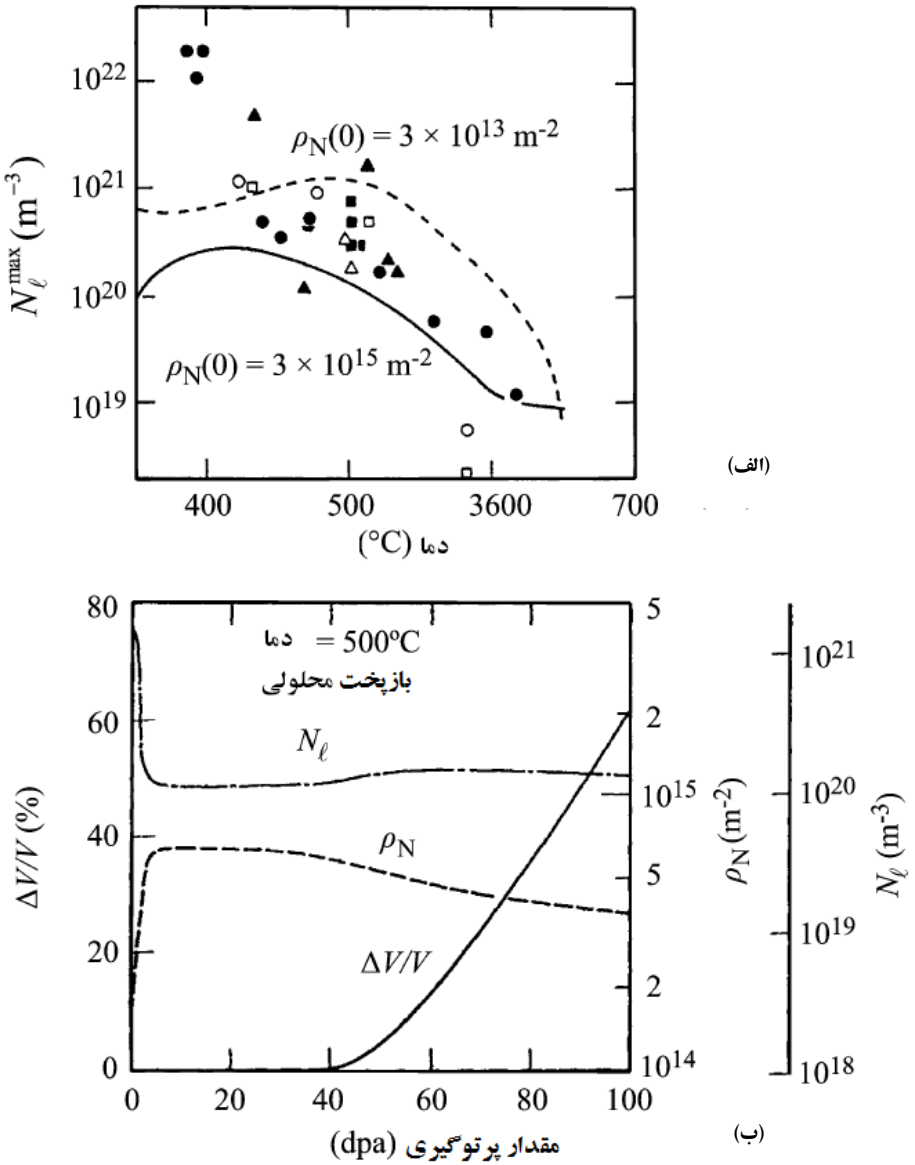
$$\tau_j = \int_{r_j}^{r_{j+1}} \left(\frac{\mathrm{d}r_L}{\mathrm{d}t}\right)^{-1} \mathrm{d}r_L ,$$

و

(۱۳۵-۷)

$$\frac{\mathrm{d}r_L}{\mathrm{d}t} = \frac{\Omega}{b}[z_{iL}(r_L)D_iC_i - z_{vL}(r_L)D_v(C_v - C_{vL})] ,$$

که z_{iL} و z_{vL} با معادله‌ی ۵-۹۷ مشخص می‌شوند و $C_{vL} = C_v^0\exp(\frac{E_F\Omega}{kT})$ است که E_F انرژی یک حلقه‌ی نقص‌دار محاسبه شده از معادله‌ی ۷-۶۵ است. شکل ۷-۵۹ الف مقایسه‌ای از وابستگی دمایی بیشینه‌ی دانسیته‌ی حلقه‌ی نقص‌دار محاسبه شده و اطلاعات رآکتور سریع جریان پایین برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ با دانسیته‌ی نابجایی‌های ابتدایی شبکه $۳ \times ۱۰^{۱۵}\ m^{-2}$ (خط پررنگ) و $۳ \times ۱۰^{۱۳}\ m^{-2}$ (خط چین) را نشان می‌دهد. شکل ۷-۵۹ ب وابستگی مقدار مجاز پرتوگیری دانسیته‌ی حلقه برای فولاد ۳۱۶ بازپخت محلولی شده را نشان می‌دهد که در دمای ۵۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد پرتودهی شده است.



شکل ۷-۵۹. (الف) مقایسه‌ی دانسیته‌ی بیشینه‌ی حلقه‌ی نقص‌دار و اطلاعات رآکتور سریع جریان پایین به صورت تابعی از دما محاسبه شده است، (ب) وابستگی مقدار مجاز دریافتی دانسیته‌ی حلقه برای پرتودهی فولاد زنگ نزن بازپخت محلولی شده در دمای ^{o}C ۵۰۰ [۳۲].

سمنو و وو [۲۶] اثر گرایش تولید را با نوشتن معادله‌ی ۷-۱۳۵ برای نرخ تغییر در اندازه‌ی حلقه برای گنجاندن عبارات ناشی از جذب خوشه‌ی جای خالی و خوشه‌ی بین‌نشین محاسبه کردند:

(۷-۱۳۶)

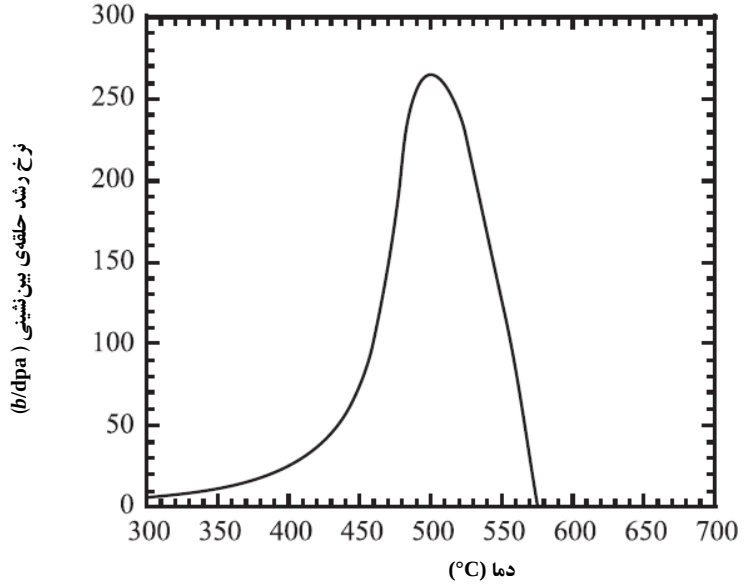
$$\frac{\mathrm{d}r_{\mathrm{L}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\Omega}{b}\left[J_{\mathrm{i}} - J_{\mathrm{v}} + J_{\mathrm{v}}^{e} + J_{\mathrm{i}}^{cl} - J_{\mathrm{v}}^{cl}\right],$$

که Jها به ترتیب شارهای ناشی از بین‌نشین‌های تکی، جاهای خالی تکی، نشر حرارتی جای خالی، خوشه‌های بین‌نشینی و خوشه‌های جای خالی هستند و τ_{d} عمر حلقه‌ی نابجایی است. با جایگذاری برای شارها [۳۲] نتیجه می‌شود که:

(۷-۱۳۷)

$$\frac{\mathrm{d}r_{\mathrm{L}}}{\mathrm{d}t} = \frac{K_0}{(\rho_N + \rho_{\mathrm{L}})b}\left(\frac{k_{\mathrm{V}}^2(\varepsilon_{\mathrm{i}} - \varepsilon_{\mathrm{v}}') + k_{\mathrm{d}}^2\bar{z}(1-\varepsilon_{\mathrm{i}})}{k^2} - \frac{K^e}{K_0}\right),$$

که در این رابطه K_0 نرخ تولید عیب، K^{e} نرخ نشر حرارتی جای خالی، ρ_N و ρ_{L} دانسیته‌های شبکه و حلقه‌ی نابجایی هستند، $\varepsilon_{\mathrm{i,v}}$ نیز به ترتیب کسر بین‌نشین‌ها و جاهای خالی هستند که با خوشه‌بندی‌های درون آبشاری، غیرمتحرک شده‌اند، $\varepsilon_{\mathrm{v}}' = \varepsilon_{\mathrm{v}} - K^e / K_0$، z_{d} گرایش نابجایی است، $k_{\mathrm{V,d}}^2$ شدت چاهک‌هایِ حفره‌ها و نابجایی‌ها هستند، k^2 شدت کلی چاهک و $\bar{z} = \dfrac{z_{\mathrm{d}}k_{\mathrm{c}}^2}{k^2 + z_{\mathrm{d}}k_{\mathrm{d}}^2}$ است. نرخ رشد حلقه‌ی بین‌نشینی حالت پایدار برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ با نرخ مؤثر تولید عیب نقطه‌ای $۱۰^{-۷}$ dpa/s به صورت تابعی از دما در شکل ۷-۶۰ نشان داده شده است. نرخ رشد در واحدهایی از بردار برگرز، b در dpa است. لازم به ذکر است که نرخ رشد حلقه در دماهای پایین و بالا، کم است و در دماهای میانی و در حدود $۵۰۰^{\mathrm{o}}\mathrm{C}$ اوج می‌گیرد.



شکل ۷-۶۰. نرخ رشد حلقه‌ی بین‌نشینی در واحدهایی از بردار برگرز، b در dpa به صورت تابعی از دما برای فولاد زنگ نزن 316 [۳۳].

۷-۸ بازیابی

با رشد حلقه‌های نابجایی سرانجام آن‌ها با نابجایی‌های شبکه یا با یک‌دیگر برخورد می‌کنند. بیشینه‌ی شعاعی که یک حلقه می‌تواند تا آن رشد کند، $R_{\max}$، با دانسیته‌ی حلقه، ρ_{L} کنترل می‌شود که به صورت $\frac{4\pi}{3}\rho_{\mathrm{L}}R_{\max}^3=1$ تعیین می‌شود. هنگامی که حلقه‌ها با یک‌دیگر برخورد می‌کنند، آن‌ها ترکیب می‌شوند و در دانسیته‌ی نابجایی شبکه سهیم می‌شوند. برهم‌کنش میان نابجایی‌های تکی و حلقه‌ها منجر به بی‌نقص شدن حلقه می‌شود که آن‌ها نیز در شبکه سهیم می‌شوند (در فصل ۱۲، قسمت ۱۲-۳ بحث شده است). هم‌چنان که دانسیته‌ی نابجایی‌ها افزایش می‌یابد، نرخ برهم‌کنش حلقه‌ها با شبکه نیز افزایش می‌یابد و شعاع حلقه‌ها به صورت بیش‌تری به وسیله‌ی دانسیته‌ی نابجایی شبکه محدود می‌شود که به وسیله‌ی معادله‌ی ۵-۸۲، $\left(\pi R_{\max}^2\right)\rho_N=1$ توضیح داده شد.

به هرجهت، مشاهدات ریزساختارهای پرتودهی شده، تأیید می‌کند که دانسیته‌ی نابجایی اشباع می‌شود، که مستلزم این است که فرایندی برای حذف نابجایی‌ها در شبکه موجود باشد که افزایش آن‌ها را محدود کند. فرایند بازیابی می‌تواند رفتار دانسیته‌ی نابجایی با پرتودهی را تشریح کند. فرض شده است که نرخ تغییر دانسیته‌ی نابجایی در جامد تحت تنش در دمای بالا به صورت زیر است:

(۱۳۸–۷)

$$\dot{\rho} = B\rho - A\rho^2 ,$$

که ρ دانسیته‌ی نابجایی‌های متحرک و A و B ثوابت هستند. (لازم به ذکر است که درحالی‌که نرخ تغییر دانسیته‌ی نابجاییِ مشخص شده با معادله‌ی ۷–۱۳۸ به صورت طبیعی قابل پذیرش است، توضیح بسیار دقیق‌تر از فرایند فیزیکی به وسیله‌ی معادله‌ی ۷–۱۳۳ فراهم شده است).
عبارت اول معادله‌ی ۷–۱۳۸ نرخ تولید نابجایی‌ها و عبارت دوم نرخ نابودسازی است. فرض شده است که عبارت مربوط به اتلاف به علت نابودسازی متقابل جفت‌های نابجایی با علامت مخالف رخ دهد، که مستلزم نرخ واکنشی است که متناسب با مربع تعداد نابجایی‌های موجود در زمان مشخص باشد. گارنر[1] و وولفر[2] [۳۴] نشان دادند که نرخ تولید نابجایی‌ها متناسب با $b^2 \varnothing \rho^{\frac{1}{2}}$ است، در نتیجه معادله‌ی ۷–۱۳۸ می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۱۳۹–۷)

$$\dot{\rho} = B\rho^{1/2} - A\rho^{3/2} ,$$

که $B \sim b^2\phi$ و $A \sim v_c$ که v_c سرعت صعود نابجایی (فصل ۱۴ ملاحظه شود) است. در حالت پایدار ($d\rho/dt = 0$) است، و دانسیته‌ی اشباع برابر با $\rho_s = B/A$ است. حل معادله‌ی ۷–۱۳۸ به صورت زیر است:

1. Garner
2. Wolfer

(۱۴۰-۷)

$$\frac{\rho(t)}{\rho_s} = \frac{1 - e^{-x} + \sqrt{\rho_0/\rho_s}(1 + e^{-x})}{1 + e^{-x} + \sqrt{\rho_0/\rho_s}(1 - e^{-x})} ,$$

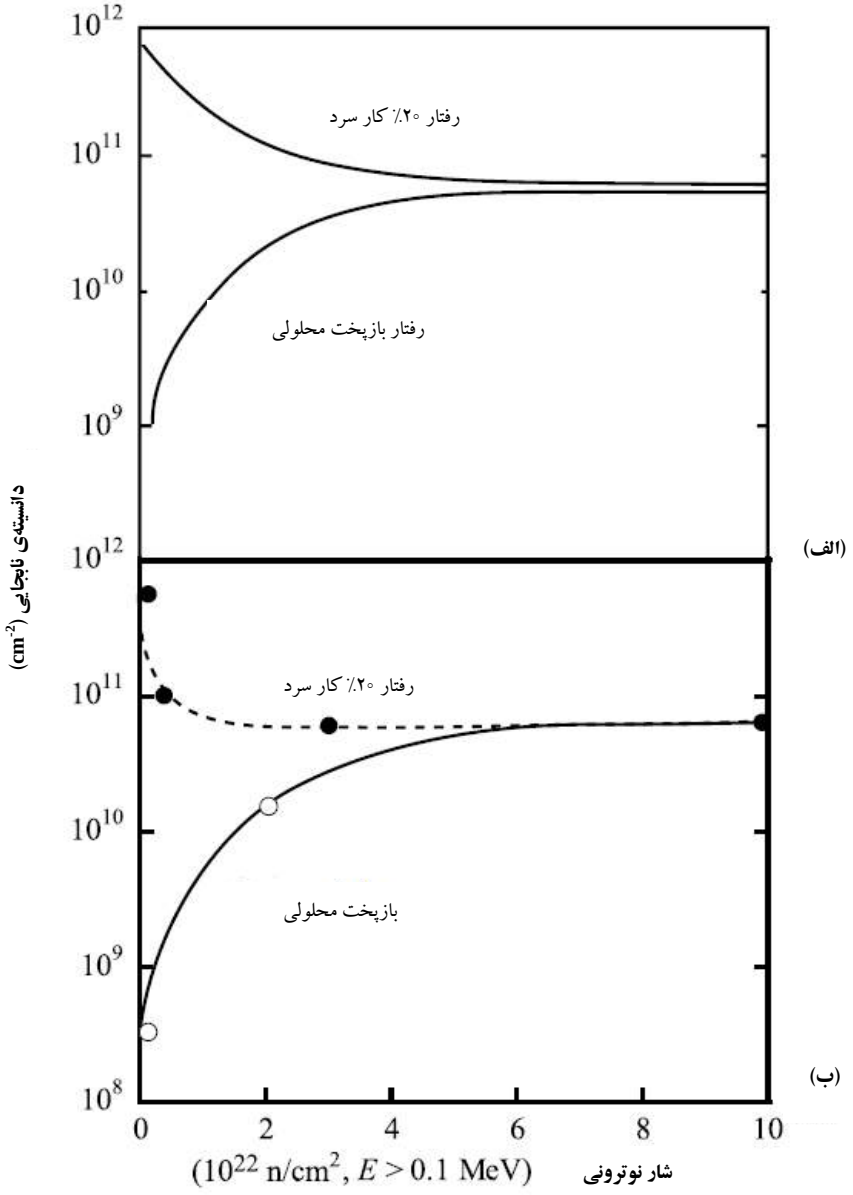
که ρ_0 دانسیته‌ی نابجایی اولیه است و

(۱۴۱-۷)

$$x = A\sqrt{\rho_s}t = \sqrt{\rho_s}v_c t .$$

با استفاده از دانسیته‌ی اشباع، ρ_s برابر با ۶×۱۰^{۱۰} cm^{-2}، و دانسیته‌ی حلقه‌های اولیه ρ_0 برابر با ۳×۱۰^{۸} cm^{-2} برای 316 SS بازپخت شده و ۷×۱۰^{۱۱} cm^{-2} برای 316 SS 20% CW، دانسیته‌ی نابجایی‌های محاسبه شده از معادله‌ی ۷-۱۳۹ در شکل ۷-۶۱ الف نشان داده شده است. رابطه‌ی میان در معادله‌ی ۷-۱۴۰ و جریان، با موردی تعریف شده است که دانسیته‌ی نابجایی برای 316 SS بازپخت شده به مقدار ۲×۱۰^{۱۰} cm^{-2} در ۲×۱۰^{۲۲} n/cm^2 می‌رسد.

اطلاعات در شکل ۷-۶۱ ب رسم شده‌اند. لازم به ذکر است که نتایج مدل از شکل ۷-۶۱ الف با اطلاعات به خوبی در توافق است. این توافقات نشان می‌دهد که نابجایی‌های اصلی از نابجایی‌های تولید شده در طول پرتودهی با توجه به قابلیت آن‌ها در جذب عیوب نقطه‌ای متفاوت نیستند.



شکل ۷–۶۱. (الف) تکامل دانسیته‌ی نابجایی‌های محاسبه شده در 316 SS در ۵۰۰°C با استفاده از معادله‌ی ۷–۱۳۹ برای دانسیته‌های ابتدایی $۷ \times ۱۰^{۱۱}\ cm^{-2}$ و $۴ \times ۱۰^{۸}\ cm^{-2}$، به ترتیب برای شرایط کار سرد شده و بازپخت شده [۳۴]. (ب) دانسیته‌ی نابجایی‌های اندازه‌گیری شده در فولاد 316 SS کار سرد شده و بازپخت شده بعد از پرتودهی در EBR-II در ۵۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد [۳۵].

۷-۹ تکامل ریزساختار حلقه‌ی بین‌نشینی

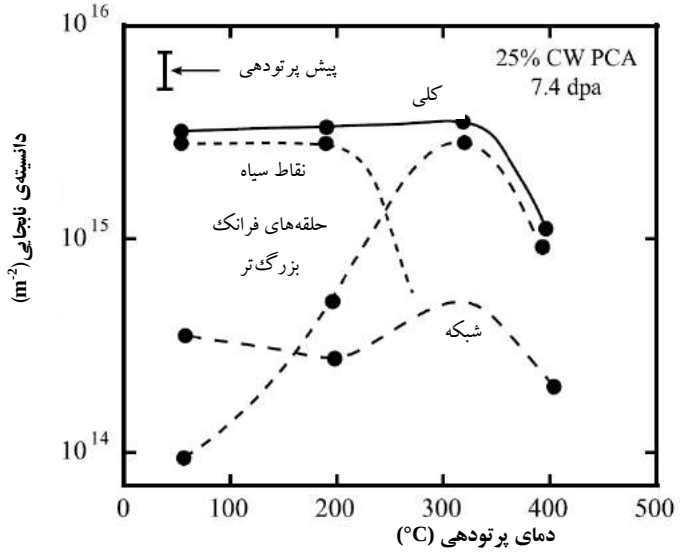
تکامل جمعیت حلقه‌ی بین‌نشینی می‌تواند برحسب واکنش آن به دما و مقدار مجاز پرتوگیری توضیح داده شود. محدوده‌ی دمایی که برای عملیات رآکتور آب سبک مهم است، در حدود ۲۷۰ تا ۳۴۰ درجه‌ی سانتی‌گراد است. دماهای بالاتر ممکن است که از حرارت‌دهی گاما در اجزای ضخیم مشخصی مانند سپرهای رآکتور آب جوشان ایجاد شود. این محدوده‌ی دمایی ناحیه‌گذار بین آن چیزی را نشان می‌دهد که به صورت معمول به عنوان دمای پایین (۵۰-۳۰۰°C) و دمای بالا (۳۰۰-۷۰۰°C) نامیده می‌شود. در زیر دمای ۳۰۰°C، ریزساختار نابجایی با یک دانسیته‌ی بالایی از نقاط سیاه رنگ (خوشه‌های عیب که برای نشان دادن در TEM بسیار کوچک هستند، nm ۲ >)، نابجایی‌های شبکه و دانسیته‌ی پایینی از حلقه‌های فرانک توصیف می‌شود. مشاهده شده است. درصد کمی از حلقه‌های کوچک در فولاد زنگ نزن، نقص در چیده شدن هستند که از ۲۰ تا ۲۵٪ از خوشه‌ها در نیکل یا مس بسیار کم‌تر است [۱۰]. نزدیک ۳۰۰°C، پرتودهی تغییرات ریزساختاری را القا می‌کند که در اثر آن ساختارهایی با حلقه‌های نابجایی کوچک به ساختارهایی با حلقه‌های نقص‌دار بزرگ‌تر و نابجایی‌های شبکه تبدیل می‌شوند (شکل ۷-۶۲). شکل ۷-۶۳ حلقه‌های نابجایی بزرگ بعد از پرتودهی در دماهای بالا را نشان می‌دهد. بالای ۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد، تعداد حلقه‌های فرانک کاهش می‌یابد. شکل ۷-۶۴ کاهش سریع ۱۰۰۰ برابری را در دانسیته‌ی حلقه‌های نقص‌دار در فولادهای زنگ نزن آستنیتی پرتودهیِ نوترونی شده بین ۴۰۰ و ۶۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد نشان می‌دهد. اندازه‌ی حلقه با افزایش دما افزایش می‌یابد که ضرورتاً منجر به افزایش در نرخ بی‌نقص شدن حلقه می‌شود که به کاهش در جمعیت حلقه‌های فرانک در دماهای بالا نسبت داده می‌شود.

دانسیته‌ی حلقه در دماهایِ پرتودهی پایین به صورت سریعی به نقطه‌ی اشباع می‌رسد. شکل ۷-۶۵، افزایش در دانسیته‌ی حلقه در فولاد زنگ نزن آستنیتی پرتودهی شده در نزدیک ۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد را نشان می‌دهد. در دماهای زیر ۳۰۰°C، اندازه‌ی حلقه در قبال جریان غیرحساس است. در این دماهای پایین، اندازه‌های حلقه و دانسیته‌ها هنگامی که تعادلی تعدادی بین تشکیل حلقه‌های جدید و تخریب حلقه‌های موجود برقرار شود، به پایداری جنبشی می‌رسد. با افزایش دما در ناحیه‌ی دما پایین، دانسیته‌ی حلقه‌های ریز کاهش می‌یابد و اندازه‌ی حلقه افزایش می‌یابد.

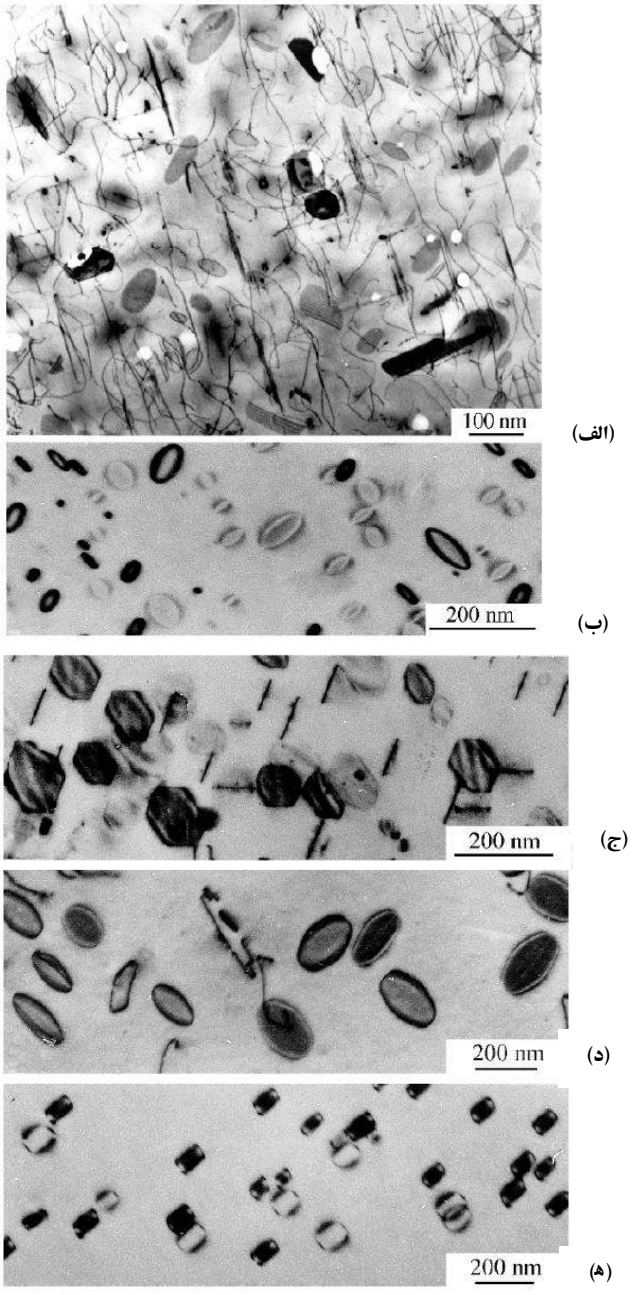
ریزساختار نابجایی در دمای بالای ۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد شامل ترکیبی از حلقه‌های فرانک و نابجایی‌های شبکه است. دانسیته‌ی حلقه، در چند dpa اشباع می‌شود و در مقادیر مجاز بالاتر، دانسیته

در حالت جنبشی باقی می‌ماند. هم‌چنان که دما افزایش می‌یابد، دانسیته‌ی نابجایی شبکه متناسب با دانسیته‌ی حلقه‌ی نقص‌دار افزایش می‌یابد اگرچه انتظار می‌رود که دانسیته‌ی کلی نابجایی‌ها بین ۳۰۰ تا ۳۷۰ درجه‌ی سانتی‌گراد، نسبتاً ثابت باقی بماند. در ناحیه‌ی دمایی بالاتر (^{o}C ۶۰۰–۴۰۰) جمعیت، ترکیبی از حلقه‌های فرانک با دانسیته‌ی پایین و شبکه‌ی نابجایی است. در عمل اگر دیگر فرایندهای ریزساختاری مانند جوانه‌زنی و رشد حفره و حباب در حال رخ دادن باشند، تکامل بسیار آرام رخ می‌دهد.

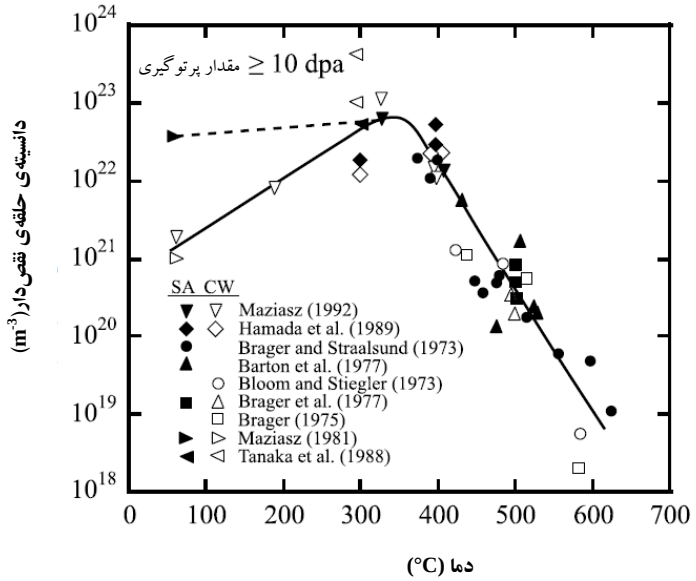
توضیح جوانه‌زنی و تکامل خوشه عیب، یک پیش زمینه‌ای را برای فهم پدیده‌ی رشد حفره فراهم می‌کند که در فصل بعد توضیح داده می‌شود. هم‌چنان که نشان داده خواهد شد، تشکیل حفره و رشد به صورت ذاتی مرتبط به تولید خوشه‌های عیب و رشد آن‌ها به درون حلقه‌ها است، زیرا این ریزساختارها چاهک‌های بحرانی را تولید می‌کنند که سرنوشت حفره‌ها را تحت تأثیر قرار خواهد داد.



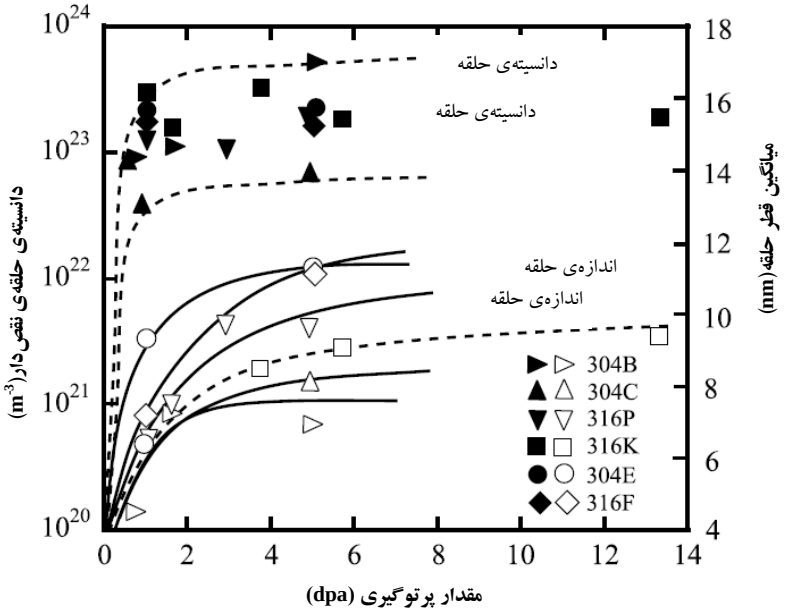
شکل ۷–۶۲. اثر دمای پرتودهی در محدوده‌ی ^{o}C ۴۰۰–۵۰ روی اجزای دانسیته‌ی نابجایی در فولاد زنگ نزن آستنیتی پرتودهی نوترونی شده [۳۶].



شکل ۷-۶۳. تصاویری از حلقه‌های فرانک بزرگ در (الف) فولاد زنگ نزن سری ۳۰۰ پرتودهی شده در $500^{o}C$ تا مقدار مجاز ۱۰dpa [۳۷] و (ب-هـ) به ترتیب در آلومینیوم، مس، نیکل و آهن پرتودهی شده [۱۶].



شکل ۷-۶۴. اثر دما روی دانسیته‌ی حلقه‌ی فرانک در ناحیه‌ی دمای میانی، ۶۰۰-۴۰۰ °C، برای فولادهای زنگ نزن آستنیتی پرتودهی نوترونی شده [۳۶].



شکل ۷-۶۵. تکامل دانسیته‌ی حلقه‌ی فرانک و اندازه در فولادهای زنگ نزن آستنیتی مختلف بعد از پرتودهی تا مقادیر مجاز بالای ۱۳dpa در دماهای نزدیک ۳۰۰°C [۳۸].

نام‌گذاری اصطلاحات

a : ثابت شبکه

A: مساحت صفحه‌ی لغزش

$\boldsymbol{b}$: بردار برگرز

$C_{\mathrm{v,i}}$: غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها

$C^{0}_{\mathrm{v,i}}$: غلظت تعادل حرارتی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها

d^{x} : شدت انتشار نفوذی برای خوشه‌ها به وسیله‌ی فرایند x

$D_{\mathrm{v,i}}$: ضریب نفوذ برای جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

D_{kj} : عبارت نفوذ در فضای اندازه‌ی عیب k و اندازه‌ی خوشه‌ی j، معادله‌ی ۷-۱۰۶

D_l : ضریب نفوذ صعود

E : انرژی

E_{b} : انرژی پیوندی

$\mathrm{E_f}$: انرژی تشکیل

E_l : انرژی حلقه‌ی نابجایی

E_{m} : انرژی مهاجرت

E_{m} : انرژی فعال‌سازی مؤثر برای حرکت خوشه

F_{kj} : سرعت رانش در فضای اندازه عیب k و اندازه‌ی خوشه‌ی j، معادله‌ی ۷-۱۰۶

G_{j} : نرخ مؤثر تولید جفت فرانکل از گونه‌های j

ΔG : تغییر در انرژی آزاد

G_0 : انرژی آزاد استاندارد

i_{n} : خوشه‌ی n بین‌نشینی

k : ثابت بولتزمان

$k^{2}_{\mathrm{v,i}}$: شدت کلی چاهک برای جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

l : طول قطعه‌ی خط نابجایی

L : طول لبه‌ی چهاروجهی نقص در چیده شدن

J : جریان جوانه‌زنی، هم‌چنین شار

K_0 : نرخ تولید عیب

K^{e} : نرخ نشر حرارتی جای خالی

m : نمای تنش در رابطه‌ی میان سرعت نابجایی و تنش برشی

$\boldsymbol{n}$: بردار واحد

n_k, n'_k : اندازه‌ی بحرانی خوشه

N_{d} : تعداد میانگین عیوب تولید شده در یک آبشار تکی

N_{il} : عدد دانسیته‌ی حلقه‌ی بین‌نشینی

N_0 : تعداد موقعیت‌های شبکه در واحد حجم. هم‌چنین تعداد موقعیت‌های جوانه‌زنی

$P_{\mathrm{i}}(n,t)$: احتمال رشد یک خوشه‌ی بین‌نشینی تا اندازه‌ی n در زمان t

P_{m} : احتمال جوانه‌زنی حلقه

R : شعاع خوشه‌ی عیب

r_{c} : شعاع هسته‌ی نابجایی

r_{L} : شعاع حلقه

r_{k} : شعاع بحرانی خوشه

s : جهت مثبت خط نابجایی

T : دما، هم‌چنین انرژی اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه

$S_{\mathrm{v,i}}$: فوق اشباع جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

$u_{i,j}$: مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی

υ_{g}: سرعت لغزش نابجایی

v_n : خوشه‌ای از n جای خالی

V : حجم

W : کار

$z_{\mathrm{v,i}}$: ضریب گرایش جای خالی، بین‌نشین

Z : ضریب زلدویچ در معادله‌ی ۷–۷۵

α_j : نرخ نشر گونه های j

β_j : نرخ جذب گونه های j

γ : کرنش برشی، هم‌چنین انرژی سطحی

γ_{SFE} : انرژی نقص در چیده شدن

δ : ضخامت دیواره‌ی حفره

ε_c : کرنش مربوط به هسته‌ی نابجایی

ε_{ij} : مؤلفه‌های کرنش

ε_{i0} : کسر بین‌نشین‌های تولید شده در آبشارها به صورت خوشه‌های غیرمتحرک

Γ : کشش خطی نابجایی

λ : ثابت لامه

λ_d : مسیر متوسط آزاد بین رخدادهای به هم پیوسته‌ی خوشه‌های بین‌نشینی متوالی

μ : ضریب برشی

ν : نسبت پواسان، هم‌چنین بسامد پرش

$\rho(n)$: عدد دانسیته‌ی خوشه‌های عیب n اندازه

v_s : شدت عبارت رانش برای خوشه‌ها، به وسیله‌ی جذب عیوب تکی

Ω : حجم اتمی

ρ_x : دانسیته کمیت x

σ_{ij}, σ : تنش و مؤلفه‌های تنشی

σ_s : تنش برشی

σ_{sD} : مقدار تنش برشی که یک سرعت نابجایی ۰٫۰۱m/s را ایجاد می‌کند.

τ : زمان تولید و تکثیر معادله‌ی ۷-۹۵

τ_d : عمر حلقه نابجایی

زیرنویس‌ها

c : هسته‌ی نابجایی

d : نابجایی

i : بین‌نشینی

k : اندازه‌ی بحرانی خوشه

L : حلقه

F : حلقه‌ی فرانک

N : شبکه‌ی نابجایی

P : حلقه‌ی کامل

v : جای خالی

0 : ابتدایی

بالانویس‌ها

c : به هم پیوستگی، آمیزش

cl: خوشه‌ها

s : عیوب تکی

مخفف‌ها

EDF : کسر عیب تبخیر شده

IDF : کسر عیوب نقطه‌ای تکی

MCF : کسر خوشه‌های متحرک

MDF : کسر عیوب متحرک

PBM : مدل گرایش تولید

PKA : اتم ضربه‌خورده‌ی اولیه

SFE : انرژی نقص در چیده شدن

SIA : اتم خود بین‌نشین تکی

مسایل

۷-۱ مدل‌های توپ بیلیاردیِ نیم صفحه‌ی اضافی از اتم‌ها را رسم کنید که جابه‌جایی های زیر را ایجاد می‌کنند:

الف) نابجایی لبه‌ی $\frac{a}{2[110]}$ در صفحه‌ی (111) از شبکه‌ی fcc

ب) نابجایی لبه‌ی $\frac{a}{2[111]}$ در صفحه‌ی (110) از شبکه‌ی bcc

۷-۲ به صورت آزمایشگاهی مشخص شده است که ماده‌ی مشخص، هنگامی که در معرض تنش حالت کشسان قرار می‌گیرد، تغییر حجم نمی‌دهد. نسبت پواسان برای این ماده چه‌قدر است؟

۷-۳ حجم کره‌ی مسی با قطر ۱۰ cm را تعیین کنید که در معرض یک فشار سیال برابر با ۱۲ MPa قرار دارد.

۷-۴ با فرض آن‌که اتم‌ها به صورت کره‌های کشسان سخت فرض شوند، نشان دهید که نسبت پواسان برای آرایش فشرده از کره‌ها برابر $\frac{1}{3}$ است؟

۷-۵ برای دیسک دایره‌ای شکل که روی صفحه‌ی (111) یک بلور fcc قرار گرفته است:

الف) انرژی را به صورت تابعی از تعداد جاهای خالی تعیین کنید.

ب) یک حفره‌ی کروی قبل از تبدیل خودبه‌خودی به دیسک جای خالی چه تعداد جای خالی را می‌تواند داشته باشد.

۷-۶ مشخص شده است که انرژی ذخیره شده در جامد با افزایش نابجایی‌ها افزایش می‌یابد.

الف) این انرژی را برای آلومینیوم با یک دانسیته‌ی نابجایی $۱۰^{۸}\ \mathrm{cm}^{-2}$ محاسبه کنید.

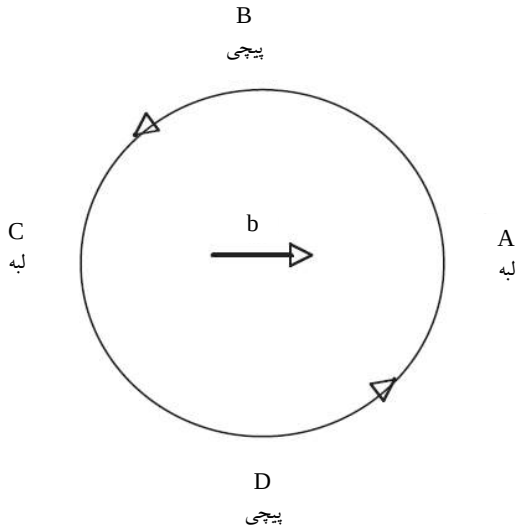
ب) هم‌چنین پیشنهاد شده است که این انرژی می‌تواند با اعمال تنش برشی، σ_s، افزایش یابد. با در نظر گرفتن این‌که نابجایی‌های لبه‌ای مستقیم در بخش (الف) به صورت شبکه‌ی مکعبی‌شکل با وجوه برابر باشند، تنش برشی لازم برای خم کردن هر بخش نابجایی به نیم دایره را تعیین و افزایش انرژی ناشی از آن را محاسبه کنید.

۷-۷ دانسیته‌ی خالص نابجایی‌های لبه در نمونه‌ی بلور مکعبی نازک با پارامتر شبکه‌ی $a = ۲\times۱۸^{-۸}\mathrm{cm}$ را در صورتی که تا شعاع انحنای برابر با ۱۰ cm خم شود را محاسبه کنید (ضخامت بلور بیش‌تر از ۱ mm نیست).

۷-۸ در حلقه‌ی برشی مدور نشان داده شده در شکل زیر، محور x جهت بردار برگرز است؛ اما محور x در صفحه‌ی حلقه‌ی عمود بر جهت بردار برگرز است، و محور y عمود بر صفحه حلقه است. θ زاویه‌ی قطبی دایره‌ی تنظیم شده از نقطه‌ی A است. در هر نقطه‌ی θ روی حلقه، بردار برگرز یک مؤلفه‌ی لبه‌ای b_e دارد که عمود بر خط نابجایی در آن نقطه است و یک مؤلفه‌ی پیچشی b_s که موازی با خط است.

الف) با استفاده از این حقیقت که بردار b با این مؤلفه‌ها، در تمام نقاط روی حلقه ثابت است (از جهت بزرگی و جهت)، عبارتی برای b_e و b_s به صورت تابعی از θ استخراج کنید.

ب) فرض کنید که تنش برشی σ_{xy} به حلقه اعمال شود. نشان دهید که نیروی حاصله‌ی روی خط نابجایی همیشه به صورت مستقیم شعاعی است و بزرگی برابر با $\sigma_{xy}b$ دارد.



۷-۹ میدان‌های تنشی احاطه کننده نابجایی لبه و پیچشی را به صورت تابعی از θ رسم کنید. دقیقاً موارد زیر را رسم کنید:

الف) σ_{xx}، σ_{yy} و σ_{xy} بر حسب θ برای یک نابجایی لبه

ب) σ_{xz} و σ_{yz} بر حسب θ برای یک نابجایی پیچشی

۷-۱۰ برای نابجایی‌ها در شکل زیر:

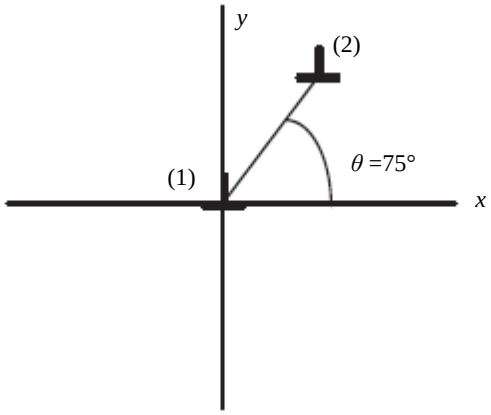
الف) بزرگی مؤلفه‌های نیرو روی نابجایی (۲) ناشی از نابجایی (۱) را محاسبه کنید.

ب) قسمت (الف) را برای زوایای ۰، ۳۰، ۴۵ و ۹۰ درجه تکرار کنید.

ج) در زاویه‌ی ۳۰ درجه، نابجایی (۲)

۱) به سمت نابجایی (۱) می‌لغزد یا از آن دور می‌شود؟

۲) تمایل به صعود یا سقوط دارد؟ چرا؟

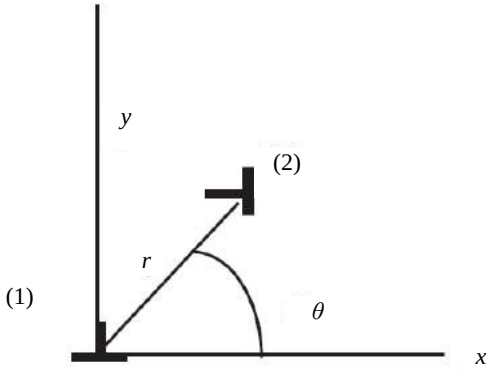


۷-۱۱ برای نابجایی‌های مشخص شده در شکل زیر، تعیین کنید:

الف) نیروی وارد بر نابجایی (۲) ناشی از نابجایی (۱)

ب) نابجایی (۲) در کدام جهت صعود و/یا لغزش می‌کند؟

ج) وابستگی دمایی و تنشی این دو فرایند را توضیح دهید و تحت کدام شرایط هر کدام از آن‌ها در خزش شرکت می‌کند.



(1) $\boldsymbol{s} = \lvert 001 \rvert, \boldsymbol{b} = b \lvert 100 \rvert$

(2) $\boldsymbol{s} = \lvert 00\bar{1} \rvert, \boldsymbol{b} = b \lvert 0\bar{1}0 \rvert$

۷-۱۲ یک نابجایی لبه‌ای با ویژگی‌های $s = k$ و $b = bj$، در روی صفحه‌ی $x = X$ قرار دارد. مختصات‌های yی بیشینه و کمینه نیروهای لغزش و صعود (به صورت جداگانه) که می‌تواند ناشی از نابجایی ثابت شده در مبدأ ($s = k$) مشاهده شود را برای سه مورد زیر محاسبه کنید:

الف) $b = bi$

ب) $b = bj$

ج) $b = b\left(\frac{1}{2}i + \frac{\sqrt{3}}{2}j\right)$

۷-۱۳ یک نابجایی لبه (۱) با $s = [001]$ و $b = [001]$ در مبدأ یک سیستم مختصات قرار داده شده است. نابجایی لبه‌ای دیگر (۲) با $s = [001]$ و $b = [\sqrt{2}\sqrt{2}0]$ در فاصله ی r از نابجایی (۱) و در زاویه‌ی ۴۵ درجه‌ای از محور x قرار گرفته است.

الف) نیروی لغزش و صعود روی نابجایی (۲) ناشی از نابجایی (۱) را محاسبه کنید.

ب) نموداری از نیروی روی نابجایی (۲) را به صورت تابعی از θ (برای یک r مشخص)برای $0 \leq \theta \leq 2\pi$ رسم کنید.

۷-۱۴ نیروی موضعی روی نابجایی (۲) ناشی از نابجایی (۱) برای چهار مثال از برهم‌کنش میان دو نابجایی عمود لیست شده در زیر را محاسبه کنید:

$$s_1 = [001] \qquad s_2 = [010]$$

$$b_1 = \begin{cases} [100] \\ [100] \\ [100] \\ [010] \end{cases} \qquad b_2 = \begin{cases} [100] \\ [010] \\ [001] \\ [010] \end{cases}$$

که نابجایی اول از میان $x = y = 0$ عبور می‌کند و موازی محور z است و نابجایی دوم از میان $x = X$ و $z = 0$ عبور می‌کند و موازی با محور y است.

الف) نشان دهید که نیروی کلی روی نابجایی (۲) در تمام موارد ناپدید می‌شود.

ب) اگر نابجایی قادر به خم شدن باشد، شکل آن را به صورت فرضی رسم کنید به شرط آن‌که نابجایی اول عبوری از مبدأ به صورت مستقیم باقی بماند.

مراجع

1. Weertman J, Weertman J (1964) Elementary Dislocation Theory. Macmillian, London.
2. Hull D, Bacon DJ (1984) Introduction to Dislocations. Pergamon, Oxford.
3. Friedel J (1964) Dislocations. Pergamon, New York.
4. Hirth JP, Lothe J (1982) Dislocations in Crystals, 2nd edn.Wiley Interscience, New York.
5. Reed-Hill RE, Abbaschian R (1994) Physical Metallurgy Principles, 4th edn. PWS, Boston.
6. Hull D, Bacon DJ (2001) Introduction to Dislocations, 4th edn. Butterworth Heinemann, Philadelphia.
7. Dieter GE (1976) Mechanical Metallurgy, 2nd edn. McGraw-Hill, New York, p 180.
8. Osetsky YuN, Stoller RE, Matsukawa Y (2004) J Nucl Mater 329–333:1228–1232.
9. Bacon DJ, Osetsky YuN, Stoller RE, Voskoboinikov RE (2003) J Nucl Mater 323:152–162.
10. Bacon DJ, Gao F, Osetsky YuN (2000) J Nucl Mater 276:1–12.
11. Phythian WJ, Stoller RE, Foreman AJE, Calder AF, Bacon DJ (1995) J Nucl Mater 223:245–261.
12. Osetsky YuN, Bacon DJ, Serra A, Singh BN, Golubov SI (2000) J NuclMater 276:65–77.
13. Osetsky YuN, Bacon DJ, Singh BN, Wirth B (2002) J Nucl Mater 307–311:852–861.
14. Stoller RE (2000) J Nucl Mater 276:22–32.
15. Jenkins ML, Kirk MA (2001) Characterization of Radiation Damage by Transmission Electron Microscopy. Institute of Physics, Philadelphia, PA.
16. Kiritani M (1994) J Nucl Mater 216:200–264.
17. Wirth BD, Odette GR, Marondas D, Lucas GE (2000) J Nucl Mater 276:33–40.
18. Johnson RA (1967) Phil Mag 16(141):553.
19. Jossang T, Hirth JP (1966) Phil Mag 13:657.
20. Kelly BT (1966) Irradiation Damage to Solids. Pergamon, New York.
21. Zinkle SJ, Singh BN (1993) J Nucl Mater 199:173–191.
22. Russell KC, Powell RW (1973) Acta Meta 21:187.
23. Stoller RE, Odette GR (1987) In: Gerner FA, Packan NH, Kumar AS (eds) Radiation-Induced Changes in Microstructure: 13th International Symposium (Part I), ASTM STP 955. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, pp 358–370.

24. Golubov SI, Ovcharenko AM, Barashev AV, Singh BN (2001) Phil Mag A 81(3):643–658.
25. Ghoniem NM, Sharafat S (1980) J Nucl Mater 92:121–135.
26. Semenov AA, Woo CH (2003) Phil Mag 813:3765–3782.
27. Pokor C, Brecht Y, Dubuisson P, Massoud JP, Barbu A (2004) J Nucl Mater 326:19–29.
28. Duparc AH, Moingeon C, Smetniansky-de-Grande N, Barbu A (2002) J Nucl Mater 302:143.
29. Soneda N, Diaz de la Rubia T (1998) Phil Mag A 78(5):995.
30. Osetsky YN, Serra A, Victoria M, Golubov SI, Priego V (1999) Phil Mag A 79(9):2285.
31. Garner FA, Kumar AS (1987) Radiation-Induced Changes in Microstructure: 13th International Symposium (Part I), ASTM STP 955. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, pp 289–314.
32. Stoller RE, Odette GR (1987) In: Garner FA, Packan NH, Kumar AS (eds) Radiation-Induced Changes in Microstructure: 13th International Symposium (Part I), ASTM STP
955. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, p 371.
33. Eyre BL, Bullough R (1965) Phil Mag 12:31.
34. Garner FA, Wolfer WG (1982) In: Brager HR, Perrin JS (eds) Effects of Radiation on Materials: 11th Conference, ASTM STP 782. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, p 1073.
35. Garner FA (1994) In: Frost BRT (ed) Materials Science and Technology, chap 6, vol 10A. VCH, New York, p 419.
36. Zinkle SJ, Maziasz PJ, Stoller RE (1993) J Nucl Mater 206:266–286.
37. Mansur LK (1994) J Nucl Mater 216:97–123.
38. Edwards DJ, Simonen EP, Bruemmer SM (2003) J Nucl Mater 317:13–31.

۸

حباب‌ها و حفره‌های القایی تابشی

تشکیل و رشد *حفره‌ها* و *حباب‌ها* یکی از نکات حایز اهمیت برای عملکرد مواد در محیط‌های تابشی در دماهای بالا است. اولین بررسی‌ها در مورد حفره‌ها در فلزات پرتودیده به وسیله‌ی کاتورنه[1] و فولتون[2] در سال ۱۹۶۷ به چاپ رسید [۱]. حفره‌ها می‌توانند تأثیر عمیقی را روی ویژگی‌های مواد داشته باشند زیرا هنگامی که حفره‌ها تشکیل شوند و رشد کنند، جامدات تحت تورم حجمی[3] قرار می‌گیرند. رآکتور زاینده‌ی امریکا به علت این مشاهدات شگفت‌انگیز وقفه‌ای ده ساله را در پیشرفت تجربه کرده است، زیرا در آن زمان تلاش‌های بسیاری برای فهم این پدیده و عواقب آن روی مواد درونی رآکتور انجام شده است. شکل ۸-۱ مثال‌هایی از حفره‌ها در فولاد زنگ نزن، آلومینیوم و منیزیم را نشان می‌دهد. حفره‌هایی در این اندازه و دانسیته می‌توانند منجر به افزایش ده درصدی در حجم شود که در نتیجه تغییرات قابل توجهی را در ابعاد طولی ایجاد می‌کنند.

1.Cauthorne
2.Fulton
3.Volumetric Swelling

اغلب تشکیل و رشد حفره‌ها با حباب‌ها مشترک هستند. با وجود این به علت ماهیتشان ـ یک تهی جایی در اصل یک حفره‌ی خالی است ــ مکانیکِ حباب بسیار پیچیده‌تر است. هنگامی که فلزات مشخص پرتودهی می‌شوند،گازهای غیرقابل حل تشکیل شده به وسیله‌ی استحاله منجر به تشکیل حباب‌ها در فلزات پرتودهی شده می‌شوند. تحت پرتودهی، تشکیل تعداد بیش‌تری از حباب‌های گازهای خنثی امکان‌پذیر است که به صورت قابل توجهی ویژگی‌های فیزیکی و مکانیکی فلزات را تغییر می‌دهند. رآکتورهای نوع حرارتی و سریع از طریق استحاله، هلیوم تولید می‌کنند و دیواره‌ی اول یک رآکتور گداخت به علت بارگیری گازی بالا از محصولات واکنش در پلاسما، بسیار مستعد به حباب‌دار شدن است. مثال‌های متعددی در سیستم‌های رآکتوری وجود دارد که حباب‌ها تشکیل شده و ویژگی‌های مواد را تغییر داده‌اند، یکی از مهمترین آن‌ها مواد ساختمانی رآکتورهای شکافت هستند. در این فصل تئوری جوانه‌زنی و رشد حفره و حباب مورد بحث قرار می‌گیرد و به همراه آن عوامل بسیار مهمِ مؤثر بر فرایندها در سیستم رآکتورها ارایه خواهد شد.

۸-۱ جوانه‌زنی حفره

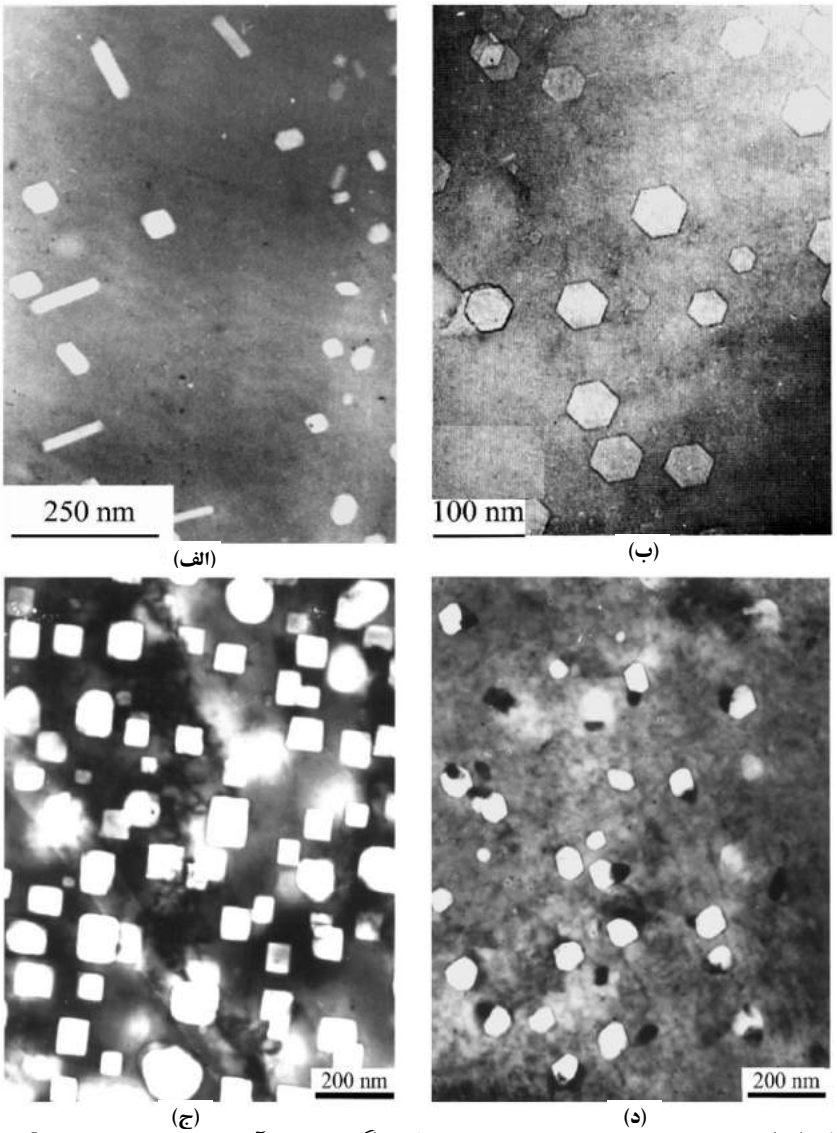
نیرو محرکه برای تشکیل حفره‌ها در جامدات، فوق اشباع جاهای خالی به علت پرتودهی است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۱-۸)

$$S_{\mathrm{v}} = \frac{C_{\mathrm{v}}}{C_{\mathrm{v}}^{0}} ,$$

که C_{v}^{0} غلظت تعادل حرارتی جاهای خالی است. در طول پرتودهی، عیوب به منظور تشکیل خوشه‌ها واکنش می‌دهند و خوشه‌ها نیز به وسیله‌ی جذب عیوب از نوع مشابه رشد کرده یا به وسیله‌ی جذب عیوب نوع مخالف منقبض می‌شوند. برای آن‌که یک خوشه از جاهای خالی به صورت حفره رشد کند، باید افزایش خالصی در تعداد جاهای خالی جذب شده از تعداد بین‌نشین‌های جذب شده وجود داشته باشد. در نتیجه باید تابع توزیع تعادلی حفره، $\rho^{0}(n)$ (که n تعداد جاهای خالی در حفره است) که به وسیله‌ی یک فوق اشباعی از جاهای خالی در جامد گسترش پیدا کرده است، بررسی شود. تابع توزیع، تعداد خوشه‌های جای خالی در هر دسته اندازه را مشخص می‌کند. تحت شرایط غیرتعادلی

یک شار خالص J از حفره‌هایی از یک دسته اندازه به دسته اندازه‌ی بزرگ‌تر بعدی وجود دارد. این جریانِ جوانه‌زنی و کمیتی است که باید محاسبه شود. سپس حضور یک گاز خنثی در فرایند جوانه‌زنی مورد توجه قرار می‌گیرد.



شکل ۸-۱. تصاویر حفره‌های القایی تابشی در (الف) فولاد زنگ نزن، (ب) آلومینیوم، (ج) و (د) منیزیوم [۲، ۳].

۸-۱-۱ توزیع اندازه‌ی حفره‌ی تعادلی

در مقایسه با مورد عیوب نقطه‌ای (بحث شده در فصل ۴) و مطالب استخراج شده در مرجع [۴]، توزیع تعادلی اندازه‌ی حفره از تغییر در انرژی آزاد گیبس یک سیستم حاوی توزیع $\rho^0(n)$ از خوشه‌های جای خالی تعیین می‌شود:

(۸-۲)

$$G = G_0 + \sum_n \rho^0(n) G_n - kT \sum_n \ln w_n \ ,$$

که G_0 انرژی آزاد شبکه‌ی کامل است، عبارت دوم کار انجام شده برای تشکیل توزیع حفره و عبارت آخر سهم بی‌نظمی در تعداد راه‌هایی است که حفره‌ها می‌تواند در شبکه توزیع شوند. کمیت G_n انرژی آزاد مورد نیاز برای تشکیل یک حفره با اندازه‌ی n است:

(۸-۳)

$$G_n = H_n - TS_n = E_n + pv_n - TS_n \ ,$$

که E_n انرژی مورد نیاز برای تشکیل یک حفره از n جای خالی، v_n تغییر حجم ($= n\Omega$)، p تنش هیدروستاتیک، S_n افزایش بی‌نظمی مرتبط با فرایند و w_n تعداد راه‌های حذف $\rho^0(n)$ حفره با اندازه‌ی n از جامد است. با نادیده گرفتن دو عبارت آخر در سمت راست $E_n \cong G_n$ است.

برای مقادیر بالای n، انرژی حفره به صورت مناسبی با انرژی سطحی نشان داده شود:

(۸-۴)

$$E_V = 4\pi R_V^2 \gamma \ ,$$

که γ انرژی سطحی جامد در واحد سطح و R_V شعاع حفره است که وابسته به تعداد جاهای خالی در حفره است:

(۸-۵)

$$n = \frac{4\pi R_V^3}{3\Omega} \ ,$$

که در این رابطه Ω حجم اتمی است. باید دقت شود که معادله‌ی ۸-۴ مشابه معادله‌ی ۷-۵۸ برای مورد حدی یک جای خالی، معادله‌ی ۴-۲۲،است. به هر جهت معادله‌ی ۸-۴ تقریبی است زیرا انرژی باید عبارات مناسبی را برای انقباض سطحی و انرژی کشسان ذخیره شده در جامد (معادله‌ی ۴-۲۳ ملاحظه شود) دربر داشته باشد. با ترکیب معادله‌های ۸-۴ و ۸-۵ معادله‌ی ۸-۶ نتیجه می‌شود:

(۸-۶)

$$E_n = (36\pi\Omega^2)^{1/3}\gamma n^{2/3} .$$

عبارت آخر در معادله‌ی ۸-۲ حاصل‌ضرب دما و بی‌نظمی اختلاط است. این عبارت می‌تواند با محاسبه‌ی تعداد راه‌های ممکن محاسبه شود که حفره‌ها در یک بلور حاوی N_0 موقعیت شبکه در واحد حجم توزیع می‌شوند. طرز کار شبیه به فرایند مورد استفاده برای جاهای خالی در قسمت ۴-۲ است و در نتیجه:

(۸-۷)

$$w_n = \frac{n^{\rho^0(n)}(N_0/n)!}{(N_0/n-\rho^0(n))!(\rho^0(n))!} .$$

اکنون پتانسیل شیمیایی یک حفره با اندازه‌ی n به صورت μ_n تعریف می‌شود که مرتبط با انرژی آزاد گیبس است:

(۸-۸)

$$\mu_n = \left.\frac{\partial G}{\partial \rho^0_{(n)}}\right|_{T,p,n} .$$

با جایگذاری معادله‌ی ۸-۷ در معادله‌ی ۸-۲، با استفاده از تقریب استرلینگ برای عبارت فاکتوریل در معادله‌ی ۸-۷، و مشتق‌گیری با توجه به معادله‌ی ۸-۸ (از آن‌جایی که $\Delta G = G - G_0$، $\partial G = \partial \Delta G$) می‌توان نوشت:

(۹-۸)

$$\mu_n = E_n + kT \ln \left[\frac{\rho^0(n)}{N_0} \right] .$$

$\rho^0(n)$ در مقایسه با N_0 نادیده گرفته می‌شود زیرا غلظت حفره پایین است. برای تک جاهای خالی ($n = ۱$) معادله‌ی ۸-۹ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۰-۸)

$$\mu_{\mathrm{v}} = E_{\mathrm{v}} + kT \ln \left(\frac{C_{\mathrm{v}}}{N_0} \right) .$$

از آن‌جایی که غلظت تعادلی جاهای خالی در یک جامد به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۱۱-۸)

$$C_{\mathrm{v}}^0 = N_0 \exp \left(\frac{-E_{\mathrm{f}}^{\mathrm{v}}}{kT} \right) ,$$

با جایگذاری N_0 از معادله‌ی ۸-۱۱ در داخل معادله‌ی ۸-۱۰ می‌توان نوشت:

(۱۲-۸)

$$\mu_{\mathrm{v}} = kT \ln \left(\frac{C_{\mathrm{v}}}{C_{\mathrm{v}}^0} \right) = kT \ln S_{\mathrm{v}} .$$

تعادل شیمیایی زمانی حاصل می‌شود که پتانسیل شیمیایی واکنش دهنده‌ها و محصولات در سیستم برابر شوند به عبارت دیگر:

(۱۳-۸)

$$n\mu_{\mathrm{v}} = \mu_n .$$

با جایگذاری معادله‌های ۸-۹ و ۸-۱۲ در معیارِ تعادل شیمیایی، معادله‌ی ۸-۱۳، نتیجه می‌شود که:

(۱۴-۸)

$$\rho^0(n) = N_0 \exp(n \ln S_v - \xi n^{2/3}) ,$$

که

(۱۵-۸)

$$\xi = (36\pi\Omega^2)^{1/3} \frac{\gamma}{kT} .$$

با جایگذاری معادله‌ی ۸-۱۵ در معادله‌ی ۸-۱۴ و فقط در نظر گرفتن عبارت داخل توان می‌توان نوشت:

(۱۶-۸)

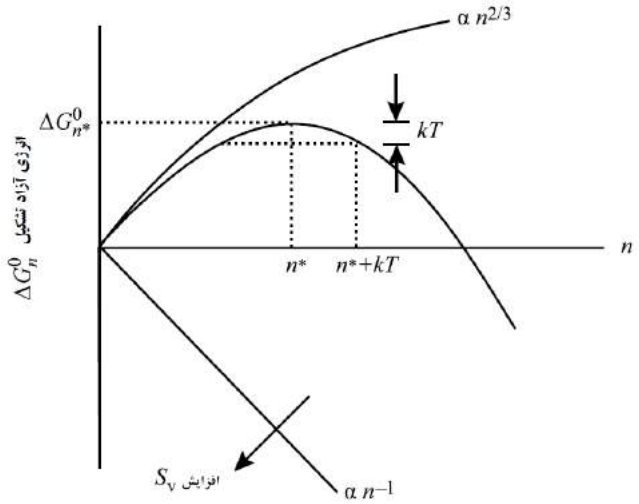
$$n \ln S_v - \xi n^{2/3} = n \ln S_v - \frac{(36\pi\Omega^2)^{1/3} \gamma n^{2/3}}{kT} .$$

با بیان معادله‌ی ۸-۱۴ به صورت $\rho^0(n) = N_0 \exp(-\frac{\Delta G_n^0}{kT})$ عبارت زیر به‌دست می‌آید:

(۱۷-۸)

$$\Delta G_n^0 :$$
$$\Delta G_n^0 = -nkT \ln S_v + (36\pi\Omega^2)^{1/3} \gamma n^{2/3} ,$$

که فقط تغییر انرژی آزاد در جامد ناشی از تشکیل یک حفره‌ی کروی در برگیرنده‌ی n جای خالی در موقعیت‌های مشخص است. شماتیکی از معادله‌ی ۸-۱۷ در شکل ۸-۲ نشان داده شده است که در آن انرژی آزاد به صورت تابعی از تعداد جاهای خالی در یک حفره رسم شده است. قابل ذکر است که عبارت اول به صورت خطی با n کاهش می‌یابد درحالی‌که عبارت دوم به صورت $n^{2/3}$ افزایش می‌یابد. با محاسبه‌ی بزرگی ضرایب در هر عبارت، نتیجه‌ی کلی یک منحنی با بیشینه‌ای در مقدار n^*



شکل۸-۲. نمایش شماتیک از ΔG_n^0، انرژی آزاد تشکیل یک حفره‌ی کروی شامل n جای خالی و اثر نوسانات حرارتی روی اندازه‌ی بحرانی جوانه‌ی حفره.

است. این اندازه‌ی بحرانی برای یک نطفه‌ی حفره است که برای رشد نطفه و تبدیل به یک حفره باید به‌دست آید. در نقطه‌ی بحرانی، اضافه شدن یا حذف جای خالی منجر به کاهش در انرژی آزاد گیبس برای سیستم می‌شود، در نتیجه این یک نقطه‌ی ناپایدار است. در بالای اندازه‌ی بحرانی اضافه شدن جاهای خالی به نطفه باعث کاهش در انرژی آزاد گیبس می‌شود که به این معنی است که در این منطقه رشد حفره مساعد است، درحالی‌که اتلاف جای خالی باعث افزایش در انرژی آزاد می‌شود که در نتیجه واکنش مطلوب نیست. قابل ذکر است که نوسانات حرارتی منجر به افزایش در اندازه‌ی نطفه می‌شود و اندازه‌ی بحرانی را به مقادیر بالاتر انتقال می‌دهند و در نتیجه جوانه‌زنی یک حفره پایدار را سخت‌تر می‌کنند.

۸-۱-۲ نرخ جوانه‌زنی حفره

نرخ جوانه‌زنی نطفه‌های حفره (شامل n جای خالی) می‌تواند با استفاده از فرمول‌بندی مشابهی توصیف شود که برای توضیح جوانه‌زنی حلقه جای خالی در فصل ۷ توضیح و در مرجع‌های [۵، ۶، ۷] توسعه داده شد. به هر جهت به علت پیوستگی مشتق‌گیری برای مورد نطفه‌های حفره تکرار خواهد شد. از

معادله ۷-۷۴ یادآوری می‌شود که نرخ جوانه‌زنی یک نطفه‌ی حفره با اندازه‌ی n با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

(۸-۱۸)

$$J_n = \rho^0(n)\beta_v(n)Z\,,$$

که $\rho^0(n)$ غلظت حفره‌ها با اندازه‌ی n جای خالی است، $\beta_v(n)$ نرخ جذب و Z، ضریب زولدویچ (تعریف شده در قسمت ۷-۶-۱) است و غلظت جاهای خالی به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۸-۱۹)

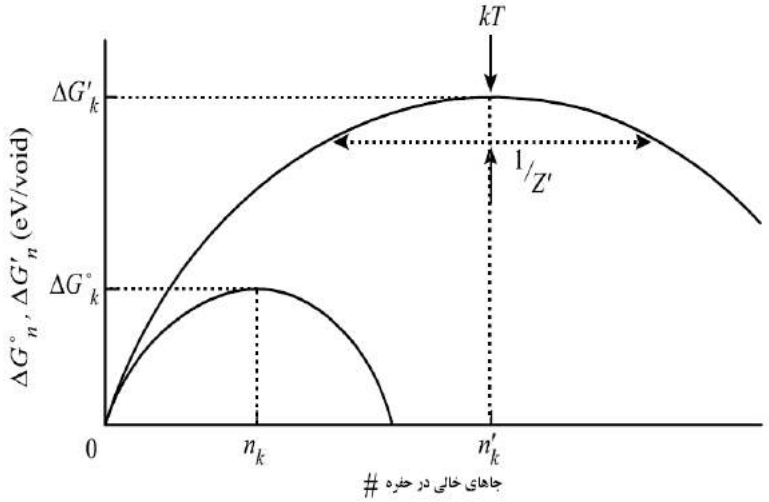
$$\rho^0(n) = N_0 \exp\left(\frac{-\Delta G_n^0}{kT}\right)\,,$$

که N_0 تعداد موقعیت‌هایی است که حفره‌ها می‌توانند در آن تشکیل شوند و ΔG_n^0 تغییر انرژی آزاد در جامد در طول تشکیل حفره است و در معادله‌ی ۸-۱۷ مشخص شده است. مقدار ΔG_n^0 برای اندازه‌ی بحرانیِ نطفه‌ی حفره، ΔG_k^0 (برای نطفه‌ی n_k اندازه)، برابر با سد فعال‌سازی برای تشکیل حفره‌هاست که در شکل ۸-۳ با منحنی پایینی نشان داده شده و به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۸-۲۰)

$$\Delta G_k^0 = -n_k kT \ln S_v + (36\pi\Omega^2)^{1/3}\gamma n_k^{2/3}\,.$$

نرخ جوانه‌زنی حفره برابر با جریان جوانه‌زنی مشخص شده در معادله‌ی ۸-۱۸ است. جریان جوانه‌زنی حفره، J_n، و سد فعال‌سازی، ΔG_k^0 به موردی اعمال می‌شود که فقط جاهای خالی حضور داشته باشند. به هر جهت تحت پرتودهی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در تعداد برابری تولید می‌شوند در نتیجه حضور بین‌نشین‌ها باید محاسبه شود. اکنون موردی بررسی می‌شود که در آن بین‌نشین‌ها نیز می‌توانند روی حفره‌ها برخورد کرده و حفره‌زایی کنند. تحلیل این مورد شبیه به تحلیل نشان داده شده است؛ اما به علت معرفی گونه‌ی دیگر که ممکن است جوانه‌زنی حفره را دشوارتر کند بسیار پیچیده‌تر است.



شکل۸-۳. شماتیک منحنی‌های جوانه‌زنی نشان دهنده‌ی عوامل مختلف است که در جوانه‌زنی حفره حایز اهمیت هستند. ΔG^0_k سد فعال‌سازی برای جوانه‌زنی است، درحالی‌که $\Delta G'_k$ کمیت مشابه در صورت حضور بین‌نشین‌ها در طول فرایند جوانه‌زنی است.

اکنون جوانه‌زنی خوشه‌های جای خالی روی یک نوع مشخص از موقعیت جاذب[۶،۵،۴] مانند میدان تنش فشاری در اطراف یک نابجایی مورد بررسی قرار می‌گیرد. فرضیات زیر در نظر گرفته می‌شود:

۱. شبکه در تعادل حرارتی و دینامیکی است، که حداقل تأثیرپذیری به وسیله‌ی جابه‌جایی و میخچه‌های حرارتی را داشته باشد.
۲. جاهای خالی‌تکی و بین‌نشین‌های تکی حل شونده، تنها عیوب نقطه‌ای متحرک حاضر هستند.
۳. عیوب از ترمودینامیک محلول‌های رقیق پیروی می‌کنند.
۴. یک غلظت حالت پایدار از جاهای خالی و بین‌نشین‌ها وجود دارد.

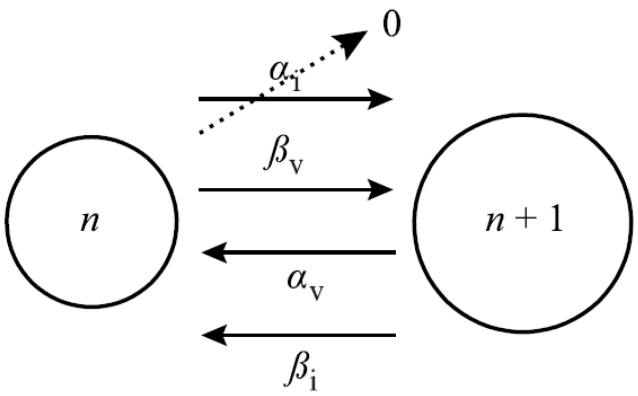
فرضیه‌ی ۱ منطقی است زیرا عمر میخچه‌های حرارتی بسیار کوتاه است ($۱۰^{-۱۲}$s) و تعادل دینامیکی در بازه زمانی مشابهی به وجود می‌آید. فرضیه‌ی ۲ در حالت کلی صادق نیست زیرا اغلب، اتم‌های گازی موجود هستند و نقش مهمی را در جوانه‌زنی ایفا می‌کنند (در بخش ۸-۱-۳ مورد بررسی قرار گرفت). فرضیه‌ی ۳ باید برای غلظت پایین عیب صادق باشد (کسر اتمی $\leq ۱۰^{-۴}$). فرضیه‌ی نهایی یک

ساده‌سازی کلی نادرست است زیرا با افزایش مقدار مجاز پرتوگیری، غلظت عیوب به صورت پیوسته تغییر می‌کند.

استخراج معادله‌ی نرخ جوانه‌زنی حفره از ملاحظات جنبشی، بسیار شبیه به نتیجه‌ی به‌دست آمده برای حلقه‌ها است که در آن نرخ جوانه‌زنی به صورت شار خوشه‌های بین دسته اندازه‌های نزدیک به هم در یک فضای فازی از اندازه خوشه، بیان شده است. شار برابر با حاصل‌ضرب غلظت در سرعت یا حاصل‌ضرب غلظت، فرکانس پرش و فاصله‌ی پرش است. شار بین هر دو دسته اندازه‌ی n و $n+1$ برابر است با:

(۸-۲۱)

$$J_n = \beta_{\mathrm{v}}(n)\rho(n) - \alpha_{\mathrm{v}}(n+1)\rho(n+1) - \beta_{\mathrm{i}}(n+1)\rho(n+1)\,,$$



شکل ۸-۴. نمایش فرایندهای کنترل کننده‌ی شار بین اندازه‌ی حفره‌های نزدیک به هم در یک فضای فازی از اندازه‌ی حفره.

که $\rho(n)$ و $\rho(n+1)$ تعداد مدار n (حفره‌های حاوی یک شبکه از n جای خالی) و مدار$(n+1)$ در واحد حجم است. $\beta_{\mathrm{v}}(n)$ نرخ به دام‌اندازی جاهای خالی به وسیله‌ی مدار n است، $\alpha_{\mathrm{v}}(n+1)$ و $\beta_{\mathrm{v}}(n+1)$ نرخ‌های اتلاف و به دام‌اندازی بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی مدار $(n+1)$ است. عبارت اول در معادله‌ی ۸-۲۱ افزایشی را در دسته‌ی $n+1$ اندازه با به دام‌اندازی یک جای خالی به وسیله‌ی یک حفره‌ی دسته اندازه‌ی n- مدار نشان می‌دهد. عبارت دوم اتلاف از دسته‌ی اندازه‌ی $(n+1)$- مدار به

وسیله‌ی اتلاف یک جای خالی را نشان می‌دهد و عبارت سوم اتلاف از دسته اندازه $(n+1)$ مدار به وسیله به دام اندازی یک بین‌نشین است. نشر بین‌نشینی بسیار غیرمحتمل است و نادیده گرفته می‌شود. شکل ۸-۴ فرایندهای مختلف توصیف شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۸-۲۱ در فضای فازی را نشان می‌دهد. تنظیم $J=0$ در معادله‌ی ۸-۲۱، برابر با متعادل‌سازی دسته اندازه‌ها است زیرا هیچ‌گونه شار خالصی بین دسته اندازه‌ها وجود ندارد (هم‌چنان که در بخش ۷-۶ انجام شد). اگر بین‌نشین‌ها در نظر گرفته نشوند، در نتیجه معادله‌ی ۸-۲۱ می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۸-۲۲)

$$\alpha_{\mathrm{v}}(n+1)=\frac{\beta_{\mathrm{v}}(n)\rho^{0}(n)}{\rho^{0}(n+1)}\ .$$

با ترکیب معادله‌ی ۸-۲۱ و ۸-۲۲ معادله‌ی ۸-۲۳ نتیجه می‌شود:

(۸-۲۳)

$$J_n=\beta_{\mathrm{v}}(n)\left\{\rho(n)-\rho(n+1)\left[\frac{\rho^{0}(n)}{\rho^{0}(n+1)}+\frac{\beta_{\mathrm{i}}(n+1)}{\beta_{\mathrm{v}}(n)}\right]\right\}\ .$$

از آن‌جایی که $\rho^{0}(n)=N_0\exp(-\frac{\Delta G_n^0}{kT})$ است، در نتیجه می‌توان نوشت:

(۸-۲۴)

$$\frac{\rho^{0}(n)}{\rho^{0}(n+1)}=\exp\left(\frac{\delta G_n^0}{kT}\right)\ ,$$

که $\partial G_n^0=\Delta G_{n+1}^0-\Delta G_n^0$ است. اکنون توابع جدیدی از n، $\rho'(n)$ و $\partial G_n'$ که قابل مقایسه با معادله‌ی ۸-۲۴ باشند، تعریف می‌شوند:

(۸-۲۵)

$$\frac{\rho'(n)}{\rho'(n+1)}=\frac{\rho^{0}(n)}{\rho^{0}(n+1)}+\frac{\beta_{\mathrm{i}}(n+1)}{\beta_{\mathrm{i}}(n)}=\exp(\delta G_n'/kT)\ ,$$

که

$$\delta G'_n = \Delta G'_{n+1} - \Delta G'_n \ , \tag{۸-۲۶}$$

و $\Delta G'_n$ به علت وجود عبارت $\frac{\beta_i(n+1)}{\beta_i(n)}$ در معادله‌ی ۸-۲۵، در اصل انرژی آزاد نیست. با استفاده از بیان معادله‌ی ۸-۲۵، می‌توان با جایگذاری معادله‌ی ۸-۲۵ در داخل معادله‌ی ۸-۲۳ معادله را برای J_n برحسب $\frac{\rho'(n+1)}{\rho'(n)}$ بازنویسی کرد و در نتیجه:

$$J_n = \beta_v(n)\left\{\rho(n) - \rho(n+1)\frac{\rho'(n)}{\rho'(n+1)}\right\} \ . \tag{۸-۲۷}$$

با مرتب کردن معادله‌ی ۸-۲۷ به‌دست می‌آید:

$$J_n = -\beta_v(n)\rho'(n)\left[\frac{\rho(n)}{\rho'(n)} - \frac{\rho(n+1)}{\rho'(n+1)}\right] \ , \tag{۸-۲۸}$$

قابل ذکر است که:

$$\frac{\left[\frac{\rho(n)}{\rho'(n)} - \frac{\rho(n+1)}{\rho'(n+1)}\right]}{\Delta n} = \frac{\partial\left(\frac{\rho(n)}{\rho'(n)}\right)}{\partial n} \ , \tag{۸-۲۹}$$

و در نتیجه:

$$J_n = -\beta_v(n)\rho'(n)\frac{\partial\left[\rho(n)/\rho'(n)\right]}{\partial n} \ , \tag{۸-۳۰}$$

که معادله‌ی اصلی شار است. با باز آرایشی معادله‌ی ۸-۲۵ و گرفتن لگاریتم طبیعی از دو طرف و جمع از $j = 0$ تا n-1 می‌توان نوشت:

(۸-۳۱)

$$\sum_{j=0}^{n-1} \ln\left(\frac{\rho'(j)}{\rho'(j+1)}\right) = \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ -\ln\left[\frac{\beta_{\mathrm{i}}(j+1)}{\beta_{\mathrm{v}}(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT}\right)\right]\right\},$$

و

(۸-۳۲)

$$\ln\left(\frac{\rho'(n)}{\rho'(0)}\right) = \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ -\ln\left[\frac{\beta_{\mathrm{i}}(j+1)}{\beta_{\mathrm{v}}(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT}\right)\right]\right\}.$$

می‌توان دو شرط مرزی متفاوت را شناسایی کرد. اولی کمیت $\rho'(0)$ است که ممکن است با در نظر گرفتن این نکته که هم‌چنان که $\frac{\beta_{\mathrm{i}}(n)}{\beta_{\mathrm{v}}(n)} \to 0$ میل می‌کند، $\rho'(0) = \rho^0(0)$ است، مورد ارزیابی قرار گیرد وآن‌که $\rho^0(0) \to N_0$ فقط تعداد موقعیت‌های جوانه‌زنی در واحد حجم است. از آن‌جایی که N_0 (و از آن‌رو $\rho'(0)$) مستقل از غلظت حفره است می‌توان نوشت:

(۸-۳۳)

$$\begin{aligned}\ln\left(\frac{\rho'(n)}{\rho'(0)}\right) &= \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ -\ln\left[\frac{\beta_{\mathrm{i}}(j+1)}{\beta_{\mathrm{v}}(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT}\right)\right]\right\} \\ &= \frac{-\Delta G_n'}{kT}.\end{aligned}$$

از آن‌جایی که $\frac{\beta_{\mathrm{i}}(n)}{\beta_{\mathrm{v}}(n)} \to 0$ میل می‌کند، $\rho'(0) \to \rho^0(0)$ میل خواهد کرد و $\rho^0(0)$ فقط برابر با N_0، تعداد موقعیت‌های جوانه‌زنی در واحد حجم است در نتیجه:

(۳۴-۸)

$$\rho'(n) = N_0 \exp\left(\frac{-\Delta G'_n}{kT}\right) ,$$

و ΔG^0_n سد فعال‌سازی بدون بین‌نشین‌ها و $\Delta G'_n$ سد فعال‌سازی با بین‌نشین‌ها هستند.
منحنی بالایی در شکل ۸-۲، $\Delta G'_n$ را به صورت تابعی از n نشان می‌دهد. قابل ذکر است که $\Delta G'_n$ از ΔG^0_k بزرگ‌تر است و به علت اثر ممانعت کنندگی بین‌نشین‌ها روی فرایند جوانه‌زنی حفره یک اندازه حفره بزرگ‌تری را نیاز دارد. نقطه‌ی بیشینه در هر دو منحنی در n_k، ΔG^0_k و n'_k، $\Delta G'_k$ رخ می‌دهد.
اکنون ممکن است که نرخ جوانه‌زنی حالت پایدار حفره از بیان J_n در معادله‌ی ۸-۳۰ محاسبه گردد:

(۳۵-۸)

$$J_k = Z' \beta_k \rho'_k ,$$

که نرخی است که در آن حفره‌ها در واحدهایی از (voids/cm^{3}s) از تمام سدهای پتانسیلی با ارتفاع $\Delta G'_k$ عبور می‌کنند. عبارت β_k نرخ برخوردهای جاهای خالی تکی روی یک حفره با اندازه‌ی n'_k است. اگر فرض شود که خوشه‌ها کروی باشند، سپس نرخ حفره‌زایی[1] جای خالی به وسیله‌ی ثابت سرعتی برای جذب عیوب نقطه‌ای به وسیله‌ی چاهک‌های کروی، معادله‌ی ۵-۹۹ بیان می‌شود. از آن‌جایی که نطفه‌های حفره کوچک هستند، نرخ به دام‌اندازی از نوع کنترل ترکیبی است که در آن هم محدودیت‌های نرخ نفوذ و هم نرخ واکنش از نظر بزرگی قابل مقایسه هستند:

(۳۶-۸)

$$\beta_v(n) = \frac{4\pi R_V D_v C_v}{1 + a/R_V} ,$$

که a ثابت شبکه است و فرض می‌شود که سرعتی که جاهای خالی یک حفره را ترک می‌کنند به اندازه‌ی حفره و نه به غلظت جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها یا جزییات دینامیکی وابسته است. قابل ذکر

1.Impingement

است که برای حفره‌های بزرگ‌تر، $\frac{a}{R_V} \to 0$ میل می‌کند و $\beta_v(n)$ یک مشخصه‌ی نفوذی خالص دارد.

عبارت Z'، مشابه Z است؛ اما در حضور بین‌نشین‌ها برابر است با:

(۳۷-۸)

$$Z' = \left[-\frac{1}{2\pi kT} \frac{\partial^2 \Delta G'_n}{\partial n^2} \right]^{1/2}_{n'_k} .$$

زیرنویس مشخص می‌کند که مشتق دوم در $n = n'_k$ مورد ارزیابی قرار گرفته است. مقدار آن پهنای $\Delta G'_k$ در واحدهای kT در زیر بیشینه است و در حدود ۰٫۰۵ است. مشتق دوم که از معادله‌ی ۸-۲۵ مشخص شده است برابر است با:

(۳۸-۸)

$$\frac{1}{kT} \left(\frac{\partial^2 \Delta G'_n}{\partial n^2} \right)_{n'_k} = \left\{ \left[\frac{1}{kT} \frac{\partial^2 \Delta G^0_n}{\partial n^2} \right] \left[\exp \left(\frac{1}{kT} \frac{\partial \Delta G^0}{\partial n} \right) \right] \right\}_{n'_k} ,$$

که به‌دست می‌آید:

(۳۹-۸)

$$\rho'_k = N_0 \exp \left(-\Delta G'_k / kT \right) ,$$

که $\Delta G'_k$ با محاسبه‌ی معادله‌ی ۸-۳۳ در n'_k تعیین می‌شود.

از آن‌جایی که اندازه‌ی بحرانی جوانه‌ی حفره به عنوان بیشینه‌ی منحنی $\Delta G'_n$ در نظر گرفته می‌شود، با مشتق‌گیری معادله‌ی ۸-۱۷ و جایگذاری نتیجه در معادله‌ی ۸-۳۳، ارزیابی $\Delta G'_n$ ممکن می‌شود. نقطه‌ی بیشینه در $\Delta G'_n$ با تنظیم $\frac{\partial \Delta G'_n}{\partial n} = 0$ تعیین می‌شود و با حل برای n می‌توان نوشت:

$$n'_k = \frac{36\pi\gamma^3\Omega^2}{3(kT)^3\left[\ln\left(\frac{\beta_v(n)-\beta_i(n+1)}{\beta_v^0(n)}\right)\right]^3}, \qquad (۴۰-۸)$$

که $\frac{C_V}{C_V^0}=\frac{\beta_V(n)}{\beta_V^0(n)}$ است. از آن‌جایی که $R_V=(\frac{3}{4}\frac{n\Omega}{\pi})^{\frac{1}{3}}$ است، شعاع مطابق با n'_k برابر است با:

$$r'_k = \frac{2\gamma\Omega}{kT\ln\left[\left(\frac{\beta_v(n)-\beta_i(n+1)}{\beta_v^0(n)}\right)\right]}. \qquad (۴۱-۸)$$

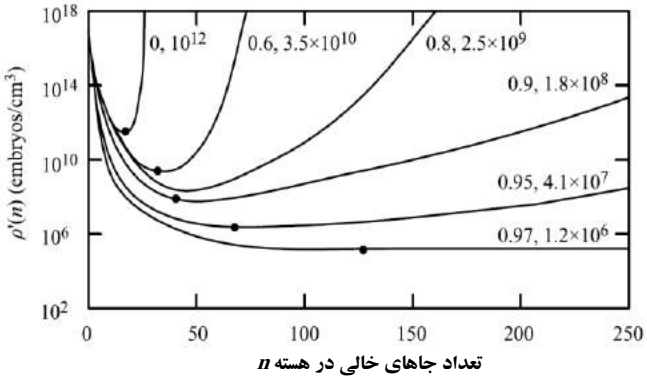
قابل ذکر است که هم‌چنان که $\beta_i \rightarrow \beta_v$ میل می‌کند، $r'_k \rightarrow \infty$ میل خواهد کرد، که بیان می‌کند که اگر نرخ به دام‌اندازی برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برابر باشد، در نتیجه لازم است که اندازه‌ی بحرانی نطفه‌ی حفره ∞ باشد.

شکل ۸-۵، $\rho'(n)$ را به صورت تابعی از اندازه‌ی خوشه‌ی n برای مقادیر مختلف (β_i/β_v) برای $S_v = ۴۳۰$ و $T = ۶۲۳^oC$ رسم کرده است. این نمودار اثر افزایش نرخ ورود بین‌نشین‌ها برای یک نرخ ورود جای خالی ثابت را نشان می‌دهد. با افزایش نسبت نرخ ورود، (β_i/β_v) شیب توزیع، $d\rho/dn$ همه‌جا کاهش می‌یابد که به این دلیل است که افزایش شار بین‌نشینی، کسر نطفه‌ها از یک اندازه‌ی مشخص n را افزایش می‌دهد که در عمل به اندازه‌ی کوچک‌تر بعدی $(n\text{-}1)$ انقباض می‌یابند. درحالی‌که برای حفظ توزیع اجباری لازم است که کسر افزایش یافته با یک غلظت کاهش یافته از جوانه‌های n اندازه از جوانه‌های $(n\text{-}1)$ اندازه متوازن شوند.

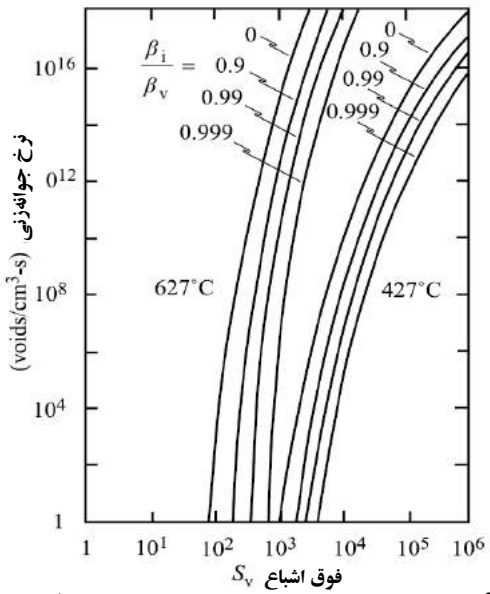
افزایش نسبت نرخ ورود، نقطه‌ی کمینه در توزیع $\rho'(n)$ را نیز به اندازه‌های بزرگ‌تر و غلظت‌های پایین‌تر منتقل می‌شود. از آن‌جایی که نرخ جوانه‌زنی متناسب با $\rho'(n)$ است، هم‌چنان که نسبت نرخ ورود افزایش می‌یابد، این کمیت به صورت نسبتاً زیادی با گود شدن و پهن شدن مینیمم در $\varphi(n)$ کاهش می‌یابد. نرخ جوانه‌زنی در شکل ۸-۵ هم‌چنان که نسبت نرخ ورود از ۰ تا ۰٫۹۷ افزایش است، در حدود ۶ برابر کاهش می‌یابد.

هم‌چنان که β_i/β_v به ۱ نزدیک می‌شود، برای به‌دست آوردن جوانه‌زنی حفره‌ی فوق اشباع جای خالی بالایی لازم است. وابستگی شدید جوانه‌زنی به فوق اشباع جای خالی فقط به صورت اندکی به وسیله‌ی

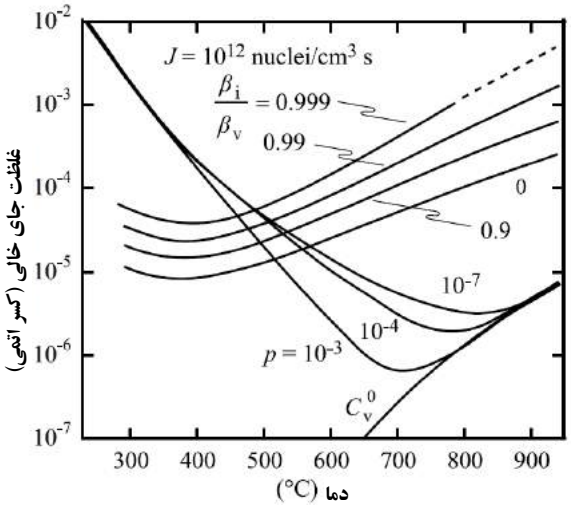
نسبت نرخ ورود تأثیر می‌پذیرد. شکل ۸-۶ نشان می‌دهد که یک افزایش ۱۰ برابری در فوق اشباع باعث می‌شود که نرخ جوانه‌زنی از ۱ تا $۱۰^{۱۵}$ $\frac{\text{جوانه}}{\text{cm}^3/\text{s}}$ در دمای ۶۲۷°C افزایش یابد.



شکل ۸-۵. غلظت نطفه‌های حفره به صورت تابعی از اندازه‌ی آن‌ها هنگامی که شار خالص نطفه‌ها صفر نگاه داشته شود. مقادیر ثابت نسبت‌های نرخ ورود β_i/β_v، و نرخ‌های جوانه زنیِ (در واحدهای $s^{-1}cm^{-3}$) سیستم بدون قید هستند. برای این مثال $S_v = ۴۳۰$ و $T = ۶۲۳^oC$ هستند. دایره‌های پررنگ روی منحنی‌ها نقطه‌ی کمینه‌ی $n(x)$ را مشخص می‌کند[۸].



شکل ۸-۶. نرخ جوانه‌زنی به صورت تابعی از فوق اشباع جای خالی. مقادیر ثابت نسبت‌های نرخ ورود، β_i/β_v و دما هستند[۸].



شکل ۸–۷. غلظت حالت پایدار جای خالی که به وسیله‌ی یک نرخ تولید $K_0 = ۱۰^{-۳}$ کسر اتمی از جفت‌های عیب در ثانیه ایجاد شده است. ضریب p روی منحنی‌ها احتمال در هر پرش است که یک عیب در چاهک‌های موجود مانند نابجایی‌ها نابود شده است. منحنی مشخص شده با C_V^0 غلظت تعادل حرارتی جاهای خالی است. مجموعه منحنی‌های مشخص شده با نسبت نرخ ورود، β_i/β_v غلظت جاهای خالی مورد نیاز برای ایجاد یک نرخ جوانه‌زنی $۱۰^{۱۲}$ (void nuclei/cm^{3}s) را نشان می‌دهد. این نرخ جوانه‌زنی در دما و غلظت جای خالی در محل تقاطع منحنی‌ها در شرایط توصیف شده به وسیله‌ی ضریب‌های منحنی به‌دست می‌آید. نرخ جوانه‌زنی در دماهایِ زیر (بالا) دمای محل تقاطع در مقادیر ثابت شده ضریب‌ها، بالاتر (پایین‌تر) خواهد بود[۸].

اثر دما روی غلظت جای خالی، C^* به وسیله‌ی مجموعه‌ای از منحنی‌های مشخص شده به وسیله‌ی نسبت‌های نرخ ورود، β_i/β_v در شکل ۸–۷ نشان داده شده است. در اکثر محدوده‌های دمایی، C^* با افزایش دما حتی اگر فوق اشباع $S_v = \frac{C_V}{C_V^0}$ کاهش یابد، افزایش می‌یابد. قابل ذکر است که C_v در دمای پایین که ضریب نفوذ کوچک است، بالا است و اتلاف زیادی وجود ندارد. C_v در دماهای میانی که نابودسازی و اتلاف در چاهک‌ها زیاد است، کوچک است؛ اما C_V در دمای بالا که $C_V^0 \sim C_V$است، بالا است. ضریب p، احتمال نابودسازی عیب در یک چاهک در هر پرش عیب است. مقادیر p از محدوده‌ی $۱۰^{-۷}$ برای نمونه‌ای از یک فلز بازپخت شده تا $۱۰^{-۳}$ برای نمونه‌ای از یک فلز به شدت کار سرد شده، متغیر است.

شکل ۸-۸ غلظت‌های حالت پایدار جای خالی را برای چندین نرخ تولید عیب، K_0، و چندین نرخ جوانه‌زنی، J، و برای یک احتمال نابودسازی ـ چاهک $۱۰^{-۷}$ و یک نسبت نرخ ورود ۰٫۹۹ را نشان می‌دهد. محل تقاطع نرخ تولید عیب و نرخ جوانه‌زنی، غلظت جای خالی در دمای محل تقاطع را نشان می‌دهد. نرخ‌های بالاتر تولید جای خالی، غلظت جای خالی را بیش‌تر افزایش داده و یک نرخ جوانه‌زنی بالاتری را ایجاد می‌کند.

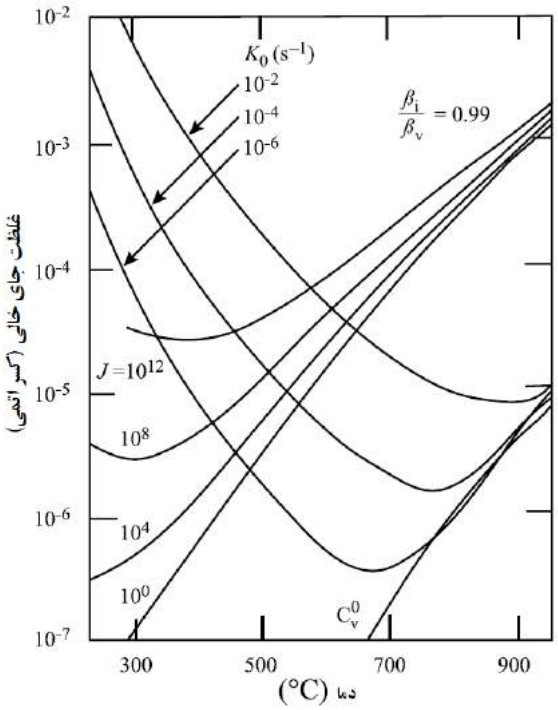
در مجموع، نرخ جوانه‌زنی حفره تابعی از ارتفاع سد فعال‌سازی است. ناخالصی‌های بین‌نشینی، سد فعال‌سازی را افزایش داده و نرخ جوانه‌زنی را کاهش می‌دهد. اندازه‌ی شعاع بحرانی حفره برای باقی ماندن و رشد به شکل یک حفره، تابعی از پهنای سد فعال‌سازی است که پهناهای بیش‌تر اندازه‌های بحرانی حفره‌ی بالاتری را نیاز دارد. نرخ جوانه‌زنی به شدت با فوق اشباع جای خالی و کاهش نسبت نرخ ورود بین‌نشین به جای خالی افزایش می‌یابد.

۸-۱-۳ تأثیر گاز خنثی

تا این‌جا فرض شد که برای ایجاد یک نطفه حفره، یک فوق اشباعی از جاهای خالی کافی است. این نظریه وجود دارد که اتم‌های گاز خنثی، ممکن است که به جای پایدارساز نطفه‌ی حفره عمل کنند و به فرایند جوانه‌زنی کمک کنند. در حقیقت، مدارکی وجود دارد که پیشنهاد می‌کند که اتم‌های گازی همیشه در فرایند جوانه‌زنی حفره درگیر هستند [۶- ۱۰] . از آن‌رو، چندین نظریه پیشنهاد شده است که جوانه‌زنی حفره در حضور گازهای خنثی و غیرخنثی را دربر می‌گیرد [۹، ۱۱]. در این‌جا رفتار ساده‌ای از یک گاز خنثی و غیرمتحرک بررسی می‌شود[۴، ۹] که فقط بسط نظریه‌ی گسترش یافته‌ی کنونی است. در این قسمت بیش‌تر روی هلیوم تمرکز خواهد شد زیرا این ماده به صورت معمول به وسیله‌ی واکنش‌های استحاله‌ای در هسته‌ی مواد ساختاری تولید می‌شود.

هلیوم در مقایسه با جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها، در محدوده‌ی دمایی تشکیل حفره بسیار غیرمتحرک است. زمانی که هلیوم به وسیله‌ی یک نطفه حفره به دام می‌افتد، بازگشت آن به زمینه‌ی بسیار غیرمحتمل است. از این جهت، جوانه‌زنی در حضور هلیوم این الزام را ایجاد نمی‌کند که برهم‌کنش بین اتم‌های هلیوم، جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در تشکیل یک جوانه‌ی حفره مورد توجه قرار گیرد. برای تحلیل مسئله اتم‌های گاز خنثی به منزله‌ی موقعیت‌هایی برای تشکیل جوانه‌های حفره به وسیله‌ی

مهاجرت عیوب نقطه‌ای در نظر گرفته می‌شوند. در واقع این فرایند شکلی از جوانه‌زنی ناهمگن حفره از فرایندهای همگن توضیح داده شده در بخش ۸-۱-۲ است.



شکل ۸-۸. غلظت حالت پایدار جاهای خالی برای چندین نرخ تولید عیب و یک احتمال نابودسازی چاهک $p = ۱۰^{-۷}$، و غلظت‌های جای خالی مورد نیاز برای چندین نرخ جوانه‌زنی (در $cm^{-3}s^{-1}$) در یک نسبت نرخ ورود ۰٫۹۹. چنین نرخ‌های جوانه‌زنی در نرخ‌هایِ تولید عیب اشاره شده در دمایی به‌دست می‌آید که منحنی‌ها متقاطع هستند[۸].

تشریح فضای فازی رفتار حفره‌ی حاوی گاز، مشابه به مطالب بیان شده در بخش ۸-۱-۲ و در مرجع [۶] است. مشخصه‌های مختصاتی نشانگر حفره، تعداد جای خالی (n) و تعداد اتم‌های گازی آن (x) (شکل ۸-۹) هستند. حفره با به دام‌اندازی جاهای خالی در جهت مثبت n و هم‌چنین با نشر حرارتی جاهای خالی با به دام‌اندازی بین‌نشین‌ها در جهت مخالف حرکت می‌کند:

(۴۲-۸)

$$\dot{n} = \beta_v^0 n^{1/3} - \alpha_v - \beta_i^0 n^{1/3} ,$$

که در این رابطه β_v^0 و β_i^0 نرخ‌های ورود جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به حفره هستند و α_v نرخ نشر جاهای خالی از حفره است و ضریب $n^{1/3}$ برای وابستگی نرخ به دام‌اندازی به اندازه‌ی حفره محاسبه می‌شود. به صورت مشابه، تحرکات در جهت مثبت x با به دام‌اندازی اتم‌های گازی و در جهت مخالف با انحلال مجدد اتم‌های گازی (بازگشت اتم گازی به زمینه به علت بیرون‌اندازی بر اثر تابش) یا با نشر حرارتی اتم‌های گازی مورد محاسبه قرار می‌گیرد:

(۴۳-۸)

$$\dot{x} = \beta_x^0 n^{1/3} - \alpha_x - xK_x^c \ ,$$

که β_x^0 نرخ ورود اتم‌های گازی، α_x نرخ نشر اتم‌های گازی و K_x^c نرخ انحلال مجدد اتم گازی است. برای موردی که حفره‌ها در تعادل با غلظت جاهای خالی و اتم‌های گازی است، توزیع نطفه‌ی حفره‌های پر از گاز حاوی n جای خالی و x اتم گازی برابر است با:

(۴۴-۸)

$$\rho^0(n,x) = N \exp\left(\frac{-\Delta G^0(n,x)}{kT}\right) \ ,$$

که $\Delta G^0(n,x)$ انرژی آزاد تشکیل حفره‌ی پر از گاز است و هم‌چنین اشاره به مدار (n,x) دارد. برای هر مدار $(n\text{-}1,x)$ به دام‌انداز یک الکترون، یک مدار (n,x) یک جای خالی نشر می‌کند و برای هر مدار $(n,x\text{-}1)$ به دام‌انداز یک اتم گازی، یک مدار (n,x) یک اتم گازی نشر می‌کند. در نتیجه:

(۴۵-۸)

$$\rho^0(n-1,x)\beta_v^0(n-1)^{1/3} = \rho^0(n,x)\alpha_v(n,x) \ ,$$

و

(۴۶-۸)

$$\rho^0(n,x-1)\beta_x^0(x-1)^{1/3} = \rho^0(n,x)\alpha_x(n,x) \ ,$$

و با جایگذاری معادله‌های ۸-۴۵ و ۸-۴۶ در معادله‌ی ۸-۴۲ برای حذف $\alpha_v(n,x)$ و $\alpha_x(n,x)$ می‌توان نوشت:

$$\dot{n} = \beta_v^0 n^{1/3}\left[1 - \frac{\beta_i^0}{\beta_v^0} - \exp\left(\frac{1}{kT}\frac{\partial \Delta G^0(n,x)}{\partial n}\right)\right] \qquad (۴۷-۸)$$

$$\dot{x} = \beta_x^0 n^{1/3}\left[1 - \frac{xK_x^c}{\beta_x^0 n^{1/3}} - \exp\left(\frac{1}{kT}\frac{\partial \Delta G^0(n,x)}{\partial x}\right)\right], \qquad (۴۸-۸)$$

که سرعت‌های حفره در فضای فازی (n,x) هستند. نرخ جوانه‌زنی از بحث‌های حایز اهمیت است که در مرجع [۴] به صورت مفصل در مورد آن بحث شده است.

در ابتدا بحث با توزیعی از خوشه‌های اتم‌های گازی، M_x، شروع می‌شود که تعداد خوشه‌های اتم‌های گازی در واحد حجم مرکب از x اتم گازی است. غلظت کلی هلیوم در جامد برابر است با:

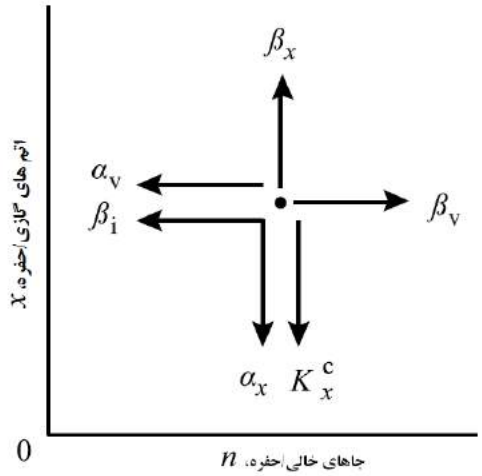
(۴۹-۸)

$$M = \sum_{x=1} xM_x ,$$

و به وسیله‌ی نرخ تولید هلیوم به علت واکنش‌های استحاله‌ای تعیین شده است. فرض می‌شود که جوانه‌زنی حفره‌ها به صورت مستقل و به صورت هم‌زمان، روی هر خوشه از اتم‌های گازی توصیف شده به وسیله‌ی M_x موقعیت جوانه‌زنی در واحد حجم رخ می‌دهد. نیرو محرکه‌ی جوانه‌زنی، فوق اشباع جاهای خالی و بین‌نشین‌ها است. علاوه بر جوانه‌زنی ناهمگن در موقعیت‌های خوشه‌ی گازی، فرض می‌شودکه جوانه‌زنی همگن نیز روی N_0 موقعیت شبکه در جامد رخ دهد. نرخ جوانه‌زنی کلی، مجموع نرخ‌های جوانه زنی همگن و ناهمگن است:

(۵۰-۸)

$$J = J_{\text{hom}} + \sum_{x=1} J_x ,$$



شکل ۸–۹. فضای فازی برای جوانه‌زنی حفره که نشان دهنده‌ی تحرکات یک حفره‌ی متعاقب به دام‌اندازی عیب نقطه‌ای (β_i, β_v, β_x) یا اتلاف (α_x, K_x^c) است[۶].

که در این رابطه J_{hom} با معادله‌ی ۸–۳۵ مشخص می‌شود. برای به‌دست آوردن نرخ جوانه‌زنی کلی، لازم است که نرخ جوانه‌زنی ناهمگن روی M_x موقعیت خوشه‌ی گازی تعیین شود.
توزیع نطفه‌های حفره هلیوم حاوی n جای خالی و اتم‌های گازی x، $\rho^0(n,x)$ به وسیله‌ی واکنش زیر کنترل می‌شود:

$$n\mathrm{v} = \mathrm{v}_{nx} \,, \tag{۵۱–۸}$$

که v_{nx} یک حفره شامل n جای خالی و x اتم گازی را نشان می‌دهد. از آن‌جایی که هلیوم غیرمتحرک است، هیچ واکنش شیمیاییِ بیان کننده‌ی تعادل اتم‌های گازی بین حفره‌ها و حجم وجود ندارد. معیار تعادل شیمیایی برابر است با:

$$n\mu_{\mathrm{v}} = \mu_{nx} \,, \tag{۵۲–۸}$$

و پتانسیل شیمیایی یک حفره با n جای خالی و x اتم گازی برابر است با:

$$\mu_{nx} = \frac{\partial G}{\partial \rho^0(n,x)} \ . \qquad (۵۳-۸)$$

فرمول‌بندی انرژی آزاد گیبس کلی برای خوشه‌ی گاز ـ جای خالی شبیه تحلیلی است که پیش‌تر برای جاهای خالی تکی نشان داده شده بود. با مقایسه‌ی معادله‌ی ۸-۲ برای حفره‌ها، انرژی آزاد گیبس کلی برابر است با:

$$G = G_0 + \sum_x \sum_n \left[\rho^0(n,x) G_{nx} - kT \ln w_{nx}\right] \ . \qquad (۵۴-۸)$$

همانند قبل w_{nx} تعداد راه‌های چینش $\rho^0(n,x)$ حفره روی M_i موقعیت است:

(۵۵-۸)

$$w_{nx} = \frac{M_x(M_x-1)\ldots\{M_x - [\rho^0(n,x)-1]\}}{[\rho^0(n,x)]!} = \frac{M_x!}{[M_x - \rho^0(n,x)]![\rho^0(n,x)]!}$$

با استفاده از معادله‌ی ۸-۵۵ در معادله‌ی ۸-۵۴ و با استفاده از معادله‌ی ۸-۵۴ برای تعیین پتانسیل شیمیایی همان‌طوری که در معادله‌ی ۸-۵۳ مشخص شد، می‌توان نوشت:

(۵۶-۸)

$$\mu_{nx} = G_{nx} + kT \ln\left[\frac{\rho^0(n,x)}{M_x}\right] \ .$$

کار برگشت‌پذیر برای تشکیل یک نطفه‌ی حفره از n جای خالی و x اتم گازی برابر است با [۴، ۱۲]:

(۵۷-۸)

$$G_{nx} = (36\pi\Omega^2)^{1/3}\gamma n^{2/3} - xkT \ln\left(\frac{MHn\Omega}{xkT}\right) \ .$$

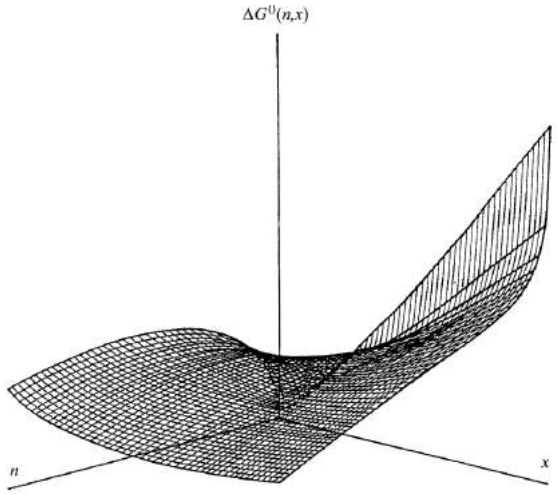
عبارت اول کار انجام شده برای ایجاد یک حفره‌ی بدون گازِ حاوی n جای خالی است و مشابه چیزی است که در معادله‌ی ۸-۶ برای تشکیل حفره مشخص شد. عبارت دوم کار لازم برای حرکت هلیوم از جامد به داخل حفره است. H در عبارت دوم ثابت قانون هنری برای انحلال هلیوم در فلز است. عبارت‌های موجود برای G_{nx} در معادله‌ی ۸-۵۷ در عبارت پتانسیل شیمیایی یک حفره با n جای خالی و x اتم گازی، معادله‌ی ۸-۵۶، جایگذاری شده است. با استفاده از تساوی معادله‌ی ۸-۵۲ با μ_v مشخص شده با معادله‌ی ۸-۱۲ و حل برای $\rho^0(n,x)$ داریم:

$$\rho^0(n,x) = M_x \exp\left[n \ln S_v - \xi n^{2/3} + x \ln\left(\frac{MHn\Omega}{xkT}\right)\right] . \qquad (۵۸-۸)$$

که بجز عبارت اضافی در توان، مشابه به معادله‌ی ۸-۱۴ است و هم‌چنین ضریب پیش‌نمایی متفاوتی را دارد. در حقیقت، برای $x=0$ و $M_x=N_0$ نتیجه به صورت معادله‌ی ۸-۱۴ به‌دست می‌آید.

با استفاده از معادله‌ی ۸-۴۴ با جایگذاری M_x به جای N_0 می‌توان نوشت:

$$\Delta G^0(n,x) = -nkT \ln S_v + (36\pi\Omega^2)^{1/3}\gamma n^{2/3} - xkT \ln\left(\frac{MHn\Omega}{xkT}\right) . \qquad (۵۹-۸)$$



شکل ۸-۱۰. منحنی انرژی آزاد تشکیل حفره به صورت تابعی از تعداد جاهای خالی (n) و تعداد اتم‌های گازی (x) در حفره. شرایط عبارتند از: $S_v = ۶۰۰$، $p_0 = ۵۰۷$ MPa، $T = ۵۰۰$ °C، $\gamma = ۱$ J/m^2 [۱۲].

شکل ۸-۱۰ انرژی آزاد تشکیل حفره را به صورت تابعی از n و x نشان می‌دهد. محل تقاطع این صفحه در $x = 0$ (بدون گاز) برابر با منحنی $\beta_i/\beta_v = 0$ در شکل ۸-۵ است که در آن ρ' به صورت تابعی از n در معادله‌ی ۸-۳۴، $\rho'(n) = N_0 \exp(\frac{\Delta G'_k}{kT})$، رسم شده است و برای $\beta_i/\beta_v = 0$ در نتیجه $\Delta G'_n = \Delta G(n, x = 0)$ است. قابل ذکر است که اتم‌های گازی در حفره، سد انرژی برای جوانه‌زنی را به زیر مقدار مشخصه‌ی حفرات بدون گاز کاهش می‌دهد. نقطه‌ی زینی‌شکل (سد انرژی) روی سطح نشان داده شده در شکل ۸-۱۰ در $n = 11$ و $x = 6$ رخ می‌دهد. به هر جهت منحنی، بین‌نشین‌های (همانند یک منحنی $\Delta G'_n$) موجود در تحلیل را دقیقاً مشابه به روش جوانه‌زنی همگن دربر نمی‌گیرد.

تعیین نرخ جوانه‌زنی شبیه به روش انجام شده برای جوانه‌زنی همگن است، در نتیجه در یک جریان جوانه زنی:

(۶۰-۸)

$$J_{k,x} = Z'_x \beta_{kx} \rho'_k(n,x) \ ,$$

که

(۶۱-۸)

$$Z'_x = \left[\frac{-1}{2\pi kT} \frac{\partial^2 \Delta G'(n,x)}{\partial n^2} \right]^{1/2}_{n=n_k} \ ,$$

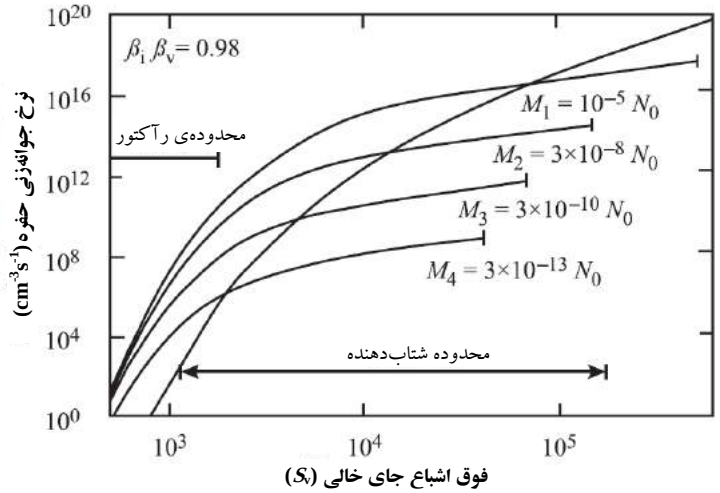
(۶۲-۸)

$$\rho'(n,x) = M_x \exp(-\Delta G'(n,x)/kT) \ ,$$

و

(۶۳-۸)

$$\Delta G'(n,x) = kT \sum_{x=0}^{n} \left[\ln \left(\frac{\beta_i^0}{\beta_v^0} \right) + \exp \left(\frac{1}{kT} \frac{\partial \Delta G^0(n,x)}{\partial n} \right) \right] \ ,$$



شکل۸-۱۱. نرخ‌های جوانه‌زنی حفره (J) روی خوشه‌های اتم هلیوم و نرخ جوانه‌زنی همگن (J_{hom}) به صورت تابعی از فوق اشباع جاهای خالی در ۵۰۰°C. مقدار کلی هلیوم ۱۰ppm است[۱۳].

و مقادیر Z'_k و $\rho'(n_k,x)$ در اندازه‌ی حفره‌ی بحرانی، n_k، مورد ارزیابی قرار گرفته‌اند و β_{kx} نرخ حفره‌زایی جاهای خالی روی یک حفره با اندازه‌ی بحرانی است.

برای تعیین نرخ جوانه‌زنی روی خوشه‌های گاز-اتم در فلز، باید توزیع گاز موجود ($M\ atoms/cm^3$) میان خوشه‌های با اندازه مختلف تخمین زده شود. برای ساده‌سازی، توزیع $M_x = M_1^{-(x+1)}$ فرض می‌شود. این توزیع باید در معادله‌ی ۸-۴۹ جواب دهد. شکل ۸-۱۱ نتایج محاسبات بر پایه‌ی معادله‌ی ۸-۶۰ تا معادله‌ی ۸-۶۲ و معادله‌ی ۸-۶۰ برای M معادل با ۱۰ppm هلیوم را نشان می‌دهد (که برابر با مقدار معادل هلیوم در پوشش‌های فولاد زنگ نزن بعد از یک جریان نوترون دهی $۵ \times ۱۰^{۲۲}\ n/cm^2$ است). قابل ذکر است که در منطقه‌ی فوق اشباع جای خالیِ مورد انتظار در یک رآکتور، جوانه‌زنی ناهمگن روی خوشه‌های اتم هلیوم بسیار مهم‌تر از جوانه‌زنی همگن است. این رفتار تأیید نظری افزایش‌های مشاهده شده از جوانه‌زنی حفره‌ای هلیوم را نشان می‌دهد. اهمیت نسبی جوانه‌زنی همگن و ناهمگن با توجه به غلظت هلیوم تغییر می‌کند؛ زیرا $J_{hom}(n)$ متناسب با N_0 است درحالی‌که $J_x(n)$ متناسب با M_x است. در جریان‌های پایین جوانه‌زنی همگن غالب است زیرا هلیوم کافی برای تحریک جوانه‌زنی ناهمگن وجود ندارد. به هرجهت، از آن‌جایی که J_{hom} کاملاً کوچک است تا زمانی که هلیوم کافی به وسیله‌ی واکنش‌های استحاله‌ای برای ایجاد نرخ جوانه‌زنی

ناهمگن بالا تولید شود هیچ‌گونه حفره‌ای مشاهده نمی‌شود. این زمان نهفتگی به صورت فیزیکی زمان واهلش برای رسیدن به حالت پایدار بعد از یک مرحله افزایش در فوق اشباع است. برای تشکیل حفره با یا بدون حضور گاز می‌توان نوشت:

$$\tau = (2\beta_k Z')^{-1} \ . \qquad (۶۴-۸)$$

این مقدار معادل با یک جریان $۱۰^{۲۲}\ \mathrm{n/cm^2}$ برای شرایط پرتودهی رآکتورهای سریع است.
در مجموع، اثر اتم‌های گازی اساساً افزایش نرخ جوانه‌زنی حفره با کاهش شعاع بحرانی برای یک نطفه‌ی حفره پایدار به زیر شعاع بحرانی برای حفره‌ی بدون گاز است. بنابراین، ورود اتم گازی به یک شبکه (به وسیله‌ی استحاله یا شتاب دهنده‌ی تزریقی) تشکیل حفره‌ها را از شبکه‌ی اولیه افزایش می‌دهد.

۸-۱-۴ جوانه‌زنی حفره با گرایش تولید

معادله‌ی جنبشی برای تکامل حلقه‌ی نابجایی تحت شرایط آسیب آبشاری در بخش ۷-۶-۳ برای خوشه‌های بین‌نشینی گسترش یافت. با مقداری تغییرات در عبارت‌ها می‌توان فرمول‌بندی مشابهی را برای جوانه‌زنی حفره مورد استفاده قرار داد [۱۴]. تعداد جاهای خالی در یک حفره کروی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\frac{\mathrm{d}n_{\mathrm{V}}}{\mathrm{d}t} = \frac{3n_{\mathrm{V}}^{1/3}}{a^2}[D_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}} - D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}} - D_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}^{0}] \qquad (۶۵-۸)$$

$$C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{V}} = C_{\mathrm{V}}^{0}\exp(2\gamma\Omega/kTR_{\mathrm{V}}) \ , \qquad (۶۶-۸)$$

که $a = (\frac{3\Omega}{4\pi})^{\frac{1}{3}}$، n_v تعداد جاهای خالی در یک حفره، $R_{\mathrm{V}} = an_{\mathrm{V}}^{\frac{1}{3}}$ و Ω حجم اتمی است.اکنون سرعت رانش، $F(n)$ (از عملیات فوکر ـ پلانک) یک عبارت تکی معادل با مقدار سمت راست

معادله‌ی ۸-۶۵ است. گسترش نفوذی توصیف شده با عبارت $D(n)$، مجموعی از سهم‌های ناشی از پرش عیوب تکی، آبشارها و نشر جاهای خالی است به صورتی که:

(۶۷-۸)

$$D(n) = D^s(n) + D^c(n) + D^e(n) ,$$

که

(۶۸-۸)

$$D^s(n) = \frac{3n^{1/3}}{2a^2}\left[D_{\mathrm{v}}(C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^0) + D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}\right] ,$$

(۶۹-۸)

$$D^c(n) = \frac{3n^{2/3}}{4a}\left[\frac{K_{\mathrm{v}}^{\mathrm{eff}}\langle N_{\mathrm{dv}}^2\rangle}{k_{\mathrm{v}}N_{\mathrm{dv}}} + \frac{K_{\mathrm{i}}^{\mathrm{eff}}\langle N_{\mathrm{di}}^2\rangle}{k_{\mathrm{i}}N_{\mathrm{di}}}\right] ,$$

(۷۰-۸)

$$D^e(n) = \frac{9D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}}^0 n^{2/3}}{2a^2} ,$$

و $K_{\mathrm{j}}^{\mathrm{eff}}$ نرخ تولید مؤثر عیوب نقطه‌ای آزاد است، N_{dj} و $\langle N_{dj}^2\rangle$ به ترتیب تعداد میانگین و مربع تعداد میانگین عیوب نقطه‌ای آزاد تولید شده در یک آبشار تکی است و K_{j}^2 شدت کلی چاهک برای عیوب نقطه‌ای از نوع j است. همان‌طوری که در مرجع [۱۴] نیز مشخص شده است، راه‌حل معادله‌ی جنبشی کلی شبیه به مورد خوشه‌های بین‌نشینی است. برای مورد اندازه‌ی بحرانی جاهای خالی کوچک، راه‌حل برابر است با:

(۷۱-۸)

$$P_{\mathrm{m}} \cong \left[\frac{\beta}{6\pi R_{\mathrm{cr}}n_{\mathrm{cr}}}\frac{(D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}} - D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}})}{D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}(1 + dn_{\mathrm{cr}}^{1/3})}(n_0 - n_{\mathrm{v}\,0})\right]^{1/2} \times \exp\left(-\frac{\eta(\beta/R_{\mathrm{cr}})n_{\mathrm{cr}}^{2/3} - n_0^{2/3}}{1 + 1/(d^e n_{\mathrm{cr}}^{1/3}) + d^c/d^e}\right) ,$$

که n_0 اندازه‌ی نطفه‌ی حفره‌ی ابتدایی (در اصل تقریباً برابر با ۴ جای خالی) است، n_{v0} اندازه‌ی کمینه‌ی یک نطفه‌ی حفره است که زیر این اندازه به صورت حفره وجود ندارد (در اصل تقریباً برابر ۲ تا ۳ حفره)، $d = d^{c} + d^{e}$، $\beta = 2\gamma\Omega/kT$ و R_{cr} و n_{cr} اندازه و مقدار جای خالیِ نطفه با اندازه بحرانی هستند. عبارت R_{cr} از معادله‌های ۸-۶۵ و ۸-۶۶ تعیین می‌شود، البته یک حفره تحت شرایطی رشد خواهد کرد که یک شار جای خالی خالصی را دریافت کند ($D_vC_v > D_iC_i$):

$$R_{cr} = \frac{\beta D_v C_v^V}{D_v C_v - D_i C_i - D_v C_v^V} , \qquad (۸-۷۲)$$

و $R(n) = an^{1/3}$ است. عبارت d^{c} و d^{e} شدت‌های گسترش نفوذی برای خوشه‌ها و برای نشر جاهای خالی متناسب با عیوب نقطه‌ای تکی هستند:

$$d^c = \frac{D^c(n_{cr})}{n_{cr}^{1/3} D^s(n_{cr})} , \quad d^e = \frac{D^e(n_{cr})}{n_{cr}^{1/3} D^s(n_{cr})} , \qquad (۸-۷۳)$$

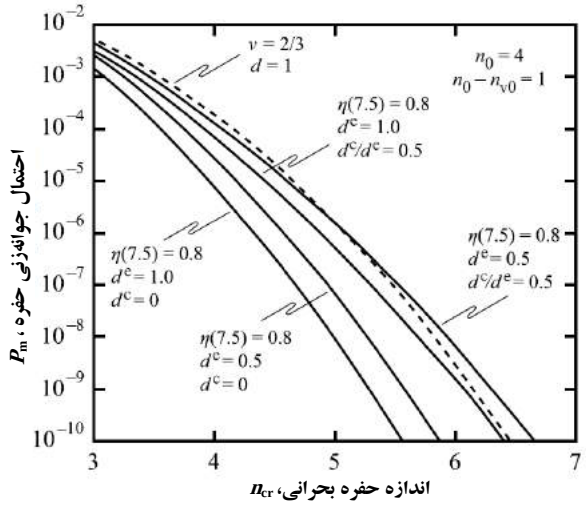
و تابع η مقداری بین ۰٫۵۵ و ۰٫۸۴ دارد.

برای یک اندازه‌ی نطفه‌ی حفره‌ی ۴ جای خالی، اعمال معادله‌ی ۸-۷۱ برای مقادیر مختلفی از d^{c} و d^{e} منجر به یک احتمال جوانه‌زنی در محدوده‌ی 10^{-6} تا 10^{-4} برای خوشه‌های جای خالی بحرانی با اندازه‌ی تقریباً ۱۰۰ جای خالی می‌شود (شکل ۸-۱۲). در نتیجه نرخ جوانه‌زنی برابر است با:

$$J \cong \frac{K_{cl}^{eff}}{N_d} P_m , \qquad (۸-۷۴)$$

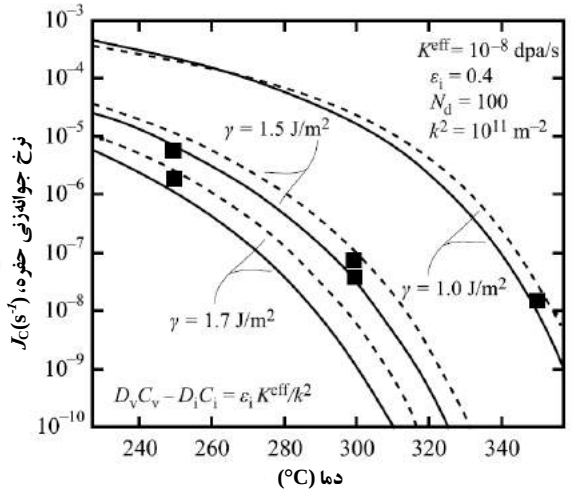
که K_{cl}^{eff} نرخ تولید مؤثر عیوب نقطه‌ای در خوشه و شکل آزاد است و N_d عدد میانگین کلی عیوب نقطه‌ای تولید شده در یک آبشار تکی و ε_i کسر بین‌نشین‌های تولید شده در آبشارها به صورت خوشه‌های غیرمتحرک است. شکل ۸-۱۳ نرخ جوانه‌زنی حفره‌ی محاسبه شده برای مس بازپخت شده در مقایسه با اطلاعات آزمایشگاهی در ۲۵۰، ۳۰۰ و ۳۵۰°C و انرژی‌های سطحی متفاوت، γ_s و برای مقادیر مختلفی از d^{e} را نشان می‌دهد. برحسب جوانه‌ی حفره تولید شده $cm^{-3}s^{-1}$، نرخ جوانه‌زنی در

محدوده‌ی 10^{15} تا 10^{18} است که از مقادیر پیش‌بینی شده با تئوری جوانه‌زنی مرسوم بزرگ‌تر است. در نتیجه، اثر گرایش تولید افزایش نرخ جوانه‌زنی است.



شکل ۸-۱۲. احتمال جوانه‌زنی رسم شده از معادله‌ی ۸-۷۱ برای اندازه‌ی حفره‌ی ابتدایی ۴ جای خالی و اندازه‌ی کمینه‌ی یک جای خالی و برای مقادیر مختلفی از d^c و d^e برحسب اندازه‌ی حفره‌ی بحرانی، n_{cr} [۱۴].

$$v = \frac{(D_v C_v - D_i C_i)\left[1 - \exp(-\frac{\beta}{R_{cr}})\right]}{D_i C_i}$$



شکل ۸-۱۳. نرخ جوانه‌زنی حفره برحسب دمای پرتودهی برای مس تحت یک نرخ جابه‌جایی 10^{-8} dpa/s [۱۴].

۸-۲ رشد حفره

نرخی که در آن حفره‌ها در یک جامد جوانه می‌زنند و یک جوانه‌ی حفره رشد می‌کند تا به یک حفره‌ی پایدار برسد با داشتن عبارت‌های تعیین کننده تعیین می‌شود. همان‌طوری که قبلاً اشاره شد، فرض می‌شود که مراحل جوانه‌زنی و رشد از نظر زمانی مجزا هستند و هم‌چنین رشد هنگامی شروع می‌شودکه نطفه‌های حفره پایدار شوند. البته این یک ساده‌سازی از موقعیت‌های عملی در رآکتور است که در آن‌ها رشد جوانه‌ی پایدار به صورت هم‌زمان با جوانه‌زنی رخ می‌دهد.

رشد حفره با حل معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای تعیین می‌شود که در فصل ۵ توضیح داده شد. این معادلات، فوق اشباع جاهای خالی و بین‌نشین‌ها را فراهم می‌کند که نیرو محرکه‌ی فرایندهای جوانه‌زنی و رشد هستند. غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در جامد با برابر قرار دادن نرخ‌های تولید و حذف عیب به وسیله‌ی تمام سازوکارها تعیین می‌شود. درصورت چنین کاری مشتقات زمانی حذف شده و راه‌حل حاصله، شکلی از یک راه‌حل حالت پایدار را دارد. به هرجهت، از آن‌جایی که غلظت عیوب با زمان تغییر می‌کند (مقدار مجاز پرتوگیری)، راه‌حل حالت پایدار فقط در دوره‌های زمانی کوتاه معتبر است و حالت نیمه پایدار نامیده می‌شود. راه‌حل حالت نیمه پایدار اهمیت دارد؛ زیرا تغییرات شدت چاهک به علت تکامل ریزساختاری در مقایسه با زمان واکنش جمعیت عیوب آهسته است. در نتیجه مسئله می‌تواند با فرض یک شرایط ابتدایی حل شود که به خوبی شدت چاهک‌ها را توصیف می‌کند.

فرض شده است که نرخ‌های تولید و حذف در سراسر فلز یکنواخت باشد. به وضوح، شیب‌های قوی نزدیک به چاهک وجود خواهد داشت؛ اما این شیب‌ها می‌تواند با همگن کردن یا گسترش شدت چاهک‌ها یعنی با جایگزین کردن چاهک‌های مجزا با جاذب‌های یکنواخت فضاییِ عیوب نقطه‌ای نادیده گرفته شود. در نتیجه اثر انباشتگی روی جذب عیب در مورد یک چاهک همگن مشابه به مورد چاهک ناهمگن است. شدت چاهک‌ها همان مطالبی است که در فصل ۵ توصیف شد. سپس رشد حفره مطابق با تئوری سرعتی گسترش یافته به وسیله‌ی بریلس فورد[1] و بلوگ[2] [۱۴] و ساده‌سازی‌های زیر محاسبه می‌شود:

۱. چاهک‌های مجزا با یک توزیع پیوسته یا گسترده‌ای از چاهک‌ها جایگزین می‌شوند.

1. Brailsford
2. Bullough

۲. هر چاهک یک شدت مشخصی دارد، در نتیجه جریان عیوب به چاهک گسترده، شبیه به جریان در چاهک‌های حقیقی در یک ماده‌ی واقعی است.

۳. مراحل ۱ و ۲ وابستگیِ فضایی C_v و C_i را حذف می‌کنند و معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای به صورت زیر نوشته می‌شوند:

(۸–۷۵)

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = K_0 - \sum_j A_v^j - R_{iv}$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = K_0 - \sum_j A_i^j - R_{iv} \ ,$$

که عبارت اول در سمت راست نرخ تولید جاهای خالی و بین‌نشین‌ها است، عبارت دوم نرخ اتلاف به تمام چاهک‌ها است و عبارت آخر نرخ اتلاف ناشی از بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشینی است.

۴. غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها، C_v و C_i از معادله‌ی ۸–۷۵ محاسبه می‌شوند. تغییر در شدت چاهک ناشی از جریان عیوب به چاهک محاسبه شده است و فرایند با آغاز از مرحله‌ی ۱ به منظور پیشرفت در زمان و مقدار مجاز پرتوگیری تکرار می‌شود.

ثابت‌های نرخ واکنش برای واکنش‌های عیب ـ چاهک و شدت چاهک‌ها برای چاهک‌های مربوط در فصل ۵ تعیین شد و به صورت خلاصه در جدول ۵–۱ گزارش شده است. یادآوری می‌شود که چاهک‌ها به صورت خنثی (حفره‌ها، مرزدانه‌ها، رسوبات ناهمدوس)، گرایش‌دار (شبکه‌ی نابجایی‌ها و حلقه‌های نابجایی) یا گرایش متغیر (رسوبات هم‌بسته و عناصر حل شونده‌ی بزرگ اندازه و کوچک اندازه) تقسیم‌بندی می‌شوند. برای تمام انواع چاهک‌ها، نرخ جذب عیب متناسب با ضریب نفوذ عیب نقطه‌ای و تفاوت در غلظت عیب بین حجم و سطح چاهک است. به استثنای حلقه‌های نابجایی، غلظت بین‌نشین‌ها در سطح چاهک در مقایسه با مقدار حجمی قابل توجه نیست و ممکن است که نادیده گرفته شود. در مورد جاهای خالی، غلظت آن‌ها در هسته نابجایی شبکه، در غلظت تعادلی باقی می‌ماند. برای حفره‌ها و حلقه‌ها، غلظت جاهای خالی در سطح چاهک‌ها نیز باید تعیین شود. زمانی که شدت چاهک‌ها و غلظت‌های عیب در سطوح چاهک‌ها کاملاً شناخته شدند، سپس نرخ جذب خالص

عیوب به وسیله‌ی جوانه‌ی حفره قابل محاسبه است و این اطلاعات برای تعیین نرخ رشد حفره‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد.

۸-۲-۱ نرخ‌های جذب عیب و غلظت‌ها در سطوح چاهک‌ها

در ادامه توضیحاتی برای تعیین عباراتی برای نرخ‌های جذب عیوب برای هر چاهک مربوطه، که مطابق با نوع چاهک طبقه‌بندی شده، ارایه می‌شود.

(۷۶-۸)

$$A_j^X = k_X^2 D_j (C_j - C_j^X) = k_X^2 D_j C_j - L_j^X \ ,$$

که A_j^X نرخ جذب عیب j به وسیله‌ی چاهک X است، k_X^2 شدت چاهک X، D_j ضریب نفوذ عیب j، C_j و C_j^X غلظت‌های حجمی و غلظت سطح چاهک از عیب j هستند و L_j^X نرخ نشر حرارتی عیب j به وسیله‌ی چاهک X است. قابل ذکر است که برای چاهک‌های خنثی، شدت چاهک‌ها فقط وابسته به مشخصه‌ی چاهک و نه عیب است. این مزیتِ نوشتن عبارت‌های اتلاف با استفاده از شدت چاهک‌ها از ثابت‌های نرخ واکنش است.

چاهک‌های خنثی

نرخ اتلاف عیوب نقطه‌ای به حفرات می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۷۷-۸)

$$A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}} = k_{\mathrm{V}}^2 D_{\mathrm{v}} (C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}) = k_{\mathrm{V}}^2 D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} - L_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}$$
$$A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{V}} = k_{\mathrm{V}}^2 D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} \ ,$$

که k_{V}^2 شدت چاهک یک حفره‌ی مشخص در جدول ۵-۱ است، $C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}$ غلظت جاهای خالی در سطح حفره، $L_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}$ نرخ نشر حرارتی جاهای خالی در سطح چاهک هستند و فرض شده است که تمام حفرات یک اندازه باشند. نرخ اتلاف عیوب به رسوبات غیرهم‌بسته برابر است با:

(۷۸-۸)

$$A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{IP}} = k_{\mathrm{IP}}^2 D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}$$
$$A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{IP}} = k_{\mathrm{IP}}^2 D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} \ ,$$

و نرخ به مرزدانه‌ها برابر است با:

$$A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{gb}} = k_{\mathrm{gb}}^2 D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} \qquad (۷۹-۸)$$
$$A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{gb}} = k_{\mathrm{gb}}^2 D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} \ ,$$

که شدت چاهک‌ها در جدول ۵-۱ تعیین شده است و عبارات نشر حراراتی نادیده گرفته شده است. از میان معادله‌های ۸-۷۷، ۸-۷۸ و ۸-۷۹ عبارتی که تاکنون تعیین شده، غلظت جاهای خالی در سطح حفره، $C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}$، است. این عملیات به صورت زیر انجام شده است. از معادله‌ی ۴-۱۴ یادآوری می‌شود که غلظت تعادل حرارتی جاهای خالی در یک جامد برابر است با:

$$C_{\mathrm{v}}^{0} = \frac{1}{\Omega} \exp\left(\frac{S_{\mathrm{f}}}{k}\right) \exp\left(\frac{H_{\mathrm{f}}}{kT}\right) \ ,$$

که

$$H_{\mathrm{f}} = E_{\mathrm{f}} + p\Omega \ , \qquad (۸۰-۸)$$

و عبارت $p\Omega$ برای جاهای خالی تکی نهفته در شبکه نادیده گرفته شده است. این ساده‌سازی در فضای پیرامون یک حفره که نیروهایی مانند کشش سطحی، فشار ناشی از گاز در حفره و یک تنش هیدروستاتیکی خارجی فعال هستند، اعمال نمی‌شود. برای مثال وجود یک حفره‌ی سطحی یک کشش سطحی را ایجاد می‌کند که با استفاده از معادله‌ی ۸-۱۴ به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۸۱-۸)

$$\frac{\text{Force}}{\text{unit area}} = \frac{2\pi r\gamma \sin\theta}{A} \cong \frac{2\pi r\gamma}{\pi r^2}\theta = \frac{2\pi r\gamma}{\pi r^2}\left(\frac{r}{R}\right) = \frac{2\gamma}{R} \ ,$$

که به صورت تقریبی $\sin\theta$ برای θهای کوچک با θ جایگزین شده است. از آن‌رو، عبارت p در معادله‌ی ۸-۸۰ برابر است با:

(۸۲-۸)

$$p = -\frac{2\gamma}{R} ,$$

که علامت منفی به این علت وارد شده است که کشش سطحی در جهت انقباض حفره عمل می‌کند. سپس غلظت جای خالی در سطح حفره برابر است با:

(۸۳-۸)

$$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}} = \frac{1}{\Omega}\exp\left(\frac{S_{\mathrm{f}}}{k}\right)\exp\left(-\frac{E_{\mathrm{f}}}{kT}\right)\exp\left(-\frac{p\Omega}{kT}\right) ,$$

که:

(۸۴-۸)

$$C_{\mathrm{v}}^{0} = \frac{1}{\Omega}\exp\left(\frac{S_{\mathrm{f}}}{k}\right)\exp\left(-\frac{E_{\mathrm{f}}}{kT}\right) ,$$

و با جایگذاری $p\Omega$ از معادله‌ی ۸-۸۲ می‌توان نوشت:

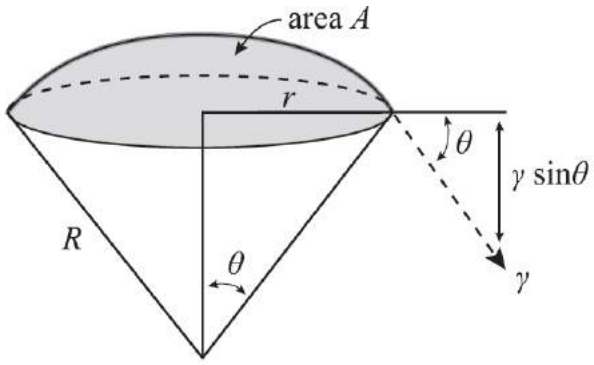
(۸۵-۸)

$$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}} = C_{\mathrm{v}}^{0}\exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT}\right) ,$$

و معادله‌ی ۸-۷۷ به صورت نوشته می‌شود:

(۸۶-۸)

$$A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}} = k_{\mathrm{V}}^{2}D_{\mathrm{v}}\left[C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^{0}\exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT}\right)\right] .$$



شکل ۸-۱۴. شماتیکی از کشش سطحی روی یک حفره با شعاع r.

چاهک‌های گرایش‌دار

نرخ اتلاف عیوب به نابجایی‌های شبکه برابر است با:

(۸۷-۸)

$$A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} = k_{\mathrm{vd}}^2 D_{\mathrm{v}}(C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^0) = k_{\mathrm{vd}}^2 D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} - L_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}$$
$$A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} = k_{\mathrm{id}}^2 D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} \ ,$$

که شدت چاهک‌ها در جدول ۵-۱ مشخص شده است و عبارت C_V^0 غلظت تعادل حرارتی جاهای خالی است. برای حلقه‌ی نابجایی‌های بین‌نشینی، عبارت اتلاف برابر است با:

(۸۸-۸)

$$A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}} = k_{\mathrm{vd}}^2 D_{\mathrm{v}}(C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}}) = k_{\mathrm{vL}}^2 D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} - L_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}}$$
$$A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}} = k_{\mathrm{id}}^2 D_{\mathrm{i}}(C_{\mathrm{i}} - C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}}) = k_{\mathrm{iL}}^2 D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - L_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}} \ ,$$

که شدت چاهک‌ها شبیه نابجایی‌های شبکه است زیرا هسته‌ی نابجایی مشابه است. به هر جهت، غلظت عیوب در سطح چاهک‌ها از مقدار تعادل حرارتی متفاوت است زیرا اضافه شدن یک جای خالی یا یک بین‌نشین به حلقه‌ی نابجایی به ترتیب اندازه‌ی حلقه را کوچک و بزرگ می‌کند و این فرایند یک تغییر در انرژی را لازم دارد. غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در تعادل با یک حلقه به ترتیب $C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{L}}$ و $C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}}$ هستند. با دنبال کردن تحلیل موجود در مرجع[۴]، غلظت عیوب در تعادل با حلقه، با توجه به

انرژی آزاد گیبس یک بخش از فلز حاوی n_v جای خالی و n_i بین‌نشین در غلظت‌های C_V^L و C_i^L و یک حلقه‌ی بین‌نشینی تکی حاوی m_i بین‌نشین،تعیین می‌شود:

$$G = G_0 + E_L(m_i) + n_v\mu_v + n_i\mu_i \,, \tag{۸-۸۹}$$

که G_0 انرژی آزاد جامد بدون حلقه اما با C_v و C_i عیب است، $E_L(m_i)$ انرژی حلقه و $\mu_{i,v}$ پتانسیل شیمیایی بین‌نشین‌ها و جاهای خالی در یک جامد هستند. برای سیستمی که در تعادل شیمیایی است، انتقال عیوب نقطه‌ای بین جامد و حلقه نباید باعث ایجاد تغییر در انرژی آزاد سیستم شود:

$$\delta G = \left(\frac{dE_L}{dm_i}\right)\delta m_i + \mu_v\delta n_v + \mu_i\delta n_i = 0 \,, \tag{۸-۹۰}$$

و

$$\delta m_i = \delta n_v - \delta n_i \,, \tag{۸-۹۱}$$

زیرا تعدادی از بین‌نشین‌ها در حلقه باید از حجم بیایند. با حذف δm_i از معادله‌ی ۸-۹۱ و ۸-۹۲ می‌توان نوشت:

$$\left(\frac{dE_L}{dm_i}\right)\delta n_v - \left(\frac{dE_L}{dm_i}\right)\delta n_i + \mu_v\delta n_v + \mu_i\delta n_i = 0 \,. \tag{۸-۹۲}$$

از آن‌جایی که تغییرات در غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها مطلق و مستقل از یک‌دیگر هستند، ضرایب هر دو تغییر معادل با صفر تنظیم می‌شود که در نتیجه:

$$\frac{dE_L}{dm_i} + \mu_v = 0$$
$$\frac{dE_L}{dm_i} - \mu_i = 0 \,. \tag{۸-۹۳}$$

از معادله‌ی ۸-۱۲، پتانسیل شیمیایی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در یک جامد با غلظت های $C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{L}}$ و $C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}}$ برابر است با:

$$\mu_{\mathrm{v}} = kT \ln \frac{C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}}}{C_{\mathrm{v}}^{0}} \qquad (۹۴-۸)$$
$$\mu_{\mathrm{i}} = kT \ln \frac{C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}}}{C_{\mathrm{i}}^{0}} .$$

برای جاهای خالی و بین‌نشین‌های در تعادل می‌توان نوشت:

(۹۵-۸)

$$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}} C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}} = C_{\mathrm{v}}^{0} C_{\mathrm{i}}^{0} ,$$

یا از معادله‌ی ۸-۹۴:

(۹۶-۸)

$$\mu_{\mathrm{v}} = -\mu_{\mathrm{i}} .$$

با ترکیب معادله‌های ۸-۹۳ و ۸-۹۴ برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها، داریم:

(۹۷-۸)

$$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}} = C_{\mathrm{v}}^{0} \exp\left(-\frac{\mathrm{d}E_{\mathrm{L}}/\mathrm{d}m_{\mathrm{i}}}{kT}\right)$$
$$C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}} = C_{\mathrm{i}}^{0} \exp\left(\frac{\mathrm{d}E_{\mathrm{L}}/\mathrm{d}m_{\mathrm{i}}}{kT}\right) .$$

با استفاده از معادله‌ی ۷-۶۲ برای انرژیِ یک حلقه فرانک داریم:

$$E_{\mathrm{L}} = 2\pi\mu b^2 \left(\frac{\sqrt{3}a^2 m_{\mathrm{i}}}{4\pi}\right)^{1/2} + \pi\left(\frac{\sqrt{3}a^2 m_{\mathrm{i}}}{4\pi}\right)\gamma_{\mathrm{SFE}} ,$$

و حذف عبارت دوم به منظور ساده‌سازی، در نتیجه $\mathrm{d}E_\mathrm{L}/\mathrm{d}m_\mathrm{i}$ برابر است با:

(۹۸-۸)

$$\frac{\mathrm{d}E_\mathrm{L}}{\mathrm{d}m_\mathrm{i}} = \frac{\Theta}{2\sqrt{m_\mathrm{i}}}\,,$$

که Θ برابر با $2\pi\mu b^2(\frac{\sqrt{3}a^2}{4\pi})^{\frac{1}{2}}$ است و با جایگذاری در معادله‌ی ۸-۹۷ می‌توان نوشت:

(۹۹-۸)

$$C_\mathrm{v}^\mathrm{L} = C_\mathrm{v}^0 \exp\left(-\frac{\Theta}{2\sqrt{m_\mathrm{i}}kT}\right)$$
$$C_\mathrm{i}^\mathrm{L} = C_\mathrm{i}^0 \exp\left(\frac{\Theta}{2\sqrt{m_\mathrm{i}}kT}\right)\,.$$

قابل ذکر است که غلظت جای خالیِ در تعادل با یک حلقه‌ی بین‌نشین، کم‌تر از غلظت تعادلی جای خالی در جامد است درحالی‌که برای بین‌نشین‌ها عکس این مطلب صحیح است. نرخ‌های جذب جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در حلقه‌ها از معادله‌ی ۸-۸۸ برابر است با:

(۱۰۰-۸)

$$A_\mathrm{v}^\mathrm{L} = z_\mathrm{v} D_\mathrm{v} \rho_\mathrm{L}\left[C_\mathrm{v} - C_\mathrm{v}^0 \exp\left(-\frac{\Theta}{2\sqrt{m_\mathrm{i}}kT}\right)\right]$$
$$A_\mathrm{i}^\mathrm{L} = z_\mathrm{i} D_\mathrm{i} \rho_\mathrm{L}\left[C_\mathrm{i} - C_\mathrm{i}^0 \exp\left(\frac{\Theta}{2\sqrt{m_\mathrm{i}}kT}\right)\right]\,.$$

چاهک‌های گرایش متغیر

شدت‌های چاهک‌های گرایش متغیر در معادله‌ی ۵-۱۱۷ تعیین شده و برابر است با:

$$k_\mathrm{vCP}^2 = 4\pi R_\mathrm{CP}\rho_\mathrm{CP}Y_\mathrm{v}$$
$$k_\mathrm{iCP}^2 = 4\pi R_\mathrm{CP}\rho_\mathrm{CP}Y_\mathrm{i}\,,$$

که $Y_{v,i}$ شدت چاهک‌ها برای رسوبات هم‌بسته برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها هستند و نرخ اتلاف عیوب نقطه‌ای به رسوبات هم‌بسته برابر است با:

(۱۰۱-۸)

$$A_v^{CP} = k_{vCP}^2 D_v C_v = 4\pi R_{CP}\rho_{CP} C_v Y_v$$
$$A_i^{CP} = k_{iCP}^2 D_i C_i = 4\pi R_{CP}\rho_{CP} C_i Y_i \,.$$

۸-۲-۲ موازنه‌های عیب نقطه‌ای

اکنون که عباراتی برای نرخ‌های جذب عیوب برای هر نوع از چاهک‌ها وجود دارد، می‌توان موازنه‌های حالت پایدارِ عیب نقطه‌ای برای جامد تحت پرتودهی را نوشت:

(۱۰۲-۸)

$$K_0 - \sum_j A_v^j - R_{iv} = 0$$
$$K_0 - \sum_j A_i^j - R_{iv} = 0\,,$$

و در صورت کلی‌تر:

(۱۰۳-۸)

$$K_0 - k_v^2 D_v (C_v - C_v^X) - K_{iv} C_v C_i = 0$$
$$K_0 - k_i^2 D_i (C_i - C_i^X) - K_{iv} C_v C_i = 0\,,$$

که K_v^2 و K_i^2 شدت‌های کلی چاهک برای اتلاف جای خالی و بین‌نشین هستند:

(۱۰۴-۸)

$$k_v^2 = k_{vV}^2 + k_{vIP}^2 + k_{vgb}^2 + k_{vN}^2 + k_{vL}^2 + k_{vCP}^2$$
$$k_i^2 = k_{iV}^2 + k_{iIP}^2 + k_{igb}^2 + k_{iN}^2 + k_{iL}^2 + k_{iCP}^2\,,$$

و $C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{x}}$ و $C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{x}}$ غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در سطح چاهک هستند. اکنون، از آن‌جایی که نرخ‌های تولید عیب و نرخ‌های بازترکیبی در معادله‌ی ۸-۱۰۳ برابر هستند و هیچ‌گونه تجمع عیوب نقطه‌ای در رسوبات هم‌بسته وجود ندارد، در نتیجه:

$$\sum_j A_{\mathrm{v}}^j = \sum_j A_{\mathrm{i}}^j \ , \tag{۸-۱۰۵}$$

یا

$$A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}} + A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{IP}} + A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{gb}} + A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} + A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}} = A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{V}} + A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{IP}} + A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{gb}} + A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} + A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}} \ , \tag{۸-۱۰۶}$$

و بنابراین:

$$\begin{aligned}&(k_{\mathrm{vV}}^2 + k_{\mathrm{vIP}}^2 + k_{\mathrm{vgb}}^2 + k_{\mathrm{vN}}^2 + k_{\mathrm{vL}}^2 + k_{\mathrm{vCP}}^2) D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} - L_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}} - L_{\mathrm{v}}^{N} - L_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}} \\ &= (k_{\mathrm{iV}}^2 + k_{\mathrm{iIP}}^2 + k_{\mathrm{igb}}^2 + k_{\mathrm{iN}}^2 + k_{\mathrm{iL}}^2 + k_{\mathrm{iCP}}^2) D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - L_{\mathrm{i}}^{\mathrm{L}} \ .\end{aligned} \tag{۸-۱۰۷}$$

که عبارت‌های L، نشر حرارتی عیوب از چاهک‌ها هستند.

با جایگذاری معادلات شدت چاهک و نشر حرارتی از معادلات مربوطه در فصل‌های ۵ و ۷ می‌توان نوشت:

(۸-۱۰۸)

$$\begin{aligned}&4\pi R_{\mathrm{V}} \rho_{\mathrm{V}} D_{\mathrm{v}} \left[C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^0 \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT} \right) \right] + z_{\mathrm{v}} \rho_N D_{\mathrm{v}} \left(C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^{(0)} \right) + 4\pi R_{\mathrm{CP}} \rho_{\mathrm{CP}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} Y_{\mathrm{v}} \\ &\quad + z_{\mathrm{v}} \rho_{\mathrm{L}} D_{\mathrm{v}} \left[C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^0 \exp\left(-\frac{\Theta}{2\sqrt{m_{\mathrm{i}}} kT} \right) \right] \\ &= \pi R_{\mathrm{V}} \rho_{\mathrm{V}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} + z_{\mathrm{i}} \rho_{\mathrm{N}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} + 4\pi R_{CP} \rho_{\mathrm{CP}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} Y_{\mathrm{i}} \\ &\quad + z_{\mathrm{i}} \rho_{\mathrm{L}} D_{\mathrm{i}} \left[C_{\mathrm{i}} - C_{\mathrm{i}}^0 \exp\left(\frac{\Theta}{2\sqrt{m_{\mathrm{i}}} kT} \right) \right] \ ,\end{aligned}$$

که عبارات مربوط به مرزدانه‌ها و رسوبات ناهم‌بسته برای ساده‌سازی نادیده گرفته شده است. از آن‌جایی که غلظت تعادل حرارتی بین‌نشین‌ها، C_{i}^{0} بی‌نهایت کوچک است، نشر حرارتی بین‌نشین‌ها از حلقه‌ها می‌تواند نادیده گرفته شود.

۸-۳ معادله‌ی رشد حفره

اکنون که نرخ جذب عیوب برای هر چاهک در جامد تعیین شد، روی حفره با دیدگاه تعیین عبارتی برای نرخ رشد آن تمرکز می‌شود. معادله‌ی رشد حفره منشأ در شار خالص جاهای خالی به یک نطفه‌ی حفره دارد. نرخ خالص جذب جاهای خالی به وسیله‌ی یک حفره برابر است با:

(۸-۱۰۹)

$$A_{\mathrm{net}}^{\mathrm{V}} = A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}} - A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{V}} = 4\pi R D_{\mathrm{v}} \left(C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}\right) - 4\pi R D_{\mathrm{i}} \left(C_{\mathrm{i}} - C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{V}}\right) \ ,$$

که

R= شعاع حفره (اندیس V به منظور سادگی حذف شده است)

$C_{\mathrm{v,i}}$ = غلظت جای خالی بین‌نشین در جامد

$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}$ = غلظت جای خالی در سطح حفره،

و نشر حرارتی بین‌نشین‌ها از حلقه‌ها نادیده گرفته شده است.

نرخ تغییر در حجم حفره برابر با حاصل‌ضرب نرخ جذب خالص در حجم عیب، Ω است:

(۸-۱۱۰)

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = 4\pi R \Omega \left[D_{\mathrm{v}} \left(C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}\right) - D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}}\right] \ ,$$

و از آن‌جایی که:

(۸-۱۱۱)

$$V = \frac{4}{3}\pi R^{3} \ ,$$

و شکل معمول معادله‌ی رشد حفره به‌دست می‌آید:

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} = \dot{R} = \frac{\Omega}{R}\left[D_{\mathrm{v}}\left(C_{\mathrm{v}} - C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}\right) - D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}\right] . \qquad (۱۱۲-۸)$$

هدف تعیین عبارتی برای معادله‌ی رشد حفره است که مقادیر C_{v}، C_{i} و $C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}$ را مورد محاسبه قرار دهد. فرایند حل کلی، حل معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای در معادله‌ی ۸-۷۵ برای C_{v} و C_{i} در بعضی از مقادیر ابتدایی شعاع‌های حفره، $R(0)$ و سپس استفاده از آن مقادیر C_{v} و C_{i} در معادله‌ی ۸-۱۱۲ برای افزایش اندازه‌ی حفره از R به R' است. ازآن‌جایی که شدت چاهک‌ها با اندازه‌ی حفره تغییر می‌کند برای فاصله‌ی بعدی رشد حفره مقادیر جدیدی از C_{v} و C_{i} باید به‌دست آید. سپس فرایند برای تشریح تغییر در اندازه‌ی حفره با زمان و مقدار مجاز پرتوگیری تکرار می‌شود. این فرایند می‌تواند به صورت آماری و با مراحل زمانی کوچک به منظور حداقل کردن فاصله‌ی زمانی انجام شود که در سراسر آن شدت چاهک‌ها ثابت فرض شده است. در حل اندازه‌ی حفره با این روش تغییرات ریزساختاری نیز می‌تواند در مرزهای مرحله‌ی زمانی وارد شود.

درحالی‌که راه‌حل آماریِ معادله‌ی رشد حفره نتایج بسیار دقیقی را تولید می‌کند. این روش هیچ‌گونه بینشی را از فرایندهای پوشش دهنده در طول رشد حفره فراهم نمی‌کند. برایس فورد و بلوگ [۱۵] برای به‌دست آوردن یک نتیجه‌ی تحلیلی تقریبی که ابزار دقیقی برای فهم عوامل پوشش دهنده‌ی رشد حفره را فراهم می‌کند، حل معادله‌ی ۸-۷۵ را در معادله‌ی ۸-۱۱۲ وارد کردند. منصور[1] [۵، ۱۶] تحلیلی را برای بیان نحوه‌ی تأثیرگذاری ضریب‌های بحرانی روی رشد حفره توسعه داد. به منظور تعیین غلظت‌های حجمی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها، C_{v} و C_{i}، به معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای در حالت پایدار باز می‌گردیم. نرخ زمانی تغییر غلظت‌های جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در معادله‌ی ۸-۷۵ برابر با صفر در نظر گرفته می‌شود و می‌توان نوشت:

$$K_0 - \sum_j A_{\mathrm{v}}^j - R_{\mathrm{iv}} = 0 \qquad (۱۱۳-۸)$$

$$K_0 - \sum_j A_{\mathrm{i}}^j - R_{\mathrm{iv}} = 0 ,$$

1. Mansur

یا

$$K_0 - K_{iv}C_iC_v - K_{vs}C_vC_s = 0$$
$$K_0 - K_{iv}C_iC_v - K_{is}C_iC_s = 0\ , \tag{۸-۱۱۴}$$

با راه‌حل‌های:

$$C_v = \frac{-K_{is}C_s}{2K_{iv}} + \left[\frac{K_0K_{vs}}{K_{iv}K_{is}} + \frac{K_{vs}^2C_s^2}{4K_{iv}}\right]^{1/2}$$
$$C_i = \frac{-K_{vs}C_s}{2K_{iv}} + \left[\frac{K_0K_{is}}{K_{iv}K_{vs}} + \frac{K_{is}^2C_s^2}{4K_{iv}}\right]^{1/2}\ , \tag{۸-۱۱۵}$$

که C_s غلظت چاهک است. با استفاده از جدول ۵-۱ برای نوشتن ثوابت سرعتی واکنش برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در چاهک‌ها به صورت شدت چاهک‌ها، نتیجه می‌شود که:

(۸-۱۱۶)

$$C_v = \frac{-k_i^2}{2K_{iv}} + \left[\frac{K_0k_v^2D_i}{K_{iv}k_i^2D_v} + \frac{k_v^2D_v^2}{4K_{iv}}\right]^{1/2}$$
$$C_i = \frac{-k_v^2}{2K_{iv}} + \left[\frac{K_0k_i^2D_v}{K_{iv}k_v^2D_i} + \frac{k_i^2D_i^2}{4K_{iv}}\right]^{1/2}.$$

و با تعریف:

$$\eta = \frac{4K_{iv}K_0}{D_iD_vk_v^2k_i^2}\ , \tag{۸-۱۱۷}$$

و

$$k_v^2 = z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V + 4\pi R_{CP}\rho_{CP}$$
$$k_i^2 = z_i\rho_d + 4\pi R\rho_V + 4\pi R_{CP}\rho_{CP}\ , \tag{۸-۱۱۸}$$

که به منظور ساده‌سازی، مرزدانه‌ها، رسوبات غیرهم‌بسته و ضریب‌های گرایش روی حفره‌ها و رسوبات هم‌بسته نادیده گرفته شده‌اند و نابجایی‌های شبکه و حلقه‌های نابجایی با یک عبارت تکی با دانسیته‌ی $\rho_d = \rho_N + \rho_L$ بیان می‌شوند. با استفاده از معادله‌های ۸-۱۱۷ و ۸-۱۱۸، معادله‌ی ۸-۱۱۶ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۸-۱۱۹)

$$C_v = \frac{D_i k_i^2}{2K_{iv}}\left[(\eta+1)^{1/2}-1\right]$$
$$C_i = \frac{D_v k_v^2}{2K_{iv}}\left[(\eta+1)^{1/2}-1\right] .$$

نرخ رشد حفره از معادله‌ی ۸-۱۱۲ می‌تواند به شکل زیر نوشته شود:

(۸-۱۲۰)

$$\dot{R} = \dot{R}_0 X(\eta) ,$$

که

(۸-۱۲۱)

$$\dot{R}_0 = \frac{\dfrac{K_0(z_i - z_v)\rho_d\Omega}{R(z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V)}}{z_i\rho_d + 4\pi R\rho_V + 4\pi R_{CP}\rho_{CP}\left[1 + \dfrac{(z_i - z_v)\rho_d}{z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V}\right]} .$$

معادله‌ی ۸-۱۲۱ می‌تواند با حذف عبارت آخر در براکت‌ها در مخرج ساده شود، از آن‌جایی که تفاوت ($z_i - z_v$) کوچک است، در نتیجه:

(۸-۱۲۲)

$$\dot{R}_0 = \frac{K_0(z_i - z_v)\rho_d\Omega}{R(z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V)(z_i\rho_d + 4\pi R\rho_V + 4\pi R_{CP}\rho_{CP})} .$$

این عبارت رشد مستقل از دما است و متناسب با گرایش نابجایی‌ها برای بین‌نشین‌ها ($z_i - z_v$) و نرخ تولید عیب است. قابل ذکر است که $\dot{R}_0$:

- مستقل از دما،
- متناسب با گرایش نابجایی‌ها($z_i - z_v$)،
- متناسب با نرخ تولید عیب، K_0است.

عبارت $X(\eta)$ با رابطه‌ی زیر تعیین می‌شود:

$$X(\eta) = F(\eta) - 2\zeta \,, \tag{۸-۱۲۳}$$

که

$$F(\eta) = \frac{2}{\eta}\left[(\eta+1)^{1/2} - 1\right] \,, \tag{۸-۱۲۴}$$

و η یک ضریب بی بعد تعریف شده در معادله‌ی ۸-۱۱۷ است. با جایگذاری معادله‌ی ۸-۱۲۳ در معادله ۸-۱۲۰:

$$\dot{R} = \dot{R}_0 F(\eta) - 2\dot{R}_0\zeta \,. \tag{۸-۱۲۵}$$

کمیت η در تابع $F(\eta)$، می‌تواند با جایگذاری برای K_v^2 و K_i^2 از معادله‌ی ۸-۱۰۴ (یا جدول ۵-۱) ساده شود، که در نتیجه:

$$\eta = \frac{4K_{iv}K_0}{D_i D_v (z_i\rho_D + 4\pi R\rho_V + 4\pi R_{CP}\rho_{CP})(z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V + 4\pi R_{CP}\rho_{CP})} \,. \tag{۸-۱۲۶}$$

با استفاده از این تقریب که $z_i \cong z_v$ و با حذف K_{iv} با استفاده از معادله‌ی ۵-۵۷ می‌توان نوشت:

$$\eta = \frac{4 z_{iv} K_0 \Omega}{D_i D_v (z\rho_D + 4\pi R\rho_V + 4\pi R_{CP}\rho_{CP})^2} \,. \qquad (۱۲۷-۸)$$

به منظور به‌دست آوردن عبارتی برای $F(\eta)$، عبارت موجود برای η در معادله‌ی ۸-۱۲۴ جایگذاری می‌شود. این تابع اثر بازترکیبیِ همگن روی رشد حفره را تشریح می‌کند (شکل ۸-۱۵). هنگامی که بازترکیبی قابل چشم‌پوشی است $K_{iv}\to 0$ و $\eta\to 0$ میل خواهند کرد، و $F\to 1$ یا $\lim_{\eta\to 0} F(\eta)=1$ میل می‌کند.

عبارت دوم در معادله‌ی ۸-۱۲۵ به منظور سادگی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\dot{R}_{th} = -2\dot{R}_0\zeta \,, \qquad (۱۲۸-۸)$$

در نتیجه معادله‌ی ۸-۱۲۵ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\dot{R} = \dot{R}_0 F(\eta) + \dot{R}_{th} \,, \qquad (۱۲۹-۸)$$

عبارت ζ، تابعی از دما است و به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\zeta = \zeta(T) = \frac{D_v(z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V)\left[z_i\rho_d + 4\pi(R\rho_V + R_{CP}\rho_{CP})\right]}{2K_0(z_i - z_v)\left[z_v p_d + 4\pi(R\rho_V + R_{CP}\rho_{CP})\right]} \times \left[4\pi R_{CP}\rho_{CP}C_v^V + z_v\left\{\rho_N\left(C_v^V - C_v^0\right) + \rho_L\left(C_v^V - C_v^L\right)\right\}\right] \,. \qquad (۱۳۰-۸)$$

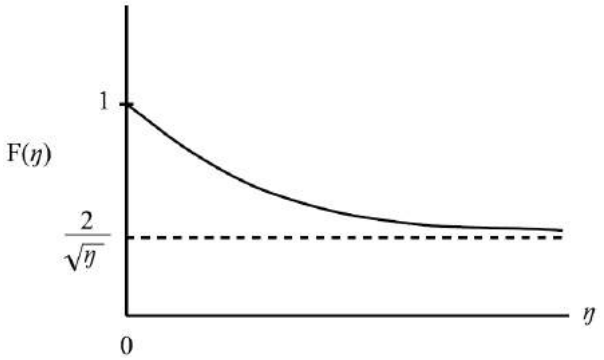
در نتیجه

$$\dot{R}_{th} = -2\dot{R}_0\zeta = \frac{-2D_v(z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V)\left[z_i\rho_d + 4\pi(R\rho_V + R_{CP}\rho_{CP})\right]}{2K_0(z_i - z_v)\rho_d\left[z_v\rho_d + 4\pi(R\rho_V + R_{CP}\rho_{CP})\right]} \times \frac{\dfrac{K_0(z_i - z_v)\rho_d\Omega}{R(z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V)}}{z_i\rho_d + 4\pi R\rho_V + 4\pi R_{CP}\rho_{CP}\left[1 + \dfrac{(z_i - z_v)\rho_d}{z_v\rho_d + 4\pi R\rho_V}\right]} \times \left[4\pi R_{CP}\rho_{CP}C_v^V + z_v\left[\rho_N\left(C_v^V - C_v^0\right) + \rho_L\left(C_v^V - C_v^L\right)\right]\right] . \qquad (۱۳۱-۸)$$

با در نظر گرفتن تقریب $z_i \cong z_v$ تعدادی از عبارت‌ها در معادله‌ی ۸-۱۳۱ از بین می‌روند و در نتیجه:

(۸-۱۳۲)

$$\dot{R}_{th} = \frac{-D_v \Omega}{R(z_i \rho_d + 4\pi R \rho_V + 4\pi R_{CP} \rho_{CP})} \times \left[4\pi R_{CP} \rho_{CP} C_v^V + z_v \left[\rho_N \left(C_v^V - C_v^0\right) + \rho_L \left(C_v^V - C_v^L\right)\right]\right] .$$



شکل ۸-۱۵. رفتار تابع $F(\eta)$ در معادله‌ی ۸-۱۲۴ به صورت تابعی از η.

با جایگذاری C_v^V و C_v^L به ترتیب از معادله‌های ۸-۸۵ و ۸-۹۹ نتیجه می‌شود که:

(۸-۱۳۳)

$$\dot{R}_{th} = \frac{-D_v \Omega}{R(z_i \rho_d + 4\pi R \rho_V + 4\pi R_{CP} \rho_{CP})} \times \left[4\pi R_{CP} \rho_{CP} C_v^0 \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT}\right) + z_v \left[\rho_N \left(C_v^0 \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT}\right) - C_v^0\right) + \rho_L \left(C_v^0 \exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT}\right) - C_v^0 \exp\left(-\frac{\Theta}{2\sqrt{m_i} kT}\right)\right)\right]\right] .$$

با تقریب گرفتن $\exp(x) \sim x + 1$ برای xهای کوچک، در عبارت‌های نمایی معادله‌ی ۸-۱۳۳ می‌توان نوشت:

(۸-۱۳۴)

$$\dot{R}_{\mathrm{th}} = \frac{-D_{\mathrm{v}}\Omega}{R(z_{\mathrm{i}}\rho_{\mathrm{d}} + 4\pi R\rho_{\mathrm{V}} + 4\pi R_{\mathrm{CP}}\rho_{\mathrm{CP}})} \times \left[4\pi R_{\mathrm{CP}}\rho_{\mathrm{CP}}C_{\mathrm{v}}^{0}\exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT}\right) + z_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}}^{0}\left[\rho_{\mathrm{N}}\frac{2\gamma\Omega}{RkT} + \rho_{\mathrm{L}}\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT} + \frac{\Theta}{2\sqrt{m_{\mathrm{i}}kT}}\right)\right]\right],$$

و با بیرون کشیدن عبارت C_{v}^{0} از ضریب نتیجه می‌شود که:

(۸-۱۳۵)

$$\dot{R}_{\mathrm{th}} = \frac{-D_{\mathrm{v}}\Omega C_{\mathrm{v}}^{0}}{R(z_{\mathrm{i}}\rho_{\mathrm{d}} + 4\pi R\rho_{\mathrm{V}} + 4\pi R_{\mathrm{CP}}\rho_{\mathrm{CP}})} \times \left[4\pi R_{\mathrm{CP}}\rho_{\mathrm{CP}}\exp\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT}\right) + z_{\mathrm{v}}\rho_{\mathrm{N}}\frac{2\gamma\Omega}{RkT} + z_{\mathrm{v}}\rho_{\mathrm{L}}\left(\frac{2\gamma\Omega}{RkT} + \frac{A}{2\sqrt{m_{\mathrm{i}}kT}}\right)\right],$$

که عبارت ساده شده برای عبارت نشر حرارتی است. این عبارت نشر حرارتی عیوب از چاهک‌ها را نشان می‌دهد که مستقل از نرخ تولید عیب و به شدت وابسته به دما است. قابل ذکر است که در دماهای بسیار پایین به علت عبارت‌های D_{v} و C_{v}^{0}، $\dot{R}_{\mathrm{th}} \to 0$ میل می‌کند.

نرخ تغییر در شعاع حفره با زمان، $\dot{R}$، که از معادله‌ی ۸-۱۲۰ تعیین شد، می‌تواند برای تعیین نرخ تورم[1] حجمی مورد استفاده قرار گیرد:

(۸-۱۳۶)

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = 4\pi R^{2}\dot{R}\,.$$

1. Swelling

تورم حفره می‌تواند بر حسب توزیع اندازه‌ی حفره به صورت زیر نشان داده شود. اگر $\rho_V(R)\mathrm{d}R$ تعداد حفره‌ها در سانتی‌متر مکعب با شعاع بین R و $R+\mathrm{d}R$ باشند، در نتیجه عدد کلیِ دانسیته‌ی حفره برابر است با:

$$\rho_V = \int_0^\infty \rho_V(R)\,\mathrm{d}R\,, \tag{۸-۱۳۷}$$

و میانگین اندازه‌ی حفره برابر است با:

$$\overline{R} = \frac{1}{\rho_V}\int_0^\infty R\rho_V(R)\,\mathrm{d}R\,, \tag{۸-۱۳۸}$$

و مقدار تورم حفره با تغییر در حجم جامد تعریف می‌شود:

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{4}{3}\pi\int_0^\infty R^3\rho_V(R)\,\mathrm{d}R\,. \tag{۸-۱۳۹}$$

اگر توزیع حفره باریک باشد، در نتیجه می‌توان انتگرال موجود در معادله‌ی ۸-۱۳۹ را به صورت زیر تقریب زد:

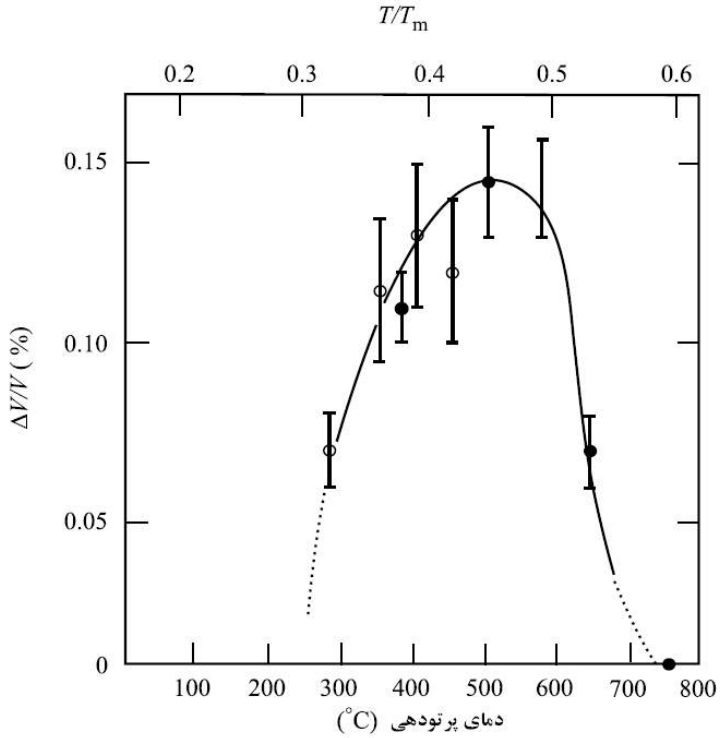
$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{4}{3}\pi\overline{R}^3\rho_V\,. \tag{۸-۱۴۰}$$

معادلات به‌دست آمده در این فصل امکان تعیین نرخ رشد حفره‌ها در یک جامدِ تحت پرتودهی و در نتیجه نرخ تورم و تورم را فراهم می‌کند. فصل بعدی، اثرات ضریب‌های مختلف روی رشد حفره را نشان می‌دهد.

۸-۳-۱ وابستگیِ دمایی

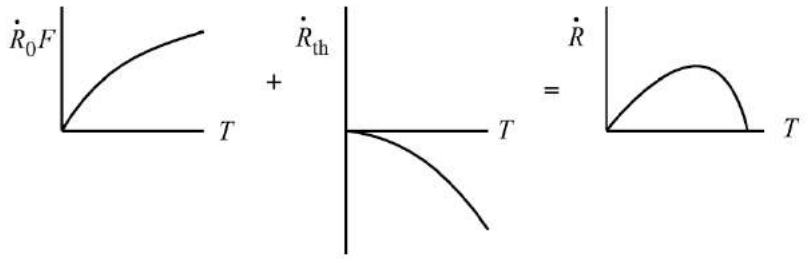
شکل ۸-۱۶، یک منحنی نمونه‌وار از تورم حفره به صورت تابعی از دما را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که تورم با یک بیشینه در دماهای میانی توصیف می‌شود. این رفتار باید شبیه به وابستگی دمایی جدایش القایی تابشی باشد زیرا منشأ آن‌ها در اصل مشابه است. تحرک پایین عیب، رشد حفره در دمای پایین و روند نزدیک شدن غلظت عیب به مقدار تعادل حرارتی را محدود می‌کند و از آن‌رو اتلاف فوق اشباع، رشد حفره در دماهای بالا را محدود می‌کند. در تحلیل قبلی معادله‌ی رشد حفره، دو ضریب بسیار حساس در دمای بالا، ضریب نفوذ جای خالی D_{v} و غلظت جای خالی تعادلی C_{v}^{0} هستند. وابستگی دمایی عبارت $\dot{R}_0 F(\eta)$ در ضریب η گنجانده شده است که با D_{v} کنترل می‌شود. در دماهای پایین، تورم پایین است زیرا جاهای خالی در عمل غیرمتحرک هستند. یک مقدار کم از D_{v}، η را بزرگ کرده و نیروی‌های F را کوچک می‌کند که در نتیجه منجر به مقادیر پایین عبارت $\dot{R}_0 F(\eta)$ می‌شود. عبارت $\dot{R}_{\mathrm{th}}$ به صفر نزدیک می‌شود زیرا متناسب با $D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{0}$ است. از آن‌جایی که $F'(\eta)$ و $\dot{R}_{\mathrm{th}}$ در دماهای پایین کوچک هستند، رشد حفره متوقف $F'(\eta)$ و $\dot{R}_{\mathrm{th}}$ در دماهای پایین کوچک هستند، رشد حفره متوقف می‌شود. تحت این شرایط، غلظت جاهای خالی افزایش می‌یابد و جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی بازترکیبی از بین می‌روند.

در دماهای بالا، نشر جاهای خالی به وسیله‌ی حفره‌ها، جریان خالص جای خالی تحریک شده به وسیله‌ی پرتودهی را متعادل می‌کند و تورم متوقف می‌شود. هنگامی که در معادله‌ی رشد حفره، η کوچک می‌شود و F به واحد نزدیک می‌شود، عبارت $\dot{R}_{\mathrm{th}}$ نیز افزایش می‌یابد (اما در جهت منفی) و در دماهای بالا غالب می‌شود. از آن‌رو یک بیشینه‌ای در نرخ رشد در دماهای میانی که هم نشر حرارتی و هم بازترکیبی متقابل اهمیت کم‌تری دارند و شار خالص جاهای خالی به حفره‌ها بیشینه است، قابل پیش‌بینی است.



شکل ۸-۱۶. تورم در نیکل به صورت تابعی از دمای پرتودهی برای یک جریانی از 5×10^{19} n/cm^2 [۱۷].

شکل ۸-۱۷ نشان می‌دهد که چه‌طور مؤلفه‌های نرخ رشد حفره برای ایجاد یک بیشینه در دماهای میانی ترکیب می‌شوند. مشخص شده است که این وضعیت در تمام فلزات موجود است.



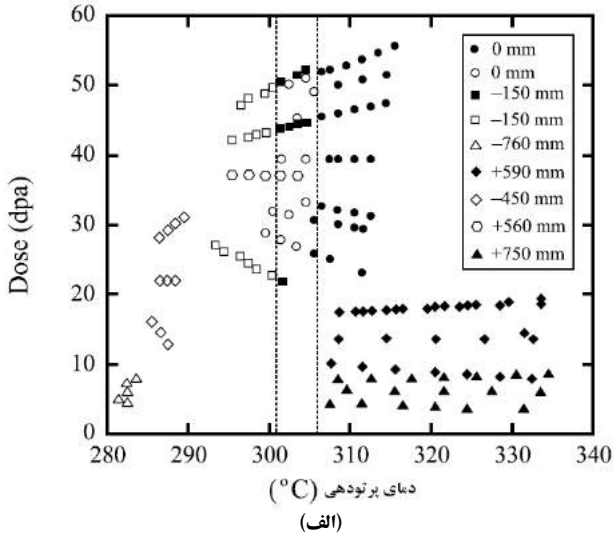
شکل ۸-۱۷. ترسیمی از نرخ کلی تورم حفره $\dot{R}$ از مؤلفه‌هایش $\dot{R}_{th}$ و $\dot{R}_0$.

شکل ۸-۱۸ الف یک مثال از وابستگی شدید تورم حفره به دما در یک آلیاژ Fe-Cr-Ni پرتودهی شده در یک رآکتور BN-350 را به صورت تابعی از مقدار مجاز پرتوگیری و دما را نشان می‌دهد. تمام اطلاعات موجود برای پرتودهی در یک دوره‌ی زمانی ثابت، منعکس کننده تغییرات نرخ‌های مقدار مجاز پرتوگیری با موقعیت در هسته هستند. نشانه‌های توپر نمونه‌هایی را نشان می‌دهد که در آن حفره‌هایی دیده شده است و نشانه‌های توخالی نمونه‌هایی هستند که هیچ‌گونه حفره‌ای را نشان نداده‌اند.

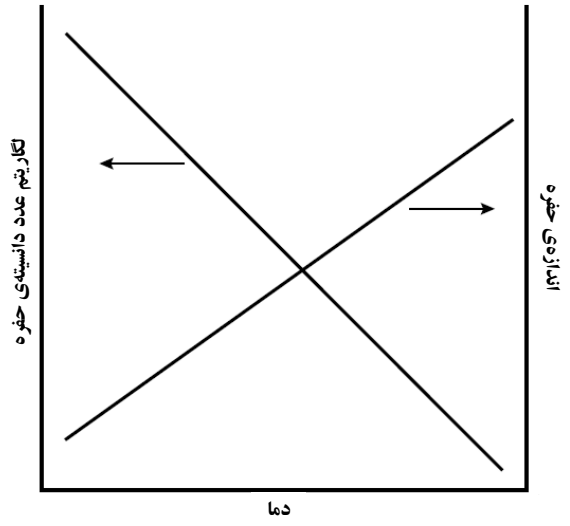
شایان ذکر است که علی‌رغم مقادیر مجاز پرتوگیری و نرخ‌های مقدار مجاز پرتوگیری متفاوت، جوانه‌زنی حفره با یک دمایِ آستانه‌ی بسیار تیز در حدود $۳۰۲-۳۰۷\ ^{o}C$ رخ می‌دهد، که نشان دهنده‌ی حساسیت بالای تشکیل حفره به دما است. رفتار کلی عدد دانسیته‌ی حفره و اندازه با دما در شکل ۸-۱۸ب نشان داده شده است.

با افزایش دما، دانسیته‌ی حفره به صورت لگاریتمی کاهش می‌یابد و اندازه افزایش می‌یابد که رفتار نمونه‌وار، برای فرایندی است که به وسیله‌ی جوانه‌زنی در دماهای پایین که رشد حفره آرام است و به وسیله‌ی رشد در دمای بالا کنترل می‌شود که تفاوت انرژی آزاد محرک رشد حفره کوچک است.

شکل ۸-۱۹ تصویری از ریزساختار در یک پیچ سپر مورد استفاده برای صفحات موج‌گیر در رآکتورهای آب تحت فشار را نشان می‌دهد. در این مورد سر پیچ به هسته نزدیک‌تر (بیش‌ترین مقدار پرتوگیری) و در معرض سرد کننده است از آن‌رو پایین‌ترین دما را دارد. حرارت‌دهی گاما باعث می‌شود که دمای سرد کننده (تقریباً $۳۲۰^{o}C$) در طول پیچ، افزایش یابد. درحالی‌که مقدار پرتوگیری تا حدی متفاوت است. تأثیر غالب دما با فقدان حفره‌ها در موقعیت‌های دما پایین‌تر (سر) و حفره‌هایی با اندازه‌ی بزرگ‌تر در دماهای بالاتر (ساق پیچ) نشان داده می‌شود.



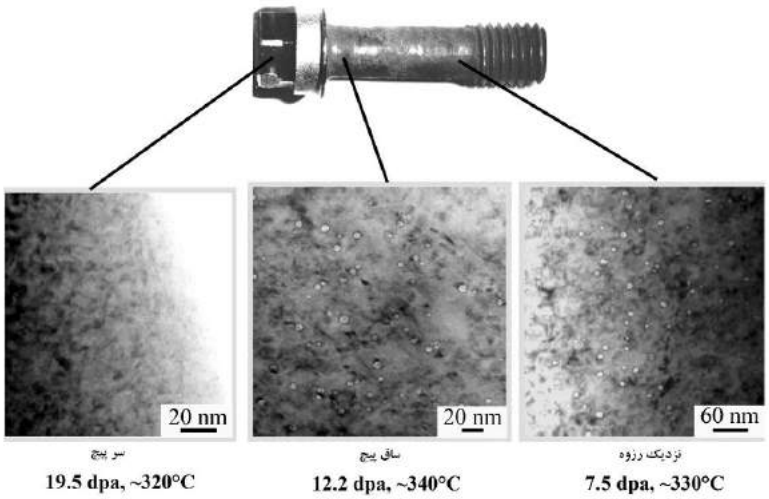
(الف)



(ب)

شکل ۸–۱۸. (الف) منحنی مقدار پرتوگیری ـ دما از تورم در آلیاژ Fe-Cr-Ni پرتودهی شده در در یک رآکتور سریع BN-350 که نشان دهنده‌ی آستانه‌ی دمایی تیز برای تورم است[۱۸].

(ب) شماتیکی از وابستگی دمایی دانسیته و اندازه‌ی حفره.



شکل ۸-۱۹. تورم در یک پیچ سپرSS 316 کارسرد شده در یک PWR به صورت تابعی از موقعیت در طول پیچ. سر پیچ نزدیک‌ترین نقطه به هسته است و توزیع دمایی به وسیله‌ی ترکیبی از حرارت‌دهی گاما و آن‌که پیچ در معرض سردکننده بوده، ایجاد شده است.

۸-۳-۲ وابستگیِ مقدار مجاز پرتوگیری

فهم آن‌که تورم به چه نحو به مقدار پرتوگیری وابسته است، در طراحی و عملکرد قطعات در محیط‌های تحت پرتودهی که در آن‌ها حفره‌های پتانسیل تشکیل و رشد را دارند بسیار حایز اهمیت و حساس است. از بحث موجود در فصل قبل، به علت رخداد نرخ تولید عیب، K_0، برحسب $\dot{R}_0$ و $F(\eta)$ وابستگی پیچیده است. در نتیجه این تمایل وجود دارد که دیدگاه متفاوتی در تعیین وابستگی نرخ رشد حفره به مقدار پرتوگیری به‌کارگرفته شود. عبارت موجود برای C_v و C_i در معادله‌ی ۸-۱۱۹ یادآوری می‌شود:

$$C_v = \frac{D_i k_i^2}{2K_{iv}} \left[(\eta + 1)^{1/2} - 1 \right]$$

$$C_i = \frac{D_v k_v^2}{2K_{iv}} \left[(\eta + 1)^{1/2} - 1 \right] ,$$

و همان‌طوری که برای η در معادله‌ی ۸-۱۱۷ مشخص شد، می‌توان نوشت:

$$\eta = \frac{4K_{iv}K_0}{D_i D_v k_v^2 k_i^2} .$$

می‌توان عبارت داخل کروشه در معادله‌ی ۸-۱۱۹ را به صورت زیر نوشت:

(۸-۱۴۱)
$$\left[(\eta+1)^{1/2}-1\right] = \left[\left(1+\frac{4K_{iv}K_0}{D_i D_v k_v^2 k_i^2}\right)^{1/2}-1\right] .$$

در نتیجه، D_vC_v و D_iC_i به صورت زیر نوشته می‌شوند:

(۸-۱۴۲)
$$D_vC_v = \frac{D_vD_ik_i^2z_v}{2K_{iv}}\left[\left(1+\frac{4K_{iv}K_0}{D_iD_vk_v^2k_i^2}\right)^{1/2}-1\right]$$
$$D_iC_i = \frac{D_vD_ik_v^2z_i}{2K_{iv}}\left[\left(1+\frac{4K_{iv}K_0}{D_iD_vk_v^2k_i^2}\right)^{1/2}-1\right] .$$

با نادیده گرفتن نشر حرارتی و جایگذاری در معادله‌ی ۸-۱۱۲، داریم:

(۸-۱۴۳)
$$\dot{R} = \frac{\Omega D_vD_i}{2RK_{iv}}\left[\left(1+\frac{4K_{iv}K_0}{D_iD_vk_v^2k_i^2}\right)^{1/2}-1\right](k_v^2z_v - k_i^2z_i) .$$

با جایگذاری k_i^2 و k_v^2 از معادله‌ی ۸-۱۰۴ و در نظر گرفتن تنها رسوبات هم‌بسته، نابجایی‌های شبکه و حلقه‌ها نتیجه می‌شود:

(۸-۱۴۴)
$$\dot{R} = \frac{\Omega D_vD_i}{2RK_{iv}}\left[\left(1+\frac{4K_{iv}K_0}{D_iD_vk_v^2k_i^2}\right)^{1/2}-1\right]$$
$$\times\left[4\pi R_{CP}\rho_{CP}\left(z_i^{CP}z_v - z_v^{CP}z_i\right)+\rho_L\left(z_i^{L}z_v - z_v^{L}z_i\right)+\rho_N\left(z_i^{N}z_v - z_v^{N}z_i\right)\right] .$$

با ساده کردن معادله‌ی ۸-۱۴۴ برای مورد حفره‌ها و دانسیته‌ی کلی نابجایی، داریم:

(۸-۱۴۵)

$$\dot{R} = \frac{\Omega D_v D_i}{2RK_{iv}} \left[\left(1 + \frac{4K_{iv}K_0}{D_i D_v k_v^2 k_i^2} \right)^{1/2} - 1 \right] \rho_d \left(z_i^d z_v - z_v^d z_i \right) .$$

عبارت $(z_i^d z_v - z_v^d z_i)$، گرایش نابجایی‌ها در مقابل گرایش حفره‌ها است و تعیین کننده‌ی گرایش یک حفره به رشد یا انقباض است. در صورتی که $z_i^d z_v > z_v^d z_i$ باشد، رشد رخ می‌دهد یا به صورت نسبتی $z_i^d / z_v^d > z_v / z_i$ است و انقباض زمانی رخ می‌دهد که نامساوی‌ها در جهت دیگر باشد. حضور دیگر چاهک‌ها از طریق ورود آن‌ها به عبارات k_i^2 و k_v^2، روی تورم تأثیرگذار خواهد بود. شدت‌های بزرگ چاهک، به علت اتلاف عیوب به این چاهک‌ها منجر به نرخ رشد پایین‌تر حفره می‌شود.

شرایط محدود کننده‌ی معادله‌ی ۸-۱۴۵ مواردی هستند که در آن‌ها بازترکیبی غالب است

$$\frac{4k_{iv}k_0}{D_i D_v k_v^2 k_i^2} \gg 1$$

(اتلاف عیوب به بازترکیبی بیش‌تر از اتلاف به چاهک‌ها است) و هم‌چنین موردی که اتلاف به چاهک‌ها غالب است $\frac{4k_{iv}k_0}{D_i D_v k_v^2 k_i^2} \gg 1$ [۵]. با فرض آن‌که علاوه برحفره‌ها تنها چاهک‌ها، نابجایی‌های شبکه باشند، می‌توان نوشت:

(۸-۱۴۶)

$$\dot{R} = \frac{\Omega}{R} \left(\frac{D_i D_v K_0}{z_i^N z_v^N K_{iv}} \right)^{1/2} \frac{Q_i^{1/2} Q_v^{1/2} \left(z_i^N z_v - z_v^N z_i \right)}{(1+Q_v)^{1/2}(1+Q_i)^{1/2}} : \quad \text{غلبه‌ی بازترکیبی}$$

(۸-۱۴۷)

$$\dot{R} = \frac{\Omega K_0 Q_i Q_v}{R\rho_N (1+Q_v)(1+Q_i)} \left(z_i^N z_v - z_v^N z_i \right) : \quad \text{غلبه‌ی چاهک}$$

که

(۱۴۸-۸)

$$Q_{\mathrm{i,v}} = \frac{z_{\mathrm{i,v}}^{N}\rho_{\mathrm{N}}}{4\pi R\rho_{\mathrm{v}}z_{\mathrm{i,v}}}$$

نسبت شدت چاهک نابجایی به شدت چاهک حفره است. قابل ذکر است که نرخ رشد هنگامی که بازترکیبی غالب باشد وابسته به $K_0^{\frac{1}{2}}$ است، معادله‌ی ۸-۱۴۶.

به هرجهت هنگامی که چاهک‌ها غالب هستند معادله‌ی ۸-۱۴۷ نشان می‌دهد که نرخ رشد متناسب با K_0 است. با ضرب معادله‌ی ۸-۱۴۷ در $4\pi R^2\rho_{\mathrm{V}}$ و در نظر گرفتن $\Omega = \frac{1}{N_0}$، دانسیته‌ی موقعیت نرخ تورم حجمی به‌دست می‌آید:

(۱۴۹-۸)

$$\frac{\mathrm{d}(\Delta V/V)}{\mathrm{d}t} = K_0\left(\frac{z_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}}{z_{\mathrm{v}}}\right)\frac{Q}{(1+Q)^2}\,.$$

این عبارت مشابه عبارت به‌دست آمده از معادله‌ی ۸-۱۲۲ با نادیده گرفتن اثر رسوبات هم‌بسته است. برای $Q = ۱$ و $z_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}} = ۰/۰۱$، می‌توان نوشت:

(۱۵۰-۸)

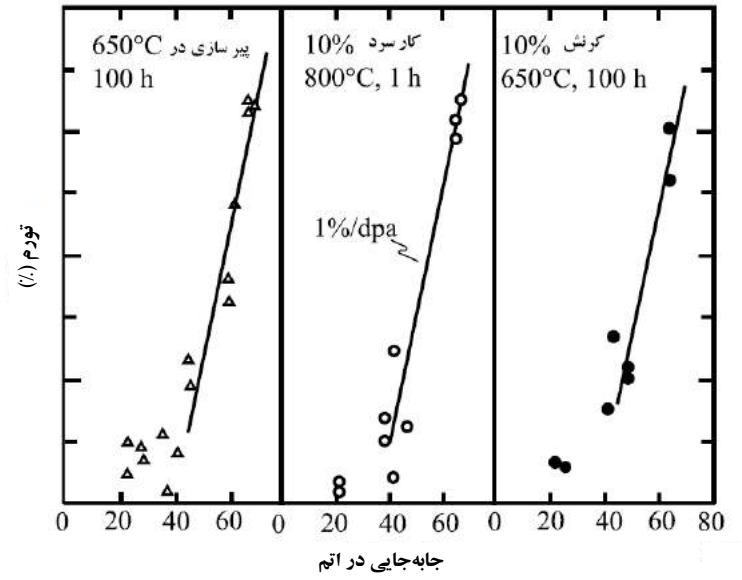
$$\frac{\Delta V}{V}\% \cong 1/4 \times (\text{dose in dpa})\,.$$

گارنر[1] [۱۹] نشان داد که در یک محدوده وسیعی از مقدار پرتوگیری، نرخ تورم حالت پایدار تقریباً ۱٪/dpa (شکل ۸-۲۰) است. وابستگی خطی با فرایندی که در آن چاهک غالب است سازگار است؛ اما بزرگی ضریب برابر با یک ضریب چهار برابری بیش‌تر از مقدار پیش‌بینی شده در معادله‌ی ۸-۱۵۰ است.

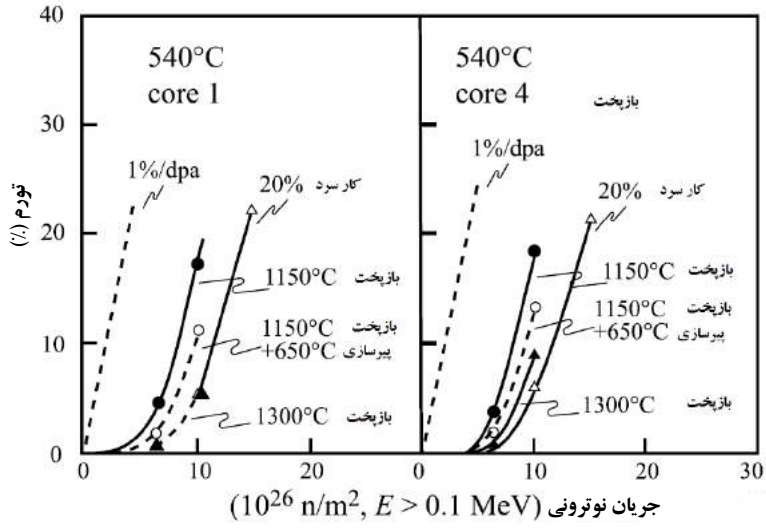
این اختلاف احتمالاً ناشی از اثر خوشه‌ها است که برای مدل تئوری سرعتی محاسبه نشده‌اند. یک نگاه دقیق‌تر به رفتار جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در آبشار نشان می‌دهد که کسر جاهای خالی و بین‌نشین‌هایی که خوشه را تشکیل می‌دهند از مقادیر محاسبه شده بزرگ‌تر است. خوشه‌های جای خالی نزدیک هسته‌ی آبشار تشکیل می‌شوند و خوشه‌های بین‌نشینی نزدیک به پیرامون آبشار تشکیل می‌شوند. خوشه‌های بین‌نشینی متحرک می‌توانند با مهاجرت خوشه‌ها به صورت کامل به چاهک‌ها برسند. جاهای خالی نشر شده به وسیله‌ی خوشه‌های جای خالی تشکیل شده با نشر حرارتی نیز برای رسیدن به چاهک‌ها آزاد هستند. از آن‌جایی که کسر بین‌نشین‌ها و جاهای خالی در خوشه‌ها مشابه نیستند، حتی نه در حالت پایداری حرارتی، تفاوت میان خوشه‌های جای خالی و بین‌نشینی منجر به تفاوت در نرخ‌های مؤثر تولید جاهای خالی در مقایسه با بین‌نشین‌ها می‌شود، که *گرایش تولید* نامیده می‌شود و می‌تواند روی تورم حفره تأثیر بگذارد.

نتیجه‌ی نهایی به این صورت است که شدت چاهک خوشه‌ها از حلقه‌های نابجاییِ قابل اندازه‌گیری بسیار بزرگ‌تر است که منجر به نیرو محرکه‌ی بیش‌تر برای تورم حفره از آن چیزی می‌شود که با فرمول‌های معادلات سرعت محاسبه شده است. این یکی از دلایلی است که وابستگی تورمیِ حالت پایدار مشاهده شده به مقدار مجاز پرتوگیری، بیش‌تر از آن چیزی است که با فرمول‌بندی معادله‌ی سرعتی پیش‌بینی شده است.

1. Garner



(الف)



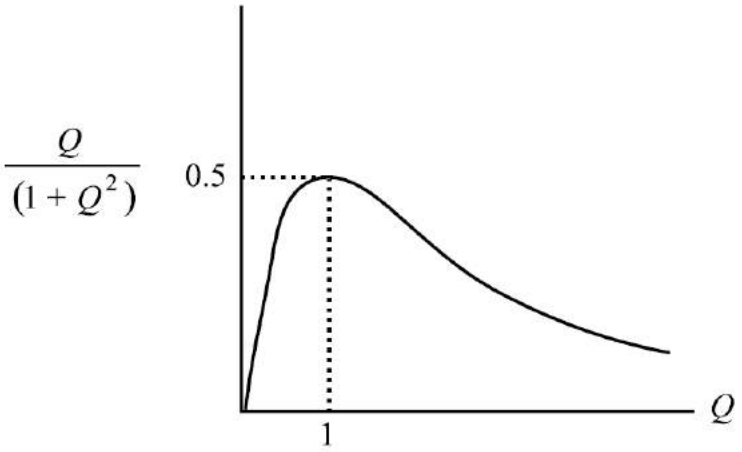
(ب)

شکل ۸–۲۰. (الف) گسترش اولیه از نرخ‌های تورم ۱٪/dpa در فولاد پیر شده‌ی OKH16N15M3B در طول پرتودهی در رآکتور BOR-60 در دمای ۵۵۰–۴۰۰°C [۲۰]. (ب) تغییرات در تورم در ۵۴۰°C در EBR-II برای دو فولاد زنگ نزن به صورت اسمی مشابه به هم حرارت‌دهی شده به صورت تابعی از شرایط ابتدایی[۲۱].

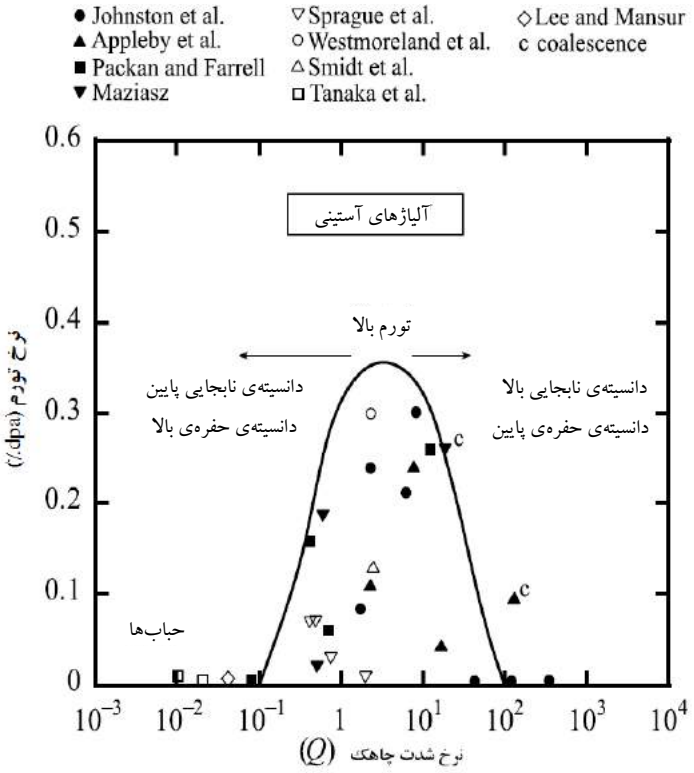
۸-۳-۳ نقش نابجایی‌ها به جای چاهک‌های گرایش شده

ساختار نابجایی یک آلیاژ می‌تواند اثر عمیقی را روی رفتار تورم آلیاژ اعمال کند. معادله‌ی ۸-۱۲۲ نشان می‌دهد که هم یک چاهک گرایش شده (به عبارت دیگر نابجایی‌ها) و هم یک چاهک خنثی برای رشد یک حفره لازم هستند. اگر گرایش حذف شود، $z_i = z_v$ است و در نتیجه $\dot{R}_0 = 0$ و تورم رخ نمی‌دهد زیرا عیوب به صورت مساوی روانه چاهک‌ها می‌شوند.

وابستگی Q ضریب $\dot{R}_0$ در شکل ۸-۲۱ نشان داده شده است. قابل ذکر است که $\dot{R}_0$ در Q = ۱، یا هنگامی که شار جاهای خالی به حفره‌ها و نابجایی‌ها برابر است بیشینه است. منطقه‌ی Q < ۱ نشان دهنده‌ی منطقه‌ی مقدار پرتوگیری پایین است که در آن هم R و هم ρ_v کوچک هستند، در نتیجه اتلاف جاهای خالی به نابجایی‌های موجود شبکه غالب است. این علتی است که به خاطر آن تورمِ آلیاژهای کار سرد شده کم‌تر است. هنگامی که $Q \sim$ ۱ است، در نتیجه شار جاهای خالی به حفره‌ها و نابجایی‌ها تقریباً برابر است. این منطقه‌ای است که گرایش بیش‌ترین تأثیر را وارد می‌کند. اگر جریان جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به چاهک برابر باشد، و اکثر بین‌نشین‌ها به نابجایی‌ها بروند، در نتیجه بیش‌تر جاهای خالی باید به حفره‌ها سرازیر شوند. در $Q \sim$ ۱، جریان‌ها برابر هستند در نتیجه گرایش در افزایش رشد حفره بسیار مؤثر است. هنگامی که Q > ۱، جریان عیب به حفره‌ها، عبارت‌های اتلاف را تحت کنترل قرار می‌دهد و از آن‌رو عیوب کمی به نابجایی‌ها جریان می‌یابند و گرایش در ایجاد عدم تعادل در شارهای عیوب نقطه‌ای چندان تأثیرگذار نیست در نتیجه جریان جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به حفره‌ها از لحاظ بزرگی مشابه است و رشد حفره آرام شده یا متوقف می‌شود. اگرچه در یک ماده کارسرد شده، نابجایی‌ها یک برتری کمی را برای بین‌نشین‌ها نشان می‌دهند $(\frac{\beta_d}{\beta_v} \geq 1)$، اما نابجایی‌ها چاهک‌های بسیار بیش‌تری را برای جاهای خالی فراهم می‌آورند که اثر فوق اشباع یک جای خالی در اصل چند برابر می‌شودکه منجر به جوانه‌زنی و نرخ‌های پایین رشد حفره می‌شوند. با سازوکار مشابه، مرزدانه‌ها چاهک‌های غیرگرایشی را برای عیوب نقطه‌ای فراهم می‌کنند و فوق اشباع جاهای خالی برای رشد را به شرط آن‌که ناحیه‌ی مرزدانه‌ای به اندازه‌ی کافی بزرگ باشد (به عبارت دیگر دانه‌های بسیار ریز)، بسیار پایین نگاه می‌دارند. شکل ۸-۲۲ منحنی نرخ تورم را برحسب نسبت شدت چاهک، Q برای چند فولاد زنگ نزن آستنیتی نشان می‌دهد و این حقیقت را تأیید می‌کند، وابستگی نشان داده شده در شکل ۸-۲۱ در عمل اجرا شده است.

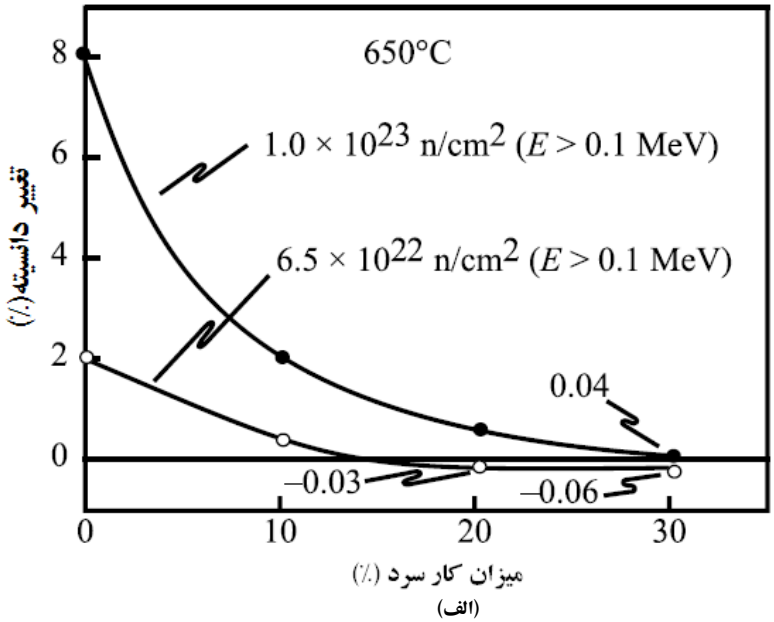


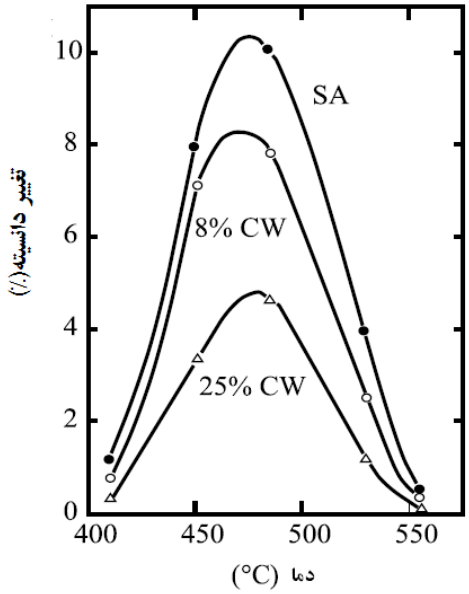
شکل ۸-۲۱. وابستگی تورم به نسبت شدت چاهک نابجایی/ حفره، Q در معادله‌ی ۸-۱۴۹.



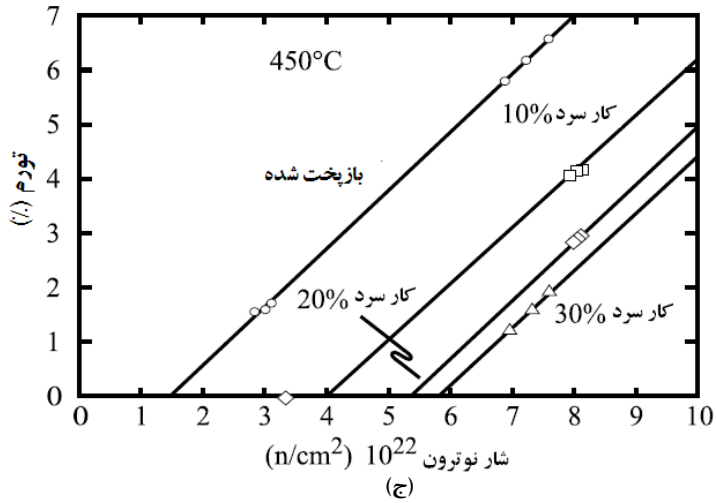
شکل ۸-۲۲. مشاهدات آزمایشگاهی نرخ‌های تورم به صورت تابعی از Q برای فولادهای زنگ نزن آستنیتی[۵].

اثر کارسرد روی تورم در پرتودهی رآکتوری در شکل ۸-۲۳ نشان داده شده است. شکل ۸-۲۳ الف اثر کارسرد روی تورم در فولاد زنگ نزن آستنیتی پرتودهی شده در EBR-II در دمای ۶۵۰°C تا سطوح ۳۰ و ۵۰dpa نشان داده شده است. قابل ذکر است که برای هر دو مورد، مقدار تورم با افزایش کار سرد کاهش می‌یابد. شکل ۸-۲۳ ب نشان می‌دهد که کار سرد وابستگی دمایی تورم را با کاهش بزرگی پیک تورم با افزایش سطح کار سرد تحت تأثیر قرار می‌دهد. اطلاعات یک فولاد زنگ نزن پرتودهی شده تا مقادیر پرتوگیری ۶۱dpa-۲۰ در رآکتور RAPSODIE گرفته شده است. شکل ۸-۲۳ ج اثر کارسرد روی وابستگی تورم به مقدار پرتوگیری در فولاد زنگ نزن آستنیتی ۳۰۴ را نشان می‌دهد و بیانگر این واقعیت است که افزایش کارسرد مقدار تورم را کاهش می‌دهد؛ اما هم‌چنان که کار سرد افزایش می‌یابد نرخ‌های کاهش کم‌تر می‌شود. شایان ذکر است که این اطلاعات نشان می‌دهد که اثر اولیه‌ی کارسرد گسترده کردن منطقه‌ی تورم زودگذر از تغییر نرخ تورم حالت پایدار است.





(ب)



(ج)

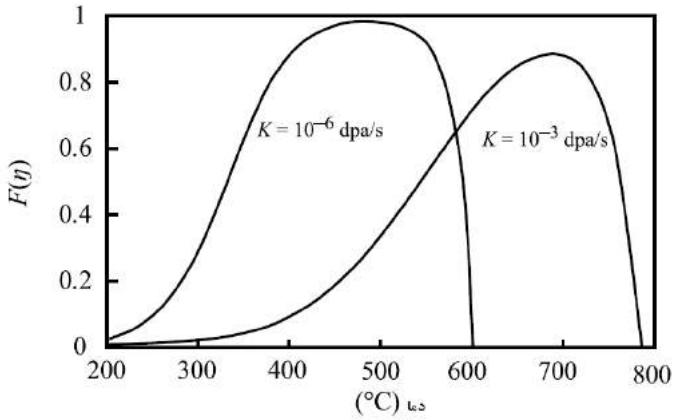
شکل ۸–۲۳. (الف) اثر میزان کارسرد روی تورم فولاد زنگ نزن پرتودهی شده ۳۱۶ در ۶۵۰°C در EBR-II تا ۳۳ و ۵۰dpa [۲۲]. (ب) وابستگی تورم به‌کارسرد برای دماهای مختلف برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده در رآکتور RAPSODIE تا مقادیر پرتوگیری ۷۱dpa–۲۰ [۲۳]. (ج) اثر کار سرد روی تورم در فولاد زنگ نزن ۳۰۴ در ۴۵۰°C در EBR-II [۲۴].

۸-۳-۴ وابستگی نرخ مقدار پرتوگیری

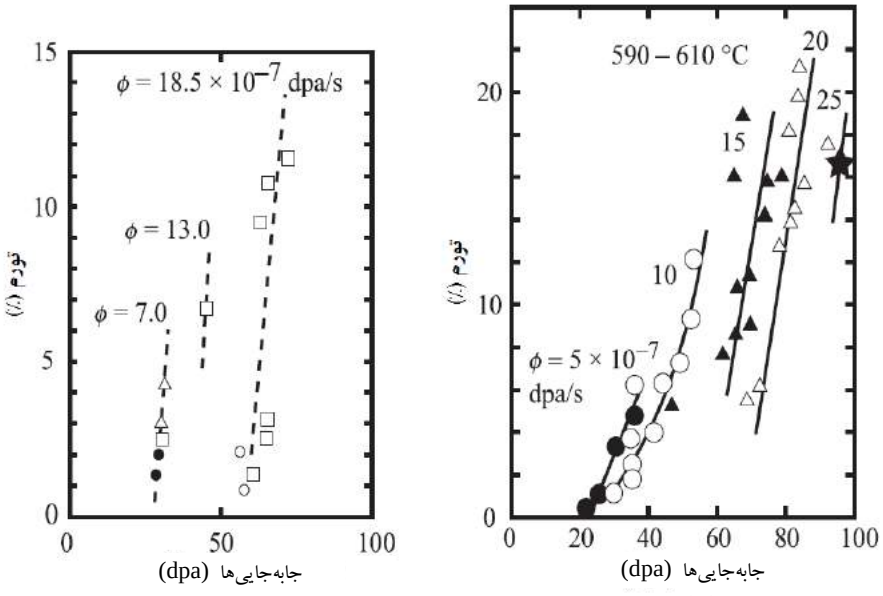
موقعیت بیشینه‌ی دمای تورم وابسته به نرخ مقدار پرتوگیری شدت چاهک و مد غالب اتلاف عیب است. هنگامی که نرخ مقدار پرتوگیری افزایش می‌یابد عیوب نقطه‌ای بیش‌تری تولید می‌شوند؛ اما سرعت‌های مهاجرت تغییر نمی‌یابد. برای حذف عیوب در نرخ‌های بالاتر در حالت پایدار لازم است که غلظت‌های عیوب بالاتر باشد که منجر به بازترکیبی بیش‌تر و یک کاهش در جذب خالص جاهای خالی به وسیله‌ی حفره‌ها می‌شود و از آن‌رو منجر به کاهش در نرخ رشد حفره می‌شود. در نتیجه منحنی زنگ شتری[1] تورم با افزایش نرخ مقدار پرتوگیری به دماهای بالاتری منتقل می‌شود. شکل ۸-۲۴ یک منحنی از وابستگی دمایی عبارت $F(\eta)$ در معادله‌ی ۸-۱۲۵ است و انتقال بیشینه‌ی تورم با نرخ مقدار پرتوگیری K_0 را نشان می‌دهد. به صورت متقابل در یک دمای مشخص نرخ رشد حفره با افزایش نرخ مقدار پرتوگیری کاهش می‌یابد. در دماهایی که نشر حرارتی قابل چشم‌پوشی نیست نرخ رشد حفره تابع پیچیده‌ای از نرخ مقدار پرتوگیری است. با وجود این اطلاعات آزمایشگاهی اثر نرخ مقدار پرتوگیری روی تورم را اثبات کرده‌اند. شکل ۸-۲۵ تورم در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ آنیل شده و کارسرد شده در دماهای بین ۵۶۲ و ۶۱۰ درجه‌ی سانتی‌گراد در سراسر یک محدوده نرخ‌های مقدار پرتوگیری را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که افزایش نرخ مقدار پرتوگیری منجر به کاهش نرخ تورم در یک مقدار پرتوگیری مشخص می‌شود؛ اما در حالت پایدار تمام اطلاعات شیب مشابهی را دارند که مشخص می‌کند که اثر اولیه نرخ مقدار پرتوگیری روی مدت دوره‌ی تحول تورم است.

اگر مقیاس دمایی افزایش یابد می‌توان نسبت نسبی مشابهی از نرخ بازترکیبی به نرخ جذب در چاهک‌ها را به‌دست آورد. در حقیقت با این الزام که این نسبت تغییرناپذیر است می‌توان رابطه‌ی میان دما و نرخ مقدار پرتوگیری را به‌دست آورد که به منزله‌ی انتقال دما[2] نامیده می‌شود.

1. Bell-Shaped
2.Temperature Shift



شکل ۸-۲۴. تغییر تابع $F(\eta)$ در معادله‌ی ۸-۱۲۴ با دما، که انتقال پیک با مقدار پرتوگیری، K_0 را نشان می‌دهد. مقادیر ثابت مورد استفاده برای رسم منحنی عبارتند از: $\varphi_d = ۱۰^{۹}\ cm^{-2}$، $E_f^v = ۱٫۶\ eV$، $z_i - z_v = ۰٫۰۱$، $z_v = ۱$، $4\pi R\rho_V = ۱۰^{-۱۱} cm^{-2}$، $D_v = \exp(-1.4\,eV / KT) cm^2 s^{-1}$ [۱۵].



شکل ۸-۲۵. (الف) اثر نرخ جابه‌جایی روی تورم فولاد زنگ نزن ۳۱۶ آنیل شده در پوشش‌های غلاف سوخت در رآکتور RAPSODIE در دمای $۵۶۲^{o}C$. (ب) تورم در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ کارسرد شده در پوشش‌های غلاف سوخت در رآکتور PHENIX در دمای $۵۹۰ - ۶۱۰\ ^{o}C$ [۲۵، ۲۶].

۸-۳-۵ تغییر متغیرهای تابشی

مفهوم تغییر متغیرها برای فراهم کردن یک فهم بهینه از ارتباط میان متغیرها در تورم توسعه یافته است[۱۶]. اعتقاد بر این است که هنگامی که یک متغیر پرتودهی تغییر می‌کند یک تغییر در دیگر متغیرها می‌تواند تعیین کند که آیا یک کمیت فیزیکیِ توضیح دهنده رفتار عیوب در طول پرتودهی حفظ خواهد شد. در این مورد دو کمیت وجود دارد که مربوط به محدود کننده‌ای است که بازترکیبی اتلاف عیب را کنترل می‌کند. تعداد عیوب در واحد حجم که در زمان τ بازترکیب می‌شوند برابر است با:

(۱۵۱-۸)

$$N_{\mathrm{R}} = K_{\mathrm{iv}} \int_0^{\tau} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{v}} \, \mathrm{d}t \; .$$

هنگامی که جامد در حالت پایدار باشد و غلظت‌های عیوب به وسیله‌ی بازترکیبی کنترل شوند، معادله‌ی ۸-۱۱۶ مقادیر زیر نتیجه می‌دهد:

(۱۵۲-۸)

$$C_{\mathrm{v}} = \left(\frac{K_0}{K_{\mathrm{iv}}} \frac{z_{\mathrm{i}} D_{\mathrm{i}}}{z_{\mathrm{v}} D_{\mathrm{v}}} \right)^{1/2}$$

$$C_{\mathrm{i}} = \left(\frac{K_0}{K_{\mathrm{iv}}} \frac{z_{\mathrm{v}} D_{\mathrm{v}}}{z_{\mathrm{i}} D_{\mathrm{i}}} \right)^{1/2} ,$$

و با جایگذاری در معادله‌ی ۸-۱۵۱ می‌توان نوشت:

(۱۵۳-۸)

$$N_{\mathrm{R}} = K_0 \tau \; .$$

تعداد اتلاف عیوب به چاهک‌ها در واحد حجم تا یک زمان τ برابر است با:

(۱۵۴-۸)

$$N_{\mathrm{Sj}} = \int_0^{\tau} K_j C_j \, \mathrm{d}t \; ,$$

که اندیس j نوع عیب را نشان می‌دهد. با جایگذاری معادله‌ی ۸-۱۵۲ در معادله‌ی ۸-۱۵۴ برای جاهای خالی می‌توان نوشت:

$$N_{Sv} = \frac{K_V}{(K_0 K_{iv})^{1/2}} \left(\frac{z_i D_i}{z_v D_v} \right)^{1/2} \Phi \,, \qquad (۸-۱۵۵)$$

که Φ مقدار پرتوگیری است و چنین عبارتی برای بین‌نشین‌ها نیز وجود دارد.

این تعریف‌ها می‌توانند برای تعیین ارتباط بین هر دو متغیر از سه متغیر دما، مقدار پرتوگیری و نرخ مقدار پرتوگیری با ثابت در نظر گرفتن متغیر سوم مورد استفاده قرار گیرد. برای مثال در منطقه‌ی حالت پایدار که بازترکیبی غالب است این الزام مورد نیاز است که N_s در یک دمای ثابت برای مقدار پرتوگیری ۱ و نرخ مقدار پرتوگیری ۱ با مقدار پرتوگیری ۲ و نرخ مقدار پرتوگیری ۳ برابر باشد:

$$\frac{K_V}{(K_{0_1} K_{iv})^{1/2}} \left(\frac{z_i D_i}{z_v D_v} \right)^{1/2} \Phi_1 = \frac{K_V}{(K_{0_2} K_{iv})^{1/2}} \left(\frac{z_i D_i}{z_v D_v} \right)^{1/2} \Phi_2 \,,$$

و با حذف کردن عبارت‌های مشابه در تساوی می‌توان نوشت:

$$\frac{\Phi_2}{\Phi_1} = \left(\frac{K_{0_1}}{K_{0_2}} \right)^{1/2} . \qquad (۸-۱۵۶)$$

برای یک تغییر مشخص در نرخ مقدار پرتوگیری تغییر در دمای مورد نیاز در مقدار پرتوگیری ثابت برای حفظ نامتغیر N_s، با برابر گرفتن عبارت‌های مشابه که مقادیر پرتوگیری ثابت دارند تعیین می‌شود، در نتیجه:

$$\left(\frac{D_v}{K_0} \right)_1^{1/2} = \left(\frac{D_v}{K_0} \right)_2^{1/2} , \qquad (۸-۱۵۷)$$

با جایگذاری D_v از معادله‌ی ۴-۵۴، $D_V = D_0 \exp(-E_m^v / KT)$ است:

(۸-۱۵۸)

$$T_2 - T_1 = \frac{\dfrac{kT_1^2}{E_m^v} \ln\left(\dfrac{K_{0_2}}{K_{0_1}}\right)}{1 - \dfrac{kT_1}{E_m^v} \ln\left(\dfrac{K_{0_2}}{K_{0_1}}\right)} .$$

برای یک تغییر در مقدار پرتوگیری تغییر در دمای مورد نیاز برای حفظ نامتغیر N_s در نرخ مقدار پرتوگیری ثابت برابر است با:

(۸-۱۵۹)

$$(D_v^{1/2}\Phi)_1 = (D_v^{1/2}\Phi)_2 ,$$

و با جایگذاری برای D_v:

(۸-۱۶۰)

$$\frac{\Phi_2}{\Phi_1} = \exp\left[\frac{E_m^v}{2k}\left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)\right] ,$$

و با باز آرایشی این رابطه نتیجه می‌شود که:

(۸-۱۶۱)

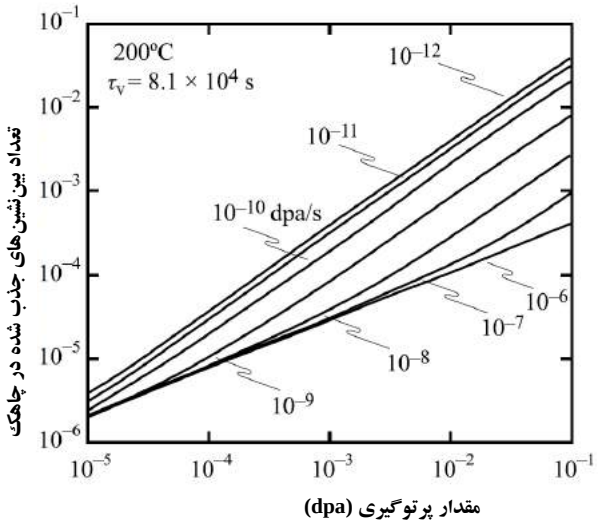
$$T_2 - T_1 = \frac{\dfrac{-2kT_1^2}{E_m^v} \ln\dfrac{\Phi_2}{\Phi_1}}{1 + \dfrac{2kT_1}{E_m^v} \ln\dfrac{\Phi_2}{\Phi_1}} .$$

یک تغییر دمایِ بسیار مهم دیگری نیز وجود دارد که در آن به جای نیاز به نامتغیر N_s ، لازم است که شار خالص جاهای خالی از بین‌نشین‌ها به یک نوع چاهک مشخص (در این مورد حفره) نامتغیر باشد، که در آن شار خالص مربوط به تورم حفره است. تغییر دمای ایجاد شده در این روش برای منطقه‌ی غلبه‌ی بازترکیبی به منظور حفظ نامتغیر نرخ تورم (N_R) برابر است با [۱۶]:

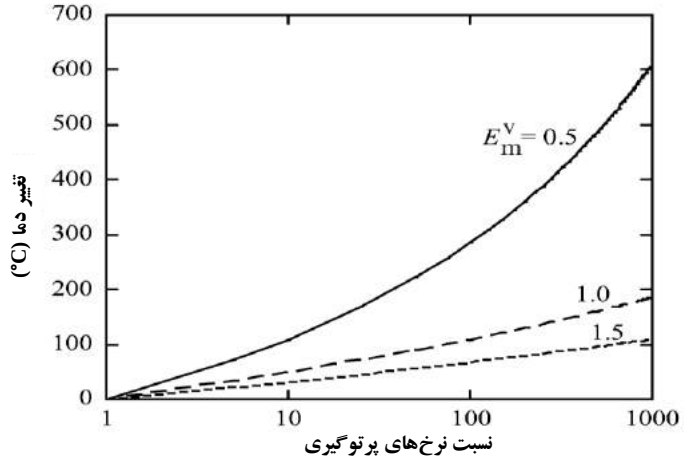
$$T_2 - T_1 = \frac{\dfrac{kT_1^2}{E_m^v + 2E_f^v} \ln \dfrac{K_{0_2}}{K_{0_1}}}{1 - \dfrac{kT_1}{E_m^v + 2E_f^v} \ln \dfrac{K_{0_2}}{K_{0_1}}} . \qquad (۱۶۲-۸)$$

که E_f^v انرژی تشکیل جای خالی است.

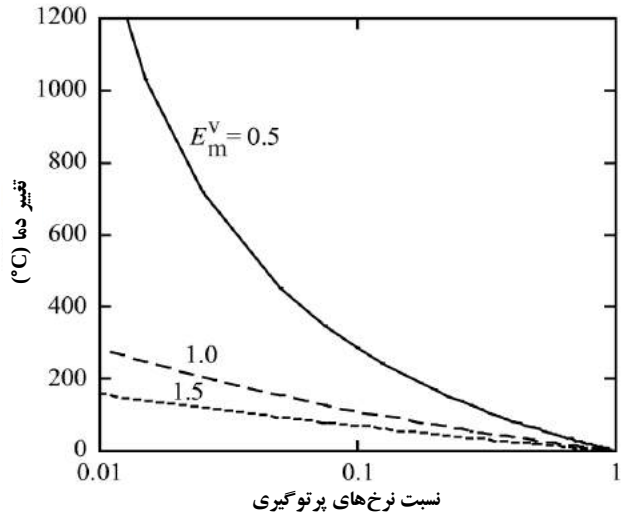
تغییر متغیرهای مختلفی که در این فصل توضیح داده شد در شکل‌های زیر نشان داده شده است. شکل ۸-۲۶ رابطه‌ی بین مقدار پرتوگیری برحسب وابستگی نرخ مقدار پرتوگیری در یک دمای مرجع ۲۰۰°C برای مورد نامتغیر N_s، معادله‌ی ۸-۱۵۶ را نشان می‌دهد. شکل ۸-۲۷ انتقال دما به صورت تابعی از نرخ مقدار پرتوگیری در مقدار پرتوگیری ثابت برای سه مقدار مختلف از انرژی مهاجرت جای خالی برای نامتغیر N_s، معادله‌ی ۸-۱۵۸ را نشان می‌دهد و شکل ۸-۲۸ روابط مشابه برای مورد نرخ دوز ثابت معادله‌ی ۸-۱۶۱ را نشان می‌دهد. شکل ۸-۲۹ تغییر دما به صورت تابعی از مقدار پرتوگیری برای نرخ مقدار پرتوگیری ثابت برای حفظ نرخ تورم، نامتغیر N_R معادله‌ی ۸-۱۶۲ را نشان می‌دهد. شکل ۸-۳۰ نشان می‌دهد که مفهوم تغییر دما در توضیح تغییر بیش‌تر از پنج برابر بزرگی در بیشینه در منحنی تورم برحسب دما در نیکل در نرخ مقدار پرتوگیری که با معادله‌ی ۸-۱۶۲ مشخص شده است، به خوبی مؤثر واقع می‌شود.



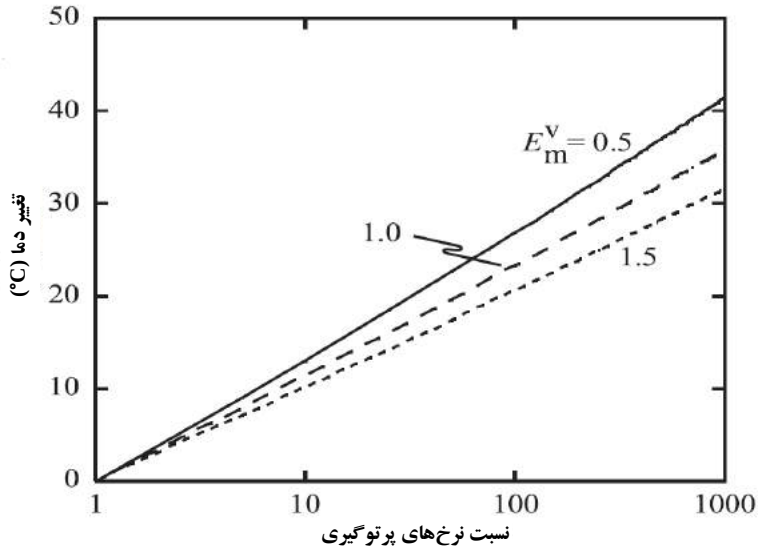
شکل ۸-۲۶. تعداد بین‌نشین‌های جذب شده در چاهک‌ها به صورت تابعی از مقدار پرتوگیری در دمای ۲۰۰°C برای نرخ‌های مقدار پرتوگیری متفاوت [۲۷].



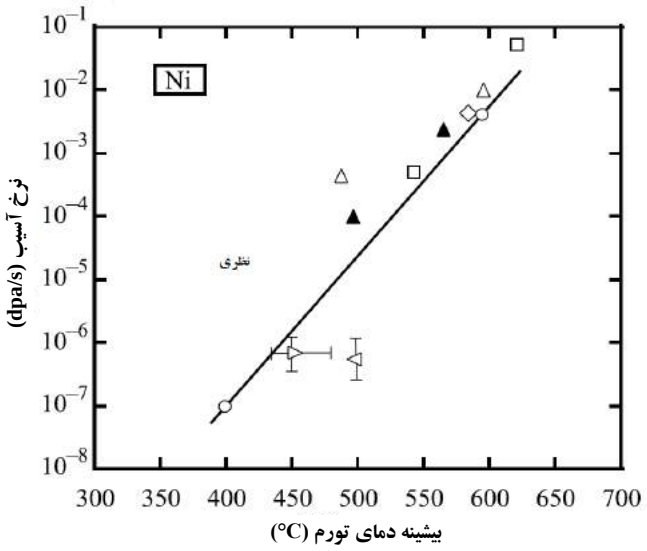
شکل ۸-۲۷. تغییر دما از مرجع ۲۰۰°C مورد نیاز در مقدار پرتوگیری ثابت به منظور حفظ جذب عیب نقطه‌ای مشابه در چاهک‌ها به صورت تابعی از نرخ مقدار پرتوگیری، که از نرخ مقدار پرتوگیری اولیه بهنجار شده است. نتایج برای سه مقدار متفاوت از انرژی مهاجرت جای خالی نشان داده شده است[۸، ۲۷].



شکل ۸-۲۸. تغییر دما از مرجع ۲۰۰°C مورد نیاز در مقدار پرتوگیری ثابت به منظور حفظ جذب عیب نقطه‌ای مشابه در چاهک‌ها به صورت تابعی از مقدار پرتوگیری، که از نرخ مقدار پرتوگیری اولیه بهنجار شده است. نتایج برای سه مقدار متفاوت از انرژی مهاجرت جای خالی نشان داده شده است[۸، ۲۷].



شکل ۸-۲۹. تغییر دما از مرجع $200^{\circ}C$ مورد نیاز در مقدار پرتوگیری ثابت به منظور حفظ نامتغیر تورم به صورت تابعی از نرخ مقدار پرتوگیری، که از نرخ مقدار پرتوگیری اولیه بهنجار شده است. نتایج برای سه مقدار متفاوت از انرژی مهاجرت جای خالی و یک انرژی تشکیل $1.5\ eV$ نشان داده شده است[۸، ۲۷].



شکل ۸-۳۰. تغییر دمای بیشینه‌ی تورم به صورت تابعی از نرخ مقدار پرتوگیری. *نقطه‌ها* اطلاعات آزمایشگاهی هستند و *خط* از اطلاعات تئوری رسم شده است [۵].

۸-۳-۶ وابستگی تنشی

معادله‌ی ۸-۱۲۵ نشان می‌دهد که نرخ رشد حفره شامل دو مؤلفه است. $\dot{R}_{\text{th}}$ که عبارت نشر حرارتی است و از آن‌رو تنها جزء تأثیرپذیر با حالت تنش یا فشار داخلی گاز است. در نتیجه فقط هنگامی که $\dot{R}_{\text{th}}$ مقدار قابل توجهی داشته باشد فشار داخلی گاز و تنش روی نرخ رشد تأثیرگذار هستند، به عبارت دیگر برای دماهای بیش‌تر از دمای بیشینه‌ی تورم. هنگامی که جامد تحت یک تنش هیدروستاتیکی است و هنگامی که حفره‌ها گازی دارند که یک فشاری را روی سطح حفره وارد می‌کند غلظت تعادلی جاهای خالی روی حفره‌ها و نابجایی‌ها متفاوت از حالت بدون تنش یا حالت بدون گاز است. بریلس فورد و بولوگ نشان دادند که فشار و نه تنش خارجی روی غلظت جاهای خالی در تعادل با حفره اثر گذار است. از آن‌رو تعادل نیرو برای سطح حفره از یک حباب در تعادل مکانیکی معادله‌ی ۸-۸۲ برابر است با:

$$\sigma = p - \frac{2\gamma}{R}\,, \tag{۱۶۳-۸}$$

که $\boldsymbol{\sigma}$ تنش هیدروستاتیکی و p فشار گاز در داخل حفره است. (در مورد یک حباب غیرتعادلی، تنش مناسب برابر با مؤلفه‌ی شعاعی تانسور تنش، $\boldsymbol{\sigma}_{\text{r}}$، است.) غلظت جاهای خالی در سطح حفره که در مورد یک حفره‌ی بدون گاز با معادله‌ی ۸-۸۵ تعیین شد برابر است با:

$$C_{\text{v}}^{\text{V}} = C_{\text{v}}^{0} \exp\left[-\frac{\Omega}{kT}\left(p - \frac{2\gamma}{R}\right)\right]\,. \tag{۱۶۴-۸}$$

به صورت مشابه غلظت جای خالی تعادلی مجاور نابجایی‌های شبکه برابر است با:

$$C_{\text{v}}^{N} = C_{\text{v}}^{0} \exp\left[-\frac{\sigma\Omega}{kT}\right]\,. \tag{۱۶۵-۸}$$

با تکرار حل معادله‌ی رشد حفره با استفاده از غلظت تعادلی جاهای خالی در سطح حفره که با معادله‌ی ۸-۱۶۴ تعیین شد و غلظت تعادلی جاهای خالی در نابجایی‌های شبکه که با معادله‌ی ۸-۱۶۴

مشخص شد عبارت نشر حرارتی، R_{th} در معادله‌ی ۸-۱۳۵ (با $\rho_{CP} = \rho_L = 0$) به صورت زیر اصلاح می‌شود:

$$\dot{R}_{th} = \frac{D_v C_v^0 \Omega^2 z_v \rho_d \left(\sigma + p - \frac{2\gamma}{R}\right)}{RkT(z_v \rho_d + 4\pi R \rho_v)} . \qquad (۱۶۶-۸)$$

قابل ذکر است که انقباض ناشی از نشر حرارتی به جای افزایش رشد تنشی هنگامی که جمع تنش خارجی و فشار گاز بیش‌تر از تنش ناشی از کشش سطحی باشد در نظر گرفته می‌شود:

$$\sigma + p > \frac{2\gamma}{R} . \qquad (۱۶۷-۸)$$

قابل ذکر است که برای یک جامد تحت تنش که حاوی هیچ‌گونه گازی نیست، افزایش رشد تنش هنگامی که $\sigma > \frac{2\gamma}{R}$ باشد، رخ خواهد داد. برای یک حفره حاوی x اتم گازی، معادله‌ی ۸-۱۶۷ برابر است با:

$$\sigma = \frac{2\gamma}{R} - \left(\frac{3xkT}{4\pi R^3}\right) . \qquad (۱۶۸-۸)$$

شعاع حفره که در آن $\frac{d\sigma}{dR} = 0$ است، شعاع بحرانی حفره نامیده می‌شود و با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

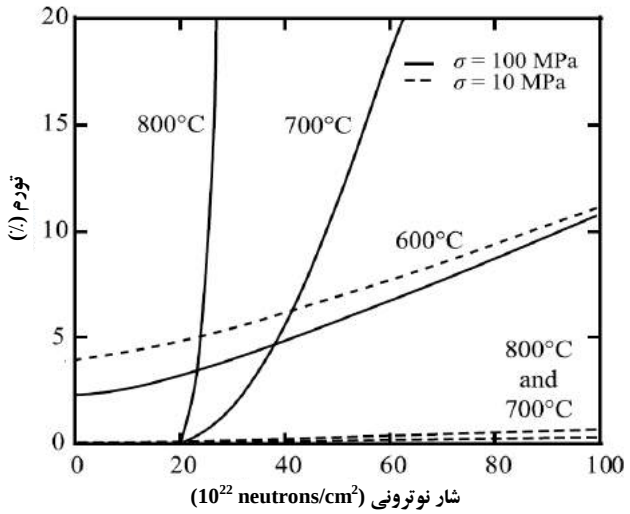
$$R_{cr} = \left(\frac{9xkT}{8\pi\gamma}\right)^{1/2} , \qquad (۱۶۹-۸)$$

و با جایگذاری در معادله‌ی ۸-۱۶۵، تنش در اندازه‌ی بحرانی حفره نتیجه می‌شود که برابر با تنش بحرانی برای رشد غیرمحدود حفره است:

(۸-۱۷۰)

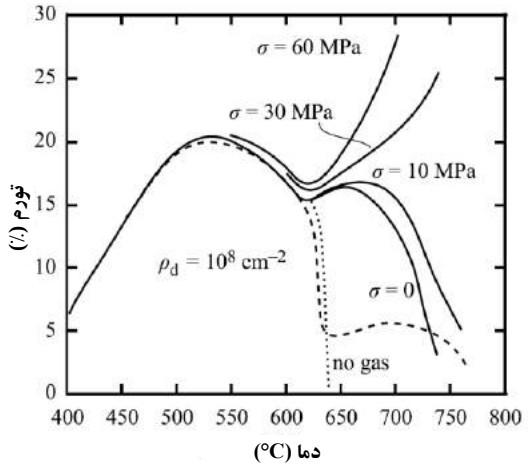
$$\sigma_{cr} = \frac{4\gamma}{3}\left(\frac{8\pi\gamma}{9xkT}\right)^{1/2}.$$

اثر تنش روی رشد حفره در فولاد در شکل ۸-۳۱ مشخص شده است. قابل ذکر است که در تنش‌های پایین تنش اثر کمی را روی رشد حفره حتی تا مقادیر پرتوگیری بالا دارد؛ اما هنگامی که تنش افزایش می‌یابد تورم به صورت سریع در مقادیر پرتوگیری نسبتاً پایین افزایش می‌یابد.
شکل ۸-۳۲ نیز حضور هلیوم در رشد حفره‌ها تحت تنش را محاسبه می‌کند.



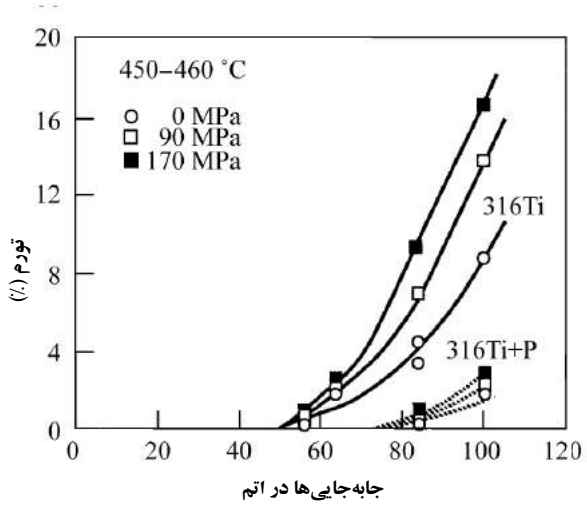
شکل ۸-۳۱. افزایش تورم تنشی برای سطوح تنشی و دماهای مختلف به صورت تابعی از شار نوترونی[۲۸].

به هرجهت این فرمول‌بندی پیش‌بینی می‌کند که نرخ رشد حفره متناسب با تنش است که با بررسی‌های ٪۱/dpa محاسبه شده است. هم‌چنین همان طوری که در شکل ۸-۳۲ نشان داده شده است، اثر تنش فقط در دماهای بالا قابل توجه است. اطلاعات آزمایشگاهی تاکنون نشان داده‌اند که نقش اصلی تنش کوتاه کردن منطقه‌ی تورم ناپایدار از افزایش نرخ تورم در منطقه‌ی حالت پایدار است.



شکل ۸-۳۲. وابستگی دمایی افزایش رشد حفره‌ی تنشی در فولاد. منحنی‌های پیوسته (خطوط پررنگ) به یک دانسیته‌ی نابجایی 10^9 cm^{-2} و یک نرخ تولید هلیوم 10^{-6}appm/s اعمال شده‌اند[۲۹].

شکل ۸-۳۳ اثر تنش روی تورم در آلیاژ فولاد زنگ نزن ۳۱۶ اصلاح شده تحت پرتودهی در رآکتور PHENIX را نشان می‌دهد. شایان ذکر است که با افزایش تنش، نرخ تورم (شیب) در مقادیر پرتوگیری پایین به یک مقدار ثابت می رسد. تنش هم‌چنین می‌تواند پایداری جوانه‌ی حفره را تحت تأثیر قرار دهد که ممکن است که جوانه‌زنی‌های بسیار سریع را توضیح دهد.



شکل ۸-۳۳. اثر تنش روی تورمِ دو فولاد زنگ نزن ۳۱۶ اصلاح شده تحت پرتودهی در لوله‌های فشار در رآکتور PHENIX [۳۰].

در تکامل نرخ جوانه‌زنی حفره، جریان جوانه‌زنی و عدد دانسیته‌ی حفره‌های با اندازه‌ی n به ترتیب با معادله‌های ۸-۱۸ و ۸-۱۹ توضیح داده شد، برای مورد چگالش جای خالی به استثنای بین‌نشین‌ها داریم:

$$J_n = Z\beta N_0 \exp\left(\frac{-\Delta G_n^0}{kT}\right), \quad \text{and} \quad \rho^0(n) = N_0 \exp\left(\frac{-\Delta G_n^0}{kT}\right).$$

که انرژی آزاد تشکیل حفره‌ی n اندازه با معادله‌ی ۸-۱۷تعیین شده است:

$$\Delta G_n^0 = -nkT \ln S_v + (36\pi\Omega^2)^{1/3}\gamma n^{2/3}.$$

با محاسبه برای یک تنش هیدروستاتیک خارجی، σ_h می‌توان نوشت:

(۸-۱۷۱)

$$\Delta G_n^0(\sigma_h) = -nkT \ln S_v + (36\pi\Omega^2)^{1/3}\gamma n^{2/3} - n\sigma_h\Omega,$$

و

(۸-۱۷۲)

$$\Delta G_n^0(\sigma_h) = \Delta G_n^0(0) + n\sigma_h\Omega.$$

قابل ذکر است که اثر فشار گاز، p، در حفره می‌تواند با افزودن یک عبارت $np\Omega$ نیز محاسبه شود.
هنگامی که بین‌نشین‌ها وجود دارند انرژی آزاد با معادله‌ی ۸-۳۳ مشخص می‌شود:

$$\Delta G_n' = kT \sum_{j=0}^{n-1} \ln\left[\frac{\beta_i(j+1)}{\beta_v(j)} + \exp\left(\frac{\delta G_j^0}{kT}\right)\right],$$

که $\delta G_j^0 / kT$ افزایش در انرژی آزاد یک حفره در رفتن از جاهای خالی j به جاهای خالی $j+1$ است اگر هیچ بین‌نشینی وجود نداشته باشد. با فرض آن‌که تنش فقط سد انرژی آزاد را تحت تأثیر قرار دهد (و نه اندازه‌ی بحرانی جوانه را)، و آن‌که سهم تنش از انرژی در هر اتم، وابسته به تعداد اتم‌ها در خوشه نباشد، در نتیجه می‌توان انرژی آزاد در معادله‌ی ۸-۳۳ را به روشی مشابه با روشی تقریب زد که برای معادله‌ی ۸-۱۷۲ انجام شد[۳۱].

$$\Delta G_n'(\sigma_h) = \Delta G_n'(0) + n\sigma_h\Omega \ . \qquad (۸-۱۷۳)$$

سپس از معادله‌ی ۸-۳۵، نسبت نرخ‌های جوانه زنی حالت پایدار تنش‌دار به بدون تنش در یک محیط همگن و هم رسوبی[1] برابر است با:

$$\frac{J_n(\sigma_h)}{J_n(0)} = \frac{\exp[-(\Delta G_n' - n\sigma_h\Omega)/kT]}{\exp[-\Delta G_n'/kT]} \ . \qquad (۸-۱۷۴)$$

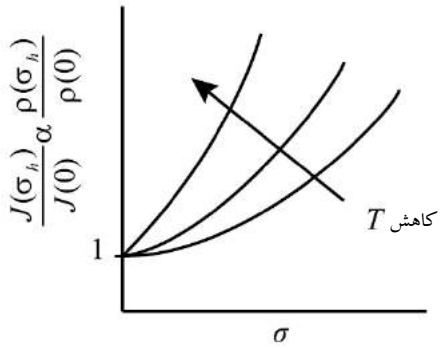
با استفاده از معادله‌های ۸-۲۲ و ۸-۲۳ برای نوشتن نسبت جریان‌های جوانه‌زنی برحسب نسبت عدد دانسیته‌ی حفره در حالت‌های تنش‌دار و بدون تنش می‌توان نوشت:

$$\frac{J_n(\sigma_h)}{J_n(0)} = \frac{Z'(\sigma_h)\beta_n(\sigma_h)\rho_n(\sigma_h)}{Z'(0)\beta_n(0)\rho_n(0)} = \frac{Z'(\sigma_h)\beta_n(\sigma_h)\exp[-(\Delta G_n'(\sigma_h))]}{Z'(0)\beta_n(0)\exp[-\Delta G_n'(0)]} \ , \qquad (۸-۱۷۵)$$

که مشخص می‌کند که نه نسبت نرخ ورود، $\beta_n(\sigma_h)/\beta_n(0)$ و نه Z' به سطح تنش حساس نیست[۳۲]، در نتیجه معادله‌ی ۸-۱۷۵ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{\rho_n(\sigma_h)}{\rho_n(0)} \approx \exp(n\sigma_n\Omega/kT) \ . \qquad (۸-۱۷۶)$$

1. Co-precipitation



شکل ۸-۳۴. تغییر نرخ جوانه‌زنی حفره و دانسیته‌ی تعداد حفره به صورت تابعی از تنش و دما، هم‌چنان که در معادله‌ی ۸-۱۷۶ توضیح داده شد.

مثال ۸-۱. *اثر تنش روی دانسیته‌ی حفره*

با فرض یک تنش خارجی ۱۰۰ MPa و یک اندازه‌ی خوشه تقریباً ۱۵ در دمای ۴۵۰°C، معادله‌ی ۸-۱۷۶ یک افزایش ۶ برابری را در دانسیته‌ی تعداد حفره‌ها نتیجه می‌دهد. به هرجهت، برای یک تنش ۲۰۰ MPa این افزایش در حدود ۳۴ و برای تنش ۳۰۰ MPa در حدود ۲۰۰ است. از آن‌جایی که هم تنش و هم دما در توان ظاهر می‌شوند ضریب به سرعت با یک افزایش در تنش و با یک کاهش دما افزایش می‌یابد (شکل ۸-۳۴). با ارجاع به شکل ۸-۳۳، کاهش زمان برای رسیدن به نرخ تورم حالت پایدار با افزایش تنش و جوانه‌زنیِ افزایشی تنشی که در دماهای پایین‌تر بسیار حایز اهمیت است برخلاف اثر تنش روی نرخ تورم حالت پایدار قابل توضیح است.

۸-۳-۷ اثر جدایش القایی تابشی

از فصل ۶، قسمت ۶-۴ یادآوری می‌شود که جدایش القایی تابشی عناصر اصلی که در چاهک‌ها رخ می‌دهد، می‌تواند حفره‌هایی را ایجاد کند. در نتیجه یک حفره‌ی پوشش‌دار است که در آن حفره یک لایه با ترکیبی متفاوت از زمینه را گسترش می‌دهد. همان‌طوری که خواهیم دید برای فولادهای زنگ نزن آستنیتی پوشش حفره از زمینه‌ی غنی از نیکل و تهی از کروم است. اثر اولیه‌ی تغییر ترکیب تغییر در ضریب نفوذ است که منجر به تغییر در ضریب به دام‌اندازی حفره می‌شود. راندمان به دام‌اندازی برای جای خالی در لایه برابر است با [۱۶، ۳۳]:

(۸-۱۷۷)

$$z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}}(r_{\mathrm{V}}) = \frac{1 + \delta / r_{\mathrm{V}}}{1 + D_{\mathrm{v}} \delta / D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{S}} r_{\mathrm{V}}} ,$$

که δ ضخامت لایه است و $D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{S}}$ ضریب نفوذ جای خالی در لایه است. یادآوری می‌شود که یک عبارت برای وابستگی ترکیبی D_{v} در لایه، $D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{S}}$ در قسمت ۶-۴ از فصل ۶ تعیین شد. استفاده از این عبارت برای راندمان به دام‌اندازی در معادلات رشد حفره، منجر به یک کاهش در رشد حفره می‌شود اگر $D_{\mathrm{v}}^{\mathrm{S}} < D_{\mathrm{v}}$ و $D_{\mathrm{i}}^{\mathrm{S}} \sim D_{\mathrm{i}}$.

اثر بسیار مهم دیگر پوشش‌ها، برهم‌کنش کشسان بین یک عیب نقطه‌ای و یک حفره احاطه شده با یک پوشش که ثوابت کشسانی متفاوتی از زمینه دارد، است. نتیجه، یک تغییر در راندمان به دام‌اندازی حفره برای عیوب است. راندمان به دام‌اندازی ناشی از یک تفاوت در ثوابت کشسانی است که به صورت زیر مشخص می‌شوند:

(۸-۱۷۸)

$$z_{\mathrm{i,v}}^{\mathrm{V}}(r_{\mathrm{V}}) = \left[\frac{r_{\mathrm{V}}}{r_{\mathrm{c}}} + \frac{r_{\mathrm{V}}}{(r_{\mathrm{c}} + \delta)^2} \frac{D_{\mathrm{i,v}}}{w_{\mathrm{i,v}}} \right]^{-1} ,$$

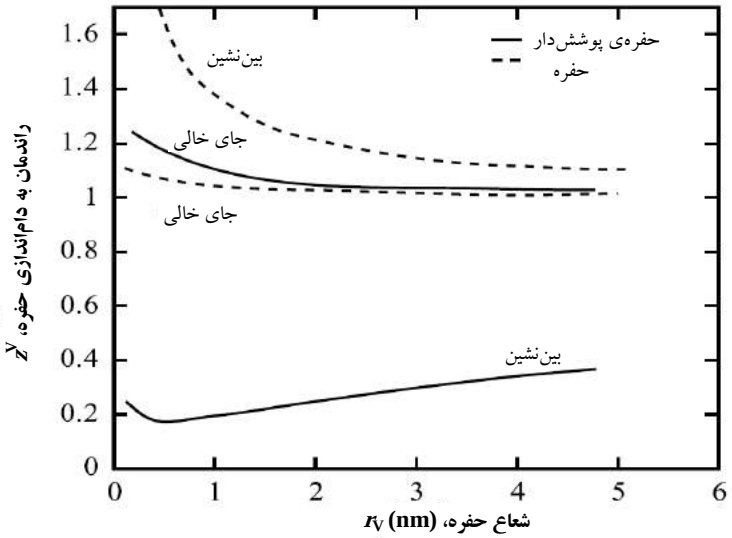
که r_{c} شعاع حفره به علاوه شعاع پوشش است و سرعت انتقال $w_{\mathrm{i,v}}$ برابر است با:

(۸-۱۷۹)

$$w_{\mathrm{i,v}} = \frac{D_{\mathrm{i,v}} \exp(-E_{\mathrm{i,v}}^{*} / kT)}{a} ,$$

که a ضریب شبکه و E^{*} انرژی دافعه‌ی برهم‌کنش در بزرگ‌ترین مقدار مثبتش است. اگر زمینه‌ی لایه‌ی سخت‌تر از زمینه باشد علامت E^{*} مثبت (دافعه) است. از آن‌جایی که E^{*} متناسب با مربع حجم واهلش عیب نقطه‌ای است، راندمان چاهک برای بین‌نشین‌ها در مقایسه با جاهای خالی به علت

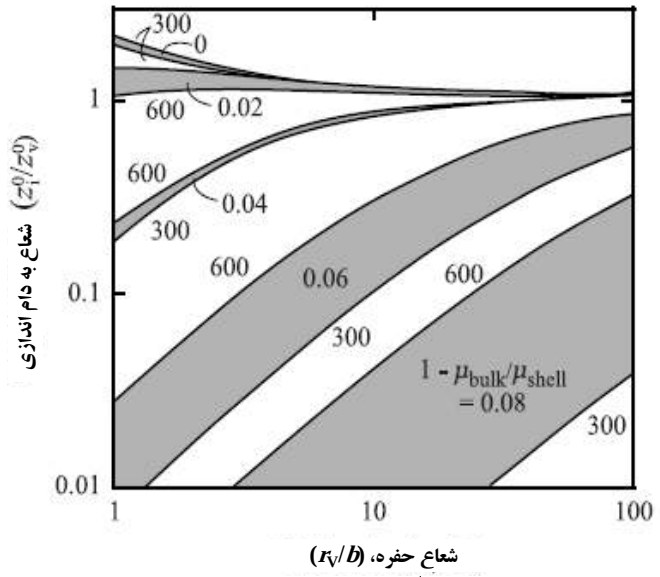
دافعه‌ی بزرگ‌تر بین‌نشین‌ها بسیار کوچک‌تر است. در نتیجه لایه‌ی سخت‌تر دافعه‌ای را نتیجه می‌دهد که برای بین‌نشین‌ها از جای خالی بزرگ‌تر است که جوانه‌زنی حفره و رشد را در مورد یک حفره‌ی پوشش‌دار تسریع می‌کند (شکل ۸-۳۵).



شکل ۸-۳۵. راندمان‌های به دام‌اندازی برای نفوذ عیوب نقطه‌ای به یک حفره و یک حفره‌ی پوشش‌دار به صورت تابعی از شعاع حفره، r_V. حفره‌ی بین‌نشین‌ها را مخصوصاً در اندازه‌ی حفره‌های کوچک ترجیح می‌دهد. این ترجیح برای حفره‌ی پوشش‌دار به صورت معکوس است [۱۶].

تغییر در ضریب برشی یا ضریب شبکه، با ایجاد یک سد در مقابل نفوذ عیب از طریق لایه به علت تغییر در انرژی کرنشی می‌تواند ترجیح حفره برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها [۳۴] در لایه را نیز تغییر دهد. هنگامی که جدایش در یک لایه با ضریب برشی یا ضریب شبکه فقط اندکی بیش‌تر از محیط اطرافش ایجاد می‌شود، حفره تبدیل به یک چاهک با تمایل بالا برای جاهای خالی می‌شود و تورم افزایش می‌یابد. برعکس یک کاهش در ضریب برشی و ضریب شبکه منجر به کاهش تورم حفره می‌شود. شکل ۸-۳۶ اثر ضریب برشی (μ_{bulk}/μ_{shell} -۱) بر نسبت به دام‌اندازی بین‌نشین/جای خالی را نشان می‌دهد. برای حفره‌های کوچک، یک تغییر چند درصدی در ضریب برشی می‌تواند منجر به تغییر چند

برابری از دام اندازی شود. الن[1] و همکارانش [۳۵] تورم و رفتار جدایش القایی تابشی یک محدوده‌ای از آلیاژها با درصد نیکل مختلف را مورد مقایسه قرار دادند. محاسبه ضریب شبکه برای ترکیب لایه‌ی حفره نشان می‌دهد که رفتار تورم می‌تواند به وسیله‌ی یک کاهشی در ضریب شبکه در سطح حفره توضیح داده شود (شکل ۸-۳۷). در حقیقت، جدایش منجر به یک ضریب شبکه کوچک‌تر با یک ضریب برشی کوچک‌تر می‌شود و لایه‌ی نرم‌تر تورم حفره را کاهش می‌دهد.



شکل ۸-۳۶. نسبت به دام اندازی z_i^0 / z_v^0 برای حفره‌های پوشش‌دار با یک ضخامت پوسته از دو لایه‌ی اتمی و تنش سطحی صفر[۳۴].

۸-۳-۸ اثر گرایش تولید

فرمول‌بندی ارایه شده از تورم با این فرض تکامل یافتند که فقط جاهای خالی تکی و بین‌نشین‌ها در رشد یا انقباض حفره سهیم هستند. اگر هدف این باشد که اثر خوشه‌بندی بین‌نشینی و تحرک در آبشار آسیب در این فرمول‌بندی وارد شود، در نتیجه اکثر روش‌های درست برای انجام این کار به تئوری خوشه‌بندی و تشریح تکامل نطفه‌ی حفره با توجه به خوشه‌های بین‌نشینی باز می‌گردد. راه‌حل آماری معادله‌ی فوکر ـ پلانک، توزیع اندازه‌ی حفره به صورت تابعی از زمان یا مقدار پرتوگیری را نتیجه

1. Allen

می‌دهد. (یک مثال از نتایج این تحلیل در فصل ۷ برای حلقه‌های بین‌نشینی نشان داده شده، است.) به هرجهت راه‌حل‌های آماری در فهم فرایند و اهمیت ضرایب مختلف در تکامل جمعیت حفره مقادیر معتبری نیستند. دیدگاه دیگر، مورد توجه قرار دادن اثر تولید نامتقارن جاهای خالی و بین‌نشین‌ها (گرایش تولید) به علت تفاوت‌ها در کسرهایی که در خوشه‌ها انباشته می‌شوند و تفاوت در پایداری حرارتی و تحرک خوشه‌های جای خالی و بین‌نشینی است. در نتیجه هنگامی که برهم‌کنش حلقه‌های لغزنده با جای خالی و حلقه‌های جدایش القایی تابشی به صورت جزیی کوچک هستند مورد توجه قرار می‌گیرد. در این مورد می‌توان یک بیان تحلیلی برای تورم گسترش داد که هنوز اثر خوشه‌بندی را دربر داشته باشد[۳۶، ۳۷].

تحت شرایط آبشاری که انتظار می‌رود خوشه‌بندی رخ دهد، معادلات تعادلیِ حالت پایدار عیوب نقطه‌ای جای خالی و بین‌نشینی با افزودن خوشه‌های لغزنده جدایش القایی تابشی اصلاح می‌شود که نتایج زیر را به دنبال دارد:

(۱۸۰–۸)

$$(1-\varepsilon_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}})K_0^{\mathrm{eff}} = D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}(z_{\mathrm{i}}k_{\mathrm{v}}^2 + z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}\rho_{\mathrm{d}}) + K_{\mathrm{iv}}D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ic}}D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}}k_{ni}^2 + z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{vc}}D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}k_{n\mathrm{v}}^2$$

(۱۸۱–۸)

$$K_0^{\mathrm{eff}} = D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}}(z_{\mathrm{v}}k_{\mathrm{v}}^2 + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}\rho_{\mathrm{d}}) + K_{\mathrm{iv}}D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ic}}D_{\mathrm{v}}C_{\mathrm{v}}k_{ni}^2 + z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{vc}}D_{\mathrm{i}}C_{\mathrm{i}}k_{n\mathrm{v}}^2$$

(۱۸۲–۸)

$$\varepsilon_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}}K_0^{\mathrm{eff}}/x_{\mathrm{g}} = D_{\mathrm{g}}C_{\mathrm{g}}k_{\mathrm{g}}^2\,,$$

که $K_0^{\mathrm{eff}} = (1-\varepsilon_T)K_0$ نرخ تولید مؤثر جفت فرانکل به‌دست آمده از نرخ NRT با محاسبه برای کسر جفت‌های فرانکل، ε_{T}، بازترکیب شده در طول سرد شدن آبشار است، و $z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{vc}}k_{n\mathrm{v}}^2$ و $z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ic}}k_{ni}^2$، شدت چاهک خوشه‌های لغزنده جدایش القایی تابشی (ic) و خوشه‌های جای خالی (vc) به ترتیب برای جذب جاهای خالی (v) و خوشه‌های جدایش القایی تابشی (i) هستند. کمیت g اشاره به خوشه‌های لغزنده دارد، $\varepsilon_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}}$ کسر جدایش القایی تابشی در خوشه‌های لغزنده و x_{g} متوسط اندازه‌ی

خوشه است. عبارت k_g^2 شدت کلی چاهک برای نفوذ یک بعدی خوشه‌های جدایش القایی تابشی است.

(۸-۱۸۳)

$$k_g = \frac{\pi \rho d_{abs}}{4} + \left(\frac{2}{l(2R_g - l)}\right)^{1/2} + \pi R^2 \rho_V ,$$

که d_{abs} قطر مؤثر نابجایی‌ها برای جذب خوشه‌ی لغزنده‌ی جدایش القایی تابشی است، R_g و l به ترتیب شعاع و فاصله‌ی d دانه‌ها از خوشه تا مرز دانه هستند.

تحت شرایط آسیب آبشاری که خوشه‌بندی درون آبشاری جدایش القایی تابشی مجاز می‌شود و هم‌چنین خوشه با نفوذ یک بعدی خوشه‌ی لغزنده جدایش القایی تابشی حذف می‌شود، نرخ تورم حفره با شارهای عیوب نقطه‌ای و خوشه‌های لغزنده جدایش القایی تابشی به حفره‌ها تعیین می‌شود. در نتیجه معادله‌ی ۸-۱۱۰ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۸-۱۸۴)

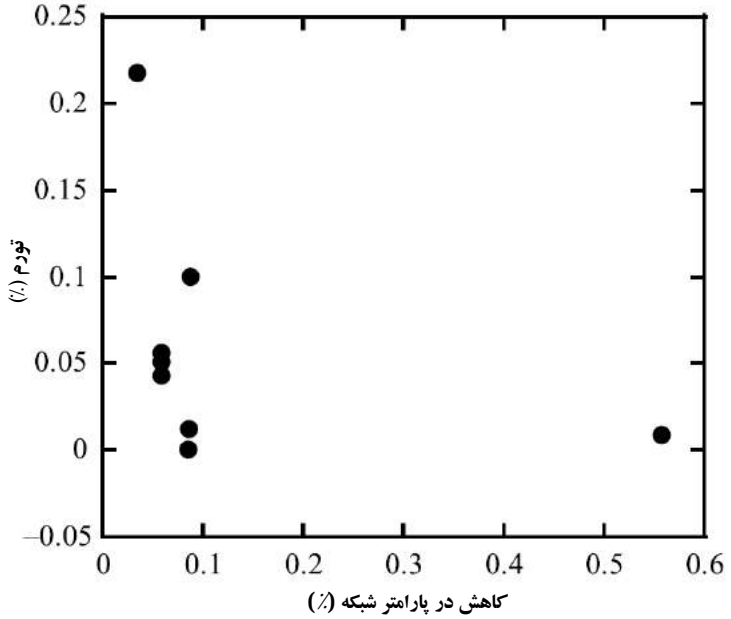
$$\frac{d(\Delta V/V)}{dt} = (D_v C_v z_v - D_i C_i z_i) k_v^2 - D_g C_g x_g k_g \pi R^2 \rho_V .$$

عبارت دوم در معادله‌ی ۸-۱۸۴ از معادله‌ی ۸-۱۸۳ می‌آید. تحت شرایط آسیب آبشاری، تفاوت در شارهای عیب نقطه‌ای به نابجایی‌ها به علت گرایش نابجایی و نیز بازترکیبی است و اثر عبارت‌های خوشه‌ای در معادله‌های ۸-۱۸۰ و ۸-۱۸۱ فقط باعث آشفتگی‌های اندکی در نرخ تورم در حالت پایدار می‌شود. با نادیده گرفتن بازترکیبی و عبارت خوشه‌های عیب در معادله‌های ۸-۱۸۰ و ۸-۱۸۱، معادله‌ی ۸-۱۸۴ به صورت زیر در می‌آید:

(۸-۱۸۵)

$$\frac{d(\Delta V/V)}{dt} = K_0^{eff} \left[\varepsilon_i^g \left(\frac{z_v k_v^2}{z_v k_v^2 + z_v^d \rho_d} - \frac{\pi R^2 \rho_V}{k_g} \right) + (1 - \varepsilon_i^g) p_l \frac{z_v k_v^2 z_v^d \rho_d}{(z_i k_v^2 + z_i^d \rho_d)(z_v k_v^2 + z_v^d \rho_d)} \right] ,$$

که $p_l = (\frac{z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}}{z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}} - \frac{z_{\mathrm{i}}}{z_{\mathrm{v}}}) \approx (\frac{z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}}{z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}} - 1)$ و $z_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{i}} = 1$.



شکل۸-۳۷. کاهش در تورم به صورت تابعی از تغییر ضریب شبکه. تورم با کاهش ضریب شبکه، که با جدایش القایی تابشی در سطح حفره ایجاد می‌شود، کاهش می‌یابد[۳۵].

نرخ تورم متناسب با نرخ مؤثر تولید و راندمان آسیب است. عبارت اول در داخل براکت‌ها در معادله‌ی ۸-۱۸۵ سهم گرایش تولید در تورم است و همان‌طوری که مشخص است متناسب با کسر خوشه‌ی لغزنده است. عبارت دوم ناشی از گرایش معمول نابجایی که با عیوب نقطه‌ای تکی کنترل می‌شود، است و همان‌طوری که دیده می‌شود متناسب با $(1-\varepsilon_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}})$ است. برای مورد محدود کننده‌ی تولید جفت فرانکل تکی، که هیچ‌گونه خوشه‌ای تشکیل نمی‌شود و $\varepsilon_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}} = 0$ است، عبارت اول از بین می‌رود و نرخ تورم با جذب عیوب نقطه‌ای تکیِ کنترل شده به وسیله‌ی گرایش نابجایی کنترل می‌شود. عبارت نتیجه شده مشابه با عبارت موجود در معادله‌ی ۸-۱۲۲ است (با نادیده گرفتن رسوبات هم‌بسته). برعکس، هنگامی که $\varepsilon_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}}$ نزدیک به ۱ است، سهم گرایش معمول نابجایی در مقایسه با گرایش تولید کوچک است.

هنگامی که جدایش القایی تابشی تکی و خوشه‌های جدایش القایی تابشی نفوذ سه بعدی را نشان می‌دهند، نرخ تورم یک عبارتی مشابه با عبارت تعیین شده برای عیب تکی، مورد گرایش نابجایی، معادله‌ی ۸-۱۲، است؛ به هر جهت، اکنون یک عبارت خوشه‌های جدایش القایی تابشی معرفی شده که مشابه با جدایش‌های القایی تابشی تکی است و به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۸۶-۸)

$$\frac{\mathrm{d}(\Delta V/V)}{\mathrm{d}t} = K_0^{\mathrm{eff}} \frac{z_{\mathrm{v}} k_{\mathrm{v}}^2 z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} \rho_{\mathrm{d}}}{(z_{\mathrm{v}} k_{\mathrm{v}}^2 + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} \rho_{\mathrm{d}})} \left[\frac{\varepsilon_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}} p_{cl}}{z_{\mathrm{cl}} k_{\mathrm{v}}^2 + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} \rho_{\mathrm{d}}} + \frac{(1-\varepsilon_{\mathrm{i}}^{\mathrm{g}}) p_{\ell}}{(z_{\mathrm{v}} k_{\mathrm{v}}^2 + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} \rho_{\mathrm{d}})} \right] ,$$

که $p_{\mathrm{cl}} = (\frac{z_{\mathrm{cl}}^{\mathrm{d}}}{z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}} - \frac{z_{\mathrm{cl}}}{z_{\mathrm{v}}})$ ضریب گرایش برای خوشه‌های جدایش القایی تابشی است. معادله‌ی ۸-۱۸۶ در یک نرخ تورم مثبت برای حرکت‌شناسی واکنش خوشه‌ی سه بعدی برای هر ریز ساختاری، مشابه با عیوب تکی، نتیجه شده است، فرمول گرایش نابجایی، به این معنی است که اشباع تورمی رخ نمی‌دهد.

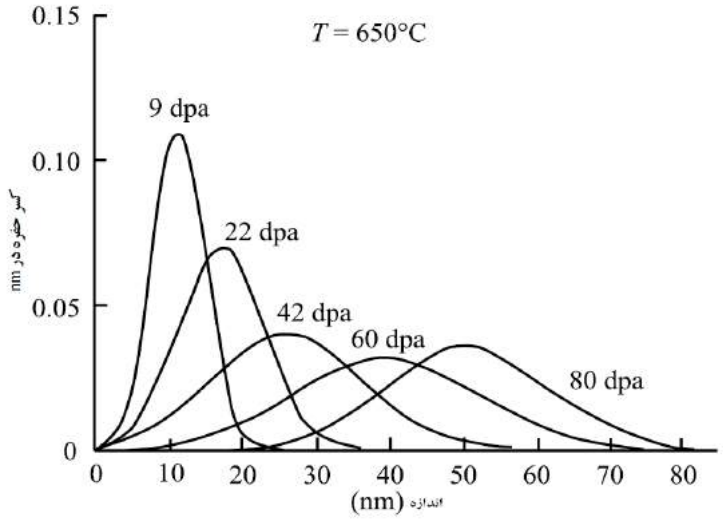
یک نرخ دایمی مثبت تورم از نظر فیزیکی پذیرفتنی نیست زیرا مشخص شده است که تورم در مقادیر پرتوگیری بالا و در مقادیر بالای تورم به اشباع می‌رسد. در حقیقت، رفتار کلیِ حل معادله‌ی فوکر ـ پلانک، یک گسترش تدریجی از توزیع اندازه تا رسیدن حالت پایدار است زیرا آسیب آبشار رشد بیش‌تر خوشه‌های بین‌نشینی را محدود می‌کند. با توجه به معادله‌ی ۸-۱۸۵، نرخ تورم با افزایش اندازه‌ی حفره به علت افزایش راندمان آن‌ها برای به دام‌اندازی خوشه‌های جدایش القایی تابشی لغزنده کاهش می‌یابد و نرخ تورم هنگامی که یک اندازه‌ی حفره‌ی بیشینه، $R^{\max}$ فرا می‌رسد، تا صفر کاهش می‌یابد. تحت این شرایط و اگر دانسیته‌ی حفره ثابت باقی بماند نرخ تورم هنگامی که تورم به مقادیر اندکی می‌رسد، $(\Delta V/V)^{\max}$، اشباع می‌شود. در موردی که گرایش تولید غالب است، اشباع اندازه‌ی حفره و اشباع تورم به وجود می‌آید، از معادله‌ی ۸-۱۸۵ داریم:

(۱۸۷-۸)

$$R^{\max} = \pi d_{\mathrm{abs}} / z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} \, , (\Delta V/V)^{\max} = \frac{4\pi}{3} (R^{\max})^3 \rho_{\mathrm{V}} \, .$$

قابل ذکر است که نه R^{max} و نه $(\Delta V/V)^{max}$ وابسته به ضرایب آبشار ε_i^g و ε_T نیستند و R^{max} حتی از دانسیته‌ی اندازه‌ی حفره، ρ_V مستقل است. اگر در معادله‌ی ۸–۱۸۵ تشکیل حفره نادیده گرفته شود، در نتیجه، نرخ تورم از بین نمی‌رود. اشباع تورم یک ویژگی ذاتیِ گرایش تولید تحت شرایط آسیب آبشاری است.

همان‌طوری که در توضیح خوشه‌ها با استفاده از فرمول فوکر ـ پلانک (بخش ۷–۶) نشان داده شد، ذکر شده است که توزیع اندازه‌ی خوشه به وسیله‌ی ضریب D گسترده می‌شود و به وسیله‌ی ضریب F تغییر مکان می‌یابد. در نتیجه، با افزایش مقدار پرتوگیری، حل معادله‌ی فوکر ـ پلانک گستردگی توزیع اندازه‌ی حفره و افزایش در متوسط توزیع اندازه‌ی حفره با مقدار پرتوگیری را توضیح می‌دهد. این رفتار کلی می‌تواند با نتایج آزمایشگاهی تورم برای Fe-Cr-Ni پرتودهی شده در ۶۵۰°C مقایسه شود. شکل ۸–۳۸ نشان می‌دهد که متوسط اندازه‌ی توزیع از ۱۱nm در ۹dpa به بیش‌تر از ۵۰nm در ۸۰dpa با یک گستردگی مطابق با توزیع، افزایش می‌یابد. از آن‌جایی که تورم اساساً به تغییر اندازه‌ی متوسط توزیع حساس است، تورم خطی ($\frac{\Delta V}{V}$ متناسب با مقدار پرتوگیری) هنگامی که نرخ رشد در مقایسه با گستردگی نفوذی بزرگ‌تر است، به‌دست می‌آید که در این مورد نرخ تورم تنها با نیروی رانشی تعیین می‌شود.



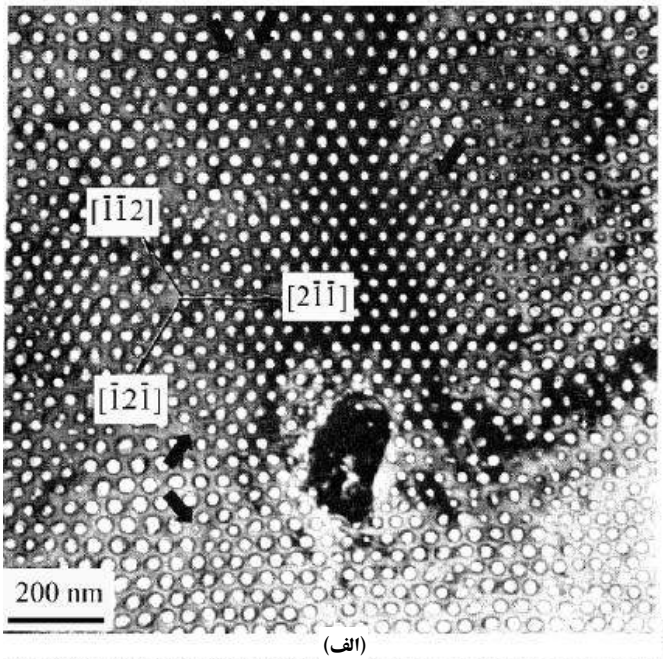
شکل ۸–۳۸. توزیع اندازه‌ی حفره که به صورت آزمایشگاهی در یک آلیاژ Fe-Cr-Ni پرتودهی شده در دمای ۶۵۰°C اندازه‌گیری شده است[۳۶].

۸-۳-۹ شبکه‌های حفره

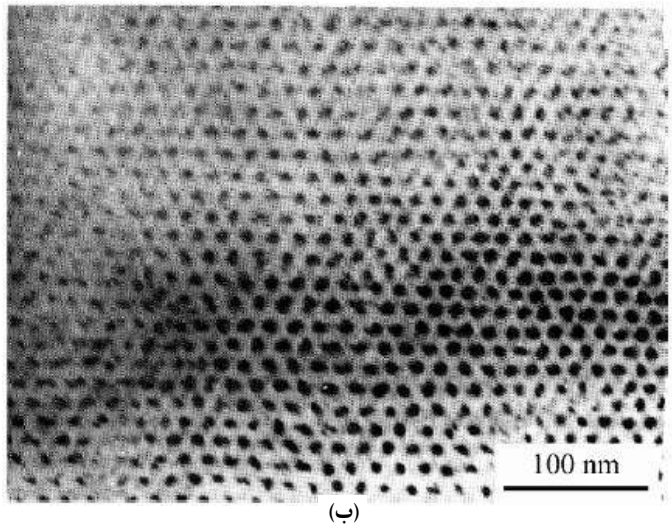
مشخص شده است که در یک فلز تحت پرتودهی، حفره‌ها خودشان را در آرایش‌های تناوبی یا شبکه‌هایی سازمان‌دهی می‌کنند. شکل ۸-۳۹ الف یک شبکه‌ی حفره در نیوبیوم با ساختمان bcc را نشان می‌دهد، که با یون‌های Ta^{+} ۸/۵ MeV تا یک مقدار پرتوگیری ۳۰۰dpa در دمای $800^{o}C$ پرتودهی شده است. شکل ۸-۳۹ شبکه‌ی حفره در مولیبدن پرتودهی شده با یون‌های N^{+} ۲ MeV تا یک مقدار پرتوگیری ۱۰۰dpa در دمای $870^{o}C$ را نشان می‌دهد. این شبکه‌ها در فلزات bcc از فلزات fcc بسیار راحت‌تر تشکیل می‌شوند، اگرچه شبکه‌هایی در نیکل، آلومینیوم و فولاد زنگ نزن مشاهده شده است. شبکه‌های حفره یک شکلی از خودآرایشی است که در سیستم‌های پیچیده به تحریک خارجی رخ می‌دهد. این اعتقاد وجود دارد که خود آرایشی ناشی از برهم‌کنش‌های جمعی بین مؤلفه‌های سیستم تحت نیروهای خارجی است که سیستم را از حالت تعادلی دور می‌کند. باور این است که در جامدات پرتودهی شده، الگوهای حفره مرتبط با عمل جمعی عیوب نقطه‌ای روی ساختار شبکه هستند.

هنوز دانش کاملی از تشکیل شبکه‌های حفره وجود ندارد؛ اما تئوری قادر است که بسیاری از اثرات ضریبی در تشکیل شبکه را محاسبه کند. تئوری جنبشی سرعت و تعیین یک آستانه‌ی ناپایداری می‌تواند بسیاری از مشاهدات را تشریح کند. در کل، ساختارهای منظم عیب هنگامی، تشکیل می‌شوند که شرایط زیر تأمین باشند[۳۹].

۱. تجمع جاهای خالی در داخل خوشه‌ها درطول فاز برخوردی در مرحله‌ی سرد شدن آبشار،
۲. یک گرایش برای نابجایی‌ها برای جذب ترجیحی بین‌نشین‌ها از جاهای خالی،
۳. تقارن در تولید و نفوذ عیوب نقطه‌ای متحرک (گرایش تولید)،
۴. درجه اندکی از ناهم‌سان‌گردی درطول تکامل عیوب خوشه شده. این هم‌چنین می‌تواند به وسیله‌ی ناهم‌سان‌گردی‌های نفوذی عیوب نقطه‌ای، یا به وسیله ناهم‌سان‌گردی برهم‌کنش کشسان میان خوشه‌های عیب در طول مراحل بعدی تکاملشان تحریک شود.



(الف)



(ب)

شکل۸-۳۹. شبکه‌ی حفره در (الف) نیوبیوم که با یون‌های ^{+}Ta MeV ۸٫۵ تا یک مقدار پرتوگیری dpa۳۰۰ در دمای ^{o}C۸۰۰ پرتودهی شده است و شبکه‌ی حباب هلیوم در (ب) مولیبدن پرتودهی شده با یون‌های ^{+}N MeV ۲ تا یک مقدار پرتوگیری dpa۱۰۰ در دمای ^{o}C۸۷۰ [۳۹].

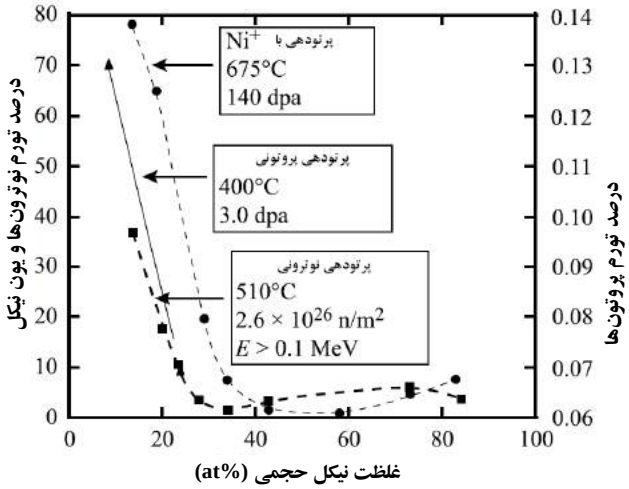
رویداد تشکیل شبکه‌ی حفره تحت شرایط آسیب آبشاری (نوترونی یا پرتودهی یونی) و غیاب آن تحت تولید جفت فرانکل تکی (پرتودهی الکترونی)، شاهدی قوی برای نقش کلیدیِ تحرک یک بعدی خوشه‌های جدایش القایی تابشی از نظر حرارتی پایدار که به صورت مستقیم در آبشارها تولید شده‌اند، است. در حقیقت، نشان داده شده است که هنگامی که یک انتقال ناهم‌سان‌گرد از اتم‌های خود بین‌نشین با سازوکار جمعیتی (به عبارت دیگر انتقالی که در آن بعضی از جهت‌های بلوری از بعضی دیگر ترجیح داده می‌شوند) وجود دارد، حفره‌ها موقعیت‌های فضایی را اشغال می‌کنند که به صورت میانگین یک رشد شبکه‌ی منظم سریع‌تری را از حفره‌های توزیع شده به صورت تصادفی تشکیل می‌دهند[۴۰]. به هرجهت برای تشکیل شبکه‌ی حفره، توزیع‌های تصادفی حفره‌ها باید از بین بروند. این می‌تواند از طریق درشت شدن تصادفی حفره‌ها رخ دهد. ازآن‌جایی که تکامل حفره در این مورد به تغییرات فضایی در نرخ رشد حفره حساس است، حتی یک کسر کوچکی از بین‌نشین‌های متحرک به صورت جمعیتی، می‌تواند به صورت قابل توجهی رفتار فضایی مجموعه‌ی حفره را تحت تأثیر قرار دهد، که منجر به انحلال حفره‌های به صورت تصادفی توزیع شده با نرخ‌های رشد پایین‌تر به وسیله‌ی نوسانات تصادفی می‌شود، و جوانه‌زنی و رشد حفره‌ها، یک شبکه‌ی منظم را تشکیل می‌دهند.

۸-۳-۱۰ اثر ریزساختار و ترکیب

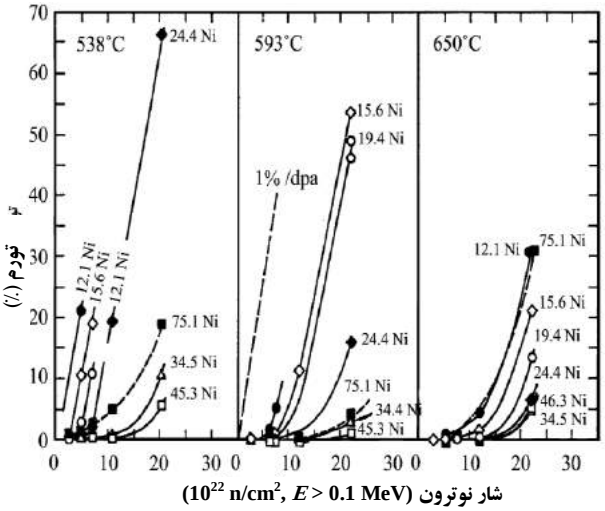
ریزساختار آلیاژ می‌تواند اثر قابل توجهی را روی جوانه‌زنی و رشد حفره داشته باشد. ویژگی‌های ریزساختاری مانند ترکیب، افزودنی‌های حل شده و ساختار رسوبات در رفتار حفره بسیار تأثیرگذار هستند.

ترکیب عناصر اصلی

در یک آلیاژ آستنیتی ساده Fe-Cr-Ni، تورم به صورت قابل توجهی با افزایش مقدار نیکل، رسیدن به یک حداقل در حدود ۵۰٪، افزایش می‌یابد. شکل ۸-۴۰ نشان می‌دهد که وابستگی تورمیِ نیکل برای پرتودهی‌ها با ذرات مختلف نیز حفظ شده است. اثر مقدار نیکل روی تورم اصولاً ناشی از تغییر در مقدار پرتوگیری نهفتگی، همان‌طوری است که در شکل ۸-۴۱ نشان داده شده است. در حقیقت اطلاعات در شکل ۸-۴۲ نشان می‌دهد که در حالت پایدار، نرخ تورم در محدوده‌ی وسیعی از مقدار نیکل، مشابه باقی می‌ماند.



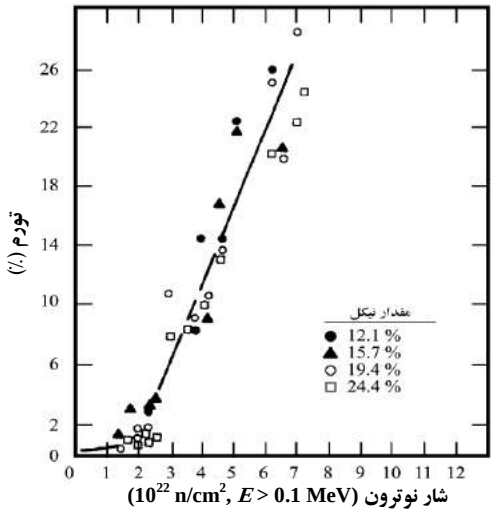
شکل ۸–۴۰. اثر غلظت حجمی نیکل روی تورمِ ناشی از پرتودهی با ذرات متفاوت: نوترون‌ها، یون‌های نیکل و پروتون‌ها [۳۵].



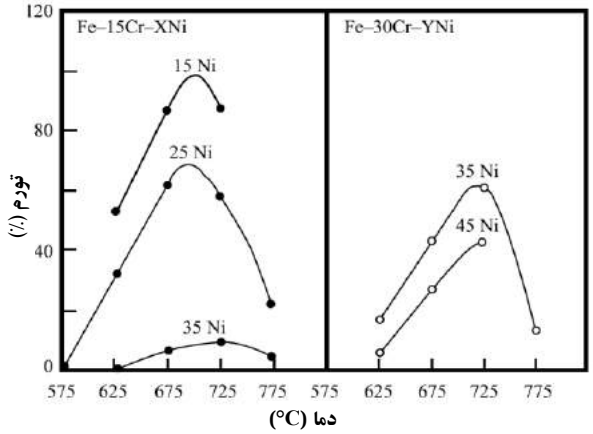
شکل ۸–۴۱. تأثیر دما و مقدار نیکل روی تورم آلیاژ سه‌تایی Fe-15Cr-xNi در یک رآکتور EBR-II [۴۱].

هم‌چنین مقدار کروم نیز روی تورم آلیاژهای آستنیتی تأثیرگذار است. شکل ۸–۴۳ نشان می‌دهد افزایش کروم در محدوده‌ی ۱۵ تا ۳۰٪ منجر به بیش‌تر شدن تورم می‌شود. اطلاعات کمی در مورد اثر سیستماتیک کروم از نیکل وجود دارد؛ اما اطلاعات موجود پیشنهاد می‌کند که تورم به صورت

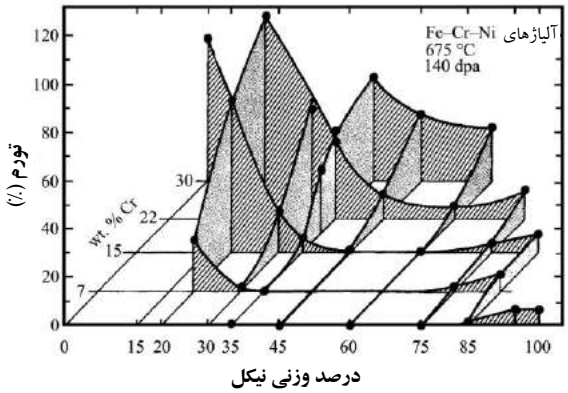
یکنواختی با مقدار کروم افزایش می‌یابد. تورم در آلیاژهای فریتی اهمیت کم‌تری را دارد و مشکلات کم‌تری را ایجاد می‌کند؛ اما هنگامی که مقدار کروم به ۱۵ درصد می‌رسد به مقدار بیشینه نزدیک می‌شود. شکل ۸-۴۴ اثر نیکل و کروم روی تورم در آلیاژهای Fe-Cr-Ni در ^{o}C ۶۷۵ را نشان می‌دهد.



شکل ۸-۴۲. تورم آلیاژ سه تایی Fe-15Cr-Ni در EBR-II در دماهای بین ۴۰۰ و ^{o}C ۵۱۰ برای مقادیر مختلف نیکل بین ۱۲٫۱ و ۲۴٫۴٪ وزنی [۴۱].



شکل ۸-۴۳. اثر مقدار کروم روی تورم در آلیاژهای Fe-Cr-Ni پرتودهی شده یا یون‌های +Ni ۵ MeV تا مقدار پرتوگیری ۱۴۰ dpa [۱۹].



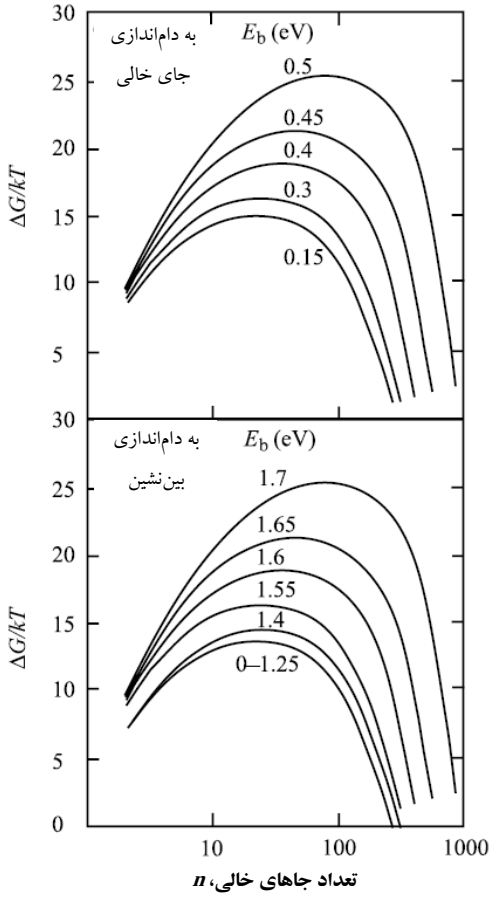
شکل ۸–۴۴. منحنی دوبعدی از وابستگی تورم به مقدار نیکل و کروم در آلیاژهای Fe-Cr-Ni پرتودهی شده با یون‌های +Ni MeV ۵ در دمای $۶۷۵^{o}C$ تا مقدار پرتوگیری dpa ۱۴۰ [۱۹].

افزودنی‌های حل شونده

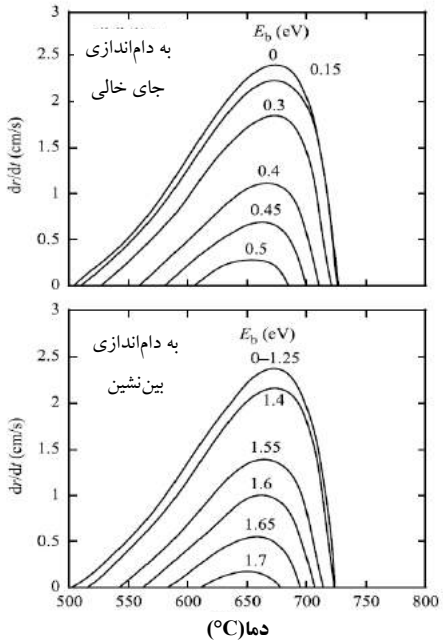
تورم حفره باید با افزودن عناصر جزیی که با شدت کافی به جاهای خالی و بین‌نشین‌ها متصل می‌شوند و تحرک مؤثر آن‌ها را کاهش می‌دهند (در نتیجه از رسیدن به چاهک‌ها و افزایش بازترکیبی جلوگیری می‌کند) ، ممانعت شود. اثر عناصر حل شونده روی معادلات تعادلی عیوب نقطه‌ای در فصل ۶ و قسمت ۶–۴ نشان داده شده است. اثر افزودن عناصر حل شونده روی رفتار تورم حفره می‌تواند با حل معادله‌ی ۶–۵۷ از طریق معادله‌ی ۶–۶۱ و نرخ جوانه‌زنی، معادله‌ی ۸–۳۵، و نرخ تورم حفره، معادله‌ی ۸–۱۱۲ تعیین شود.

نتایج حل روش‌های عددی [۴۲] نشان می‌دهد که با افزایش مقادیر انرژی اتصال، انرژی فعال‌سازی برای جوانه‌زنی حفره افزایش می‌یابد (شکل ۸–۴۵). نرخ تورم حفره با افزایش انرژی اتصال همان‌طوری کاهش می‌یابد که در شکل ۸–۴۶ نشان داده شده است. اثر خالص اضافه کردن عناصر حل شونده روی تورم حفره در شکل ۸–۴۷ نشان داده شده است که مشخص می‌کند که با افزایش غلظت عناصر حل شونده و انرژی اتصال، تورم حفره کاهش می‌یابد. اطلاعات درباره‌ی نقش عناصر حل شونده در تورم در توافق کلی با مدل است. شکل ۸–۴۸ نشان می‌دهد که سیلیسیم و فسفر به شدت روی تورم فولادهای زنگ نزن آستنیتی تأثیرگذار هستند. در حقیقت سیلیسیم یک عنصر نفوذ کننده‌ی بسیار سریع است و مشخص شده است که نسبت نفوذپذیری عناصر حل شونده را تغییر می‌دهد. همان‌طوری که در شکل ۸–۴۹ نشان داده شده، اثر فسفر روی تورم در واقع گسترده کردن

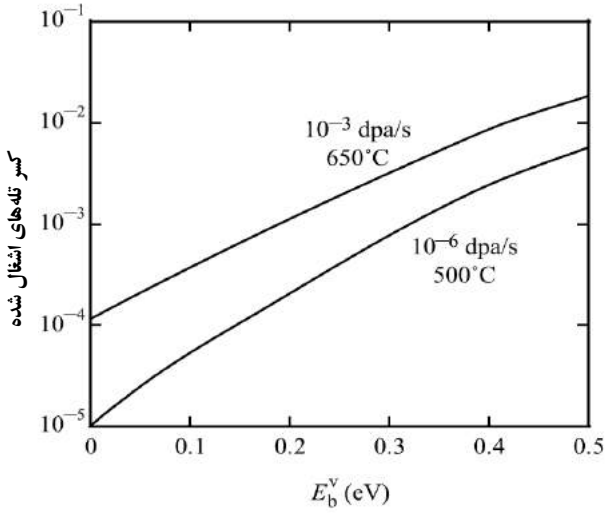
دوره‌ی نهفتگی به مقادیر پرتوگیری بزرگ‌تر است. عناصر حل شونده‌ی بزرگ اندازه مانند هافنیوم اثر مشابهی در متوقف کردن جوانه‌زنی حفره‌ها در فولاد زنگ نزن پرتودهی شده در دمای تقریباً ۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد دارند. درحالی‌که دیگر عوامل بسیار مهم هستند، شکل ۸–۵۰ نشان می‌دهد که اضافه کردن تقریباً ۱٪Hf به فولاد زنگ نزن ۳۱۶ منجر به متوقف شدن تشکیل حفره در طول پرتودهی با یون های Ni^{++} در دمای ۵۰۰°C در سراسر یک مقدار پرتوگیری ۵۰ dpa در مقایسه با یک مقدار پرتوگیری نهفتگی فقط ۲ dpa برای آلیاژ زنگ نزن ۳۱۶ مرجع می‌شود.



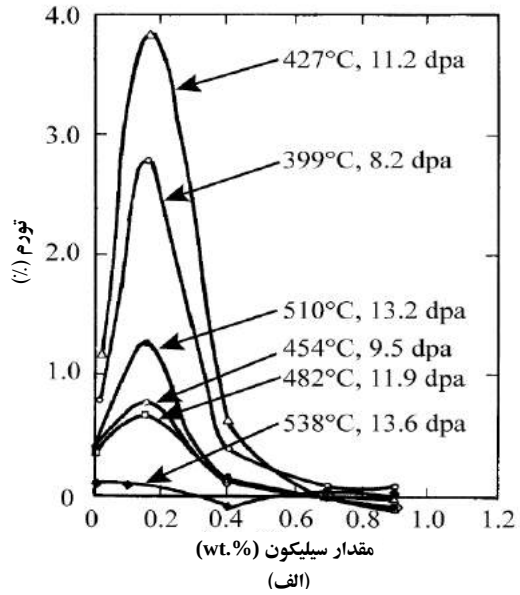
شکل ۸–۴۵. اثر به دام‌اندازی ناخالصی روی انرژی آزاد تشکیل حفره. منحنی‌های بالایی برای به دام‌اندازی جاهای خالی و منحنی‌های پایینی برای به دام‌اندازی بین‌نشین‌ها هستند. نرخ‌های جوانه زنیِ محاسبه شده از منحنی‌ها، به صورت تابعی از انرژی اتصال برحسب eV تعیین شده اند [۴۲].

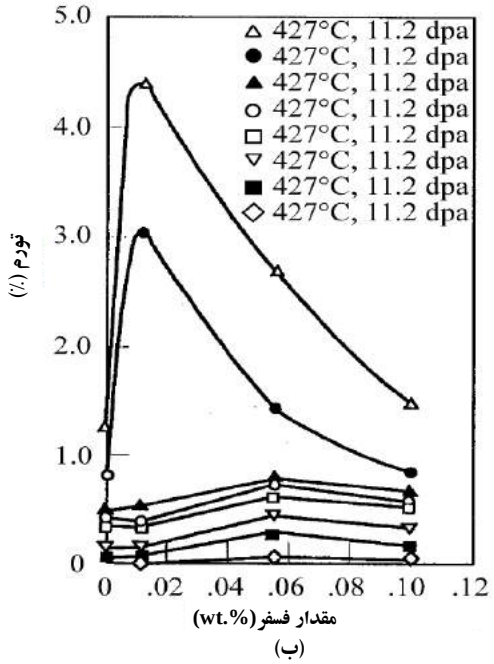


شکل ۸-۴۶. اثر به دام‌اندازی ناخالصی‌ها روی نرخ‌های رشد حفره. *منحنی‌های بالایی* برای به دام اندازی جای خالی و *منحنی‌های پایینی* برای به دام‌اندازی بین‌نشین‌هاست [۴۲].

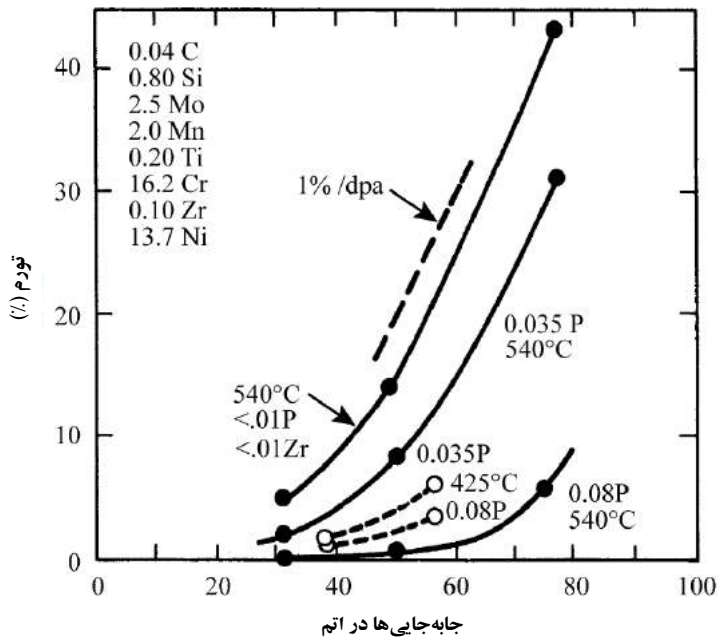


شکل ۸-۴۷. کسر تله‌های اشغال شده برای به دام‌اندازی جاهای خالی در نرخ‌های مقدار پرتوگیری رآکتور سریع و رآکتورهای ذرات باردار و دماهای مختلف برحسب انرژی اتصال. تحت این شرایط، کسر تله‌های اشغال شده حتی در انرژی‌های اتصال بالای جای خالی، کوچک است [۴۲].

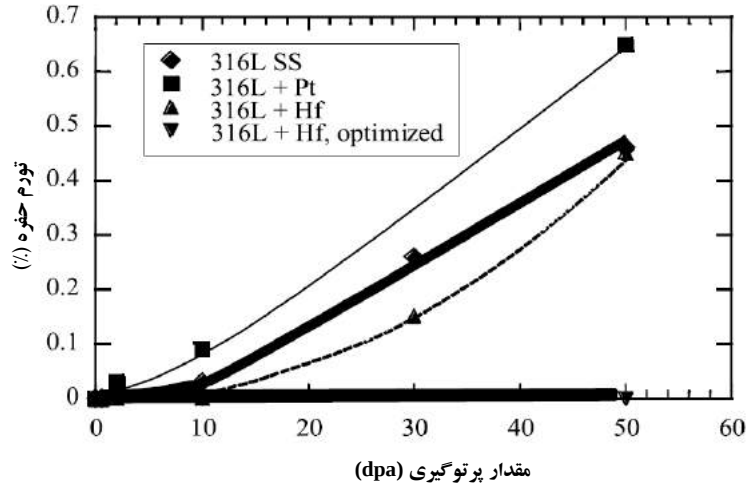




شکل ۸–۴۸. تأثیر (الف) سیلیسیم و (ب) فسفر روی تورم در EBR-II برای Fe-25Ni-15Cr آنیل شده در شرایط مختلف دمایی و پرتودهی [۴۳].



شکل ۸–۴۹. تأثیر مقدار فسفر روی تورم در EBR-II برای یک فولاد ۳۱۶ اصلاح شده با تیتانیوم در دماهای ۴۲۵ و $540^{\circ}C$ [۴۴].



شکل ۸–۵۰. توقف تورم به حداقل dpa ۵۰ در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ با ۱٪ عنصر دوپت شده‌ی هافنیوم بعد از پرتودهی با یون‌های $5\ MeV\ Ni^{++}$ در دمای $500^{\circ}C$ [۴۵].

رسوبات

رسوباب می‌توانند به منزله‌ی موقعیت‌های بازترکیبی برای نابودسازی جای خالی ـ بین‌نشینی به منظور کاهش تورم حفره‌ها عمل کنند. رسوبات هم‌چنین می‌توانند از صعود نابجایی‌ها که لازمه‌ی عمل کردن به جای یک چاهک ترجیحی برای بین‌نشین‌هاست جلوگیری کنند و از آن‌رو رشد حفره را به تأخیر می‌اندازد. در حقیقت رسوبات می‌توانند رشد حفره را به یکی از سه روش‌های زیر تحت تأثیر قرار دهند [۴۶]. اولی یک اثر مستقیم است که در آن حفره‌هایی که به رسوبات چسبیده‌اند، می‌توانند نرخ‌های رشد بالاتری را تحمل کنند زیرا رسوبات به منزله‌ی یک جمع کننده‌ی عیوب نقطه‌ای عمل می‌کنند. رسوبات هم‌چنین می‌توانند به صورت غیرمستقیم با تغییر شدت کلی چاهک جامد یا به وسیله‌ی تغییر مشخصه‌های زمینه رشد حفره را تحت تأثیر قرار دهند.

همان طوری که در بخش ۵-۸ بحث شد این‌گونه در نظر گرفته شده است که رسوبات هم‌بسته موقعیت‌هایی هستند که در آن‌ها بازترکیبی‌های اجباری عیوب به علت توزیع تله‌های اشباع‌پذیر رخ می‌دهد، که یک احتمال اشغال حالت پایداری را به مثابه‌ی یک نتیجه‌ای از تعادل میان به دام‌اندازی عیب، آزادسازی حرارتی عیب و بازترکیبی ذاتی با ضد عیب به‌دست می‌آورد. به هرجهت، رسوبات غیرهم‌بسته هرگونه شار عیب نقطه‌ای اضافی که در برخورد با آن رخ می‌دهد را می‌پذیرند. این رسوبات می‌توانند عیوب را جمع کنند و ممکن است که به جای موقعیت‌هایی برای انتقال سریع عیوب، شبیه به مرزدانه‌ها، عمل کنند. در حقیقت آن‌ها می‌توانند به منزله‌ی موقعیت‌هایی برای جمع‌آوری عیوبی که سپس به حفره‌ها کانال می‌زنند به‌کار روند.

مادامی که پتانسیل موجود برای رسوبات به شدت رشد حفره را از طریق عمل کردن به جای چاهک‌ها یا موقعیت‌های بازترکیبی، تحت تأثیر قرار می‌دهد، اندازه‌گیری‌های اثر رسوب‌گذاری روی رشد حفره برای نشان دادن آن‌که آن‌ها یک نقش قابل توجهی را ایفا می‌کنند، با شکست مواجه خواهد شد.

۸-۳-۱۱ اثر تاریخچه‌ی فعالیت رآکتور

بسیاری از اطلاعات موجود در مورد رفتار حفره در فلزات، از پرتودهی در رآکتورها به‌دست می‌آید. اطلاعات آزمایشگاهی برای تأیید مدل‌ها و فراهم آوری ضریب‌های مواد برای آزمایش مقایسه‌ایِ مدل‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرند. در بسیاری از مدل‌ها فرض شده است که ضریب‌های مربوط به

رآکتور (دما، نرخ مقدار پرتوگیری، تنش) در یک محدوده‌ی زمانی ثابت باشند؛ اما در حقیقت در رآکتورهای تجاری و آزمایشگاهی این ضریب‌ها در طول عملکرد رآکتورها و ناشی از سیکل‌های خاموش و روشن شدن، می‌توانند به صورت قابل ملاحظه‌ای تغییر کنند. برای آزمایشات پرتودهی اصلاً غیرمعمول نیست که کاهش نیروهای متعدد (و از آن‌رو دماهای مختلف) در طول یک دوره‌ی کاری شش ماهه یا یک ساله پرتودهی مورد آزمایش قرار گیرد. گارنر[۴۷] موردی را گزارش کرد که در آن یک رآکتور با دمای کاری ۶۰۰°C در طول سه سال پرتودهی و ۲۳۷ بار کاهش دما تا زیر ۵۰ °C در طول سال اول را آزمایش کرده بود. درحالی‌که مجموع مقدار پرتوگیری در دماهای پایین کم‌تر از تمام مقدار پرتوگیری در دمای بالای رآکتور است (۰٫۱۲ dpa در ۳٫۵ dpa مقدار پرتوگیری در ۱ سال)، آن‌ها اثر عمیقی روی ریزساختار داشتند.

شکل ۸-۵۱ الف تفاوت اندازه‌ی حلقه‌ی نابجایی و عدد دانسیته در نمونه‌های Ni-2.0Si پرتودهی شده در JMTR در ۴۰۰°C برای مورد کنترل دمایی معمول و موردی را نشان می‌دهد که کنترل دمایی به صورت قابل توجهی بهبود یافته است. اندازه‌ی حلقه‌ی به طور متوسط کوچک‌تر و دانسیته‌ی بالاتر، احتمالاً نتیجه‌ای از جوانه‌زنی حلقه‌های اضافه در طول دوره‌ای است که دما پایین است؛ اما جریان نوترونی صفر نیست. این ریزساختار دما پایین در دمای پرتودهی اسمی نیز وجود دارد و منجر به تغییر توزیع اندازه‌ی حلقه در مقایسه با موردی می‌شود که در آن دما کنترل شده است. جوانه‌زنی دما پایین حلقه در یک ریز ساختار دما بالا هم‌چنین می‌تواند تکامل ریزساختار حفره را تحت تأثیر قرار دهد.

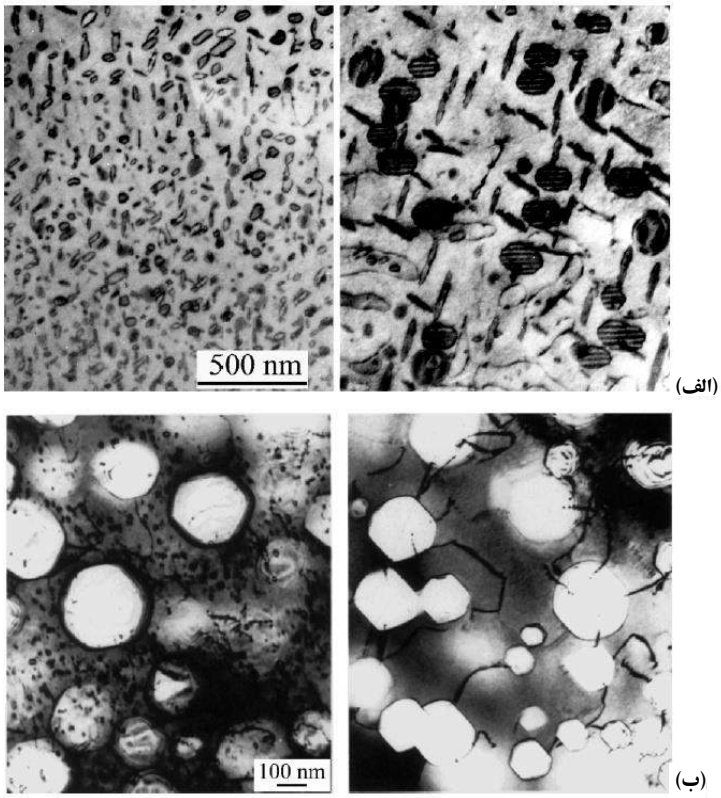
شکل ۸-۵۱ ب ریزساختار یک آلیاژ Fe-15Cr-16Ni پرتودهی شده در دمای ۶۰۰°C در مجموعه تست باز مواد (MOTA)[1] در تأسیسات تست شار سریع (FFTF)[2] تا مقادیر پرتوگیری قابل مقایسه را نشان می‌دهد. نمونه‌ی سمت چپ در یک مجموعه‌ای بوده است که خاموش شدن رآکتور در طول دوره‌ی زمانی ۶ ساعته رخ داده و دما به ۵۰ تا ۱۰۰ °C کاهش یافته است و شار نیز به صورت تدریجی در طول دوره‌ی زمانی ۶ ساعته کاهش یافته است.

پرتودهی در طول مرحله‌ی سرد شدن، مسئول تشکیل ساختار حلقه‌ی نابجایی ظریف است. متعاقب خاموش کردن سریع که در طول آن شار نوترونی و دما در طول یک دوره‌ی چند دقیقه‌ای کاهش یافتند ساختار حلقه‌ی ظریف مشاهده نگردید. افت سریع در دما فرصتی را برای انباشتگیِ کافیِ مقدار

1. Materials Open Test Assembly
2. Fast Flux Test Facility

پرتوگیری در این منطقه‌ی دمایی میانی برای ایجاد جوانه‌زنی حلقه فراهم نمی‌کند. اهمیت این مشاهدات از دو جنبه است.

اولاً ایجاد یک ریزساختار نابجایی دما پایین در داخل یک ریزساختار دما بالا می‌تواند توسعه‌ی بیش‌تر آن ریزساختار را تغییر دهد که هم روی تکامل حلقه و هم تکامل حفره تأثیرگذار است. ثانیاً فقط مقادیر پرتوگیری بسیار پایین (dpa ۰٫۱>) برای جوانه‌زنی ساختار حلقه‌ی ظریف که در طول پرتودهیِ مستمر در دماهای بالا پایدار باقی می‌ماند لازم است.



شکل ۸-۵۱. (الف) اثر کنترل دما روی تشکیل و رشد حلقه‌ی نابجایی در Ni-2%Si پرتودهی شده در ۴۰۰°C در رآکتور تست مواد ژاپن (JMTR) با مقدار پرتوگیری تقریباً $۱۰^{۲۴}$ n/m^2. LHS کنترل معمول (E> ۱٫۰ MeV، $۰٫۹۲ \times ۱۰^{۲۴}$ n/m^2) و RHS کنترل پیشرفته است ($۰٫۹۶ \times ۱۰^{۲۴}$ n/m^2). (ب) اثر سرعت خاموش شدن روی تشکیل حلقه‌های نابجایی کوچک در Fe-15Cr-16Ni پرتودهی شده در FFTF در دمای ۶۰۰°C. تصویر سمت چپ یک کاهش دمایی پایینی را در طول خاموش شدن در مقایسه با کاهش بسیار سریع دما در خاموش شدن برای نمونه‌ی سمت راست تحمل کرده است [۴۷].

۸-۴ رشد حباب[1]

تا این‌جا حفره‌ها در اصل به جای گودال‌هایی در نظر گرفته شدند که به وسیله‌ی جذب جاهای خالی رشد و انقباض می‌یابند. اثر اتم‌های گازی روی جوانه‌زنی حفره‌ها و هم‌چنین روی غلظت تعادلی جاهای خالی در سطح حفره‌ها محاسبه شد؛ اما بزرگی فشارِ ناشی از گاز در حفره بحث نشد و این ضریب ممکن است که روی رشد حفره تأثیرگذار باشد. هم‌چنین هیچ‌گونه تمایزی بین حفره و حباب در نظر گرفته نشد. سؤالی که ممکن است مطرح شود این است که حفره برای آن‌که به منزله‌ی حباب در نظر گرفته شود چه مقدار گاز باید داشته باشد؟ گودال در صورتی به جای حباب در نظر گرفته می‌شودکه اثر گاز (روی انرژی سطحی و ناشی از فشار) باعث شود که گودال به صورت کره درآید. این در اصل چگونگی تمایز حفره‌ها و حباب‌ها در میکروسکوپ الکترونی عبوری است. به علت تناوبی بودن شبکه گودال‌ها با پخ‌های قرار گرفته روی صفحات فشرده پخ‌دار می‌شوند؛ اما اگر انرژی سطحی به وسیله‌ی گاز تغییر کند، یا اگر فشار گاز به اندازه‌ی کافی بالا باشد، در نتیجه گودال از نظر شکل به صورت کروی در می‌آید. البته حفره‌های بسیار بزرگ هم‌چنان که سهم پخ‌ها با افزایش شعاع حفره کاهش یابد، به شکل‌های کروی نزدیک می‌شوند.

به علت آن‌که گازهای نامحلول اغلب به وسیله‌ی تبدیل هسته‌ای در هنگام پرتودهی فلزات مشخص تشکیل می‌شوند حباب‌های گاز خنثی نیز تشکیل می‌شود که ویژگی‌های فیزیکی و مکانیکی یک آلیاژ را تغییر می‌دهد. تشکیل حباب به تحرک گاز (به صورت اتم‌های انفرادی یا ترکیبی)، حداقل تعداد اتم‌های گازی که قادرند یک جوانه‌ی پایدار را تشکیل دهند و نرخی که در آن جاهای خالی شبکه می‌توانند برای افزایش پایداری یک هسته‌ی جوانه زده فراهم شوند بستگی دارد.

حباب‌ها تحت پرتودهی جوانه می‌زنند و سپس رشد می‌کنند یا دوباره حل می‌شوند. معیار به این صورت است که جوانه‌زنی هنگامی متوقف می‌شود که یک اتم گازی نفوذ کننده به صورت تصادفی به یک هسته از قبل موجود برخورد می‌کند تا آن‌که در ایجاد یک جوانه‌ی جدید شرکت کند. دانسیته‌ی حباب نتیجه شده به صورت معکوس با جذر ضریب نفوذ اتم گازی تغییر می‌کند و در نتیجه با کاهش دما افزایش می‌یابد.

فرضیات زیر در مورد جوانه‌زنی حباب، تحت پرتودهی در نظر گرفته شده است. جوانه‌زنی همگن بر پایه‌ی این قضیه استوار شده است که حباب‌ها به وسیله‌ی برهم‌کنش اتم‌های گازی از یک جمعیت

1. Bubble Growth

اتمی زمینه به صورت تصادفی رشد می‌کنند. در نتیجه هیچ‌گونه محاسبه‌ای از اثرات موضعی مانند فرایندهای آبشاری یا رسوب‌گذاری روی عیوب شبکه یا تجمع ناخالصی‌ها در نظر گرفته نشده است. درباره‌ی جوانه‌ی پایدار فرض شده است که یک جفت از اتم‌های گازی در برابر تجزیه‌ی حرارتی پایدار هستند و آن‌که انرژی فعال‌سازی آن به گونه‌ای است که ممکن است که حرکت آن با توجه به اتم‌های گازی تکی نادیده گرفته شود.

در این قسمت، ابتدا علم مکانیک حباب‌ها مورد توجه قرار می‌گیرد و سپس مدل‌های رشد حباب که شبیه به رشد حفره است بررسی می‌شود.

۸-۴-۱ علم مکانیک حباب

برای یک حباب پر از گاز با شعاع R، که در یک محیط جامد جاسازی شده است، تغییر در انرژی آزاد جامد ناشی از حباب برابر است با:

(۱۸۸-۸)

$$\mathrm{d}G = V\,\mathrm{d}p + \gamma \mathrm{d}A\ .$$

از آن‌جایی که

(۱۸۹-۸)

$$V\,\mathrm{d}p = \mathrm{d}(pV) - p\,\mathrm{d}V\ ,$$

و برای یک گاز ایده‌آل، pV برابر با مقدار ثابتی است و $V = \frac{4}{3}\pi R^3$ است، در نتیجه:

(۱۹۰-۸)

$$\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r} = -4\pi R^2\left(p - \frac{2\gamma}{R}\right)\ .$$

با در نظر گرفتن $\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r} = 0$ می‌توان نوشت:

(۸-۱۹۱)

$$p = 2\gamma/R\,.$$

در نتیجه، شرایط تعادلی برای یک حباب به وسیله‌ی تعادل نیرو $p=2\gamma/R$ بیان می‌شود که در آن نیروی ناشی از فشار خارجی، p، به وسیله‌ی نیروی به سمت داخل ناشی از کشش سطحی، $2\gamma/R$ متعادل می‌شود. در حضور یک تنش، تعادل نیروها به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۸-۱۹۲)

$$p = \frac{2\gamma}{R} - \sigma\,.$$

که تنش مثبت کششی است.

تمام مدل‌های حباب، یک رابطه‌ی مشخصی میان تعداد اتم‌های گازی در یک حباب و شعاع آن‌ها را لازم دارند. معادله‌ی حالت واندروالس برای توصیف حالت ترمودینامیکی گاز خنثی در حباب‌ها استفاده می‌شود. n_x به جای تعداد اتم‌های گازی در حباب کروی با شعاع R در نظر گرفته می‌شود و ρ_g دانسیته‌ی گاز است. در نتیجه:

(۸-۱۹۳)

$$n_x = (4/3\pi R^3)\rho_g\,.$$

از قانون گاز ایده‌آل ($pV=nkT$) نتیجه می‌شود:

(۸-۱۹۴)

$$p\frac{V}{n} = kT \quad \text{or} \quad \frac{p}{\rho_g} = kT \quad \text{or} \quad p = \frac{3nkT}{4\pi R^3}\,.$$

با استفاده از معادله‌ی ۸-۱۹۱ برای تعادل مکانیکی به منظور حذف کردن ρ_g و p در معادله‌های ۸-۱۹۳ و ۸-۱۹۴ می‌توان نوشت:

(۱۹۵-۸)

$$n_x = 4/3\pi R^3 \frac{2\gamma}{RkT} = \frac{8\pi R^2 \gamma}{3kT} .$$

برای R کوچک، $1/\rho_g$متناسب با R نیست و باید برای حجم اشغال شده به وسیله‌ی خود اتم‌های گازی محاسبه شود. این کار با اصلاح معادله‌ی ۸-۱۹۴ برای گنجاندن یک عبارت B انجام می‌شود که یک تابع از دما و فشار است. این عملیات، معادله‌ی حالت واندوالس را نتیجه می‌دهد:

(۱۹۶-۸)

$$P\left(\frac{1}{\rho_g} - B\right) = kT \quad \text{or} \quad \frac{1}{\rho_g} = B + \left(\frac{kT}{2\gamma}\right) R ,$$

و معادله‌ی ۸-۱۹۵ به صورت زیر در می‌آید:

(۱۹۷-۸)

$$n_x = \frac{8\pi R^2 \gamma}{3(kT + 2B\gamma/R)} = \frac{4/3\pi R^3}{B + (kT/2\gamma)R} .$$

برای R بزرگ تقریب گاز کامل و برای R بسیار کوچک محدوده‌ی گاز متراکم اعمال می‌شود. از لحاظ فیزیکی حداقل حجم اشغال شده به وسیله‌ی هر اتم، B وجود دارد و هم‌چنان که R کاهش می‌یابد حجم هر اتم به این حد نزدیک می‌شود. نتیجه به این صورت است که:

(۱۹۸-۸)

$$\frac{1}{\rho_g} = B\frac{\text{nm}^3}{\text{atom}} : \text{حد گاز متراکم} ,$$

و

(۱۹۹-۸)

$$\frac{1}{\rho_g} \cong \left(\frac{kT}{2\gamma}\right) R : \text{حد گاز ایده‌آل} .$$

قابل ذکر است که برای فولاد زنگ نزن در ۵۰۰°C که $\gamma \sim$ ۱٫۷۵ J/m^2، $2\gamma/kT \sim$ ۳۲۸ nm^{-2} و

$$\frac{1}{\rho_g} \cong 3 \times 10^{-4} R \frac{\text{nm}^3}{\text{atom}}.$$

موارد محدود کننده مطابق با معادله‌های ۸-۱۹۸ و ۸-۱۹۹ برابر هستند با:

(۸-۲۰۰)

$$n_x = \left(\frac{4\pi R^3}{3B}\right) \quad \text{برای } R \text{ کوچک}$$

و

(۸-۲۰۱)

$$= \left(\frac{4\pi R^2}{3}\right)\left(\frac{2\gamma}{kT}\right) \quad \text{برای } R \text{ بزرگ}$$

اگر معادله‌ی ۸-۱۹۱ رضایت‌بخش نبود، در نتیجه حباب به منزله‌ی یک حباب غیرتعادلی توصیف می‌شود. یعنی حباب در تعادل با جامد نیست. تعادل مکانیکی معمولاً به وسیله‌ی شاری از جاهای خالی به حباب به منظور فراهم کردن حجم اضافی لازم برای تطبیق ریزش اتم‌های گازی حفظ می‌شود. رضایت‌بخش بودن معادله‌ی ۸-۱۹۱، وابسته به نرخ‌های نسبی جذب جاهای خالی و اتم‌های گازی به وسیله‌ی حباب است. یک حباب با شعاع R می‌تواند به صورت عدم حضور $(4/3\pi R^3)/\Omega$ اتم از اتم‌های زمینه در نظر گرفته شود، که Ω حجم اتمی است. کره‌ی خالی با شعاع R می‌تواند به صورت مجموعه‌ای از n_v جای خالی در نظر گرفته شود که می‌توان نوشت:

(۸-۲۰۲)

$$n_v = \frac{4/3\pi R^3}{\Omega}.$$

تعداد اتم‌های گازی در یک کره با شعاع R در تعادل مکانیکی با معادله‌ی ۸-۱۹۷ تعیین می‌شود. تعداد جاهای خالی در هر اتم گازی در یک حباب تعادلی برابر است با:

(۲۰۳-۸)

$$\frac{n_v}{n_x} = \left(\frac{kT}{2\gamma}\right)\frac{R}{\Omega} + \frac{B}{\Omega} .$$

شایان ذکر است که n_x به صورت R^2 افزایش می‌یابد؛ اما n_v به صورت R^3 افزایش می‌یابد. در نتیجه به منظور حفظ تعادل افزایش تعداد جاهای خالی در هر اتم گازی لازم است.

تنش با در نظر گرفتن معادله‌ی ۸-۱۹۲ محاسبه می‌شود و با جایگذاری از معادله‌ی ۸-۱۹۴ برای p می‌توان نوشت:

(۲۰۴-۸)

$$\sigma = \frac{2\gamma}{R} - \frac{3n_x kT}{4\pi R^3} ,$$

که σ تنش کششی هیدروستاتیک است. شعاع بحرانی حباب برای رشد ناپایدار حباب با تنظیم $d\sigma/dr=0$ و حل برای R، تعیین می‌شود که نتیجه می‌دهد:

(۲۰۵-۸)

$$R_c = \left(\frac{9n_x kT}{8\pi\gamma}\right)^{1/2} .$$

با جایگذاری R_c از معادله‌ی ۸-۲۰۵ در داخل معادله‌ی ۸-۲۰۴ داریم:

(۲۰۶-۸)

$$\sigma_c = \left(\frac{128\pi\gamma^3}{81 n_x kT}\right)^{1/2} , \quad \text{or} \quad n_x = \frac{128\pi\gamma^3}{81\sigma_c^2 kT} .$$

شعاع بحرانی حباب، R_c با بیان معادله‌های ۸-۲۰۱ و ۸-۲۰۵ برحسب تعداد اتم‌های گازی در حباب، n_x و حذف n_x با شعاع تعادلی حباب R_0 در ارتباط است و در نتیجه:

(۲۰۷-۸)

$$R_c = \sqrt{3}R_0 ,$$

و تنش بحرانی برحسب R_0 عبارتست از:

(۲۰۸-۸)

$$\sigma_c = \frac{4\sqrt{3}\gamma}{9R_0} .$$

با جایگذاری معادله‌ی ۸-۲۰۱ در معادله‌ی ۸-۲۰۴ برای حذف n_x، رابطه‌ای میان تنش اعمالی، اندازه‌ی اولیه‌ی حباب و اندازه‌ی بحرانی حباب به‌دست می‌آید:

(۲۰۹-۸)

$$\sigma_c = \frac{2\gamma}{R_c}\left(1 - \frac{R_0^2}{R_c^2}\right) .$$

معادله‌های ۸-۲۰۸ و ۸-۲۰۹ معیار پایداری حباب برحسب تنش اعمالی و اندازه‌ی حباب را فراهم می‌کنند. برای حباب‌هایی با اندازه‌ی R_0، معادله‌ی ۸-۲۰۸ تنش بحرانی برای پایداری را ارایه می‌دهد. برای یک جامد با حباب‌هایی با اندازه $R_0<R_c$، اعمال یک تنش کششی σ_c باعث رشد حفره به اندازه‌ی R_c که با معادله‌ی ۸-۲۰۹ مشخص شد، می‌شود. اگر $R_0>R$ یا اگر تنش σ_c از مقدار سمت راست معادله‌ی ۸-۲۰۸ بزرگ‌تر باشد در نتیجه حباب بدون محدودیت رشد می‌کند. یا برای یک تنش اعمالی مشخص، معادله‌ی ۸-۲۰۸ شعاع بحرانی حباب برای پایداری را می‌دهد. معادله‌ی ۸-۲۰۵ می‌تواند با معادله‌ی پایداری برای یک حفره‌ی بدون گاز در یک جامد در معرض تنش σ مقایسه شود. برای $p = 0$ در معادله‌ی ۸-۱۹۲، $\sigma = 2\gamma / R$ است. ضریب عددی در معادله‌ی ۸-۲۰۸ در حدود ۰٫۷۷ است که در حدود ۳ برابر از ضریب موجود برای حفره‌ی کوچک‌تر است. تفاوت، به علت اثر فشار گاز در حباب است که فشار را همراهی می‌کند.

۸-۴-۲ قانون رشد

در مقایسه با رشد حفره، سرعت زمانی تغییر حجم یک حباب برابر با تفاوت در نرخ‌هایی است که در آن جاهای خالی و بین‌نشین‌ها جذب می‌شوند و حجم تحمیل شده به وسیله‌ی هر یک از این عیوب نقطه‌ای برابر است با:

(۸-۲۱۰)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{4}{3}\pi R^3\right) = \Omega\left[4\pi R D_\mathrm{v}\left(C_\mathrm{v} - C_\mathrm{v}^\mathrm{V}\right) - 4\pi R D_\mathrm{i}\left(C_\mathrm{i} - C_\mathrm{i}^\mathrm{V}\right)\right] ,$$

و در نتیجه قانون رشد برابر است با:

(۸-۲۱۱)

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} \equiv \dot{R} = \frac{\Omega}{R}\left[D_\mathrm{v}\left(C_\mathrm{v} - C_\mathrm{v}^\mathrm{V}\right) - D_\mathrm{i}\left(C_\mathrm{i} - C_\mathrm{i}^\mathrm{V}\right)\right] ,$$

که C_v^V و C_i^V غلظت‌های جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در سطح حباب هستند و C_v و C_i غلظت‌های عیوب نقطه‌ای در حجم جامد هستند. غلظت ترمودینامیکی جاهای خالی در سطح حباب که با معادله‌ی ۸-۸۵ مشخص شد، با وارد کردن اثر فشار گاز در حباب اصلاح می‌شود:

(۸-۲۱۲)

$$C_\mathrm{v}^\mathrm{V} = C_\mathrm{v}^0 \exp\left[\frac{-\Omega}{kT}\left(p - \frac{2\gamma}{R}\right)\right] ,$$

و برای بین‌نشین‌ها:

(۸-۲۱۳)

$$C_\mathrm{i}^\mathrm{V} = C_\mathrm{i}^0 \exp\left[\frac{\Omega}{kT}\left(p - \frac{2\gamma}{R}\right)\right] ,$$

که C_v^0 و C_i^0 به ترتیب غلظت‌های تعادلی ترمودینامیکی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برای یک جامد بدون تنش هستند و عبارت‌های نمایی حضور یک تنش مکانیکیِ فعال روی جامد معادل با بزرگی $p - 2\gamma/R$ است. به علت آن‌که C_i^0 بسیار کوچک است عبارت بین‌نشینی، معادله‌ی ۸-۲۱۲ می‌تواند نادیده گرفته شود. با تنظیم $\mathrm{d}R/\mathrm{d}t = 0$ در معادله‌ی ۸-۲۱۱ و جایگذاری معادله‌ی ۸-۲۱۲ برای C_v^V در عبارت حاصله، و گرفتن لگاریتم و باز آرایشی می‌توان نوشت [۴۸، ۴۹]:

(۸-۲۱۴)

$$R_\mathrm{c} = \frac{2\gamma}{p + \dfrac{kT}{\Omega}\ln S_\mathrm{v}} ,$$

که S_v فوق اشباع مؤثر جای خالی است که با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

(۸-۲۱۵)

$$S_v = \frac{D_v C_v - D_i C_i}{D_v C_v^0} .$$

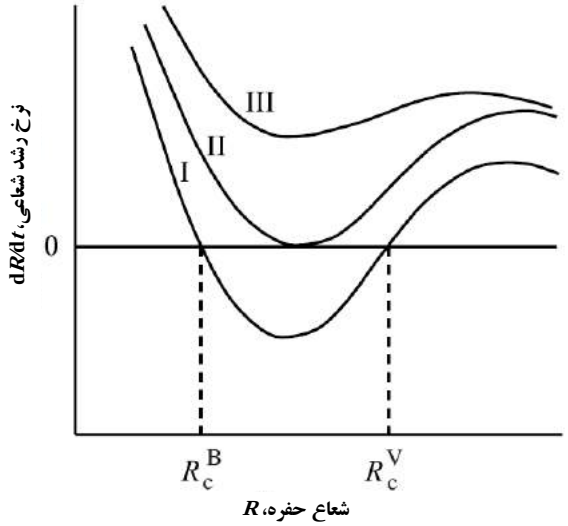
اکنون با جایگذاری معادله‌ی ۸-۱۹۴ برای p در معادله‌ی ۸-۲۱۴ و بازآرایشی نتیجه می‌شود:

(۸-۲۱۶)

$$g(R_c) = R_c^3 - \frac{2\gamma\Omega}{kT \ln S_v} R_c^2 + \frac{3n_x\Omega}{4\pi \ln S_v} = 0 ,$$

که این عبارت با تابع $g(R_c)$ نشان داده می‌شود و هنگامی که R_c یک ریشه باشد، برابر با صفر می‌شود. نرخ رشد به صورت تابعی از شعاع حفره در شکل ۸-۵۲ برای سه حالت مختلف رسم شده است. منحنی پایین موردی است که معادله‌ی ۸-۲۱۶ سه ریشه‌ی واقعی دارد، منحنی وسطی موردی را نشان می‌دهد که در آن حداقل دو ریشه برابر هستند و منحنی بالایی یک ریشه‌ی واقعی دارد [۴۹]. در مورد I، ریشه‌ها به صورت R_c^B و R_c^V نشان داده می‌شوند. یک حفره‌ی حاوی تعداد کافی اتم گازی که بین R_c^B و R_c^V است به R_c^B انقباض پیدا خواهد کرد. یک حفره با تعداد مشابه اتم‌های گازی اما با شعاع زیر R_c^B به R_c^B رشد خواهد کرد و متوقف می‌شود. در پایان یک حفره با تعداد مشابه از اتم‌های گازی و با شعاعی بالاتر از R_c^V بدون محدودیت و با رشد تحریک شده به وسیله‌ی گرایش رشد خواهد کرد. هم‌چنان که تعداد اتم‌های گازی افزایش می‌یابد، معادله‌ی ۸-۲۱۶ با منحنی‌هایی نشان داده می‌شود که از I به II و از II به III پیشرفت می‌کنند. در مورد منحنی III، تعداد اتم‌های گازی به اندازه‌ی کافی بزرگ است و هیچ‌گونه تقاطعی با محور $dR/dt = 0$ نخواهد داشت و این حفره‌ها فقط با رشد تحریک شده به وسیله‌ی گرایش، رشد خواهند کرد. در برخی از تعداد اتم‌های گازیِ بحرانی، فقط یک تقاطع از تابع dR/dt با محور $dR/dt = 0$ وجود دارد. این موردی است که به وسیله‌ی محور II نشان داده می‌شود. در این مورد، عدد مطابق با اتم‌های گازی به صورت n_x^* نشان داده می‌شوند و شعاع بحرانی کمینه مربوط که منطبق بر R_c^B و R_c^V است به صورت R_c^* نشان داده می‌شود. کمیت n_x^*

بیشینه‌ی تعداد اتم‌های گازی است که ممکن است در یک حفره برای وجود یک شعاع بحرانی با یک مقدار کمینه R_c^*، موجود باشد.



شکل ۸–۵۲. منحنی شماتیکی از نرخ رشد حفره به صورت تابعی از شعاع حفره برای مقادیر صعوی از گاز هلیوم در حفره یا S_V [۴۸].

حداقل شعاع بحرانی R_c^*، با مشتق گرفتن از معادله‌ی ۸–۲۱۶ با توجه به R_c به‌دست می‌آید:

$$\frac{dg(R_c)}{dR_c} = 3R_c^2 - \frac{4\gamma\Omega}{kT\ln S_v}R_c \,. \qquad (۸–۲۱۷)$$

اگر معادله‌های ۸–۲۱۶ و ۸–۲۱۷ به صورت هم‌زمان برابر با صفر در نظر گرفته شوند، کم‌ترین شعاع بحرانی به‌دست می‌آید:

$$R_c^* = \frac{4\gamma\Omega}{3kT\ln S_v}\,, \qquad (۸–۲۱۸)$$

و از معادله‌ی ۸–۲۰۵ می‌توان نوشت:

$$n_x^* = \frac{128\pi\gamma^3\Omega^2}{81(kT)^3(\ln S_v)^2} \quad (۲۱۹-۸)$$

استولر[1] و همکارانش [۴۹] ذکر کرده‌اند که معادله‌ی ۸-۲۱۹ می‌تواند با استفاده از یک ضریب شکل، F_v برای حفره‌های غیرکروی نوشته شود، به گونه‌ای که:

$$n_x^* = \frac{32F_v\gamma^3\Omega^2}{27(kT)^3(\ln S_v)^2} \quad (۲۲۰-۸)$$

که $F_v = 4\pi/3$ برای یک حفره کروی است. این محقق هم‌چنین اشاره کرده است که راه‌حل‌های منطقی فیزیکی بیش‌تری با استفاده از یک معادله‌ی حالت کره‌ی سخت نسبت به قانون گاز ایده‌آل به‌دست می‌آید که تمایل به پیش‌گویی زمان‌های نهفتگی تورم بیش‌تری را دارد.

هم‌چنین باید ذکر شود هنگامی که σ با $\Omega/\ln S$ جایگزین شود، معادله‌های ۸-۲۱۹ و ۸-۲۰۶ مشابه هستند، که مشخص می‌کند که معیار پایداری صرف‌نظر از آن‌که جامد تحت یک تنش عملی یا یک تنش مؤثر تعریف شده به وسیله‌ی فوق اشباع جای خالی القایی تابشی باشد مشابه است. یک حباب برای فوق اشباع جای خالی منفی پایدار است و می‌تواند وابسته به بزرگی فوق اشباع، مقدار گاز و اندازه‌ی حباب مطابق با شکل ۸-۵۲، برای فوق اشباع مثبت جای خالی پایدار یا شبه پایدار باشد. برای یک تنش ثابت یا فوق اشباع جای خالی القایی تابشی، هنگامی که حد پایداری به وسیله‌ی جذب گاز فرا می‌رسد، یک حباب با جذب جای خالی رشد می‌کند و تبدیل به یک حفره می‌شود. معادله‌های ۸-۲۱۸ و ۸-۲۰۵ معیار استحاله‌ی حباب ـ حفره را تشریح می‌کند.

معادله‌ی ۸-۲۱۱ می‌تواند برای محاسبه‌ی نرخ تورم ناشی از تورم حباب با فرض آن‌که تمام گاز در داخل حفره باشد، انحلال مجدد ناچیز باشد و گاز ایده‌آل در نظر گرفته شود استفاده شود به صورتی که:

$$p = \frac{n_x kT}{4/3\pi R^3\rho_B} \quad (۲۲۱-۸)$$

1. Stoller

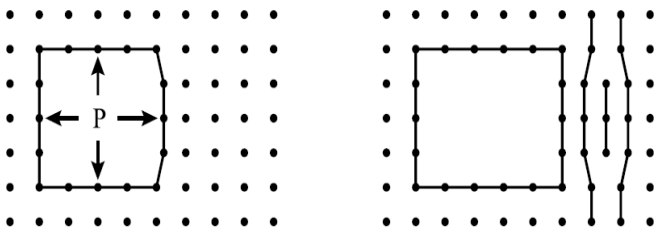
که ρ_B دانسیته‌ی کلی حباب است و $n_X = \dot{x}t$ غلظت گاز در جامد است که به وسیله‌ی تحول در یک نرخ $\dot{x}$ تولید شده است. نرخ تورم ناشی از رشد حباب برابر است با:

$$\mathrm{d}(\Delta V/V)/\mathrm{d}t = (4\pi R^2 \rho_\mathrm{B}/\Omega)\,\mathrm{d}R/\mathrm{d}t\ . \qquad (۲۲۲-۸)$$

۸-۴-۳ رشد حباب به وسیله‌ی تورفتگی حلقه‌ی نابجایی

درحالی‌که نفوذ جای خالی، سازوکار عمده‌ی سهیم در رشد حفره در مقیاس‌های ظریف است، یک سازوکار اضافی برای رشد حفره در مورد فشار گاز بالا، تورفتگی[1] حلقه‌ی نابجایی است. اگر فشار در حباب به اندازه‌ی کافی بالا باشد، ممکن است تنش در پیرامون جامد به سطحی برسد که منابع نابجایی بتوانند فعال شوند، که منجر به رشد حباب به وسیله‌ی تورفتگی به سمت بیرون یک حلقه‌ی نابجایی می‌شود (شکل ۸-۵۳). لازم به یادآوری است که تنش مورد نیاز برای فعال کردن یک منبع فرانک ـ رید تقریباً برابر با $\mu b/l$ است که l فاصله‌ی میان نقاط ثابت شبکه است. منابع نابجایی که به راحتی فعال می‌شوند، منابعی با $l \sim r_0$ هستند که r_0 شعاع حباب است. در نتیجه فشار اضافه مورد نیاز برای تولید نابجایی‌ها تقریباً برابر با $\mu b/r_0$ است. بزرگی فشار اضافیِ مورد نیاز برای تولید نابجایی‌های منشوری با مقایسه‌ی تغییر انرژی آزاد حباب در ایجاد یک حلقه‌ی نابجاییِ برابر با اندازه‌ی حباب با انرژی خود حلقه به‌دست می‌آید [۵۱]. کار لازم برای افزایش اندازه‌ی حباب برابر است با:

$$\Delta F = -p\,\mathrm{d}V = -\left(p - \frac{2\gamma}{r_0}\right)\pi r_0^2 b\ , \qquad (۲۲۳-۸)$$



شکل ۸-۵۳. نمایش شماتیکی از رشد یک حباب به وسیله‌ی تورفتگی حلقه نابجایی [۵۰].

1. Punching

که p فشار در حباب، V حجم حباب، γ انرژی سطحی و b بردار برگرز هستند. با نادیده گرفتن سهم نقص در چیده شدن، انرژی حلقه نابجایی منشوری با شعاع r_0 به وسیله‌ی معادله‌ی ۷-۶۴ تقریباً برابر است با:

$$E_{\mathrm{L}} = \frac{\mu b^2 r_0}{2(1-\nu)} \ln \frac{4r_0}{r_{\mathrm{c}}} , \qquad (۲۲۴-۸)$$

در نتیجه برای آن‌که تشکیل حلقه نابجایی از لحاظ انرژی امکان‌پذیر باشد:

$$\left(p - \frac{2\gamma}{r}\right) \pi r_0^2 b > \frac{\mu b^2 r_0}{2(1-\nu)} \ln \frac{4r_0}{r_{\mathrm{c}}} , \qquad (۲۲۵-۸)$$

با تقریب گرفتن E_{L} به صورت $\pi\mu b^2 r_0$ داریم:

$$p > (2\gamma + \mu b)/r_0 . \qquad (۲۲۶-۸)$$

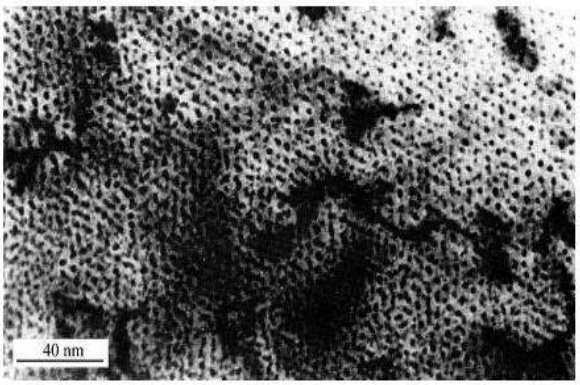
برای مقادیر نمونه‌واری از γ و μ، فشار گاز در حباب باید قبل از آن‌که نابجایی‌ها بتوانند تولید شوند و اجازه‌ی گسترش به حباب را بدهند، در حدود یک مرتبه‌ی بزرگ‌تر از $2\gamma/r_0$ باشد.

۸-۴-۴ شبکه‌های حباب

مشابه با شبکه‌های حفره که قبلاً توضیح داده شد، سطح بالایِ هلیوم می‌تواند منجر به سازماندهی شبکه‌ی حباب‌های گازی شود. در حقیقت، تشکیل شبکه حباب گاز در فلزات bcc، fcc و hcp متعاقب تزریق هلیوم در دماهای $T_{\mathrm{m}} > ۰٫۳$ مشاهده شده است [۵۲]. حباب‌های هلیوم در مس با ردیف‌های پرتراکم موازی با جهت‌های {111} در یک خط قرار گرفته‌اند. اندازه‌گیری‌های جوهانسون[1] و همکارانش نشان داد که ثابت شبکه‌ی ابر شبکه‌ی حباب هلیوم در مس، برابر با

1. Johnson

a_{He} = ۷٫۶nm است که مطابق با دانسیته‌ی حباب $۱۰^{۲۵}$ حباب در مترمکعب است. شکل ۸-۵۴ یک تصویر میکروسکوپ الکترونی عبوری میدان روشن از شبکه‌ی حباب گاز هلیوم در مولیبدن را نشان می‌دهد که در اثر پرتودهی با $۴۰\ keV\ He^+$ تا یک مقدار پرتوگیری $۵\times۱۰^{۲۱}\ He^+/m^2$ در ۵۰۰°C در مولیبدن تشکیل شده است.



شکل ۸-۵۴. ابر شبکه‌ی حباب گاز He که در اثر پرتودهی با $۴۰\ keV\ He^+$ تا یک مقدار پرتوگیری $۵\times۱۰^{۲۱}\ He^+/m^2$ در ۵۰۰°C در مولیبدن تشکیل شده است [۳۹].

۸-۴-۵ تولید هلیوم

یک جزء مهم در تشکیل و رشد حباب، تولید هلیوم است. در یک رآکتور، تولید He به وسیله‌ی مقادیر بور و نیکل آلیاژ از طریق واکنش:

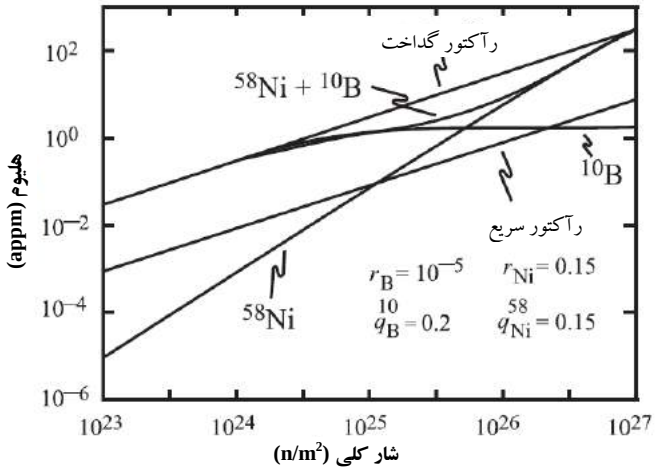
$$^{10}\mathrm{B}(n,\alpha)^{7}\mathrm{Li}\ , \qquad (۲۲۷-۸)$$

و واکنش دومرحله‌ای:

$$^{58}\mathrm{Ni}(n,\gamma)^{59}\mathrm{Ni}(n,\alpha)^{56}\mathrm{Fe}\ . \qquad (۲۲۸-۸)$$

کنترل می‌شود. سطح مقطع نوترون حرارتی (n,α) برای ^{۱۰}B بسیار بزرگ و در حدود ۳۸۳۷b است درحالی‌که سطح مقطع برای ^{۵۹}Ni برابر با نوترون‌های سریع و فقط در حدود ۴/۳b است. برای رآکتورهای حرارتی در اوایل عمر کاری مقدار بزرگی از هلیوم از استحاله‌های بور تولید می‌شود؛ اما

این منبع توسط حدود dpa ۱ ($\sim 10^{21}$ n/cm^2) خاتمه می‌یابد. حضور نیکل در فولاد زنگ نزن مقدار کم‌تری هلیوم را تولید می‌کند؛ اما منبع هلیوم در مقادیر پرتوگیری بالاتر را حفظ می‌کند. از این جنبه، رآکتورهای حرارتی مقدار بیش‌تری از هلیوم را در مقادیر پرتوگیری پایین تولید می‌کنند و در یک محیط با نرخ مقدار پرتوگیری پایین‌تر، ایجاد تورم القایی هلیومی در یک رآکتور حرارتی از یک رآکتور سریع مشکل پیچیده‌تری را ایجاد می‌کند. شکل ۸-۵۵ نرخ تولید هلیوم از یک آلیاژ حاوی ^{10}B و ^{58}Ni در رآکتور HFIR (حرارتی) را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که نرخ تولید هلیوم در شارهای پایین به وسیله‌ی سهم ^{10}B و در شارهای بالا به وسیله ^{58}Ni کنترل می‌شود. افزایش هلیوم برای آلیاژ مشابه در یک رآکتور سریع و یک رآکتور گداخت جهت مقایسه آورده شده است. شایان ذکر است که افزایش هلیوم در یک رآکتور گداخت مطابق رآکتور HFIR است و هر دو از یک رآکتور سریع بالاتر هستند.



شکل ۸-۵۵. افزایش هلیوم بر حسب جریان برای فولاد زنگ نزن آستنیتی در HFIR (رآکتور حرارتی)، رآکتور گداخت و رآکتور سریع. در شکل r کسر اتمی بور یا نیکل در آلیاژ است و q کسر اولیه ایزوتوپ‌های لیست شده در شکل است[۲۷].

نام‌گذاری اصطلاحات

a: ثابت شبکه

$A_{\mathrm{v,i}}^{\mathrm{x}}$: نرخ جذب جاهای خالی، بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی چاهک X

B: حجم اشغال شده به وسیله‌ی یک اتم گازی در یک شبکه

C_j: غلظت گونه‌های j

C_{j}^{0}: غلظت تعادل حرارتی گونه‌های j

$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{L}}$: غلظت جای خالی در تعادل با یک حلقه‌ی نابجایی

d_{abs}: قطر مؤثر نابجایی‌ها برای جذب خوشه‌های جدایش القایی تابشی لغزنده

$d^{\mathrm{c,e}}$: شدت گسترش نفوذی برای خوشه‌ها (c) یا برای نشر جاهای خالی (e) از عیوب نقطه‌ای تنها

D_j: ضریب نفوذ گونه‌های j

D^{c}: گسترش نفوذی ناشی از آبشارها

D^{e}: گسترش نفوذی ناشی از جای خالی

D^{s}: گسترش نفوذی ناشی از پرش‌های عیوب تکی

E: انرژی

E_{b}^{j}: انرژی اتصال گونه‌های j

E_{f}^{j}: انرژی تشکیل گونه‌ی j

E_{m}^{j}: انرژی مهاجرت گونه‌ی j

F_{v}: ضریب شکل ($4\pi/3$ برای حفره‌ی کروی)

$g(R_{\mathrm{c}})$: ضریب نرخ رشد حفره، تعریف شده در معادله‌ی ۸-۲۱۶

G: انرژی آزاد

G_0: انرژی تشکیل شبکه‌ی کامل

ΔG: تغییر در انرژی آزاد

$\Delta G_{\mathrm{n}}^{0}$: سد فعال‌سازی برای جوانه‌زنی حفره‌ی بدون بین‌نشین‌ها

$\Delta G_{\mathrm{n}}'$: سد فعال‌سازی برای جوانه‌زنی حفره‌ی با بین‌نشین‌ها

H: آنتالپی، هم‌چنین ثابت قانون هنری معادله‌ی ۸-۵۷

J : جریان جوانه‌زنی

k : ثابت بولتزمان

k_{g}^2 : شدت چاهک برای خوشه‌های جدایش القایی تابشی نفوذ کننده در یک بعد

k_{x}^2 : شدت چاهکِ چاهک X

k_{j}^2 : شدت کلی چاهک گونه‌های j

k_{cl}^{eff} : نرخ مؤثر تولید عیوب در خوشه‌ها و شکل‌های آزاد

K_j : نرخ اتلاف گونه‌های j

K_{iv} : نرخ بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشین

K_j^{eff} : نرخ مؤثر تولید عیوب آزاد از نوع j

K_0 : نرخ تولید عیب

k_0^{eff} : نرخ مؤثر تولید جفت فرانکل محاسبه شده برای بازترکیبی

k_x^{c} : نرخ انحلال مجدد اتم گازی

l : فاصله‌ی خوشه تا یک مرزدانه

L_j : نرخ نشر حرارتی گونه‌های j

m_{i} : تعداد بین‌نشین‌ها در یک حلقه‌ی بین‌نشینی

M : غلظت هلیوم

M_x : خوشه‌ی هلیوم از x اتم گازی

n : تعداد جاهای خالی در یک حفره

n_{cr} : تعداد جاهای خالی در یک حفره با اندازه‌ی بحرانی

$n_{\mathrm{k}}, n'_{\mathrm{k}}$: اندازه‌ی خوشه‌ی بحرانی هسته‌ی حفره

$n_{\mathrm{v,i}}$: تعداد جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

$N_{\mathrm{d}j}$: تعداد میانگینِ عیوب نوع j که در یک آبشار تکی تولید شده

N_0 : تعداد موقعیت‌های شبکه در واحد حجم

N_{R} : معادله‌ی ۸–۱۵۱ ملاحظه شود

N_{S} : معادله‌ی ۸–۱۵۴ ملاحظه شود

p : فشار گاز

p_{cl} : تعریف شده در معادله‌ی ۸-۱۸۶

p_l : تعریف شده در معادله‌ی ۸-۱۸۵

P_m: احتمال جوانه‌زنی یک نطفه‌ی حفره با اندازه‌ی m

Q : تعریف شده در معادله‌ی ۸-۱۸۴

r : شعاع

r_o: شعاع حلقه‌ی نابجایی منشوری

R : شعاع حباب یا حفره

R_g: شعاع دانه

R_c: شعاع بحرانی حباب

R_{cr}: شعاع بحرانی حفره

R_{iv}: نرخ بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشین

R_{max}: اندازه حفره‌ی اشباع

R_0: شعاع حباب تعادلی

$\dot{R}$:نرخ تغییر شعاع، نرخ رشد

r_k, r_k' :شعاع بحرانی جوانه‌ی حفره

S : آنتروپی، بی‌نظمی

S_j: فوق اشباع گونه‌های j

T : دما

V : حجم

$\Delta V/V$: کسر حجمی

w_n : تعداد راه‌های حذف $\rho^0(n)$ حفره با اندازه‌ی n از یک جامد

x : تعداد اتم‌های گازی در یک حفره

x_g: متوسط اندازه‌ی خوشه‌ی لغزنده

z_v :ضریب گرایش جای خالی

z_i :ضریب گرایش بین‌نشین

Z : ضریب زلدویچ

Z' : ضریب زلدویچ در حضور بین‌نشین‌ها یا در یک جامد تنش‌دار

α_j : نرخ نشر گونه‌های j

β : $2\gamma\Omega/kT$ تعریف شده در معادله‌ی ۸-۷۱

β_j: نرخ جذب گونه‌های j

δ : ضخامت دیواره‌ی حفره

ε_i^g :کسر بین‌نشین‌ها در خوشه‌های لغزنده

ε_T: کسر جفت‌های فرانکل که در طول سرد شدن آبشار بازترکیب شدند

Φ: جریان یا مقدار پرتوگیری

γ : انرژی سطحی

η : تعریف شده در معادله‌ی ۸-۱۱۷

μ : ضریب برشی

μ_x: پتانسیل شیمیایی گونه‌های x

ν : نسبت پواسون

θ : زاویه‌ی مابین سطح و خط مماس بر حفره، معادله‌ی ۸-۸۱

Θ : تعریف شده در معادله‌ی ۸-۹۸

ρ : توزیع اندازه‌ی حفره

ρ_x : دانسیته‌ی کمیت x

σ : تنش هیدروستاتیک

τ : زمان

Ω : حجم اتمی

ξ : تعریف شده در معادله‌ی ۸-۱۵

ζ : تعریف شده در معادله‌ی ۸-۱۳۰

زیرنویس‌ها

B : حباب‌ها

cr : اندازه‌ی بحرانی

CP : رسوبات هم‌بسته

D : نابجایی‌های کلی

g : خوشه‌های لغزنده یا گاز

gb : مرزدانه

hom : همگن

i : بین‌نشین‌ها

j : نماد گونه عیب

IP : رسوبات غیرهم‌بسته

L : حلقه‌های نابجایی

N : نابجایی‌های شبکه

s : چاهک‌ها

v : جاهای خالی

V : حفره

0 : تعادل

بالانویس‌ها

c : آبشار

e : نشر جای خالی

L : حلقه ها

m : تعداد جاهای خالی در یک نطفه‌ی حفره‌ی با اندازه nی

s : عیوب تکی

V: حفره‌ها

0 : تعادل

* : حداقل مقدار بحرانی

′ : در حضور بین‌نشین‌ها

مسایل

۸-۱ در یک جامد که در آن اثر بین‌نشین‌ها نادیده گرفته شده است (به عبارت دیگر $\beta_i/\beta_v = 0$)

الف) اندازه‌ی بحرانی نطفه‌ی حفره (برحسب تعداد جاهای خالی و شعاع حفره) را تعیین کنید.

ب) به صورت شماتیکی نشان دهید که چه‌طور تعداد جاهای خالی در اندازه‌ی بحرانی نطفه‌ی حفره با موارد زیر تغییر می‌کند:

i) دما

ii) درجه‌ی فوق اشباع جای خالی

iii) انرژی سطحی حفره

iv) حضور بین‌نشین‌ها

ج) جواب‌های بخش‌های (الف) و (ب) هنگامی که یک گاز خنثی حضور داشته باشد، چگونه تغییر می‌کند؟

۸-۲ اندازه‌ی بحرانی نطفه‌ی حفره را برای فولاد زنگ نزن (a =۰٫۳ nm، γ = ۱٫۷۵ J/m^2) پرتودهی شده در دمای ۵۰۰ ^{o}C برای تولید یک فوق اشباع جای خالی 10^{3} را تعیین کنید.

۸-۳ معادله‌ی ۸-۴۰ را استخراج کنید.

۸-۴ نرخ رشد نسبی حفره‌ی $\frac{\dot{R}}{R_o}$ برای فولاد زنگ نزن (T_m = ۱۸۲۳ K) به صورت تابعی از T/T_m را محاسبه و رسم کنید به‌طوری‌که

$$Q_f^v = 1.4\,\text{eV}$$
$$Q_m^v = 1.09\,\text{eV}$$
$$\rho_d = 10^{10}\,\text{cm}^{-2}$$
$$\Sigma_s = 0.3\,\text{cm}^{-1}$$
$$\phi = 10^{14}\,\text{n/cm}^2\,\text{s}$$
$$\nu = 100 \text{ جابه‌جایی / نوترون}$$
$$z_{iv} = 30$$
$$Z_i = 1.02$$
$$Z_v = 1.00$$
$$a^3 = \Omega = 0.011\,\text{nm}^3$$
$$kT/2\gamma = 0.01\,\text{nm}^2$$
$$\nu = 10^{13}\,\text{s}^{-1}$$

حفره‌ها را مانند چاهک‌ها ($\rho_V \simeq 0$) و رسوبات ($\rho_{cp} \sim 0$) و نیز حلقه‌ها را مانند چاهک‌ها ($\rho_L \simeq 0$) نادیده بگیرید. فرض کنید که ضریب نفوذ جاهای خالی با رابطه‌ی زیر مشخص شود:

$$D_v = \nu a_0^2 \exp(-Q_m^v/kT)$$

و غلظت تعادلی جاهای خالی نیز با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$C_v = \Omega^{-1} \exp(-Q_f^v/kT) .$$

فرض شود که قطر حفره برابر با ۵۰nm باشد.

۸-۵ معادله‌ی رشد یک حفره با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\Omega}{R}\left[D_v(C_v - C_r^V) - D_i C_i\right] .$$

توضیح دهید که اگر نرخ مقدار پرتوگیری دو برابر شود چه اتفاقی رخ می‌دهد. شدت چاهک و دما را پایین فرض کنید. توضیح دهید که اگر پرتودهی متوقف شود؛ اما نمونه در همان دمایی نگاه داشته شود که در طول پرتودهی قرار داشته است، چه اتفاقی رخ می‌دهد.

۸-۶ یک جامد در معرض یک شار نوترونی است، که در نتیجه آن حفره تشکیل شده و رشد می‌کند. در زمان t_1، شرایطی فرا می‌رسد که در آن دانسیته‌ی نابجایی 10^9 cm^{-2} است، قطر تمام حفره‌ها ۱۰۰ nm و دانسیته‌ی حفره‌ها 10^{14} cm^{-3} است و نرخ رشد حفره صفر است. در غیاب نشر حرارتی، به هرجهت، $\dot{R} = 10^{-2}$ nm/s است. فلز در یک لحظه تحت کرنش قرار می‌گیرد به گونه‌ای که دانسیته‌ی نابجایی‌ها تا ۱۰ برابر افزایش و نرخ رشد حفره در غیاب نشر حرارتی تا 8×10^{-2} nm/s افزایش می‌یابد. جهت و بزرگی تنش هیدروستاتیک مورد نیاز برای توقف رشد حفره را محاسبه کنید.

۸-۷ مشخص شده است که نیکل خالص هنگامی که در معرض شار نوترون‌های سریع قرار می‌گیرد، به شدت در برابر تشکیل حفره حساس است. همراه با حفره‌ها، حلقه‌های نابجایی کامل نیز در نیکل دیده شده‌اند. بنابراین فولاد زنگ نزن Fe-18Cr-8Ni در مقابل تشکیل حفره‌ی حساسیت کم‌تری را دارد و حلقه‌های فرانک نقص‌دار در آن دیده شده است؛ اما حفره‌ها نیز وجود دارند.

هم‌چنان که مقدار نیکل در فولاد زنگ نزن افزایش می‌یابد دو پدیده‌ی دیگر مشاهده شود. حساسیت پذیری در مقابل تشکیل حفره‌ی کاهش می‌یابد و حفره‌هایی که وجود دارند به وسیله‌ی یک پوسته‌ی غنی از نیکل احاطه می‌شوند. با اطلاعات زیر هریک از این مشاهدات را توضیح دهید.

$$\sigma/\gamma|_{\mathrm{Ni}} < \sigma/\gamma|_{\mathrm{Fe}}\,, \quad R_{\mathrm{Ni}} < R_{\mathrm{Fe}}$$

عنصر	Cr	Fe	Ni
$\sigma_{\mathrm{eff}}(n,\alpha)$	0.20	0.23	4.20

۸-۸ الف) دلیل مشخصه‌ی زنگ شتری شکل منحنی تورم برحسب دمای پرتودهی را تشریح کنید.

ب) چه‌طور و چرا شکل منحنی به وسیله

i) کار سرد قبل از پرتودهی

ii) اضافه کردن ناخالصی‌ها

iii) اندازه‌ی دانه تغییر می‌کند.

ج) توضیح دهید که چرا تورم و خزش می‌توانند یک‌دیگر را تحت تأثیر قرار دهند.

۸-۹ شما طراح غلاف‌های سوخت از جنس فولاد زنگ نزن برای رآکتور زاینده‌ی پیشرفته هستید. هدف شما به تأخیر انداختن جوانه‌زنی و حداقل کردن رشد حفره است. در خصوص ساخت پوشش‌ها شما می‌توانید موارد زیر را در مورد فولاد کنترل کنید:

الف) اندازه‌ی دانه

ب) درجه‌ی کار سرد

ج) دانسیته‌ی رسوبات

د) مقدار ناخالصی

از نقطه نظر طراحی شما می‌توانید دمای کاری معمول غلاف را کنترل کنید. با استفاده از تئوری جوانه‌زنی و رشد حفره چه‌طور می‌توان این ۵ ضریب را برای رسیدن به هدف مورد استفاده قرار داد؟

۸-۱۰ بازپخت وسیله‌ای برای حذف آسیب تابشی از یک آلیاژ است. برای فولاد زنگ نزن با حلقه‌ی نابجایی و جمعیت حفره‌ها، تشریح کنید، چه رخ می‌دهد هنگامی که فولاد در ۶۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد و برای چندین ساعت بازپخت می‌شود. در تشریح تغییرات در طول بازپخت نرخ‌های نسبی و نقاط ابتدایی و انتهایی را مشخص کنید.

۸-۱۱ در غیاب اتم‌های گازی، این امیدواری وجود دارد که حفره‌ها در مس با عملیات حرارتی در $400^{\circ}C$ از بین برود. مدت زمان مورد نیاز برای به اتمام رسیدن این عملیات برای یک شعاع حفره‌ی ابتدایی 5nm و 30nm را محاسبه کنید. انرژی سطحی مس برابر با $1/73\ J/m^2$ است.

۸-۱۲ تعداد اتم‌های گازی در یک حباب با رابطه‌ی زیر تشریح می‌شود:

$$m = (4/3\pi R^3)\rho_g$$

و دانسیته‌ی اتم گاز (ρ_g) به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$1/\rho_g = B + (kT/2\gamma)R$$

که B حد گاز متراکم است:

الف) نشان دهید که افزایش حجمی که ناشی از آمیختگی حباب‌های گازی با اندازه‌ی برابر است به صورت زیر مشخص می‌شود

$$(\Delta V/V)_{final}/(\Delta V/V)_{initial} = /2\ .$$

ب) با فرض آن‌که تعادل کلی گاز در UO_2 به صورت زیر باشد:

$$YF't = mN$$

که در این رابطه Y= گاز نجیب تولید شده در یک رخداد شکافت

F' = دانسته‌ی نرخ شکافت

m = اتم‌های گازی در حباب

N = دانسیته‌ی حباب است،

و تمام گاز در حباب‌ها باقی می‌ماند. عبارتی را برای نرخ تورم حجمی تعیین کنید و نشان دهید که وابسته به افزایش حرارت است.

ج) چگونه می‌توان موارد زیر را محاسبه کرد:

i) گاز باقی‌مانده در زمینه؟

ii) انحلال مجدد؟

مراجع

1. Cauthorne C, Fulton E (1967) Nature 216:575.
2. Jenkins ML, Kirk MA (2001) Characterization of Radiation Damage by Transmission Electron Microscopy.Institute of Physics Publishing, Philadelphia, PA.
3. Adda U (1972) In: Corbett JW, Ianiello LC (eds) Proceedings of Radiation-Induced Voids in Metals, CONF-710601, USAEC Technical Information Center, Oak Ridge, TN, 1972, p 31.
4. Olander DR (1976) Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements, TID-26711-P1. Technical Information Center,USERDA,Washington, DC.
5. Mansur LK (1994) J Nucl Mater 216:97–123.
6. Russell KC (1971) Acta Met 19:753.
7. Powell RW, Russell KC (1972) Rad Eff 12:127.
8. Katz JL, Wiedersich H (1972) In: Corbett JW, Ianiello LC (eds) Proceedings of Radiation-Induced Voids inMetals, CONF-710601, USAEC Technical Information Center, Oak Ridge, TN, 1972, p 825.
9. Russell KC (1979) Acta Met 26:1615.
10. Packan NH, Farrell K, Stregler JO (1978) J Nucl Mater 78:143.
11. Wiedersich H, Katy JL (1979) Adv Colloid Interface Sci 10:33.
12. Russell KC (1972) Acta Met 20:899.
13. Katz JL, Wiedersich H (1973) J Nucl Mater 46:41.
14. Semenov AA, Woo CH (2002) Phys Rev B 66:024118.
15. Brailsford AD, Bullough R (1972) J Nucl Mater 44:121–135.
16. Mansur LK (1978) Nucl Technol 40:5–34.
17. Brimhall JL, Kissinger HE, Kulcinski GL (1972) In: Corbett JW, Ianiello LC (eds) Proceedingsof Radiation-Induced Voids in Metals, CONF-710601, USAEC Technical InformationCenter, Oak Ridge, TN, 1972, p 338.
18. Garner FA, Porollo SI, Vorobjev AN, Konobeev YuV, Dvoriashin AM (1999) In: Ford FP, Bruemmer SM, Was GS (eds) Proceedings of the 9th International Symposium on Environmental Degradation ofMaterials in Nuclear Power Systems:Water Reactors, The Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale, PA p. 1051.
19. Garner FA (1984) Irradiation performance of cladding and structural steels in liquid metal reactors, chap 6. In: Frost BRT (ed) Materials Science and Technology, vol 10A, Nuclear Materials, part I. VCH, New York.
20. Krasnoselov VA, Prokhorov VI, Koleskikov AN, Ostrovskii ZA (1983) Atomnaya Energiya 54(2)111–114.

21. Garner FA, Bates JF, Mitchell MA (1992) J Nucl Mater 189:201–209.
22. Brager HR, Garner FA (1979) Effects of Radiation on Structural Materials the 9th InternationalSymposium, STP 683. America Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1979, pp 207–232.
23. Dupouy JM, Lehmann J, Boutard JL (1978) In: Proceedings of the Conference on Reactor Materials Science, vol. 5, Alushta, USSR. Moscow, USSR Government, pp 280–296.
24. Busboom HJ, McClelland GC, Bell WL, Appleby WK (1975) Swelling of Types 304 and 316 Stainless Steel Irradiated to 8×10^{22} n/cm^2, General Electric Company Report GEAP-14062. General Electric Co., Sunnyvale, CA.
25. Seran LJ, Dupouy JM (1982) In: Effects of Radiation on Materials the 11th International Symposium, STP 782. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1982, pp 5–16.
26. Seran LJ, Dupouy JM (1983) In: Proceedings of the Conference on Dimensional Stability and Mechanical Behavior of Irradiated Metals and Alloys, vol 1, Brighton. BritishNuclear Energy Society, London, 1983, pp 22–28.
27. Mansur LK (1993) J Nucl Mater 206:306–323.
28. Brailsford AD, Bullough R (1973) J Nucl Mater 48:87.
29. Brailsford AD, Bullough R (1972) British Rep AERE-TB-542.
30. Dubuisson P, Maillard A, Delalande C, Gilbon D, Seran JL (1992) Effects of Radiation on Materials the 15th International Symposium, STP 1125. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1992, pp 995–1014.
31. Brager HR, Garner FA, Guthrie GL (1977) J Nucl Mater 66:301–321.
32. Wolfer WG, Foster JP, Garner FA (1972) Nucl Technol 16:55.
33. Brailsford AD (1975) J Nucl Mater 56:7.
34. Wolfer WG, Mansur LK (1980) J Nucl Mater 91:265.
35. Allen TR, Cole JI, Gan J,Was GS, Dropek R, Kenik EA (2005) J NuclMater 341:90–100.
36. Singh BN, Golubov SI, Trinkaus H, Serra A, Osetsky Y, Baraskev AV (1997) J NuclMater 251:107–122.
37. Golubov SI, Singh BN, Trinkaus H (2000) J Nucl Mater 276:78–89.
38. Abromeit C (1994) J Nucl Mater 216:78–96.
39. Ghoniem NM, Walgraef DJ, Zinkle S (2002) Comput Aided Mater Des 8:1–38.
40. Woo CH, Frank W (1985) J Nucl Mater 137:7.
41. Garner FA (1984) J Nucl Mater 122–123:459–471.
42. Mansur LK, Yoo MH (1978) J Nucl Mater 74:228–241.

43. Garner FA, Kumar AS (1987) Radiation-Induced Changes in Microstructure the 13th International Symposium, STP 955 (Part 1). American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1987, pp 289–314.
44. Garner FA, Brager HR (1985) J Nucl Mater 133–134:511–514.
45. Gan J, Simonen EP, Bruemmer SM, Fournier L, Sencer BH,Was GS (2004) J NuclMater 325:94–106.
46. Brailsford AD, Mansur LK (1981) J Nucl Mater 103–104:1403–1408.
47. Garner FA, Sekimura N, Grossbeck ML, Ermi AM, Newkirk JW, Watanabe H, Kiritani M (1993) J Nucl Mater 205:206–218.
48. Mansur LK, Coghlan WA (1983) J Nucl Mater 119:1–25.
49. Stoller RE, Odette GR (1985) J Nucl Mater 131:118–125.
50. Evans JH (1978) J Nucl Mater 76–77:228–234.
51. Trinkaus H (1983) Rad Eff 78:189–211.
52. Johnson PB, Mazey DJ, Evans JH (1983) Rad Eff 78:147–156.

۹

پایداری فازی تحت پرتودهی

پرتودهی می‌تواند به واسطه‌ی تغییر پایداری فازها اثرات عمیقی را روی تشکیل یا انحلال فازها ایجاد کند. مهم‌ترین روشی که به وسیله‌ی آن پرتودهی می‌تواند پایداری فازی را تغییر دهد، غنی‌سازی یا تهی‌سازی موضعی ماده‌ی حل شده است به گونه‌ای که حد انحلال تغییر می‌یابد. پرتودهی هم‌چنین می‌تواند به وسیله‌ی انحلال معکوس[1]، فازها را حل کند که با ایجاد عیوب ضد شبکه باعث بی‌نظمی شود و منجر به جوانه‌زنی و رشد فازهای مجزا می‌شود. تحت شرایط ویژه، پرتودهی هم‌چنین می‌تواند منجر به تشکیل فازهای نیمه‌پایدار بی‌شکل شود. به علت آن‌که ساختار فازی یک آلیاژ به صورت قابل توجهی ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی ماده را تحت تأثیر قرار می‌دهد، فهم نحوه‌ی تأثیرگذاری پرتودهی روی پایداری فازی برای مواد مهندسی بسیار حایز اهمیت است.

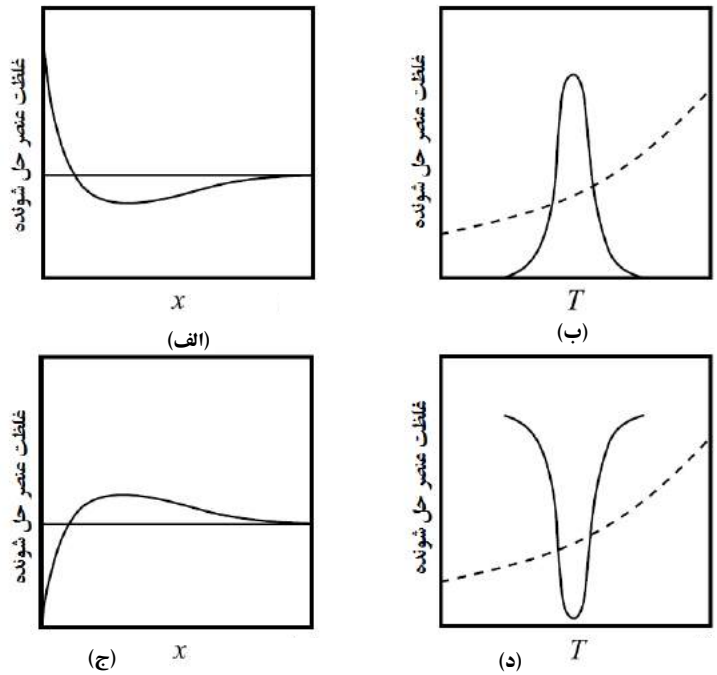
1. Recoil dissolution

۹-۱ جدایش القایی تابشی و رسوب‌گذاری القایی تابشی

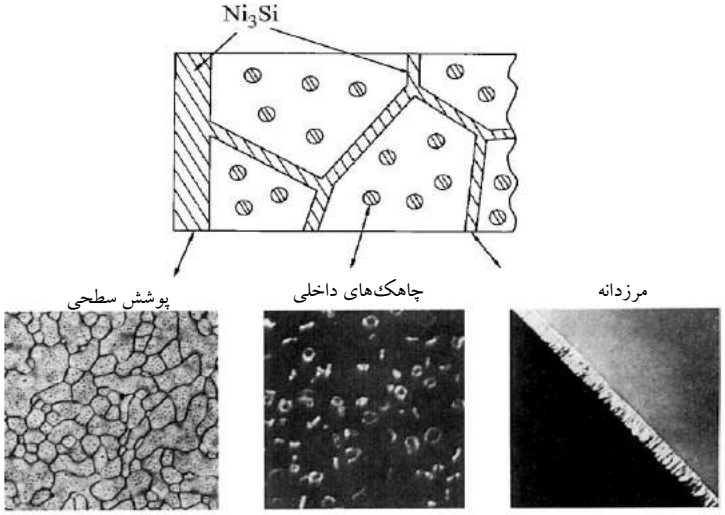
افزایش نفوذ در اثر پرتودهی یا افزایش نفوذ تابشی (RED)، که در فصل ۴ مورد توجه قرار گرفت، و جدایش القایی تابشی که در فصل ۶ توضیح داده شده، تشریح می‌کند که چه‌طور پرتودهی می‌تواند انتقال‌های اتمی اتم‌ها در آلیاژ را افزایش دهد و چگونه پیوند میان شارهای جای خالی و بین‌نشین‌ها و اتم‌های حلال و حل شونده می‌تواند منجر به غنی شدن یا تهی‌شدگی اتم‌های حل شونده در چاهک‌های عیب مانند سطوح آزاد، مرزدانه‌ها، نابجایی‌ها، فصل مشترک رسوبات، و غیره شود. غنی شدن یا تهی شدن ماده‌ی حل شده می‌تواند به صورت مستقیم منجر به تشکیل رسوبات شود اگر غلظت موضعی عناصر حل شونده‌ی ماده‌ی حل شده بیش‌تر از حد انحلال شود یا انحلال رسوب هنگامی رخ می‌دهد که مقدار ماده‌ی حل شده به کم‌تر از حد انحلال‌پذیری برسد. یادآوری می‌شود که وابستگی دمایی جدایش القایی تابشی به گونه‌ای است که در دماهای پایین، جدایش القایی تابشی به علت تحرک پایین عیوب و نرخ بازترکیبی بالای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها و محدود شدن تعداد موجود برای نابود شدن در چاهک‌ها، کم‌ترین مقدار است. در دماهای بالا، غلظت تعادلی بالای جای خالی منجر به افزایش بازترکیبی و تسریع نفوذ معکوس می‌شود و درجه‌ی جدایش القایی تابشی را محدود می‌کند. به هر جهت در دماهای میانی، رسوب‌گذاری قابل توجهی از ماده‌ی حل شده در شارهای عیوب منجر به جدایش قطعی در چاهک‌ها می‌شود. شکل ۹-۱ نشان می‌دهد که جدایش القایی تابشی می‌تواند منجر به تشکیل رسوب یا انحلال در چاهک شود. غنی شدن عنصر حل شونده در چاهک می‌تواند غلظت موضعی را (شکل ۹-۱ الف) به بالای حد انحلال (که در شکل ۹-۱ب به صورت نقطه‌چین نشان داده شده است) افزایش دهد. سپس مواد حل شده‌ی اضافی می‌توانند به جای فاز دوم رسوب‌گذاری کنند. اگر فاز ثانویه قبلاً حضور داشته باشد، سپس تهی شدن ماده‌ی حل شده (شکل ۹-۱ج) می‌تواند منجر به انحلال موضعی آن فاز شود (شکل ۹-۱د).

مثال نمونه‌وار از تشکیل و انحلال رسوب القایی تابشی در قسمت ۶-۱-۲ و شکل ۹-۲ و ۹-۳ برای مورد جدایش القایی تابشی در آلیاژهای محلول جامد Ni-Si و Ni-Al توضیح داده شده است. نتیجه‌ی یک مقدار زیاد از غنی‌سازی عنصر حل شونده در چاهک‌ها، رسوب‌گذاری یک فاز ثانویه است. در سیستم Ni-Si، سیلیسیم در قبال نیکل از لحاظ اندازه کوچک‌تر است و در طول پرتودهی در چاهک‌ها غنی می‌شود (شکل ۹-۲). جدایش القایی تابشی منجر به جدایش به سطوحی می‌شود که بالای انحلال‌پذیری سیلیسیم در نیکل است، که منجر به تشکیل رسوب Ni_3Si، γ' می‌شود. Ni_3Si در

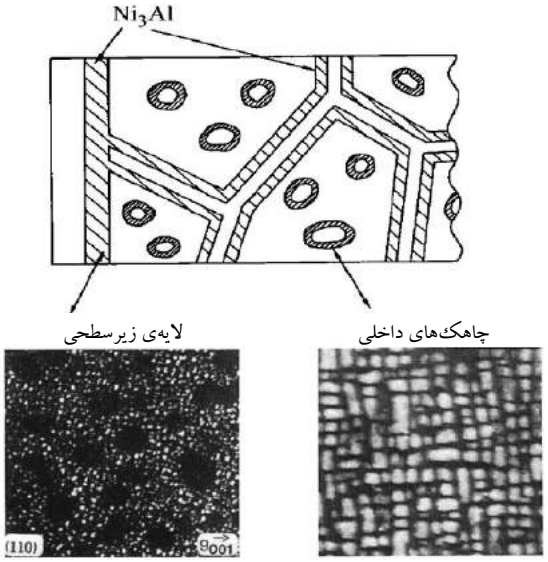
سطح، مرزدانه‌ها و حلقه‌های نابجایی رسوب‌گذاری می‌کند. از طرف دیگر در مورد Ni-Al، آلومینیوم در مقایسه با نیکل بزرگ اندازه است و تحت پرتودهی همان‌طوری که در شکل ۹-۳ نشان داده شده است، در چاهک‌ها تهی می‌شود. که نتیجه‌ی آن، انحلال رسوب‌های موجود در آن موقعیت‌ها است. از آن‌جایی که آلیاژ Ni-Al اصولاً آلیاژ همگن است و مقدار آلومینیوم کم‌تر از حد انحلال‌پذیری برای آلومینیوم است، هیچ‌گونه رسوبی قبل از پرتودهی وجود ندارد. به هرجهت همان‌طوری که در شکل ۹-۳ نشان داده شده است، منطقه‌ی پشت ناحیه‌ی تهی‌شده غنی از آلومینیوم است و این مقدار غنی‌شدگی، سطح انحلال در موقعیت‌هایی را که از فصل مشترک چاهک جابه‌جا شده‌اند، افزایش می‌دهد و منجر به رسوب‌گذاری Ni_3Al در یک لایه‌ی زیر سطحی در فاصله‌ی کمی دورتر از مرزدانه‌ها و حلقه‌های نابجایی می‌شود. هر دو این مثال‌ها نتیجه‌ای از قطع خط انحلال‌پذیری برای یک عنصر در محلول به وسیله‌ی غنی شدن عنصر حل شونده یا تهی شدن ناشی از جدایش القایی تابشی است و یک سازوکار اولیه‌ی عدم پایداری فازی تحت پرتودهی را ایجاد می‌کند.



شکل ۹-۱. نمایش شماتیک از (الف) غنی شدن یک عنصر حل شونده در چاهک و (ب) افزایش متناظر آن بالای حد انحلال و (ج) تهی‌شدگی عنصر حل شونده در چاهک و (د) کاهش متناظر آن زیر حد انحلال.



شکل ۹-۲. تشکیل γ'-Ni_3Si روی چاهک‌های عیب در آلیاژ محلول جامد از Ni-6at%Si که نشان دهنده‌ی (الف) پوشش سطحی از Ni_3Si، (ب) رسوبات چنبره‌ای γ' در حلقه‌های نابجایی و (ج) مرزدانه پوشش داده شده یا Ni_3Si [۱].



شکل ۹-۳. تشکیل γ'-Ni_3Al دور از چاهک‌های عیب در محلول جامد از Ni-12.8at%Al که نشان دهنده‌ی (الف) لایه‌ی زیرسطحی از γ'-Ni_3Al و (ب) تشکیل Ni_3Al دور از حلقه‌های نابجایی است [۱].

۹-۲ انحلال معکوس

جابه‌جایی‌های اتمی ایجاد شده در درون آبشارهای برخوردی می‌تواند باعث شود که اتم‌ها در رسوب به صورت بالستیکی به زمینه پیرامونشان رانده شوند، در نتیجه در انحلال رسوبات سهیم می‌شوند. نلسون[1]، هادسون[2] و مازی[3] [۲] مدلی را (NHM) برای انحلال معکوس رسوبات گسترش دادند که در این قسمت به صورت خلاصه آورده می‌شود. برای نرخ جابه‌جایی K_0 dpa/s در جامد، شار اتم‌ها (اتم در واحد سطح در ثانیه) از سطح رسوب، می‌تواند به صورت ζK_0 نوشته شود. برای رسوب کروی با شعاع r_p، نرخ انحلال بیان شده به صورت نرخ انقباض حجمی، به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۹-۱)

$$\frac{dV}{dt} = -4\pi r_p^2 \zeta K_0 \Omega ,$$

که Ω حجم اتمی است.

انحلال به وسیله‌ی حل معکوسِ ماده‌ی حل شده، توسط رشد رسوب به علت نفوذ اتم‌های حل شونده به رسوب متعادل می‌شود. حتی اگرچه ماده‌ی حل شده بین رسوب و زمینه، توزیع مجدد شده باشد، غلظت کلی ماده‌ی حل شده، C ثابت است و می‌تواند به صورت زیر نشان داده شود:

(۹-۲)

$$C = 4/3\pi r_p^3 \rho C_p + C_s ,$$

که ρ دانسیته‌ی رسوبات و C_p غلظت ماده‌ی حل شده در رسوبات و C_s غلظت ماده‌ی حل شده در محلول است. نرخ رشد رسوبات به علت شار ماده‌ی حل شده به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۹-۳)

$$\frac{dV}{dt} = \frac{3DC_s r_p}{C_p} ,$$

که D ضریب نفوذ ماده‌ی حل شده است.

1. Nelson
2. Hudson
3. Mazey

سپس نرخ رشد خالص رسوب برابر با جمع عبارت‌های ناشی از انحلال معکوس، معادله‌ی ۹-۱ و رشد رسوبات ناشی از نفوذ ماده‌ی حل شونده از محلول، معادله‌ی ۹-۳ است و می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۹-۴)

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = -4\pi r_{\mathrm{p}}^2 \zeta K_0 \Omega + \frac{3DC_{\mathrm{s}} r_{\mathrm{p}}}{C_{\mathrm{p}}} .$$

با جایگذاری C_{s} از معادله‌ی ۹-۲ می‌توان نوشت:

(۹-۵)

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = -4\pi r_{\mathrm{p}}^2 \zeta K_0 \Omega + \frac{3DCr_{\mathrm{p}}}{C_{\mathrm{p}}} - 4\pi r_{\mathrm{p}}^4 D\rho ,$$

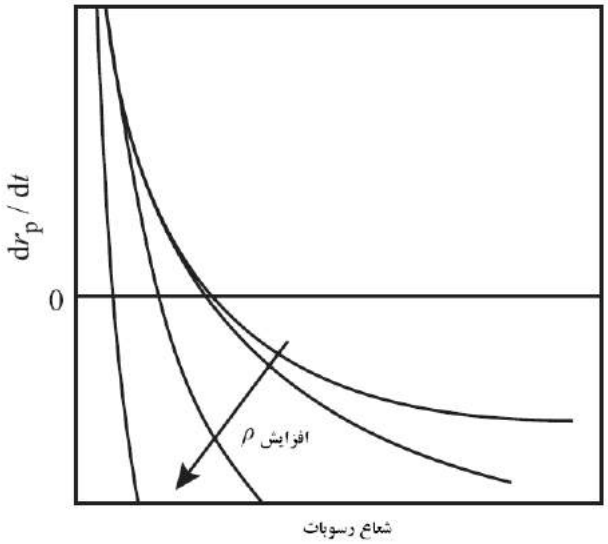
و با نوشتن معادله‌ی ۹-۵ به صورت قانون رشد شعاعی نتیجه می‌شود که:

(۹-۶)

$$\frac{\mathrm{d}r_{\mathrm{p}}}{\mathrm{d}t} = -\zeta K_0 \Omega + \frac{3DC}{4\pi r_{\mathrm{p}} C_{\mathrm{p}}} - r_{\mathrm{p}}^2 D\rho .$$

معادله‌ی ۹-۶ در شکل ۹-۴ رسم شده است و نشان می‌دهد که برای رسوبات کوچک اندازه نرخ رشد مثبت است؛ اما در اندازه‌های بزرگ‌تر که ناحیه‌ی سطحی بزرگ می‌شود، رسوبات حل خواهند شد. در اندازه‌ی مشخص شده با نرخ رشد صفر، انحلال به وسیله‌ی رسوب‌گذاری مجدد متعادل خواهد شد. لازم به ذکر است که اثر پرتودهی، نتیجه‌ای از نوع درشت شدن معکوس است که در آن ذرات کوچک‌تر از ذرات بزرگ‌تر بسیار پایدارتر هستند، که مخالف چیزی است که به وسیله‌ی قوانین اوستوالد[1] رخ می‌دهد.

1. Ostwald ripening



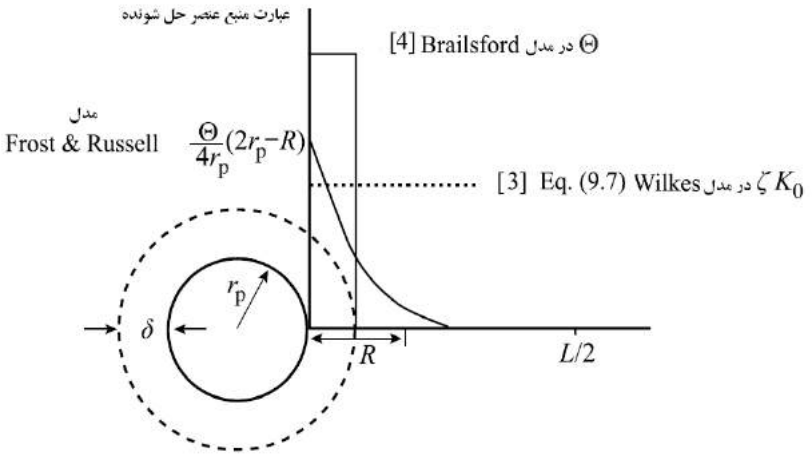
شکل ۹-۴. نرخ‌های رشد برای رسوب‌گذاری تحت انحلال القایی تابشی [۲].

سطح مقطع غلظت ماده‌ی حل شده می‌تواند با استفاده از مدل سلولی تعیین شود که در آن تمام رسوبات اندازه‌ی مشابهی دارند و هر کدام در سلول زمینه با شعاع L با $4/3\pi L^3\rho=1$ هستند. در مدل انحلال مجدد ویلکس[1] [۳]، اتم‌های ماده‌ی حل شده به صورت همگن در سراسر سلول رسوب می‌کنند و عبارت منبع[2] را در حل حالت پایدار معادله‌ی نفوذی ایجاد می‌کند. شکل ۹-۵، عبارت منبع عنصر حل شونده در زمینه‌ی پیرامون رسوب را نشان می‌دهد. معادله‌ی نفوذی برابر با $\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 C + \zeta K_0$ است، و با اعمال شرایط مرزی: $\left.\frac{\partial c}{\partial r}\right| r = L = 0$ در مرز سلول (r = L)، و غلظت ماده‌ی حل شده در سطح رسوب برابر با غلظت تعادلی $C(r_p) = C_e$، غلظت برابر است با:

(۷-۹)

$$C(r) = C_e + \frac{\zeta K_0 r_p^2}{2\Omega D(L^3 - r_p^3)} \left[\frac{2L^3(r - r_p)}{r r_p} - r^2 + r_p^2 \right] .$$

1. Wilkes
2. Source term



شکل ۹–۵. عبارت‌های منبع برای انحلال القایی تابشیِ ماده‌ی حل شده از رسوب، مطابق با مدل‌های مختلف. عبارت r_p برابر با شعاع رسوب است، L فاصله‌بندی رسوبات است، R شعاع برگشتی (انحلال معکوس) در مدل فراست ـ راسل[1] [۱۰، ۱۱] است و δ پوسته‌ی اطراف r_p در مدل بریلس فورد[2] [۴] است.

سطح مقطع غلظتیِ معادله‌ی ۹–۷ در شکل ۹–۶ الف رسم شده است و نشان می‌دهد که غلظت ماده‌ی حل شده از مرز رسوب، r_p افزایش می‌یابد و هم‌چنان که به مرز سلول L نزدیک می‌شود یکنواخت می‌شود. غلظت حالت پایدار مرز سلول، $C(L)$ می‌تواند به صورت یک غلظت اضافی نوشته شود:

(۸–۹)

$$\chi = \frac{2D\Omega}{\zeta K_0}(C(L) - C_e)$$
$$= L\frac{2(r_p/L) - 3(r_p/L)^2 + (r_p/L)^4}{1-(r_p/L)^2},$$

و در شکل ۹–۶ ب به صورت تابعی از نسبت شعاع رسوب به شعاع سلول (r_0/L) نشان داده شده است. لازم به ذکر است که برای اندازه‌ی سلول ثابت، غلظت مرز سلول در ابتدا افزایش می‌یابد زیرا فوق اشباع حالت پایدار ماده‌ی حل شده، با مساحت سطح رسوب افزایش می‌یابد. هنگامی که رسوب

1. Frost–Russell
2. Brailsford

بزرگ است، سطح رسوب نزدیک به دیواره‌ی سلول است و نفوذ معکوس قابل توجه می‌شود، در نتیجه باعث ایجاد کاهش در غلظت می‌شود. برای بسیاری از موقعیت‌های عملی، کسر حجمی رسوبات کوچک است، در نتیجه توزیع اندازه‌ی رسوب در سمت چپ نقطه‌ی بیشینه در شکل ۹-۶ ب است. در نتیجه رسوبات کوچک، اتلاف خالصی از ماده‌ی حل شده را تا زمان رسیدن حالت پایدار تجربه می‌کنند.

با فرض آن‌که ذرات بی‌نهایت از یک‌دیگر دور هستند (انحلال ـ رسوب‌گذاری مجدد در ذره به وسیله‌ی ذرات دیگر اثر نمی‌پذیرد)، و آن‌که انحلال مجدد در نرخ یکنواخت در پوسته‌ای به ضخامت δ در اطراف ذره‌ای با شعاع r_p (شکل ۹-۵) رخ دهد، بهبودی در رفتار عبارت منبع در مدل ساده‌ی NHM به‌دست می‌آید [۴]. برای اندازه‌ی رسوب اولیه‌ی r_0، اندازه‌ی نتیجه شده به صورت زیر است:

(۹-۹)

$$r_0^3 - r_p^3 = \frac{3\delta^2 r_p(3r_p + 2\delta)}{8\pi D\rho_p[(r_p+\delta)^3 - r_p^3)]}\left(-\frac{\Theta}{4\pi r_p^2}\right),$$

که Θ انحلال مجددِ القایی نرخ تغییر حجم رسوب است. اثر پرتودهی در این مدل، کاهش اندازه‌ی رسوب از ابعاد اصلی با ضریبی بیش‌تر از ۲ است [۳]. لازم به ذکر است که برای موردی که $\delta \to \infty$، نتیجه به صورت معادله‌ی ۹-۶ کاهش می‌یابد.

این نتیجه می‌تواند با رفتار درشت شوندگی حرارتی رسوبات که به وسیله‌ی واگنر[1] [۵] و لیفشیتز[2] و اسلیسو[3] [۶] توضیح داده شده است، مقایسه شود:

(۹-۱۰)

$$\bar{r}_p^3 - \bar{r}_0^3 = \frac{8DC_e\gamma V_m^2 t}{9\mathscr{R}T},$$

1.Wagner
2. Lifshitz
3. Slyosov

که r_0 شعاع میانگین اولیه‌ی رسوب، C_e انحلال‌پذیری رسوب با شعاع نامحدود، V_m حجم مولار، γ انرژی سطح مشترک رسوب ـ زمینه و $\mathcal{R}$ ثابت گازها است. با محاسبه برای انحلال مجدد القایی تابشی و افزایش نفوذ تابشی، بیشینه‌ی اندازه‌ی ذره پایدار به صورت زیر نشان داده می‌شود [۷، ۸، ۹]:

(۹-۱۱)

$$r_{max} = \left(\frac{3aD}{lfK_0}\right)^{1/2},$$

که a فاصله‌ی شبکه، l بعد خطی آبشار، f کسر اتم‌های ماده‌ی حل شده و حاصل‌ضرب lf انقباض ایجاد شده به وسیله‌ی انحلال مجدد است [۲].

هنگامی که رسوبات در آغاز از بیشینه‌ی اندازه‌ی d پایدار، بزرگ‌تر هستند، بیشینه‌ی اندازه مطابق با معادله‌ی زیر کاهش می‌یابد:

(۹-۱۲ الف)

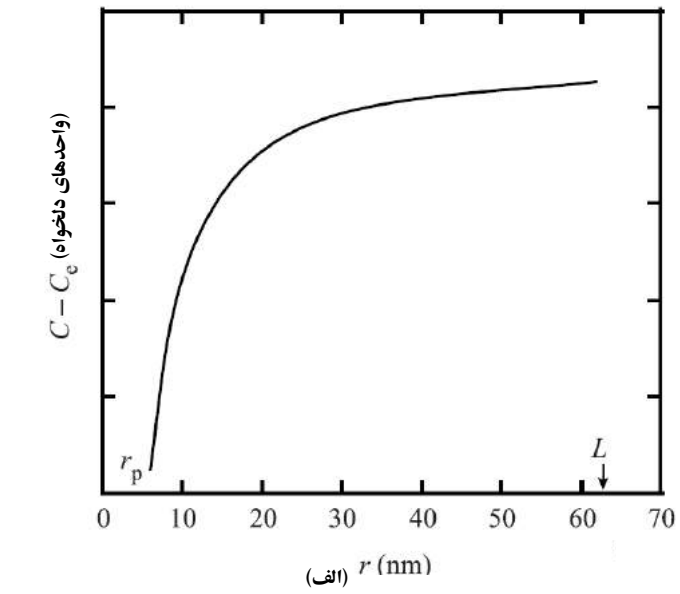
$$r_{max}(K_0t) - r_{max}(K_0t_0) = -lfK_0(t - t_0),$$

و هنگامی که اندازه‌ی رسوبات اولیه کوچک‌تر از اندازه‌ی مشخص شده با توزیع اندازه‌ی تعادلی هستند، سپس اندازه‌ی ذره مطابق با رابطه‌ی زیر افزایش می‌یابد:

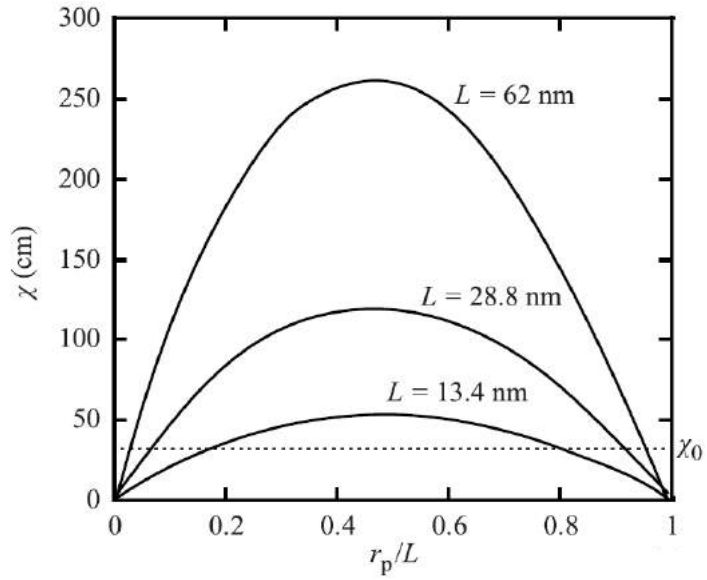
(۹-۱۲ ب)

$$r^3_{max}(K_0t) - r^3_{max}(K_0t_0) = 9aD(t - t_0).$$

لازم به ذکر است که معادله‌ی ۹-۱۲ب برای درشت شدن حرارتی مشابه به معادله‌ی ۹-۱۰ است.



(الف)



(ب)

شکل ۹-۶. (الف) غلظت حالت پایدار ماده‌ی حل شده در زمینه از معادله‌ی ۹-۷ و (ب) غلظت حالت پایدار مرز از معادله‌ی ۹-۸ [۳].

یک اصلاح در مدل سلولی ویکلز، فراهم کردن یک عبارتِ منبع برای رسوب مجدد ماده‌ی حل شده است که از داشتن رسوب‌گذاری یکنواخت در سلول (ویلکز [۳]) یا غیریکنواخت در لایه‌ی (برایسفورد [۴]) بسیار واقع گرایانه‌تر است. فراست[1] و راسل[2] [۱۰، ۱۱]، نرخ رسوب مجدد ماده‌ی حل شده در زمینه با استفاده از نرخی که در آن پس‌زنی‌ها در زمینه به وجود می‌آیند را مدل‌سازی کردند که وابسته به فاصله از مرکز رسوب، r مطابق با رابطه‌ی زیر است:

(۹-۱۳)

$$G(r) = \frac{\Theta}{4rR}\left[r_{\mathrm{p}}^2 - (r-R)^2\right] ,$$

که Θ نرخ انحلال مجدد در هر اتم و R فاصله‌ی پس‌زنی است (شکل ۹-۵). با حل معادله‌ی نفوذی با وابستگی سه بعدی عبارت منبع، $G(r)$ داریم:

(۹-۱۴)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\nabla^2 C + G ,$$

که در نتیجه:

(۹-۱۵)

$$C(r) = C_0 + \frac{\Theta}{48RD}\left[r^3 - r_{\mathrm{p}}^3 - 4R\left(r^2 - r_{\mathrm{p}}^2\right)\right.$$
$$\left. -6\left(r_{\mathrm{p}}^2 - R^2\right)(r - r_{\mathrm{p}}) - (3r_{\mathrm{p}} - R)(r_{\mathrm{p}} + R)^3\right]\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_{\mathrm{p}}}\right) ,$$

و بیشینه‌ی غلظت به صورت رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

1. Frost
2. Russell

(۹-۱۶)

$$C_{\max} = C_0 + \frac{\Theta R^2}{12D}\left(1 - \frac{R}{4r_p}\right) .$$

بیشینه‌ی غلظت ماده‌ی حل شده متناسب با نرخ انحلال مجدد است و به صورت ضعیفی وابسته به اندازه‌ی رسوب است.

نرخ درشت شوندگیِ معکوس ذراتی که هم اندازه نیستند، می‌تواند با محاسبه‌ی نفوذ نزدیک هر دانه تعیین شود [۱۰، ۱۱]. محاسبات فرض می‌کنند که غلظت در لبه‌ی سلول میانگینی از غلظت زمینه است و آن‌که هیچ‌گونه شار خالص از رسوبی با شعاع کوچک، r_m وجود ندارد که در نتیجه:

(۹-۱۷)

$$\frac{dr_p}{dt} = \left(1 - \frac{r_p}{r_m}\right)\frac{1}{r_p^2}\frac{L}{(L - r_p^2)}\frac{\Theta R^3}{48} ,$$

که راه‌حل‌های موجود برای آن وابسته به مقدار r_m است. با فرض آن‌که $r_p << L$ باشد و اندازه‌ی رسوب اولیه برابر با r_0 باشد، سپس:

(۹-۱۸)

$$\frac{r_p^3(t)}{r_0^3} = 1 + \frac{t}{\tau_A} , \quad \text{برای} \quad r_p \ll r_m \quad \text{و} \quad \tau_A = \frac{48 r_0^3}{\Theta R^3} ,$$

(۹-۱۹)

$$\frac{r_p^2(t)}{r_0^2} = 1 - \frac{t}{\tau_B} , \quad \text{برای} \quad r_p \gg r_m \quad \text{و} \quad \tau_B = \frac{24 r_m r_0^2}{\Theta R^3} ,$$

(۹-۲۰)

$$r_p - r_m = (r_0 - r_m)\exp(-t/\tau_C) , \quad \text{برای} \quad r \cong r_m \quad \text{و} \quad \tau_C = \frac{48 r_m^3}{\Theta R^3} .$$

لازم به ذکر است که رابطه‌ی میان اندازه‌ی ذره و زمان هنگامی که اندازه کم‌تر از r_m باشد، برابر با $r_p^3 \alpha t$ است و هنگامی که اندازه بزرگ‌تر از r_m باشد، $r_p^2 \alpha t$ است. برای همه‌ی موارد، هنگامی که

R، r_0 و r_m در حدود ۱۰nm باشند، t بین $10/\Theta$ و $100/\Theta$ است. برای شرایط رآکتور سریع، $\Theta \sim 10^{-7}$ dpa/s، در نتیجه $10^8 \text{ s} \leq t \leq 10^9 \text{ s}$ است که معادل ۳ تا ۳۰ سال است. از آن‌جایی که زمان نهفتگی با r^3 تغییر می‌کند، رسوبات بزرگ‌تر حتی زمان طولانی‌تری را برای رخداد رشد معکوس لازم دارند. در نتیجه، درشت شوندگی معکوس القایی تابشی به وسیله‌ی انحلال مجدد معکوس، فقط بعد از زمان‌های طولانیِ در معرض پرتودهی بودن مورد انتظار است.

اثر پرتودهی روی پایداری رسوب به صورت شماتیک در شکل ۹–۷ به صورت یکسری از مشاهدات با افزایش مقدار پرتوگیری نشان داده شده است. قبل از پرتودهی، رسوب در تعادل با غلظت ماده‌ی حل شده‌ی زمینه، C_e است (شکل ۹–۷ الف). پرتودهی باعث انحلال سطح رسوب و افزایش در مقدار ماده‌ی حل شده نزدیک فصل مشترکی که نفوذ از آن آغاز شده، می‌شود (شکل ۹–۷ ب). انحلال مجدد به وسیله‌ی رسوب‌گذاری مجدد متعادل می‌شود و سطح مقطع غلظت حالت پایداری را نتیجه می‌دهد (شکل ۹–۷ ج). فوق اشباع موضعیِ ماده‌ی حل شده ممکن است که منجر به جوانه‌زنی رسوبات جدید در زمینه شود (شکل ۹–۷ د) یا اگر رسوبات به صورت گسترده‌ای منتشر شده باشند، این امکان وجود ندارد که ماده‌ی حل شده‌ی زمینه به مقداری برسد که حالت پایدار نتیجه شود و رسوبات به انحلال ادامه می‌دهند (شکل ۹–۷ ه).

تعیین پایداری فاز تحت پرتودهی تحت تأثیر عوامل چندگانه‌ای مانند نرخ جابه‌جایی، دما، و شدت چاهک، بسیار پیچیده است. تخمین برای پایداری رسوب، می‌تواند با توجه به دو فرایند مخالف، یعنی اختلاط بالستیکی و افزایش نفوذ درونی تابشی محاسبه شود. این مسئله به وسیله‌ی آبرومیت[1] [۱۳] تحلیل شده است و این تحلیل در این قسمت توضیح داده خواهد شد. فرض شده است که رسوبات به وسیله‌ی اختلاط بالستیکی در نرخ تقریبی که به صورت زیر است، حل می‌شوند:

(۹–۲۱)

$$R_m = \beta \sigma_D \phi \,,$$

که حاصل‌ضرب سطح مقطع جابه‌جایی، σ_D و شار ϕ برابر با نرخ جابه‌جایی برحسب dpa/s است و β ضریبی است که نرخ جابه‌جایی را به اتلاف ماده‌ی حل شده از رسوب مرتبط می‌کند. به صورت

1. Abromeit

مشابه، نرخ تشکیل یا رشد رسوب ناشی از افزایش نفوذ ناشی از پرتودهی به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$R_g = \alpha \tilde{D} , \qquad (۲۲-۹)$$

که α ثابت است و $\tilde{D}$ ضریب نفوذ درونی است. حد انحلال با برابر قرار دادن دو معادله به‌دست می‌آید:

$$\alpha \tilde{D} = \beta \sigma_D \phi . \qquad (۲۳-۹)$$

معادلات تعادلی حالت پایدار عیوب نقطه‌ای همان‌طوری که در فصل ۵ نوشته شده، برابر است با:

$$\begin{aligned} K_0 - K_{iv} C_i C_v - D_v k_s^2 C_v = 0 \\ K_0 - K_{iv} C_i C_v - D_i k_s^2 C_i = 0 , \end{aligned} \qquad (۲۴-۹)$$

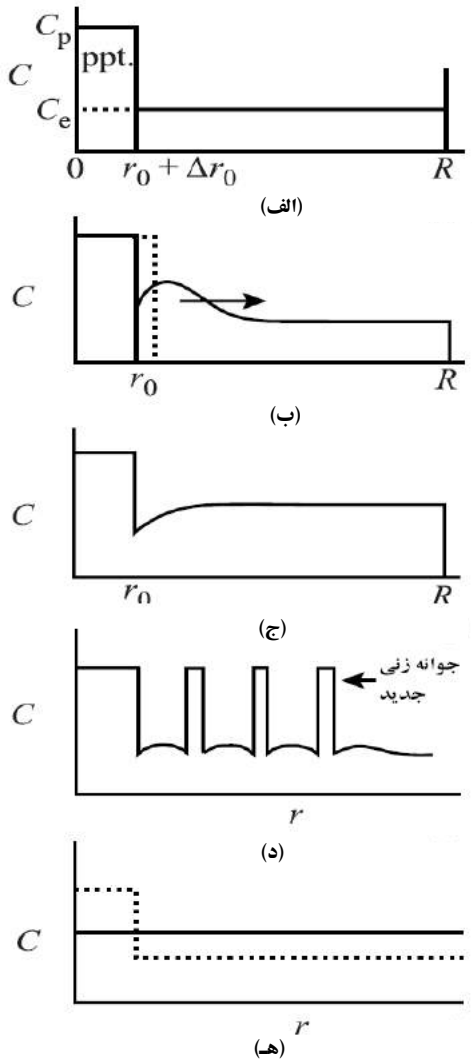
و متغیرها همان‌طوری که در فصل ۵ تشریح شده هستند، که $K_{iv} = 4\pi r_v D_i / \Omega$ و $K_s^2 = 4\pi r_s C_s / \Omega$ شدت چاهک‌ها هستند. قابل ذکر است که در این تحلیل هیچ‌گونه تمایزی در شدت چاهک برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها وجود ندارد.

هنگامی که بازترکیبی بر اتلاف عیب غالب است:

$$\tilde{D} = A K_0^{1/2} D_v^{1/2} (\Omega / 4\pi r_v)^{1/2} , \qquad (۲۵-۹)$$

و هنگامی که نابودسازی عیوب در چاهک‌ها غالب است، $\tilde{D}$ مستقل از دما است و می‌تواند به صورت زیر تشریح شود:

$$\tilde{D} = A K_0 / k_s^2 \qquad (۲۶-۹)$$



شکل ۹-۷. نمایش شماتیک از انحلال و رسوب‌گذاری رسوب ناشی از پرتودهی به صورت تابعی از مقدار پرتوگیری. (الف) حالت پرتودهی نشده، (ب) انحلال سطحی در مقادیر پرتوگیری پایین، (ج) حالت پایدار و هم‌چنین (د) جوانه‌زنی رسوبات جدید به علت فوق اشباع موضع ماده‌ی حل شده در زمینه یا (هـ) انحلال پیوسته رسوب به علت دانسیته‌ی پایین رسوب [۱۲].

و A ثابت توضیح دهنده‌ی راندمان انتقال اتم‌ها از طریق جاهای خالی و بین‌نشین‌ها است. با حذف $\tilde{D}$ از معادله‌های ۹-۲۵ و ۹-۲۶ مرز میان مناطقی با غلبه‌ی بازترکیبی و مناطقی با غلبه‌ی نابودسازی در چاهک تعریف می‌شود، و می‌توان نوشت:

(۹-۲۷)

$$K_0 = k_s^4 D_v (\Omega / 4\pi r_v) .$$

معادله‌ی ۹-۲۷ به وسیله‌ی صفحه‌ی P_1 در شکل ۹-۸ نشان داده شده است که انحلال‌پذیری را به صورت تابعی از نرخ آسیب، دما و شدت چاهک ترسیم کرده است. با در نظر گرفتن $\sigma_d \phi = K_0 / N$ سهم نابودسازی عیب در چاهک‌ها در برابر حد انحلال‌پذیری با حذف $\tilde{D}$ بین معادله‌های ۹-۲۱ و ۹-۲۶ تعیین می‌شود و شدت چاهک بحرانی را نتیجه می‌دهد:

(۹-۲۸)

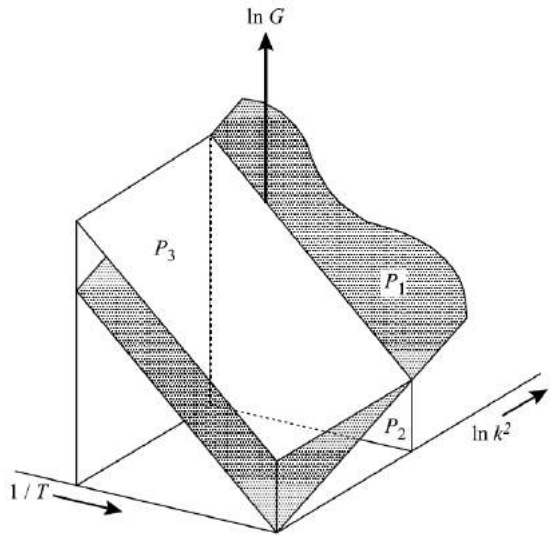
$$k_c^2 = A \alpha N / \beta .$$

معادله‌ی ۹-۲۸ به صورت صفحه‌ی P_2 در شکل ۹-۸ نشان داده شده است. در نهایت، مطابق با معادله‌های ۹-۲۳ و ۹-۲۵، مرز وابسته به دما، منطقه‌ی دو فازی را از منطقه‌ی یک فازی جدا می‌کند و در نتیجه:

(۹-۲۹)

$$K_0 = (A \alpha N / \beta)^2 D_v \Omega / 4\pi r_v ,$$

و به صورت صفحه‌ی P_3 در شکل ۹-۸ نشان داده شده است. رسوبات در زیر P_3 و در سمت چپ P_2 پایدار هستند. منطقه‌ی نشان دهنده‌ی پایداری ساختار دو فازی، از نظر اندازه با افزایش دما و به علت افزایش نفوذپذیری و با افزایش مقادیر شدت بحرانی چاهک، k_c^2، افزایش می‌یابد.



شکل ۹–۸ نمودار پایداری برای رسوبات تحت پرتودهی در فضای نرخ جابه‌جایی ـ دما ـ شدت چاهک. صفحه‌ی P_1 مناطق بازترکیبی و نابودسازی را مجزا می‌کند و رسوبات در زیر صفحه‌ی P_3 و در سمت چپ صفحه‌ی P_2 پایدار هستند [۱۳].

عبارت β در معادله‌ی ۹–۲۱ به صورت $\beta = \beta_1 V_c/\Omega$ تخمین زده می‌شود که β_1 یک ثابت است و V_c حجم آبشار برخوردی است و بنابراین متناسب با مکعب شعاع آبشار r_c است [۱۳]. رسوب‌گذاری مجدد عناصر حل شده در زمینه به وسیله‌ی آبشار با نفوذ درونی با نرخ ثابت کنترل می‌شود که به وسیله‌ی قانون فیک به صورت $\alpha = 4\alpha_1 / r_c^2$ تعیین می‌شود. که در این رابطه α_1 ثابت است. با وارد کردن این عبارات برای α و β در معادله‌های ۹–۲۸ و ۹–۲۹ می‌توان نوشت:

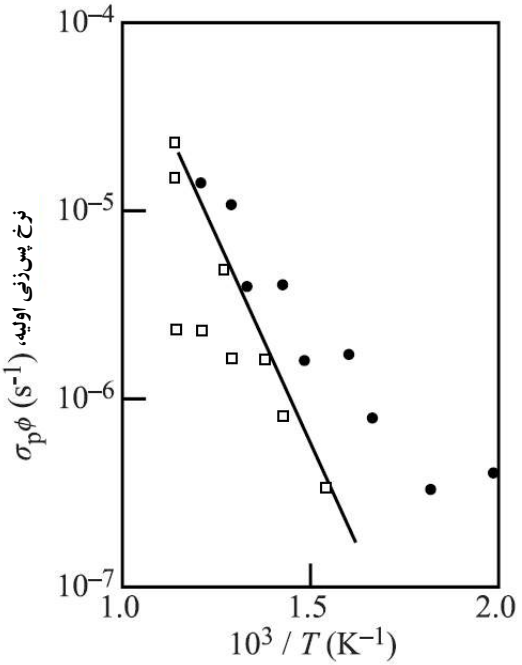
(۹–۳۰)

$$k_c^2 = \frac{3\pi A \alpha_1 \Omega N}{\beta_1} \frac{1}{r_c^5},$$

(۹–۳۱)

$$K_0 = \left(\frac{A\alpha_1 N}{\beta_1}\right)^2 \frac{3D_v\Omega^3}{4\pi^3 r_v} \frac{1}{r_c^{10}}.$$

لازم به ذکر است که هم شدت بحرانی چاهک و هم رابطه‌ی نرخ تولید/ دما یک وابستگی شدیدی را به اندازه‌ی آبشار نشان می‌دهند. این مدل به موردی مثل یک آلیاژ $Cu-48\%Ni-8\%Fe$ پرتودهی شده با یون‌های $300\ keV\ Cu^{+}$ در سراسر یک گستره‌ی دمایی و نرخ‌های جابه‌جایی اعمال شده است. شکل ۹-۹ نرخ پس‌زنی اولیه برحسب $1/T$ را نشان می‌دهد که علایم توخالی نشان دهنده‌ی انحلال ساختار دو فازی در اثر پرتودهی هستند. قابل ذکر است که یک نرخ بحرانی جابه‌جایی برای انحلال القایی تابشی وجود دارد که با دما افزایش می‌یابد. خط موجود در نمودار بهینه‌سازی مناسب از معادله‌ی ۹-۳۱ براساس اطلاعات است که از آن شعاع آبشار در حدود ۲٫۷nm تعیین شده است.



شکل ۹-۹. پایداری ساختار دو فازی آلیاژ $Cu-48\%Ni-8\%Fe$ پرتودهی شده با یون‌های $300\ keV\ Cu^{++}$.
علامت‌های توپر بی‌نظمی‌های القایی تابشیِ ساختار دو فازی و علامت‌های توخالی عدم اثر پرتودهی را نشان می‌دهند. خط موجود در نمودار بهترین بهینه‌سازی از معادله‌ی ۹-۳۱ را مشخص می‌کند [۱۳].

به صورت خلاصه، انحلال القایی تابشی یک فرایند کلیدی مؤثر بر پایداری رسوبات است. نتایج اثرات پرتودهی در انحلال مجدد رسوبات سطح بیرونی‌تر و تکامل تدریجی ریزساختار فاز، به وسیله‌ی

نسبت‌های انحلال مجدد و رسوب‌گذاری مجدد تعیین می‌شود. در کل پایداری فازی با بی‌نظمی‌های القایی تابشی تأثیر می پذیرد که در فصل بعد توضیح داده می‌شود.

۹-۳ بی‌نظمیِ تابشی

مدل NHM که در قسمت قبل توضیح داده شد در اصل برای انحلال معکوس و انحلال نامنظم[1] گسترش یافته بود. بی‌نظمی از دست دادن نظم بلند دامنه در اثر پرتودهی است. در مورد بی‌نظمی، فرض شده است که جابه‌جایی در پوسته‌ای به ضخامت l در سطح رسوب رخ می‌دهد و منجر به اتلاف اتم‌های ماده‌ی حل شده به وسیله‌ی نفوذ به زمینه شود. هم‌چنین فرض شده است که فقط کسر، f از این اتم‌های حل شده، واقعاً حل می‌شوند. با تعریف $\xi = lf$ به جای عامل انحلال، سپس نرخ انحلال مشخص شده در معادله‌ی ۹-۱ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۹-۳۲)

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = -4\pi r_{\mathrm{p}}^2 \xi K_0 \,,$$

و نرخ تغییر اندازه‌ی رسوب به علت انحلال نامنظم برابر است با:

(۹-۳۳)

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = -\xi K_0 + \frac{3DC}{4\pi r_{\mathrm{p}} C_{\mathrm{p}}} - r_{\mathrm{p}}^2 D\rho \,,$$

که بجز عبارت اول مشابه با معادله‌ی ۹-۶ است. راسل [۱۴] نشان داد که زمانی که $l \sim ۱۰$ nm، سپس برای $f \sim ۱$، $\xi = lf \sim ۱۰$ nm است. مقایسه‌ی این مقدار با عبارت متناظر در معادله‌ی ۹-۶ برای انحلال معکوس، که $\zeta\Omega \sim ۱۰^{-۴}$ nm است، نشان می‌دهد که نرخ انحلال نامنظم از انحلال معکوس بسیار بیش‌تر است. در نتیجه انتظار می‌رود که انحلال نامنظم فرایند بسیار مهمی باشد. مراجعه به شکل

1. Disordering Dissolution

۹-۴ نشان می‌دهد که اندازه‌ی رسوب پایدار برای انحلال نامنظم به علت راندمان بالاترش کوچک‌تر خواهد بود.

مشخص شده است که پرتودهی از طریق ایجاد جاهای خالی و بین‌نشین‌ها و عیوب ضد موقعیت آلیاژها را بی‌نظم می‌کند که در این فرایند استقرار مجدد اتم‌ها در موقعیت‌های مکمل نظم در آلیاژ را از بین می‌برد؛ اما به محض آن‌که نفوذ بتواند رخ دهد آلیاژ بی‌نظم شده به حالت تعادلی بر می‌گردد.

در حقیقت غلظت بالای جاهای خالی و بین‌نشین‌های تولید شده به وسیله‌ی پرتودهی می‌توانند فرایند منظم شدن را به وسیله‌ی افزایش نفوذ القایی تابشی افزایش دهد. بنابراین، پرتودهی باعث وقوع دو فرایند مخالف یک‌دیگر می‌شود: بی‌نظمی و نظم مجدد. لیو[1] و ویلکز [۱۵] نرخ تغییر نظم در آلیاژ به علت پرتودهی را از تعریف نظم بلند دامنه‌ی براگ ـ ویلیامز[2] برای آلیاژ دوتایی با اتم‌های آرایش یافته در دو زیر شبکه‌ی α و β را تشریح کردند که عامل نظم بلند دامنه به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۹-۳۴)

$$S = \frac{(f_{A\alpha} - X_{\mathrm{A}})}{(1 - X_{\mathrm{A}})} ,$$

که $f_{A\alpha}$ احتمال بودن اتم A روی موقعیت شبکه‌ی α است و X_{A} کسر اتمی اتم‌های A است.

هنگامی که $S = ۱$، آلیاژ کاملاً منظم است و هنگامی که $S = ۰$ آلیاژ کاملاً بی‌نظم است.

تحت پرتودهی، نرخ منظم شدن می‌تواند به صورت رقابت بین بی‌نظمی القایی تابشی و آرایش مجدد حرارتی نوشته شود:

(۹-۳۵)

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{irr}} + \left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{th}} .$$

نرخ بی‌نظمی ناشی از پرتودهی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

1. Liou
2. Bragg–Williams

(۹-۳۶)

$$\left(\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t}\right)_{\mathrm{irr}} = -\varepsilon K_0 S\,,$$

که ε راندمان بی‌نظمی یا نسبت جایگزینی‌ها به جابه‌جایی‌ها است و تحت پرتودهی نوترونی در حدود ۱۰ – ۱۰۰ است.

استحاله‌ی حرارتی نظم ـ بی‌نظمی می‌تواند به جای یک واکنش شیمیایی در نظر گرفته شود که در آن اتم‌های A و B روی موقعیت‌های نادرست شبکه مبادله می‌شوند. در نتیجه جفت A–B روی موقعیت‌های صحیح هستند:

(۹-۳۷)

$$(A-B)_{\text{ناصحیح}} \underset{K_{\mathrm{w}}}{\overset{K_{\mathrm{c}}}{\rightleftharpoons}} (A-B)_{\text{صحیح}}\,,$$

که ثابت‌های سرعتی، K_{c} و K_{w} به صورت زیر مشخص می‌شوند:

(۹-۳۸ الف)

$$K_{\mathrm{c}} = \nu_{\mathrm{c}} \exp(-U/kT)\,,$$

و

(۹-۳۸ ب)

$$K_{\mathrm{w}} = \nu_{\mathrm{w}} \exp[(-U+V_{\mathrm{T}})/kT]\,,$$

که U سد انرژی برای واکنش و انرژی فعال‌سازی است، V_{T} کاهش انرژی هنگام استحاله‌ی جفت ناصحیح A–B به جفت صحیح A–B است و $\nu_{\mathrm{c,w}}$ به ترتیب ضریب‌های بسامد برای جفت‌های *صحیح* و *ناصحیح* هستند. راه‌حل معادلات نرخ شیمیایی رابطه‌ی زیر را برای عامل نظم برحسب عامل تعادلی نظم، S_{e} و زمان t ارایه می‌دهد:

$$\frac{(1-S)}{(1-S_e)} = \coth(k_o t + y)\,, \qquad (۳۹-۹)$$

که y ثابت است و k_0 ثابت سرعتیِ تعریف شده به صورت زیر است:

(۴۰-۹)

$$k_o = \left[\nu_v C_v \exp(-E^v_{m0}/kT)(Z_\alpha + Z_\beta - 2) + \nu_i \sigma C_i \exp(-E^i_{m0}/kT)\right](X_A/X_B)^{1/2} \times Z_\beta \exp(-V_0/2kT)\,,$$

که $3\nu_i = (\nu_c\nu_w)^{1/2}_i$ و $2\nu_V = (\nu_c\nu_w)^{1/2}_V$ به ترتیب ضریب‌های بسامد برای تبادل جاهای خالی و بین‌نشین‌ها هستند و E^V_{m0} و E^i_{m0} انرژی‌های مهاجرت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها برای حالت منظم هستند، Z_α تعداد موقعیت‌های α است که نزدیک‌ترین همسایه‌ها به موقعیت β هستند و Z_β به صورت معکوس تعداد موقعیت‌های β است که نزدیک‌ترین همسایه‌ها به موقعیت α هستند که α و β اشاره به دو زیر شبکه دارد، σ عامل محاسبه‌ی تعداد مسیرهای واکنش و احتمالات آن‌ها است و X_A و X_B کسرهای اتمی اتم‌های A و B هستند. V_0 انرژی فعال‌سازی برای منظم شدن، $V_0 = AV$، است که A تابع ساختار بلوری است ($A = ۶$ برای fcc و $A = ۱۴$ برای bcc) و $V = V_{AB} - (V_{AA}+V_{BB})/2$ است که عبارت‌های V_{XY} انرژی‌های جفت اتم‌های مرتبط است. مشتق زمانی عامل نظم حرارتی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود [۱۵]:

(۴۱-۹)

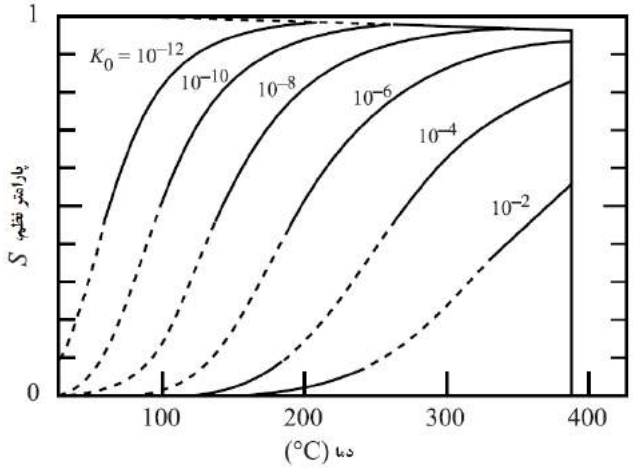
$$\left(\frac{dS}{dt}\right)_{th} = \frac{k_o(1-S)^2}{(1-S_e)} - (1-S_e)k_o\,.$$

راه‌حل حالت پایدار معادله‌ی ۹-۳۵ با عبارت‌های موجود در معادله‌های ۹-۳۶ و ۹-۴۱ برابر است با:

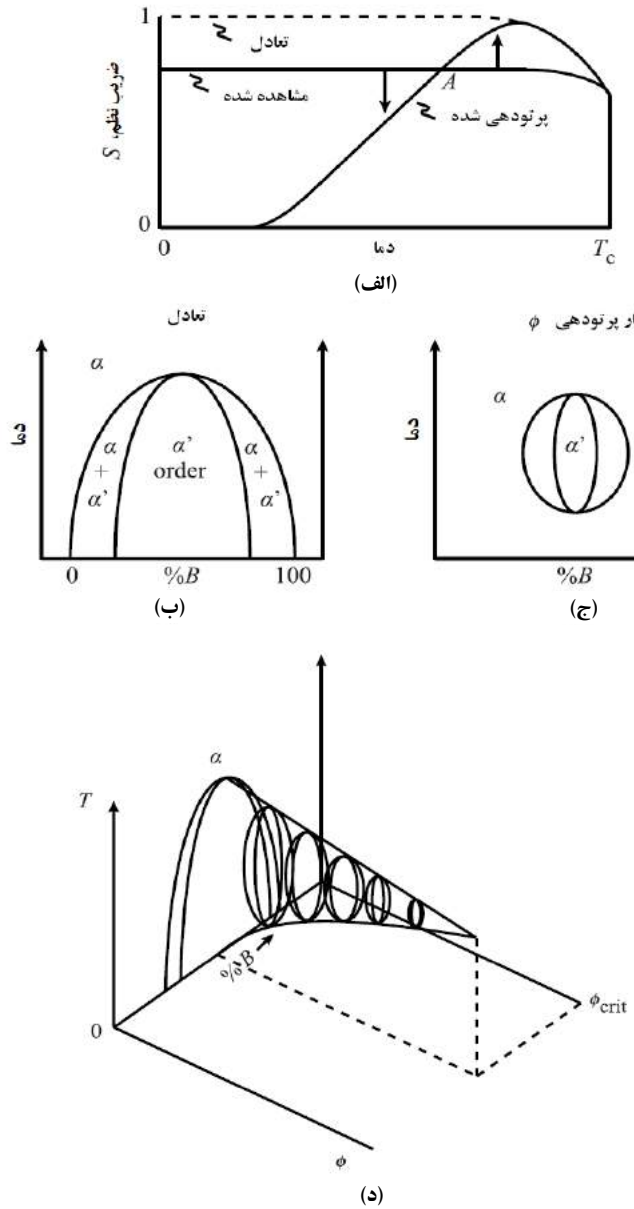
(۴۲-۹)

$$S = 1 + \varepsilon K_0 - \frac{(1-S_e)}{2k_o}\left(\varepsilon^2 K_0^2 + 4k_o^2 + \frac{4k_o\varepsilon K_0}{(1-S_e)}\right)^{1/2}\,.$$

لیو و ویلکز این فرمول‌بندی را به سیستم $AuCu_3$ به صورت تابعی از دما و نرخ پرتوگیری اعمال کردند. شکل ۹-۱۰ نشان می‌دهد که در هر دمای مشخص، اثر افزایش نرخ پرتوگیری همان‌طوری که انتظار می‌رود، کاهش در نظم است. هم‌چنین برای نرخ پرتوگیری مشخص، افزایشِ دما منجر به افزایش نظم می‌شود. راه دیگر نشان دادن اثرات رقابتیِ پرتودهی و دما روی آلیاژ منظم، در شکل ۹-۱۱ الف نشان داده شده است. در این شکل مقدار تعادلی S_e برابر با ۱/۰ است؛ اما آلیاژ در حالتی است که نظم، $S_{\text{مشاهده شده}}$، کم‌تر از S_e است. در دماهای پایین که حرکت عیب محدود است اثر پرتودهی بی‌نظم کردن آلیاژ است. در دماهای بالا، اثر پرتودهی افزایش تحرک عیوب است در نتیجه عامل نظم تعادل را نزدیک می‌کند که در بالای حالت تعادل اصلی قرار می‌گیرد. یعنی پرتودهی در دماهای بالا به منظم شدن کمک می‌کند. این رفتار با مثال نشان داده شده در شکل ۹-۱۱ب تشریح شده است که استحاله‌ی منظم شدن مرتبه‌ی اولِ آلیاژ محلول جامد از فاز نامنظم α به فاز منظم شده α' است. تحت پرتودهی فاز منظم شده در دماهای پایین با برگشت به فاز α همان‌طوری که در شکل ۹-۱۱ ج نشان داده شده است، نامنظم می‌شود. از آن‌جایی که درجه‌ی بی‌نظمی وابسته به نرخ پرتوگیری است، شکل میدان‌های فازی نشان داده شده در شکل ۹-۱۱ ج در نرخ پرتوگیری بالاتر تغییر خواهد کرد. وابستگیِ میدان‌های فازی به نرخ پرتوگیری به صورت شماتیکی در شکل ۹-۱۱ د نشان داده شده است که در آن، ناحیه‌ی منظم شده با افزایش نرخ پرتوگیری پیوسته منقبض می‌شود.

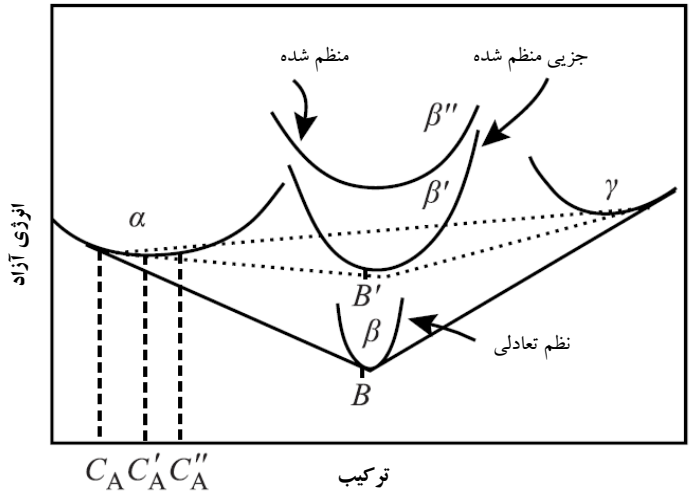


شکل ۹-۱۰. ضریب نظم بلند دامنه‌ی حالت پایدار برای Cu_3Au تحت پرتودهی برای نرخ‌های پرتوگیری متفاوت[۱۵].



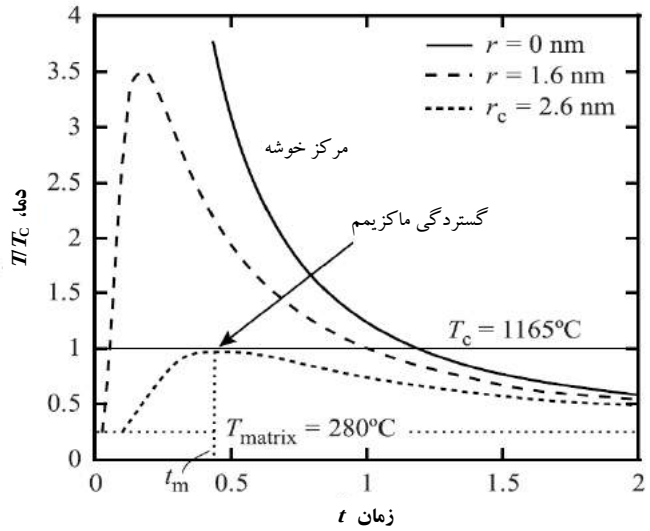
شکل ۹-۱۱. (الف) اثر پرتودهی روی وابستگی دمایی ضریب نظم برای ساختار فازی که در نظم تعادلی، S_e نیست. (ب) نمودار تعادلی فاز نشان دهنده‌ی استحاله‌ی فازی مرتبه اول از فاز نامنظم α به فاز منظم شده α'. (ج) تغییر نمودار فازی به وسیله‌ی پرتودهی که نشان دهنده‌ی تغییر در نظم همان‌طوری که در (الف) مشخص شده است. (د) وابستگی نمودار فازی تغییر یافته با تابش با مقدار پرتوگیری[۳].

تغییر در نمودار فازی ایجاد شده به وسیله‌ی بی‌نظمیِ القایی تابشی، استحاله‌ی فازی تغییریافته‌ی تابشی را به وجود می‌آورد زیرا بی‌نظمی می‌تواند ساختار فازی آلیاژ را تغییر دهد. یادآوری می‌شود که حالت منظم، آرایشی از اتم‌ها است که کم‌ترین انرژی سطحی جامد را دارند. بنابراین، بی‌نظمی القا شده در اثر تابش انرژی سطحی جامد را به بالای مقدار تعادلی افزایش می‌دهد. از این‌رو تحت پرتودهی تعادل جدیدی از انرژی سطحی بین فازهای مجاور در آلیاژ به وجود می‌آید. شکل ۹-۱۲ نشان می‌دهد که چه‌طور ترکیب فازهای α و γ، که به وسیله‌ی تانژانت مشترک منحنی‌های انرژی آزاد تعیین شده، هنگامی که پرتودهی افزایشی را در انرژی آزاد فاز بین فلزی β القا می‌کند منجر به یک فاز به صورت جزیی بی‌نظم شده β' می‌شود. شایان ذکر است که درحالی‌که فاز منظم β در حال تعادل با فاز α در غلظت C_{A} است، بی‌نظمی‌های جزیی ناشی از پرتودهی انرژی آزاد فاز β را به β' افزایش می‌دهد و غلظت A در تعادل با فازهای α و β' در چنین حالتی C'_Aاست. پرتودهی بیش‌تر می‌تواند منجر به بی‌نظمی کامل، فاز β''، شود به گونه‌ای که این فاز نتواند شکل بگیرد. به طور کلی انرژی‌های استحاله‌ی نظم ـ بی‌نظمی در محدوده‌ی ۰٫۱ تا ۰٫۶ eV/atom است [۱۶].



شکل ۹-۱۲. نمایش شماتیک از نمودار فازی برای آلیاژ با ترکیب بین فلزی منظم شده، β که نشان دهنده‌ی بی‌نظمی جزیی به β' و بی‌نظمی کامل به β'' به علت افزایش در انرژی آزاد ایجاد شده به وسیله‌ی پرتودهی است [۱۴].

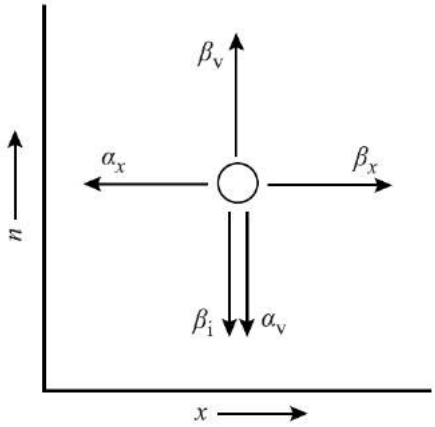
اثر پرتودهی روی منظم شدن می‌تواند با کمک مدل خوشه حرارتی آبشار، که در قسمت‌های ۳-۳ و ۴-۲-۱۰ بحث شد، بررسی شود. یادآوری می‌شود که دانسیته‌ی انرژی در هسته‌ی آبشار می‌تواند به مقادیری برسد که مشابه نواحی یک ساختار مایع مانند باشد. وولنبرگر[1] [۱۲] وابستگی زمانیِ دما در آبشار را به صورت تابعی از فاصله از مرکز خوشه تعیین کرد، که دما با دمای بی‌نظم شدن (T_c) بهنجار شده است و نتیجه برای نیکل در شکل ۹-۱۳ نشان داده شده است. در این شکل، r_c مقدار شعاع آبشار است که در آن دما در هر لحظه در طول خوشه حرارتی به دمای بی‌نظم شدن می‌رسد که در این مورد ۲٫۶ nm است. هم‌چنین دمای ناحیه درون این شعاع، می‌تواند فراتر از T_c فرض شود که در نتیجه منجر به بی‌نظمی مرکز آبشار می‌شود. از قرار معلوم در نواحی خارج از آبشار که دما کم‌تر از T_c است؛ دانسیته‌ی جای خالی بالا است و منظم شدن مجدد رخ می‌دهد. در حقیقت، هنگامی که لایه‌ی دوباره منظم شده‌ی آبشار جدید با منطقه‌ی نامنظم از آبشار قدیمی تداخل می‌کند، بی‌نظمی باقی مانده کاهش پیدا خواهد کرد که باعث کاهش در راندمان بی‌نظمی در هر آبشار با افزایش شار می‌شود. نتیجه‌ی این فرایند تداخل این است که ضریب نظم بلند دامنه به صورت کامل حتی در جریان‌های بالا ناپدید نخواهد شد.



شکل ۹-۱۳. وابستگی زمانیِ دمایِ خوشه‌ی حرارتی برای موقعیت‌های شعاعی متفاوت در درون خوشه[۱۲].

1. Wollenberger

در دماهای پایین که جاهای خالی غیرمتحرک هستند، بی‌نظمی‌های القایی تابشی در بعضی از سیستم‌ها بسیار سریع رخ می‌دهد. برای مثال، فاز γ' ($L1_2$)، $NiAl_3$، تحت پرتودهی به شدت ناپایدار است [۱۷]، که با پرتودهی با ۵۰۰ keV Kr در دمای اتاق تا مقدار پرتوگیری ۲×۱۰^{۱۴} i/cm^2 نامنظم می‌شود [۱۸]. به عبارت دیگر، Fe_3Al (bcc) و FeAl (bcc-B2) فقط بعد از ۴۰dpa از پرتودهی با یون‌های Ni^+ ۲٫۵ MeV فقط بی‌نظمی‌های جزیی را متحمل می‌شوند [۱۹]. از این‌رو، در کنار مقدار پرتوگیری، عوامل دیگری نیز در استحاله‌های نظم ـ بی‌نظمی در آلیاژها نقش دارند.



شکل ۹-۱۴. خط سیر رسوب در فضای فازی (n,x)[۲۰].

۹-۴ جوانه‌زنی رسوب ناهم‌دوس

پرتودهی می‌تواند تشکیل رسوبات در آلیاژ را القا کند. جوانه‌زنی و رشد رسوب می‌تواند به جای اثر *شیمیایی* ناشی از جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به علت سطوح بالای فوق اشباع ماده‌ی حل شده تحت پرتودهی بیان شود. فوق اشباع نیروی محرکه برای واکنش را فراهم می‌کند. می‌دت[1] و راسل [۲۰] مدلی را برای رشد رسوبات کروی و ناهم‌دوس تحت پرتودهی ارایه کردند که این مدل در این قسمت توضیح داده می‌شود. رسوب با دو متغیر توصیف می‌شوند: تعداد اتم‌های حل شده، x و تعداد جاهای خالی اضافی، n، که متفاوت از تعداد اتم‌های جابه‌جا شده‌ی زمینه به وسیله‌ی رسوب و x است. رسوباتی با حجم اتمی بزرگ‌تر از زمینه برای رهاسازی انرژی کرنشی باید $n > ۰$ داشته باشند و

1. Maydet

رسوبات کوچک اندازه باید $n < 0$ داشته باشند. رفتار رسوب به وسیله‌ی حرکتش در یک فضای فازی با مختصات n و x، همان‌طوری که برای حلقه‌های نابجایی و حفره‌ها در فصل‌های ۷ و ۸ انجام شد، توضیح داده می‌شود. شکل ۹-۱۴ نشان می‌دهد که چگونه رسوب می‌تواند با به دام‌اندازی اتم‌های حل شده، β_x، جاهای خالی، β_v، یا بین‌نشین‌ها، β_i، یا نشر اتم‌های حل شده، α_x یا جاهای خالی، α_v در فضای فازی حرکت کنند. ذرات در فضای فازی با سرعتی برابر با بسامد اضافه شدن ماده‌ی حل شده یا عیب ضرب در فاصله پرش، حرکت می‌کنند:

$$\dot{x} = \beta_x(n,x) - \alpha_x(n,x) \ , \tag{۹-۴۳}$$

و

$$\dot{n} = \beta_v(n,x) - \alpha_v(n,x) - \beta_i(n,x) \ . \tag{۹-۴۴}$$

که βها از غلظت‌ها و نفوذپذیری‌های عیوب و ماده‌ی حل شده تعیین می‌شوند و αها به صورت زیر تعیین می‌شوند.

مانند جوانه‌زنی حفره، برای رشد رسوب به بالای بعضی از اندازه‌ها یک سد انرژی وجود دارد به گونه‌ای که رسوبات کوچک‌تر از این اندازه با یک‌دیگر به تعادل رسیده و رشد و انقباض در نرخ مشابهی رخ می‌دهد. **یعنی تعداد اضافیِ مدار $(n,x-1)$ به دست آورنده‌ی یک اتم حل شده برای تبدیل به مدار (n,x)، به وسیله‌ی فرایندهای معکوس به تعادل می‌رسند.** فرایندهای مشابهی برای تعداد مدار $(n-1,x)$ کسب کننده‌ی جای خالی برای تبدیل به مدار (n,x) صورت می‌گیرد. تعداد تعادلی مدار (n,x) برابر است با:

$$\rho_p^0(n,x) = \frac{1}{\Omega_m} \exp\left(-\frac{\Delta G_p^0(n,x)}{kT}\right) \ , \tag{۹-۴۵}$$

که Ω_m حجم اتمی فاز زمینه است و $\Delta G_p^0(n,x)$ انرژی آزاد تشکیل رسوب از n جای خالی زمینه و x اتم حل شده است. تعادل میان مدار $(n,x-1)$ و مدار (n,x) می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۴۶-۹)

$$\beta_v(n-1,x)\rho_p^0(n-1,x)=\alpha_v(n,x)\rho_p^0(n,x)\ ,$$

(۴۷-۹)

$$\beta_x(n,x-1)\rho_p^0(n,x-1)=\alpha_x(n,x)\rho_p^0(n,x)\ .$$

با جایگذاری معادله‌ی ۹-۴۵ در معادله‌های ۹-۴۶ و ۹-۴۷ و جایگزینی مشتقات به جای تفاضلات در $\Delta G_p^0(n,x)$ داریم:

(۴۸-۹)

$$\alpha_v(n,x)\approx\beta_v(n,x)\exp\left(\frac{1}{kT}\frac{\partial\Delta G_p^0(n,x)}{\partial n}\right)\ ,$$

(۴۹-۹)

$$\alpha_x(n,x)\approx\beta_x(n,x)\exp\left(\frac{1}{kT}\frac{\partial\Delta G_p^0(n,x)}{\partial x}\right)\ ,$$

که $\beta_v(n-1,x)$ و $\beta_x(n,x-1)$ در معادله‌های ۹-۴۶ و ۹-۴۷ به تدریج با n و x تغییر می‌کند و با مقادیرشان در (n,x) جایگزین می‌شوند.

تغییر انرژی آزاد در اثر تشکیل رسوب از محلول جامد که حاوی فوق اشباعی از ماده‌ی حل شده و جاهای خالی است، به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۵۰-۹)

$$\Delta G_p^0=-nkT\ln S_v+(36\pi\Omega^2)^{1/3}\gamma x-xkT\ln S_x+\frac{\Omega Ex(\delta-n/x)^2}{9(1-\nu)}\ ,$$

که S_v فوق اشباع جای خالی و S_x فوق اشباع ماده‌ی حل شده، Ω حجم اتمی رسوب، $\delta=(\Omega-\Omega_m)/\Omega_m$، γ انرژی سطحی زمینه:رسوب، E ضریب یانگ و ν نسبت پواسون هستند و

متغیرهای باقی‌مانده قبلاً تعریف شده‌اند. دو عبارت اول هم‌چنان که در تشکیل حفره از فوق اشباع جاهای خالی در معادله‌ی ۸-۱۷ مشخص شده، مشابه هستند که در آن عبارت اول ناشی از فوق اشباع جای خالی است و عبارت دوم سهم انرژی سطحی (با تعداد اتم‌های حل شده‌ی جایگزین شده برای تعداد جاهای خالی در کل) است. عبارت سوم اثر فوق اشباع ماده‌ی حل شده، در مقایسه با فوق اشباع جاهای خالی را منعکس می‌کند و عبارت آخر انرژی کرنشی کشسان ناشی از جاهای خالی اضافی یا کمبود جاهای خالی از شرایط بدون تنش است (تعیین شده به صورت $\delta = n/x$). با جایگذاری معادله‌های ۹-۴۸ و ۹-۴۹ برای $\alpha_v(n,x)$ و $\alpha_x(n,x)$ در معادله‌های ۹-۴۳ و ۹-۴۴ و می‌توان نوشت:

$$\dot{x} = \beta_x(n,x) - \alpha_x(n,x) = \beta_x \left[1 - \exp\left(\frac{1}{kT} \frac{\partial \Delta G_p^0}{\partial x} \right) \right] , \qquad (۵۱-۹)$$

$$\dot{n} = \beta_v(n,x) - \alpha_v(n,x) - \beta_i(n,x) = \beta_v \left[1 - \frac{\beta_i}{\beta_v} - \exp\left(\frac{1}{kT} \frac{\partial \Delta G_p^0}{\partial n} \right) \right] , \qquad (۵۲-۹)$$

که از معادله‌ی ۹-۵۰ شناسه‌های توانی به صورت زیر تعیین می‌شوند:

$$\frac{1}{kT} \frac{\partial \Delta G_p^0}{\partial x} = -\ln S_x + \frac{2Ax^{-1/3}}{3} + B(\delta^2 - n^2/x^2) , \qquad (۵۳-۹)$$

$$\frac{1}{kT} \frac{\partial \Delta G_p^0}{\partial n} = -\ln S_v - 2B(\delta - n/x) , \qquad (۵۴-۹)$$

که $A = \frac{(36\pi\Omega^2)^{1/3}\gamma}{KT}$ و $B = \frac{\Omega E}{9KT(1-v)}$ است.

ممکن است که رفتار رسوب در فضای (n,x) به وسیله‌ی ایجاد خطوط گرهی[1] در فضای (n,x) که در طول آن $\dot{x}$ و $\dot{n}$ به صورت ویژه‌ای برابر با صفر تنظیم می‌شوند، توصیف می‌شود به صورتی که:

1. Nodal Lines

$$n = x\left[\delta + \frac{1}{2B}\ln\left\{S_{\mathrm{v}}\left(1 - \frac{\beta_{\mathrm{i}}}{\beta_{\mathrm{v}}}\right)\right\}\right], \quad \text{for} \quad \dot{n} = 0, \tag{۵۵-۹}$$

$$n = x\delta\left[1 + \frac{2A}{3B\delta^2 x^{1/3}} - \frac{1}{\delta^2 B}\ln S_x\right]^{1/2}, \quad \text{for} \quad \dot{x} = 0. \tag{۵۶-۹}$$

شکل ۹-۱۵ نشان می‌دهد که خطوط گرهی در فضای (n,x) در نقطه‌ی بحرانی، خارج از جایی که از یک‌دیگر دور می‌شوند، به هم نزدیک شده و هم‌دیگر را قطع می‌کنند. نقطه‌ی بحرانی (n^*,x^*) با حل هم‌زمان معادله‌های ۹-۵۵ و ۹-۵۶ به‌دست می‌آید:

$$x^* = -\frac{32\pi\gamma^3\Omega^2}{3(\Delta\phi)^3}, \quad \text{یا} \quad r_{\mathrm{p}}^* = -\frac{2\gamma\Omega}{\Delta\phi} \tag{۵۷-۹}$$

$$n^* = x^*\left[\delta + \frac{1}{2B}\ln\left\{S_{\mathrm{v}}\left(1 - \frac{\beta_{\mathrm{i}}}{\beta_{\mathrm{v}}}\right)\right\}\right], \tag{۵۸-۹}$$

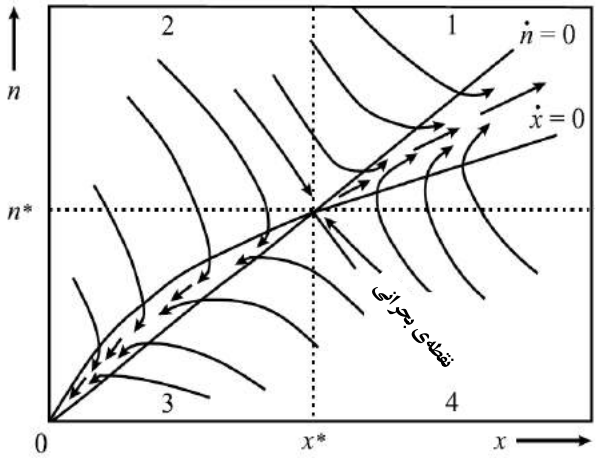
که x^* و r_{p}^* به وسیله‌ی معادله‌ی $x^* = \dfrac{\frac{4}{3}\pi r_{\mathrm{p}}^2}{\Omega}$ با یک‌دیگر در ارتباط هستند و انرژی آزاد اصلاح شده‌ی تابشی به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۵۹-۹)

$$\Delta\phi = -kT\ln S_x - \delta kT\ln[S_{\mathrm{v}}(1 - \beta_{\mathrm{i}}/\beta_{\mathrm{v}})] - \frac{kT}{4B}[\ln S_{\mathrm{v}}(1 - \beta_{\mathrm{i}}/\beta_{\mathrm{v}})]^2.$$

شکل ۹-۱۵ برای موردی که $\delta > 0$ باشد، یعنی یک افزایش جاهای خالی متناسب با ماده‌ی حل شده، ایجاد شده است. تحت این شرایط، ناحیه‌ی بالای خط $\dot{n} = 0$، شامل تعداد اضافی از جاهای خالی است

و در مقایسه با به دام‌اندازیِ تعیین شده در $\dot{n} < ۰$ یا انقباض، تمایل بیش‌تری به نشر دارد. عکس این مطالب برای خط گرهی $\dot{x} = ۰$ درست است که در آن رسوب غنی از جای خالی، انرژی کرنشی خود را با نشر ماده‌ی حل شده افزایش می‌دهد، که منجر به $\dot{x} < ۰$ شده و رشد متوقف می‌شود. همان‌طوری که نشان داده شده، رشد ذره به وسیله‌ی ربع دایره‌های تعریف شده به وسیله‌ی نقطه‌ی بحرانی تعیین می‌شود. رسوبات در ربع اول رشد می‌کنند و در ربع سوم تجزیه می‌شوند و رفتار در ربع‌های ۲ و ۴ وابسته به مقادیر عبارات به دام‌اندازی است. رسوباتی که بین خطوط گرهی هستند نمی‌توانند فرار کنند. هنگامی که $x > x^*$ باشد، رسوبات رشد خواهند کرد و هنگامی که $x < x^*$ باشد، آن‌ها تجزیه می‌شوند. در کل پرتودهی تمایل دارد که یک رسوب با $\delta > ۰$ را پایدار کرده و رسوبی با $\delta < ۰$ را ناپایدار سازد. لازم به ذکر است که مورد ناپایدار $\delta < ۰$ به معنی $\Delta\phi > ۰$ است که فقط در صورتی که عبارت اول در معادله‌ی ۹-۵۹ مثبت باشد، رخ می‌دهد زیرا عبارت دوم تا زمانی که $\beta_i/\beta_v < ۱$ باشد همیشه منفی است. از لحاظ فیزیکی به این معنی است که از آن‌جایی که ورود خالصی از جاهای خالی به رسوبات وجود دارد، آن رسوباتی که برای رشد به جاهای خالی نیاز دارند (به عبارت دیگر رسوبات بزرگ اندازه، $\delta > ۰$)، با پرتودهی پایدار خواهند شد.



شکل ۹-۱۵. خطوط گرهی، نقاط بحرانی و خط سیرهای رسوب در فضای فازی (n,x) برای رشد رسوب بزرگ اندازه و ناهم‌دوس تحت پرتودهی[۲۰].

برای رشد فاز رسوبی کوچک اندازه ($\delta < 0$) از محلول جامدِ اندکی فوق اشباع یافته‌ی بدون انرژی کرنشی بازدارنده، ذره باید جاهای خالی را به درون زمینه نشر کند. در غیاب جاهای خالی اضافه، این به راحتی انجام می‌شود، زیرا جاهای خالی در نرخ‌های یکسان به فصل مشترک رسیده است و آن را ترک می‌کنند (در غیاب رشد یا تجزیه)، و هیچ‌گونه مشکلی در ایجاد شار خالص برای رشد مجاز وجود ندارد. تحت پرتودهی نرخ نشر جای خالی تغییر نمی‌یابد؛ اما نرخ رسیدن چندین برابر افزایش می‌یابد. اغلب غیرممکن است که یک نشر خالصی از جاهای خالی را به‌دست آورد. در عوض تمایل به یک کسب خالص از اتم‌های حل شده علی‌رغم فوق اشباع اندک ماده‌ی حل شده وجود خواهد داشت. در نتیجه جاهای خالی اضافی فاز رسوبی کوچک اندازه را ناپایدار خواهد کرد. بحث‌های مشابهی نیز ممکن است برای فهم پایداری رسوب بزرگ اندازه استفاده شود.

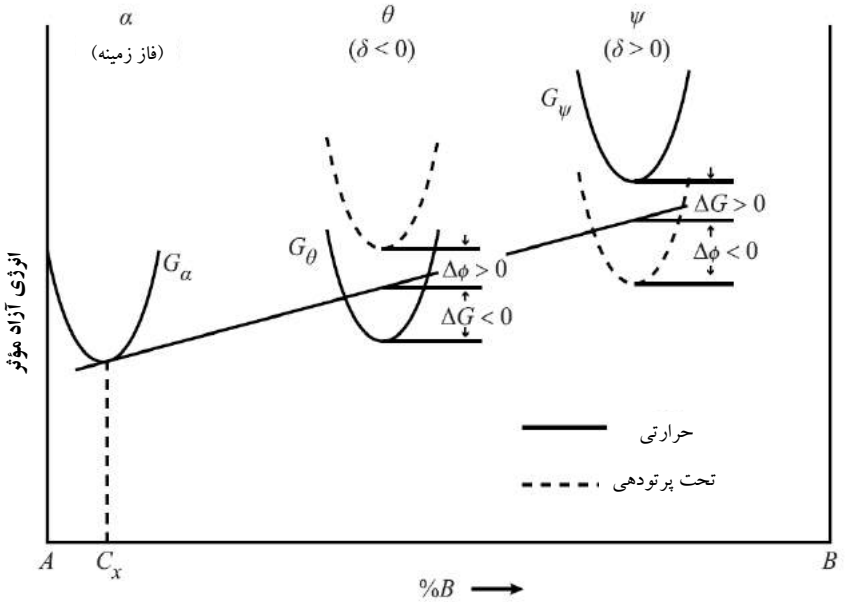
تابع پتانسیلی مشخص شده در معادله‌ی ۹-۵۹ بعضی از ویژگی‌های یک انرژی آزاد را دارد. این رابطه پیش‌بینی می‌کند که آیا رسوباتی با اندازه‌ی مشخص تحت پرتودهی پایدار خواهند بود و حداقل اندازه‌ی رسوب پایدار را مشخص خواهد کرد. در غیاب جاهای خالی اضافیِ ناشی از پرتودهی، $\Delta\phi$ در معادله‌ی ۹-۵۹ به صورت $\Delta\phi = -KT \ln S_x$ نوشته می‌شود که معادله‌ی گیبس ـ تامسون[1] است. اثر پرتودهی انتقال عمودی منحنی انرژی آزاد مؤثر برای رسوب با مقداری در حدود $\delta kT\ln[S_v(1-\beta_i/\beta_v)]$ است. اگر $\Delta\phi < 0$ باشد، رسوبات بزرگ‌تر از x^* پایدار خواهند بود و اگر $\Delta\phi > 0$ تمام رسوبات تجزیه می‌شوند. راسل این پدیده را به صورت شماتیک در شکل ۹-۱۶ نشان داده است. برای این آلیاژ، فاز θ به صورت حرارتی پایدار است و فاز ψ پایدار نیست. اثر پرتودهی ناپایدارسازی فاز θ ($\delta < 0$) و پایدارسازی فاز ψ ($\delta > 0$) است. قابل ذکر است که نظم پایداری به وسیله‌ی پرتودهی معکوس می‌شود در نتیجه ممکن است که فاز θ حل شده و فاز ψ رسوب‌گذاری شود. رسوب‌گذاری فاز ψ تحت پرتودهی مثالی از رسوب‌گذاری القایی تابشی در محلول جامد غیرفوق اشباع است.

نرخ جوانه‌زنی رسوبات به علت پرتودهی نیز می‌تواند تخمین زده شود. نرخ جوانه‌زنی برابر با تعداد جوانه‌ی رسوب رشد کرده به بیش‌تر از یک مقدار مشخص از x در واحد زمان در واحد حجم است [۲۲]. در حالت پایدار، شار جوانه‌زنی مستقل از x است و نرخ جوانه‌زنی می‌تواند در یک مقدار اختیاری از x به صورت زیر تعیین شود:

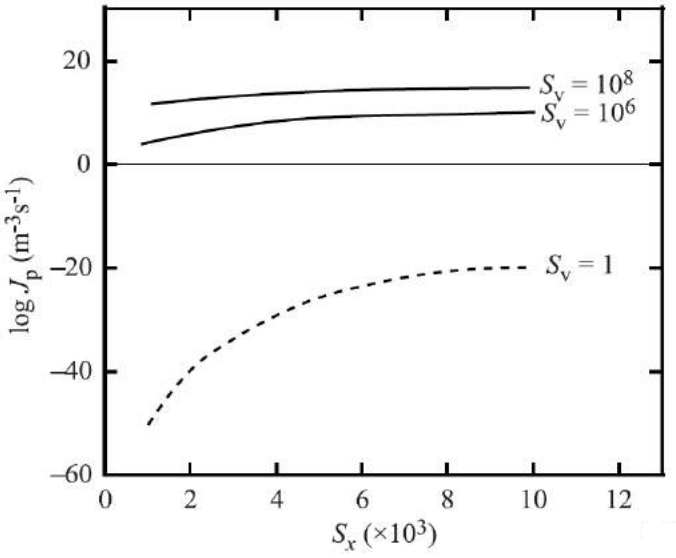
1. Gibbs–Thompson

$$J_{\mathrm{p}}(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\beta_x(x)\rho_{\mathrm{p}}(n,x) - \alpha_x(n,x)\rho_{\mathrm{p}}(n,x+1)\right], \qquad (۹-۶۰)$$

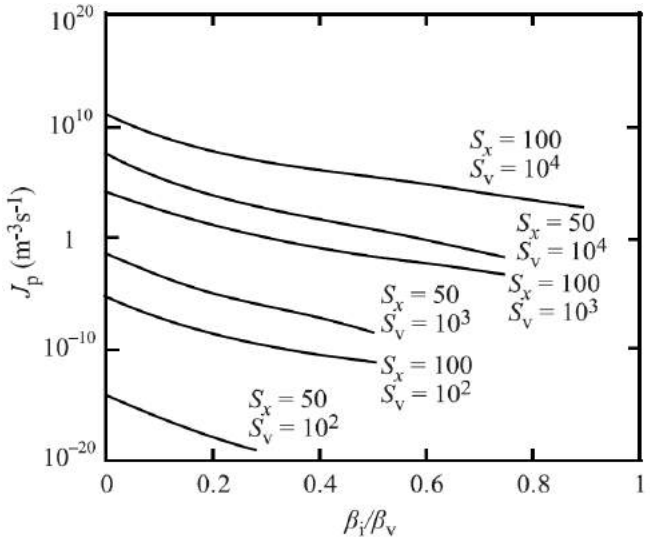
و این مجموعه برای مقادیر بزرگ n به علت اثر انرژی کرنشی به سرعت به هم نزدیک می‌شود. شکل ۹-۱۷ نشان می‌دهد که چه‌طور نرخ جوانه‌زنی با فوق اشباع جاهای خالی و ماده‌ی حل شده در سیستم Al-2%Ge تحت پرتودهی تغییر می‌یابد. همان‌طوری که انتظار می‌رود، نرخ جوانه‌زنی با S_x و S_{v} افزایش می‌یابد؛ اما از S_x بسیار حساس‌تر است. شکل ۹-۱۷ الف اثر شدید جاهای خالی اضافه تکی روی جوانه‌زنی رسوب را نشان می‌دهد. جاهای خالی اضافه، نرخ جوانه‌زنی را از مقادیر بسیار کوچک به مقادیر بالایِ تشکیل دهنده‌ی دانسیته‌ی رسوب بالا افزایش می‌دهند. شکل ۹-۱۷ ب نشان می‌دهد که اثر افزایش بین‌نشین‌های اضافه تاحدی نرخ جوانه‌زنی را کاهش می‌دهد؛ اما در اندازه‌هایی که در مقایسه با افزایش بزرگ ناشی از جاهای خالی بسیار کوچک است. در نتیجه پرتودهی ابزاری برای ایجاد فازهایی است که دستیابی به آن‌ها از جهات دیگر غیرممکن باشد و هم‌چنین برای جلوگیری از تشکیل فازهایی است که از جهات دیگر پایدار هستند.



شکل ۹-۱۶. نمودار فازی شماتیک نشان دهنده‌ی اثر پرتودهی روی پایداری رسوبات ناهم‌دوس در موردی که رسوبات از لحاظ حرارتی پایدار (θ) و از لحاظ حرارتی ناپایدار (ψ) وجود دارند[۱۲].



(الف)



(ب)

شکل ۹-۱۷. (الف) وابستگی نرخ جوانه‌زنی به فوق اشباع ماده‌ی حل شده برای سطوح فوق اشباع جای خالی متفاوت در محلول جامد از Ge در Al در دمای ۲۳^oC. (ب) اثر نسبت نرخ ورود بین‌نشین ـ جای خالی روی نرخ جوانه‌زنی برای چندین سطح مختلف از غلظت ماده‌ی حل شده و جای خالی، در محلول جامد از Ge در Al در دمای ۱۲۳^oC [۲۱].

۹-۵ جوانه‌زنی رسوب هم‌دوس

تحلیل قبلی برای رسوب‌گذاری رسوبات ناهم‌دوس از محلول جامد ناشی از پرتودهی به‌کار برده می‌شود. در این‌جا رسوب‌گذاری رسوبات همدوس به علت پرتودهی بررسی می‌شود. تفاوت میان این دو مورد به رفتار عیوب نقطه‌ای در سطح رسوب بر می‌گردد. همان‌طوری که در فصل ۸ نشان داده شد رسوبات ناهم‌دوس مانند حفراتی رفتار می‌کنند که در آن عیوب می‌توانند جذب و نشر شوند. به هرجهت، فصل مشترک رسوبات هم‌بسته به جای یک تله‌ی عیب به گونه‌ای عمل می‌کنند که عیب مشخصه خودش را حفظ می‌کند. این خصیصه منجر به کاهش مشکل تعیین تغییر انرژی ناشی از رسوب‌گذاری از مسئله‌ی دوبعدی (n,x) به مسئله‌ی یک‌بعدی (x) می‌شود. کاوین[1] و مارتین[2] [۲۳] هم‌چنان که به وسیله‌ی راسل جمع‌بندی شده بود [۱۴]، توزیع اندازه‌ی رسوب شبه تعادلی را تحت پرتودهی، $\rho'(x)$ توضیح دادند به گونه‌ای:

$$\frac{\rho'(x)}{\rho'(x+1)} = \frac{\rho^0(x)}{\rho^0(x+1)} B(x)\,, \qquad (۹-۶۱)$$

که $\rho^0(x)$ توزیع اندازه‌ی تعادلی در غیاب عیوب تولید شده تابشی است و $B(x)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$B(x) = \frac{\beta_v(x)[\rho_v(x)+\rho_n(x)] + \beta_i(x)[\rho_i(x)+\rho_n(x)]}{[\beta_v(x)+\beta_i(x)]\rho_l(x)}\,, \qquad (۹-۶۲)$$

که:

$\rho_i(x)$: تعداد خوشه‌ها با بین‌نشین‌های حبس شده

$\rho_v(x)$: تعداد خوشه‌ها با جاهای خالی حبس شده

$\rho_n(x)$: تعداد خوشه‌ها بدون عیوب حبس شده

$$\rho_t(x) = \rho_i(x) + \rho_v(x) + \rho_n(x)$$

1. Cauvin
2. Martin

کمیت $B(x)$ کسر ماده‌ی حل شده‌ی رسیده به رسوب است که نمی‌تواند منجر به نابودسازی عیب شود. تغییر حرارتی و تابشی قابلیت انحلال به وسیله‌ی رابطه‌ی $C_{irr} = C_0B(\infty)$ با یک‌دیگر در ارتباط هستند. مطابق با انرژی آزاد تعادلی، شبه انرژی آزاد[1]، $\Delta G'(x)$ برحسب توزیع اندازه‌ی رسوب شبه تعادلی، $\rho'(x)$ به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۹-۶۳)

$$\frac{\rho'(x)}{\rho'(x+1)} = \exp\left(\frac{1}{kT}\frac{\partial \Delta G'}{\partial x}\right) .$$

مانند محلول جامد غیرپرتودهی شده که در آن شرایط شبه پایدار در صورتی وجود خواهد داشت که $G(x)$ یک بیشینه‌ای را در x داشته باشد، $G'(x)$ برای شبه پایداری در حالت پرتودیده، باید بیشینه‌ای را در x داشته باشد. با یادآوری آن‌که $\rho^0(x) = \exp(-G^0(x)/kT)$ است، سپس معادله‌ی ۹-۶۱ می‌تواند با استفاده از معادله‌ی ۹-۶۳ دوباره بازنویسی شود به صورتی که:

(۹-۶۴)

$$\frac{\partial G'(x)}{\partial x} = \frac{\partial \Delta G^0(x)}{\partial x} + kT \ln B(x) ,$$

و $B(x)$ وابسته به علامت عبارت σ که به صورت زیر تعریف می‌شود، دو شکل متفاوت دارد:

(۹-۶۵)

$$\sigma = \frac{(1 - p_i/p_v)}{(1 - \beta_i/\beta_v)} .$$

که $p_{i,v}$ احتمالی است که موقعیت به دام‌انداز مشخص با بین‌نشین یا جای خالی پر شده باشد. برای هر یک از این دو مورد مقدار B با افزایش مقادیر x به مقدار ثابت می‌رسد و به روش مشابه برای مقادیر بزرگ x داریم:

(۹-۶۶)

$$\frac{\partial \Delta G^0(x)}{\partial x} = -kT \ln S_x ,$$

1 .Pseudo-free energy

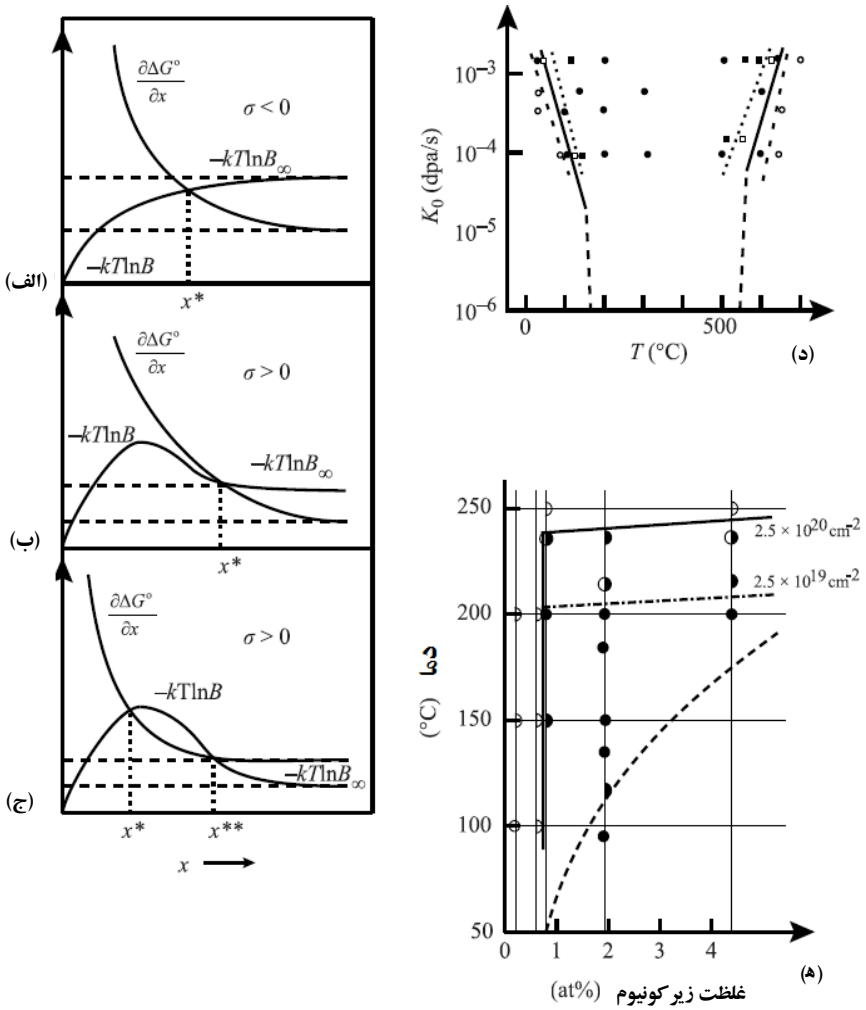
و معادله‌ی ۹-۶۴ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{\partial G'(x)}{\partial x} = -kT \ln S_x + kT \ln B(x) \,. \qquad (۹-۶۷)$$

شکل ۹-۱۸ عبارات بیان شده در معادله‌ی ۹-۶۴ برای شبه انرژی آزاد محلول جامد تحت پرتودهی برای مقادیر مختلفی از σ را نشان می‌دهد. هنگامی که $\sigma < 0$، اگر $-kT\ln B(\infty) > -kT\ln S_x$ باشد، سپس راه‌حل همان‌طوری که در شکل ۹-۱۸ الف نشان داده شده است شبه پایدار خواهد بود. اگر $\sigma > 0$، در نتیجه ممکن است که راه‌حل $\frac{\partial G'(x)}{\partial x} = 0$، یک یا دو ریشه داشته باشد. اگر هیچ ریشه‌ای وجود نداشته باشد، محلول جامد پایدار است. با یک ریشه راه‌حل شبه پایدار است (شکل ۹-۱۸ ب)؛ اما در مورد دو ریشه (شکل ۹-۱۸ج) راه‌حل در زیر مقادیر x^{**} شبه پایدار خواهد بود و رسوب هرگز نمی‌تواند به مقادیر بزرگ رشد کند. بنابراین در این مدل پرتودهی همواره قابلیت انحلال جامد را کاهش می‌دهد.

خلاصه‌ای از رسوبات تشکیل شده در محلول‌های جامد ناشی از پرتودهی در جدول ۹-۱ نشان داده شده است. لازم به ذکر است که رسوب‌گذاری با انواع زیادی از ذرات و در محدوده‌های وسیعی از دما و مقدار پرتوگیری رخ می‌دهد. رابطه‌ی میان این دو عامل متغیر مهم است و در شکل‌های ۹-۱۸د، هـ پررنگ شده است. شکل ۹- ۱۸د از پرتودهی ۱ MeV چندین محلول جامد Ni-Si تحت اشباع ایجاد شده است و منطقه‌ی رسوب‌گذاری γ' ,Ni_3Si از محلول جامد را همان‌طوری ترسیم می‌کند که به وسیله‌ی دایره‌های پر نشان داده شده است. شکل ۹-۱۸هـ وابستگی قابلیت انحلال به مقدار پرتوگیری در Al-Zn را نشان می‌دهد. با افزایش نرخ مقدار پرتوگیری، تشکیل مناطق ژونیر- پریستون[1] (GP) (خوشه‌های غنی از روی) در Al-Zn در مقایسه با حد پایداری در غیاب پرتودهی در دماهای بالاتری (خطوط پررنگ) رخ می‌دهد. هر دوی این مثال‌ها نشان می‌دهد که پرتودهیِ محلول جامد تحت اشباع می‌تواند منجر به رسوب‌گذاری تحت پرتودهی در دماهایی شود که رسوب از نظر حرارتی پایدار نیست. این مثال‌ها هم‌چنین تأکید می‌کنند که ارتباط شدیدی میان دما و نرخ پرتوگیری در رسوب‌گذاری القایی تابشی وجود دارد.

1 .Guinier-Preston



شکل ۹-۱۸. نمایش شماتیک تغییر پایداری به وسیله‌ی بازترکیبی عیب در فصل مشترک دانه ـ زمینه. (الف) $\sigma < 0$ ریشه. (ب) $\sigma > 0$ ریشه. (ج) $\sigma > 0$ ریشه [۲۳]. (د) وابستگی مقدار پرتوگیری- دمای رسوب Ni_3Si، γ' از آلیاژهای محلول جامد فوق اشباع Ni-Si پرتودهی شده با الکترون‌های ۱ MeV، Ni-6at%Si-، Ni-4at%Si-، Ni-2at%Si-. (ه) افزایش در دمایی که در آن Zn خوشه‌ها را غنی می‌کند، یا مناطق G.P. با افزایش نرخ پرتوگیری با الکترون‌هایی با انرژی ۱ MeV در یک محدوده از غلظت Zn در نمودار فازی Al-Zn پایدار هستند. نیم دایره‌ها در سمت راست (چپ) اطلاعات در شارهای تابشی بالا (پایین) را مشخص می‌کند. نشانه‌های پر (توخالی) وجود (غیاب) رسوب‌گذاری القایی تابشی را نشان می‌دهد. خط‌چین‌ها حد پایداری در غیاب پرتودهی هستند [۲۴].

جدول۹-۱. رسوب القایی تابشی در آلیاژهای دوتایی تحت اشباع [۲۴].

آلیاژ	پرتابه	رسوب	مورفولوژی
MgCd	e^-	Mg_3Cd	–
AlZn	n	β Zn	رسوب همگن
	e^-	β Zn و GP مناطق	رسوب همگن
AlAg	e^-	Ag صفحات (۱۰۰) غنی از	رسوب همگن
NiBe	Ni^+	β NiBe	در حلقه‌های نابجایی بین‌نشینی
	e^-	β NiBe	رسوب همگن و در حلقه‌های نابجایی بین‌نشینی
NiSi	n	γ' Ni_3Si	در حلقه‌های نابجایی بین‌نشینی
	Ni^+	γ' Ni_3Si	،،
	e^-	γ' Ni_3Si	،،
	H^+	γ' Ni_3Si	هم‌بسته، تحریک شده به وسیله‌ی غیرهمگنی اثر تولید
NiGe	e^-	γ' Ni_3Ge	در حفره‌ها و خط‌های نابجایی
CuBe	e^-	GP مناطق	رسوب همگن
	Cu^+	γ	
PdMo	Cu^+	M_o	در حلقه‌های نابجایی
PdFe	H^+	γ' Pd_3Fe	در حلقه‌های نابجایی
PdW	$H^+N^+ e^-$	bcc W	در حلقه‌های نابجایی
WRe	n	WRe_3, W-Re	رسوب همگن
FeV	e^-	نامشخص	رسوب همگن
FeCr	e^-	،،	،،
سه‌تایی مختلف	n, ions, e^-	تغییرات ترکیبی	–

به صورت خلاصه، پرتودهی می‌تواند پایداری فازی را با فرایندهای متعددی تحت تأثیر قرار دهد: غنی‌سازی یا تهی‌سازی ماده‌ی حل شده انحلال مجدد رسوب، بی‌نظمی رسوب، و جوانه‌زنی رسوبات هم‌بسته و غیرهم‌بسته تحت پرتودهی. پرتودهی هم‌چنین تشکیل فازهایی را که در شرایط تعادلی پایدار نیستند یا فازهای نیمه پایدار را القا می‌کند. تشکیل فازهای نیمه پایدار در فصل بعد توضیح داده می‌شود.

۹-۶ فازهای شبه پایدار

از آن‌جایی که عبارت شبه پایدار به فازی با انرژی آزاد بالاتر از فاز پایدار تحت شرایط متداول دما و فشار اشاره دارد، جستجوی ترمودینامیکی برای تشریح تشکیل این فازها تحت پرتودهی طبیعی است.

به نظر می‌رسد که نتایج آزمایشگاهی به این نکته دلالت دارد که ترمودینامیک نقش شدیدی را در تمایل به تشکیل فازهای شبه پایدار ایفا می‌کند. ترکیبات بین فلزی با محدوده‌های کوچک انحلال‌پذیری و ساختارهای بلوری پیچیده نامزدهای اولیه برای استحاله به یک فاز شبه پایدار هستند [۱۹]. هم‌چنین، تغییر در انرژی آزاد جامد ناشی از افزایش عیوب القایی تابشی برای تشریح ترمودینامیکی استفاده می‌شود[۲۵]. به هر جهت، تمام استحاله‌ها نمی‌تواند صرفاً براساس پایه‌های ترمودینامیکی تشریح شوند زیرا جامدات تحت پرتودهی اساساً از حالت تعادل بسیار دور هستند. پرتودهی می‌تواند مشابه با فرایند سرد شدن بررسی شود که در آن آرایش‌های اتمی ضرورتاً در طول دوره‌ی رهایش متعاقب رخدادهای برخوردی تعیین می‌گردند. در دماهای پایین، جنبش‌ها محدود می‌شوند و تشکیل ساختارهای بلوری پیچیده غیرمحتمل می‌شود. پرتودهی در محلول جامد معمولاً منجر به ساختارهای مکعبی ساده یا ساختارهای بی‌شکل می‌شود. به هرجهت ساختار سیستم شبه پایدار به وسیله‌ی ماهیت تعادلی سیستم تأثیر می‌پذیرد. سیستم‌هایی با تعداد زیادی ترکیبات بین فلزی فازهای بی‌شکل را تشکیل خواهند داد درحالی‌که سیستم‌های بدون آلیاژهای بین فلزی تمایل به تشکیل محلول‌های جامد را نشان می‌دهند. در دماهای بالا که قابلیت تحرک اتم‌ها قابل توجه است، معمولاً فازهای تعادلی تشکیل خواهند شد.

فازهای شبه پایدار معمولاً می‌توانند با پرتودهی نوترونی یا با پرتودهی یونی، کاشت یون[1] و ترکیب پرتو یونی[2] شکل بگیرند. تفاوت‌های بین فرایند استحاله بین روش‌های پرتودهی یونی می‌تواند بینشی را از سازوکارهای حکم‌فرما بر تشکیل فازهای نیمه‌پایدار فراهم آورد. برای مثال در آزمایشات پرتودهی یونی نتیجه‌ی اصلی پرتودهی ایجاد آسیب در شبکه است. به هرجهت، در کاشت یون، گونه‌های کاشته شده تغییر شیمیایی را نیز در هدف ایجاد می‌کنند. آزمایشات پرتوی یونی ترکیبی برای بررسی استحاله به وسیله‌ی تغییر سریع (دور از حالت تعادل) مقدار حجمی فیلم طراحی شده‌اند. فازهای شبه پایدار تشکیل شده به وسیله‌ی پرتودهی معمولاً به وسیله‌ی یکی از چهار سازوکار زیر رخ می‌دهند [۲۶]:

نظم ⟵ بی نظمی

استحاله‌ی ساختار بلوری: $A \rightarrow B$

1. Ion Implantation
2. Ion Beam Mixing

ساختار بلوری A ⟵ ساختار شبه بلوری

ساختار بلوری A ⟵ ساختار بی‌شکل

سه استحاله‌ی اول به صورت خلاصه بحث خواهد شد و بی‌شکل‌سازی در قسمت ۹-۷ بررسی می‌شود. برای بحث‌های تکمیلی بیش‌تر در مورد تشکیل فازهای شبه پایدار خواننده به مرجع [۲۷] ارجاع داده می‌شود.

۹-۶-۱ استحاله‌های نظم ـ بی‌نظمی

استحاله‌ی نظم ـ بی‌نظمی و نقش آن در پایداری فازی در بخش ۹-۳ بحث شد. به هرجهت، بی‌نظمی القایی تابشی به تشکیل فازهای شبه پایدار ارتباط داده می‌شود. در حقیقت، این اعتقاد وجود دارد که بسیاری از ترکیبات یک بی‌نظمی شیمیایی را قبل از بی‌شکل شدن تحت پرتودهی الکترونی تجربه می‌کنند. لوزی[1] و مشی[2] [۲۸] نشان دادند که از ۳۲ ترکیب پرتودهی شده، تمام آن‌ها بی‌نظمی شیمیایی را متحمل شده و ۱۵ ترکیب بی‌شکل شده‌اند. این محققین نتیجه گرفتند که بی‌نظمی‌های شیمیایی القایی تابشی، نیرو محرکه برای بی‌شکل‌سازی را فراهم می‌کند و ذکر کرده‌اند که دشواریِ تشکیل ساختار بی‌شکل در فلزات خالص تأییدی بر این مبحث است. پیوند میان بی‌نظم شدن و بی‌شکل شدن وابسته به شرایط پرتودهی و به ویژه جرم ذره و نیز آن‌که آسیب از طریق جفت‌های فرانکل (پرتودهی الکترونی) یا در آبشارها (پرتودهی یون سنگین) ایجاد شده است. مقایسه‌ی آنتالپی برای استحاله‌ی نظم ـ بی‌نظمی از استحاله‌ی تبلور به بی‌شکل نشان می‌دهد که $\Delta H_{\text{O-D}} \sim 5\ \Delta H_{\text{c-a}}$ است [۱۶]. در واقع ممکن است که تغییر آنتالپی برای بی‌نظم شدن، برای القای بی‌شکل شدن کافی است. نقش بی‌نظمی در آغاز بی‌شکل شدن در قسمت ۹-۷ بحث خواهد شد.

۹-۶-۲ استحاله‌های ساختار بلوری

مثال‌های متعددی در مورد استحاله از ساختار بلوری به ساختار دیگر تحت پرتودهی یونی وجود دارد. یکی از ساده‌ترین مثال‌ها استحاله‌ی فلز نیکل خالص از fcc به hcp تحت پرتودهی است. مشخص شده است که این استحاله در طول پرتودهی با گونه‌های مختلفی شامل نوترون‌ها، عناصر خنثای شیمیایی از

1. Luzzi
2. Meshii

جمله هلیوم و آرگون، شبه فلزات فسفر و آرسنیک، به علاوه خود پرتودهی رخ می‌دهد [۲۹]. مشاهدات در مورد کاشت فسفر روی نیکل با خلوص بالا [۳۰] یک ارتباط آرایشی بین فاز hcp جدید و زمینه‌ی fcc را نشان داده است که مشابه با چیزی است که در مورد استحاله‌های مارتنزیتی fcc → hcp دیده شده است. بنابراین این اعتقاد وجود دارد که استحاله موجود در نیکل مارتنزیتی باشد. مشاهدات میکروسکوپ الکترونی عبوری از کاشت آنتی‌مو آن در نیکل، ذرات hcp بزرگ‌تر از ۲۰nm در عمق‌های فراتر از عمق کاشت را نشان داده است، ولی کانال‌زدایی تا عمق ۱۳۰nm وجود دارد که پیشنهاد می‌کند که توزیع عیوب نقش مهمی را در استحاله‌ی ساختاری ایفا می‌کند.

مشخص شده است که پرتودهی یونی استحاله‌های فازی بین فازهای bcc و fcc در آلیاژهای آستنیتی پایه آهنی را القا می‌کند [۳۱]. مثال شاخصی از این مورد استحاله fcc به bcc فولاد زنگ نزن ۳۰۴ متعاقب کاشت با یون‌های Fe^+ در یک شار 3×10^{16} atom/cm^2 در ۱۶۰ keV است. اگرچه این مقدار پرتوگیری منجر به افزایش فقط ۱ at% Fe در ترکیب آلیاژ (۶۷ at% Fe به صورت اسمی در آلیاژ موجود است) می‌شود؛ اما ساختار از fcc به bcc تغییر یافته است. روابط آرایشی در این استحاله به صورت زیر است:

(۹-۶۸)

$$(100)_{bcc} || (100)_{fcc} \quad \text{و} \quad [010]_{bcc} || [011]_{fcc} .$$

فول‌استید[1] [۳۲] پیشنهاد کرد که لازم نیست استحاله به صورت مارتنزیتی رخ دهد ولی غلظت عیوب را افزایش می‌دهد و از این‌رو ممکن است که نفوذپذیری مسئول استحاله باشد. هم‌چنین باید ذکر شود که این استحاله اساساً متفاوت از استحاله‌ی نیکل تحت پرتودهی است زیرا از حالت شبه پایدار به ساختار تعادلی است درحالی‌که در مورد نیکل، استحاله از ساختار تعادلی fcc به یک ساختار شبه پایدار hcp است.

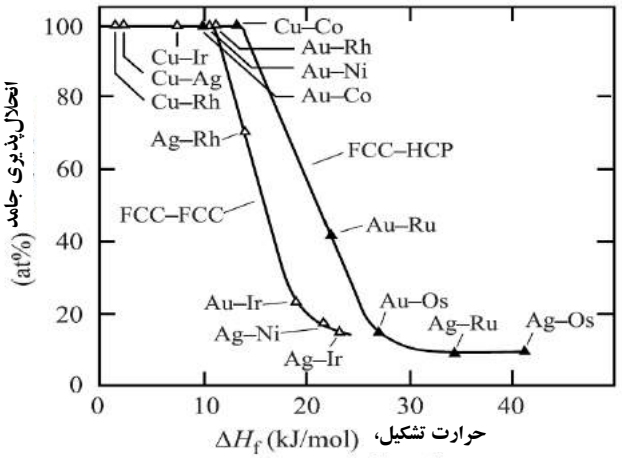
حرارت تشکیل آلیاژ می‌تواند به صورت مؤثری روی چگونگی شکل‌های فاز شبه پایدار تأثیر بگذارد. شکل ۹-۱۹ قابلیت‌های انحلال القایی تابشی برای چندین سیستم فلزی دوتایی به صورت تابعی از گرمای تشکیل، ΔH_f را نشان می‌دهد. نمونه‌ها به صورت چندلایه‌ای بودند و در دمای ۷۷K و به

1. Follstaedt

وسیله‌ی یون‌های Kr^{+} با انرژی ۴۰۰keV بمباران شدند. تمام سیستم‌ها مقادیر مثبت ΔH_f را دارند، به این معنی که در تعادل حرارتی هیچ‌گونه قابلیت انحلال وجود ندارد یا فقط قابلیت انحلال محدودی از ترکیبات سیستم‌ها بررسی می‌شود. شایان ذکر است که نقاط اطلاعاتیِ سیستم‌هایی که ترکیبات ساختار مشابهی دارند و سیستم‌هایی با ترکیباتی با ساختار متفاوت، منحنی‌های صاف را دنبال می‌کنند. هر دو منحنی کاهش شدیدی را از انحلال کامل به سطوحی کم‌تر از ۱۵ at% در محدوده در حدود ۱۲ kJ/mol از ΔH_f نشان می‌دهند. به هر جهت حتی در مقادیر بالای ΔH_f، انحلال‌پذیری هنوز از بین نرفته است.

محلول‌های جامد شبه پایدار می‌توانند با اختلاط جابه‌جاساز در دماهایی که نفوذ القایی تابشی برای حفظ فاز محلول جامد فوق اشباع به اندازه‌ی کافی کم است نیز تشکیل شوند. ترکیب پرتو یونی از هدف‌های چندلایه Ag-Cu، یک‌سری محلول‌های جامد شبه پایدار پیوسته‌ای را در نمودار فازی شکل می‌دهند. اگرچه نمودار فازی Cu-Ag یوتکتیک ساده با قابلیت انحلال نسبتاً کم نقره در مس و بالعکس است، پرتودهی محلول جامد تک فازِ شبه پایدار با ساختار بلوری fcc در سراسر سیستم Cu-Ag را تولید می‌کند [۳۴]. از آن‌جایی که ترکیب پرتو یونی اساساً در حالت جامد رخ می‌دهد، محلول‌های جامد گسترده‌ای در سیستم‌های تقریباً اختلاط‌ناپذیری مانند Ag-Ni به‌دست می‌آیند. حتی در سیستم‌های دوتایی مانند Au-Fe و Au-V که نمودارهای فازی بسیار پیچیده‌ای دارند و به ترتیب شکاف انحلال‌پذیری بزرگ و چندین ترکیب بین فلزی را نشان می‌دهند و ساختار bcc در محلول‌های جامد نهایی غنی از آهن و وانادیوم دیده می‌شود، محلول‌های جامد شبه پایدار در هر دو سیستم در طول ترکیب پرتو یونی تشکیل می‌شوند [۳۵]. در تمام موارد، عوامل شبکه‌ی محلول‌های جامد به آرامی با ترکیب تغییر می‌کند و انحرافات کم یا متوسطی را از قانون ویگارد[1] بین اجزای پایانی نشان می‌دهد.

1. Vegard’s law



شکل ۹-۱۹. انحلال‌پذیری‌های جامد القایی تابشی برای سیستم‌های فلزی دوتایی با حرارت‌های تشکیل مثبت [۳۳].

۹-۶-۳ تشکیل شبه بلور

اکثر فازهای شبه پایدار جدید فازهای شبه بلوری تولید شده به وسیله‌ی پرتودهی یونی آلیاژهای ویژه Al است. این فازها، نظم بلند دامنه‌ای را نشان می‌دهند؛ اما تقارن‌های بلوری ممنوعی مانند تقارن‌های پنج و شش مرتبه را دارند. فاز با مشارکت شکتمن[1] و همکارانش [۳۶] در کمیته‌ی ملی استاندارد کشف شد. شبه بلورها یک نظم وابسته به موقعیت[2] دارند؛ اما به صورت تناوبی یا تصادفی فاصله‌دار نشده‌اند و به جای آن‌ها به صورت شبه تناوبی فاصله‌دار شده‌اند. یعنی با تعیین موقعیت یک سلول واحد موقعیت‌های دیگر سلول واحدها مطابق با توالی قابل پیش‌بینی و دقیق تعیین می‌شوند که هرگز کاملاً تکرار نمی‌شود. به علت آن‌که این ساختارها به شدت مشابه به بلور منظم هستند، به جای تناوبی بودن شبه تناوبی‌اند، آن‌ها بلورهای شبه تناوبی یا به صورت مختصر شبه بلور نامیده می‌شوند.

اولین شبه بلورها با پرتودهی یونی در سیستم Al-Mn تشکیل شدند و مثال‌ها در سیستم‌های سه‌تایی و چهارتایی نیز گسترده شدند. در این آزمایشات اولیه فاز شبه بلوری به وسیله‌ی پرتودهی لایه‌های متناوبی از آلومینیوم و منگنز در ترکیب $Al_{48}Mn_{16}$ با یون‌های زنون ۴۰۰ keV تا دوز ۱۰×۱۰^{۱۵} Xe/cm^2 در دمای ۸۰^oC تشکیل شدند[۳۷، ۳۸]. نتایج نشان داد که فازهای بیست‌وجهی[3]

1. Shectman
2. Positional Order
3. Icosahedral phase

بدون عملیات حرارتی مجزا در دمای ^{o}C ۸۰ یا بالای آن تشکیل شدند، درحالی‌که فازهای بی‌شکل در دمای ^{o}C ۶۰ تشکیل شدند. این بیست‌وجهی یک چندوجهی منظم بیست وجه سه گوش مشابه سی لبه و دوازده رأس را دارد. پنج‌وجهی‌های سیاه روی سطح توپ فوتبال روی رئوس بیست‌وجهی متمرکز شده‌اند. این وابستگی مشاهده شده به دمای نمونه پیشنهاد می‌کند که فاز بیست‌وجهی در درون آبشار یونی متراکم تشکیل نمی‌شود، و بیش‌تر در طول تکامل تدریجی بعدی عیب تشکیل می‌شود. نتایج مشابهی با نمونه‌های چندلایه‌ای ساده‌ی Al-Fe به‌دست آمد [۳۹]، که نشان می‌دهد که هم نمونه‌های چندلایه و هم نمونه‌های بی‌شکل می‌توانند به فازهای شبه بلورین استحاله یابند. علاوه بر دما، ترکیب نمونه‌ها اثر مهمی را روی تشکیل شبه بلور دارد که بیان می‌کند که در اصل شبه بلورها در درون ترکیب و ناحیه‌ی دمایی خوش تعریف[1] تشکیل می‌شوند.

۹-۷ بی‌شکل‌سازی

پرتودهی می‌تواند تشکیل فازهای بی‌شکل را در آلیاژها القا کند. اگرچه فضای فازی موجود در آلیاژ بی‌نهایت بزرگ است؛ اما فقط یک نقطه‌ی منطبق بر کمینه‌ی مطلق در انرژی آزاد است. این نقطه فاز تعادلی را نشان می‌دهد. با دادن زمان کافی در هر دمایی بیش‌تر از صفر، سیستم آن نقطه را پیدا خواهد کرد و فاز تعادلی را در آن نقطه مستقر می‌کند. با این حال کمینه‌های دیگری در فضای فازی انرژی آزاد وجود دارند که شدت‌های مختلفی دارند. این کمینه‌ها، مطابق با فازهای شبه پایدار هستند. قطعاً این فازها نظم‌های کوتاه دامنه‌ی ترکیبی[2] (CSRO) بسیار مشابه با فازهای تعادلی اما با نظم بلند دامنه‌ی ترکیبی متفاوت را نشان می‌دهند. به صورت مشابه آرایشات فضایی اتم‌ها روی مقیاس کوچک (مکان‌شناسی نظم کوتاه دامنه[3]، TSRO) می‌تواند بسیار مشابه با فاز تعادلی اما با نظم بلند دامنه‌ی متفاوت (مانند فازهای fcc در مقایسه با hcp) باشد. در کل فازهای زیادی با CSRO و TSRO وجود دارند که تقریباً مشابه با فاز تعادلی هستند. مثال‌های معمول از این فازهای شبه پایدار گازها و جامدات بلورین با سلول واحد به صورت جزیی متفاوت از فازهای تعادلی هستند.

1. Well-defined
2. Compositional Short-Range Order
3 .Topological Short-range Order

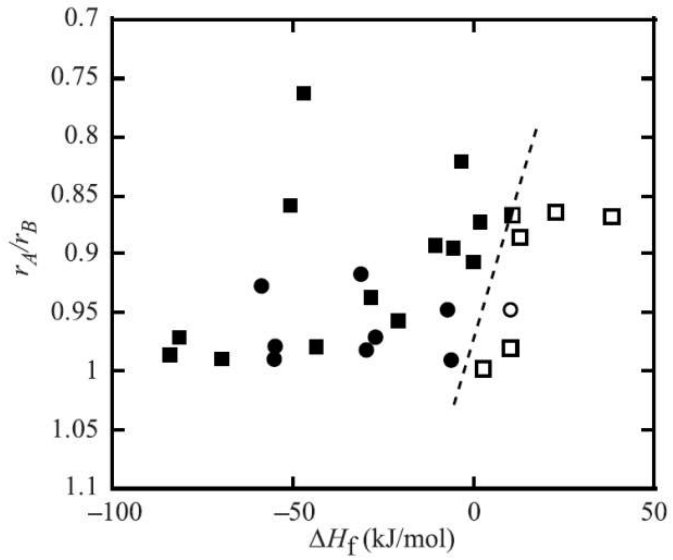
پیشنهاد شده است که در آلیاژهایی با گرمای تشکیل منفی بزرگ، آشفتگیِ نظم کوتاه دامنه‌ی شیمیایی منجر به ناپایدار شدن شبکه و تشکیل یک فاز بی شکل می‌شود [۴۰]. در حقیقت، اطلاعات موجود در پرتودهی یونی این ترکیبات بین فلزی، فقط این نوع از نتیجه‌گیری‌ها را تأیید کرده است [۴۰،۲۲] . نتایج پرتودهی الکترونی در تناقض با این مشاهدات هستند که نشان می‌دهد که بی نظمیِ بلند دامنه‌ی کامل اغلب مقدم بر تشکیل یک فاز بی‌شکل است [۴۱،۲۶]. برای ترکیبات بین فلزی مانند NiAl یا FeTi، پرتودهی الکترونی منجر به بی‌نظمی می‌شود؛ اما این ترکیبات را بی‌شکل نمی‌کند [۴۲]. پرتودهی با یون‌های سبک نتایج مشابه با پرتودهی الکترونی را تولید می‌کند که در آن تشکیل فاز بی‌شکل دشوار است. بنابراین پیشنهاد می‌کند که آشفتگی CSRO برای ناپایدارسازی شبکه کافی نیست و دیگر سازوکارها مانند بی‌نظمی توپولوژیکی[1] (هندسی) باید مسئول بی‌شکل‌سازی باشند [۴۲-۴۶]. در حقیقت، خود پرتودهی یونی[2] نیکل که تغییر فازی از fcc پایدار به hcp ناپایدار را القا می‌کند (همان‌طوری که در قسمت ۹-۶ مورد بررسی قرار گرفت)، هیچ مؤلفه‌ی شیمیایی ندارد و باید نتیجه‌ای از بی‌نظمی مکانی ایجاد شده در سیستم با پرتو Ni^{+} باشد. دو بخش بعدی، نقش‌های حرارت تشکیل ترکیب، تفاوت‌های ساختار بلوری، محدوده‌ی انحلال‌پذیری ترکیبات بین فلزی و دانسیته‌ی بحرانی عیب روی تشکیل فاز بی شکل را بحث می‌کند.

۹-۷-۱ حرارت تشکیل ترکیب و تفاوت‌های ساختار بلوری

ارتباط خوبی بین حرارت تشکیل یک ترکیب و تشکیل فازهای بی‌شکل در سیستم‌های فلز ـ فلز[۴۷] وجود دارد به نحوی که حرارت‌های تشکیل منفی بزرگ تحت پرتودهی تمایل به بی‌شکل شدن دارند. جایی که بی‌شکل‌سازی رخ خواهد داد با یک منحنی از نسبت شعاع اتمی برحسب حرارت تشکیل که با استفاده از مدل میدما[3] [۴۸] محاسبه شده است نشان داده می‌شود (شکل ۹-۲۰). در حقیقت اگر حرارت تشکیل بزرگ‌تر از ۱۰+ kJ/mol باشد، آلیاژها بی‌شکل نخواهند شد. به هرجهت، اگر حرارت تشکیل بالاتر باشد، ساختار بی‌شکل می‌تواند به وسیله‌ی ترکیب یونی تشکیل شود به عبارت دیگر، Cr/Ag، Co/Cu، Fe/Cu و Co/Au. ترکیب‌های ویژه‌ای در سیستم‌های Au-Ir،

1. Topological Disorder
2. Self-ion Irradiation
3. Miedema

Au-Ru و Au-Os، که حرارت‌های تشکیل در محدوده‌ی ۱۹ تا ۲۷ kJ/mol دارند، به وسیله‌ی پرتودهی بی‌شکل شده‌اند [۳۳]. هم‌چنین مشاهده شده است که فازهای بلورین از ساختارهای ساده‌ای مانند محلول‌های جامد یا ساختارهای مکعبی ساده تحت پرتودهی شکل می‌گیرند درحالی‌که فازهای بی شکل از ساختارهای بسیار پیچیده شکل می‌گیرند. این پدیده به وسیله‌ی مدت کوتاه مرحله‌ی واهلش متعاقب میخچه‌ی حرارتی تشریح می‌شود. در طول دوره‌ی رهایش، اتم‌ها تلاش می‌کنند که مجدداً خود را آرایش کنند. اگر زمان رهایش برای جوانه‌زنی رسوبات کافی باشد، ممکن است که تشکیل فازهای بلوری قابل دستیابی باشد. زمان مورد نیاز برای جوانه‌زنی به شدت با دما، ساختار بلوری جوانه و ترکیب فیلم‌هایی که با عملیات‌های حرارتی یا پرتوهای یونی همگن شده‌اند تأثیر می‌پذیرد. اگر ترکیب کلی نزدیک به ساختار بلوری ساده در نمودار فازی تعادلی نباشد و نیرو محرکه‌ی شیمیایی قوی (علاوه بر تحرک) برای افزایش قابل توجه حرکت اتمی وجود نداشته باشد، در نتیجه ممکن است که از تشکیل فازهای بلوری ممانعت به عمل آید.

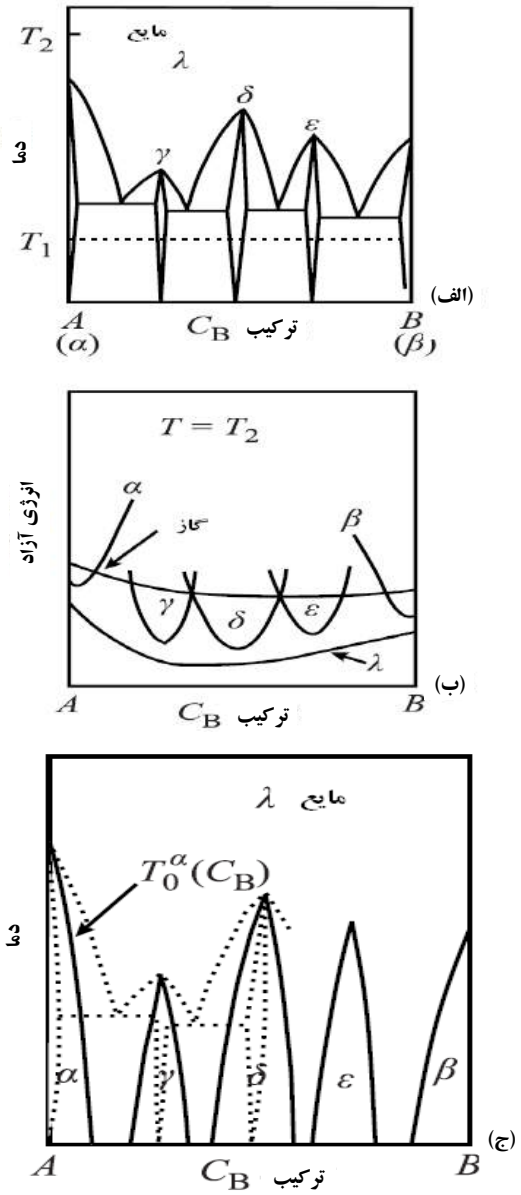


شکل ۹-۲۰. نسبت شعاع اتمی برحسب حرارت تشکیلِ یک ترکیب با کسر اتمی برابر (□ فلز ـ فلز بلورین، ■ فلز ـ فلز بی‌شکل ، ○ فلز ـ شبه فلز بلورین، ● فلز – شبه فلز بی‌شکل)[۴۷].

نقش تفاوت ساختاری در تمایل برای بی‌شکل شدن در اثر پرتودهی می‌تواند با کمک یک نمودار فازی دوتایی از یک آلیاژ A-B (شکل ۹-۲۱ الف)، یک نمودار انرژی آزاد شماتیک برای این آلیاژ (شکل ۹-۲۱ ب) و نمودار فازی چندریختی[1] مربوطه (شکل ۹-۲۱ ج) فهمیده شود [۴۹]. قابل ذکر است که منحنی‌های T_0 در شکل ۹-۲۱ج از تقاطع منحنی انرژی آزاد جامد با منحنی مایع (یا بی‌شکل) در دمای مشخص به‌دست می‌آید. خط $T_{0\alpha}$، محدوده‌های ترکیب ترمودینامیکی محلول α را تعریف می‌کند. هنگامی که سطح مقطع غلظتی ایجاد شده به وسیله‌ی ترکیب به صورت موضعی به خارج از این محدوده تنزل می‌یابد محلول α با توجه به فاز مایع (بی‌شکل) بیش از حد گرما دیده و قابل حل نیست. از آن‌جایی که ذوب یک پدیده‌ی موضعی است که نفوذ بلند دامنه را شامل نمی‌شود، و از آن‌جایی که مشاهده نشده است که جامدات تحمل فوق گرمایش را داشته باشند، در نتیجه مشاهده‌ی فاز α خارج از این محدوده ترکیبی، فاز ناپایدار را نشان می‌دهد. چنین حالتی احتمالاً شبیه ذوب یا بی‌شکل شدن قبل از کامل شدن میخچه‌ی حرارتی است. این منجر به اولین قانون پایه‌ای برای تشکیل فاز جامد شد.

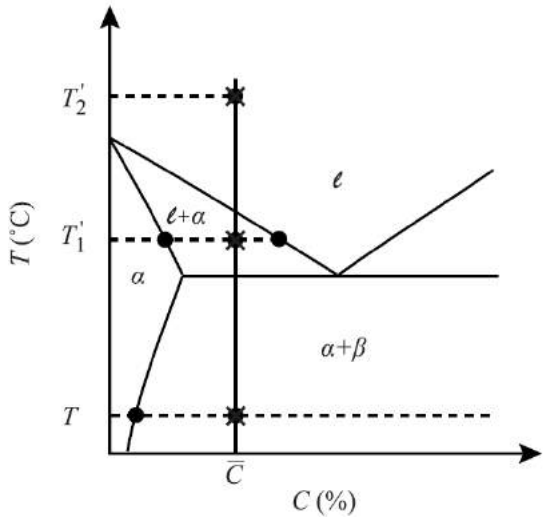
ژوهانسون[2] و همکارانش [۴۹] پیشنهاد کردند که محلول‌های جامد نهایی α و β می‌توانند بالای محدوده‌های منحنی‌های $T_{0\alpha}$ و $T_{0\beta}$ تشکیل شوند (به عبارت دیگر در درون محدوده‌های چندریختی نمودار فازی α و β). محلول‌های تشکیل شده در خارج از این محدوده، فوق گرمایش شده‌اند و برخلاف بی‌شکل شدن یا ذوب شدن ناپایدار هستند. ترکیبات بین فلزی با محدوده‌های همگن تعادلیِ گسترده (محدوده‌های چندریختی پهن در شکل ۹-۲۱) و انرژی فصل مشترک پایین با فازهای محلول α و محلول β، به شرط آن‌که جنبه‌های جنبشی رشد با سرعت‌های بالا را مجاز کند، در آبشار تشکیل می‌شوند. ترکیباتی با محدوده‌ی همگنی باریک و سلول واحد منظم شده‌ی شیمیایی پیچیده نباید تشکیل شوند. در پایان، فازهای بی‌شکل زمانی که سطح مقطع ترکیبی القایی یونی $C_B(z)$ در خارج از محدوده‌ی چندریختی فازهای بلورین قرار بگیرد، مورد انتظار هستند. بی‌شکل‌سازی هم‌چنین ممکن است که زمانی که محدوده‌های چندریختی، تشکیل ترکیب را مجاز می‌کنند؛ اما جنبش‌شناسی تشکیل ترکیب یا رشد آرام باشد رخ دهد.

1. Polymorphic phase diagram
2. Johnson



شکل ۹-۲۱. (الف) نمودار ترکیب دوتایی از آلیاژ A_B. (ب) نمودار انرژی آزاد شماتیکی برای آلیاژ در دمای T_2. (ج) نمودار فاز چندریختی مطابق با نمودار فازی تعادلی در بخش (الف). نقطه‌چین‌ها قسمتی از نمودار فازی اصلی را نشان می‌دهند. خطوط پررنگ، خطوط T_0 هر فاز را نشان می‌دهند. خطوط T_0 مناطق تشکیل جامد چندریختی از حالت مایع را نشان می‌دهند. مناطق بیرونی منطبق بر حالت‌های مایع یا بی‌شکل (چندریختی) هستند [۴۹].

مارتین[1] [۵۰] یک نظریه‌ای برای بی‌شکل‌سازی پیشنهاد کرد که از نظر ماهیت شبیه به نظریه‌ی جانسون است. در این مدل برای به‌دست آوردن معادله‌ی نفوذی تغییر یافته در اثر پرتودهی، پرش‌های جابه‌جا کننده‌ی انحلال مجدد پس‌زنی تابشی بالستیکی را به پرش‌های فعال شده‌ی حرارتی اضافه شده است. اثر عملی پرتودهی این است که سیستمی با یک آرایش مفروض در دمای T و در غیاب پرتودهی در دمای T' پایدار است: $T' = T(1+\frac{D_B}{D'})$ که D' ضریب نفوذ فعال شده‌ی حرارتی و D_B ضریب نفوذ در برگیرنده‌ی اثرات بالستیکی است (شکل ۹-۲۲). نظریه پیش‌بینی می‌کند که پرتودهی آلیاژ تعادلی از دو فاز جامد در دمای T، می‌تواند دمای مؤثر را به T_1' یا تحت پرتودهی شدید به T_2' افزایش می‌دهد. در دمای T_1' آلیاژ پرتودیده‌ی در حالت پایدار ترکیبی از فازهای بی‌شکل و بلورین با ترکیب‌های متفاوت است. پرتودهیِ به اندازه‌ی کافی شدید برای افزایش دمای مؤثر به T_2' ممکن است آلیاژ بی‌شکل یکنواختی را تولید کند.



شکل ۹-۲۲. ترکیب‌های ممکن از آلیاژ تعادلی دو فازی تحت پرتودهی در دمای T. پرتودهی تا دمای مؤثر T_1' فازهای بی‌شکل و بلوری با ترکیبات مشابه را نتیجه می‌دهد، درحالی‌که پرتودهی بسیار شدید به یک دمای مؤثر T_2' فاز تکی یکنواخت بی‌شکل را نتیجه می‌دهد[۵۹].

1. Martin

۹-۷-۲ محدوده‌ی انحلال‌پذیری ترکیبات و دانسیته‌ی عیب بحرانی

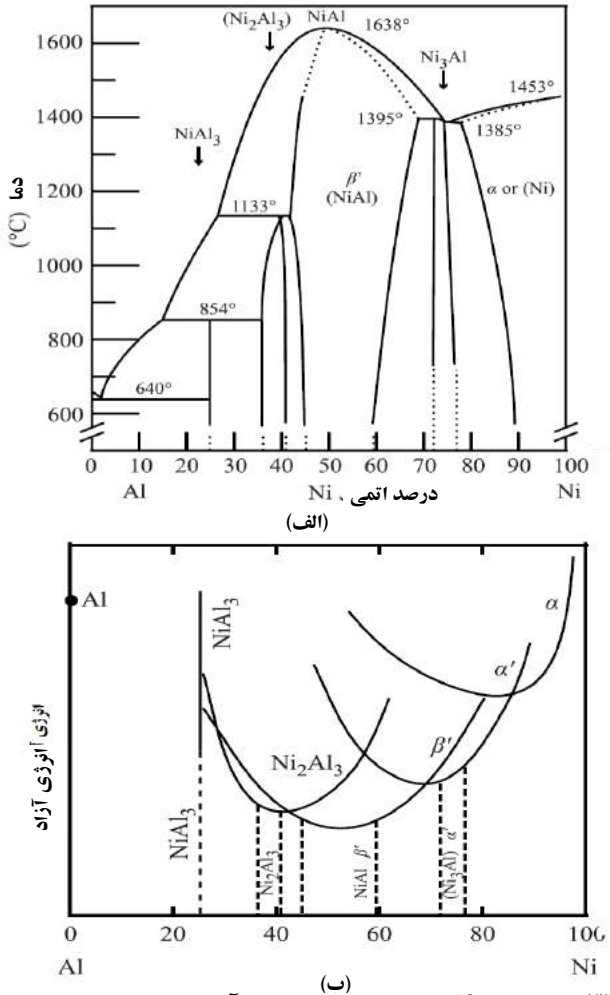
تمایل به بی‌شکل شدن ترکیبات بین فلزی به وسیله‌ی پرتودهی، به صورت منطقی با درجه‌ی انحلال‌پذیری در درون فازها وابسته است. یعنی آلیاژهایی با انحلال‌پذیری محدود یا محدوده‌ی ترکیبی باریک، تمایل بیش‌تری را برای استحاله‌ی بی‌شکل شدن نشان می‌دهند. این هم‌بستگی هم‌چنین مطابق با این مفهوم است که قبل از آن‌که استحاله‌ی بی‌شکل شدن بتواند رخ دهد، باید انرژی یا دانسیته‌ی عیب بحرانی ایجاد شود. اگر انرژی آزاد کلی حالت بلوری عیب‌دار بیش‌تر از حالت بی‌شکل شود، استحاله‌ی خودبه‌خودی باید رخ دهد. انرژی آزاد بحرانی همراه با غلظت عیب بحرانی است. اگر این غلظت عیب بحرانی تحت پرتودهی قابل دستیابی باشد، در نتیجه بلور به حالت انرژی آزاد پایین‌تر (بی‌شکل) منتقل می‌شود. این غلظت عیب بحرانی برای سیلیکون و ژرمانیوم در حدود ۰٫۰۲ تخمین زده شده است [۵۱]. تخمین غلظت عیب مورد نیاز برای بی‌شکل شدن می‌تواند بر پایه‌ی افزایش در انرژی آزاد شبکه در تشکیل یک جفت فرانکل پایدار حاصل شود. هر جفت فرانکل انرژی آلیاژ را تقریباً برابر با آنتالپی تشکیل عیب، $\Delta H_{\text{i-v}}$ افزایش می‌دهد. غلظت جفت‌های جای خالی ـ بین‌نشینی، $C_{\text{i-v}}$ لازم برای افزایش انرژی آلیاژ به وسیله‌ی $\Delta H_{\text{c-a}}$ ، از رابطه‌ی زیر تخمین زده می‌شود:

$$\Delta H_{\text{c-a}} = C_{\text{i-v}} \Delta H_{\text{i-v}} \,. \qquad (۶۹-۹)$$

بزرگی $\Delta H_{\text{i-v}}$ برای یک فلز fcc تقریباً برابر با ۵ eV است، و $\Delta H_{\text{c-a}}$ تقریباً برابر با ۰٫۶ eV در هر اتم است [۱۶]، که غلظت جای خالی ـ بین‌نشینی بحرانی لازم برای بی‌شکل شدن تقریباً برابر با ۰٫۰۱ را نتیجه می‌دهد. به هرجهت چنین سطوحی در دماهای ترکیبات هسته رآکتور ممکن نیستند؛ اما ممکن است که در تجربیات آزمایشگاهی انجام شده در دماهایی که جاهای خالی متحرک هستند، قابل دستیابی باشد.

ارتباط بین دانسیته‌ی عیب و درجه‌ی انحلال‌پذیری با ارجاع به نمودار انرژی آزاد در شکل ۹-۲۳ فهمیده می‌شود. ترکیباتی با محدوده‌ی ترکیبی محدود یا بدون محدوده‌ی ترکیبی افزایش بیش‌تری را در انرژی آزاد از ترکیباتی با محدوده‌ی ترکیبی پهن تحمل می‌کنند. افزایش بیش‌تر در انرژی آزاد به علت ناتوانی حضور ترکیب در تعادل در بیرون از محدوده‌ی ترکیبی انتخاب شده است. این در افزایش باریک و سریع انرژی آزاد برحسب منحنی‌های ترکیب آشکار شده است. برای فازهای منظم

(بین‌فلزی‌ها)، افزایش فقط ناشی از عیوب نقطه‌ای نیست، و ممکن است که ناشی از عیوب ضد موقعیت در نواحیِ به صورت موضعی غیراستوکیومتری است. این قانون انحلال‌پذیری پیشنهاد شده با تحلیل ترمودینامیکی جوهانسون[1] بسیار سازگار است [۴۹]. لازم به ذکر است که برای $NiAl_3$، فقط انحراف کوچکی از استوکیومتری لازم است تا افزایش بسیار بزرگی در انرژی آزاد نتیجه شود. بنابراین، دانسیته‌ی بحرانی عیب ضد موقعیت ممکن است که برای $NiAl_3$ در مقایسه با NiAl کم‌تر باشد.



شکل ۹-۲۳. نمودار فازی Ni-Al (الف) با نمودار انرژی آزاد فرضی (ب) در دمای پرتودهی[۱۹].

1. Johnson's thermodynamic analysis

عیوب ضد شبکه یک نقش بحرانی در فرایند بی‌شکل شدن ایفا می‌کنند زیرا محاسبات نشان داده است که رسیدن به دانسیته‌ی عیب بحرانی محاسبه شده برای عیوب نقطه‌ای تکی ممکن است دشوار باشد. به هرجهت، از آن‌جایی که غلظت عیب به شدت وابسته به تحرک اتم‌ها است و این تا حد زیادی در ترکیبات بین فلزی ناشناخته مانده است، تعیین تخمین‌های دقیق از غلظت عیب دشوار است. به علاوه دانسیته‌ی عیب بحرانی به شدت وابسته به دما خواهد بود و در دماهای بالاتر غلظت‌های بالاتر مورد نیاز است.

تأیید بیش‌تر برای وجود دانسیته‌ی عیب بحرانی، با بررسی ترکیباتی که در طول پرتودهی بی‌شکل شده‌اند و هیچ‌گونه مدرکی مبنی بر تشکیل حلقه‌ی نابجایی قبلی نشان ندادند، فراهم شده است [۲۵، ۵۲]. اگرچه فرض شده است که رسیدن به غلظت عیب بحرانی منجر به استحاله‌ی بی‌شکل شدن می‌شود، انرژی آزاد بالای مرتبط با عیوب نقطه‌ای نیز می‌تواند از طریق تشکیل یک ساختار نابجایی به واسطه‌ی تجزیه‌ی خوشه‌های بین‌نشینی و جای خالی به داخل حلقه‌های کوچک آزاد شود. به هرجهت، مشاهدات نشان می‌دهد که مواد یا به صورت مستقیم به حالت بی‌شکل استحاله می‌یابند یا حلقه‌های نابجایی را تشکیل می‌دهند.

از آن‌جایی که تحرک بیش‌تر برای تشکیل حلقه‌های نابجایی مورد نیاز است، و بیشینه‌ی غلظت عیب وابسته به جوانه‌زنی حلقه‌ها در فلزات پرتودیده تقریباً برابر با $۱۰^{-۴}$ [۵۳] است (تقریباً دو برابر کم‌تر از بی‌شکل شدن)، مشخص شده است که تحرک عیب ضریب کلیدی در فرایند بی‌شکل شدن است. این مشاهدات با سهولت بی‌شکل شدن در بین فلزی‌ها که تحرک عیب پایین است، و تشکیل ترجیحی حلقه‌های نابجایی در فلزات خالص و آلیاژهای محلول جامد که تحرک عیب بالا است سازگار است.

۹-۷-۳ ترمودینامیک و جنبش‌شناسی بی‌شکل شدن

از بسیاری از جنبه‌ها، استحاله‌ی $C \rightarrow A$ (بلوری به بی‌شکل) می‌تواند با ارتباط آن با ذوب به واسطه تشابه این استحاله‌ها بررسی شود. برای مثال، مشخص شده است که بی‌شکل شدن در یک شیوه‌ی ناهمگن مشابه با مشخصات جوانه‌زنی مرتبه‌ی اول و مشخصه‌ی فرایند رشد ذوب شدن رخ می‌دهد. هم‌چنین مطالعات پراکنش بریلوین[1] نشان داده است که مشابه با چیزی که در آغاز ذوب شدن بسیاری از فلزات مشاهده می‌شود، بین فلزی‌ها یک نرم‌شدگی را در ضریب برشی متحمل می‌شوند.

1. Brillouin

در نتیجه استحاله‌ی C→A می‌تواند به منزله‌ی یک نوع استحاله‌ی ذوب شدن در نظر گرفته شود. اوکوماتو[1] و همکارانش [۵۴] یک بررسی فشرده‌ای را از فیزیک استحاله‌ی فازی بلورین به بی‌شکل را منتشر کردند. نقش پرتودهی در این استحاله نیز در مقاله‌ی آن‌ها نشان داده شده است که در این قسمت ارایه می‌شود.

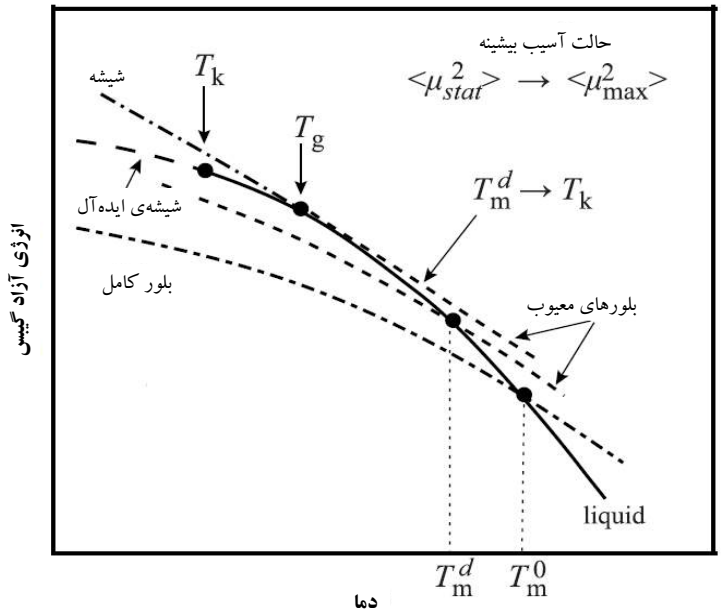
تحول مایع به شیشه‌ای شدن به وسیله‌ی دمایی مشخص می‌شود که دمای تحول شیشه‌ای T_g نامیده می‌شود. تحول شیشه‌ای شدن تحول فازی ترمودینامیکی نیست. تحول شیشه‌ای شدن بیش‌تر از عامل جنبشی وابسته به مقیاس زمانی مشاهدات است. منحنی‌های انرژی آزاد تحول شیشه‌ای شدن برای بلورهایِ کامل و نقص‌دار در شکل ۹-۲۴ نشان داده شده است. بلور کامل با خط پایینی نشان داده می‌شود و بلور عیب‌دار به وسیله‌ی خط‌چین‌ها نشان داده می‌شوند که انرژی‌های آزاد بالاتری را دارند. دماهای ذوب به ترتیب به وسیله‌ی T_m^0 و T_m^d مشخص می‌شوند.

هم‌چنین نشان داده شده است که دو دمای تحول شیشه‌ای شدن، T_g مطابق با حالت شیشه‌ای غیرآرمیده[2] است و T_k مطابق با دمای تحول شیشه‌ای ایده‌آل است. از آن‌جایی که دمای تحول شیشه‌ای شدن وابسته به زمان است، فرض شده است که تعدادی دمای T_k وجود داشته باشد که تحول هرگز در زیر آن رخ ندهد و به جای دمای شیشه‌ای شدن ایده‌آل در نظر گرفته می‌شود. لازم به ذکر است که این نقاط در انرژی‌های آزاد بالاتری از بلور کامل یا بلور معیوب قرار گرفته‌اند.

همان‌طوری که به وسیله‌ی اوکوماتو و همکارانش [۵۴] تشریح شده است، یکی از ساده‌ترین مدل‌های ذوب، مدل لیندمان[3] [۵۵] است که پیشنهاد می‌کند که بلورها هنگامی که جذر میانگین (rms) جابه‌جایی حرارتیِ، $\left\langle \delta_{vib}^2 \right\rangle^{1/2}$، اتم‌ها از موقعیت‌های تعادلیشان به اندازه‌ی کافی برای رسیدن به نزدیک‌ترین همسایه بزرگ باشد یا هنگامی ذوب می‌شوند که دامنه‌ی نوسان در حدود ۵۰٪ فواصل درون اتمی است.

در نتیجه، ذوب شدن هنگامی رخ می‌دهد که $\left\langle \delta_{vib}^2 \right\rangle^{1/2} / r_{nn}$ به یک مقدار بحرانی برابر با کسری از $\left\langle \delta_{crit}^2 \right\rangle^{1/2} / r_{nn}$ از نزدیک‌ترین فاصله‌ی همسایه r_{nn} می‌رسد.

1. Okamoto
2. unrelaxed
3. Lindemann



شکل ۹-۲۴. منحنی شماتیک انرژی آزاد گیبس به صورت تابعی از دما برای بلور کامل، فاز مایع و دو فاز بلوری معیوب. T_m^0 و T_m^d به ترتیب دماهای ذوب تعادلی بلورهای کامل و معیوب هستند، T_g دمای تحول جنبشی شیشه‌ای شدن برای فاز شیشه‌های تحریک شده است و T_k دمای تحول شیشه‌ی ایده‌آل است [۵۴].

در مدل هم آهنگ دبای[1] از شبکه‌های بلوری، میانگین مجذور جابه‌جایی حرارتی برای بلور کامل در دمای T بالای دمای دبای، Θ_0 برابر است با:

(۷۰-۹)

$$\langle \delta^2_{vib} \rangle = \frac{36\pi^2\hbar^2 T}{Mk\Theta_0^2} ,$$

که $\hbar$ ثابت پلانک ، k ثابت بولتزمان و M جرم اتمی است. از آن‌جایی که ذوب هنگامی رخ می‌دهد که $\langle \delta^2_{vib} \rangle$ به یک مقدار بحرانی برسد، در نتیجه از معادله‌ی ۹-۷۰ دمای ذوب بلور کامل برابر است با:

1. Harmonic debye model

(۷۱-۹)

$$T_{\mathrm{m}}^{0}=\frac{Mk\Theta_{0}^{2}}{36\pi^{2}\hbar^{2}}\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^{2}\right\rangle .$$

میانگین مجذور کلی جابه‌جایی اتمی، ترکیبی از مؤلفه‌های حرارتی $\left\langle\delta_{\mathrm{vib}}^{2}\right\rangle$ و ایستایی $\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^{2}\right\rangle$ است که آخری ناشی از ساختارهای عیب مانند عیوب نقطه‌ای، عیوب ضد شبکه، عدم تطابق میان ماده‌ی حل شده، اتم‌های حلال در محلول جامد، خوشه‌های عیب و ناخالصی‌ها است. شکل کلی معیار ذوب لیندمان به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۷۲-۹)

$$\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^{2}\right\rangle=\left\langle\delta_{stat}^{2}\right\rangle+\left\langle\delta_{\mathrm{vib}}^{2}\right\rangle ,$$

که $\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^{2}\right\rangle$ یک ثابت است. با ارجاع به شکل ۹-۲۴، این معیار نشان می‌دهد که بلور هم با حرارت دادن آن تا دمای ذوب، (T_{m}^{0} یا با افزایش مقدار بی‌نظمی ایستایی $\left\langle\delta_{\mathrm{vib}}^{2}\right\rangle=\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^{2}\right\rangle$) در بلور $\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^{2}\right\rangle$ تا برابر شدن انرژی آزاد با انرژی آزاد مایع ، ذوب می‌شود. هم‌چنان که سطح آسیب افزایش می‌یابد، دمای ذوب بلور معیوب، $T_{\mathrm{m}}^{\mathrm{d}}$ که به صورت تقاطع منحنی انرژی آزاد با منحنی انرژی آزاد برای مایع فوق سرد شده تعریف شده است، همان‌طوری تغییر می‌کند که در شکل ۹-۲۴ نشان داده شده است.
بیشینه‌ی حالت آسیب هنگامی رخ می‌دهد که منحنی انرژی آزاد بلور معیوب به منحنی انرژی آزاد مایع فوق تبرید شده مماس می‌شود، که با خط‌چین‌های بالایی در شکل ۹-۲۴ نشان داده شده است.
حالت بیشینه‌ی آسیب، $\left\langle\delta_{\mathrm{vib}}^{2}\right\rangle=\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^{2}\right\rangle$ است، یا هر جا $T_{\mathrm{m}}^{\mathrm{d}}=0$ باشد، برابر با حد بالای نظریه‌ی فوق برای انباشت آسیب در بلور معیوب است. شکل ۹-۲۵ یک منحنی ذوب چندریختی برای بلور معیوب را نشان می‌دهد که در آن $\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^{2}\right\rangle$ نشان دهنده‌ی مجموع کلی اثر تمام عیوب در بلور است. ناحیه‌ی خطی از معادله‌ی ۹-۷۲ تبعیت می‌کند. در طول منحنی ذوب که $T=T_{\mathrm{m}}^{\mathrm{d}}$ است، معادله‌ی ۹-۷۲ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۷۳-۹)

$$\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^{2}\right\rangle=\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^{2}\right\rangle+\frac{36\pi^{2}\hbar^{2}T_{\mathrm{m}}^{\mathrm{d}}}{Mk\Theta_{0}^{2}} ,$$

که به صورت زیر در شکل معادله‌ی ۹-۷۱ نوشته می‌شود:

$$T_{\mathrm{m}}^{\mathrm{d}}=\frac{Mk\Theta_0^2}{36\pi^2\hbar^2}\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^2\right\rangle\ , \tag{۹-۷۴}$$

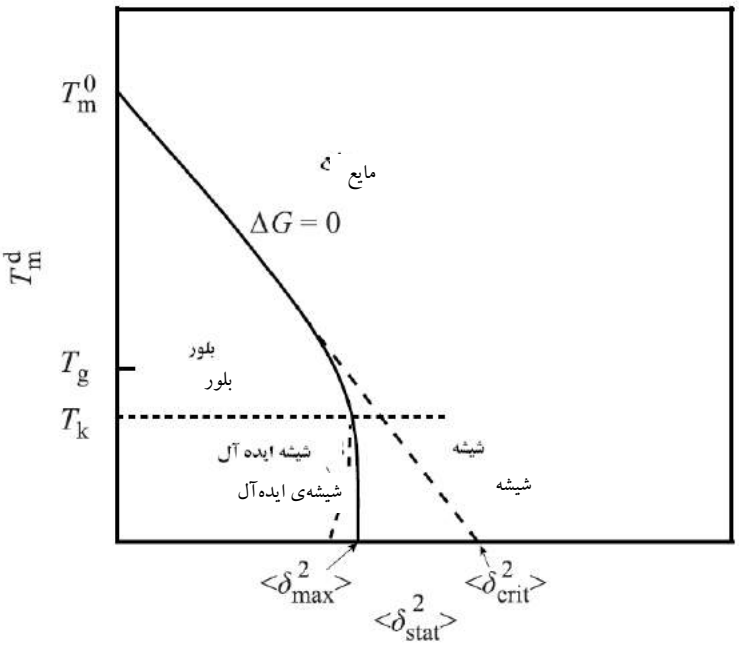
که دمای دبای بلور معیوب، Θ_{d} به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$\Theta_{\mathrm{d}}^2=\Theta_0^2\left(1-\frac{\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^2\right\rangle}{\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^2\right\rangle}\right)\ . \tag{۹-۷۵}$$

در بلور کامل، $\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^2\right\rangle\to 0$، $\Theta_{\mathrm{d}}^2\to\Theta_0^2$، و $T_{\mathrm{m}}^{\mathrm{d}}\to T_0^{\mathrm{d}}$ میل می‌کند. لازم به ذکر است که معادله‌ی ۹-۷۴ نشان می‌دهد که تناسب بین دمای ذوب و $\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^2\right\rangle$، شکل ۹-۲۵، وابسته به دمای دبای مشخص شده در معادله‌ی ۹-۷۵ است. هم‌چنین از آن‌جایی که Θ_{d}^2 متناسب با ضریب برشی، μ_{d} است، کاهش خطی در دمای ذوب به این معنی است که کاهش ضریب برشی القا شده در اثر بی‌نظمی با وابستگی تابعی مشابه به $\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^2\right\rangle$ رخ می‌دهد. از این تناسب‌ها می‌توان نوشت:

$$\frac{T_{\mathrm{m}}^{\mathrm{d}}}{T_{\mathrm{m}}^{0}}=\frac{\mu_{\mathrm{d}}}{\mu_0}=\frac{\Theta_{\mathrm{d}}^2}{\Theta_0^2}=\left(1-\frac{\left\langle\delta_{\mathrm{stat}}^2\right\rangle}{\left\langle\delta_{\mathrm{crit}}^2\right\rangle}\right)\ . \tag{۹-۷۶}$$

اگر این امکان وجود داشته باشد که عیوب ایجاد شده با پرتودهی را به مجذور میانگین جابه‌جایی در جامد ارتباط داد، در نتیجه می‌توان معادله‌ی ۹-۷۶ را به صورت مستقیم برای تعیین مقیاس بی‌شکل شدن استفاده کرد. از آن‌جایی که این امر امکان‌پذیر نیست، دو راه دیگر برای تعیین مقیاس بی‌شکل شدن وجود دارد. یکی از طریق بی‌نظم شدن و دیگری از طریق تغییر انرژی آزاد است.



شکل ۹-۲۵. منحنی کلی T_0 نشان دهنده‌ی شماتیکی اثرات ایستایی بی‌نظمی اتمی که به وسیله‌ی $\left\langle \delta^2_{stat} \right\rangle$، در دمای ذوب بلور معیوب، T_m^d اندازه‌گیری شده است. $\left\langle \delta^2_{max} \right\rangle$ و $\left\langle \delta^2_{crit} \right\rangle$ مقادیر بحرانی $\left\langle \delta^2_{stat} \right\rangle$ برای ذوب ترمودینامیکی و مکانیکی هستند [۵۴].

بی‌شکل‌سازی القایی تابشیِ تحریک شده به وسیله‌ی بی‌نظمی

یادآوری می‌شود که در قسمت ۹-۶، مشخص شد که انرژی بی‌نظمی باید برای تحریک استحاله‌ی $A \rightarrow C$ کافی باشد. در حقیقت، نظریه‌ی سرعت شیمیاییِ استحاله‌ی نظم ـ بی‌نظمی القایی تابشی می‌تواند برای تعیین دمای حدی بررسی شود که در زیر آن بی‌شکل‌سازی رخ می‌دهد. در این مدل [۵۶]، نرخ تغییر در عامل نظم بلند دامنه عبارت بی‌نظمی ناشی از پرتودهی و عبارت تجدید نظم حرارتی را در بر می‌گیرد، مشابه با مورد موجود در بخش ۹-۳ داریم:

$$\frac{dS}{dt} = -\varepsilon K_0 S + \nu \exp\left(\frac{-U}{kT}\right)\left[C_A(1-C_A)(1-S)^2 - \exp\left(\frac{-V}{kT}\right)\left(S + C_A(1-C_A)(1-S)^2\right)\right] \qquad (۷۷-۹)$$

که U سد انرژی برای تبادل جفت A – B است، V انرژی منظم شدن است به صورتی که $V = V_{AB} - 1/2(V_{AA} + V_{BB})$ که V_{AB}، V_{AA} و V_{BB} به ترتیب انرژی‌های پیوندی برای جفت‌های A–B، A–A و B–B هستند و عبارت‌های باقی‌مانده در قسمت ۹–۳ تعریف شده‌اند. عبارت اول، نرخ بی‌نظمی القایی تابشی است و عبارت دوم و سوم نرخ‌های تجدید نظم حرارتی و بی‌نظمی هستند. در شکل ۹–۲۶ یک مثال از تغییر نظم بلند دامنه با دما در سیستم CuTi همراه با تغییر مقدار پرتوگیری بی‌شکل شدن با دما نشان داده شده است. لازم به ذکر است که در دمای حدوداً زیر ۵۳ ^{o}C–، عامل نظم تا صفر کاهش می‌یابد. این دمای حدی، T_C است که منطبق با آغاز بی‌شکل شدن، $T_{c\text{-}a}$ است. فقط در بالای دمای حدی، dS/dt تقریباً برابر با صفر است و ارتباط بین دمای حدی و نرخ آسیب، K_0 می‌تواند با برابر قرار دادن dS/dt در معادله‌ی ۹–۷۷ معادل با صفر نوشته شود:

(۹–۷۸)

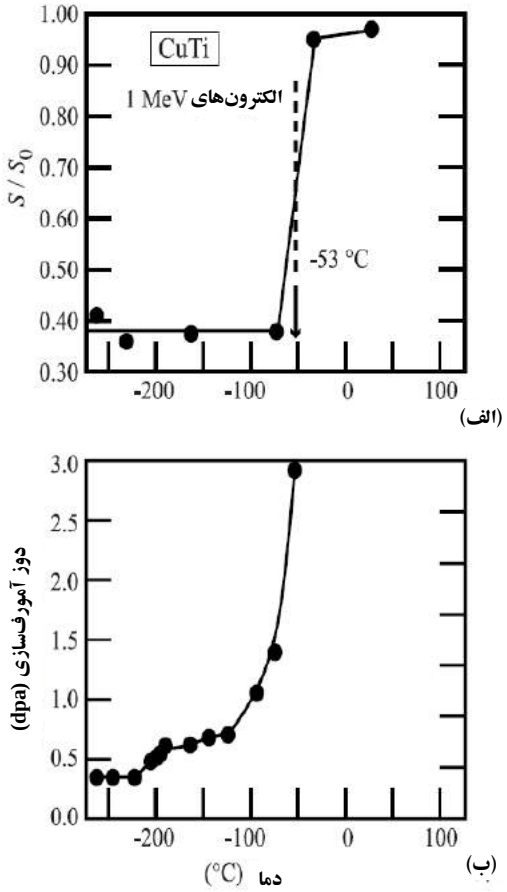
$$\varepsilon K_0 S_0 = \nu \exp\left(\frac{-U}{kT_C}\right)\left[C_A(1-C_A)(1-S_0)^2 - \exp\left(\frac{-VS_0}{kT}\right)\left(S_0 + C_A(1-C_A)(1-S_0)^2\right)\right],$$

که S_0 مقدار حالت پایدار عامل نظم بلند دامنه است. برای مقادیر نمونه‌واری از V، توان داخل کروشه‌ها در حدود 10^{-5} تا 10^{-21} است و در نتیجه عبارت دوم می‌تواند نادیده گرفته شود و عبارت موجود در معادله‌ی ۹–۷۸ می‌تواند برای T_C حل شود:

(۹–۷۹)

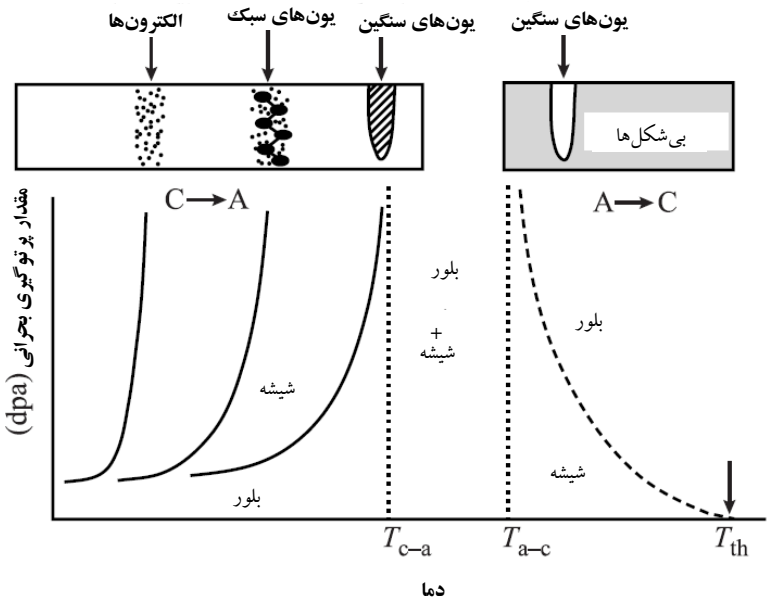
$$T_C = U\left[k \ln\left(\frac{\nu C_A(1-C_A)(1-S_0)^2}{\varepsilon K_0 S_0}\right)\right]^{-1}.$$

معادله‌ی ۹–۷۹ تخمینی از دمای حدی یا دمای $T_{c\text{-}a}$ برای یک جامد تحت پرتودهی را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که این دما وابسته به نرخ جابه‌جایی و هم‌چنین تعداد جایگزینی‌ها در هر جابه‌جایی، ε است. در نتیجه دمایی که در آن بی‌شکل شدن رخ خواهد داد، وابسته به ذره‌ی تابشی و نرخ پرتوگیری خواهد بود.



شکل ۹-۲۶. وابستگی دمایی (الف) ضریب نظم بلند دامنه‌ی S/S_0، و (ب) مقدار پرتوگیری بحرانی بی‌شکل‌سازی برای CuTi، پرتودهی شده با الکترون‌هایی با انرژی ۱ MeV [۵۴].

شکل ۹-۲۷ یک نمایش شماتیک از وابستگی دمایی مقدار پرتوگیری بحرانی برای بی‌شکل‌سازی برای انواع مختلفی از ذرات باردار را نشان می‌دهد. $T_{c\text{-}a}$ دمایی است که در زیر آن بی‌شکل‌سازی کامل قابل دستیابی است. $T_{a\text{-}c}$ دمایی است که بالای آن ترکیب بلوری نمی‌تواند بی‌شکل شود و مستقل از شرایط پرتودهی است و T_{th} دمای تبلور مجدد حرارتی است. اوکاماتو و همکارانش [۵۴] ترکیب‌های جنبشی اصلیِ بی‌شکل شدن القایی تابشی را به صورت زیر تشریح کردند:



شکل ۹-۲۷. نمایش شماتیک از وابستگی دمایی مقدار پرتوگیری بحرانی برای بی‌شکل شدن برای پرتودهی به وسیله‌ی انواع مختلفی از ذرات [۵۴].

- برای ذره و نرخ مقدار پرتوگیری مشخص، دمایی وجود دارد که در آن دو فرایند رقابتیِ تولید آسیب و بازیابی به تعادل می‌رسند. در زیر آن دما، تولید آسیب بر بازیابی غالب می‌شود و بلور به صورت کامل بی‌شکل می‌شود.
- بی‌شکل شدن در دماهای پایین، دور از نرخ مقدار پرتوگیری و دمای بحرانی، به صورت همگن رخ می‌دهد. بی‌شکل‌سازی ناهمگن نزدیک به دمای حدی رخ می‌دهد.
- برای نرخ مقدار پرتوگیری ثابت، $T_{c\text{-}a}$ با افزایش جرم ذره افزایش می‌یابد.
- $T_{c\text{-}a}$ ضریب جنبشی است که وابسته به متغیرهای پرتودهی مانند نرخ مقدار پرتوگیری است. نرخ‌های مقدار پرتوگیری بالاتر $T_{c\text{-}a}$ را به مقادیر بالاتر انتقال می‌دهند.

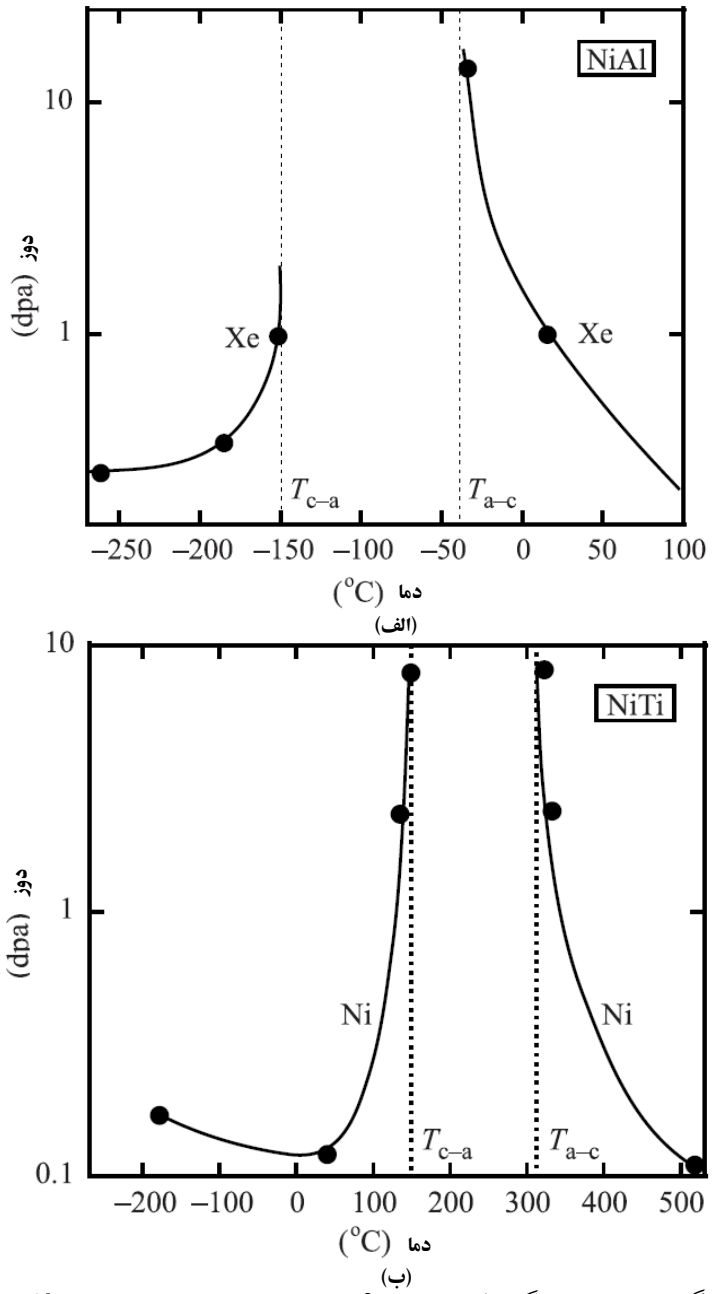
- دمای $T_{a\text{-}c}$ وجود دارد که بالای آن بی‌شکل شدن غیرممکن است. $T_{a\text{-}c}$ وابسته به دمای هدف و نه متغیرهای پرتودهی است.
- بین $T_{a\text{-}c}$ و T_{th}، پرتودهی می‌تواند استحاله‌ی $A \rightarrow C$ را القا کند و مقدار پرتوگیری مورد نیاز برای استحاله وابسته به مقدار پرتوگیری است.

شکل ۹-۲۸ الف،ب دو مثال از وابستگی دمایی بی‌شکل‌سازی القایی تابشی را به ترتیب در NiAl و NiTi نشان می‌دهد. شکل ۹-۲۹ نشان می‌دهد که چگونه $T_{c\text{-}a}$ در نرخ‌های مقدار پرتوگیری تقریباً برابر با نوع ذره تغییر می‌کند. روشن است که پرتودهی با یون‌های سنگین می‌تواند بی‌شکل شدن را در محدوده‌ی دمایی بزرگ‌تری از پرتودهی با الکترون‌ها القا کند زیرا یون‌ها می‌توانند انرژی بسیار بیش‌تری در حجم بسیار کوچک‌تر از انرژی انتقالی از طریق الکترون‌ها منتقل می‌کنند. درحالی‌که پرتودهی الکترونی در محدوده‌ی تقریباً MeV، جابه‌جایی‌های منفرد (جفت‌های فرانکل تکی) را تولید می‌کنند، پرتودهیِ یون سنگین منجر به آبشارهایی می‌شود که در آن نرخ جابه‌جایی مؤثر به اندازه‌ای بالا است که نرخ آسیب بیش‌تر از نرخ بازیابی می‌شود.
با ارتباط فرایند منظم شدن به مجذور میانگین جابه‌جایی ایستایی، اوکاماتو و همکارانش [۵۴، ۵۷] نشان دادند که:

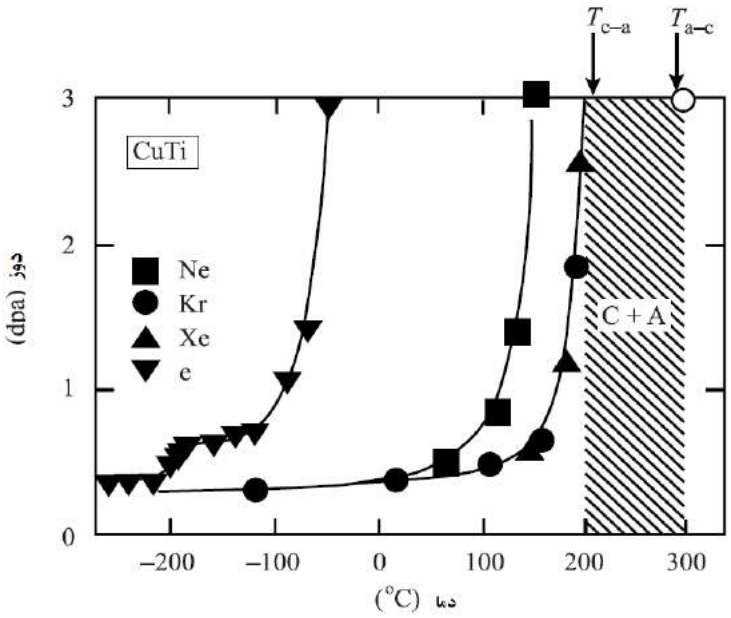
(۹-۸۰)

$$\left\langle \delta_{stat}^2 \right\rangle \alpha (1 - S^2) ,$$

و از آن‌جایی که از معادله‌ی ۹-۷۵، $\left\langle \delta_{stat}^2 \right\rangle$ متناسب با ضریب برشی، μ، است در نتیجه $\mu\alpha(1-S^2)$ است.



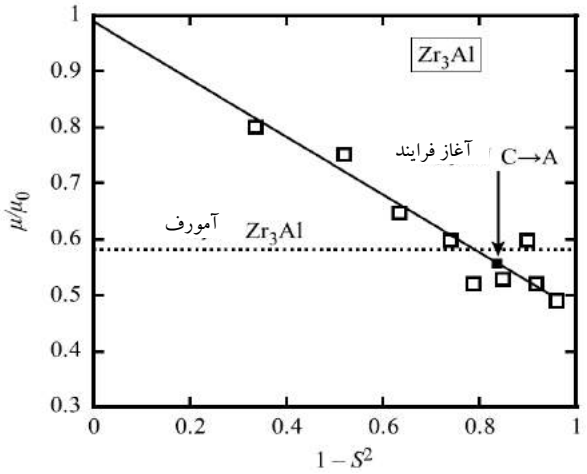
شکل ۹–۲۸. وابستگی دمایی مقدار پرتوگیری کلی برای بی‌شکل‌سازی القا شده‌ی یونی و تبلورِ (الف) NiAl بلورین و بی‌شکل، و (ب) NiTi بلورین و بی‌شکل [۵۴].



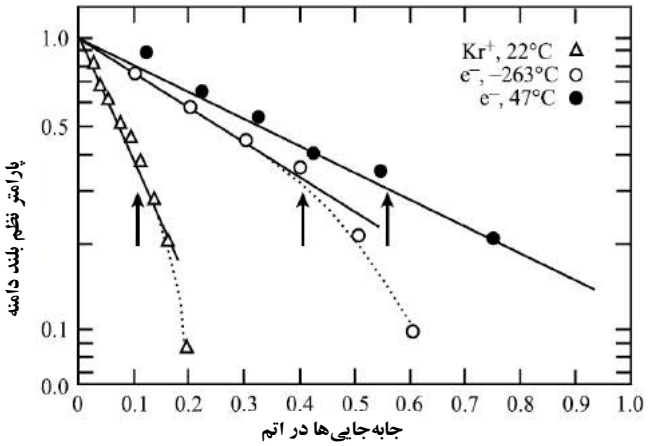
شکل ۹-۲۹. وابستگی دمایی مقدار پرتوگیری بی‌شکل‌سازی بحرانی برای CuTi در طول پرتودهی با الکترون‌های با انرژی ۱ MeV و یون‌های Ne، Kr و Xe با انرژی ۱ MeV، و در یک مقدار پرتوگیری 10^{-3} dpa/s [۵۴].

شکل ۹-۳۰ نشان می‌دهد بی‌شکل‌سازی Zr_3Al ، بسیار نزدیک به نقطه‌ای رخ می‌دهد که خط مستقیم منطبق بر اطلاعات خط افقی برای آلیاژ بی‌شکل را قطع می‌کند و نشان می‌دهد که آغاز بی‌شکل شدن مرتبط با مقدار بحرانی از میانگین مجذور بی‌نظمی شیمیایی $(1\text{-}S^2)$ و از معادله‌ی ۹-۸۰ میانگین مجذور جابه‌جایی ایستایی است. مثال دیگری از نقش بی‌نظمی در بی‌شکل شدن در شکل ۹-۳۱ نشان داده شده است که وابستگی مقدار پرتوگیری S برای Zr_3Al در طول پرتودهی با الکترون‌های MeV ۱ در دو دما و پرتودهی با یون‌ها در ^oC ۲۲ را مشخص می‌کند. آغاز بی‌شکل‌سازی با فلش نشان داده شده است و اگرچه این اتفاق برای ذرات و دماهای پرتودهی مختلف، در مقادیر پرتوگیری متفاوتی رخ می‌دهد، مقدار عامل نظم تقریباً مشابه است. اهمیت این مشاهده در این است که درحالی‌که علم جنبش‌شناسی بی‌نظم شدن بین ذرات و دماها متفاوت است، بی‌شکل شدن فقط وابسته به بزرگی S است و به چگونگی حصول آن بستگی ندارد. شکل ۹-۳۲ [۵۴، ۵۷]مثال دیگری از هم‌بستگی میان آغاز بی‌شکل‌سازی و جذر میانگین مربعات برای موردی را نشان می‌دهد که بور در درون نیوبیوم

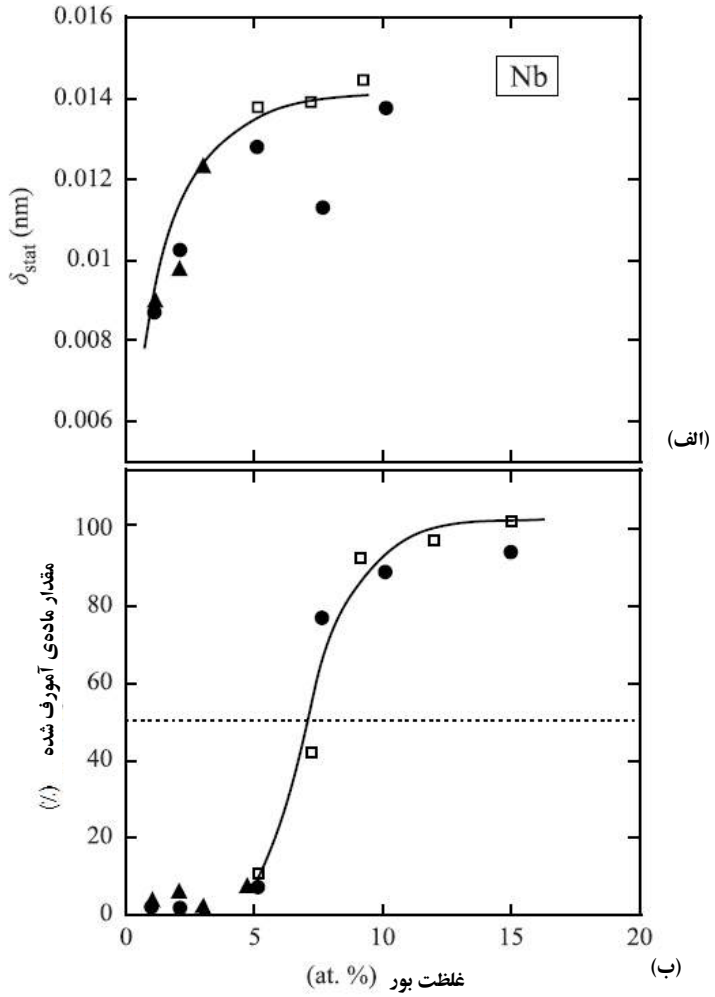
کاشته شده است. هنگامی که میانگین مجذور جابه‌جایی‌های ایستایی به یک مقدار بحرانی می‌رسد، بی‌شکل‌سازی رخ می‌دهد.



شکل ۹-۳۰. تغییر نسبی در ضریب برشی با افزایش درجه‌ی بی‌نظمی ($1-S^2$) در Zr_3Al پرتودهی شده با یون‌های Kr^+ MeV ۱. خط‌چین‌ها ضریب برشی نسبی در فاز بی‌شکل را نشان می‌دهند، و فلش عمودی آغاز بی‌شکل شدن را مشخص می‌کند [۵۴].



شکل ۹-۳۱. وابستگی مقدار پرتوگیری ـ آسیبِ عامل نظم بلند دامنه، S در Zr_3Al در طول پرتودهی با الکترون‌های MeV ۱ در دماهای K ۱۰ و K ۳۲۰ و با یون‌های Kr با انرژی MeV ۱ در دمای K۲۹۵[۵۴].



شکل ۹-۳۲. هم‌بستگی میان (الف) میانگین جابه‌جایی ایستایی، δ_{stat} و (ب) کسر حجمی فاز بی‌شکل برحسب غلظت اتم‌های B کاشته شده در نیوبیوم[۳۲].

بی‌شکل‌سازی القایی تابشیِ تحریک شده به وسیله‌ی انرژی آزاد

بی‌شکل‌سازی هم‌چنین می‌تواند با توجه به انرژی آزاد استحاله و همان‌طوری تشریح شود که به وسیله‌ی موتا[1] و همکارانش [۵۸، ۵۹] توضیح داده شد. معیار بی‌شکل‌سازی به این صورت است که تغییر انرژی آزاد در پرتودهی، ΔG_{irr} باید بیش‌تر از تغییر انرژی آزاد استحاله‌ی $C \rightarrow A$، ΔG_{ac} باشد:

1. Motta

$$\Delta G_{\text{irr}} \geq \Delta G_{\text{ac}} \, . \tag{۸۱-۹}$$

عبارت ΔG_{irr} تمام عیوب ایجاد شده با پرتودهی را دربر می‌گیرد و می‌تواند به صورت مجموع عبارت‌های نشان دهنده‌ی بی‌نظمی شیمیایی، ΔG_{dis} و تمام عیوب دیگر ΔG_{def} نوشته شود:

$$\Delta G_{\text{irr}} = \Delta G_{\text{def}} + \Delta G_{\text{dis}} = \sum_{j} (C_j E_j - T\Delta S_j) + \Delta C_{\text{AB}} NV - T\Delta S_{\text{dis}} \, , \tag{۸۲-۹}$$

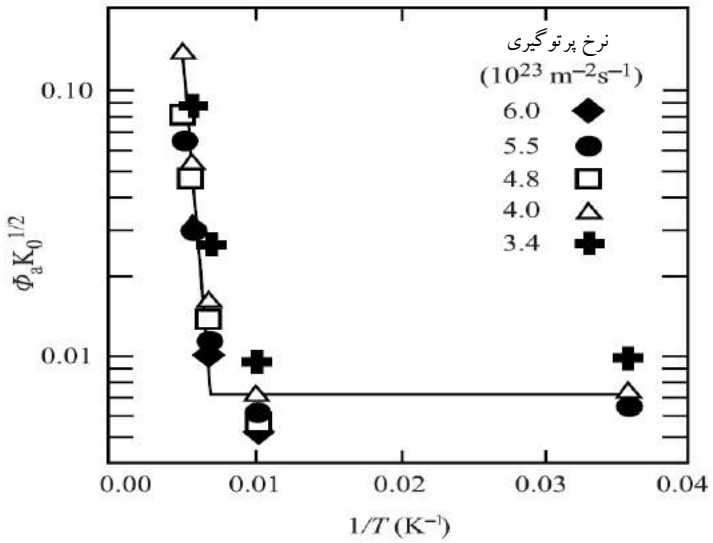
که C_j غلظت عیب j است، E_j انرژی تشکیل، V انرژی بی‌نظمی (قبلاً تعریف شده) و ΔS_j و ΔS_{dis} به ترتیب تغییر بی‌نظمی آرایشی ناشی از عیوب نقطه‌ای و عیوب ضد شبکه هستند. عبارت ΔC_{AB} تغییر در تعداد جفت‌های AB است و از عامل نظم بلند دامنه، S تعیین شده است. به صورتی که:

$$\Delta C_{\text{AB}} = N\left[A\left(1 - S^2\right) + B(1 - S)\right] \, , \tag{۸۳-۹}$$

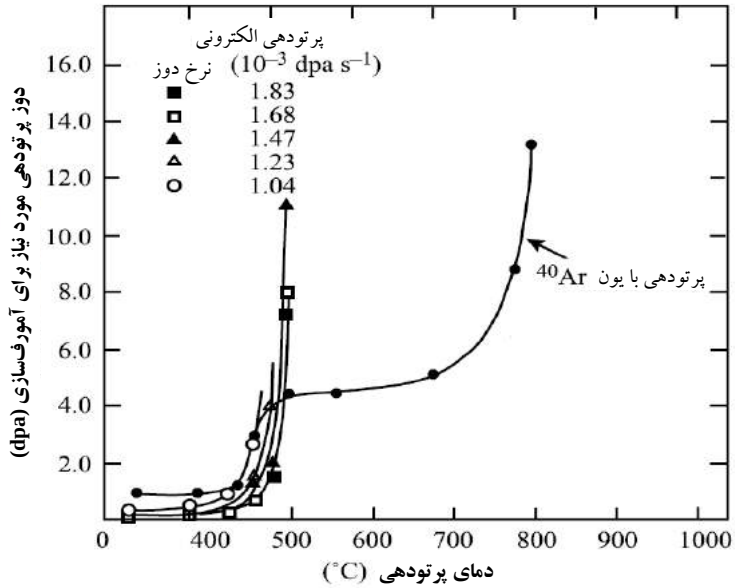
که N تعداد موقعیت‌های شبکه در مول و A و B کسرهای اتمی روی موقعیت‌های شبکه‌ی مربوطه در فاز منظم شده است. غلظت عیوب با معادلات تعادلی عیوب مشخص شده در معادله‌ی ۵-۱ تعیین می‌شوند. معادله‌های ۹-۸۱ ، ۹-۸۲ و ۹-۸۳ و ۵-۱ می‌تواند برای تعیین رابطه میان مقدار پرتوگیری بی‌شکل‌سازی، نرخ مقدار پرتوگیری و دما استفاده شوند. موتا این ارتباط را برای پرتودهی الکترونی Zr_3Fe تعیین کرد:

$$\Phi_{\text{a}} \, K_0^{1/2} = B \exp(-E_{\text{m}}^{\text{i}}/2kT) \, , \tag{۸۴-۹}$$

که Φ_{a} مقدار پرتوگیری تا بی‌شکل شدن، K_0 نرخ مقدار پرتوگیری ، E_{m}^{i} انرژی مهاجرت بین‌نشین‌ها و B ثابت است و مشخص شده است که نتایج نشان داده شده در شکل ۹-۳۳ در توافق خوبی با مشاهدات نشان داده شده در شکل ۹-۳۴ باشند.



شکل ۹-۳۳. منحنی مقدار پرتوگیری بی‌شکل‌سازی × ریشه‌ی دوم نرخ مقدار پرتوگیری برحسب $1/T$. خطوط بر اطلاعات منطبق هستند و مشخص می‌کند که دو منطقه وجود دارد، منطقه‌ی غیرحرارتی در دمای پایین و منطقه‌ی فعال شده حرارتی دردمای بالاتر [۵۸].



شکل ۹-۳۴. مقدار پرتوگیری بی‌شکل شدن برای Zr_3Fe در طول پرتودهی الکترونی و پرتودهی با Ar^+ [۵۸].

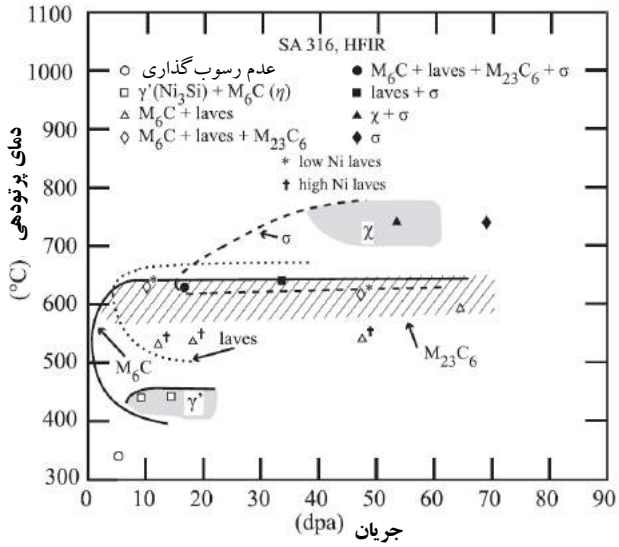
۹-۸ پایداری فازی در آلیاژهای سازنده‌ی قلب رآکتور

پایداری فازها در آلیاژهای مهندسی تحت پرتودهی بزرگ‌ترین چالش فنی است. فولادهای زنگ نزن به صورت گسترده‌ای در قلب سیستم‌های رآکتوری جاری و پیشرفته استفاده می‌شوند. مشاهده شده است که تعداد ۱۰ فاز فولاد زنگ نزن آستنیتی به وسیله‌ی پرتودهی تأثیر می پذیرند [۶۰، ۶۱، ۶۲]. این فازها می‌توانند در سه دسته تقسیم بندی شوند [۶۰]: *القایی تابشی*، *اصلاح شده‌ی تابشی و افزایشیِ تابشی*. جدول ۹-۲ فازهای متعلق به هر گروه به همراه توضیحات بلورشناسی و ریخت شناسی هر فاز را نشان می‌دهد. فازهای القایی تابشی شامل فازهای γ'، G و M_xP هستند و فقط تحت پرتودهی و نه تحت شرایط حرارتی ظاهر می‌شوند. گروه اصلاح شده‌ی تابشی شامل فازهایی است که در طول پیرسازی تابشی و حرارتی تشکیل می‌شوند و شامل $\eta(M_6C)$، لاوه و $M_2P(FeTiP)$ هستند. گروه افزایشیِ تابشی شامل فازهایی است که به صورت منظم درطول فرایندهای حرارتی تشکیل می‌شوند؛ اما هم‌چنین بسیار سریع یا به صورت بسیار فراوان در دماهای پایین در طول پرتودهی رآکتوری ایجاد می‌شوند. فازهای این گروه شامل کاربیدهای M_6C، $M_{23}C_6$ و MC و فازهای بین فلزی σ و χ هستند. شکل ۹-۳۵ یک نقشه‌ی دما ـ مقدار پرتوگیری را نشان می‌دهد که در آن فازهای مختلف لیست شده در جدول ۹-۲ تشکیل شده‌اند. لازم به ذکر است درحالی‌که تقریباً شارهای ۱۰ dpa برای ظاهر شدن این فازها مورد نیاز هستند، متغیر بسیار مهم دیگر دما است. در یک فولاد زنگ نزن ۳۱۶ بازپخت محلولی و کار سرد شده، مدارک کمی از رسوبات القایی تابشیِ قابل توجه در دمای کم‌تر از ۳۷۹^oC وجود دارد. تنها فاز تشکیل شده در این ناحیه، γ'-Ni_3Si است و آن هم در ترکیبات قلب رآکتورهای آب سبک و هم در پرتودهی پروتونی در ^oC ۳۶۰ مشاهده شده است [۶۳]. فاز γ' در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده در یک رآکتور سریع در دماهای پایین‌تر از ۲۷۰^oC نیز شناسایی شده است. بین ۴۰۰ و ۵۵۰ درجه‌ی سانتی‌گراد، γ'-Ni_3Si به آسانی در طول تابش‌های رآکتور سریع تشکیل می‌شود و در فولادهای با مقادیر بالای سیلیسیم و تیتانیوم بیش‌ترین فاز است. در رآکتورهای طیف مخلوط در این محدوده دمایی، فازهای ظریف غنی از Cr مانند $M_{23}C_6$ و M_6C در فولاد ضد زنگ ۳۱۶ تشکیل می‌شوند و فازهای MC غنی از Ti در فولادهای اصلاح شده‌ی تیتانیومی تشکیل می‌شوند [۶۰]. در محدوده‌ی دمایی ^oC ۵۰۰-۶۰۰ فازهای القایی تابشی و اصلاح شده‌ی تابشی، شامل فاز G

($M_6Ni_{16}Si_7$)، فازهای لاوه M_6C و فسفیدها[1] و سیلیسیدها[2] تشکیل می‌شوند. کسر حجمی فاز G تابعی از مقدار سیلیسیم، تیتانیوم و نیوبیوم فولاد است.

حضور این فازها می‌تواند به اثرات تابش روی پایداری فازی مرتبط باشد. بزرگ‌ترین اثر تابش روی رسوب‌گذاری در فولادهای ضد زنگ، به علت افزایش ماده‌ی حل شده از طریق جدایش القایی تابشی است. از فصل ۶ یادآوری می‌شود که پرتودهی فولادهای ضد زنگ آستنیتی منجر به غنی شدن سیلیسیم و نیکل در چاهک‌ها می‌شود و بسیاری از فازهای ظاهر شده تحت پرتودهی غنی از یکی از این دو عنصر هستند. نفوذ افزایشی تابشی، رسوبات MC را به وسیله‌ی افزایش رشد آن در مقایسه با شرایط تحت حرارت، تحت تأثیر قرار می‌دهد. درحالی‌که انتظار می‌رود که فازهای بزرگ اندازه، تحت پرتودهی بسیار پایدار باشند و فازهای کوچک اندازه پایداری کم‌تری را داشته باشند، از میان فازهای مشخص شده در جدول ۹-۲، سه فاز عدم انطباق‌های مثبت حداقل ۱۰٪ را دارند و از میان آن‌ها فقط M_6C در یک محدوده‌ی وسیعی از شرایط پرتودهی پایدار است. MC و $M_{23}C_6$ بزرگ اندازه هستند و از مزایای فوق اشباع جای خالی و هم‌چنین تهی شدن جزء سازنده‌ی اصلی آن‌ها، کروم، به علت جدایش القایی تابشی هستند. به صورت عکس، چندین فاز که کوچک اندازه هستند، تحت پرتودهی القا شده یا افزایش می‌یابند: لاوه، M_2P، γ'. به وضوح اثر جدایش ماده‌ی حل شده و دیگر مواد و عوامل پرتودهی یک نقش مهمی را در فازهایی ایفا می‌کنند که تحت پرتودهی پایدار هستند.

1. Phosphides
2. Silicides



شکل ۹-۳۵. وابستگی مقدار پرتوگیری و دمای تشکیل فاز رسوبی در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ بازپخت محلولی شده و پرتودهی شده در HFIR [۶۱].

جدول ۹-۲. فازهای مشاهده شده در فولاد زنگ آستنیتی بعد از پرتودهی نوترونی [۶۰، ۶۱].

تابشی	فاز	ساختار بلوری	پارامتر شبکه(nm)	ریخت‌شناسی آرایش در زمینه‌ی γ		عدم انطباق حجمی
– القا شده	γ' (Ni_3Si)	Cubic, A1 Fm3m	0.35	کروی	مکعبی برروی مکعبی	−0.1
	G ($M_6Ni_{16}Si_7$)	Cubic, A1	1.12	میله‌ای کوچک	تصادفی	0.05
	M_2P (FeTiP)	Hexagonal, C22, P321	0.6 ($c/a = 0.6$)	تخته‌ای نازک	$(1210)_{ppt}\|\|(001)_\gamma$	−0.4
	Cr_3P	Tetragonal, S_4^2 14	0.92 ($c/a = 0.5$)	–	–	~0
– اصلاح شده	η (M_6C)	Cubic, E9, Fd3M	1.08	رومبوهدرال	مکعبی برروی مکعبی یا دوقلویی	0.1
	Laves (A_2B)	Hexagonal, C14 $P6_3/mmc$	0.47 ($c/a = 0.77$)	تخته‌ای نقص‌دار	مختلف	−0.05
	M_2P (FeTiP)	〃	〃	〃	〃	〃
– افزایش یافته	MC	Cubic, B1 Fm3m	0.43	کروی	کروی	0.7
	η (M_6C)	〃	〃	〃	〃	〃
	τ ($M_{23}C_6$)	Cubic, $D8_4$ Fm3m	1.06	صفحات رومبوهدرال	مکعبی برروی مکعبی یا دوقلویی	0.1
	Laves (A_2B)	〃	〃	〃	〃	〃
	σ	Tetragonal, $D8_b$ p4/mnm	0.88 ($c/a = 0.52$)	مختلف	مختلف	~0
	χ	Cubic, A12 143m	0.89	مختلف	مختلف	0.05

نام‌گذاری اصطلاحات

a: ثابت شبکه

A: عبارت مرتبط با وابستگی ساختار بلوری به انرژی منظم شدن

C_{e}: غلظت ماده‌ی حل شده‌ی زمینه

C_i: غلظت گونه‌های i

C_{p}: غلظت ماده‌ی حل شده در رسوب

D: ضریب نفوذ

$\tilde{D}$: ضریب نفوذ درونی

E: ضریب یانگ

E_{m0}^{j}: انرژی مهاجرت برای منظم شدن عیب j

G: عبارت منبع ماده‌ی حل شده

ΔG_{p}: انرژی آزاد تشکیل یک رسوب

$\Delta G'$: شبه انرژی آزاد تشکیل یک رسوب

ΔG_{ac}: تغییر انرژی آزاد ناشی از بی‌شکل شدن

ΔG_{irr}: تغییر انرژی آزاد ناشی از پرتودهی

ΔG_{def}: تغییر انرژی آزاد ناشی از عیوب

ΔG_{dis}: تغییر انرژی آزاد ناشی از بی‌نظمی شیمیایی

$\hbar$: ثابت پلانک

ΔH_{f}: حرارت تشکیل

$\Delta H_{\mathrm{i\text{-}v}}$: آنتالپی تشکیل عیب

$\Delta H_{\mathrm{c\text{-}a}}$: آنتالپی برای استحاله‌ی بلوری به بی‌شکل

J_{p}: نرخ جوانه‌زنی رسوب

k: ثابت بولتزمان

k_0: ثابت سرعتی برای واکنش منظم شدن

k_{s}^{2}: شدت چاهک

K_{iv}: ثابت سرعت بازترکیبی

K_0: نرخ تولید عیب

L: اندازه‌ی سلول

M: جرم اتمی

n: تعداد اضافیِ جاهای خالی در یک رسوب

N: عدد دانسیته‌ی اتمی

p_x: احتمال آن‌که یک موقعیت تله به وسیله‌ی گونه‌ی x اشغال شود

Q: انرژی فعال‌سازی برای منظم شدن

r_c: شعاع آبشار

r_p: شعاع رسوب

r_j: شعاع بازترکیبی گونه‌ی j

r_{mn}: فاصله‌ی اتمی نزدیک‌ترین همسایه

R: نسبت اندازه‌ی فلز به شبه فلز

R_m: نرخ انحلال رسوب به وسیله‌ی اختلاط

R_s: نرخ رشد رسوب ناشی از افزایش نفوذ القایی تابشی

R: ثابت گازها

S: عامل نظم بلند دامنه

S_e: مقدار تعادلی عامل نظم

S_j: فوق اشباع گونه j

$S_{مشاهده شده}$: عامل نظم بلند دامنه‌ی مشاهده شده

S_0: مقدار حالت پایدار عامل نظم

S_v: فوق اشباع جای خالی

S_x: فوق اشباع ماده‌ی حل شده

ΔS_{dis}: تغییر آنتروپی آرایشی ناشی از عیوب ضد شبکه

ΔS_j: تغییر آنتروپی آرایشی ناشی از عیوب نقطه‌ای

t: زمان

T : دما

T_c : دمای برش

$T_{a\text{-}c}$: دمایی که بالای آن بلور نمی‌تواند بی‌شکل شود

$T_{c\text{-}a}$: دمایی که زیر آن بی‌شکل‌سازی کامل قابل حصول است

T_g : دمای استحاله‌ی شیشه‌ای شدن

T_k : دمای استحاله‌ی شیشه‌ی واقعی

T_m : دمای ذوب

U : سد انرژی برای واکنش منظم شدن

V : حجم، هم‌چنین عامل منظم شدن

V_0 : انرژی فعال‌سازی هنگامی که عامل نظم بلند دامنه‌ی S برابر با ۱ باشد

V_T : کاهش انرژی هنگامی که یک جفت A-B غیرصحیح به یک جفت A-B صحیح استحاله یابد

V_c : حجم آبشار

V_m : حجم مولار

V_{ij} : انرژی اتصال برای گونه‌های i و j

X : تعداد اتم‌های ماده‌ی حل شده در یک رسوب

X_j : کسر اتمی گونه‌های j

Z_α : تعداد موقعیت‌های α که نزدیک‌ترین همسایه‌ها به موقعیت β هستند

Z_β : تعداد موقعیت‌های β که نزدیک‌ترین همسایه‌ها به موقعیت α هستند

α : ثابت در معادله‌ی ۹-۲۲

α_j : نرخ نشر گونه‌های j

β : ثابت در معادله‌ی ۹-۲۱

β_j : نرخ به دام اندازی گونه‌های j

δ : تفاوت جزیی در حجم رسوب نسبت به زمینه

$\left\langle \delta_{crit}^2 \right\rangle^{1/2}$: مقدار بحرانی میانگین مجذور جابه‌جایی

$\left\langle \delta_{stat}^2 \right\rangle^{1/2}$: مقدار بی نظمی ایستایی در جامد

$\left\langle \delta_{\mathrm{vib}}^2 \right\rangle^{1/2}$: ریشه‌ی دوم میانگین جابه‌جایی حرارتی

ε : راندمان بی‌نظم شدن

ϕ :شار نوترون

γ : انرژی فصل مشترک ذره ـ زمینه. هم‌چنین انرژی سطحی

μ : ضریب برشی

ν : نسبت پواسون

ν_j: ضریب بسامد برای عیب j

ν_{c}: ضریب بسامد برای جفت صحیح A-B

ν_{w}: ضریب بسامد برای جفت غیرصحیح A-B

Θ : نرخ انحلال مجدد حجم رسوب

Θ_0: دمای دبای

ρ : دانسیته

ρ_{p}: عدد دانسیته‌ی رسوب

ρ_{p}^0 :عدد دانسیته‌ی تعادلی رسوب

ρ' : عدد دانسیته‌ی شبه تعادلی رسوب

σ : ضریب موجود در معادله‌ی ۹-۴۰

σ_{D}: سطح مقطع جابه‌جایی

τ : ثابت زمانی

Ω : حجم اتمی

ξ : ضریب انحلال در معادله‌ی ۹-۳۲

ζ : ثابت در معادله‌ی ۹-۱

بالانویس‌ها

i : بین‌نشین

v : جای خالی

اندیس‌ها

d : معیوب

def : عیوب

dis : بی‌نظم شده

e : انحلال‌پذیری

i : بین‌نشین‌ها

irr : پرتودهی

m : زمینه

max : بیشینه

p : رسوب

s : ماده‌ی حل شده

th : حرارتی

v : جاهای خالی

x : اتم ماده‌ی حل شده

◦ : آغازین

مخفف‌ها

CSRO : نظم کوتاه دامنه‌ی ترکیبی

HFIR : رآکتور ایزوتوپی شار بالا

NHM : نلسون ـ هادسون ـ مازی

RED : افزایش نفوذ در اثر تابش

RIS : جدایش القایی تابشی

TSRO : نظم کوتاه دامنه‌ی توپولوژیکی

مسایل

۹-۱ رسوب کروی از طریق فرایند جوانه‌زنی تصادفی در دمای T رشد می‌کند. رسوب مشابهی تحت پرتودهی در دمای مشابه T رشد می‌کند. تحت پرتودهی، زمان برای به‌دست آوردن کسر حجمی مشابه از رسوب، نصف زمان لازم در طول پیرسازی حرارتی خالص است. تفاوت در انرژی فعال‌سازی در این دما بین شرایط حرارتی و پرتودهی برای این فرایند استحاله‌ای را محاسبه کنید. فرضیات کلیدی را تعیین کنید.

۹-۲ فولاد زنگ نزن ۳۰۴ چه فازی است؟ آیا جدایش القایی تابشی در فولاد زنگ نزن ۳۰۴ تمایل به پایدارسازی یا ناپایدارسازی این فاز دارد؟ تشریح کنید چرا؟

۹-۳ برای 316 SS تحت پرتودهی با یک فوق اشباع جای خالی، $S_v = ۱۰^{۴}$ و فوق اشباع ماده‌ی حل شده، $S_x = ۱۰^{۲}$، نسبت نرخ ورود بین‌نشین به جای خالی (β_i/β_v) که فاز رسوبی که تا ۵٪ بزرگ اندازه شده است $(\delta = ۰/۰۵)$ را پایدار می‌کند، تعیین کنید. نتایج را به صورت تابعی از دما از ۵۷۳ تا ۸۷۳ درجه‌ی کلوین در بازه‌های ۱۰۰K رسم کنید. وابستگی دمایی ضریب یانگ را نادیده بگیرید.

۹-۴ برای آلیاژ Ni-5%Al تحت انقباض به وسیله‌ی انحلال معکوس و رشد به وسیله‌ی نفوذ ماده‌ی حل شده از محلول:

الف) شعاع بحرانی رسوب γ' را تعیین کنید که در زیر آن رشد رسوب و در بالای آن انقباض رخ می‌دهد.

ب) نتایج خود را با نتایجی مقایسه کنید که انتظار می‌رود اندازه‌ی رسوب به وسیله‌ی انحلال بی‌نظمی کنترل می‌شود.

ضرایب پرتودهی زیر را مورد استفاده قرار دهید:

$$\phi_f = 10^{15}\,\mathrm{n/cm^2 s} \quad (E \sim 0.5\,\mathrm{MeV})$$
$$\rho = 10^{15}\,\mathrm{cm^{-3}}$$
$$\zeta\Omega = 10^{-4}\,\mathrm{nm}$$
$$\xi = 10\,\mathrm{nm}$$
$$D = 10^{-15}\,\mathrm{cm^2/s}$$

۹-۵ برای آلیاژ مشابه با مسئله‌ی ۹-۴، وابستگی بیشینه‌ی اندازه‌ی ذره‌ی پایدار به f، کسر اتم‌های حل شده به وسیله‌ی آبشار برای رسوباتی تحت انحلال مجدد القایی تابشی را رسم کنید. منحنی را برای $0 < f < 1$ و $l = 10$ nm رسم کنید.

۹-۶ نرخ بی‌نظم شدن ناشی از پرتودهی برای Ni-25Al (γ') پرتودهی شده با یون‌های Ni^{++} MeV ۵ در نرخ جابه‌جایی 10^{-3} dpa/s با راندمان بی نظم شدن ۳۰ را تخمین بزنید.

۹-۷ مقاله‌ی اخیراً یک مجموعه‌ی ریزساختاریِ جدید از عیب را کشف کرده است و به علت تمایل آن برای جاهای خالی ($z_i^{BH} > z_i^{BH}$) به جای *حفره‌ی سیاه* نام‌گذاری شد.

توضیح دهید چه‌طور حضور این حفره‌های سیاه به همراه آرایش معمولی از چاهک‌های عیب می‌تواند موارد زیر را تحت تأثیر قرار دهد:

الف) نرخ جوانه‌زنی حفره

ب) اندازه‌ی بحرانی حفره

ج) نرخ رشد حفره

د) پایداری رسوب ناهمدوس ($\delta > 0$)

ه) نرخ جوانه‌زنی رسوب ناهم‌دوس.

۹-۸ در پایان غنی‌سازی نیکل در سیستم Ni-Al، محلول جامد از Al در Ni، شناخته شده به جای فاز γ، ساختار بلوریِ fcc دارد. نزدیک به ترکیب Ni-50Al، فاز β (bcc) ساختار پایدار است. با اطلاعات مشخص زیر S_v و β_i/β_v مورد نیاز برای تشکیل فاز NiAl(β) از محلول‌های زیر را تعیین کنید:

الف) محلول اشباع از Al در Ni

ب) محلول فوق اشباع، $S_x = 2/0$

ج) محلول کم‌تر از اشباع، $S_x = 0/5$.

دمای پرتودهی = ۵۰۰ °C

$$N = 0.35$$
$$E = 150\,\text{GPa}$$
$$a_\beta = 0.3574\,\text{nm}$$
$$a_\gamma = 0.490\,\text{nm}$$

۹-۹ با استفاده از قوانین تشکیل فازهای بی‌شکل، سهولت نسبیِ تشکیل یک فاز بی‌شکل در هر منطقه‌ی تک فازی و دوفازی از نمودار فازی Ni-Al را توضیح دهید. استدلال‌های خود را توضیح دهید.

۹-۱۰ یکی از نظریه‌های تشکیل بی‌شکل‌سازی القایی تابشی مستلزم این است که غلظت عیوب جای‌خالی و بین‌نشین به سطح ۲٪ برسد، که در آن نقطه حجم تأثیر پذیرفته بی‌شکل خواهد شد. تعیین کنید که آیا بی‌شکل‌سازی القایی تابشی، در NiAl(β′-bcc) با تعیین آنتالپی مهاجرت برای بین‌نشین‌ها در ۳۰۰k که رسیدن غلظت‌های عیوب نقطه‌ای به این نقطه را مجاز می‌نند، امکان‌پذیر است. غلظت چاهک پایین در ماده و نرخ جابه‌جایی 10^{-4} dpa/s را فرض کنید.

۹-۱۱ دمای استحاله‌ی بلوری به بی‌شکل را برای $NiAl_3$ تحت پرتودهی یونی Ni^{++} ۵ MeV برای عوامل پرتودهی و عوامل مربوط به ماده که در زیر آورده شده، تخمین بزنید:

$$K_0 = 10^{-3}\,\mathrm{dpa/s}$$
$$U = 0.1\,\mathrm{eV}$$
$$S_0 = 1.0$$
$$\nu = 10^{13}\,\mathrm{s}^{-1}$$
$$\varepsilon = 30$$

مراجع

1. Rehn LE (1982) In: Picraux ST, Choyke WJ (eds) Metastable Materials Formation by Ion Implantation. Elsevier Science, New York, pp 17–33.
2. Nelson RS , Hudson JA, Mazey DJ (1972) M Nucl Mater 44:318–330.
3. Wilkes P (1979) J Nucl Mater 83:166–175.
4. Brailsford AD (1980) J Nucl Mater 91:221–222.
5. Wagner C (1961) Z Elektrochem 65:581–591.
6. Lifshitz IM, Slyozov VV (1961) Phys Chem Solids 19:35–50.
7. Frost HJ, Russell KC (1983) In: Nolfi FV (ed) Phase Transformations During Irradiation. Applied Science, New York, p 75.
8. Baron M, Chang H, Bleiberg ML (1977) In: Bleiberg ML, Bennett JW (eds) Radiation Effects in Breeder Reactor Structural Materials. TMS-AIME, New York, pp 395–404.
9. Bilsby CF (1975) J Nucl Mater 55:125–133.
10. Frost HJ, Russell KC (1982) Acta Metal 30:953–960.
11. Frost HJ, Russell KC (1981) J Nucl Mater 103–104:1427–1432.
12. Wollenberger H (1994) J Nucl Mater 2116:63–77.
13. Abromeit C, Naundorf V, Wollenberger H (1988) J Nucl Mater 155–157:1174–1178.
14. Russell KC (1984) Prog Mater Sci 28:229–434.
15. Liou K-Y, Wilkes P (1979) J Nucl Mater 87:317–330.
16. Nastasi M, Mayer JW, Hirvonen JK (1966) Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications. Cambridge University Press, Cambridge, p 342.
17. Potter DI (1983) In: Nolfi FV (ed) Phase Transformations During Irradiation. Applied Science, New York, p 213.
18. Eridon J, Rehn L, Was G (1987) Nucl Instr Meth B 19/20:626.
19. Brimhall JL, Kissinger HE, Charlot LA (1983) Rad Eff 77:273.
20. Maydet SI, Russell KC (1977) J Nucl Mater 64:101–114.
21. Russell KC (1979) J Nucl Mater 83:176–185.
22. Mruzik MR, Russell KC (1978) J Nucl Mater 78:343–353.
23. Cauvin R, Martin G (1981) Phys Rev B 32(7):3322–3332.
24. Martin G, Bellon P, (1997) In: Ehrenreich H, Spaepen F (eds) Solid State Physics: Advances in Research and Applications, vol 50. Academic, New York, pp 189–332.
25. Brimhall JL, Simonen EP (1986) Nucl Instr Meth B 16:187.
26. Was GS, Eridon JM (1987) Nucl Instr Meth B 24/25:557.
27. Was GS (1989) Prog Surf Sci 32(3/4):211.
28. Luzzi DE, Meshii M (1986) Scr Metal 20:943.

29. Johnson E, Wohlenberg T, Grant WA (1970) Phase Transitions 1:23.
30. Grant WA (1981) Nucl Instr Meth 182/183:809.
31. Johnson E, Littmark U, Johnson A, Christodoulides C (1982) Phil Mag A 45:803.
32. Follstaedt DM (1985) Nucl Instr Meth B 78:11.
33. Peiner E, Kopitzki K (1988) Nucl Instr Meth B 34:173.
34. Tsaur BY, Lau SS, Mayer JW (1980) Appl Phys Lett 36:823.
35. Tsaur BY, Lau SS, Hung LS, Mayer JW (1981) Nucl Instr Meth 182/813:1.
36. Shectman D, Blech I, Gratias D, Cahn JW (1984) Phys Rev Lett 53:1951.
37. Knapp JA, Follstaedt DM (1985) Phys Rev Lett 55(15):1591.
38. Lilienfield DA, Nastasi M, Johnson HH, Ast AG, Mayer JW (1985) Phys Rev Lett 55(15):1587.
39. Lilienfield DA, Mayer JW (1987) Mat Res Soc Symp 74. Materials Research Society, Pittsburgh, PA, p 339.
40. Ossi PM (1977) Mater Sci Eng 90:55.
41. Luzzi DE, Mori H, Fujita H, Meshii M (1984) Scr Metal 18:957.
42. Pedraza DF (1987) Mater Sci Eng 90:69.
43. Pedraza DF (1990) Rad Eff 112:11.
44. Pedraza DF, Mansur LK (1986) Nucl Instr Meth B 16:203.
45. Pedraza DF (1986) J Mater Res 1:425.
46. Simonen EP (1986) Nucl Instr Meth B 16:198.
47. Alonso JA, Somoza S (1983) Solid State Comm 48:765.
48. Miedema AR (1973) J Less Comm Metals 32:117.
49. JohnsonWL, Cheng Y-T, Van RossumM, Nicolet M-A (1985) Nucl InstrMeth B 7/8:657.
50. Martin G (1984) Phys Rev B 30:1424.
51. Swanson ML, Parsons JR, Hoelke CW (1971) Rad Eff 9:249.
52. Brimhall JL, Kissinger HE, Pelton AR (1985) Rad Eff 90:241.
53. Brimhall JL, Simonen EP, Kissinger HE (1973) J Nucl Mater 48:339.
54. Okamoto PR, Lam NQ, Rehn LE (1999) In: Ehrenreich H, Spaepen F (eds) Solid State Physics: Advances in Research and Applications, vol 52. Academic, New York, pp 2–137.
55. Lindemann FA (1910) Z Phys 11:609.
56. Dienes GJ (1955) Acta Metal 3:549.
57. Lam NQ, Okamoto PR, Li M (1997) J Nucl Mater 251:89–07.
58. Motta AT, Howe LM, Okamoto PR (1999) J Nucl Mater 270:174–186.
59. Motta AT (1997) J Nucl Mater 244:227–250.
60. Mansur LK (1987) In: Freeman GR (ed) Kinetics of Nonhomogeneous Processes.Wiley, New York, pp 377–463.
61. Maziasz PJ, McHargue CJ (1987) Int Mater Rev 32(4):190–218.
62. Maziasz P (1993) J Nucl Mater 205:118–145.

63. Was GS (2004) In: Proceedings of the 11th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems:Water Reactors, American Nuclear Society, La Grange Park, IL, pp 965–985.

۱۰

اثرات منحصر به فرد پرتودهی یونی

در این فصل روی فرایندهایی که منحصر به بمباران یونی فلزات و آلیاژها هستند، تمرکز خواهد شد. بمباران یونی در سیستم رآکتورهای گداخت که در آن‌ها محصولات واکنش مشتمل بر یون‌های پر انرژی هلیم و هیدروژن (دوتریم یا تریتم) که با دیواره‌ی اول رآکتور یا دیگر اجزای رآکتور برخورد می‌کنند، بسیار حایز اهمیت است. در تحقیقات آزمایشگاهی، کاشت یون[1]، اختلاط پرتو یونی[2] و رسوب‌گذاری با کمک پرتو یونی[3] برای مطالعه‌ی برهم‌کنش‌های یون ـ جامد و ایجاد فازهای جدید و ریز ساختارهای منحصر به فرد مورد استفاده قرار می‌گیرد. موضوع اصلاح مواد با کمک پرتو یونی یا برهم‌کنش‌های یون ـ جامد در کل موضوع بسیار گسترده است و بررسی جامعی را نیاز دارد که فراتر از حیطه‌ی این متن است (خواننده به چندین کتاب دقیق یا مقالات مروری در این موضوع ارجاع داده می‌شود، برای مثال به مرجع‌های [۱-۵] مراجعه شود). در این فصل روی فرایندهایی که در طول برهم‌کنش‌های یون ـ جامد رخ می‌دهد و نتایج آن‌ها در ریزساختارها و فازهای منحصر به فرد در ماده‌ی هدف، مانند جابه‌جایی‌های ترکیبی، کندوپاش ترجیحی، جذب گیبسی، رشد دانه و غیره و

1. Ion Implantation
2. Ion Beam Mixing
3. Ion Beam-assisted Deposition

ترکیبی از این فرایندها تمرکز خواهد شد که مجموعاً ماده‌ی هدف را از حالت اولیه تغییر می‌دهند. یادآوری می‌شود که یون‌ها نه تنها ایجاد آسیب می‌کنند، بلکه آن‌ها می‌توانند منجر به تغییر شیمیایی در هدف شوند. فرایندهای تأثیرگذار روی ساختار سطحی و ترکیب که تحت پرتودهی نوترونی نادیده گرفته می‌شوند، می‌توانند تحت پرتودهی یونی بسیار قابل توجه باشند.

در ابتدا مقدمه‌ی مختصری از روش‌های پرتودهی یونی که برای فهم اثراتی که بعداً توضیح داده خواهد شد، لازم است ارایه می‌شود. اثرات پرتودهی یونی روی ترکیب، ریزساختار و تشکیل فازی در مرحله‌ی بعد نشان داده خواهد شد. موضوع نهایی اثرات ناشی از بمباران به وسیله‌ی گازها در مقادیر پرتوگیری بالا و دماهای بالا همان‌طوری است که در دیواره‌ی اول رآکتور گداخت یا در دمای پایین در یک آزمایشگاه رخ می‌دهد.

۱۰-۱ روش‌های پرتودهی یونی

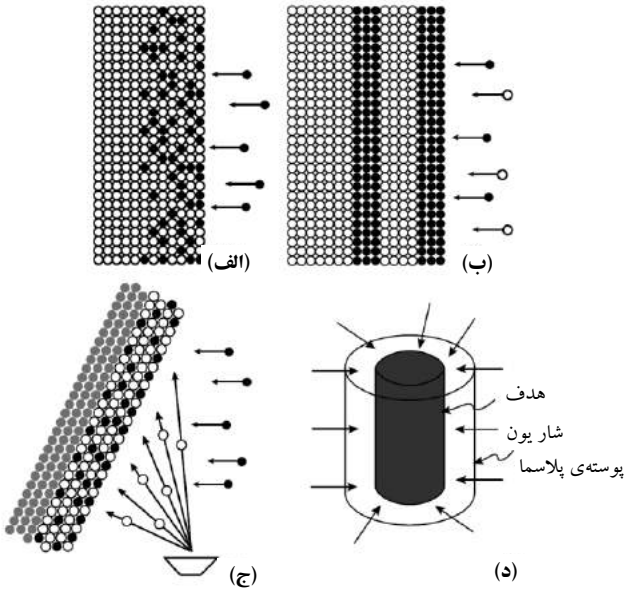
اصلاح سطح فلزات به وسیله‌ی پرتوهای یونی می‌تواند با روش‌های مختلفی انجام شود که هر کدام از آن‌ها می‌تواند در موقعیت‌های ویژه، مزیت‌هایی را داشته باشد. روش‌های اصلی شامل کاشت یون، اختلاط پرتو یونی، رسوب‌گذاری با کمک پرتو یونی و کاشت پلاسمایی یون[1] است و به صورت شماتیک در شکل ۱۰-۱ الف ـ د نشان داده شده است. هر یک از این روش‌ها و ظرفیت آن‌ها برای تغییر ترکیب هدف به صورت مختصر در این فصل توضیح داده می‌شود.

کاشت یون (II) بمباران یک هدف با یک پرتویی از یون‌ها در محدوده‌ی انرژی از چند صد کیلوولت تا چندین مگاولت است. پرتو معمولاً تک انرژی است و یک حالت بار تکی دارد و در کل (نه همیشه) به صورت جرمی تحلیل می‌شود. به علت ماهیت تصادفیِ فرایند برخورد کشسان، یون‌ها در یک توزیع گیبسی با متوسط گوسین متمرکز شده در حدود R_p، برد طی شده، با FWHM تقریباً برابر با ΔR_p ۲٫۳۵، که ΔR_p انحراف استاندارد از متوسط است، به سکون می‌رسد.

اگرچه کاشت یون فرایندی ساده است؛ اما این روش از دیدگاه اصلاح‌سازی ترکیب سطحی چندین مزیت دارد. اول آن‌که از آن‌جایی که عمقِ توزیع یون‌های کاشته شده به صورت $E^{1/2}$ تغییر می‌کند، انرژی‌های در محدوده چند صد keV، که در اکثر دستگاه‌های کاشت یون معمول قابل دستیابی هستند، در برد طی شده کم‌تر از ۱۰۰nm برای اکثر یون‌های سنگین نتیجه خواهد شد. برای نفوذ به

1. Plasma Ion Implantation

درون محدوده‌ی میکرومتری، انرژی‌های در محدوده‌ی MeV مورد نیاز است. دوماً، کندوپاش غلظت گونه‌ی کاشته شده را به مقداری که معکوس بازده کندوپاش است (قسمت ۱۰-۲-۱ مرور شود)، محدود خواهد کرد.



شکل ۱۰-۱. اصلاح سطحی با پرتو یونی به وسیله‌ی (الف) کاشت مستقیم یون، (ب) پرتو یونی مخلوط، (ج) رسوب‌گذاری با کمک پرتو یونی و (د) کاشت پلاسمایی یون [۳].

از آن‌جایی که بازده‌ی کندوپاش فلزات در این انرژی‌ها در محدوده‌ی ۲ تا ۵ متغیر است، به ترتیب بیشینه غلظت گونه‌ی کاشته شده ۲۰ تا ۵۰٪ است. شکل و موقعیت توزیع نیز می‌تواند یک مانع باشد. در خوردگی، که ترکیب لایه‌های تکی بالایی بسیار حایز اهمیت است، به صورت قابل ملاحظه‌ای عمده تغییرات در عمق‌های بیش‌تر رخ می‌دهد، و منجر به رقیق شدن سطح از گونه‌های کاشته شده می‌شود. هنگامی که کاشت یک استحاله‌ی فازی را القا می‌کند، همیشه اثرگذاری یا راندمان کاشت مستقیم کم‌تر است. در پایان، اغلب مطلوب است که به منظور به‌دست آوردن یک ترکیب سطحی ویژه، یون‌های فلزی در فلزات خالص یا آلیاژها کاشته شوند. به منزله‌ی یک موضوع عملی، اکثر دستگاه‌های کاشت یون تجاری می‌توانند جریان‌های بالایی از گازهای خنثی را تولید کنند؛ اما برای

تولید یون‌های فلزی در جریان‌هایی که عملی هستند، اندازه‌های بسیار دقیقی لازم است. اختلاط پرتو یونی راهی را برای نقص‌های کاشت مستقیم یون فراهم می‌کند.

اختلاط پرتو یونی به همگن‌سازی تک لایه‌ها یا چند لایه‌هایی از عناصر رسوب داده شده روی سطح یک هدف قبل از بمباران اشاره دارد. تفکر پشتیبان اختلاط پرتو یونی، ایجاد یک سطح آلیاژی با همگن کردن لایه‌های متناوب از اجزای آلیاژی رسوب داده شده در یک نسبت ضخامت مشخص برای دستیابی به ترکیب نهایی دلخواه است. اختلاط پرتو یونی چندین نقص کاشت یونی را مرتفع می‌کند. اولاً، نیاز برای تولید یک پرتو یونی فلزی حذف می‌شود زیرا گازهای نجیب می‌توانند برای اختلاط استفاده شوند. گازهای نجیب در اثرات شیمیایی در جامد سهیم نیستند و می‌توانند در پرتوهای جریان بالا در اکثر دستگاه‌های کاشت تجاری ایجاد شوند. دوماً، هیچ‌گونه محدودیتی در محدوده‌ی ترکیبی وجود ندارد زیرا ترکیب نهایی با نسبت ضخامت لایه‌ها، کنترل می‌شود. این موضوع دو نقص دیگر کاشت یون را که یکنواختی و نقصان سطح از گونه‌ی کاشته شده است نیز از بین می‌برد. اختلاط پرتو یونی، یک ترکیب بسیار یکنواختی را در سراسر عمق نفوذ یون، از جمله مناطق بسیار نزدیک به سطح را ایجاد می‌کند که برای کاشت یون بسیار سخت است. در پایان اگر لایه‌های ابتدایی به اندازه‌ی کافی نازک باشند، مقدار پرتوگیری لازم برای به‌دست آوردن اختلاط کامل می‌تواند چندین برابر از مقدار پرتوگیری لازم برای تولید آلیاژهای تغلیظ شده با کاشت مستقیم کم‌تر باشد.

اگر فرایند در دماهای پایین انجام شود، نتیجه معمولاً یک آلیاژ شبه پایدار در شکل محلول جامد فوق اشباع یا ساختاری بی‌شکل است. در نتیجه ریزساختار می‌تواند به وسیله‌ی عملیات‌های بازپخت بعدی کنترل شود. به هرجهت، علی‌رغم مزیت‌های زیاد آن اختلاط پرتو یونی نقایصی مانند محدودیت عمق نفوذ دارد. ضخامت سطح هنوز به وسیله‌ی برد طی شده یون کنترل می‌شود که کم‌تر از محدوده‌ی ۱۰۰nm برای یون‌های سنگین با چند صد کیلو الکترون‌ولت است. راه‌حل این مشکل در روش‌های رسوب‌گذاری با کمک پرتو یونی نهفته است.

رسوب‌گذاریِ افزایش یافته یا رسوب‌گذاریِ کمک شده با پرتو یونی به رشد یک فیلم با کمک یک پرتو یونی اشاره می‌کند. در این روش، فیلم روی زمینه با رسوب‌گذاری فیزیکی بخار به همراه بمباران به وسیله‌ی پرتو یونی با انرژی کم (~ ۱ keV) رشد داده می‌شود. مزیت‌های این روش بسیار زیاد است. اول، در واقع هیچ محدودیتی برای ضخامت فیلمی که می‌تواند اصلاح شود وجود ندارد زیرا بمباران در طول رشد رخ می‌دهد. دوم، بمباران یونی با رسوب بخار اختلاط خودبه‌خود فصل مشترک

را فراهم می‌کند که در نتیجه منجر به چسبندگی بیش‌تر می‌شود. شیب ترکیبی در فصل مشترک می‌تواند به وسیله‌ی نرخ رسوب‌گذاری و شار یون کنترل شود. سوم، افزایش تحرک سطح در طول رشد، کنترل اندازه‌ی دانه و ریخت‌شناسی، بافت، دانسیته، ترکیب و حالت تنش پسماند را مجاز می‌کند. این ویژگی‌ها اساساً به وسیله‌ی کنترل نرخ رسوب‌گذاری اتم‌ها در ترکیب با شار یون (نسبت نرخ ورود یون به اتم)، انرژی یون و گونه‌ها تعیین می‌شوند. از آن‌رو فلزات خالص، آلیاژهای محلول جامد، ترکیبات بین فلزی و گروهی از ترکیبات پایه‌ی فلزی می‌توانند با این روش رشد یابند.

روش پایانی، کاشت پلاسمایی سطحی یون است. در این روش، هدف به صورت مستقیم در یک منبع پلاسمایی قرار داده می‌شود و در یک پتانسیل منفی بالا نگاه داشته می‌شود (۴۰- تا ۱۰۰keV -). یک پوشش پلاسما در اطراف هدف تشکیل می‌شود و یون‌ها عمود بر سطح هدف به سمت پوشش پلاسما شتاب می‌گیرند. کاشت پلاسمایی یون چندین مزیت بالقوه از فرایندهای کاشت یونی معمولی را دارد که شامل حذف نیاز برای دستکاری هدف و تراز پرتو، حذف حفاظ‌گذاری هدف (حفظ مشکل مقدار پرتوگیری)، عملکرد سخت افزاری منبع یونی و آسانی فرایند برای هدف‌های بزرگ و/یا سنگین است.

تمام این روش‌ها برهم‌کنش یون پرانرژی ـ جامد و فرایندهای فیزیکیِ سازنده این برهم‌کنش‌ها مانند کندوپاش، جذب گیبسی[1]، کاشت برگشتی[2]، اختلاط جابه‌جایی، افزایش نفوذ تابشی و جدایش القایی تابشی را دربر می‌گیرند. این فرایندها ترکیب، ریزساختار و ساختار فازی را تحت تأثیر قرار می‌دهند و اساس تغییرات مشاهده شده در ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی فلز یا آلیاژ را تشکیل می‌دهند. فصل‌های ۷، ۸ و ۹ تغییرات ریزساختاری و فازی ناشی از پرتودهی را توضیح دادند و این فصل روی اثرات ترکیبی و بعضی از اثرات اضافی منحصر به پرتودهی یونی مانند رشد دانه، اصلاح بافت و ریخت‌شناسی سطحی در طول بارگذاری‌های بالای گازی را تشریح می‌کند.

۱۰-۲ تغییرات ترکیبی

تحت بمباران یونی، فرایندهای مختلفی رخ می‌دهد، که بعضی از این فرایندها در قبال مواردی مانند پرتودهی نوترونی و موارد مشابه بسیار معلوم و مشخص هستند. بمبارن با یون‌های سنگین منجر به

1. Gibbsian adsorption
2. Recoil implantation

کندوپاش اتم‌ها از روی سطح می‌شود، که شامل تغییرات ترکیبی در نواحی نزدیک به سطح هدف است. در دماهایی بین ۰٫۳ و T_m ۰٫۵، جذب گیبسی باعث تغییرات در ترکیب دو لایه‌ی اول اتمی می‌شود که فرایند کندوپاش را تحت تأثیر قرار می‌دهد. سازوکار اصلیِ بی‌نظمی، اختلاط برخوردی یا بالستیکی است که از لحاظ کیفی به کاشت برگشتی و اختلاط آبشاری (همسان‌گرد) تقسیم می‌شود. کاشت برگشتی به جابه‌جایی مستقیم یک اتم هدف به وسیله‌ی بمباران یون اشاره دارد. فرایندهای غیرمستقیم در برگیرنده‌ی دیگر اتم‌های هدف به صورت یک‌جا اختلاط آبشاری نامیده می‌شوند. با ارجاع به آزمایشات دربرگیرنده‌ی کاشت در داخل تک لایه یا لایه‌ی نازک نشانگر نازک جاسازی شده در جامد تک اتمی، کاشت برگشتی انتقال و گستردگی از سطح مقطع ابتداییِ مشخص را ایجاد می‌کند درحالی‌که اختلاط آبشاری گستردگی را ایجاد می‌کند؛ اما علاوه بر اختلاط برخوردی، فرایندهای حرارتی نیز حایز اهمیت هستند زیرا منجر به افزایش نفوذ در اثر پرتودهی می‌شوند (فصل ۵). هنگامی که شار عیوب به چاهک‌ها با شار اتم‌های میزبان همراه می‌شوند، می‌تواند جدایش القایی تابشی رخ دهد که منجر به تراکم یا تهی‌شدن عنصر آلیاژی در چاهک‌های عیب می‌شود (فصل ۶). فصل‌هایی که در ادامه توضیح داده می‌شود شرحی از فرایندهای فیزیکی کندوپاش، جذب گیبسی، کاشت برگشتی و اختلاط آبشاری را ارایه می‌دهد. نفوذ و جدایش افزایشی تابشی در فصل‌های قبل توضیح داده شد و فقط در ترکیب با دیگر فرایندها برای نشان دادن تصویر کامل از تغییرات ترکیبی تحت بمباران یونی بررسی می‌شود.

۱۰-۲-۱ کندوپاش

کندوپاش، اصولاً از طریق عملیات کندوپاش ترجیحی، جزء کلیدی در تعیین ترکیب سطح تحت بمباران یونی است. عناصر مختلف با احتمالات متفاوتی از روی سطح کنده می‌شوند و ترکیب سطح تابعی از این احتمالات است. این فصل به صورت مختصر فرایندهای فیزیکی کندوپاش را توضیح می‌دهد و با بحث کندوپاش ترجیحی دنبال می‌شود که یک عامل تغییر دهنده‌ی ترکیب سطحی در آلیاژها است.

مدل اصلی

سطوح جامدات تحت بمبارن یونی ساییده می‌شوند. نرخ سایش با راندمان کندوپاش،Y ، توصیف می‌شود که به صورت تعداد میانگین اتم‌های نشر شده در ذره‌ی فرودی تعریف می‌شود. Y وابسته به ساختار و ترکیب هدف، عوامل پرتو ورودی و هندسه‌ی آزمایش وابسته است. برای یون‌هایی با جرم متوسط و انرژی‌های keV، $۰/۵ < Y < ۲۰$ است.

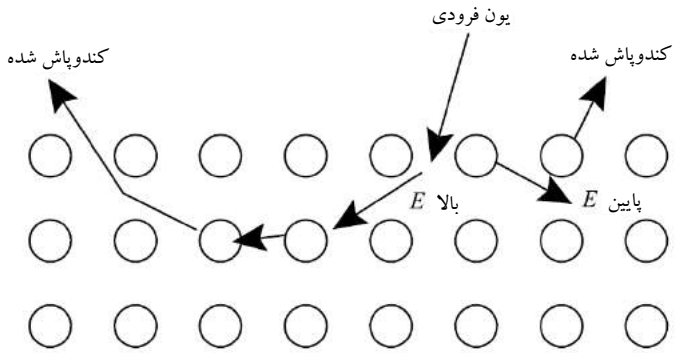
در فرایند کندوپاش، اتم‌ها از لایه‌های سطحی بیرونی‌تر خارج می‌شوند (شکل ۱۰-۲). بمباران یونی در برخورد، انرژی را به اتم‌های هدف منتقل می‌کند که پس‌زنی‌هایی با انرژی کافی دیگر پس‌زنی‌ها را تولید می‌کنند. بعضی از اتم‌های پس‌زده شده که به صورت مستقیم به عقب سرعت گرفته‌اند برای فرار از جامد با انرژی کافی به سطح برخورد می‌کنند. این پس‌زنی‌ها هستند که اکثر راندمان کندوپاش را تشکیل می‌دهند که متناسب با تعداد اتم‌های جابه‌جا شده یا پس‌زده شده است. در منطقه‌ی خطی آبشار تعداد پس‌زنی‌ها متناسب با انرژی ذخیره شده در واحد عمق در اتلاف انرژی هسته‌ای است [۶-۹]. یک آبشار برخوردی، خطی است اگر فقط کسر کوچکی از اتم‌های هدف در درون حجم آبشاری در حرکت باشند. برای یک آبشار حجمی، این مستلزم دانسیته‌ی پایینی از عیوب نقطه‌ای تولید شده است. در صورتی که این مسئله به کندوپاش نیز اعمال شود، به این معنی است که راندمان کندوپاش باید در مقایسه با تعداد اتم‌های هدف قرار گرفته در درون ناحیه‌ی سطحی تحت تأثیر یک ذره‌ی بمباران کننده، بسیار کوچک است. در عمل، آبشارها در فلزات نزدیک به ناحیه‌ی خطی هستند، بجز آن‌هایی که به وسیله‌ی بمباران هدف‌های سنگین با یون‌های سنگین در محدوده‌ی انرژی تقریباً ۱۰keV تا ۱ MeV تولید شده‌اند. راندمان کندوپاش برای ذرات فرودی روی سطح می‌تواند به صورت زیر نشان داده شود:

(۱-۱۰)

$$Y = \Lambda F_{\mathrm{D}}(E_0) \ ,$$

که Y تعداد اتم‌های نشر شده در ذره‌ی ورودی است، E_0 انرژی ذره‌ی ورودی است، Λ تمام ویژگی‌های ماده مانند انرژی پیوندی سطح و وابستگی زاویه‌ای یون ورودی را در برمی‌گیرد و F_{D}

دانسیته‌ی انرژی ذخیره شده در واحد عمق در سطح است و به نوع، انرژی و جهت یون ورودی و ضرایب Z_2، M_2 و N هدف وابسته است. مشتق Λ، توضیحی از تعداد اتم‌های پس‌زده شده که



شکل ۱۰-۲. نمایش شماتیک از جهت‌گیری مجدد یون ورودی در جهت عکس به علت کندوپاش.

می‌تواند بر موانع سطحی غلبه کند و از جامد فرار کند را دربر می‌گیرد. سیگموند[1] [۶] عبارتی را برای Λ با استفاده از تابع استتارگر توماس ـ فرمی استخراج کرد:

(۱۰-۲)

$$\Lambda = 0.042/NU_0 \,,$$

که N عدد دانسیته‌ی اتمی و U_0 انرژی پیوندی سطح است و می‌تواند از حرارت تصعید تخمین زده شود. انرژی ذخیره شده به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۱۰-۳)

$$F_{\mathrm{D}}(E_0) = \alpha \, \mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}} \,,$$

1. Sigmund

که $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}}$ نرخ اتلاف انرژی ناشی از بازدارندگی هسته‌ای است و α ضریب تصحیح است که برای زاویه‌ی برخورد پرتو به سطح محاسبه می‌شود و ناشی از رخدادهای پراکنش بزرگ زاویه است. ضریب α با زاویه‌ی برخوردی افزایش می‌یابد که به علت افزایش انرژی ذخیره شده در سطح است، α با M_2/M_1 نیز افزایش می‌یابد که ناشی از ذخیره‌ی بیش‌تر انرژی در سطح است. با استفاده از پتانسیل مربع‌معکوس (معادله‌ی ۱-۱۵۹)، $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}}$ به صورت زیر برآورد می‌شود:

(۴-۱۰)

$$\mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}} = NS_{\mathrm{n}} = N\frac{\pi^2}{2}Z_1Z_2\varepsilon^2 a\frac{M_1}{M_1+M_2}\,,$$

که N دانسیته‌ی عدد اتمی است، S_{n} نیروی بازدارندگی هسته‌ای است، a شعاع استتارگر، ε واحد بار، Z و M به ترتیب عدد اتمی و جرم اتمی هستند و اندیس‌های ۱ و ۲ به ترتیب اتم‌های ورودی و هدف را نشان می‌دهند. نیروی بازدارندگی هسته‌ای با استفاده از سطح مقطع توماس ـ فرمی [۱۰] محاسبه می‌شود:

(۵-۱۰)

$$S_{\mathrm{n}}(E) = 4\pi aNZ_1Z_2\varepsilon^2\frac{M_1}{M_1+M_2}S_{\mathrm{n}}(\in)\,,$$

که $S_{\mathrm{n}}(\in)$ نیروی بازدارندگی کاهشی (از معادله‌ی ۱-۱۴۲) است و انرژی کاهش یافته، $\in$ (از معادله‌ی ۱-۱۳۷) برابر است با:

(۶-۱۰)

$$\in = \frac{M_2}{M_1+M_2}\frac{a}{Z_1Z_2\varepsilon^2}E\,.$$

برای آرگون فرودی با انرژی ۱keV روی Cu، a = ۰٫۰۱۰۳ nm و $\in$ = ۰٫۰۰۸ و برای اکسیژن فرودی با انرژی ۱۰ keV روی مس، a = ۰٫۰۱۱۵ nm و $\in$ = ۰٫۲۷ است. برای انرژی‌های یونی بین ۱ و

۱۰ keV، مقدار $\in$ در محدوده‌ی ۰٫۰۱ تا ۰٫۳، یا کم‌تر از مقدار شرایط پایا در $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}}$ است. با استفاده از مقدار مستقل از انرژی، $S_{\mathrm{n}}(\in)$ تقریباً برابر با ۰٫۳۹ eVcm^2 (معادله‌ی ۱-۱۶۲) است، $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}}$ برای آرگون فرودی روی C و O فرودی روی Cu به ترتیب تقریباً برابر با ۱۲۴۰ و ۳۲۰ eV/nm است. با استفاده از عبارت Λ در معادله‌ی ۱۰-۲، راندمان کندوپاش در معادله‌ی ۱۰-۱ برابر است با:

$$Y = 0.528\alpha Z_1 Z_2 \frac{M_1}{U_0(M_1+M_2)} S_{\mathrm{n}}(\in)\ . \qquad (۷-۱۰)$$

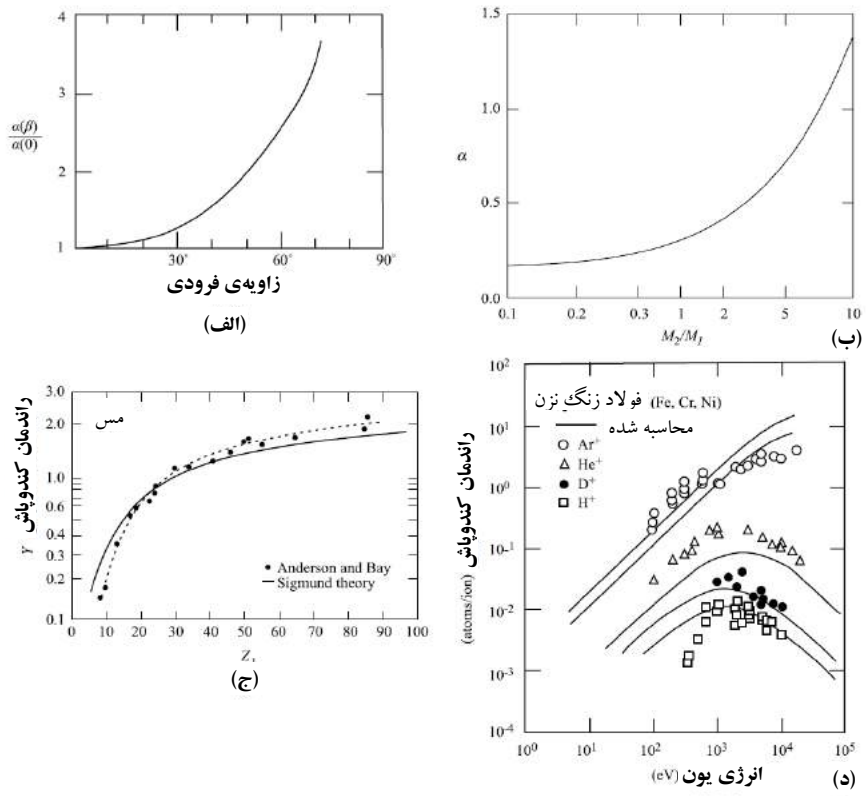
برای Ar فرودی روی مس، $NS_{\mathrm{n}} = \mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}} =$ ۱۲۴۰ eV/nm، $U_0 \sim$ ۳ eV، $\alpha \sim$ ۰٫۲۵، $\Lambda =$ ۰٫۰۱۶۵ nm/eV و $N =$ ۸۵ $\mathrm{atoms/nm}^3$ است و راندمان کندوپاش تقریباً برابر با ۵/۱ است. شکل ۱۰-۳ تغییر راندمان کندوپاش با زاویه، عدد اتمی یون، نسبت جرم اتم هدف به جرم یون فرودی و انرژی یون را نشان می‌دهد. کندوپاش با فاصله گرفتن از برخورد عمودی افزایش می‌یابد زیرا بیش‌تر انرژی یون نزدیک به سطح ذخیره می‌شود. رفتار مشابهی نیز برای وابستگی به Z یون برای یک انرژی ثابت، وجود دارد. راندمان کندوپاش در انرژی‌های پایین به علت مقدار کم انرژی ذخیره شده در سطح کم است. به صورت مشابه، از آن‌جایی که سطح مقطع پراکنش کشسان با انرژی کاهش می‌یابد، انرژی ذخیره شده در ناحیه‌ی سطحی در انرژی‌های بالا کاهش می‌یابد و راندمان کندوپاش کم می‌شود. در نتیجه در انرژی‌های میانی که ذخیره‌ی انرژی در نواحی نزدیک به سطح بالا است، یک بیشینه وجود دارد.

راندمان کندوپاش می‌تواند برای تعیین غلظت حالت پایدار گونه‌های کاشته شده به صورت زیر مورد استفاده قرار گیرد [۱]. فرض می‌شود که یک یون از عنصر A در یک هدف از عنصر B کاشته شود که $N_{\mathrm{A,B}}$ غلظت اتمی و $S_{\mathrm{A,B}}$ شار کندوپاش عناصر A و B است. در نتیجه در هر زمان می‌توان نوشت:

$$S_{\mathrm{B}}/S_{\mathrm{A}} = \chi(N_{\mathrm{B}}/N_{\mathrm{A}})\ , \qquad (۸-۱۰)$$

که χ نسبت احتمالات برای کندوپاش یک اتم B از سطح نسبت به اتم A است. شار اتم‌های A فرودی، ϕ_{A} به وسیله‌ی راندمان کندوپاش مرتبط با شار کلی کندوپاش شده است:

$$\phi_A Y = S_A + S_B \,. \qquad (۹-۱۰)$$



شکل ۱۰-۳. وابستگی راندمان کندوپاش به (الف) زاویه‌ی ورودی، β، که β از عمود سطحی اندازه‌گیری شده [۸]، (ب) عدد اتمی یون ورودی [۹]، (ج) نسبت جرم اتم هدف به جرم یون ورودی از طریق یک ضریب α در معادله‌ی ۳-۱۰ [۸] و (د) انرژی یون ورودی [۷].

در حالت پایدار، افزایش اتم‌های A به وسیله‌ی کاشت برابر با اتلاف آن‌ها به وسیله‌ی کندوپاش است در نتیجه هیچ‌گونه تغییر خالصی در تعداد کلی اتم‌های A در هدف وجود ندارد و $\phi_A = S_A$ است. با جای‌گذاری برای S_A در معادله‌ی ۹-۱۰، $S_B = (Y-1)\phi_A$ است. با جای‌گذاری S_A و S_B در معادله‌ی ۸-۱۰، ترکیب سطحی حالت پایدار تعیین می‌شود:

$$N_A/N_B = \chi(Y-1)^{-1} . \quad (۱۰-۱۰)$$

برای موردی که $\chi = ۱$ است، معادله‌ی ۱۰-۱۰ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$N_A/(N_A+N_B) = 1/Y , \quad (۱۰-۱۱)$$

که مشخص می‌کند که غلظت گونه‌ی کاشته شده به صورت مستقیم به وسیله‌ی راندمان کندوپاش تعیین می‌شود.

کندوپاش ترجیحی[1]

هنگامی که یون‌های پرانرژی با یک هدف مانند آلیاژ برخورد می‌کنند، تمام عناصر هدف با راندمان مشابهی کندوپاش نمی‌شوند. راندمان اتم‌های A از آلیاژ در هر یون فرودی در شار اتم‌های کندوپاش شده برابر است با:

$$Y_A = \int_0^\infty \sigma_A(x)(C_A(x)/\Omega)\,dx , \quad (۱۰-۱۲)$$

که $\sigma_A(x)$ سطح مقطع برای اتم‌های A در عمق $x \geq 0$ که از سطح، $x = 0$، به ناحیه‌ی $x < 0$ در هر یون فرودی خارج شده‌اند، است، $C_A(x)$ کسر اتمی A در آلیاژ در عمق x و Ω حجم متوسط اتمی است. هم‌چنین باید میزان احتمال در واحد عمق، $p_A(x)$ که یک اتم A موجود در عمق x به وسیله‌ی یک یون فرودی خارج می‌شود، تعریف شود:

(۱۰-۱۳)

$$p_A(x) \equiv \sigma_A(x)/\Omega .$$

در نتیجه راندمان اتم‌های A به صورت زیر نوشته می‌شود:

1. Preferential Sputtering

$$Y_{\mathrm{A}} = \int_0^{\infty} C_{\mathrm{A}}(x) p_{\mathrm{A}}(x)\,\mathrm{d}x\,. \qquad (۱۰-۱۴)$$

اثرات اصلی در کندوپاش آلیاژ آن‌هایی هستند که مرتبط به رخدادهای کندوپاش ویژه و متغییرهای فیزیکی سهیم در راندمان کندوپاش هستند، و تماماً در احتمال کندوپاش، p_{A} ، موجود هستند که وابسته به نوع و انرژی یون فرودی، نوع اتم کندوپاش شده و انرژی پیوندی سطحی آن است. از آن‌جایی که مقادیر احتمالات کندوپاش، P_{i} برای گونه‌های اتمیِ متفاوت، مختلف هستند، کندوپاش ترجیحی رخ می‌دهد.

اثرات ثانوی در کندوپاش آلیاژ از طریق غلظت اتمی، C_{A}، که احتمال اشتغال یک موقعیت با اتم A را نتیجه می‌دهد در معادله‌ی ۱۰-۱۴ وارد می‌شود. در نتیجه، راندمان‌های کندوپاش ترکیب‌های آلیاژی از طریق یک ضریب $C_{\mathrm{A}}(x)$ در معادله‌ی ۱۰-۱۴ تأثیر خواهند پذیرفت. در عمل، اتم‌های کندوپاش شده از یک لایه‌ی سطحی و کم عمق (شکل ۱۰-۴) می‌آیند که سهم آن‌ها به صورت نمایی با عمق کاهش می‌یابد. عمقی که اتم‌ها می‌توانند از آن خارج شوند در حدود دولایه اتمی است. بنابراین انتگرال معادله‌ی ۱۰-۱۴ می‌تواند با رابطه‌ی زیر جایگزین شود [۶، ۷، ۱۲]:

$$Y_{\mathrm{A}} = \overline{p}_{\mathrm{A}} C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{s}}\,, \qquad (۱۰-۱۵)$$

که $\overline{p}_{\mathrm{A}}$ میانگین احتمال کلی برای حضور یک اتم A در لایه‌ی سطحی کندوپاش شده در هر یون فرودی است و $C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{s}}$ میانگین غلظت اتمی A در لایه‌ی سطحی که با اندیس s نشان داده شده، است. ضخامت این لایه به خوبی مشخص نشده است؛ اما باید به صورت یک یا دو لایه‌ی اتمی برای تعیین $C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{s}}$ درنظر گرفته شود زیرا منشأ یون‌های کندوپاش شده یون‌های بسیار سنگین به طرف لایه‌ی اتمی اول هستند.

تفاوت‌ها در احتمالات کندوپاش برای اتم‌های سازنده در آلیاژ، به وسیله‌ی تفاوت‌ها در مقادیر انرژی و اندازه‌ی حرکت منتقل شده به اتم‌هایی با جرم‌های متفاوت و انرژی‌های پیوندی سطحی متفاوت ایجاد می‌شود. به هرجهت کندوپاش پیوسته‌ی هدف آلیاژی نیمه نامحدود با ترکیب حجمی

یکنواخت، باید در پایان منجر به حالت پایدار شود که در آن ترکیب شار اتم‌های کندوپاش شده که سطح را ترک می‌کنند برابر با ترکیب آلیاژ حجمی است. ویدرسیچ[1] و همکارانش [۱۱] نشان دادند که بمباران آلیاژ دوتایی AB با شاری از یون‌های ϕ (ions/cm^{2}s) منجر به نرخ حذف اتمی می‌شود که برابر است با:

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = \phi(Y_\mathrm{A} + Y_\mathrm{B}) \,. \tag{۱۰–۱۶}$$

بنابراین، نرخی که در آن سطح کندوپاش شده کاهش ضخامت می‌دهد، می‌تواند به وسیله‌ی نرخ کلی اتلاف اتم‌ها در واحد سطح محاسبه شود:

$$\dot{\delta} = \mathrm{d}\delta/\mathrm{d}t = \phi\Omega\,\mathrm{d}N/\mathrm{d}t = \phi\Omega(\overline{p}_\mathrm{A}C_\mathrm{A}^\mathrm{s} + \overline{p}_\mathrm{B}C_\mathrm{B}^\mathrm{s}) \,, \tag{۱۰–۱۷}$$

که δ ضخامت لایه‌ی سطحی حذف شده به وسیله‌ی کندوپاش است.
این محققین هم‌چنین نشان دادند که نرخ خالص انباشت گونه‌های i، در یک صفحه از جامد در سطح نمونه، $0 \le x < x_0$ برابر است با:

$$\frac{\mathrm{d}N_i}{\mathrm{d}t} = \phi\left[C_i^b(\alpha/\Omega^b) - Y_i\right] \,, \tag{۱۰–۱۸}$$

که C_i^b غلظت اتمی جزء i آلیاژ حجمی است و با اندیس b نشان داده می‌شود، α حجم حذف شده در هر یون فرودی و Ω^b میانگین حجم اتمی آلیاژ است. نرخ خالص انباشت یون‌های کاشته شده برابر است با:

$$\frac{\mathrm{d}N_0}{\mathrm{d}t} = \phi\,[1 - Y_0] \,. \tag{۱۰–۱۹}$$

1. Wiedersich

در حالت پایدار، عبارت‌های داخل کروشه‌های معادله‌های ۱۰–۱۸ و ۱۰–۱۹ باید برابر با صفر باشند، که در نتیجه:

(۱۰–۲۰)

$$Y_1 : Y_2 : Y_3 .... = C_1^{\mathrm{b}} : C_2^{\mathrm{b}} : C_3^{\mathrm{b}} ...,$$

و

(۱۰–۲۱)

$$Y_0 = 1 .$$

یعنی، نسبت‌های اجزای آلیاژی در شار کندوپاش شده مشابه با نسبت‌های آلیاژ حجمی است و فقط غلظت‌هایشان به صورت یکنواخت به واسطه‌ی نشر مجدد یون‌های کندوپاش شده رقیق شده است. لازم به ذکر است که شار حالت پایدار اتم‌های کندوپاش شده هیچ‌گونه اطلاعاتی را در مورد کندوپاش ترجیحی دربر نمی‌گیرد. اطلاعات مربوط به کندوپاش ترجیحی می‌تواند از غلظت‌های حالت پایدار در نواحی نزدیک به سطح و از طریق تقریب مشخص شده در معادله‌ی ۱۰–۱۵ به‌دست آید. با جایگذاری معادله‌ی ۱۰–۱۵ در معادله‌ی ۱۰–۲۰ می‌توان نوشت:

(۱۰–۲۲)

$$\frac{p_1}{p_2} = \frac{C_1^{\mathrm{b}}}{C_1^{\mathrm{s}}} \frac{C_2^{\mathrm{s}}}{C_2^{\mathrm{b}}} , \quad \text{or} \quad \frac{C_1^{\mathrm{s}}}{C_2^{\mathrm{s}}} = \frac{C_1^{\mathrm{b}}}{C_2^{\mathrm{b}}} \frac{p_2}{p_1} .$$

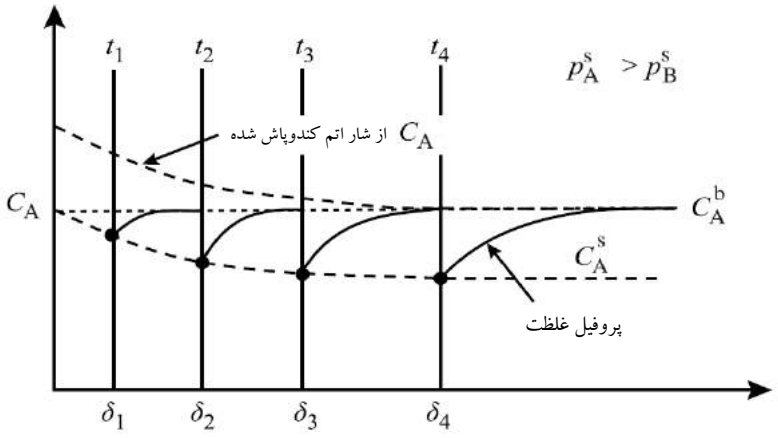
یعنی بعد از حصول حالت پایدار، احتمالات کندوپاش متناسب با نسبت غلظت‌های حجمی و سطحی عناصر در مسئله است. احتمال کندوپاش یون‌های کندوپاش شده می‌تواند از غلظت سطحی به‌دست آید:

(۱۰–۲۳)

$$p_0 \cong \frac{1}{C_0^{\mathrm{s}}} .$$

لام[1] و ویدرسیچ [۱۳] سیر تکامل زمانی کندوپاش ترجیحی را روی ترکیب نزدیک به سطح برای آلیاژ دوتایی AB با $p_A^s > p_B^s$ ، به عبارت دیگر برای موردی که کندوپاش ترجیحی اتم‌های A رخ می‌دهد (شکل ۱۰-۴)، توضیح دادند. شایان ذکر است که در آغاز، غلظت اتم‌های A در شار کندوپاش شده (خط نقطه‌چین بالا) از حجم بزرگ‌تر است. بنابراین، از آن‌جایی که ترکیب سطح تغییر می‌کند (خط نقطه‌چین پایین)، و ترکیب لایه نزدیک به سطح تغییر می‌یابد، بعد از زمان بمباران معین، هنگامی که ترکیب شار اتم کندوپاش شده برابر با ترکیب حجم می‌شود، هم‌چنان که با قانون بقای ماده اشاره شده است، حالت پایدار به‌دست خواهد آمد. یعنی غلظت سطحی اتم‌های A به یک حالت پایداری خواهد رسید که در آن احتمال کندوپاش بالاتر عنصر A از عنصر B، با غلظت پایین‌تر اتم A جبران می‌شود.

یک آلیاژ دوتایی A:B را به گونه‌ای که $C_A^b = C_B^b = ۰/۵$ باشد را در نظر بگیرید. در نتیجه از معادله‌ی ۱۰-۲۲ می‌توان نوشت:



شکل ۱۰-۴. توضیح شماتیک از اثر کندوپاش ترجیحی روی تکامل زمانی ترکیب ناحیه‌ی نزدیک به سطح از نمونه و شار اتم کندوپاش شده [۱۳].

(۲۴-۱۰)

$$\frac{C_A^s}{C_B^s} = \frac{\overline{p}_B}{\overline{p}_A} .$$

1. Lam

اگر غلظت‌های سطحی اندازه‌گیری شده برابر با $C_A^s = ۰/۳۳$ و $C_B^s = ۰/۶۷$ باشند، در نتیجه می‌توان نوشت: $\overline{p}_B = ۰/۲ : \overline{p}_A$. به صورت معکوس، اگر شار اتم کندوپاش شده حالت پایدار از اتم‌های A به اتم‌های B برابر با ۱/۰ باشد ($Y_A:Y_B = ۱/۰$)، سپس می‌توان نتیجه گرفت که $S_A:S_B = ۱/۰$ است. یعنی اندازه‌گیری شار اتم کندوپاش شده چیزی در مورد ترکیب سطحی ارایه نمی‌دهد و باید ترکیب سطحی به صورت مستقیم و مستقل مورد اندازه‌گیری قرار گیرد.

۱۰-۲-۲ جذب گیبسی[1]

جذب گیبسی (یا جدایش حرارتی سطح) فرایندی است که به وسیله‌ی آن سطح آلیاژ به منظور کم کردن انرژی آزاد، خودش را به ترکیب متفاوتی از حجم آرایش مجدد می‌کند [۱۴]. در سیستم‌های فلزی، تغییر می‌تواند کاملاً قابل توجه باشد؛ اما به یک یا دو لایه اتمی محدود می‌شود. ترکیب حجم به صورت حتم تأثیر نپذیرفته است زیرا نسبت حجم به سطح بزرگ است. آرایش مجدد به صورت خودبه‌خود در دماهای به اندازه‌ی کافی بالا رخ می‌دهد که نفوذ با یک سرعت قابل قبول پیش می‌رود. باید توجه کرد که ترکیب لایه‌ی سطحی C_A^s و C_B^s از ترکیب حجمی C_A^b و C_B^b متفاوت است. در تعادل، ترکیب سطحی به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر با ترکیب حجمی مرتبط است [۱۴]:

(۱۰-۲۵)

$$\frac{C_A^s}{C_B^s} = \frac{C_A^b}{C_B^b} \exp\left(-\frac{\Delta H_A}{kT}\right) ,$$

که ΔH_A، حرارت جذب است که به صورت تغییر آنتالپی وابسته به تبادل اتم A در حجم با اتم B در سطح تعریف می‌شود. در دماهای بالا، تعادل به صورت شار خالص، J_A از اتم‌های A که به صورت زیر توصیف می‌شود قابل دستیابی است:

(۱۰-۲۶)

$$J_A \Omega = \left[(\nu_A^{b\to s} C_A^b C_B^s) - (\nu_A^{s\to b} C_A^s C_B^b) \right] \xi ,$$

1. Gibbsian Adsorption

که ξ ضخامت لایه‌ی اتمی، $\nu_A^{b\to s}$ بسامد پرش حجم به سطح و $\nu_A^{s\to b}$ بسامد پرش سطح به حجم برای یک اتم A است. عبارت اول در سمت راست شار اتم‌های A از حجم به سطح و عبارت دوم شار اتم‌های A از سطح به حجم است. در تعادل ($J_A = 0$) است، یا:

(۱۰–۲۷)

$$\frac{\nu_A^{b\to s}}{\nu_A^{s\to b}} = \frac{C_A^s}{C_A^b}\frac{C_B^b}{C_B^s},$$

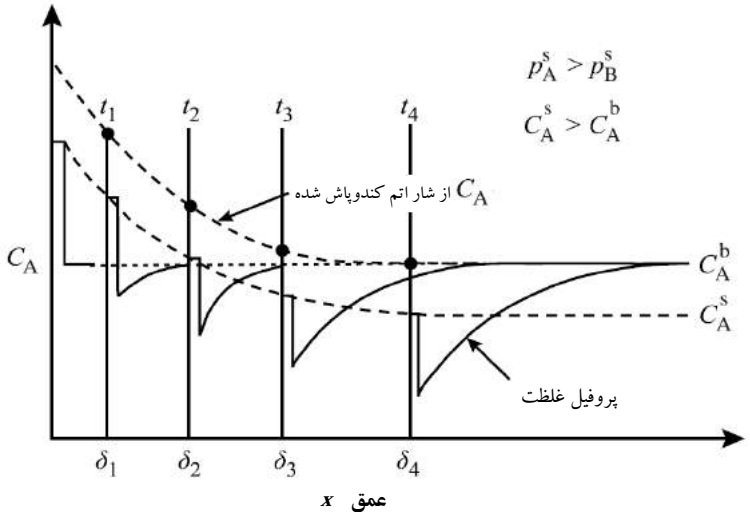
و با جایگذاری در معادله‌ی ۱۰–۲۵ می‌توان نوشت:

(۱۰–۲۸)

$$\nu_A^{s\to b} = \nu_A^{b\to s}\exp\left(-\frac{\Delta H_A}{kT}\right).$$

این رابطه به این معنی است که آنتالپی فعال‌سازی برای یک عنصر جدایش یافته‌ی سطحی (که باید $\Delta H_A < 0$ داشته باشد) برای پرش معکوس به سمت حجم به صورت مؤثری برای آنتالپی مهاجرت در حجم، با حرارت جذب افزایش می‌یابد. تفاوت غلظت میان لایه‌ی سطحی و حجمی به وسیله‌ی احتمال کم‌تر پرش‌های فعال شده حرارتی اتم‌های A از سطح به حجم به وجود آمده و حفظ می‌شود. افزایش غلظت سطحی به علت جذب گیبسی منجر به افزایش اتلاف عناصر جدایش یافته به علت کندوپاش می‌شود. اتلاف ترجیحی پیوسته‌ی عنصر به وسیله‌ی جذب گیبسی مستلزم این است که نفوذ بالا باشد ($T \geq ۰٫۵\ T_m$)؛ اما به علت افزایش نفوذ حرارتی ناشی از کندوپاش، اثر جذب گیبسی در دمای $T \approx ۰٫۳\ T_m$ قابل توجه می‌شود. به هرجهت، فرایند غیرحرارتیِ اختلاط جابه‌جایی مخالف جذب گیبسی خواهد بود. اثر جذب گیبسی در حالت پایدار، کم کردن غلظت آلیاژ فقط در زیر لایه‌ی سطحی به مقداری است که غلظت لایه‌ی سطحی در مقدار مشخص شده به وسیله کندوپاش ترجیحی، حفظ شود. از آن‌رو تحت بمباران یونی، ترکیب سطحی به وسیله‌ی هر دو این فرایندها تأثیر می‌پذیرد. لام و ویدرسیج [۱۳] توضیح شماتیک از رفتار جنبشی ترکیب سطحی در طول بمباران یونی به علت اثرات هم‌زمان جذب گیبسی و کندوپاش ترجیحی را فراهم کردند. در مثال نشان داده شده در

شکل ۱۰-۵، جذب گیبسی در یک غلظت سطحی از اتم‌های A که در آغاز از غلظت حجمی بیش‌تر بوده است، نتیجه شده و به وسیله‌ی تغییر مرحله‌ای در غلظت اتم A در سطح نشان داده شده است. این منجر به کندوپاش ترجیحیِ افزایشی از اتم‌های A می‌شود، زیرا شار اتم کندوپاش شده اساساً از لایه‌ی اتمی اول است. در نتیجه، غلظت اتم‌های A در لایه‌ی زیر سطح به منزله‌ی تلاشی برای برقراری مجدد تعادل ترمودینامیکی کاهش می‌یابد. بعد از زمان t_1، سطح مقطع غلظت اتم A شبیه به سطح مقطع اصلی می‌شود که در آن یک افزایش تدریجی A در سطح وجود دارد؛ اما غلظت سطحی از اصل کاهش می‌یابد و هم‌چنین غلظت پشت پله نیز کاهش می‌یابد. با افزایش زمان بمباران، غلظت سطحیِ اتم A به صورت پیوسته کاهش می‌یابد و منطقه تهی‌شده از اتم A از لحاظ عمق و گستردگی افزایش می‌یابد. حالت پایدار زمانی فرا می‌رسد که ترکیب شار اتم کندوپاش شده برابر با ترکیب حجمی آلیاژ می‌شود.



شکل ۱۰-۵. توضیح شماتیک اثرات هم‌زمان جذب گیبسی و کندوپاش ترجیحی روی سیر تکامل زمانی ترکیب نزدیک به سطح و شار اتم کندوپاش شده [۱۳].

۱۰-۲-۳ کاشت برگشتی

پرتو یونی فرودی نیرویِ حرکت خود را به اتم‌های (یا الکترون‌ها) جامد منتقل می‌کند. از آن‌رو، توزیع اندازه‌ی حرکت اتم‌ها در طول فرایند جابه‌جایی همسان‌گرد نیست و اتم‌ها به صورت ترجیحی

در جهت پرتو مجدداً تعیین موقعیت می‌شوند. این فرایند منجر به انتقال اتمی قابل توجهی در جهت پرتو نمی‌شود زیرا جامد به دانسیته‌ی معمولی تقریبی خودش واهلیده می‌شود، به عبارت دیگر، شار اتم‌های پس‌زده شده در جهت پرتو به وسیله‌ی یک شار یکنواخت از اتم‌ها به علت رهایش در جهت مخالف، جبران می‌شود. در آلیاژها، سطح مقطع جابه‌جاسازی و دامنه‌ی اتم‌های پس‌زده شده وابسته به بار و جرم هسته‌ها است به گونه‌ای که در کل اتم‌های سازنده‌ی سبک‌تر از اتم‌های سازنده‌ی سنگین‌تر در جهت پرتو منتقل می‌شوند. این می‌تواند به صورت شاری از اتم‌های برخی از اجزای سازنده‌ی آلیاژی به سمت نواحی عمیق‌تر در هدف توضیح داده شود که به وسیله‌ی یک شار مخالفی از اجزای باقی‌مانده به منظور حفظ دانسیته‌ی اتمی در یک مقدار مشخص، جبران می‌شود، به عبارت دیگر، شار خالص اتم‌ها در طول هر صفحه‌ی موازی با صفحه‌ی درونی هدف، صفر است. عبارت کاشت برگشتی برای توضیح انتقال خالص موازی با جهت پرتو بعضی از انواع اتم‌ها از انواع دیگر مورد استفاده قرار می‌گیرد. سازوکار کاشت برگشتی به وسیله‌ی سیگموند[1] و همکارانش [۱۵–۱۷] توسعه یافت و در این قسمت به صورت خلاصه توضیح داده می‌شود.

میانگین اثر کاشت یک یون تکیِ (M_0,Z_0) کُند شده[2] در طول خط مستقیم به یک محدوده‌ی مشخص، R، در آلیاژ همگن دوتایی از اجزای ۱ و ۲ را در نظر بگیرید که به صورت M_i، Z_i و C_i با ۲، ۱ = i و ۱ = $C_1 + C_2$ توصیف شده است. تعداد پس‌زنی های i ایجاد شده با انرژی $(T,\mathrm{d}T)$ در عنصر $(x,\mathrm{d}x)$ در طول مسیرش برابر است با:

(۲۹–۱۰)

$$NC_i\,\mathrm{d}x\sigma_{0i}(E(x)\,,T)\,,$$

که $E(x)$ انرژی یون در عمق x و σ_{0i} سطح مقطع پراکنش کشسان بین یون‌ها و اتم‌های i است، برد طی شده یک اتم پس‌زده شده، R_p برابر است با:

(۳۰–۱۰)

$$R_p = R_i(T)\left(\frac{T}{\gamma_{0i}E(x)}\right)^{1/2},$$

1. Sigmund
2. Slowing down

که R_i طول مسیر است و فرض شده است که پس‌زده‌ها روی یک خط مستقیم به سمت یک محدوده‌ی مشخص کُند می‌شوند و $\gamma_{ij} = 4M_iM_j/(M_i+M_j)^2$ است. سپس *اثر کلی*، P_i، ضربه‌های کاشت برابر با انتگرال تعداد پس‌زده شده‌ها و دامنه‌هایشان است:

(۳۱-۱۰)

$$P_i = NC_i \int_0^R \mathrm{d}x \int_0^{\gamma_{0i}E(x)} \sigma_{0i}(E(x),T) R_i(T) \left(\frac{T}{\gamma_{0i}E(x)}\right)^{1/2} \mathrm{d}T \,.$$

معادله‌ی ۱۰-۳۱ بر پایه‌ی قانون توانی پراکنش مورد ارزیابی قرار می‌گیرد:

(۳۲-۱۰)

$$\sigma_{ij}(E,T) = C_{ij}E^{-m}T^{-1-m}, \quad i,j=0,1,2, \quad 0<m<1$$
$$C_{ij} = B_1 a_{ij}^{2(1-m)} \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^m (Z_iZ_j)^{2m}$$
$$a_{ij} = B_2 \left(Z_i^{2/3} Z_j^{2/3}\right)^{-1/2},$$

که B_1 و B_2 ثوابت مشخص هستند. دامنه‌ی $R_i(T)$، همانند فصل ۱، از سطح مقطع بازدارندگی جزیی تعیین شده است:

(۳۳-۱۰)

$$S_{ij}(E) = \int T' \,\mathrm{d}\sigma_{ij}(E,T') \,.$$

با اجرای انتگرال‌های نشان داده شده در معادله‌های ۱۰-۳۱ و ۱۰-۳۳ و تقسیم بر برد طی شده، می‌توان نوشت:

(۳۴-۱۰)

$$Q_i = \frac{P_i}{R_p} = \frac{1-m}{m(1+2m)} \gamma_{01}^{2m-1} \frac{c_i}{(A_{i1}+A_{i2})},$$

که

(۳۵–۱۰)

$$A_{ij} = c_j \left(\frac{\gamma_{ij}}{\gamma_{0i}}\right)^{1-m} \left(\frac{a_{ij}}{a_{0i}}\right)^{2(1-m)} \left(\frac{M_i^2}{M_0 M_j}\right)^{m} \left(\frac{Z_j}{Z_0}\right)^{2m},$$

که 0 یون فرودی است، i اتم ضربه‌خورده به وسیله‌ی یون است، و j اتم‌های بعدی برخورد شده به وسیله‌ی اتم ith هستند.

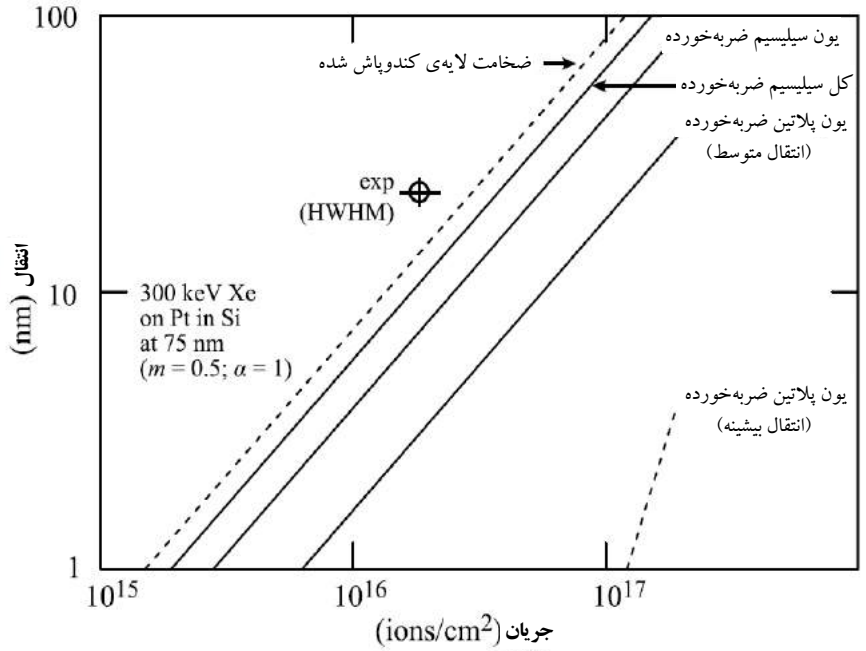
Q_i تعداد *معادل* اتم‌های کاشته شده‌ی برگشتی i در سراسر عمق R_p (به عبارت دیگر دامنه‌ی یون) در جهت پرتو یون در هر یون فرودی است. عبارت غالب در Q_i با توجه به وابستگیِ آن به i، ضریب M_i^{2m} در معادله‌ی ۱۰–۳۵ است. مشخص شده است که در کاشت برگشتی، گونه‌های سبک‌تر مرجح هستند زیرا تعداد پس‌زنی‌های i در یک انرژی مشخص $(T,\mathrm{d}T)$ متناسب با $M_i^{-m}Z_i^{2m}$ است، در نتیجه مقدار این عبارت برای جزء سنگین، بزرگ‌تر است؛ اما دامنه‌ی پس‌زنی‌های i در یک T مشخص، متناسب با $M_i^{-m}Z_i^{-2m}$ است، در نتیجه برای جزء سبک بزرگ‌تر است. از آن‌رو، اثر مرکب، یا تعداد × دامنه، متناسب با Z_i^{-2m} است.

برای مثال، بمباران PtSi با Ar^+ را در نظر بگیرید. مقادیر نتیجه شده برای تعداد معادل از هر نوع اتم کاشته شده برگشتی در دامنه‌ی یون [۱۵] برابر است با:

$$Q_{Pt} = 0.034\,, Q_{Si} = 0.37 \quad \text{for} \quad m = 0.5$$
$$Q_{Pt} = 0.019\,, Q_{Si} = 0.94 \quad \text{for} \quad m = 0.33\,.$$

در هر دو مورد، انتقال خالصی از سیلیسیم در قبال پلاتین وجود دارد. نتایج برای آزمایش مشابه که در آن سیلیسیم یک لایه‌ی نشانگر پلاتین دارد با یون‌های فرودی ۳۰۰ keV Xe^+ بمباران شده در شکل ۱۰–۶ نشان داده شده است. لازم به ذکر است که انتقال یون سیلیسیم ضربه‌خورده نسبت به یون پلاتین ضربه‌خورده بیش‌تر است، در نتیجه انتقال خالص از سیلیسیم از سطح نسبت به انتقال پلاتین از سطح

رخ می‌دهد. اهمیت این نتیجه به این صورت است که انتقال ترجیحیِ گونه در هدف بر پایه‌ی جرم آن، می‌تواند در اختلاط جامد سهیم شود.



شکل ۱۰-۶. انتقال لایه‌ی نشانگر برای یون‌های فرودی ۳۰۰ keV Xe روی یک لایه‌ی نازک Pt در ۷۵ nm در سیلیسیم، که با استفاده از مدل کاشت برگشتی سیگموند محاسبه شده است [۱۶].

۱۰-۲-۴ اختلاط (همسان‌گرد، جابه‌جاساز) آبشاری

انتقال سریع انرژی از اتم‌های پس‌زده شده از جامد به دیگر اتم‌ها منجر به یک آرایش تصادفی کارآمد از جهت‌های برگشتی در درون آبشارها می‌شود. در نتیجه اکثر رخدادهای جابه‌جاساز اتم‌ها در آبشارهای پر انرژی منجر به اختلاط همسان‌گرد از کاشت برگشتی می‌شود. محاسبات جنبشی مولکولی نشان می‌دهد که تعداد جایگزینی‌ها در رخداد جابه‌جایی، میانگین مجذور فاصله‌ی نفوذی، $\langle x^2 \rangle \sim ۳۰\ a^2$ در هر جفت عیب تولید شده را نتیجه می‌دهد (که a نزدیک‌ترین فاصله‌ی همسایه است). در نتیجه، یک فصل مشترک اتمی تیز به صورت $\langle x^2 \rangle^{1/2}$، یا در حدود ۵ صفحه‌ی اتمی برای

یک مقدار پرتوگیری dpa ۱، گسترده می‌شود. گستردگی متناسب با جذر مقدار پرتوگیری، افزایش می‌یابد، در نتیجه اختلاط پرتو یونی از هدف‌های چند لایه ابزار کارآمد برای همگن‌سازی جامد است. همانند پرتودهیِ نوترونی، پرتودهی یونی هدف منجر به تولید آبشار برخوردی می‌شود. وابسته به جرم و انرژی یون، دانسیته‌ی انرژی در آبشار از $۱۰^{-۳}$ تا ۱۰ eV/atom تغییر می‌یابد. زمان انتشار آبشار در حدود $۱۰^{-۱۴}$s است و زمان سرد شدن $۱۰^{-۱۲}$ s است. بسیار مهم است که بین آبشارهای تکی و تداخل آبشاری تمایز ایجاد شود. در یک هدف تحت پرتودهی یونی در یک دانسیته جریان (متناسب با نرخ مقدار پرتوگیری) ۱ $\mu A/cm^2$ (تقریباً ۶×۱۰^{۱۲} $ions/cm^2s$ برای تک تک یون‌های باردار)، برای آبشارهایی با قطر تقریبی ۴ nm، آبشارهای متوالی در یک منطقه‌ی مشخص از ماده در بازه‌ی زمانی تقریبی ۱ ثانیه رخ می‌دهد. یعنی، هر حجم از ماده در هر ثانیه یک آبشار را تجربه خواهد کرد. به منظور آن‌که از تداخل آبشار جلوگیری شود، کل مقدار پرتوگیری باید تقریباً کم‌تر از $۱۰^{۱۳}$ $ions/cm^2$ باشد. در نظر داشته باشید که حتی در منطقه‌ی تداخل آبشاری عمر آبشار در حدود $۱۰^{-۱۲}$ s است، در نتیجه هیچ‌گونه ارتباط زمانی بین آبشارها وجود ندارد مگر آن‌که مقداری نفوذ حرارتی وجود داشته باشد. در درون آبشار تکی، فاصله‌ی متوسط جابه‌جایی همیشه به صورت قابل توجهی کوچک است. برای مثال، اگر هر جفت فرانکل به صورت میانگین تقریباً ۱ nm (R_{recoil}) جابه‌جا شود، به علت آن‌که نسبت تعداد اتم‌های جابه‌جاشده، N_d به تعداد کلی اتم‌ها در درون هسته‌ی مرکزی آبشار، N_v، بسیار کم‌تر از واحد است، متوسط جابه‌جایی‌های اتمی در درون آبشار ($R_{recoil} \times N_d/N_v$) قابل چشم‌پوشی است. تنها با کمک افزایش نفوذ تابشی بعد از اتمام آبشار، اختلاط قابل توجهی می‌تواند رخ دهد. در مقدار پرتوگیری‌های تقریباً برابر با $۱۰^{۱۶}$ $ions/cm^2$، منطقه‌ی کاشت شده بیش از $۱۰^{۳}$ تداخل آبشاری متوالی را دریافت می‌کند و اثر کلی اختلاط بالستیکی قابل چشم‌پوشی نیست.

اختلاط بالستیکی

یادآوری می‌شود که مدل اتمی نفوذ حرارتی ضریب نفوذ به فرم معادله‌ی ۴-۴۴ را نتیجه می‌دهد:

(۱۰-۳۶)

$$D = 1/6\lambda^2\Gamma ,$$

که Γ بسامد پرش کلی و λ طول پرش است. اگر فرض شود که انتقال اندازه حرکت‌ها (تکانه‌ها) در اختلاط آبشاری همسان‌گرد باشد، سپس نتیجه‌ی یک فرایند جابه‌جایی تراکمی تصادفی مرحله‌ای می‌شود. می‌توان فرایند انتقال را با معرفی یک ضریب نفوذ مؤثر، D^* [۱۸، ۱۹] تعریف کرد، به صورتی که:

(۱۰-۳۷)

$$D^* = 1/6R^2F \,,$$

که R ریشه‌ی دوم میانگین جابه‌جایی یک اتم در آبشار برخوردی است و $F(x)$ نرخ جابه‌جایی اتمی در dpa/s است. F می‌تواند از مدل جابه‌جایی K-P به صورت زیر تخمین زده شود. معادله‌های ۲-۱ و ۲-۲ از فصل ۲ یادآوری می‌شود که:

(۱۰-۳۸)

$$\frac{R_\mathrm{d}}{N} = F = \int \phi(E)\sigma_\mathrm{D}(E_\mathrm{i})\,\mathrm{d}E_\mathrm{i} \,,$$

و

(۱۰-۳۹)

$$\sigma_\mathrm{D}(E_\mathrm{i}) = \int \sigma_\mathrm{s}(E_\mathrm{i},T)\nu(T)\,\mathrm{d}T \,.$$

با فرض شار ذره‌ای تک انرژی و پراکنش کشسان همسان‌گرد می‌توان نوشت:

(۱۰-۴۰)

$$\nu = \overline{T}/2E_\mathrm{d} \,,$$

و

(۱۰-۴۱)

$$\sigma_\mathrm{D} = \frac{\overline{T}}{2E_\mathrm{d}}\sigma_\mathrm{s} \,,$$

که نتیجه می‌دهد:

$$F = \phi \sigma_s \frac{\overline{T}}{2E_d} . \qquad (۴۲-۱۰)$$

با تعریف میانگین اتلاف انرژی ، $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x\big|_n = \frac{\overline{T}}{\lambda} = N\sigma_s\overline{T}$، و با جایگذاری $\overline{T}$ در معادله‌ی ۱۰-۴۲ می‌توان نوشت:

$$F = \frac{\phi \ \mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_n}{2E_d N} , \qquad (۴۳-۱۰)$$

که $\mathrm{d}E/\mathrm{d}x\big|_n$ انرژی ته نشست شده‌ی یون در واحد عمق در فرایندهای اتمی است و E_d انرژی جابه‌جایی است. با جایگذاری عبارت F در معادله‌ی ۱۰-۴۳ در داخل معادله‌ی ۱۰-۳۷ برای D^* می‌توان نوشت:

$$D^* \cong \frac{R^2\phi \ \mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_n}{12E_d N} . \qquad (۴۴-۱۰)$$

همان‌طوری که قبلاً اشاره شد، اثر اختلاط آبشاری گسترش فصل مشترک تیز یا گسترش تابع دلتا به توزیع گیبسی است. در ادامه اثر اختلاط آبشاری روی سه سطح مقطع ترکیبی متفاوت در هدف بررسی می‌شود. با یادآوری قانون دوم فیک نتیجه می‌شود که:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot D\nabla C = -D\nabla^2 C, \quad \text{for} \quad D \neq f(C) . \qquad (۴۵-۱۰)$$

حالت ۱: لایه‌یِ نازک

برای هندسه‌ی نشان داده شده در شکل ۱۰-۷ الف، شرایط مرزی برابرند با:

$$C \to 0 \quad \text{as} \quad t \to 0 \quad \text{for} \quad |x| > 0$$
$$C \to 1 \quad \text{as} \quad t \to 0 \quad \text{for} \quad x = 0$$

$\int_{-\infty}^{-\infty} C(x,t)\mathrm{d}x = \alpha$، که α مقدار کلی مادهی حل شده در هدف است. با فرض آنکه لایه بینهایت نازک باشد، راهحل قانون دوم فیک برابر است با:

(۴۶–۱۰)
$$C(x,t) = \frac{\alpha}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(\frac{-x^2}{4Dt}\right) ,$$

که انحراف از مقدار متوسط (واریانس) برابر با $\sigma^2 = 4Dt$ است و انحراف استاندارد برابر با $\sigma = \sqrt{4Dt}$ است، و پهنای کامل در نصف بیشینه، FWHM = ۲٫۳۵ σ است. از معادلهی ۱۰–۴۴، افزایش FWHM به علت اختلاط آبشاری برابر است با:

(۴۷–۱۰)
$$\Delta\mathrm{FWHM} = 2.35\sqrt{4D^*t} \cong R\left[\frac{2\,\mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}}\,\phi t}{E_{\mathrm{d}}N}\right]^{1/2} .$$

لازم به ذکر است که گسترش فیلم نازک همانطوری که به وسیلهی ΔFWHM تشریح شد، متناسب با $(\phi t)^{1/2}$ است، یا ضریب اختلاط یونی مؤثر، $4Dt$ متناسب با ϕt است. شکل ۱۰–۸ نشان میدهد همانطوری که به وسیلهی معادلهی ۱۰–۴۷ پیشبینی شد، اختلاط تعیین شده به وسیلهی $4Dt$ متناسب با مقدار پرتوگیری است.

با در نظر گرفتن مثالی از بمباران نمونهی نیکلی حاوی فیلم نازک (همانطوری که در شکل ۱۰–۷ الف نشان داده شده است) به وسیلهی یونهای Kr^+ با انرژی ۱۵۰ keV، مقدار پرتوگیری مورد نیاز برای تولید ΔFWHM ده نانومتری برابر است با:

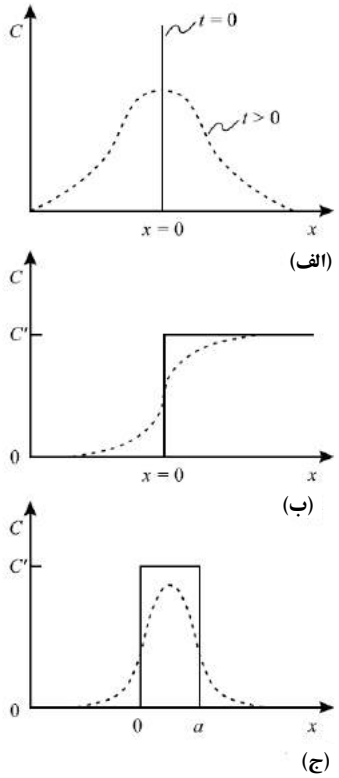
(۴۸–۱۰)
$$\Delta\mathrm{FWHM} = 10\ \mathrm{nm} \cong R\left[\frac{2\,\mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}}\,\phi t}{E_{\mathrm{d}}N}\right]^{1/2} .$$

برای $\left.\mathrm{d}E/\mathrm{d}x\right|_{\mathrm{n}} = N\sigma_{\mathrm{s}}\overline{T}$، معادله‌ی ۱۰-۴۸ به صورت زیر نوشته می‌شود:

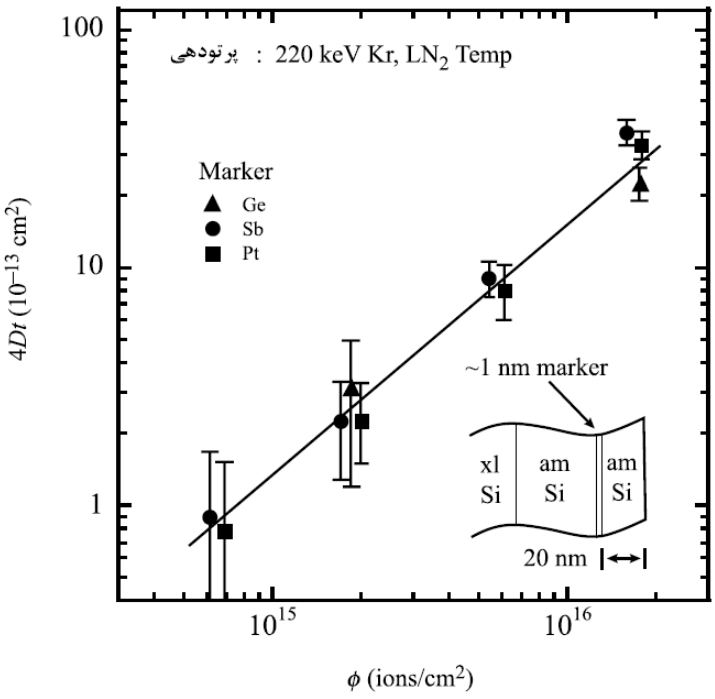
(۱۰-۴۹)

$$\Delta\mathrm{FWHM} = 10\,\mathrm{nm} \cong R\left[\frac{2\sigma_{\mathrm{s}}\overline{T}\phi t}{E_{\mathrm{d}}}\right]^{1/2}.$$

برای $\sigma_{\mathrm{s}} \sim ۱۰^{۱۶}\ \mathrm{cm}^2$، $\overline{T} \sim E_i = ۱۵۰\ \mathrm{keV}$، $E_{\mathrm{d}} \sim ۱۵\ \mathrm{eV}$ و $R \sim ۱٫۵\ \mathrm{nm}$، مقدار پرتوگیری لازم برای ایجاد یک $\Delta\mathrm{FWHM}$ ده نانومتری برابر با $۱۰^{۱۴}\ \mathrm{i/cm}^2 \times ۸٫۵$ است. اگر به‌جای Kr^+، He^+ استفاده شود، مقدار پرتوگیری مورد نیاز برابر با $۱۰^{۱۵}\ \mathrm{i/cm}^2 \times ۳٫۵$ است.



شکل ۱۰-۷. نمایش شماتیک از اثر اختلاط پرتو یونی روی (الف) فیلم نازک، (ب) جفت جامد نیمه نامحدود (دو لایه)، و (ج) فیلم نازک با ضخامت محدود (چند لایه).



شکل ۱۰–۸. اطلاعات اختلاط نشان‌گر برای چندین نشانگر مختلف در سیلیسیم بی‌شکل که نشان دهنده‌ی ارتباط بین ضریب نفوذ اختلاط یونی مؤثر، $4Dt$، و مقدار پرتوگیری ϕt است [۱].

حالت ۲: یک جفت جامد نیمه نامحدود (دو لایه)

برای دو لایه همان‌طوری که در شکل ۱۰–۷ ب نشان داده شده است، شرایط مرزی برابر است با:

$$C = 0 \quad \text{برای} \quad x < 0 \quad \text{در} \quad t = 0\,,$$
$$C = C' \quad \text{برای} \quad x > 0 \quad \text{در} \quad t = 0\,.$$

با حل قانون دوم فیک با این شرایط مرزی می‌توان نوشت:

(۵۰-۱۰)

$$C(x,t) = \frac{C'}{2}\left[1 + \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right)\right] .$$

شکل ۱۰-۹ نشان می‌دهد که همان‌طوری که به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۰-۵۰ پیش‌بینی شده است، اختلاط در طول فصل مشترک دو لایه هم‌چنان که به وسیله‌ی $4Dt$ تشریح شد، در واقع، برای چندین سیستم دولایه رفتار خطی با مقدار پرتوگیری دارد، اگرچه ثابت تناسبی، هم‌چنان که بعداً توضیح داده خواهد شد، وابسته به سیستم است.

حالت ۳: فیلم نازک با ضخامت محدود (چند لایه)

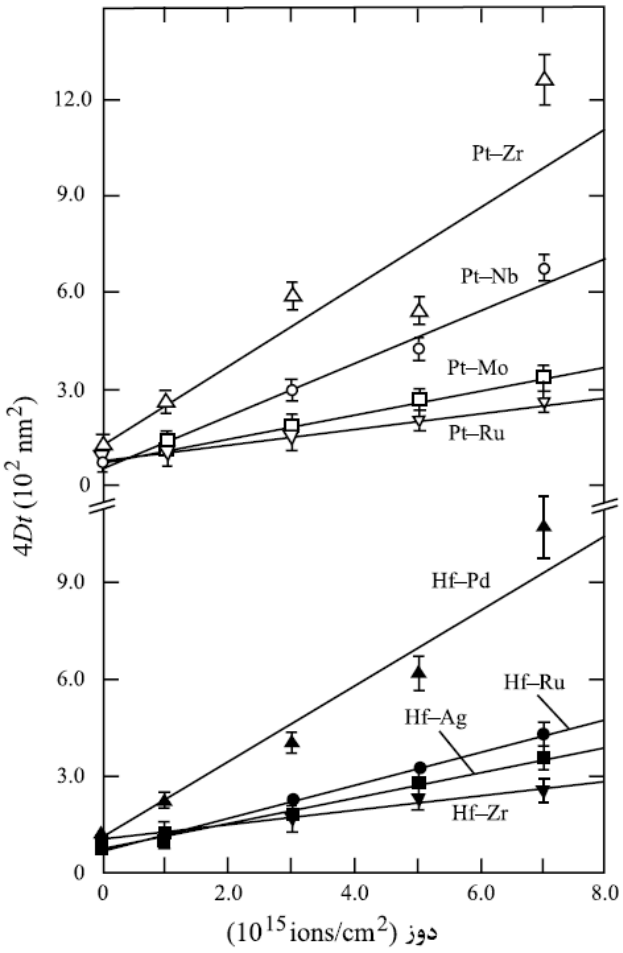
برای یک لایه با ضخامت محدود، همان‌طوری که در شکل ۱۰-۷ ج نشان داده شده است، شرایط مرزی عبارتند از:

$$C = C' \quad \text{برای} \quad 0 < x < a \quad \text{و} \quad t = 0 ,$$
$$C = 0 \quad \text{برای} \quad x < 0 , x > a \quad \text{و} \quad t = 0 .$$

در نتیجه راه‌حل برابر است با:

(۵۱-۱۰)

$$C(x,t) = \frac{C'}{2}\left[\text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{4Dt}}\right) - \text{erf}\left(\frac{x-a}{\sqrt{4Dt}}\right)\right] .$$



شکل ۱۰-۹. اختلاط فصل مشترک برحسب مقدار پرتوگیری برای چندین نمونه‌ی دولایه پرتودهی شده با یون‌های Xe^{++} با انرژی ۶۰۰ keV در دمای ۷۷K [۲۰].

اثرات شیمیایی روی اختلاط پرتو یونی

بررسی‌های اختلاط در سیستم‌های دوتایی، تفاوت‌های بزرگی را در مقدار اختلاط آشکار کرد که نمی‌تواند به وسیله‌ی اثرات بالستیکی تشریح شود. برای مثال، اختلاط در سیستم Cu-Au از اختلاط در سیستم Cu-W بالاتر است [۲۱، ۲۲] و اختلاط لایه‌های نشانگر در سیلیسیم و ژرمانیوم به صورت قابل توجهی برای عناصر با جرم مشابه تغییر می‌کند [۲۳]. این سیستم‌ها، سیستم‌های هستند که به صورت تصادفی مشابه هستند و در آن‌ها نسبت جرم‌های اجزا مشابه هستند و در نتیجه در یک مدل اختلاط

بالستیکی، آن‌ها باید به صورت مشابه رفتار کنند؛ اما به صورت کاملاً برعکس، شکل ۱۰-۹ نشان می‌دهد که سیستم‌های دوتاییِ به صورت اتفاقی مشابه، نسبت‌های اختلاط بسیار متفاوتی را نشان می‌دهند. به علاوه، اختلاط در ۷۷K رخ می‌دهد که افزایش نفوذ تابشی متوقف شده است.

جوهانسون[1] [۲۴-۲۹] ماهیت شیمیایی ترکیبات آلیاژهای دوتایی را با درک آن‌که اساساً نفوذ به وسیله‌ی شیب پتانسیل شیمیایی، $\nabla\mu(x)$ تحریک شده است، و فقط برای محلول‌های ایده‌آل قانون فیک اعمال می‌شود، بررسی کرد. به صورت کلی‌تر، برای نفوذ درونی دو فلز که یک محلول غیرایده‌آل را تشکیل می‌دهند، باید $\nabla\mu(x)$ را به $\nabla C(x)$ ارتباط داد. این می‌تواند با جایگزین کردن D با یک D' اصلاح شده که برای اثر کرکندال محاسبه شده، انجام شود و در هم آمیختن نفوذی را تشریح کند:

(۱۰-۵۲)

$$D' = \left[D_{\mathrm{A}}^{0} C_{\mathrm{B}} + D_{\mathrm{B}}^{0} C_{\mathrm{A}}\right]\left[1 + \frac{\partial \ln \gamma(C_{\mathrm{A}})}{\partial \ln C_{\mathrm{A}}}\right]$$
$$= D\left[1 - \frac{2\Delta H_{\mathrm{mix}}}{kT}\right] .$$

که D ضریب سرعت اختلاط غیرگرایشی ، γ ضریب فعالیت و ΔH_{mix} آنتالپی اختلاط است که به صورت زیر مشخص می‌شود:

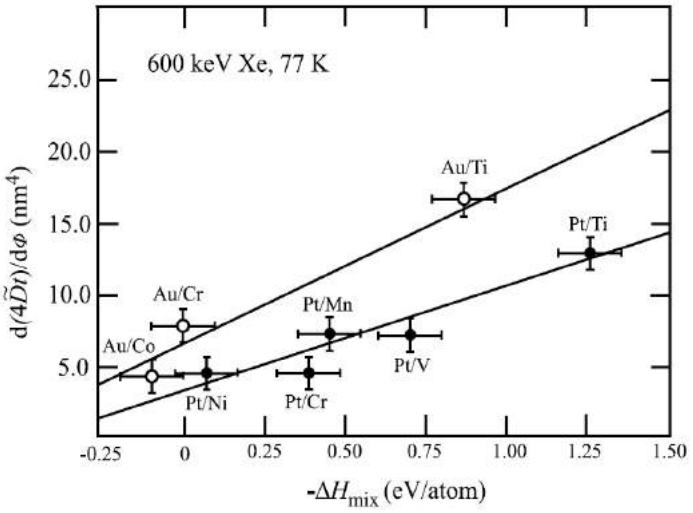
(۱۰-۵۳)

$$\Delta H_{\mathrm{mix}} = 2\delta C_{\mathrm{A}} C_{\mathrm{B}} ,$$
$$\delta = z[H_{\mathrm{AB}} - (H_{\mathrm{AA}} + H_{\mathrm{BB}})/2] ,$$

که z عدد همسایگی (تعداد نزدیک‌ترین همسایه‌ها) است و H_{ij} پتاسیل بین جفت‌های اتم، یا آنتالپی‌های دوتایی است. معادله‌ی ۱۰-۵۲ به سادگی نشان می‌دهد که رفتار تصادفی هنگامی جهت‌دار می‌شود که انرژی پتانسیل وابسته به آرایش فضایی باشد. در نتیجه نسبت‌های اختلاط نه فقط به تعداد

1. Johnson

مراحل رفتار تصادفی در واحد زمان، بلکه به درجه‌ی گرایش دارکن[1] نیز وابسته است. شکل ۱۰-۱۰ اثر ΔH_{mix} روی نرخ‌های اختلاط برای چندین سیستم دوتایی را نشان می‌دهد. معادله‌ی ۱۰-۵۲ می‌تواند برای به‌دست آوردن مقدار kT_{eff}، دمای مؤثر که در آن نفوذ رخ می‌دهد، مورد استفاده قرار گیرد [۲۸]. در سیستم Pt-Au، مقدار kT_{eff} برابر با ۲-۱ eV است که به این معنی است که سهم غالب در اختلاط یونی زمانی رخ می‌دهد که انرژی جنبشی ذره در حدود ۱ eV باشد.



شکل ۱۰-۱۰. اثر حرارت اختلاط روی نرخ‌های اختلاط مشاهده شده برای چندین سیستم فلزی دوتایی که با یون‌های Xe^{++} با انرژی ۶۰۰ keV در دمای ۷۷K پرتودهی شده‌اند [۲۴].

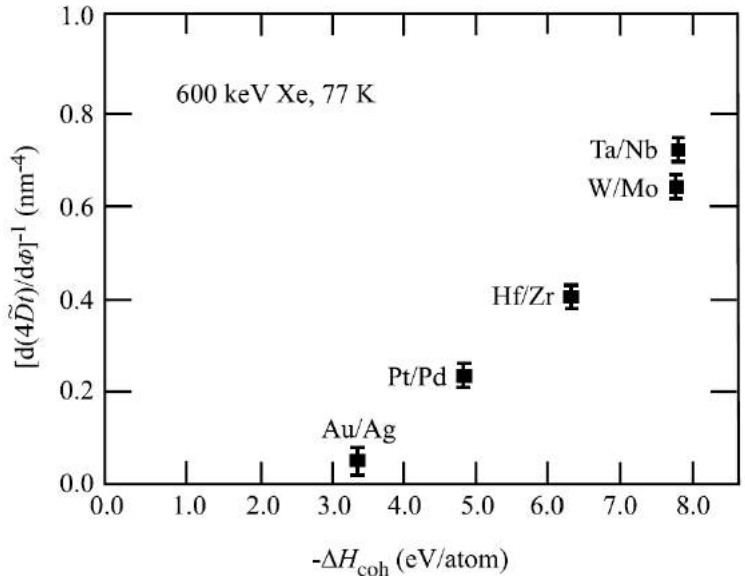
اگر اختلاط وابسته به ویژگی‌های ترمودینامیکی جامد باشد، در نتیجه باید به انرژی هم‌بستگی، ΔH_{coh} که اندازه‌ای از مقدار استحکام اتصال اتم‌ها در یک جامد است، نیز وابسته باشد. در واقع، اگر $\mathrm{d}(4Dt)/\mathrm{d}\phi$ برحسب ΔH_{coh} رسم شود، هم‌بستگی قوی مشاهده می‌شود (شکل ۱۰-۱۱). دامنه‌ی انرژی، ۱eV ~ مرتبط با منطقه‌ی حرارتی آبشار جابه‌جایی است که می‌تواند به منزله‌ی خوشه‌ی حرارتی تعریف شود. اثر میخچه‌های حرارتی روی نفوذ به وسیله‌ی روسی[2] و ناستاسی[3] [۳۰] و با مدل

1. Darken biasing
2. Rossi
3. Nastasi

میخچه‌ی حرارتی وینیارد[1] بررسی شد که در آن معادله‌ی غیرخطی فوریه برای هدایت حرارتی در سیستم همسان‌گرد و یکنواخت به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۵۴-۱۰)

$$\nabla \kappa \cdot \nabla T = c \frac{\partial T}{\partial t},$$



شکل ۱۰-۱۱. اثر میانگین انرژی هم‌بستگی روی اختلاط یونی در چندین سیستم فلزی دوتایی که با یون‌های Xe++ با انرژی ۶۰۰ keV در دمای ۷۷K پرتودهی شده‌اند [۲۹].

که $\kappa = \kappa_0 T^{n-1}$ نفوذپذیری حرارتی است، $c = c_0 T^{n-1}$ ظرفیت حرارتی ویژه است، κ_0 و c_0 ثابت هستند و $n \geq 1$ است. در زمان $t = 0$، میخچه‌ی استوانه‌ای در طول خط مستقیم نامحدود در دانسیته‌ی انرژی ثابت، ε، ایجاد می‌شود که فاصله‌ی عمودی تا محور استوانه برابر با r است. شرط اولیه برای توزیع دما با معادله‌ی زیر مشخص می‌شود:

1. Vineyar's thermal spike model

(۵۵-۱۰)

$$Q = \int c\,\mathrm{d}T = (c_0/n)T^n(r,0)\ .$$

برای دمای اولیه‌ی صفر، راه‌حل معادله‌ی ۱۰-۵۴ با توجه به شرایط مرزی در معادله‌ی ۱۰-۵۵، توزیع دمایی در فضا و زمان را نتیجه می‌دهد:

(۵۶-۱۰)

$$T(r,t) = \left[\frac{n\varepsilon}{4\pi\kappa_0 t}\right]^{1/n} \exp(-c_0 r^2/4\pi\kappa_0 t)\ .$$

با تعریف η به منزله‌ی تعداد کلی پرش‌های اتمی در میخچه در واحد طول هر میخچه، و سپس مقایسه با نفوذ حرارتی، رفتار آرنیوسی برای نرخ پرش، R، فرض می‌شود به گونه‌ای که $R = A\exp(-\frac{Q}{kT})$ است، سپس η برابر است با:

(۵۷-۱۰)

$$\eta = \int 2\pi r\,\mathrm{d}r \int A\exp(-Q/T(r,t))\,\mathrm{d}t\ .$$

انتگرال معادله‌ی ۱۰-۵۷ برابر است با:

(۵۸-۱۰)

$$\eta = \frac{n^3\Gamma(2n)A\varepsilon^2}{8\pi\kappa_0 c_0 Q^{2n}}\ ,$$

که $\Gamma(2n)$ تابع گاما با آرگومان مستقل $2n$ است. برای دماهای متوسط، $n = ۱$ و معادله‌ی ۱۰-۵۸ به صورت زیر در می‌آید:

(۵۹-۱۰)

$$\eta = \frac{A\varepsilon^2}{8\pi\kappa c Q^2} .$$

با برگشت به معادله‌ی ۱۰-۵۲ برای سیستم دوتایی با $|\Delta H_{\text{mix}}| > 0$، نرخ پرش مؤثر در دمای T می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۶۰-۱۰)

$$R_{\text{eff}} = A\exp(-Q/kT)\,[1 - 2\Delta H_{\text{mix}}/kT] ,$$

و معادله‌ی ۱۰-۵۷ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۶۱-۱۰)

$$\eta_{\text{c}} = \int 2\pi r\,\mathrm{d}r \int A\exp(-Q/kT(r,t))\,[1 - 2\Delta H_{\text{mix}}/kT(r,t)]\,\mathrm{d}t ,$$

که زیرنویس η گرایش شیمیایی را نشان می‌دهد. با در نظر گرفتن $n = ۱$ و حل کردن انتگرال در محدوده‌ی اندازه و عمر میخچه می‌توان نوشت:

(۶۲-۱۰)

$$\eta_{\text{c}} = \frac{A\varepsilon^2}{8\pi\kappa c Q^2}(1 - 4\Delta H_{\text{mix}}/Q) .$$

از آن‌جایی که انرژی فعال‌سازی با انرژی هم‌بستگی مقایسه می‌شود، می‌توان Q را برابر با $-s_2\Delta H_{\text{coh}}$ در نظر گرفت، که s_2 یک ثابت است. بعد از یک مقدار پرتوگیری Φ (i/cm^2)، تعداد کلی پرش‌ها در جامد برابر با $\eta_{\text{c}}\Phi/\rho$ است که ρ دانسیته‌ی اتمی است. در نتیجه نرخ اختلاط برابر است با:

(۶۳-۱۰)

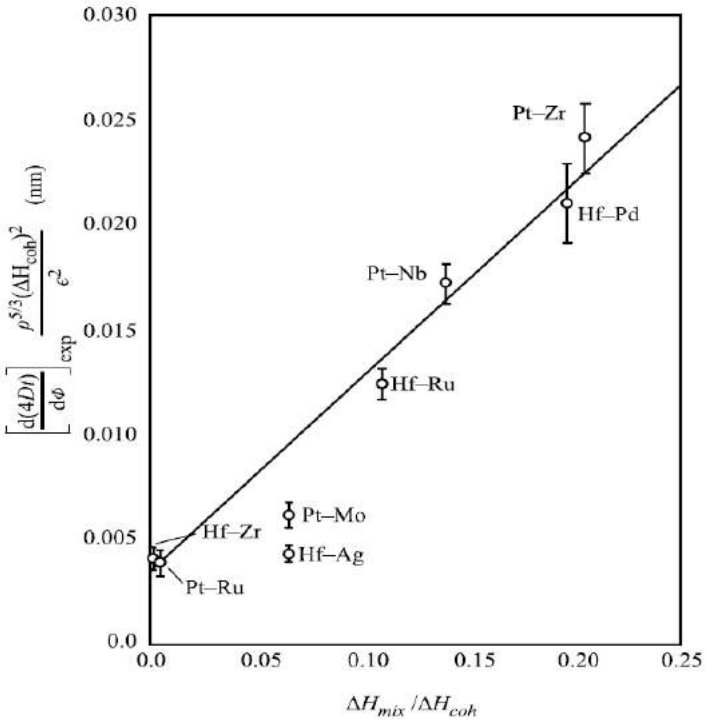
$$\frac{\mathrm{d}(4Dt)}{\mathrm{d}\Phi} = \eta_{\text{c}} r_{\text{c}}^2/\rho ,$$

که r_c فاصله‌ی پرش مشخص است. با فرض آن‌که r_c با فاصله‌ی درون اتمی مقایسه شود به صورتی که $r_c = s_1\rho^{-1/3}$ باشد، در نتیجه:

(۶۴-۱۰)

$$\frac{\mathrm{d}(4Dt)}{\mathrm{d}\Phi} = \frac{K_1\varepsilon^2}{\rho^{5/3}(\Delta H_{\mathrm{coh}})^2}(1 + K_2\Delta H_{\mathrm{mix}}/\Delta H_{\mathrm{coh}}) ,$$

که K_1 وابسته به κ، c و A و $K_2 = 4/s_2$است. معادله‌ی ۱۰-۶۴ در شکل ۱۰-۱۲ به صورت تابعی از نسبت $\Delta H_{\mathrm{mix}}/\Delta H_{\mathrm{coh}}$ برای تعداد زیادی از سیستم‌های آلیاژی دوتایی رسم شده است و هم‌بستگی دقیقی را نشان می‌دهد که مشخص می‌کند اثر شیمیایی روی اختلاط پرتویی حتی در دماهایی قوی است که RED رخ نمی‌دهد.

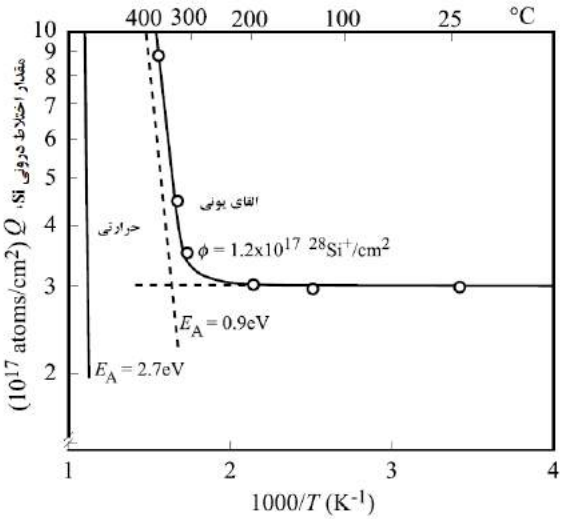


شکل ۱۰-۱۲. هم‌بستگی میان اختلاط و نسبت $\Delta H_{\mathrm{mix}}/\Delta H_{\mathrm{coh}}$ برای چندین فلز دو لایه که با یون‌های Xe^{++} با انرژی ۶۰۰ keV در دمای ۷۷K پرتودهی شده‌اند [۲۰].

شکل ۱۰–۱۳ مقدار اختلاط درونی سیلیسیم در نمونه‌ی دو لایه‌ی Si-Nb را که با یون‌های Si^+ پرتودهی شده نشان می‌دهد [۳۲]. در دمای بالا، اطلاعات یک رفتار آرنیوسی با انرژی فعال‌سازی ۰٫۹ eV را دنبال می‌کنند. هم‌چنان که دما کاهش می‌یابد، مقدار اختلاط درونی به صورت پیوسته تنزل نمی‌یابد؛ اما در مقدار تعیین شده به وسیله‌ی اختلاط بالستیکی عناصر که وابسته به دما است، یکنواخت می‌شود. اختلاط القا شده در اثر دما (اختلاط حرارتی) با منحنی پر رنگ در سمت چپ با یک انرژی فعال‌سازی ۲٫۷ eV نشان داده شده است. اثر افزایش نفوذ تابشی، بین دو منحنی که رفتار آرنیوسی را نشان می‌دهند، متفاوت است. لازم به ذکر است که اختلاط دمای پایین ناشی از افزایش نفوذ تابشی نیست بلکه بیش‌تر ناشی از اختلاط بالستیکی است. مقدار کلی اختلاط می‌تواند با یک ضریب نفوذ مؤثر [۲۵] توضیح داده شود:

(۱۰–۶۵)

$$D = D_{\text{ballistic}} + D_{\text{rad}} \exp(-Q/kT) \ ,$$



شکل ۱۰–۱۳. لگاریتم مقدار اختلاط درونی سیلیسیم برحسب دمای متقابل برای نمونه‌ی دو لایه‌ی Nb-Si بعد از جریان $۱٫۲ \times ۱۰^{۱۷}$ $^{28}Si^+/cm^2$. خط پررنگ منطبق بر نقاط اطلاعاتیِ مجموعه‌ای از قسمت مستقل از دما (نزدیک به خط نقطه‌چین افقی) و بخش فعال شده‌ی حرارتی (خط نقطه‌چین با شیب زیاد) با انرژی فعال‌سازی $E_A \sim ۰٫۹$ eV است[۳۲].

که عبارت اول در سمت راست ناشی از اختلاط بالستیکی است و مستقل از دما است و عبارت دوم ناشی از افزایش نفوذ تابشی است و وابستگی دمایی از نوع آرنیوسی دارد که Q یک انرژی فعال‌سازی ظاهری است. دمایی که در آن دو عبارت به صورت برابر در نفوذ شرکت می‌کنند، می‌تواند از معادله‌ی ۱۰-۶۵ تعیین شود:

(۱۰-۶۶)

$$T_c = \frac{Q}{k\left[\ln\left(D_{rad}/D_{ballistic}\right)\right]} .$$

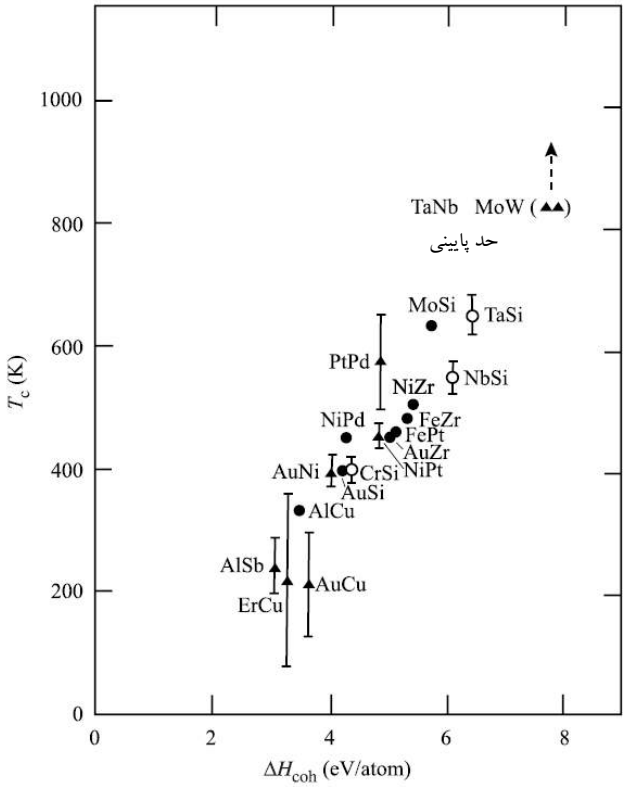
با فرض آن‌که یک ارتباط مقیاسی بین انرژی فعال‌سازی ظاهری و انرژی هم‌بستگی زمینه، ΔH_{coh} وجود داشته باشد، به عبارت دیگر $Q = S\Delta H_{coh}$ که S یک ثابت است، سپس می‌توان نوشت:

(۱۰-۶۷)

$$T_c = \frac{S\Delta H_{coh}}{k\left[\ln\left(D_{rad}/D_{ballistic}\right)\right]} .$$

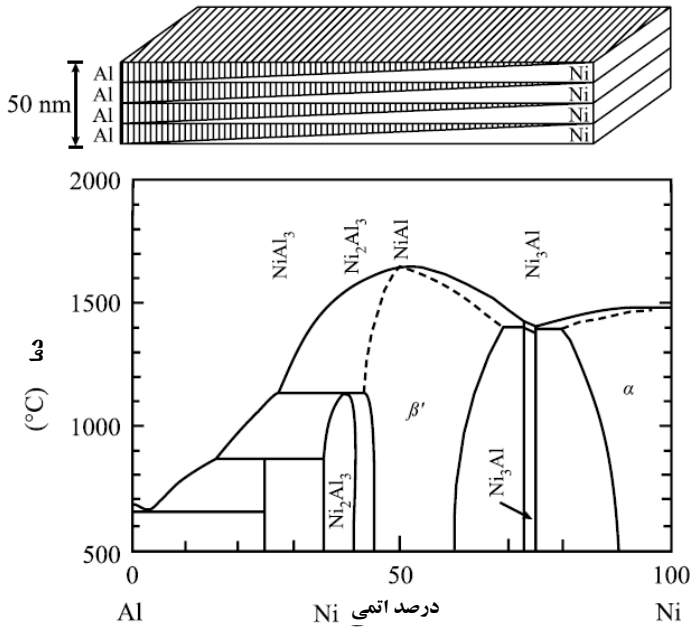
شکل ۱۰-۱۴ دمای بحرانی به صورت تابعی از میانگین انرژی هم‌بستگی برای چندین سیستم دولایه با استفاده از ضریب مقیاس، S = ۰٫۱ را نشان می‌دهد [۳۳]. لازم به ذکر است همان‌طوری که با معادله‌ی ۱۰-۶۷ پیش‌بینی می‌شود، دمای بحرانی با انرژی هم‌بستگی به صورت خطی است. با توجه به آن‌که انرژی مهاجرت جای خالی نیز با انرژی هم‌بستگی مقایسه می‌شود به این معنی است که افزایش نفوذ در اثر پرتودهی به علت مهاجرت جای خالی است.

علاوه بر همگن‌سازی یک هدف، اختلاط جابه‌جاساز، یک ابزار بسیار مؤثر برای مطالعه‌ی استحاله‌های فازی تحت پرتودهی است. پایداری فازی تحت پرتودهی در فصل ۹ بررسی گردید؛ اما اختلاط پرتو یونی یک فرصت مناسب برای مطالعه‌ی تشکیل فاز القا شده‌ی یونی است.



شکل ۱۰-۱۴. ارتباط بین میانگین انرژی هم‌بستگی و دمای بحرانی، T_c که در آن اختلاط ایجاد شده با افزایش نفوذ تابشی برابر با فرایندهای بالستیکی است [۳۳].

شکل ۱۰-۱۵ نشان می‌دهد که چگونه نمونه‌های دولایه‌ی شکاف‌دار می‌توانند برای پوشش دادن تمام محدوده ترکیبی در سیستم آلیاژی دوتایی Ni-Al ساخته شوند و چگونه فازها به صورت یک تابعی از ترکیب گسترده شده‌اند. شکل ۱۰-۱۶ نیز نشان می‌دهد که در اکثر موارد فازهای تشکیل شده مستقل از این هستند که پرتودهی با اختلاط پرتو یونی بوده یا به صورت کاشت مستقیم یون یک عنصر خنثی، یا مستقل از کاشت مستقیم A در B یا B در A است.



آنیل شده : 350°C → $NiAl_3$, Ni_2Al_3, NiAl, Ni_3Al

کاشته شده : 500 keV Xe, $2 \times 10^{15} cm^2$

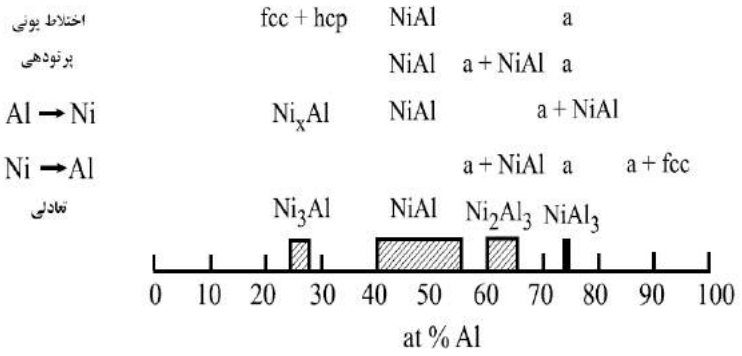
$NiAl_3$ → آمورف شده

Ni_2Al_3 → NiAl

NiAl → NiAl

Ni_3Al → بی‌نظم شده

شکل ۱۰–۱۵. آرایش فضایی نمونه، نمودار تعادل فازی Ni-Al و نتایج نمونه‌های چند لایه پیش بازپخت شده در $350^{\circ}C$ که با یون‌های Xe^{+} با انرژی ۵۰۰keV تا یک مقدار پرتوگیری $2 \times 10^{15} cm^2$ پرتودهی شده‌اند [۳۴].



شکل ۱۰–۱۶. خلاصه‌ای از ریزساختارها در سیستم Ni-Al که با عملیات‌های مختلف پرتو یونی آماده شده است [۳۵].

۱۰-۲-۵ ترکیبی از فرایندهای اثرگذار بر تغییرات ترکیبی سطح

با محاسبه اثرات تمام فرایندهای توضیح داده شده در قسمت‌های قبلی، لام و ویدرسیچ [۱۳] یک مدل پدیداری[1] برای اصلاحات ترکیبی القا شده در اثر بمباران فراهم کردند که بر پایه‌ی فرمول‌بندی یک‌سری از جفت معادلات دیفرانسیلی جزیی تشریح کننده‌ی تکامل زمانی و فضایی غلظت‌های عیوب و اتم‌ها در طول بمباران یونی آلیاژ دوتایی است. فرمول‌بندی براساس یک‌سری از معادلات سرعتی نفوذی و واکنشی بود، به عبارت دیگر، قانون دوم فیک با عبارات منبع و چاهک، نرخ زمانی تغییر ترکیب آلیاژ و غلظت‌های عیب را تشریح می‌کند، به گونه‌ای که:

$$\frac{\partial C_{\mathrm{v}}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\Omega J_{\mathrm{v}}) + K_0 - R \,, \tag{۱۰-۶۸}$$

$$\frac{\partial C_{\mathrm{i}}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\Omega J_{\mathrm{i}}) + K_0 - R \,, \tag{۱۰-۶۹}$$

$$\frac{\partial C_{\mathrm{A}}}{\partial t} = -\nabla \cdot [(\Omega J_{\mathrm{A}}) - D_{\mathrm{A}}^{\mathrm{disp}} \nabla C_{\mathrm{A}}] \,, \tag{۱۰-۷۰}$$

که K_0 و R نرخ‌های وابستگی موضعی و فضایی تولید و بازترکیبی جاهای خالی و بین‌نشین‌ها است و $D_{\mathrm{A}}^{\mathrm{disp}}$ ضریب نفوذی است که تنها به وسیله‌ی فرایند جابه‌جایی ایجاد شده است. وابستگیِ زمانی توزیع غلظت‌های عیوب و اتم‌ها می‌تواند با حل عددی معادلات ۱۰-۶۸ تا ۱۰-۷۰ برای یک هدف نیمه نامحدود با استفاده از شرایط اولیه و مرزی مناسب تعیین شود که به وسیله‌ی لام توضیح داده شده است [۱۳، ۳۶، ۳۷، ۳۸]. این فرمول‌بندی فرایندهای اختلاط جابه‌جاساز، افزایش نفوذ تابشی و جدایش القایی تابشی را پوشش می‌دهد. جذب گیبسی و کندوپاش ترجیحی می‌تواند با در نظر گرفتن لایه‌ی سطحی به جای فاز مجزا در این مدل تشریح شود. به علت ساختار پدیداری مدل، محاسبات می‌تواند برای تعیین وابستگی تغییرات ترکیبی سطحی و زیرسطحی به مواد و متغیرهای پرتودهی به علاوه مجزا

1. Phenomenological

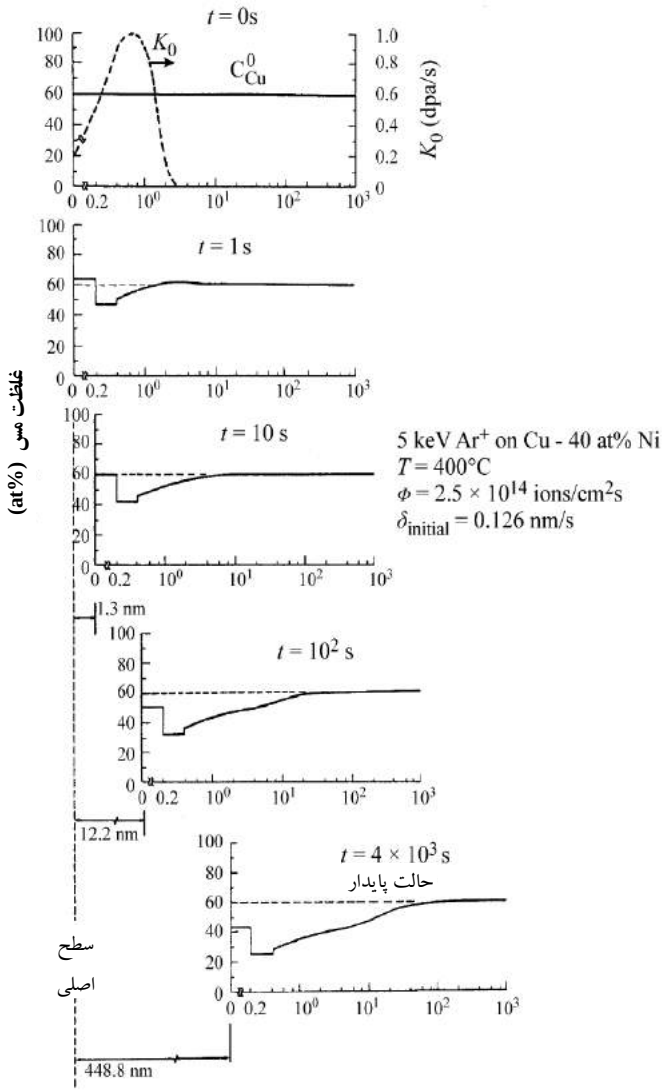
کردن سهم هریک از فرایندها انجام شود. به هر جهت به علت آن‌که بسیاری از عوامل مورد نیاز در مدل‌ها ناشناخته هستند، مقایسه‌های کمی تنها با آزمایش دشوار است. با وجود این، مدل‌سازی نیمه کمی از توزیع مجدد ترکیب القا شده در اثر بمباران در چندین آلیاژ دوتایی انجام شده است.

ویدرسیچ[1] و همکارانش [۱۱، ۳۴] توضیح خوبی از اثرات فرایندهای مختلف که در طول بمباران یک آلیاژ رخ می‌دهد و چگونگی تأثیرگذاری این فرایندها روی ترکیب سطحی را فراهم کردند. محاسبات با ترکیب‌های مختلفی از کندوپاش ترجیحی، اختلاط جابه‌جاساز، افزایش نفوذ القایی تابشی، جذب گیبسی و جدایش القایی تابشی انجام شد. شکل ۱۰-۱۷ تکامل زمانی سطح مقطع‌های غلظت مس و موقعیت سطح نمونه در Cu-40at%Ni بمباران شده با یون‌های آرگون ۵ keV در دمای ۴۰۰°C را نشان می‌دهد. جذب گیبسی منجر به غنی شدن ابتدایی ترکیب سطح از مس می‌شود (۱s). بعد از 10^{2}s کندوپاش، مس به صورت ترجیحی از روی سطح حذف شده که منجر به تهی شدن مس در سطح نسبت به حجم ماده می‌شود. بعد از 4×10^{3}s، حالت پایدار فرا می‌رسد و غلظت مس در سطح به پایان رسیده؛ اما سطح مقطع عمقی به صورت پیوسته اثر جذب گیبسی را منعکس می‌کند. شایان ذکر است که پس روی سطح با افزایش مقدار پرتوگیری به علت کندوپاش است.

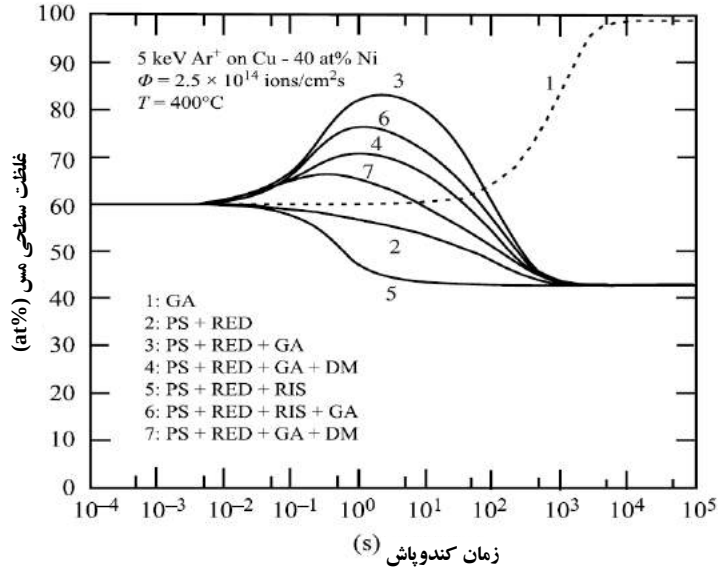
شکل ۱۰-۱۸ وابستگی زمانی غلظت مس در سطح آلیاژ را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که در غیاب پرتودهی (منحنی ۱)، جذب گیبسی منجر به غنی شدن شدید مس در لایه‌ی اتمی اول می‌شود. محاسبه‌ی تنها کندوپاش ترجیحی و افزایش نفوذ تابشی در طول پرتودهی (۲) منجر به یک کاهش یکنواخت در $C_{\mathrm{CU}}^{\mathrm{S}}$ تا مقدار حالت پایدار می‌شود که به وسیله‌ی نسبت احتمال کندوپاش و ترکیب حجمی تعریف شده است. اگر جذب گیبسی به صورت منحنی (۳) باشد، $C_{\mathrm{CU}}^{\mathrm{S}}$ در زمان‌های کوتاه به واسطه‌ی افزایش جذب ناشی از پرتودهی به سرعت افزایش و سپس به آرامی تا مقدار حالت پایدار کاهش می‌یابد. ورود اختلاط جابه‌جاساز اثر جذب گیبسی (۴) را کاهش می‌دهد. با در نظر گرفتن فقط کندوپاش ترجیحی، افزایش نفوذ تابشی و جدایش القایی تابشی (۵)، $C_{\mathrm{CU}}^{\mathrm{S}}$ به علت اثر غالب جدایش به سرعت تا مقدار حالت پایدار کاهش می‌یابد. اگر جذب گیبسی اضافه شود (۶) سپس اثر جدایش القایی تابشی محو می‌شود. در پایان با اضافه کردن اختلاط جابه‌جاساز (۷)، یا هنگامی که تمام فرایندها وارد شوند، $C_{\mathrm{CU}}^{\mathrm{S}}$ در ابتدا افزایش می‌یابد و سپس به سمت مقدار حالت تعادل کاهش می‌یابد.

1. Wiedersich

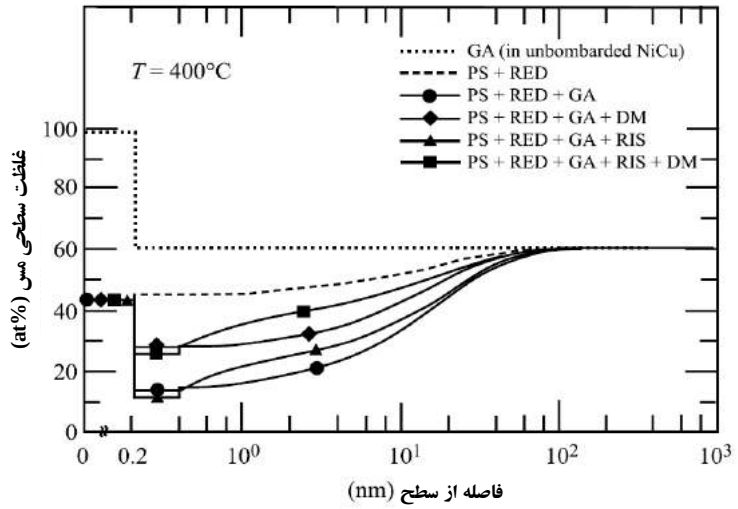
اثر ترکیب‌های متفاوت از فرایندها روی سطح مقطع غلظتی حالت پایدار مس در شکل ۱۰-۱۹ نشان داده شده است.



شکل ۱۰-۱۷. تکامل زمانی غلظت مس و موقعیت سطح در آلیاژ Cu-40at%Ni بمبارن شده با یون‌های +Ar keV ۵ در دمای ^{o}C ۴۰۰ [۱۱].



شکل ۱۰–۱۸. اثرات ترکیب‌های مختلفی از جذب گیبسی، کندوپاش ترجیحی، افزایش نفوذ ناشی از پرتودهی، اختلاط جابه‌جاساز ، جدایش القایی تابشی روی سیر تکامل زمانی غلظت مس در آلیاژ Cu-40at%Ni بمباران شده با یون‌های +Ar ۵ keV در دمای ^{o}C ۴۰۰ [۱۱].



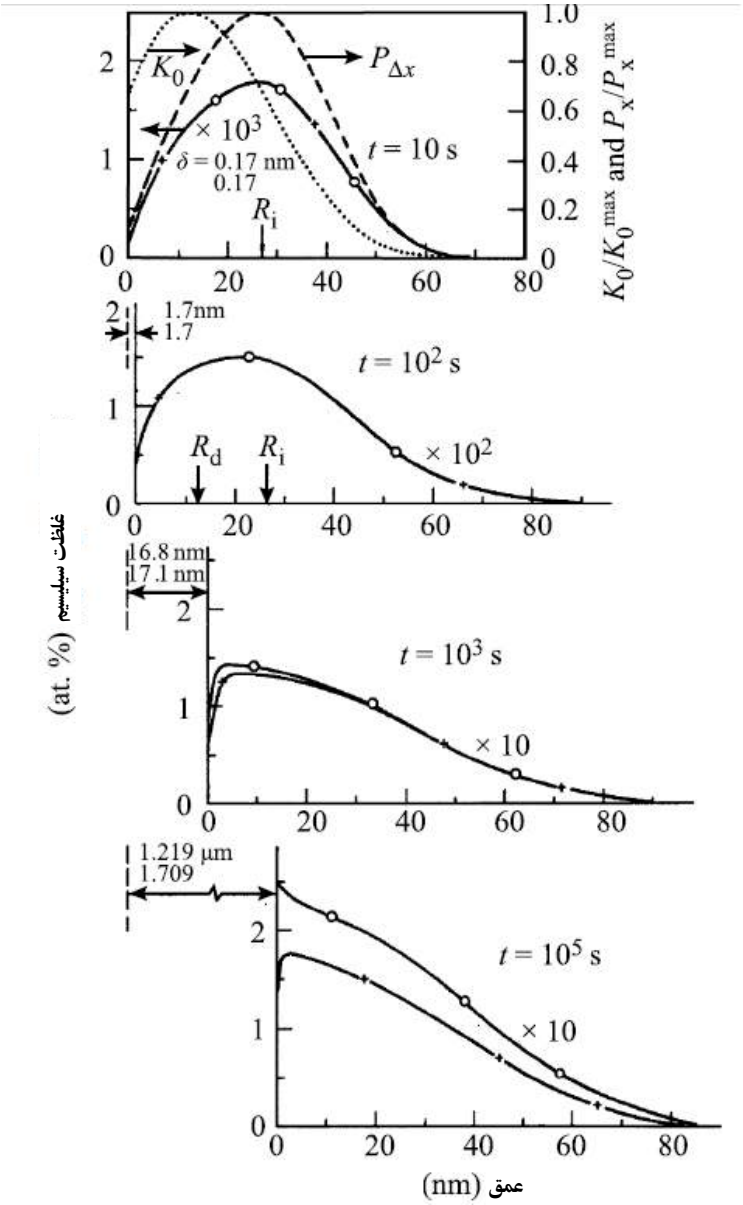
شکل ۱۰–۱۹. اثرات ترکیب‌های مختلف از ۵ فرایند توصیف شده در شکل ۱۰–۱۸ روی سطح مقطع غلظتی حالت پایدار مس [۱۱].

۱۰-۲-۶ توزیع مجدد کاشت در طول کاشت یونی

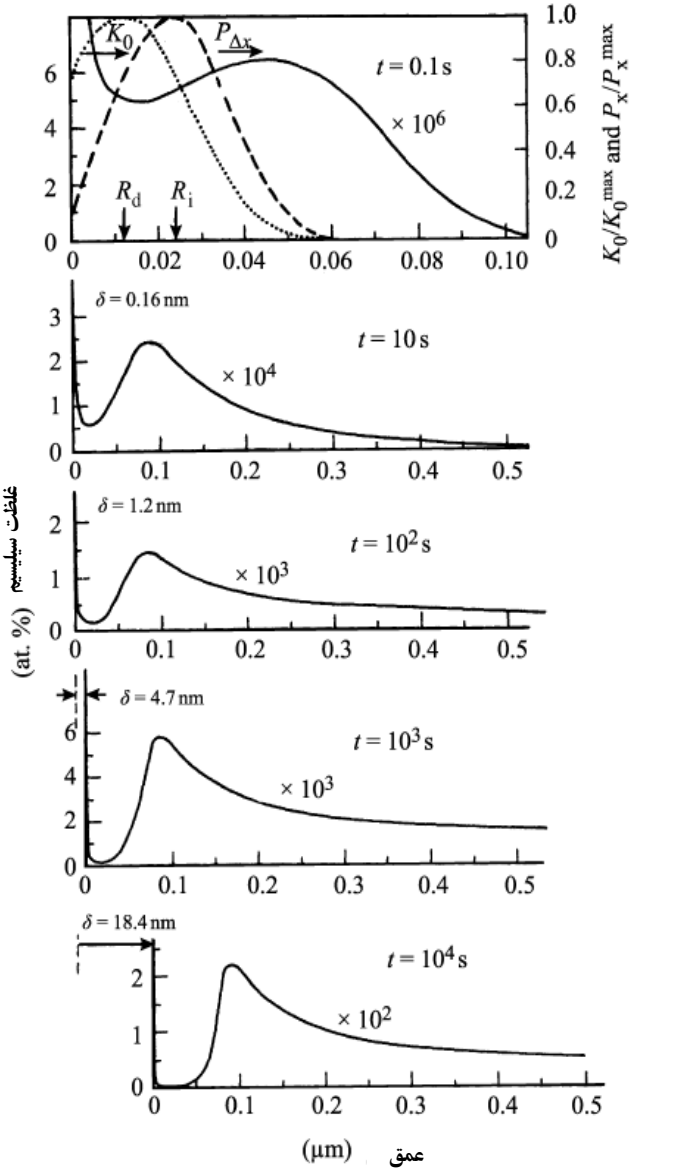
مثال کاشت مشخص شده در شکل ۱۰-۱۷ تا ۱۰-۱۹ برای بمباران آلیاژ با یون‌های یک گاز خنثی بود که هیچ‌گونه نقشی را به جای جزء شیمیایی آلیاژ ایفا نمی‌کند. در کاشت یونی علاوه بر اثرات فرایندهای سطحی مختلف، بسیار مهم است که غلظت یون کاشته شده تعیین شود. اخیراً مدل جنبشی به وسیله‌ی لام و لیف[1] [۳۹] برای توضیح اثرات این فرایندهای جنبشی روی توزیع مجدد فضایی اتم‌های کاشته شده در طول فرایندهای کاشت گسترش یافته است. اثرات فضایی نرخ‌های غیریکنواخت آسیب و رسوب یون، و نیز جابه‌جایی سطح بمباران شده به منزله‌ی نتیجه‌ای از کندوپاش و معرفی اتم‌های خارجی به درون سیستم، در این مدل محاسبه شده است. تکامل سطح مقطع غلظتی کاشت در زمان و فضا، برای دماها، انرژی‌های یون، و ترکیب‌های یون ـ هدف مختلف برای یک زمینه‌ی فلزی B محاسبه شد که در آن اتم‌های A تحت یک شار ϕ کاشته شده است. غلظت کلی جاهای خالی، بین‌نشین‌های B، بین‌نشین‌های A، کمپلکس‌های A ـ جای خالی و عناصر حل شونده‌ی جانشینی آزاد (A) بر طبق سیستمی از معادلات جنبشی [۳۹] مشابه با معادلات ۱۰-۶۸ تا ۱۰-۷۰ با زمان کاشت تغییر می‌کند. همراه با افزایش غلظت عناصر حل شونده در زمینه‌ی میزبان، سطح در معرض جابه‌جایی‌های ناشی از کندوپاش و معرفی اتم‌های خارجی در داخل سیستم قرار می‌گیرد. نرخ خالص جابه‌جایی سطحی به وسیله‌ی رقابت میان نرخ‌های جمع شدن و کندوپاش یون کنترل می‌شود.

سیر تکامل زمانی و فضایی ترکیب سطح و زیر سطح آلیاژ با حل این سری از معادلات برای محیط نیمه نامحدود و با آغاز از شرایط تعادلی ترمودینامیکی به‌دست می‌آید. محاسبات نمونه برای کاشت Al^+ و Si^+ پرانرژی در نیکل انجام شد، زیرا از مطالعات اولیه مشخص شده است که در پرتودهی Ni، Si در جهات مشابه با شارهای عیوب، جدایش می‌یابد درحالی‌که آلومینیوم مخالف شارهای عیوب است [۴۰]. توزیع مجدد عناصر حل شده‌ی آلومینیوم و سیلیسیم در نیکل در طول کاشت با انرژی ۵۰ keV در دمای $500\ ^oC$ به ترتیب در شکل‌های ۱۰-۲۰ و ۱۰-۲۱ نشان داده شده است.

1. Leaf



شکل ۱۰-۲۰. گسترش سطح مقطع‌های غلظتی آلومینیوم در طول کاشت keV ۵۰ در دمای $500^{o}C$. نرخ بهینه شده‌ی آسیب، K_0 و نرخ رسوب یون فسفر در منحنی بالایی نشان داده شده و جابه‌جایی‌های سطحی نتیجه شده از کندوپاش مشخص شده‌اند. لازم به ذکر است که سطح مقطع‌های غلظتی در ضرایبی ضرب شده‌اند که در هر منحنی نشان داده شده است [۱۳].



شکل ۱۰-۲۱. سیر تکامل زمانی سطح مقطع غلظت سیلیسیم در طول کاشت با انرژی ۵۰keV در دمای ^{o}C ۵۰۰. نرخ بهینه شده آسیب، K_0 و نرخ رسوب یون P در منحنی بالایی نشان داده شده است. جابه‌جایی‌های سطحی نتیجه شده از کندوپاش مشخص شده‌اند [۱۳].

در مورد کاشت آلومینیوم، C_{Al}^{S} با زمان تا یک مقدار حالت پایدار ۵۰ درصد اتمی افزایش می‌یابد، که به وسیله‌ی راندمان جزیی کندوپاش گونه‌های کاشته شده، کنترل می‌شود. این مقدار اساساً از مقدار به‌دست آمده در کاشت با انرژی بسیار بالا بزرگ‌تر است که کندوپاش نادیده گرفته می‌شود و C_{Al}^{S} به وسیله‌ی جدایش القایی تابشی کنترل می‌شود. به هرجهت غلظت کلی گونه‌های کاشته شده‌ی باقی‌مانده در نمونه به صورت قابل توجهی به علت کندوپاش کم‌تر است. به علاوه، شکل سطح مقطع کاشت حالت پایدار به وسیله‌ی اختلاط جابه‌جاساز که شرایط مرزی در سطح را کنترل می‌کند، و به وسیله افزایش نفوذ تابشی و جدایش القایی تابشی تحمیل می‌شود.

سیر تکامل سطح مقطع سیلیسیم نسبت به آلومینیوم به علت رفتارهای جدایش القایی تابشی مختلف نسبتاً متفاوت است. بعد از یک زمان کاشت کوتاه، به علت جدایش القایی تابشی، غنی شدن سیلیسیم در سطح رخ می‌دهد، و بیشینه توزیع سیلیسیم شروع به حرکت به داخل نمونه می‌کند (شکل ۱۰-۲۱). با افزایش زمان، C_{Si}^{S} به صورت یکنواخت افزایش می‌یابد و در زمان $t \geq ۲ \times ۱۰^{۴}\ s$ به یک مقدار حالت پایدار تقریباً ۱۰۰ at% می‌رسد. برخلاف مورد آلومینیوم، سطح مقطع سیلیسیم یک تغییر قابل توجهی در توزیع گونه‌های کاشته شده در منطقه‌ی خارج از محدوده را نشان می‌دهد. این انتقال پیش‌بینی شده‌ی بیشینه‌ی توزیع سیلیسیم در داخل نمونه با اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی انجام شده به وسیله‌ی مایر[1] و همکارانش [۴۱] در کاشت سیلیسیم در نیکل در دماهای بالا موافق است.

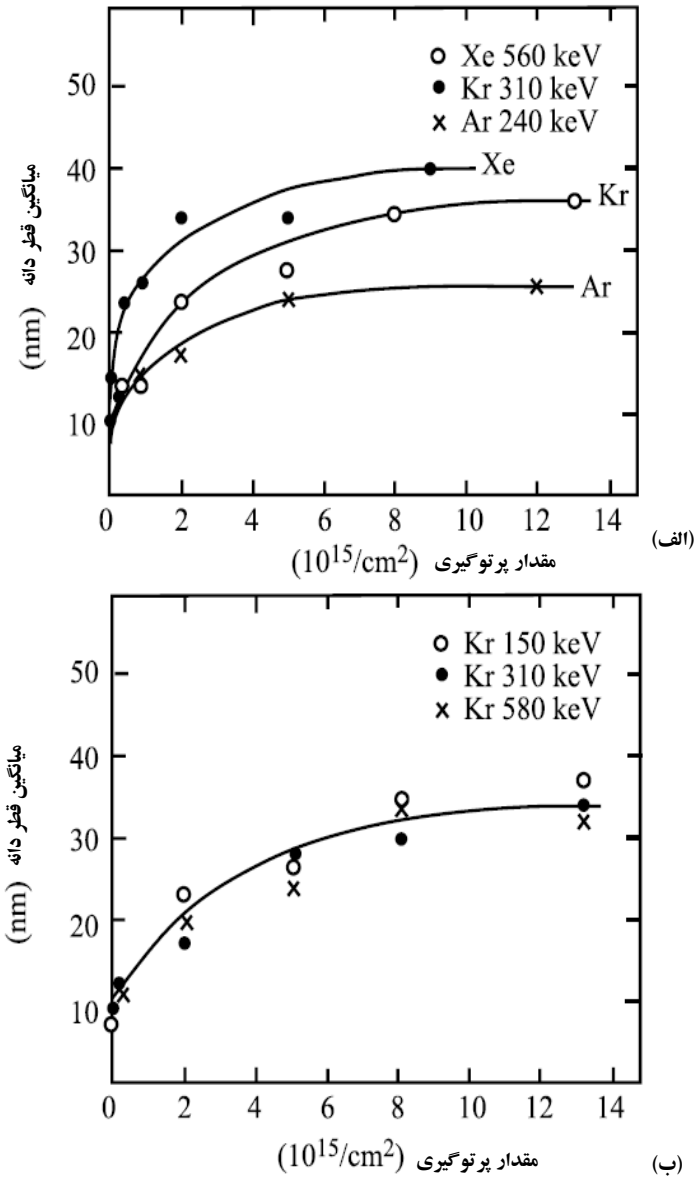
۱۰-۳ اثرات دیگر کاشت یونی

۱۰-۳-۱ رشد دانه

رشد دانه‌ی القایی تابشی در طول پرتودهی فلزات خالص و چندلایه‌ها مشاهده شده است. لیو[2] و مایر[3] [۴۲] رشد دانه‌های فیلم‌های نیکل خالص در طول پرتودهی با یون‌های گاز خنثی آرگون، کریپتون و زنون در محدوده‌ی انرژی ۱۵۰ تا ۵۸۰ keV را مشاهده کردند.

1. Mayer
2. Liu
3. Mayer

در آزمایشات آن‌ها، اندازه دانه با مقدار پرتوگیری تا اشباع در حدود ۱×۱۰^{۱۶} i/cm^2 افزایش پیدا کرد. این محققین در نمونه‌های پرتودهی شده‌ی اندازه دانه تقریباً همگنی را مشاهده کردند که در مقایسه با محدوده‌ی وسیع از اندازه دانه‌ی نمونه‌های به صورت حرارتی بازپخت شده است. آن‌ها هم‌چنین وابستگیِ اندازه دانه‌ی اشباع شده به گونه‌های یون و فقط وابستگیِ ضعیفی از اندازه دانه به مقدار یون در مقدار پرتوگیری‌های بالا را مشاهده کردند (شکل ۱۰-۲۲). احتمالاً آسیب موضعی ایجاد شده به وسیله‌ی میخچه‌ی جابه‌جایی در اطراف مرزدانه، نیرو محرکه‌ای برای رشد دانه است. رشد دانه‌ی مشاهده شده به وسیله‌ی آرایش مجدد یا رشد دانه‌های به شدت آسیب دیده به درون دانه‌های غیرآسیب دیده‌ی همسایه تشریح می‌شود. کاهش انرژی در دانه‌ی در حال رشد برابر با تفاوت میان انرژی آزاد شده از منطقه‌ی مصرف شده و انرژی مورد نیاز برای گسترش مرزدانه است. سرعت اولیه‌ی رشد دانه می‌تواند با احتمال بالایِ آسیب یک دانه‌ی کامل هنگامی تشریح شود که دانه‌ها کوچک هستند. هم‌چنان که فرایند پرتودهی ادامه می‌یابد، دانه‌های بزرگ، دانه‌های کوچک‌تر را مصرف می‌کنند و میانگین اندازه دانه افزایش می‌یابد. هنگامی که قطر میانگین دانه‌های در حال رشد به ابعاد حجم آسیب دیده می‌رسد، احتمال آسیب گسترده‌ی دانه‌ی کامل با آبشار برخوردی تکی کاهش می‌یابد، زیرا شانس رشد دانه‌ای مشخص در گرو مصرف دیگر دانه‌هاست. بنابراین نرخ رشد دانه به صورت تدریجی با افزایش اندازه دانه کاهش می‌یابد.



شکل ۱۰-۲۲. میانگین قطر دانه برحسب مقدار پرتوگیری برای (الف) پرتودهی یونی فیلم‌های چند بلوری نیکل با Ar ۲۴۰keV، Kr ۳۱۰keV و Xe ۵۶۰keV و (ب) پرتودهی فیلم‌های چند بلوری نیکل با یون کریپتون با انرژی‌های ۱۵۰، ۳۱۰ و ۵۸۰keV [۴۲].

افزایش نرخ رشد دانه در طول اختلاط فیلم‌های چندلایه Ni-Al بیش‌تر از نرخ رشد دانه به علت بمباران فیلم‌های هم رسوب شده Ni-Al با ترکیب مشابه و با ضریبی در حدود ۲٫۲ است (شکل ۱۰-۲۳). این افزایش می‌تواند با استفاده از مفهوم حرارت اختلاط، با استفاده از عبارت ژوهانسون[1] برای تعداد کلی پرش‌های اتمی القایی در یک میخچه حرارتی در واحد طول میخچه‌ی استوانه‌ای حرارتی، η، فهمیده شود. با فرض آن‌که این مقدار متناسب با تحرک مرزدانه باشد، اندازه دانه، d می‌تواند به اندازه‌ی اولیه دانه، d_0 و η در معادله‌ی ۱۰-۶۴ ارتباط داده شود به صورتی که

(۱۰-۷۱)

$$(d^3 - d_0^3)/\phi\alpha\varepsilon^2\Delta H_{\text{coh}}^2[1 + K_2(\Delta H_{\text{mix}}/\Delta H_{\text{coh}})] \ .$$

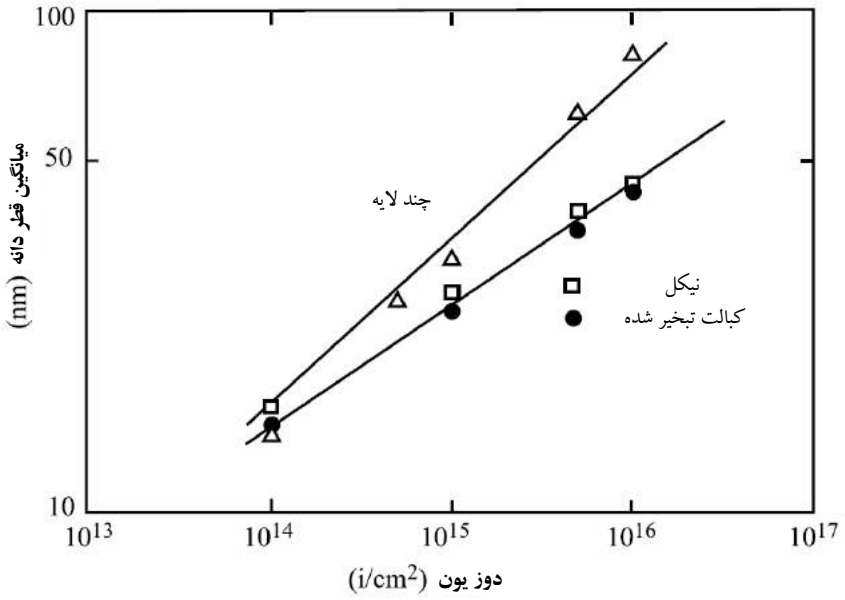
از آن‌جایی که برای فیلم‌های هم تبخیری پرتودهی شده[2] $\Delta H_{\text{mix}} = 0$ است، نسبت مقادیر اندازه‌گیری شده قابلیت تحرک باید به صورت زیر باشد:

(۱۰-۷۲)

$$\frac{(d^3 - d_0^3)\big|_{\text{ML}} / \phi|_{\text{ML}}}{(d^3 - d_0^3)\big|_{\text{CO}} / \phi|_{\text{CO}}} = 1 + K_2(\Delta H_{\text{mix}}/\Delta H_{\text{coh}}) \ .$$

با انرژی هم‌بستگی و حرارت اختلاط مشخص یک آلیاژ Ni-20at%Al، نسبت موجود در معادله‌ی ۱۰-۷۲، در مقایسه با مقادیر اندازه‌گیری شده ۲٫۲، برابر با ۳٫۰ است. این نتایج مشخص می‌کند که حرارت اختلاط نقش مهمی را در رشد دانه‌ی القایی یونی به مانند اختلاط پرتو یونی ایفا می‌کند.

1. Johnson's expression
2. Irradiated co-evaporated Films



شکل ۱۰-۲۳. مشاهده‌ی رشد دانه‌ی القایی یونی در نیکل با ضخامت ۴۰nm، چندلایه‌های Ni-20at%Al و فیلم‌های هم تبخیری Ni-20at%Al پرتودهی شده با یون‌های Xe^{++} ۷۰۰ keV [۴۳].

۱۰-۳-۲ بافت

گزارشات متعددی از اثرات بافت در اختلاط پرتو یونی یا فیلم‌های رسوبی ایجاد شده با کمک پرتو یونی منتشر شده است. الکساندر[1] و همکارانش [۴۳] و اریدون[2] و همکارانش [۴۴] دریافتند که چند لایه‌های مختلطی از نیکل و آلومینیوم در ترکیب Ni-20%Al منجر به تشکیل فازهای hcp و fcc(γ) می‌شوند. فاز γ یک بافت قوی ⟨111⟩ دارد و فاز hcp یک بافت ⟨001⟩ دارد. بافت‌ها به گونه‌ای هستند که صفحات فشرده هر دو فاز موازی با فیلم‌های سطحی هستند. این بافت‌ها بدون توجه به زاویه‌ی یون تابیده شده از فیلم تشکیل می‌شوند. به نظر می‌رسد که نیرو محرکه تشکیل بافت، انطباق صفحات فشرده باشد. احمد[3] و پوتر[4] [۴۵] متوجه شدند که پرتودهی نیکل با آلومینیوم تا مقدار

1. Alexander
2. Eridon
3. Ahmed
4. Potter

پرتوگیری $1/2\times10^{18}\ /cm^2$ منجر به تشکیل دانه‌های ۳۵۰nm از فاز β' که با توجه به ساختار نیکل fcc مطابق با روابط نیشی یاما آرایش یافته می‌شود [۴۶].

گسترش بافت در طول رسوب‌گذاری با کمک پرتو یونی می‌تواند با جهات کانال‌بندی یون‌ها در شبکه‌ی بلوری در ارتباط باشد و دانسیته‌ی رسوب انرژی به صورت معکوس با عمق کاناله شدن مرتبط است. در نتیجه، در بلور fcc، کاناله شدن آسان در جهت‌های ⟨110⟩، ⟨200⟩، ⟨111⟩ است. برادلی[1] و همکارانش [۴۷] مدلی را برای تشریح گسترش جهت‌های ترجیحیِ ناشی از بمباران‌های یونی کم انرژی در طول رشد فیلم توسعه دادند که بر پایه‌ی تفاوت در راندمان‌های کندوپاش برای جهات متفاوت برای بازآرایشی در طول تبلور مجدد است. البته هر دو اثر بر پایه‌ی پدیده‌ی مشابه تغییر دانسیته انرژی با جهت کاناله شدن هستند. در این مدل، بلوریت‌ها با جهت‌های کندوپاش بالا بسیار سریع حذف شده و مواد رسوبی جدید به صورت هم‌بافته[2] در جهت‌هایی با راندمان کندوپاش پایین رشد می‌کنند.

فیلم‌های نازکِ مواد رسوب داده شده‌ی رسوب‌گذاری بخار فیزیکی[3] به صورت معمول با صفحاتی با بالاترین دانسیته‌ی اتمی موازی با زمینه رشد می‌کنند در نتیجه فیلم‌های fcc یک بافت ⟨111⟩ دارند، فیلم‌های bcc بافت ⟨110⟩ و فیلم‌های hcp بافت ⟨0002⟩ (برای نسبت‌های ایده‌آل c/a) را دارند. آسان‌ترین جهت‌های کانال‌زنی در هر ساختار به صورت زیر است:

fcc ⟨110⟩ , ⟨100⟩ , ⟨111⟩
bcc ⟨111⟩ , ⟨100⟩ , ⟨110⟩
hcp ⟨1120⟩ , ⟨0002⟩

بمباران یونی باعث انتقال در آرایش مرجح به امتداد آسان‌ترین جهت کانال‌زنی در طول محور پرتو یونی می‌شود. در نتیجه، پرتو یونی در برخورد عمود روی فیلم fcc باعث انتقال در آرایش از بافت ⟨111⟩ به ⟨110⟩ می‌شود. پرتو فرودی در زاویه بافت متفاوتی را وابسته به ساختار بلورشناسی تولید می‌کند. اثر بافت‌بندی در پرتوهای با انرژی بالا بسیار حساس است زیرا حجم بیش‌تری در هر یون

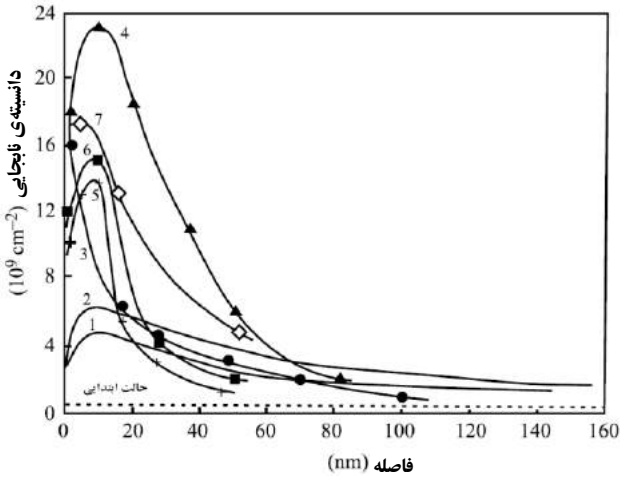
1. Bradley
2. Epitaxially
3. PVD

فرودی تأثیر می‌پذیرد و نفوذ عمیق‌تر می‌شود. آزمایشات روی بمباران یونی در طول رسوب‌گذاری فیلم Al نشان می‌دهد، درحالی‌که Al در طول رسوب‌گذاری بخار فیزیکی بافت بسیار قوی ⟨111⟩ را تشکیل می‌دهد، بمباران در طول رسوب‌گذاری می‌تواند بافت ⟨110⟩ با قدرت برابر را القا کند که به وسیله‌ی کانال‌بندی یونی تحریک شده است.

۱۰-۳-۳ ریزساختار نابجایی

کاشت یونی می‌تواند تشکیل دانسیته‌ی بالای نابجایی را درست در زیر لایه‌ی کاشته شده و در پاسخ به تنش‌های سطحی بالای ایجاد شده به وسیله‌ی مقادیر پرتوگیری بالا از عناصر کاشته شده القا کند [۴۹]. شکل ۱۰-۲۴ سطح مقطع عمقی از دانسیته‌ی نابجایی در آهن آلفا ناشی از کاشت یون‌های مختلف (C,Fe,W,Ar) در انرژی‌های بین ۴۰ تا ۶۸ keV و مقادیر پرتوگیری بالای $۱۰^{۱۸}$ cm^{-2} را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که درحالی‌که برد طی شده‌ی یون در تمام موارد کم‌تر از ۵۰nm است، دانسیته‌ی نابجایی القا شده در محدوده‌ی بین ۵ و ۱۰ μm به حداکثر رسیده و تا ۱۰۰ μm و بیش‌تر گسترده می‌شود. ریزساختار به وسیله‌ی شبکه‌ی نابجایی متراکم توصیف می‌شود که در آن دانسیته‌ی نابجایی با مقدار پرتوگیری و شعاع یون کاشته شده افزایش می‌یابد. اندازه‌گیری‌های پراکنش پرتو ایکس نشان می‌دهد که تنش‌ها، تنش تسلیم را افزایش می‌دهد و منجر به کرنش‌های پلاستیک در محدوده‌ی ۱۰٪ می‌شود.

شبکه‌ی نابجایی با دانسیته‌ی بالایی که به وسیله‌ی کاشت یون ایجاد شده است تبلور مجدد را القا می‌کند و سپس توزیع گونه‌های کاشته شده را تحت تأثیر قرار می‌دهد. احمد و پوتر [۴۵] مطالعاتی را روی کاشت آلومینیوم با انرژی ۱۸۰keV روی نیکل خالص در ^{o}C ۲۵ و دماهای بالا (^{o}C ۳۰۰-۶۰۰) انجام دادند. در دماهای بالا، حلقه‌های نابجایی ویژه‌ی ریزساختار را در جریان‌های پایین (تقریباً $۱۰^{۱۵}$ cm^{-2}) کنترل می‌کنند. این حلقه‌ها مجموعه اتم‌های بین‌نشین یا جاهای خالی، عیوب ایجاد شده به وسیله‌ی یون‌های پرانرژی آلومینیوم را محدود می‌کنند و در داخل ساختار نیکل نفوذ کرده و اتم‌ها را از موقعیت‌هایشان در شبکه جابه‌جا می‌کنند. حلقه‌ها با کاشت بیش‌تر صعود می‌کنند، و دیگر حلقه‌ها را قطع کرده و با آن‌ها واکنش می‌دهند و بعد از مقدار پرتوگیری $۲٫۱ \times ۱۰^{۱۷}$ Al/cm^2 شبکه‌ای پیچیده از نابجایی‌ها را تشکیل می‌دهند. با مقدار پرتوگیری ۳×۱۰^{۱۷} Al/cm^2، تراکم‌های سه بعدی از جاهای خالی مشاهده می‌شود.

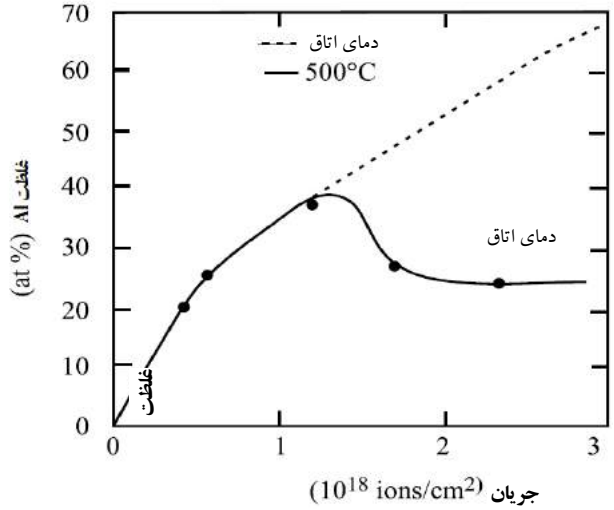


شکل ۱۰–۲۴. دانسیته‌ی نابجایی بر حسب عمق در آهن آلفا پرتودهی شده با ۱) C : ۴۰ keV، ۱×۱۰^{۱۶} cm^{-2}، ۲) C : ۴۰ keV، ۱×۱۰^{۱۸} cm^{-2}، ۳) Fe : ۶۸ keV، ۱×۱۰^{۱۸} cm^{-2}، ۴) W : ۱۱۰ keV، ۲×۱۰^{۱۷} cm^{-2}، ۵) Ar : ۵۰ keV، ۲×۱۰^{۱۶} cm^{-2}، ۶) Ar : ۵۰ keV، ۵×۱۰^{۱۶} cm^{-2}، ۷) Ar : ۵۰ keV، ۱×۱۰^{۱۷} cm^{-2}، پرتودهی‌های ۱ تا ۴ به صورت نوسانی و پرتودهی‌های ۵ تا ۷ به صورت پیوسته انجام شده است [۴۹].

سطح مقطع ترکیبی آلومینیوم کاشته شده در نیکل بین دمای ۲۳ تا ۶۰۰°C و برای مقدار پرتوگیری‌های کم‌تر از $۱۰^{۱۸}$ cm^{-2} نسبتاً مستقل از دما است. به هرجهت، در مقادیر پرتوگیری بالا تغییرات برجسته‌ای در توزیع گونه‌های کاشته شده رخ می‌دهد که به صورت پهن شدن سطح مقطع و منتقل شدن یک مقدار قابل توجهی از آلومینیوم به عمق‌های بالاتر است (شکل ۱۰–۲۵). تغییرات مشابهی متعاقب پیرسازی در دمای ۶۰۰ °C و به مدت ۱۵ Min برای نمونه‌های کاشت شده در دمای اتاق رخ می‌دهد. ریزساختار گسترش یافته در عمق‌های بیش‌تر در قبال برد یون‌های Al^+ keV ۱۸۰، تقریباً ۱۰۰ nm، نقش مهمی را در تعیین پایداری سطح مقطع‌های غلظتی گونه‌های کاشته شده ایفا می‌کند.

حلقه‌های نابجایی متعاقب کاشت در دمای اتاق، در عمق‌های نزدیک به ۳۰۰nm حضور دارند. این حلقه‌ها، حلقه‌های فرانک نقص‌دار با قطر ۱۰–۵ nm هستند و عدد دانسیته‌ی آن‌ها با جریان افزایش می‌یابد و در $۱۰^{۱۸}$ cm^{-2} × ۳ به $۱۰^{۱۶}$ cm^{-2} × ۴ می‌رسد. به هرجهت، نابجایی‌های پشت لایه‌ی کاشته شده هنگامی حذف می‌شوند که ماده تا ۶۰۰ °C حرارت دیده شود. این فرایند به وسیله‌ی تبلور مجدد

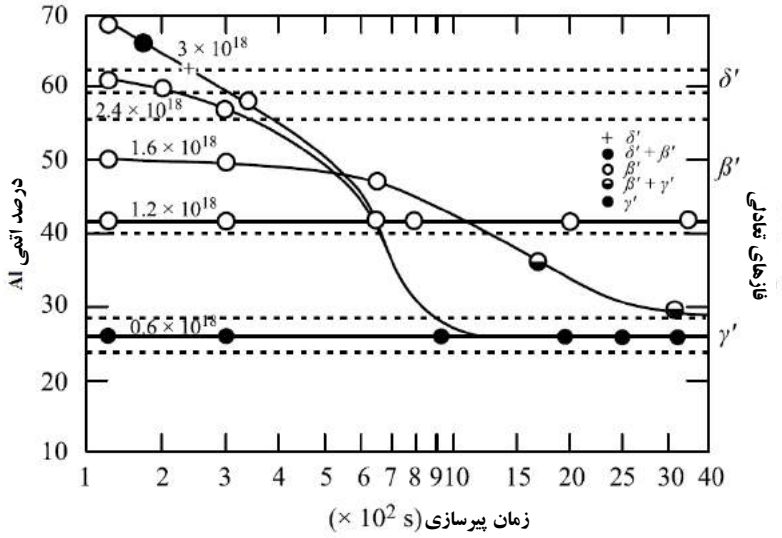
رخ می‌دهد که مسئول توزیع مجدد آلومینیوم کاشته شده است. در ادامه فرایندهایی تشریح می‌شوند که رخ می‌دهند.



شکل ۱۰-۲۵. غلظت بیشینه‌ی آلومینیوم که برحسب جریان برای کاشت آلومینیوم در نیکل در دمای ^{o}C ۵۰۰ رسم شده است [۵۴].

متعاقب کاشت در دمای اتاق، فاز بی‌شکل در عمق تقریباً ۱۶۰ نانومتری گسترش می‌یابد. بلورهای کوچک β' و γ به ترتیب از ۱۶۰ nm به تقریباً ۳۰۰nm و از ۳۰۰ nm به تقریباً ۴۰۰nm گسترده می‌شوند. نابجایی‌ها و حلقه‌های نابجایی در زیر این عمق‌ها و تقریباً در بالای ۸۰۰ nm گسترش می‌یابند. پیرسازی در دمای ۶۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد بعد از کاشت در دمای اتاق یا کاشت در دماهای بالا منجر به تبلور مجدد ساختار دانه ریز به عمق‌های ۸۰۰ تا ۱۰۰۰ nm می‌شود. در هر دو مورد، اتم‌های آلومینیوم باید از طریق نیکل تقریباً خالص حرکت کرده تا توزیع مجدد را ایجاد کنند که در صورتی امکان پذیر است که بعضی از فرایندهای نفوذ سریع رخ دهند. این امکان به وسیله‌ی دانه‌های ریزی حاصل می‌شود که روی تبلور مجدد منطقه به شدت جابه‌جاشده دورتر از لایه‌ی کاشته شده تشکیل می‌شوند و مرزدانه‌های بزرگ زاویه را برای نفوذ سریع غیرایده‌آل فراهم می‌کند. ترکیب با محدود شدن تبلور مجدد به شرایط پایدار می‌رسد. شکل ۱۰-۲۶ نشان می‌دهد که توزیع مجدد فقط بالای یک مقدار پرتوگیری آستانه رخ می‌دهد که نقش آسیب تابشی در فرایند تبلور مجدد را نشان می‌دهد.

این مثال برای ارتباط دادن نقش گونه‌های کاشته شده، مشخصه‌ی آسیب تابشی و فرایندهایی (تبلور مجدد و نفوذ سریع غیرایده‌آل) به‌کار می‌رود که می‌تواند به وسیله‌ی میدان‌های کاشت تأثیر بپذیرد.



شکل ۱۰–۲۶. غلظت آلومینیوم بر حسب زمان در دمای $600^{o}C$ برای جریان‌های بین ۰٫۶ و 3.0×10^{18} i/cm^2. نشانه‌های روی منحنی‌ها فازهای مشاهده شده در لایه‌های کاشته شده هستند و آن‌هایی که بر اساس نمودار فازی تعادلی (محور عمودی سمت راست) انتظار می‌رود [۴۵].

۱۰–۴ بارگذاری گازی مقدار بالا: تاول زدن یا ورقه ورقه شدن

به نظر می‌رسد که دیواره‌ی اول و منحرف کننده رآکتور گداخت در معرض شارهای بالایی از یون‌های هلیوم و دوتریم انرژی پایین و متوسط قرار دارند که در واقع محصولات گداخت هستند. کم‌تر از MeV ۱، هلیوم در عمق‌های تقریباً کم‌تر از μm ۱ زیر سطح متوقف می‌شود و تمدید زمان در معرض شارهای بالا می‌تواند منجر به سطح بالایی از هلیوم شود. در دماهای (^{o}C ۷۰۰–۴۰۰) که انتظار می‌رود و با همراهی غلظت عیوب بالا ناشی از پرتودهی، هلیوم متحرک خواهد شد و ممکن است منجر به تشکیل حباب‌های بحث شده در فصل ۸ شود. رشد و به هم پیوستگی حباب‌ها همان‌طوری که در شکل ۱۰–۲۷ نشان داده شده است منجر به تشکیل تاول‌ها و ورقه ورقه شدن سطح می‌شود. شکل ۱۰–۲۸ الف نتیجه‌ی بارگذاری بالای هلیوم در فاصله‌ی کوتاه در زیر سطح فلز را نشان

می‌دهد. حباب‌ها در نوار باریک پیوسته در زیر سطح تحت فشار قرار می‌گیرند. در آن‌جا ممکن است که حباب‌ها رشد کنند و برای تشکیل حباب‌های بزرگ‌تر به یک‌دیگر بپیوندند یا به علت تنش‌های میان حباب‌ها منجر به شکست‌های درون حبابی شود (شکل ۱۰-۲۸ الف). در شکل شکل ۱۰-۲۸ ب سطح مقطعی از ناحیه‌ی زیرسطحی یک نمونه‌ی نیکلی بمباران شده با مقدار پرتوگیری بالایی از هلیوم را نشان می‌دهد که ریزساختار حباب محدود به نواحی نزدیک به سطح است. تنش‌ها به علت آن افزایش می‌یابد که حباب‌ها در تعادل نیستند. یعنی، فشار ناشی از گاز در حباب به وسیله‌ی تنش ناشی از کشش سطحی متعادل نمی‌شود که منجر به یک تنش مستقیم شعاعی، σ_{rr} روی سطح می‌شود:

(۷۳-۱۰)

$$\sigma_{rr} = p - (2\gamma/r) .$$

ولفر[1] [۵۲] عبارتی را برای میانگین میدان تنشی میان حباب‌ها گسترش داد:

(۷۴-۱۰)

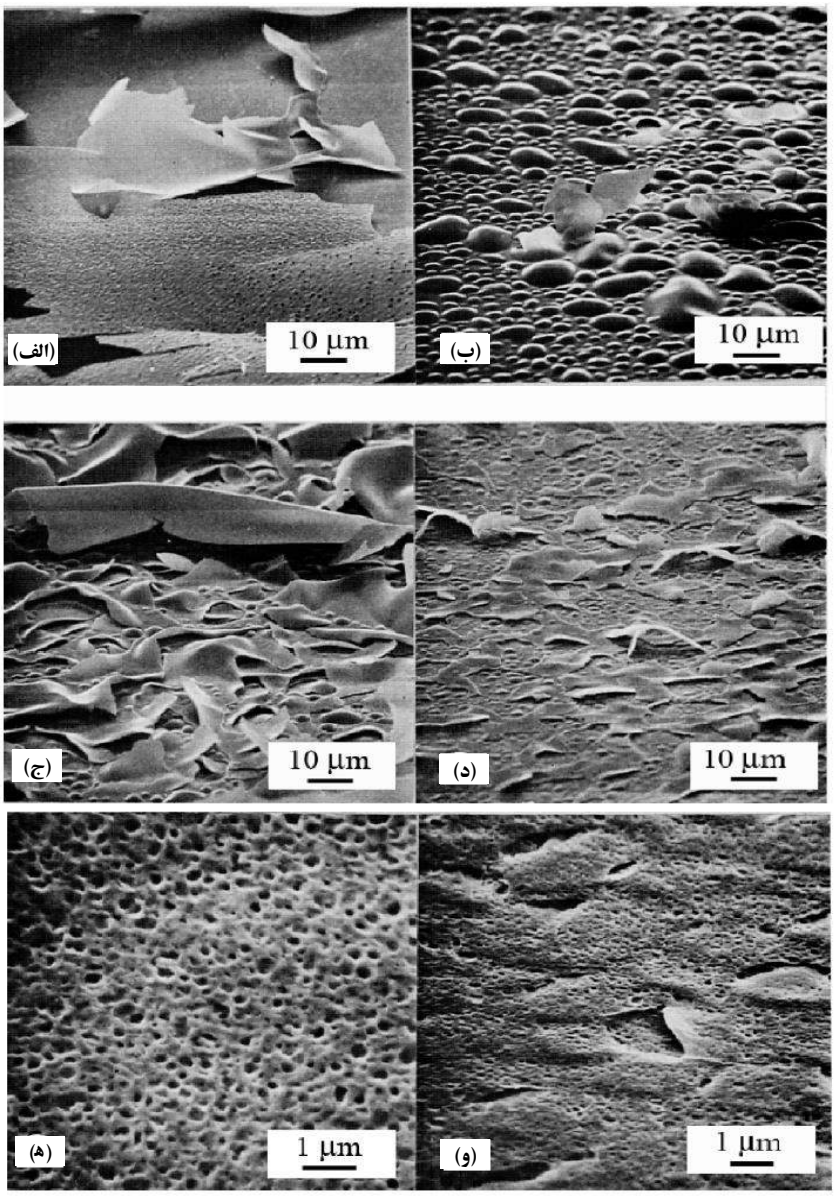
$$\frac{\overline{\sigma}}{\mu} = \left[f_{He} \frac{p}{\mu \rho \Omega} - \frac{2\gamma}{\mu \Omega} \left(\frac{4\pi \rho_B}{3} \right)^{1/3} S^{2/3} \right] F(S) ,$$

که μ ضریب برشی، $f_{He} = m\rho_B\Omega$ ، m تعداد اتم‌های گازی در یک حباب، ρ_B دانسیته‌ی حباب، Ω حجم اتمی اتم‌های فلز، ρ دانسیته‌ی هلیوم در حباب‌ها، γ کشش سطحی هستند و $S = f_{He} / \rho$ تابع $F(S)$ تعریف شده برای آرایش تصادفی از حباب‌ها است و برای $\rho \sim$ ۱٫۰ می‌توان نوشت:

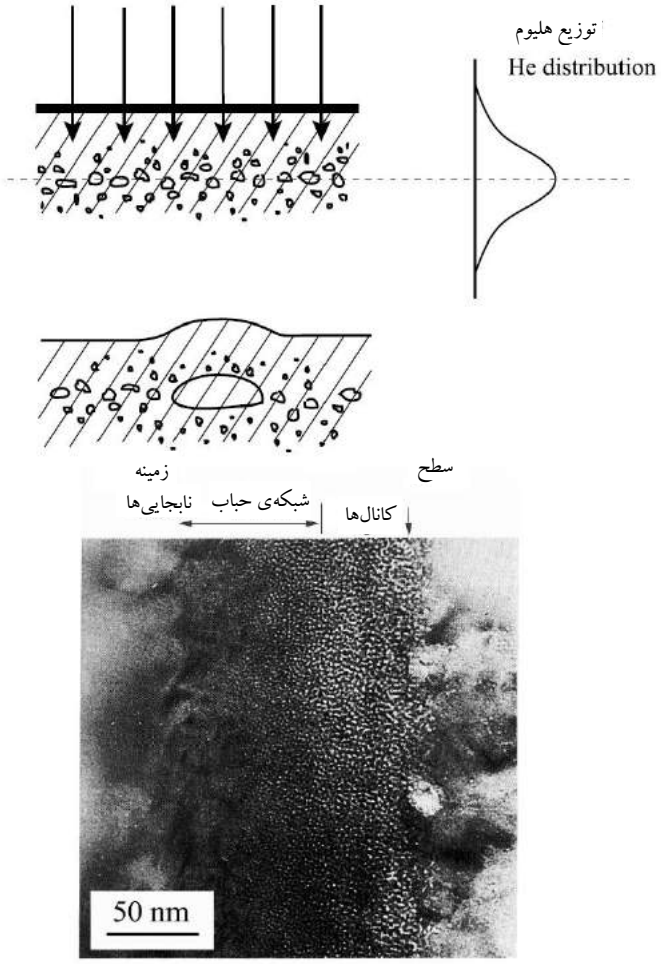
(۷۵-۱۰)

$$F(S) = (0.827 S^{1/3} - S)^{-1} .$$

1. Wolfer



شکل ۱۰-۲۷. بررسی سطحی نیکل چند بلور پرتودهی شده با مقدار پرتوگیری‌های مختلف از یون‌های $^{+}$He keV ۱۰۰: (الف) ^{4}He/cm^{2} ۱۰^{۱۸}×۲ در فرود عمودی، (ب) ^{3}He/cm^{2} ۱۰^{۱۸}×۲ در فرود عمودی، (ج) ^{3}He/cm^{2} ۱۰^{۱۹}×۱ در فرود عمودی، (د) ^{3}He/cm^{2} ۱۰^{۱۹}×۲ در فرود ۶۰^{o} از حالت معمول ، (ه) ^{4}He/cm^{2} ۱۰^{۲۰}×۱٫۲ در فرود عمودی، و (و) ^{3}He/cm^{2} ۱۰^{۱۹}×۳٫۴ در فرود ۶۰^{o} از حالت معمول [۵۰].



شکل ۱۰–۲۸. (الف) به هم پیوستگی حباب‌ها در زیر سطح نمونه‌ی بارگذاری شده با مقدار پرتوگیری بالای هلیوم. (ب) سطح مقطع از لایه‌ی سطحی نیکل حاوی مقدار پرتوگیری بالای هلیوم که نشان دهنده‌ی نابجایی‌ها (عمق)، شبکه‌ی حباب (وسط) و کانال‌های مرتبط (نزدیک سطح) است [۵۱].

از آن‌جایی که استحکام نهایی تسلیم، شکست انعطاف‌پذیر درون دانه‌ای[1] فلزات fcc و شکست کلیواژ درون دانه‌ای فلزات bcc و hcp را تعیین می‌کند و برای فلزات fcc در حدود μ۰٫۰۰۳ و برای فلزات bcc تقریباً μ۰٫۰۱ است، در نتیجه $\bar{\sigma} \sim 0.01\mu$ است. غلظت‌های هلیوم مورد نیاز برای رسیدن به تنش

1. Transgranular

لازم برای شکست میان حباب‌ها در شکل ۱۰-۲۹ نشان داده شده است و برای ۱ = ρ، غلظت بحرانی هلیوم تقریباً برابر ۴۰-۲۰٪ است. وولفر هم‌چنین تنش دیگری را شناسایی کرد، تنش‌های عرضی، σ_L که در صفحه‌ی حباب‌های موازی با سطح است (شکل ۱۰-۳۰). تنش‌های عرضی وابسته به نرخ تورم و بادکردگی، $\dot{S}$ هستند به صورتی که:

(۱۰-۷۶)

$$\sigma_L = \frac{-\dot{S}E}{(1-\nu)},$$

که E ضریب کشسان و ν نسبت پواسون است. تشکیل تاول یک فرایند دو مرحله‌ای است. شکست در عمق، t_B و در زیر سطحی آغاز می‌شود که $\overline{\sigma}$ با رشد حباب‌ها به نقطه‌ای که تنش‌های موضعی برای باز کردن ترک صفحه مجاور حباب‌ها کافی باشد، به مقدار بیشینه برسد. سپس این ترک‌ها تا رسیدن به قطر D_B گسترش می‌یابند که در آن شرایط خمشی با بار جانبی موجود تأمین می‌شود.

(۱۰-۷۷)

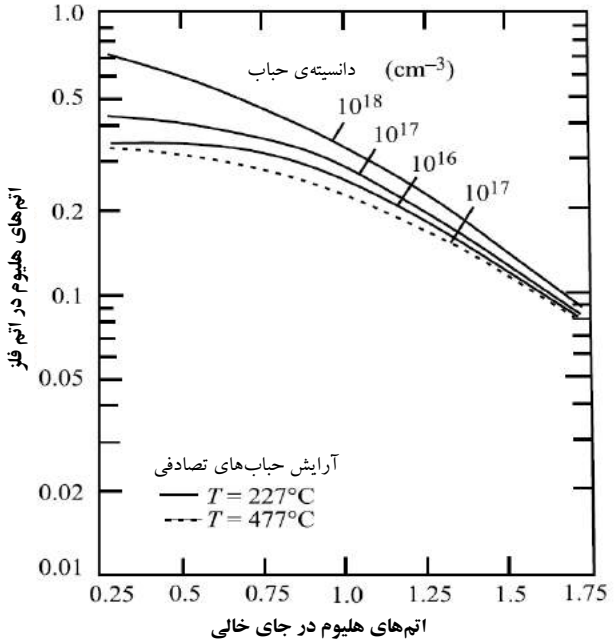
$$D_B = 1.55\frac{\mu}{(1-\nu)P},$$

که

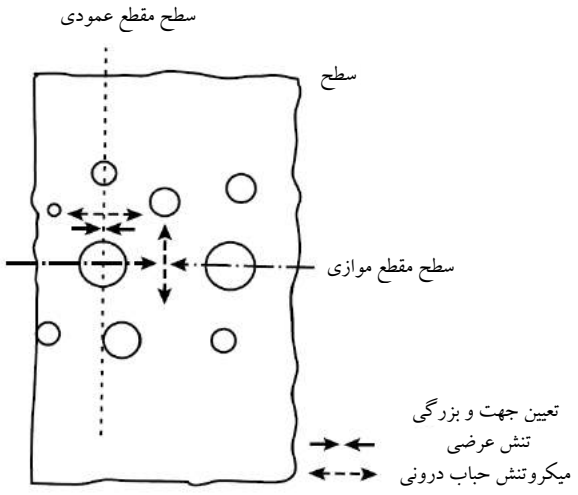
(۱۰-۷۸)

$$P = -\int_0^{t_B} \sigma_L \, dt_B$$

لازم به ذکر است که آزمایشات تعیین کرده‌اند که رابطه‌ی میان قطر اصلی تاول و ضخامتش به صورت $D_B \sim t_B^m$ است، و این رابطه نظریه‌ی تشکیل تاول به دلیل تنش‌های جانبی را تقویت می‌کند [۵۲]. در نهایت این ترک‌ها می‌توانند به رشدشان ادامه دهند تا جداشدگی لایه‌ها و تورق همان‌طوری رخ دهد که در شکل ۱۰-۲۷ نشان داده شده است.

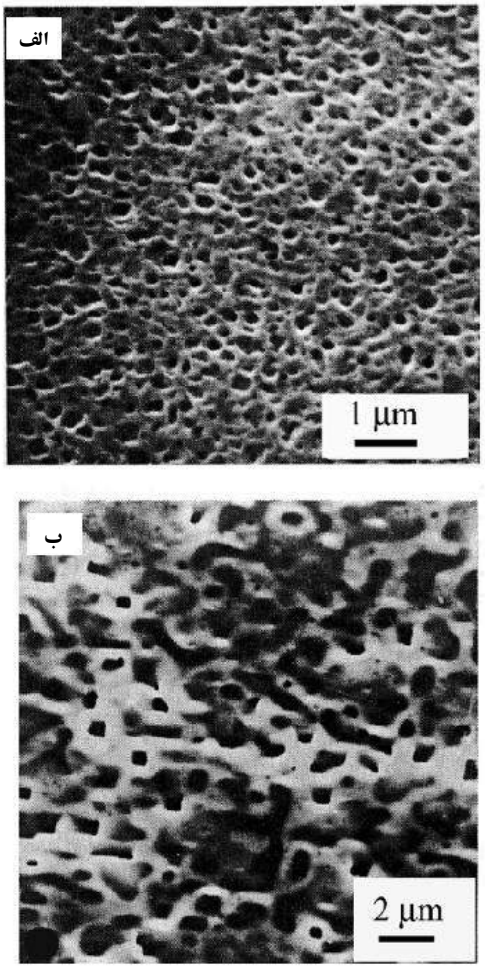


شکل ۱۰-۲۹. غلظت بحرانی هلیوم کاشته شده بر حسب غلظت هلیوم در حباب‌ها برای مورد حباب‌های تصادفی [۵۲].



شکل ۱۰-۳۰. سطح مقطع شماتیک از لایه‌ی کاشت هلیومی با حباب‌های گازی و تعریف‌های تنش عرضی و تنش درون حبابی [۵۲].

مقادیر پرتوگیری بالا یا کاشت در دماهای بالا اغلب منجر به یک ساختار اسفنجی می‌شود و همان‌طوری که در شکل ۱۰-۳۱ نشان داده شده است، سطح تعدادی حفره دارد. در دماهای بالا که حباب‌ها متحرک هستند، ممکن است حفره‌ها نتیجه‌ای از تقاطع حباب‌ها با سطح باشند. به هرجهت، مقدار بالای کاشت یون می‌تواند منجر به تغییرات توپولوژیکی سطحی شدیدی شود و این موضوع بسیاری از تحقیقات جدید است.



شکل ۱۰-۳۱. حفره‌ها در سطح نیوبیوم پرتودهی شده با (الف) $1,2\times10^{20}$ He/cm^2 در ۲۳°C و (ب) 3×10^{17} He/cm^2 در ۸۲۳°C [۵۳].

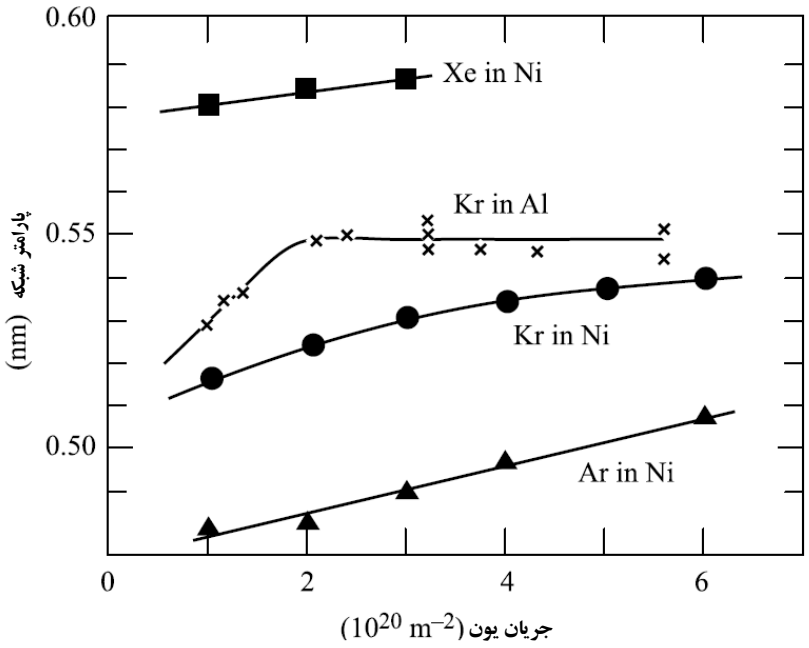
۱۰-۵ فازهای جامد و شبکه‌های حباب گاز بی‌اثر

کاشت گازهای خنثی تا مقادیر مجاز بالا در دمای اتاق می‌تواند منجر به پدیده‌ی متفاوتی شود: حباب‌های جامد[1]. مشاهده شده است که کاشت آرگون،کریپتون و زنون در فلزات مختلف منجر به تشکیل حباب‌های توپر مشتمل بر بلورهایی از گاز خنثیِ کاشته شده می‌شود. در نیکل و آلومینیوم، گازها به صورت جامداتی با ساختار بلوری مشابه با شبکه‌ی میزبان رسوب می‌کنند و به صورت هم‌بافته با زمینه هم محور می‌شوند. فاز جامد در مقدار پرتوگیری‌ها در محدوده‌ی $۱۰^{۲۰}\ m^{-2}$ تشکیل می‌شود و اندازه‌ی رسوب در نیکل ۱٫۵ nm و در آلومینیوم بالای ۴٫۷ nm است [۵۴، ۵۵]. ثابت شبکه‌ی رسوبات از فلز میزبان بزرگ‌تر است و با جرم اتمی گاز خنثی افزایش می‌یابد. ثابت شبکه با مقدار پرتوگیری افزایش می‌یابد و همان‌طوری که در شکل ۱۰-۳۲ نشان داده شده است تمایل به رسیدن به یک مقدار اشباع را دارد. دانسیته‌ی رسوبات می‌تواند بسیار بالا و در محدوده‌ی $۱۰^{۲۴}\ m^{-3}$ باشد. فشار میانگین گاز جامد از دانسیته‌ی میانگین گاز، ثابت شبکه و معادله‌ی حالت برای گاز تعیین شود و تخمین زده می‌شود که به مقادیر بیش‌تر از ۴۰ kbar برسد. درحالی‌که فشار مورد نیاز برای جامد کردن گاز در دمای اتاق وابسته به گاز است (۸ kbar برای کریپتون و ۱۱٫۵ kbar برای آرگون)، مقادیر محاسبه شده چندین برابر بیش‌تر از این مقادیر هستند. گاز خنثی به وسیله‌ی برهم‌کنش نیروهای بین اتم‌های Kr-Kr و Kr-Ni برای مورد کریپتون در نیکل در حالت جامد نگاه داشته می‌شود. هم‌چنان که اندازه‌ی رسوب افزایش می‌یابد، میانگین فاصله میان اتم‌های گازی افزایش می‌یابد و در نتیجه بزرگی برهم‌کنش Kr-Kr را کاهش می‌دهد. در نهایت، کاهش در فشار گاز منجر به ذوب شدن کریپتون جامد می‌شود. کاشت مقدار بالایی از کریپتون در داخل TiCr بی‌شکل، منجر به رسوب‌گذاری کریپتون بلورین می‌شود؛ اما در این مورد رسوبات کریپتون جامد، تبلور موضعی زمینه را به صورت یک ساختار bcc فراهم می‌کند.

مقدار بالای کاشت در دمای اتاق می‌تواند منجر به تشکیل شبکه‌ی حباب مشابه با شبکه‌ی حفره‌ی توضیح داده شده در فصل ۸ شود. شبکه‌های حباب در مس، نیکل، طلا، تیتانیوم و فولاد زنگ نزن پرتودهی شده با کریپتون یا هلیوم مشاهده شده است. در شبکه‌های fcc، حباب‌ها در ردیف‌های پر شده‌ی متراکم و موازی با جهت‌های $\{111\}$ تشکیل می‌شوند [۵۶] و می‌توانند با ثابت شبکه‌ای در

1. Solid bubbles

حدود ۷٫۶nm، مطابق با دانسیته‌ی حباب تقریباً m^{-3} ۱۰۲۰، تشریح شوند. در شبکه‌های hcp امتداد حباب مشابه با چیزی که در مورد منظم شدن حفره مشاهده شد، موازی با صفحه‌ی قاعده است [۵۷]. تشکیل شبکه‌ی حباب مستقل از گاز خنثیِ مورد استفاده و گازی یا جامد بودن اتم‌های گازی موجود در حباب‌ها است.



شکل ۱۰-۳۲. ثابت شبکه‌ی رسوبات جامد ناشی از گازهای خنثیِ کریپتون، زنون و آرگون در نیکل و کریپتون در آلومینیوم، به صورت تابعی از جریان و گونه‌های کاشته شده در دمای اتاق[۵۴، ۵۵].

نام‌گذاری اصطلاحات

a : شعاع استتار، هم‌چنین نزدیک‌ترین فاصله‌ی همسایه

c : ظرفیت حرارتی ویژه‌ی غلظت C_i از اتم نوع i

$\mathrm{d}E/\mathrm{d}x|_{\mathrm{n}}$: نرخ اتلاف انرژی ناشی از بازدارندگی هسته‌ای

d : اندازه‌ی دانه

D : ضریب نفوذ

D_{B}: قطر تاول

D^* : ضریب نفوذ مؤثر

D' : ضریب نفوذ اصلاح شده برای درهم آمیختن نفوذی

E : انرژی، هم‌چنین ضریب یانگ

E_{coh}: انرژی هم‌بستگی

E_{d}: انرژی جابه‌جایی

E_{mix}: انرژی اختلاط

F : نرخ جابه‌جایی در واحد dpa/s

F_{D}: انرژی رسوب داده شده

H_{ij}: انرژی پتانسیل بین جفت اتم‌های i و j

ΔH_{coh}: انرژی هم‌بستگی

ΔH_{A}: حرارت جذب

ΔH_{mix}: حرارت اختلاط

J_{i}: شار اتم‌های از نوع i

k : ثابت بولتزمان

K_0: نرخ تولید عیب

m : تعداد اتم‌های گازی در یک حباب

M : جرم اتمی

N : عدد دانسیته‌ی اتمی

p: فشار گاز در یک حباب

p_{i}: احتمال کندوپاش اتم نوع i

$\overline{p}_{\mathrm{i}}$: میانگین کلی احتمال کندوپاش اتم نوع i

P: بار

P_{i}: اثر کلی کاشت برگشتی، معادله‌ی ۱۰-۳۱

Q : انرژی فعال‌سازی

Q_{i}: تعداد معادل از اتم‌های i که در یک عمق R_{p} کاشت برگشتی شده‌اند

r_{c}: مشخصه‌ی فاصله‌ی پرش در یک میخچه‌ی حرارتی

R : برد یون. هم‌چنین ریشه‌ی دوم میانگین یک اتم در یک آبشار برخورد، هم‌چنین نرخ بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشین، هم‌چنین نرخ پرش در میخچه‌های حرارتی

R_{d}: نرخ جابه‌جایی در واحد $\#/\mathrm{cm}^3\mathrm{s}$

R_{p}: برد طی شده

R_{recoil}: محدوده‌ی برگشت

ΔR_{p}: انحراف استاندارد از برد طی شده

S : ضریب مقیاس

S_i: شار کندوپاش اتم نوع i

S_{n}: نیروی بازدارندگی هسته‌ای

S_x: شار کندوپاش شده‌ی عنصر x

t : زمان

t_{B}: ضخامت پوسته‌ی تاول

T : دما. هم‌چنین انرژی منتقل شده در یک رخداد برخوردی

T_{eff}: دمای مؤثر که در آن نفوذ رخ می‌دهد

U_0: انرژی پیوندی سطحی

Y : راندمان کندوپاش

z: عدد همسایگی

Z : عدد اتمی

α : ثابت در معادله‌ی ۱۰-۳

χ : نسبت احتمال کندوپاش یک اتم B به همین احتمال برای یک اتم A

δ : ضخامت لایه‌ی سطحی حذف شده به وسیله‌ی کندوپاش

ε : واحد بار. هم‌چنین دانسیته‌ی انرژی در آبشار

$\in$: انرژی کاهش یافته

ϕ_i: شار اتم‌های از نوع i

γ : ضریب فعالیت. هم‌چنین انرژی سطحی

Γ : بسامد کلی پرش

η : تعداد پرش‌های اتمی در یک میخچه‌ی حرارتی در واحد طول میخچه

κ : نفوذپذیری حرارتی

λ : طول پرش

Λ : ضریب در معادله‌ی راندمان کندوپاش (معادله‌ی ۱۰-۲) حاوی مقادیر ثابت ماده

μ : مدول برشی. هم‌چنین پتانسیل شیمیایی

ν : تعداد جابه‌جایی‌ها در اتم برخوردی اولیه. هم‌چنین نسبت پواسون

$\nu_i^{s\to b}$: بسامد پرش سطح به حجم برای اتم i

$\nu_i^{b\to s}$ بسامد پرش حجم به سطح برای اتم i

ρ : دانسیته‌ی اتم

ρ_B: دانسیته‌ی حباب گاز

σ_d: سطح مقطع جابه‌جایی

σ_s: سطح مقطع پراکنش

$\sigma_{0,i}$: سطح مقطع پراکنش کشسان برای اتم‌های از نوع i

σ_i: سطح مقطع خروج از سطح برای اتم‌های از نوع i

σ_L: تنش عرضی در جامد

$\bar{\sigma}$: تنش میانگین

Ω : حجم اتمی

ξ : ضخامت لایه‌ی اتمی

بالانویس‌ها

b : حجم

s : سطح

اندیس‌ها

A : جذب

B : حباب یا تاول

d : جابه‌جایی

P : طی شده

s : پراکنش

مخفف‌ها

CO : هم تبخیری

DM : اختلاط جابه‌جاساز

GA : جذب گیبسی

FWHM : پهنای کامل در نصف بیشینه

IBAD : رسوب با کمک پرتو یونی

IBED : رسوب افزایش یافته در اثر پرتو یونی

II : کاشت یون

ML : چندلایه شده

PS : کندوپاش ترجیحی

PSII : کاشت پلاسمایی یون

RED : افزایش نفوذ تابشی

RIS : جدایش القایی تابشی

مسایل

۱۰-۱ تشریح نحوه‌ی توزیع یک تابع دلتای ذرات را که به وسیله‌ی نفوذ گسترش می‌یابد برای محاسبه‌ی پهنای یک بیشینه‌ی توزیع ابتدایی تیز **الف)** جاهای خالی، **ب)** بین‌نشین‌ها و **ج)** خود نفوذی ردیاب‌ها به وسیله‌ی سازوکار جای خالی،

در پلاتین بعد از زمان $t = ۱$ min برای دماهای ۲۰ و ^{o}C ۸۰۰ را مورد استفاده قرار دهید.

۱۰-۲ ورقه‌ی نازک از آلیاژ دوتایی را در نظر بگیرید که در آن سطح فقط یک چاهک عیب است. ورقه در دماهای پایین در تعادل حرارتی است و سپس سریعاً تا نزدیک نقطه‌ی ذوب حرارت داده می‌شود. سیر تکامل موارد زیر را از لحاظ کیفی توضیح دهید.

الف) غلظت جای خالی

ب) سطح مقطع ترکیب

۱۰-۳ یک تک لایه ۵۰nm از پالادیوم بر روی نیکل ۵۰nm روی زمینه‌ی سیلیسیم رسوب داده شده است. لایه با Kr^{+} keV ۳۰۰ در شار ثابت $\mu A/cm^2$ ۴۰ مخلوط می‌شود. راندمان کندوپاش را تعیین کنید. بیشینه‌ی مقدار کریپتون که می‌تواند در این نمونه کاشته شود، چه‌قدر است؟

۱۰-۴ آلیاژ Ni-1%Si در طول پرتودهی بایون‌های Kr keV ۵۰۰ در دانسیته‌ی جریان $\mu A/cm^2$ ۱ تا دمای ۵۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد حرارت داده می‌شود.

الف) کدام فرایند فیزیکی در تعیین غلظت سطحی مهم است؟

ب) اگر هر فرایند به صورت مستقل از یک‌دیگر رخ دهد، اثر هر کدام از آن‌ها روی ترکیب سطح چه خواهد بود.

ج) اثر ترکیبی این فرایندها روی ترکیب سطح را تخمین بزنید و یک بحثی را برای جواب‌هایتان برای موردی که

i) فرایندهای حرارتی، فرایندهای برخوردی خالص را کنترل کنند،

ii) فرایندهای برخوردی خالص فرایندهای حرارتی را کنترل کنند، ارایه دهید.

سطح مقطع ترکیب بر حسب عمق را برای موارد (i) و (ii) رسم کنید.

$$C_{Si}^{B} = 0.01$$
$$C_{Ni}^{B} = 0.99$$

$$\Delta H_{\mathrm{A}}^{\mathrm{Si}} = -0.1\,\mathrm{eV}$$
$$\overline{p}_{\mathrm{Si}}/\overline{p}_{\mathrm{Ni}} = 2.0$$
$$\Delta H_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Ni,v}} = 0.77\,\mathrm{eV}$$

$$\Delta H_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Ni,i}} = 0.1\,\mathrm{eV}$$
$$\Delta H_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Si,v}} = 1.28\,\mathrm{eV}$$
$$\Delta H_{\mathrm{m}}^{\mathrm{Si,i}} = 0.15\,\mathrm{eV}$$
$$R_{\mathrm{Si}} = 0.1176\,\mathrm{nm}$$
$$R_{\mathrm{Ni}} = 0.1245\,\mathrm{nm}$$

$$\frac{C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{surface}}}{C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{surface}}} = \frac{C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{bulk}}}{C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{bulk}}} \exp\left(\frac{-\Delta H_{\mathrm{A}}}{kT}\right)$$
$$\frac{\overline{p}_{\mathrm{A}}}{\overline{p}_{\mathrm{B}}} = \frac{C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{bulk}}}{C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{surface}}} \frac{C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{bulk}}}{C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{surface}}}$$

۵-۱۰ آلیاژ همگن A-50at%B با یون‌های آرگون با انرژی ۵ keV در ۴۰۰ $^{\circ}$C بمباران می‌شوند. مشخص شده است که غلظت آلیاژ بعد از بمباران به صورت A-70at%B است، فرایندها یا ترکیبی از فرایندهایی را توضیح دهید که منجر به بروز چنین رفتاری شدند، و کدام‌یک از فرایندها غالب هستند؟

$\Delta H_{\mathrm{m,A}}^{\mathrm{v}}$ = آنتالپی مهاجرت برای اتم‌های A به وسیله‌ی جاهای خالی = ۰٫۷ eV

$\Delta H_{\mathrm{m,B}}^{\mathrm{v}}$ = آنتالپی مهاجرت برای اتم‌های B به وسیله‌ی جاهای خالی = ۰٫۹ eV

$\Delta H_{\mathrm{m,B}}^{\mathrm{i}} = \Delta H_{\mathrm{m,A}}^{\mathrm{i}}$ = آنتالپی مهاجرت برای اتم‌های A و B از طریق بین‌نشین‌ها = ۰٫۱ eV

ΔH_{A} = آنتالپی جذب A در B = −۰٫۳ eV

$p_{\mathrm{A}}^{\mathrm{s}}$: احتمال کندوپاش برای اتم‌های A = ۳ atoms/ion

$p_{\mathrm{B}}^{\mathrm{s}}$: احتمال کندوپاش برای اتم‌های B = ۴ atoms/ion

C_{A} = ثابت × $(d_{\mathrm{Av}}/d_{\mathrm{Bv}} - d_{\mathrm{Ai}}/d_{\mathrm{Bi}})C_{\mathrm{v}}$

$$d_{\mathrm{Av}} \alpha \exp(-\Delta H_{\mathrm{m,A}}/kT)$$
$$C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{s}}/C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{s}} = (C_{\mathrm{A}}^{\mathrm{b}}/C_{\mathrm{B}}^{\mathrm{b}})\exp(-\Delta H_{\mathrm{A}}/kT)$$

۱۰-۶ تشریح کنید که چرا آزمایشات اختلاط پرتو یونی اغلب با پیش‌گویی‌های انجام شده از نظریه‌ی بالستیکی اختلاط موافق نیستند. دمای نمونه‌ها چگونه بر پاسخ شما تأثیرگذار خواهد بود؟

۱۰-۷ نمونه‌ی چند بلوری سیلیسیم با یون‌های Al^+ با انرژی ۵۰۰ keV تا مقدار پرتوگیری 5×10^{15} i/cm^2 بمباران می‌شوند. مشخص است که R_p = ۲۶۰ nm و ΔR_p = ۹۴ nm و آن‌که سطح مقطع آسیب شکل مشابهی دارد؛ اما در $0.8\,R_p$ به اوج می‌رسد، حداکثر آسیب در ماده را با استفاده از فرضیات منطقی محاسبه کنید.

توزیع یون‌ها به صورت $N(x) = N_p \exp(-X^2)$ است که $X = (x - R_p)/\Delta R_p$ و $N_p = 0.4N_s/\Delta R_p$ است.

فرض کنید که بازدارندگی الکترونیکی با انرژی به صورت $kE^{1/2}$ تغییر می‌کند به گونه‌ای $k = 1.5 \times 10^{-16}$ eV$^{1/2}$cm^2.

سطح مقطع انتقال انرژی بر پایه‌ی قانون مربع‌معکوس:

$$\sigma(\mathrm{E,T}) = \frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{1/2}}{8E^{1/2}T^{3/2}}$$

سطح مقطع انتقال انرژی بر پایه‌ی پراکنش رادرفورد:

$$\sigma(\mathrm{E,T}) = \frac{\pi b_0^2 E\gamma}{4T^2}$$

$$N = 3\times10^{22}\,\mathrm{a/cm^3}$$

$$E_c = 28\,\mathrm{keV}$$
$$E_a = 14\,\mathrm{keV}$$
$$E_b = 14\,\mathrm{MeV}$$
$$E_d = 30\,\mathrm{eV}$$
$$a = a_B/(z_1z_2)^{1/6}$$
$$a_B = 0.053\,\mathrm{nm}$$
$$b_0 = z_1z_2\varepsilon^2/\eta E$$
$$\varepsilon^2 = 2a_BE_R$$

۱۰–۸ اثرات انرژی هم‌بستگی و انرژی انتقال را در اختلاط پرتو یونی تشریح کنید. بزرگی این انرژی‌ها چه‌قدر است و چه‌طور می‌توانند اختلاط پرتو یونی را تحت تأثیر قرار دهند؟ آیا آلیاژ همگن می‌تواند غیرمخلوط باشد؟

۱۰–۹ هدف Cu-40%Ni به وسیله‌ی یون‌های $100\ \text{keV}\ Ar^{+}$ در دانسیته‌ی شار $40\ \mu A/cm^2$ پرتودهی می‌شود.

الف) تعیین کنید که تحت پرتودهی در $500^{o}C$ کدام عنصر به سمت سطح جدایش می‌یابد.

ب) در گراف تکی، غلظت سطحی را به صورت تابعی از زمان در $400\ ^{o}C$ برای فرایندهای زیر رسم کنید:

i) فقط GA

ii) PS + RED

iii) PS + RED + GA

iv) PS + RED + RIS.

$\Delta H_{m,v}^{Cu} = 0/77\ \text{eV}$

$\Delta H_{m,v}^{Ni} = 0/82\ \text{eV}$

$\Delta H_{m,i}^{Cu,Ni} = 0/12\ \text{eV}$

$P_{Cu} = 5/5$، $P_{Ni} = 2/75$ اتم در یون در غلظت واحد.

۱۰–۱۰ بار جانبی که در آن حباب‌های هلیوم باعث تاول‌زدگی در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ تحت شرایطی که قطر تاول تقریباً برابر با t_B^2 و t_B ضخامت سر تاول است، تعیین کنید.

مراجع

1. Nastasi M, Mayer JW, Hirvonen JK (1996) Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications. Cambridge University Press, Cambridge
2. Komarov F (1992) Ion Beam Modification of Materials. Gordon and Breach, Philadelphia
3. Was GS (1989) Prog Surf Sci 32(3/4):211–312
4. Smidt F (1990) Int Mater Rev 35(2):61–128
5. Hirvonen JK (1991) Mater Sci Rep 6:251–274
6. Sigmund P (1969) Phys Rev 184:383
7. Smith DL (1978) J Nucl Mater 75:20–31
8. Sigmund P (1981) In: Sputtering by Particle Bombardment I. Springer, Berlin Heidelberg New York, p 9
9. Winters HF (1976) In: Kaminsky M (ed) Radiation Effects in Solid Surfaces. American Chemical Society, Washington, DC, p 1
10. Lindhard J, Nielsen V, Scharff M (1968) Kgl Danske Videnskab Selskab Mat Fys Medd 36(10):1
11. Wiedersich H, Andersen HH, Lam NQ, Rehn LE, Pickering HW (1983) In: Poate JM, Foti G, Jacobson DC (eds) Surface Modification and Alloying, NATO Series on Materials Science. Plenum, New York, p 261
12. Falcone G, Sigmund P (1981) Appl Phys 25:307
13. Lam NQ, Wiedersich H (1987) Nucl Instr Meth B 18:471
14. Wynblatt P, Ku RC (1979) In: Johnson WC, Blakely JM (eds) Interfacial Segregation. American Society for Metals, Metals Park, OH, p 115
15. Sigmund P (1979) J Appl Phys 50(11):7261
16. Sigmund P, Gras-Marti A (1981) Nucl Instr Meth 182/183:25
17. Gras-Marti A, Sigmund P (1981) Nucl Instr Meth 180:211
18. Myers SM (1980) Nucl Instr Meth 168:265
19. Anderson HH (1979) Appl Phys (Germany) 18:131
20. Workman TW, Cheng YT, Johnson WL, Nicolet MA (1987) Appl Phys Lett 50(21):1485
21. Westendorp H, Wang ZL, Saris FW (1982) Nucl Instr Meth 194:453
22. Wang ZL,Westendorp JFM, Doorn S, Saris FW(1982) In: Picraux ST, Choyke WJ (eds) Metastable Materials Formation by Ion Implantation. Elsevier, New York, p 59
23. Paine BM, Averback RS (1985) Nucl Instr Meth B 7/8:666
24. JohnsonWL, Cheng Y-T,Van RossumM, Nicolet M-A (1985) Nucl InstrMeth B 7/8:657
25. Van Rossum M, Cheng Y-T (1988) Defect Diffusion Forum 57/58:1

26. Cheng Y-T, Workman TW, Nicolet M-A, Johnson WL (1987) In: Beam-Solid Interactions and Transient Processes, vol 74. Materials Research Society, Pittsburgh, PA, p 419
27. Ma E, Workman TW, Johnson WL, Nicolet M-A (1989) Appl Phys Lett 54(5):413
28. Cheng Y-T, Van Rossum M, Nicolet M-A, Johnson WL (1984) Appl Phys Lett 45(2):185
29. Van Rossum M, Cheng Y-T, NicoletM-A, Johnson WL (1985) Appl Phys Lett 46(6):610
30. Rossi F, Nastasi M (1991) J Appl Phys 69(3):1310
31. Vineyard GH (1976) Rad Eff 29:245
32. Matteson S, Roth J, Nicolet M, Rad Eff 42 (1979) 217–226
33. Cheng Y-T (1989) Phys Rev B 40(10):7403–7405
34. Hung LS, Mayer JW (1985) Nucl Instr Meth B 7/8:676
35. Was GS, Eridon JM (1987) Nucl Instr Meth B 24/25:557
36. Lam NQ, Leaf GK, Wiedersich H (1980) J Nucl Mater 88:289
37. Lam NQ, Wiedersich H (1982) In: Picraux ST, Choyke WJ (eds) Metastable Materials Formation by Ion Implantation. Elsevier, New York, p 35
38. Lam NQ, Wiedersich H (1981) J Nucl Mater 103/104:433
39. Lam NQ, Leaf GK (1986) J Mater Res 1:251
40. Rehn LE, Okamoto PR (1983) In: Nolfi FV (ed) Phase Transformations During Irradiation. Applied Science, New York, p 247
41. Mayer SGB, Milillo FF, Potter DI (1985) In: Koch CC, Liu CT, Stoloff NS (eds) High- Temperature Ordered Intermetallic Alloys, vol 39. Materials Research Society, Pittsburgh, PA, p 521
42. Liu JC, Mayer JW (1987) Nucl Instr Meth B 19/29:538
43. Alexander D,Was G, Rehn LE (1990) Materials Research Symposium, vol 157. Materials Research Society, Pittsburgh, PA, p 155
44. Eridon J, Rehn L, Was GS (1987) Nucl Instr Meth B 19/20:626
45. Ahmed M, Potter DI (1987) Acta Metal 35(9):2341
46. Nishiyama Z (1978) In: Fine ME, Meshii M, Wayman CM (eds) MartensiticTransformations, vol 7. Academic, New York
47. Bradley RM, Harper JME, Smith DA (1986) J Appl Phys 60:4160
48. Ma Z, Was GS (1999) J Mater Res 14(10):4051–4061
49. Didenko AN, Kozlov EV, Sharkeev YuN, Tailashev AS, Rajabchikov AI, Pranjavichus L, Augulis L (1993) Surf Coat Technol 56:97–104
50. Behrisch R, Risch M, Roth J, Scherzer BMU (1976) Proceedings of the 9th Symposium on Fusion Technology. Pergamon, New York, pp 531–539
51. Ullmaier H (1983) Rad Eff 78:1–10
52. Wolfer WG (1980) J Nucl Mater 93/94:713–720

53. Behrisch R, Scherzer BMU (1983) Rad Eff 78:393–403
54. Birtcher RC, J¨ager W (1987) Ultramicroscopy 22:267–280
55. Liu AS, Birtcher RC (1989) Mat Res Soc Symp, vol 128. Materials Research Society, Pittsburgh, PA, pp 303–308
56. Johnson PR (1983) Rad Eff 78:147–156
57. Mazey DJ, Evans JH (1986) J Nucl Mater 138:16–18

۱۱

شبیه‌سازی اثرات پرتودهی نوترونی با یون‌ها

تحقیقات اثرات پرتودهی با ذرات پرانرژی مختلفی مانند نوترون‌ها، الکترون‌ها، یون‌های سبک و یون‌های سنگین انجام شده است. یون‌های پرانرژی می‌توانند برای فهم اثرات تابش نوترونی در اجزای رآکتورها استفاده شوند و علاقه به این کاربرد پرتودهی یونی به چند دلیل در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است. این دلایل شامل عدم وجود رادیواکتیویته پسماند بالا و مصرف کردن منابع نوترونی برای پرتودهی مواد است. حالت آسیب و ریزساختار نتیجه شده از پرتودهی یونی و در نتیجه درجه‌ای که پرتودهی یونی، پرتودهی نوترونی را شبیه‌سازی می‌کند، وابسته به نوع ذره و نرخ آسیب است. این فصل با مروری بر تابع آسیب، طیف برگشتی اولیه و راندمان تولید عیب برای انواع مختلف ذره شروع خواهد شد. اثرات نوع ذره روی ریزساختار و خواص شیمیایی و متعاقب آن اثرات ریزساختار پرتودیده روی خواص مکانیکی بحث خواهد شد. نقش مقدار پرتوگیری، نرخ مقدار پرتوگیری و عوامل دمایی و محدودیت‌های موجود در هر منبعِ ذره بررسی خواهد شد و با اثرات پرتودهی نوترونی مقایسه خواهد شد.

۱۱-۱ انگیزه‌هایِ استفاده از پرتودهی یونی به منزله‌ی جایگزینی برای پرتودهی نوترونی

در دهه‌ی ۱۹۶۰ و ۱۹۷۰ پرتودهی یون سنگین با هدف شبیه‌سازی آسیب نوترونی در حمایت از برنامه‌های رآکتورهای زاینده سریع گسترش یافت [۱-۳]. پرتودهی یونی و تزریق هم‌زمان هلیم نیز برای شبیه‌سازی اثرات آسیب نوترونی ۱۴ MeV در رابطه با برنامه‌ی مهندسی رآکتور گداخت استفاده می‌شود. کاربرد پرتودهی یونی (که در این‌جا به صورت هر نوع ذره باردار مانند الکترون‌ها تعریف شده است) برای مطالعه‌ی آسیب تابش نوترونی از زمینه‌های مورد علاقه‌ی کمیته‌ی رآکتور آب سبک برای بررسی مسایلی مانند ترک‌های خوردگی تنشی مواد هسته رآکتور است که تحت تأثیر پرتودهی هستند[۴-۶]. پرتودهی یونی هم‌چنین برای فهم ریزساختار پرتودیده‌ی فولادهای مخازن تحت فشار رآکتورها، پوشش‌های سوخت زیرکونیومی و مواد مصرفی در رآکتورهای پیشرفته استفاده شده است.

عوامل مهمی برای استفاده از پرتودهی یونی برای مطالعه‌ی آسیب نوترونی وجود دارد زیرا این روش قابلیت‌های خوب برای جواب‌های کارآمد در فرایندهای اساسی و هم‌چنین پتانسیل‌های مناسب برای ذخیره و صرفه‌جویی زیاد زمان و پول را دارد. آزمایش‌های پرتودهی نوترونی تابع مطالعات وسیعی از شرایط نیستند بلکه مستلزم شرایط دقیقی برای بررسی فرایندهای آسیب اساسی هستند. شبیه‌سازی آسیب تابشی با یون‌ها تغییر آسان عوامل پرتودهی مانند مقدار پرتوگیری، نرخ مقدار پرتوگیری و دما در یک محدوده‌ی وسیعی از مقادیر را مجاز می‌کند.

آزمایشات پرتودهی نوترونی نمونه‌وار در رآکتورهای آزمایشی، ۱ تا ۳ سال زمان پرتوگیری را نیاز دارد تا به سطوح شار محسوس برای آزمایشات بعد از پرتودهی برسد. به این زمان، به منظور طراحی کپسول،آماده‌سازی، پیاده کردن و سرد کردن یک سال دیگر نیز اضافه می‌شود. تحلیل تغییرات میکروشیمیایی با اسپکتروسکوپی الکترون اوژه[1] (AES) یا تغییرات ریزساختاری با اسپکتروسکوپی پراکنش انرژی[2] از طریق میکروسکوپ الکترونی عبوری پویشی[3] (STEM-EDS) و ویژگی‌های مکانیکی یا ارزیابی ترک خوردگیِ تنشی (SCC)، به علت احتیاط‌های لازم، تأسیسات ویژه و تجهیزات مورد نیاز برای جابه‌جایی نمونه‌های رادیواکتیو می‌تواند چندین سال زمان نیاز داشته باشد. در

1. Auger Electron Spectroscopy
2. Energy Dispersive Spectroscopy
3. Scanning Transmission Electron Microscopy

نتیجه دوره‌ی زمانی پرتودهی تا تحلیل شیمیایی و آزمایش‌های ویژگی مکانیک/ ترک خوردگیِ تنشی ممکن است ۳ تا ۵ سال به طول بینجامد. چنین دوره‌ی زمانی طولانی امکان تکرار پرتودهی که در هر تحقیق آزمایشگاهی امری بحرانی است را غیرممکن می‌سازد. زمان طولانیِ مورد نیاز برای طراحی و پرتودهی انعطاف‌پذیری در تغییر برنامه‌های پرتودهی برای دستیابی به اطلاعات جدید را کاهش می‌دهد. به علت زمان طولانی دوره، نیاز به تأسیسات ویژه و شرایط خاص جابه‌جایی نمونه‌ها هزینه‌های آزمایشات پرتودهی نوترونی به شدت افزایش می‌یابد.

در مقابل پرتودهی نوترونی، پرتودهی یونی (سنگین، سبک یا الکترون‌ها) مزیت‌های فراوانی را در زمان و هزینه به همراه دارد. پرتودهی یونی با هر نوع (سنگین، سبک یا الکترون‌ها) برای رسیدن به سطوح آسیب در محدوده ۱۰–۱ dpa به ندرت به زمان‌هایی بیش‌تر از چند ده ساعت نیاز دارد. پرتودهی یونی پسماندهای رادیواکتیو کم‌تری را تولید می‌کند که در نتیجه جابه‌جایی نمونه‌ها به احتیاط‌های خیلی خاصی نیاز ندارد. چالش فقط در مقایسه کردن نتایج پرتودهی نوترونی و یونی است.

سؤال اساسی این است که نیازهایی که باید پاسخ داده شود به چه صورت از مقایسه‌ی آزمایشات پرتودهی نوترونی و ذرات باردار نتیجه گرفته شود. برای مثال چه‌طور نتایج قطعه‌ی پرتودیده در هسته‌ی رآکتور در دمای ۲۸۸°C تا یک شار 1×10^{21} n/cm^2 ($E>1$ MeV) در یک دوره‌ی زمانی ۸ ماهه با نتایج پرتودهی یونی با استفاده از پروتون‌های ۳ MeV دردمای ۴۰۰ °C تا ۱ dpa (جابه‌جایی در اتم) در نرخ مقدار پرتوگیری 10^{-5} dpa/s (تقریباً ۱ روز)، یا با پرتودهی با یون‌های Ni^{++} ۵ MeV در دمای ۵۰۰ °C تا ۱۰ dpa در نرخ مقدار پرتوگیری 5×10^{-3} dpa/s (تقریباً ۱ ساعت) مقایسه شوند؟ حل سؤال اول منوط به اندازه‌گیری اثر تابش است. در مسئله‌ی ترک‌های خوردگی تنشی ایجاد شده با کمک پرتودهی[1] (IASCC) در رآکتورهای آب سبک، تمام توجهات روی دو اثر پرتودهی، یعنی: *جدایش* عناصر آلیاژی اصلی یا ناخالصی‌ها به مرز دانه (که سپس منجر به تردی یا افزایش فرایند ترک‌های خوردگی تنشی بین دانه‌ای[2] (LGSCC) می‌شود) و سخت‌گردانی زمینه (که نتیجه‌ای از تغییر شکل موضعی و تردی است)، متمرکز می‌شود در مورد اول *اندازه‌گیری* دقیق اثر پرتودهی با توجه به غلظت آلیاژ در مرزدانه یا مقدار ناخالصی جدایش یافته در مرزدانه تعیین می‌شود. این کمیت

1. Irradiation Assisted Stress Corrision Cracking
2. Intergranular Stress Corrosion Cracking

با روش‌های تحلیلی مانند AES یا STEM-EDS *قابل اندازه‌گیری* است. برای مورد آخری، اندازه‌گیری اثر پرتودهی می‌تواند با توجه به ماهیت، اندازه، دانسیته و توزیع حلقه‌های نابجایی، نقاط سیاه و شبکه‌ی کلی نابجایی، و چگونگی تأثیرگذاری آن‌ها روی تغییر شکل آلیاژ تعیین شود. از آن‌رو اثرات مشخص و قابل اندازه‌گیری پرتودهی می‌تواند برای آزمایشات پرتودهی نوترونی و یونی تعیین شود.

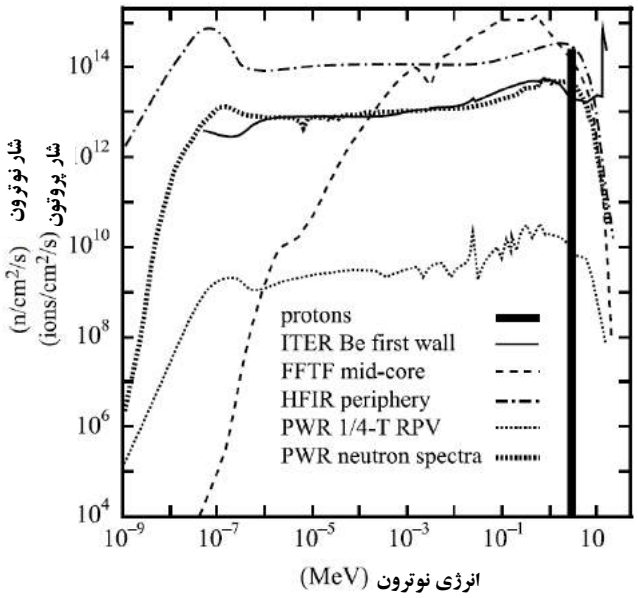
نکته‌ی بعدی این است که چگونه پرتودهی یونی به محیط توصیف کننده‌ی پرتودهی نوترونی انتقال داده شود. یعنی چه شرایطی برای تشابه کمی اثرات پرتودهی یونی و پرتودهی نوترونی مورد نیاز است؟ این سؤال کلیدی برای آزمایشات بعد از پرتودهی است. به طور کلی فقط حالت نهایی ماده در تعیین هم‌ارزی‌ها مهم است نه مسیری که ماده به حالت نهایی رسیده است. بنابراین اگر کسی بتواند آزمایشات پرتودهی یونی را به نحوی انجام دهد که اندازه‌گیری‌های مشابهی از اثرات پرتودهی همانند آن‌چه در آزمایشات پرتودهی نوترونی مشاهده می‌شود، به‌دست آید در نتیجه اطلاعات حاصله در آزمایشات بعد از پرتودهی برابر خواهند بود. در چنین شرایطی است که آزمایشات پرتودهی یونی می‌تواند جانشین مناسبی برای پرتودهی نوترونی باشد. درحالی‌که همیشه برای مورد تأیید بودن مواد برای کاربرد در رآکتورها پرتودهی نوترونی مورد نیاز است، پرتودهی یونی ابزاری کم هزینه و سریع از سازوکارهای توضیح دهنده و مواد انتخاب شده برای متغیرهای بسیار مهم را فراهم می‌کند.

۱۱-۲ مرور جنبه‌های آسیب تابشی مربوط به پرتودهی یونی

مشکل اول در تعیین هم‌ارزی میان اندازه‌ی اثر پرتودهی در پرتودهیِ ذره‌ی باردار و نوترونی استفاده از یک واحد مقدار پرتوگیری معمول است. با توجه به مقدمه یادآوری می‌شود که ویژگی‌های مواد پرتودیده می‌تواند به نحو بهتری با استفاده از dpa به جای یک اندازه‌ای از در معرض پرتو بودن مقایسه شود. واحد مقدار پرتوگیری اصلی (قابل اندازه‌گیری) برای پرتودهی نوترونی جریان در (n/cm^2) اندکی بالاتر از انرژی آستانه ($E > x\ \mathrm{MeV}$) است که x انرژی آستانه است. برایِ ذرات باردار، این یک جریان کلی یا بار در واحدهایی از Q/cm^2 است. هر دو این اندازه‌گیری‌ها می‌تواند با استفاده از یکی از چند مدل موجود برای تعیین dpa، همان‌طوری که در فصل ۲ نشان داده شد، به مقدار پرتوگیری در واحدهایی از dpa و نرخ مقدار پرتوگیری به صورت dpa/s تبدیل شود. یک تفاوت اساسی میان اثرات پرتودهی یونی و نوترونی طیف انرژی ذره است که ناشی از تفاوت در

چگونگی تولید ذرات است. یون‌ها در شتاب دهنده‌ها تولید شده و به صورت پرتوهای تک انرژی با پهنای انرژی بسیار باریک ظاهر می‌شوند. ولی، طیف انرژی نوترون در یک رآکتور پهنای انرژی بسیار بزرگی دارد در نتیجه عبارت منبعی بسیار پیچیده‌ای برای آسیب تابشی وجود دارد. شکل ۱۱-۱ تفاوت‌های قابل توجه در طیف انرژی نوترون و یون و هم‌چنین بین طیف نوترون در چندین رآکتور مختلف و چندین موقعیت مختلف در مخزن رآکتور را نشان می‌دهد.

تفاوت اصلی دیگر در مشخصات یون‌ها و نوترون‌ها عمق نفوذ است. همان‌طوری که در شکل ۲- ۲۵ در فصل ۲ نشان داده شد، یون‌ها به علت اتلاف الکترونیکی بالا، انرژی را بسیار سریع از دست می‌دهند، که منجر به صعود سطح مقطع رسوب انرژی غیریکنواخت فضایی می‌شود که با تغییر اهمیت اتلاف انرژی الکترونیکی و هسته‌ای در طول فرایند آرام شدن ایجاد شده است. محدوده‌ی فاصله‌ی نفوذ یون‌ها برای انرژی‌های یون که می‌تواند در عمل با شتاب دهنده‌های آزمایشگاهی یا دستگاه‌های کاشت یون به‌دست آید، بین ۰٫۱ و ۱۰۰μm است. به علت مزیت خنثی بودن الکتریکی، نوترون‌ها می‌توانند تا فاصله‌های بسیار زیادی نفوذ کنند و سطح مقطع فضایی آسیب صاف را در محدوده‌ی چند میلی‌متری از ماده ایجاد کنند.



شکل ۱۱-۱. طیف انرژی یون‌های فرودی در پرتو یونی تک انرژی، و نوترون‌ها از انواع مختلفی از رآکتورها [۷].

همان‌طوری که در فصل ۲ توضیح داده شد، تعداد کلی جابه‌جایی‌ها در اتم به وسیله‌ی مدل‌های K-P [۸] یا NRT [۹] مشخص می‌شود. این کمیت اندازه‌گیری مناسبی از تعداد جابه‌جایی‌های ایجاد شده به وسیله‌ی ذره‌ی فرودی با توجه به جرم ذره را فراهم می‌کند. علاوه بر dpa، طیف برگشتی اولیه تعداد نسبی برخوردهایی را توضیح می‌دهد که در آن انرژی بین T و $T+\mathrm{d}T$ از اتم برگشتی اولیه به دیگر اتم‌های هدف منتقل شده است. کسر برگشتی‌های بین انرژی جابه‌جایی E_d و T از معادله‌ی ۳-۱۱ برابر است با:

(۱-۱۱)

$$P(E_\mathrm{i},T)=\frac{1}{N}\int_{E_\mathrm{d}}^{T}\sigma(E_\mathrm{i},T')\,\mathrm{d}T'$$

که N تعداد کلی برگشتی‌های اولیه است و $\sigma(E_\mathrm{i},T)$ سطح مقطع دیفرانسیلی برای یک ذره با انرژی E_i برای ایجاد انرژی برگشتی T است و E_d انرژی جابه‌جایی است. کسر برگشتی در شکل ۳-۵ نشان داده شده است که مشخص می‌کند بین یون‌هایی با جرم‌های بسیار متفاوت، تفاوت کوچکی وجود دارد.
اما تفاوت اساسی در ریخت شناسی آسیب بین ذراتی با جرم‌های متفاوت وجود دارد. یون‌های سبک مانند الکترون‌ها و پروتون‌ها، آسیب‌هایی به صورت جفت‌های فرانکل تکی یا در خوشه‌های کوچک را تولید خواهند کرد درحالی‌که یون‌های سنگین و نوترون‌ها آسیب را در خوشه‌های بزرگ تولید می کنند (شکل ۳-۷). برای پرتودهی مس با ذره‌ای با انرژی ۱ MeV، نصف برگشتی‌ها برای پروتون‌ها با انرژی‌های تقریباً کم‌تر از ۶۰eV تولید شده است درحالی‌که کریپتون تعداد مشابه در حدود ۱۵۰ eV رخ می‌دهد. برگشتی‌ها به سمت انرژی‌های پایین‌تر تمایل دارند زیرا پتانسیل کولنی استتارگر است که برهم‌کنش‌های ذرات باردار را کنترل می‌کند. برای یک برهم‌کنش کولنی استتار شده احتمال ایجاد یک انرژی برگشتی به صورت $1/T^2$ تغییر می‌کند. به هر حال، نوترون‌ها به صورت کره‌های سخت برهم‌کنش می‌کنند و احتمال ایجاد یک انرژی برگشتی T مستقل از انرژی برگشتی است. در حقیقت، پارامتر بسیار مهم توضیح دهنده‌ی توزیع آسیب در سراسر محدوده‌ی انرژی، ترکیبی از کسر عیوب از یک انرژی مشخص و انرژی آسیب است. همان‌طوری که در فصل ۳ توضیح داده شد، **میانگین وزنی**

طیف برگشتی، $W(E_i,T)$ طیف برگشتی اولیه را با تعداد عیوب یا انرژی آسیب تولید شده در هر برگشت توزین می‌کند:

(۱۱-۲)

$$W(E_\mathrm{i},T)=\frac{1}{E_\mathrm{D}(E_\mathrm{i})}\int_{E_\mathrm{d}}^{T}\sigma(E_\mathrm{i},T')E_\mathrm{D}(T')\,\mathrm{d}T'\,,$$

(۱۱-۳)

$$E_\mathrm{D}(E_\mathrm{i})=\int_{E_\mathrm{d}}^{\hat{T}}\sigma(E_\mathrm{i},T')E_\mathrm{D}(T')\,\mathrm{d}T'\,,$$

که $\hat{T}$ بیشینه‌ی انرژی برگشت است که به صورت $\hat{T}=E_\mathrm{i}=4E_\mathrm{i}M_1M_2/(M_1+M_2)$ تعیین می‌شود. همان‌طوری که در فصل ۳ توضیح داده شد، برای کرانه‌های برهم‌کنش‌های کولنی و کره سخت، میانگین وزنی طیف برگشتی برای هر نوع برهم‌کنش برابر است با:

(۱۱-۴ الف)

$$W_\mathrm{Coul}(E_\mathrm{i},T)=\frac{\ln T-\ln E_\mathrm{d}}{\ln\hat{T}-\ln E_\mathrm{d}}$$

(۱۱-۴ ب)

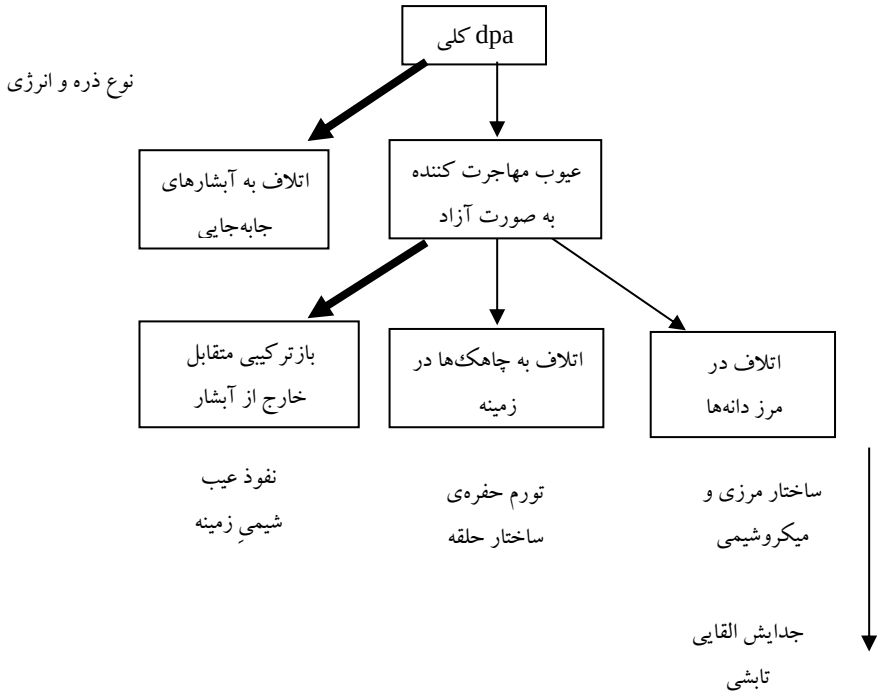
$$W_\mathrm{HS}(E_\mathrm{i},T)=\frac{T^2-E_\mathrm{d}^2}{E_\mathrm{d}^2}\,.$$

معادله‌های ۱۱-۴ الف و ۱۱-۴ ب در شکل ۳-۶ برای پرتودهی مس با ذرات MeV ۱ رسم شده است. نیروهای کولنی به بی‌نهایت گسترده می‌شوند و هم‌چنان که ذره به هدف نزدیک می‌شود به آرامی

افزایش می‌یابند، از آن‌رو به آرامی با انرژی افزایش می‌یابد. در یک برهم‌کنش کره‌ی سخت، ذرات و هدف یک‌دیگر را لمس نمی‌کنند تا فاصله‌ی آن‌ها به شعاع کره سخت در نقطه‌ای برسد که نیروهای دافعه بی‌نهایت می‌شوند. برای پرتودهی یون سنگین، پتانسیل کولنی استتارگر بسیار مناسب است. قابل ذکر است که تفاوت‌های زیادی در $W(E_i,T)$ بین انواع مختلف پرتودهی وجود دارد. درحالی‌که یون‌های سنگین از یون‌های سبک برای باز تولید توزیع انرژی برگشتی‌های نوترونی بیش‌تر به یک‌دیگر نزدیک می‌شوند؛ اما هیچ‌کدام در دنباله‌های توزیع دقیق نیستند. این مطلب به این معنی نیست که یون‌ها شبیه‌سازهای ضعیفی از آسیب تابشی هستند، بلکه به این معنی است که آسیب به صورت متفاوتی تولید شده و لازم است که این تفاوت هنگام طراحی برنامه‌ی پرتودهی که انتخابی برای تولید تغییرات ریزساختاری و میکروشیمیایی و تطابق آن‌ها با پرتودهی نوترونی است، مورد توجه قرار گیرد.

تعداد واقعیِ عیوبی که آبشار جابه‌جایی و توزیع فضایی آن‌ها در جامد را حفظ می‌کنند، اثرات روی ریزساختار پرتودیده را تعیین خواهند کرد. این موضوع در فصل‌های ۳ و ۷ با دسته‌بندی عیوب مطابق با رفتارشان در جامد بررسی شد.

شکل ۱۱-۲ به صورت خلاصه اثر ریخت‌شناسی آسیب از دیدگاه مرزدانه و این‌که چگونه شار عیب، جدایش مرزدانه‌ای القایی تابشی را تحت تأثیر قرار می‌دهد، نشان داده است. برخلاف برابری در انرژی میان چهار نوع ذره توضیح داده شده در شکل ۳-۷، میانگین انرژی منتقل شده و راندمان‌های تولید عیب در حدود دو برابر بزرگی تغییر می‌کنند! این با تفاوت‌ها در ریخت‌شناسی آبشار میان چهار نوع ذره مختلف توضیح داده می‌شود. نوترون‌ها و یون‌های سنگین آبشارهای متراکمی را تولید می کنند که منجر به باز ترکیبی‌های قابل توجهی در طول سرد شدن فازی می‌شود. ولی الکترون‌ها فقط قادرند که جفت‌های فرانکل اندکی فاصله‌دار را تولید کنند که احتمال باز ترکیبی کمی را دارد. پروتون‌ها آبشارهای اندکی فاصله‌دار و تعداد زیاد جفت‌های فرانکل تکی را به علت برهم‌کنش کولنی تولید می‌کنند و بنابراین در راندمان جابه‌جایی تعریف شده به وسیله‌ی الکترون‌ها و پروتون‌ها، بین کرانه‌ها قرار می‌گیرند.



شکل ۱۱-۲. تاریخچه‌ی عیوب نقطه‌ای بعد از ایجاد در آبشار جابه‌جایی.

۱۱-۳ وابستگی جدایش القایی تابشی به نوع ذره

در این قسمت به منظور شکل‌بندی روش شناسایی برای ایجاد هم‌ارزی میان پرتودهی نوترونی و ذرات باردار، روی مقایسه بین چهار نوع ذره‌ی تابشی تمرکز خواهد شد. در قسمت‌های قبل روی جدایش القایی تابشی به منزله‌ی اندازه‌ای از اثر پرتودهی برای مقایسه‌ی ذرات تمرکز شد. جدایش القایی تابشی به این علت انتخاب شده است که این فرایند به فعالیت عیوب نقطه‌ای وابسته است و به آگلومراسیون وابسته نیست. عوامل پرتودهی برای چهار نوع ذره در جدول ۱۱-۱ مشخص شده است. هر آزمایش به وسیله‌ی نوع ذره، انرژی و دمای پرتودهی، نرخ مقدار پرتوگیری گزارش شده و مقدار پرتوگیری کلی گزارش شده تشریح می‌شود. آخرین ستون، مقدار پرتوگیری لازم برای رسیدن به سطح مقطع حالت پایدار جدایش القایی تابشی با استفاده از مدل پرک[1] است [۱۱]. ستون‌های علامت‌گذاری شده به

1. Perk

صورت گزارش شده و تصحیح شده، به محاسبات جدایش القایی تابشی به ترتیب با استفاده از نرخ مقدار پرتوگیری اسمی (مقدار گزارش شده) و تصحیح مطلوب (مقدار تصحیح شده) اشاره دارند. راندمان جابه‌جایی که در فصل ۳ بیان شد با استفاده از مدل ناندورف[1] محاسبه شده است. کمیت مورد توجه در جدایش القایی تابشی برای مواد هسته‌ی رآکتور آب سبک، مقدار کروم تهی شده از مرزدانه یا مساحت داخلی سطح مقطع غلظتی کروم است (شکل ۱۱-۳). در دیگر سیستم‌های رآکتوری، عناصر دیگری به علت پتانسیلشان برای رسوب‌گذاری در رآکتور مورد توجه قرار می‌گیرند. اندازه‌گیریِ مناسب تهی‌شدگی تاحدی سؤال برانگیز است. در مواردی می‌توان مقدار کروم مرزدانه‌ای را به منزله‌ی اندازه‌ای از میزان تهی‌شدگی کروم در نظر گرفت. در مواردی، FWHM سطح مقطع تهی‌شدگی مورد استفاده قرار گرفته است. در حقیقت هر دو این کمیت‌ها مفید هستند و می‌توانند از سطح مقطع‌های تهی‌شدگی اندازه‌گیری شده به‌دست آیند. به هر جهت، مساحت داخلی سطح مقطع غلظتی کروم، تغییرات در حجمِ ماده را نشان می‌دهد و نسبت به مقدار مرزدانه‌ای یا FEHM تنها، به تغییرات در شکل سطح مقطع بسیار حساس است. مقدار تهی‌شدگی کروم با انتگرال‌گیری سطح مقطع غلظت برای آن عنصر با فاصله از مرزدانه تعیین می‌شود:

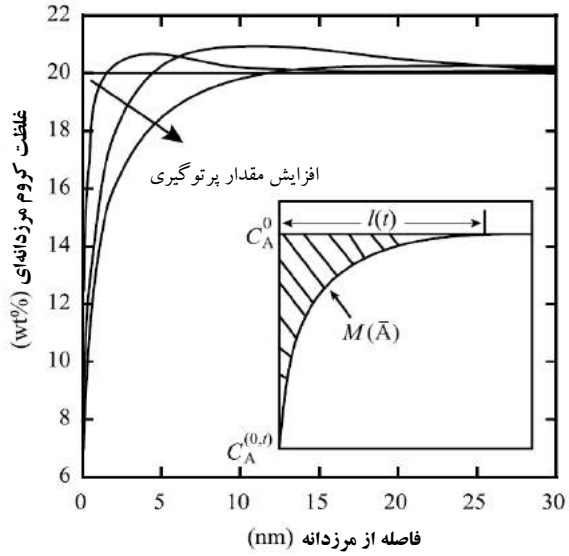
جدول ۱۱-۱. مقایسه‌ی عوامل پرتودهی و جدایش القایی تابشی برای انواع مختلف ذره [۱۰].

نوع ذره	انرژی (MeV)	دما (°C)	راندمان	نرخ مقدار پرتوگیری (dpa/s) گزارش شده / تصحیح شده*		مقدار پرتوگیری کلی (dpa/s) گزارش شده / تصحیح شده		مقدار پرتوگیری تا حالت پایدار** (dpa/s) گزارش شده / تصحیح شده	
الکترون‌ها	۱٫۰	۴۵۰	۱٫۰	۲×۱۰^{-۳}	۲×۱۰^{-۳}	۱۰	۱۰	۲۸	۲۸
پروتون‌ها	۳٫۴	۳۶۰	۰٫۲	۷×۱۰^{-۶}	۱×۱۰^{-۶}	۱	۰٫۲	۳	۷
یون‌های Ni	۵٫۰	۵۰۰	۰٫۰۴	۵×۱۰^{-۳}	۲×۱۰^{-۴}	۱۰	۰٫۴	۷	۲۵
نوترون‌ها	رآکتور شکافت	۲۸۸	۰٫۰۲	$\sim۵\times۵^{-۸}$	۹×۱۰^{-۱۰}	۱	۰٫۰۲	۱٫۴	۴

*مقدار تصحیح شده‌ی مؤثر

** محاسبه شده به وسیله‌ی مدل پرکس [۱۱] برای RIS

1. Naundorf's model



شکل ۱۱-۳. تعریف ناحیه‌ی جدایش یافته، M در ارزیابی کمی از جدایش القایی تابشی.

$$M = \int_0^{l(t)} \left[C_A^0 - C_A(x,t)\right] \mathrm{d}x\,, \qquad (۵-۱۱)$$

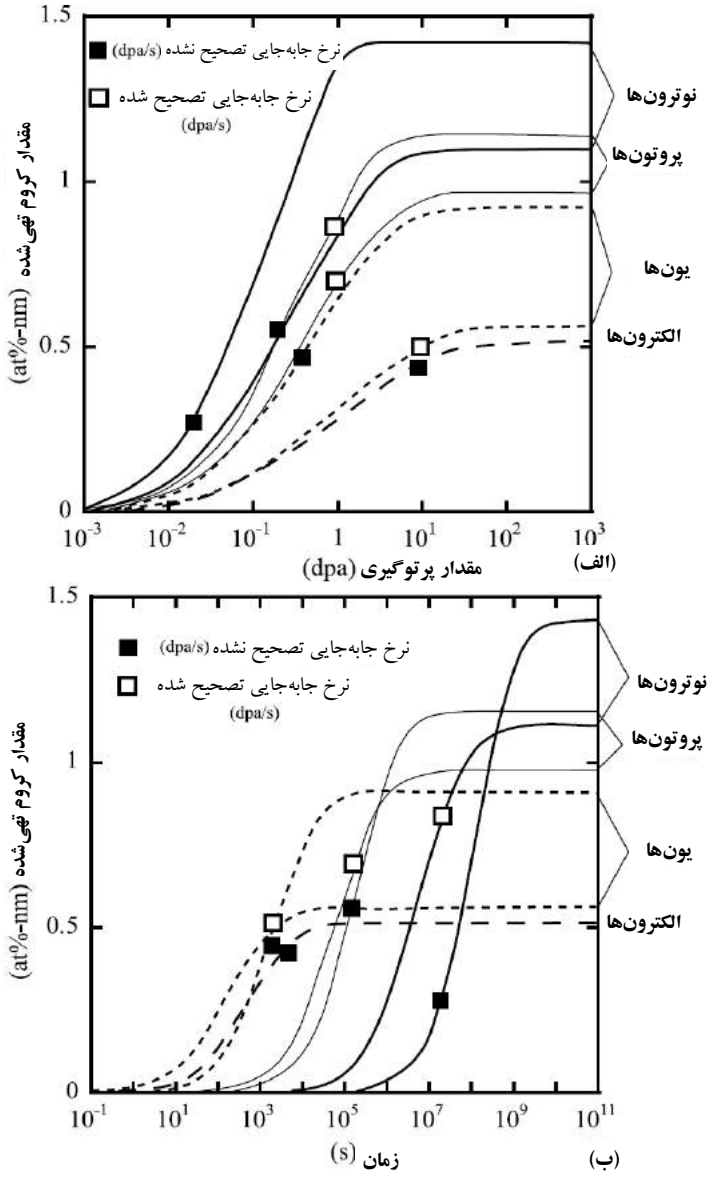
که M ناحیه‌ی جدایش یافته ، C_A^0 غلظت حجمی اتم، $C_A(x,t)$ غلظت اتم نزدیک سطح و $l(t)$ نصف پهنای منطقه تهی شده است.

شکل‌های ۱۱-۴ الف و ب مقدار تهی‌شدگی مرزدانه‌ای کروم را به صورت تابعی از مقدار پرتوگیری تابشی (۱۱-۴ الف) و زمان (۱۱-۴ ب) برای هر یک از چهار ذره توضیح داده شده در جدول ۱۱-۱ نشان می‌دهد. مقادیر محاسبه شده‌ی تهی‌سازی کروم برای هر یک از ذرات با استفاده از نرخ‌های مقدار پرتوگیری گزارش شده و تصحیح شده، بر طبق راندمان تولید عیوب مهاجرت کننده به صورت آزاد به ترتیب به صورت نمادهای باز و بسته نشان داده شده است. از آن‌جایی که فرض شده است که الکترون‌ها در تولید عیوب موجود برای اثرگذاری روی جدایش به صورت ۱۰۰٪ کارآمد هستند، هیچ‌گونه تغییری در مساحت جدایش یافته بعد از محاسبه برای راندمان وجود ندارد. به هرجهت، یک تفاوت با پروتون‌ها، یون‌های سنگین و نوترون‌ها وجود دارد که منجر به کاهش در مقدار جدایش می‌شود. تفاوت برای نوترون‌ها بزرگ‌تر و برای پروتون‌ها کوچک‌تر است. تفاوت نه فقط تابعی از

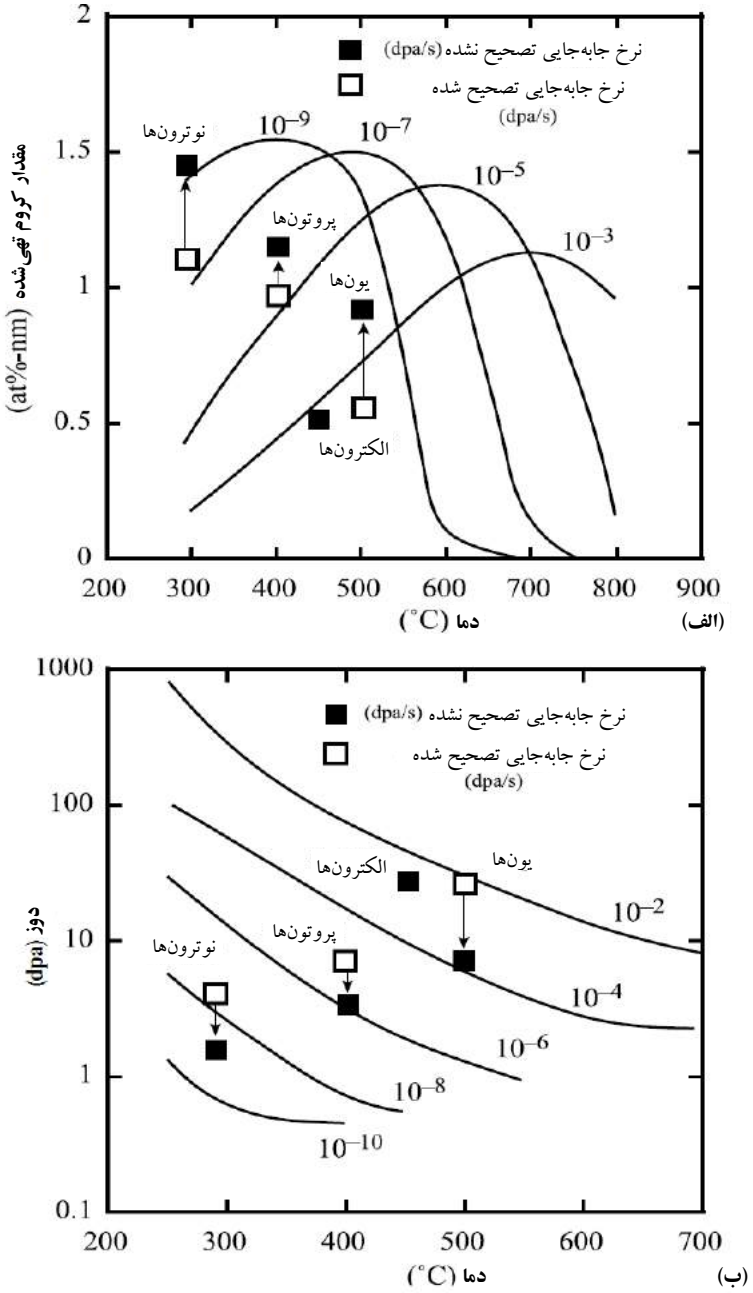
راندمان جابه‌جایی بلکه تابعی از شیب منحنی‌های نرخ مقدار پرتوگیری نیز است. با وجود این تفاوت‌های اساسی در مقادیر مورد انتظار جدایش مرزدانه، هنگامی نتیجه می‌شود که راندمان جابه‌جایی محاسبه می‌شود.

شکل ۱۱-۵ الف مقدار محاسبه شده‌ی تهی‌شدگی کروم به صورت تابعی از دما برای چندین نرخ جابه‌جایی متفاوت در حالت پایدار را نشان می‌دهد. حالت پایدار برای هر آزمایش در سطح مقدار پرتوگیریی مختلفی فرا می‌رسد. در یک نرخ جابه‌جایی مشخص، مساحت جدایش یافته در دماهای میانی به اوج می‌رسد و در دماهای پایین یا دماهای بالا سقوط کرده و کاهش می‌یابد. این به علت غلبه‌ی بازترکیبی در دماهای پایین و نفوذ معکوس در دماهای بالا است [۱۰]. هم‌چنین لازم به ذکر است که اثر کاهش در نرخ جابه‌جایی، انتقال منحنی‌ها به بیشینه‌های بالاتر در دماهای پایین‌تر است. برای یک مقدار پرتوگیری مشخص، نرخ جابه‌جایی پایین‌تر، غلظت‌های حالت پایدار عیب پایین‌تری را نتیجه می‌دهد که تعداد اتلاف عیوب به بازترکیبی را کاهش می‌دهد و منحنی را به دماهای پایین‌تر انتقال می‌دهد درحالی‌که درجه‌ی جدایش را افزایش می‌دهد. شکل ۱۱-۵ الف اثر سه‌تا از چهار عامل تعیین کننده یک آزمایش: نوع ذره، دما و نرخ مقدار پرتوگیری را نشان می‌دهد. این شکل اثر مقدار پرتوگیری را نشان نمی‌دهد زیرا این اثر نتیجه‌ی حالت پایدار است که در مقدار پرتوگیری‌های مختلف برای هر کدام از آزمایشات توضیح داده شده در جدول ۱۱-۱ به‌دست آمده است.

شکل ۱۱-۵ ب مقدار پرتوگیری مورد نیاز برای رسیدن به حالت پایدار را به صورت تابعی از دما و نرخ مقدار پرتوگیری نشان می‌دهد. هر کدام از آزمایشات برای نرخ‌های جابه‌جایی گزارش شده و تصحیح شده رسم شده است. نکته‌ی قابل توجه تفاوت زیاد در مقدار پرتوگیری‌های دریافتی برای رسیدن حالت پایدار بین الکترون‌ها و نوترون‌ها است. در کل، پرتودهی در یک نرخ dpa پایین‌تر، یک مقدار پرتوگیری پایین‌تری را برای رسیدن به حالت پایدار نتیجه می‌دهد. به همان نسبت، پرتودهی پروتون و یون سنگین برای آزمایشات توضیح داده شده در جدول ۱۱-۱ بین نوترون‌ها و الکترون‌ها رخ می‌دهد. این می‌تواند با توجه به معادلات نرخ شیمیایی مشخص شده در معادله‌ی ۵-۱ فهمیده شود که در آن معادله، عبارت اول نرخ تولید، عبارت دوم اتلاف به وسیله‌ی بازترکیبی متقابل و عبارت سوم اتلاف به وسیله‌ی نابودسازی عیوب در چاهک‌ها هستند. در حالت پایدار، در دمای پایین $C_{i,v}\alpha K_0^{1/2}$ و در دمای بالا $C_{i,v}\alpha K_0$ است (فصل ۵ ملاحظه شود). در نتیجه غلظت‌های عیوب نقطه‌ای نتیجه شده، توابع قوی از نرخ تولید هستند.



شکل ۱۱-۴. تهی‌سازی کروم برحسب (الف) مقدار پرتوگیری و (ب) زمان پرتودهی برای چندین ذره‌ی مختلف و اثر تصحیح برای راندمان ذره [۱۰].



شکل ۱۱-۵. (الف) تهی‌سازی کروم، و (ب) مقدار پرتوگیری تا رسیدن به حالت پایدار، به صورت تابعی از دما، نرخ مقدار پرتوگیری و کارایی ذره [۱۰].

شکل ۱۱-۶ یک منحنی جدایش را به صورت تابعی از دما برای ذراتی با نرخ‌های جابه‌جایی مختلف نشان می‌دهد. شایان ذکر است که دمایی که در آن جدایش بیشینه است (غلظت مینیمم است) با افزایش نرخ مقدار پرتوگیری به مقادیر بالاتری انتقال می‌یابد. این ناشی از رابطه‌ی جانشینی میان دما و نرخ مقدار پرتوگیری است. وابستگی متقابل دما ـ نرخ مقدار پرتوگیری برای فولاد زنگ نزن در یک محدوده‌ی وسیعی از دماها و مقادیر پرتوگیری در شکل ۱۱-۷ نشان داده شده است. در این شکل مناطق مهمی که در آن تابش رآکتوری به وسیله‌ی نوترون‌ها، و مناطقی که در آن پرتودهی‌های پروتونی و یون نیکل رخ می‌دهند، مشخص شده است. این نمودار تشریح می‌کند که چرا آزمایشات انجام شده در نرخ‌های مقدار پرتوگیری بالا، در دماهای بالا نیز انجام شده است.

روش ساده برای آزمایش رابطه‌ی جانشینی میان نرخ مقدار پرتوگیری و دما برایِ مقایسه‌ی اثرات پرتودهی از ذرات مختلف، یافتن شرایط لازم تغییرناپذیریِ بحث شده در فصل ۸ است. باید مشخص شود که برای تغییر مشخص در نرخ مقدار پرتوگیری، چه تغییری در دما (در یک مقدار پرتوگیری مشابه) برای جذب تعداد مشابه از عیوب در چاهک‌ها مورد نیاز است. تعداد عیوب در واحد حجم که تا زمان τ به وسیله‌ی چاهک‌ها اتلاف می‌شوند برابر است با:

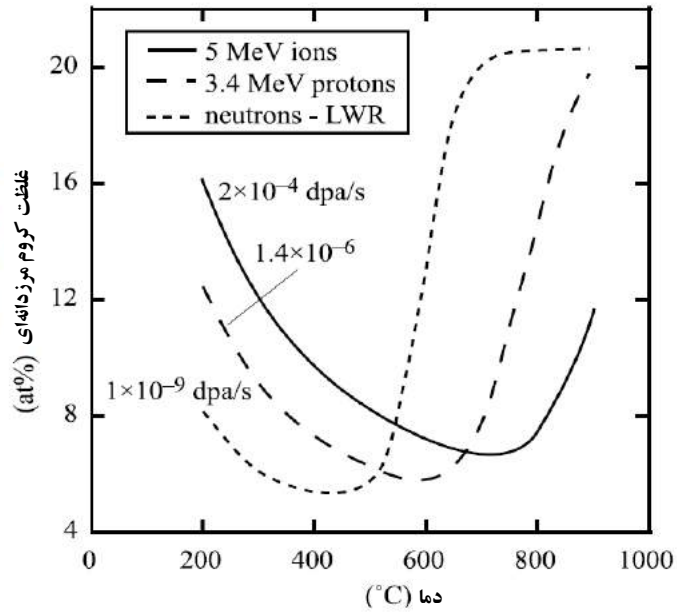
$$N_{\mathrm{Sj}} = \int_0^{\tau} k_{\mathrm{Sj}}^2 C_{\mathrm{j}} \, \mathrm{d}t \,, \tag{۶-۱۱}$$

و نسبت نرخ اتلاف جای خالی به اتلاف بین‌نشین‌ها برابر است با:

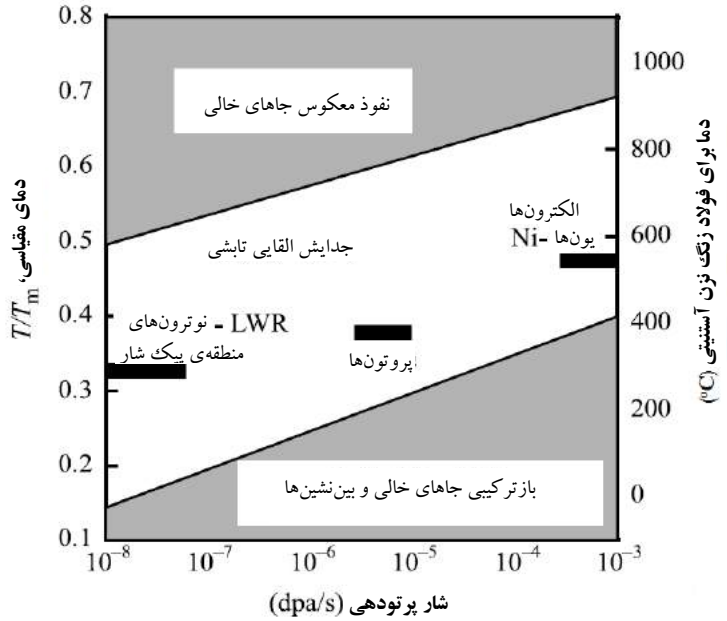
$$R_{\mathrm{S}} = \frac{N_{\mathrm{Sv}}}{N_{\mathrm{Si}}} \,, \tag{۷-۱۱}$$

که i یا $\mathrm{v} = \mathrm{j}$ و k_{S}^2 شدت چاهک است. کمیت N_{S} که در برگیرنده‌ی شار کلی عیوب نقطه‌ای به چاهک‌ها است (به عبارت دیگر جدایش القایی تابشی)، در تشریح گسترش ریزساختار مهم است. تعداد عیوب در واحد حجم که تا زمان τ بازترکیب می‌شوند با رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

$$N_{\mathrm{R}} = K_{\mathrm{iv}} \int_0^{\tau} C_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{v}} \, \mathrm{d}t \,, \tag{۸-۱۱}$$



شکل ۱۱-۶. وابستگی غلظت کروم مرزدانه‌ای به دما برای ذراتی با نرخ‌های مختلف مقدار پرتوگیری و راندمان‌های مختلف تولید عیب [۱۰].



شکل ۱۱-۷. رابطه‌ی میان دما و نرخ مقدار پرتوگیری در فولاد زنگ نزن.

که K_{iv} ضریب بازترکیبی جای خالی ـ بین‌نشین است. N_R کمیت مربوط برای رشد عیوب تجمعی مانند حفره‌ها و حلقه‌ها است که برای رشد به افرازش عیوب نقطه‌ای نیاز دارد.

شرایط لازم تغییرناپذیری می‌تواند برای به‌کار بردن ترکیبی از دمای پرتودهی یونی ـ نرخ مقدار پرتوگیری استفاده شود که پرتودهی نوترونی را شبیه‌سازی می‌کند. مثال پرتودهی فولاد زنگ نزن در شرایط پرتودهی هسته‌ی رآکتور آب جوشان (BWR) در دمای ۲۸۸ ^{o}C و تا یک نرخ مقدار پرتوگیری تقریباً $۴٫۵ \times ۱۰^{-۸}$ dpa/s را در نظر بگیرید. اگر یک پرتودهی پروتونی با یک مشخصه‌ی نرخ مقدار پرتوگیری $۷٫۰ \times ۱۰^{-۶}$ dpa/s انجام شود، سپس با استفاده از معادله‌ی ۸–۱۵۸ با یک انرژی تشکیل جای خالی ۱٫۹ eV و یک انرژی مهاجرت جای خالی ۱٫۳ eV، آزمایش در N_S با پرتودهی هسته رآکتور آب جوشان (به عبارت دیگر جدایش القایی تابشی) برای یک پرتودهی پروتونی در ۴۰۰ ^{o}C تغییرناپذیر خواهد بود. به صورت مشابه، با استفاده از معادله‌ی ۸–۱۶۲ یک دمای پرتودهی ۳۰۰ ^{o}C یک N_R تغییرناپذیر را نتیجه خواهد داد (به عبارت دیگر، تورم یا رشد حلقه). برای یک پرتودهی یونی با یون‌های Ni^{++} در یک نرخ مقدار پرتوگیری $۱۰^{-۳}$ dpa/s، دماهای مربوطه ۶۷۵^{o}C (N_S تغییرناپذیر) و ۳۴۰ ^{o}C (N_R تغییرناپذیر) هستند.

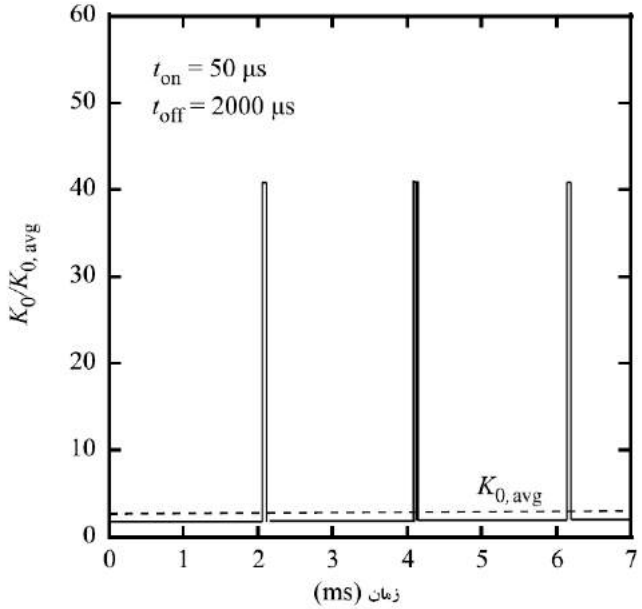
به عبارت دیگر، انتقال دمای ناشی از نرخ‌های مقدار پرتوگیری بالاتر، وابسته به ترکیب ریزساختار مورد نظر است. هم‌چنین با افزایش تفاوت در نرخ مقدار پرتوگیری، ΔT بین پرتودهی پروتونی و یونی به صورت اساسی افزایش می‌یابد. دماهای پرتودهیِ اسمیِ انتخاب شده برای پرتودهی پروتونی، ۳۶۰^{o}C و برای پرتودهی Ni^{++}، ۵۰۰^{o}C، حالت‌های میانه‌ای را در بین کرانه‌ها برای متغیرهای N_S و N_R نشان می‌دهد.

۴–۱۱ مزایا و معایب انواع مختلف ذره

هر یک از انواع ذرات برای استفاده در مطالعه و شبیه‌سازی اثرات پرتودهی مزایا و معایب مخصوص به خود دارند. معایب معمول پرتوهای ذرات باردار فقدان واکنش‌های استحاله‌ای است و لازم است که پرتو ردیابی افقی تصویر[1] استفاده شود. به استثنای بعضی از واکنش‌های استحاله‌ای کوچک که می‌تواند با پرتودهی یون سبک رخ دهد، ذرات باردار انواع واکنش‌های استحاله‌ای را که در مواد

1. Raster-scanned beam

هسته رآکتور به علت پرتودهی با نوترون‌ها رخ می‌دهد، تکثیر نمی‌کنند. مهم‌ترین آن‌ها تولید هلیوم به وسیله‌ی استحاله‌ی نیکل یا بور است؛ اما موضوع دوم پرتو ردیاب تصویر است که در آن هر عنصر حجمی از هدف فقط برای کسری از دوره‌ی زمانی ردیابی تصویر در معرض پرتو است. برای ردیاب پرتویی و عوامل پرتویی نمونه‌وار، کسری از زمان که هر جزء حجمی مشخص در جامد بمباران می‌شود، تقریباً ۰٫۰۲۵ است. در نتیجه، نرخ مقدار پرتوگیری لحظه‌ای در طول بخش روشن پرتو $\frac{۱}{۴۰}$ از هر دوره است (شکل ۱۱–۸). در نتیجه نرخ تولید عیب بسیار بالا است و عیوب می‌توانند در کسر باقی مانده ۰٫۹۷۵ از دوره قبل از آن‌که دوباره پرتو از سرتاسر جزء حجمی عبور کند، آنیل شوند. بنابراین، نرخ تولید مؤثر عیوب در سیستم‌های ردیابی تصویر خیلی کم است و باید محاسبه شود.



شکل ۱۱–۸. اثر یک پرتو ردیاب محل تصویر روی نرخ تولید فوری عیوب نقطه‌ای با نرخ میانگین زمانی مشابه به صورت یک منبع پیوسته [۱۲].

اولین هدف از اهداف پرتودهی یونی شبیه‌سازی اثرات نوترون‌ها است، دومین هدف فهم اساسی فرایندهای فیزیکی آسیب تابشی است. درحالی‌که پرتودهی یونی می‌تواند با کنترل زیاد در دما، نرخ مقدار پرتوگیری و مقدار پرتوگیری کلی انجام شود، چنین کنترل‌هایی در تابش‌های رآکتوری مخاطره آمیز است.

برای مثال، طراحی و ساخت تیوپ‌های اندازه‌گیری با کنترل دمایی فعال بسیار پر هزینه هستند. در نتیجه تغییرات مکرر نیرو یکی از مشکلات خواهد بود زیرا رابطه شار ـ دما تغییر پیدا خواهد کرد و این می‌تواند منجر به اثرات غیرطبیعی در ریزساختار پرتودیده شود (بخش ۸-۳-۱۱ و شکل ۸-۵۱ ملاحظه شود).

از طرف دیگر، پرتودهی تیوپ‌های خرگوشی[1] ارزان، حرارت‌دهی گامای غیرفعال را نیاز دارد و دما به قطعیت نمی‌تواند مشخص شود. به این لحاظ، پرتودهی‌های یونی مزیت‌های بهتری در زمینه‌ی کنترل و تأیید شرایط پرتودهی در مقایسه با پرتودهی نوترونی دارند. جدول ۱۱-۲ لیستی از مزایا و معایب را برای هر سه نوع ذره: الکترون‌ها، یون‌های سنگین و یون‌های سبک (پروتون‌ها) گزارش کرده است که در قسمت‌های بعدی به صورت جزیی بررسی می‌شوند.

۱۱-۴-۱ الکترون‌ها

پرتودهی الکترونی به آسانی در میکروسکوپ الکترونی عبوری ولتاژ بالا انجام می‌شود و به این لحاظ از منبع یونی نسبتاً ساده استفاده می‌کند که می‌تواند یک رشته‌ی گرم یا تفنگ نشر میدانی[2] باشد. مزیت این ذرات به این صورت است که تجهیزات مشابه استفاده شده برای آسیب تابشی می‌تواند برای به تصویر درآوردن آسیب نیز استفاده شوند. دیگر مزیت این ذرات این است که نرخ‌های مقدار پرتوگیری بالا، زمان‌های بسیار کوتاه پرتودهی را نیاز دارد؛ اما این فرایند نیز انتقال دمایی بالایی را همان‌طوری که در قسمت قبل توضیح داده شد نیاز دارد.

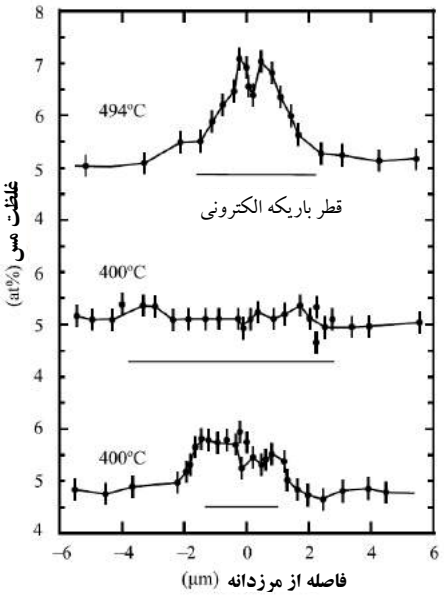
1. Rabbit tube
2. Field emission gun

جدول ۱۱-۲. مزیت‌ها و زیان‌های پرتودهی با انواع مختلف ذره [۱۲].

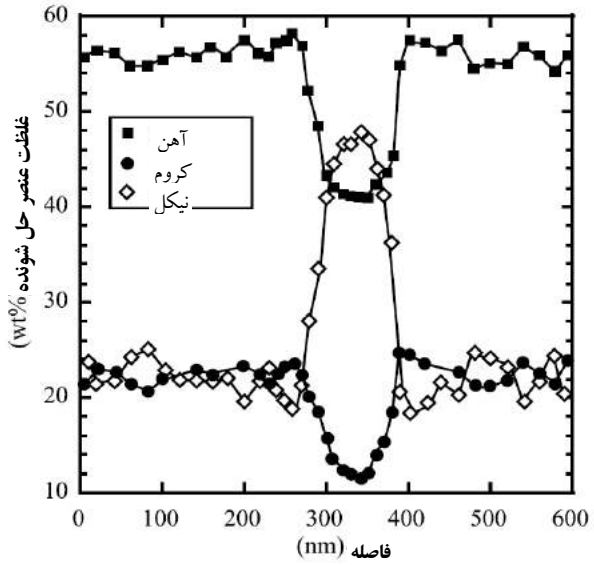
الکترون‌ها	
مزایا	**معایب**
منبع نسبتاً ساده در میکروسکوپ الکترونی عبوری نرخ مقدار پرتوگیری بالا ـ زمان‌های پرتودهی کوتاه	محدوده‌ی انرژی تقریباً ۱ MeV عدم تولید آبشار جریان پرتوی بسیار بالا (نرخ dpa بالا) دمای بالایِ مورد نیاز کنترل ضعیف دمای نمونه شکل گوسی قوی (سطح مقطع شدت غیریکنواخت) به پرتو عدم استحاله
یون‌های سنگین	
مزایا	**معایب**
نرخ مقدار پرتوگیری بالا ـ زمان‌های پرتودهی کوتاه T_{avg} بالا تولید آبشار	عمق نفوذ بسیار محدود سطح مقطع آسیب با بیشینه‌ی قوی جریان پرتوی بسیار بالا (نرخ dpa بالا) دمای مورد نیاز بالا عدم استحاله پتانسیل برای تغییرات ترکیبی در مقدار پرتوگیری بالا از طریق کاشت یون
پروتون‌ها	
مزایا	**معایب**
نرخ مقدار پرتوگیری سریع ـ زمان‌های پرتودهی متوسط ΔT مورد نیاز متوسط عمق نفوذ خوب سطح مقطع آسیب صاف در سراسر یک محدوده ده‌ها میکرومتری	فعال‌سازی اندک نمونه آبشارهای تفکیکی شده‌ی زیاد و کوچک عدم استحاله

پرتودهی الکترونی با استفاده از میکروسکوپ الکترونی عبوری چندین عیب مختلف نیز دارد. اول، انرژی‌ها به محدوده‌ی MeV ۱ محدود می‌شود. این انرژی برای تولید جفت فرانکل تکی در فلزات کافی است و هیچ‌گونه آبشاری تولید نمی‌کند. نرخ مقدار پرتوگیری بالا، دماهای بالایی را نیاز دارد که باید به دقت کنترل شود که در پایه‌های نمونه‌گیر میکروسکوپ الکترونی عبوری معمول بسیار دشوار است. دیگر عیب این ذرات به این صورت است که از آن‌جایی که پرتودهی اغلب برروی ورق‌های نازک انجام می‌شود، عیوب بسیار نزدیک به سطح تولید می‌شوند و رفتار آن‌ها ممکن است که وضعیت سطح را تغییر دهد. شاید بزرگ‌ترین عیب شکل گوسی پرتو الکترونی است که ممکن است منجر به شیب‌های نرخ مقدار پرتوگیری قوی در طول منطقه‌ی پرتودیده شود. شکل ۱۱-۹ سطح مقطع ترکیب مس در اطراف مرزدانه در آلیاژ Ni-39%Cu بعد از پرتودهی الکترونی را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که درحالی‌که یک تهی‌شدگی موضعی در مرزدانه (همان‌طوری که انتظار می‌رود) وجود دارد، ناحیه‌ی نزدیک به کمینه به علت شار عیوب بالا خارج از منطقه‌ی پرتودیده‌ی مشخص شده به وسیله‌ی خط افقیِ زیر طیف، یک غنی‌شدگی شدیدی را از مس نشان می‌دهد. این جهت به سمت بیرون شار عیب، منجر به جهت معکوس جدایش از جهتی می‌شود که به وسیله‌ی شار عیب به چاهک ایجاد شده است. دیگر اثر غیرطبیعی مشاهده شده در پرتودهی الکترونی سطح مقطع‌های غنی‌شدگی و تهی‌شدگی مرزدانه‌ای بسیار پهن است. شکل ۱۱-۱۰ نشان می‌دهد که سطح مقطع غنی‌شدن برای نیکل و سطح مقطع تهی‌شدگی برای آهن و کروم در فولاد زنگ نزن پهنایی در حدود ۷۵-۱۰۰ nm دارد که از پهنای ۵-۱۰ nm مشاهده شده برای پرتودهی نوترونی تحت شرایط مشابه و تمام مدل‌های شبیه‌سازی شده از جدایش القایی تابشی بسیار بیش‌تر است. اثر مشابهی در پرتودهی الکترونی و D^+ در آلیاژهای مشابه به وسیله‌ی واکای[1] گزارش شده است[۱۵] که در آن مشاهده شده که جدایش در اطراف مرزدانه در نمونه‌ی پرتودهی شده دوترونی در مقایسه با پرتودهی شده الکترونی بسیار بزرگ‌تر و باریک‌تر است (شکل ۱۱-۱۱).

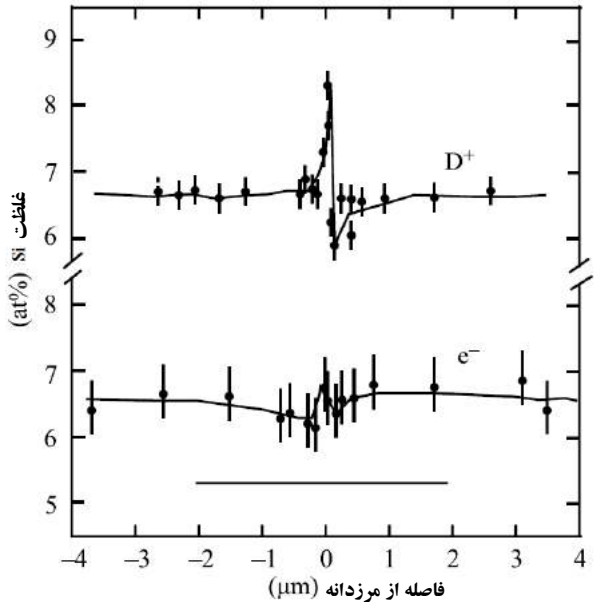
1. Wakai



شکل ۱۱-۹. غنی‌سازی مس مجاور منطقه‌ی تهی‌شده در مرزدانه. غنی‌شدگی به وسیله‌ی شار عیوب بالا دور از منطقه‌ی پرتودهی شده مشخص و به وسیله‌ی خط افقی ایجاد شده است [۱۳].



شکل ۱۱-۱۰. سطح مقطع غنی‌شدگی و تهی‌شدگی مرزدانه‌ای پهن در آلیاژ Fe-20Cr-25Ni-0.75Nb-0.5Si پرتودهی شده با الکترون‌ها در دمای $420\ ^{o}C$ تا یک نرخ مقدار پرتوگیری ۷٫۲ dpa [۱۴].

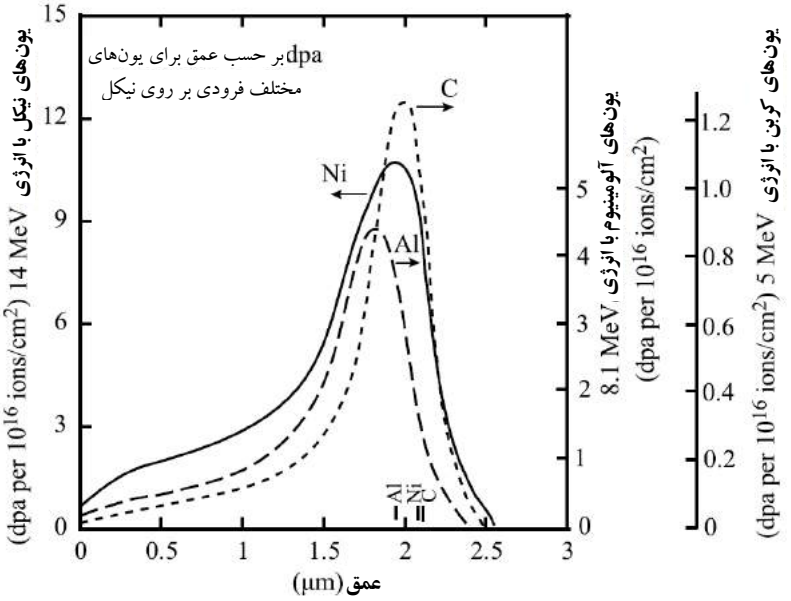


شکل ۱۱-۱۱. مقایسه‌ی پرتودهی دوترونی و الکترونی که نشان دهنده‌ی مقدار جدایش بیش‌تر و سطح مقطع باریک‌تر برای پرتودهی دوترونی است [۱۵].

۱۱-۴-۲ یون‌های سنگین

یون‌های سنگین مزیت نرخ‌های بالای مقدار پرتوگیری را دارند که منجر به انباشت مقدار بالای پرتوگیری در زمان‌های کوتاه می‌شود. هم‌چنین، به علت آن‌که آن‌ها به صورت معمول در محدوده‌ی انرژی چند MeV تولید می‌شوند، در تولید آبشارهای متراکم مشابه با آبشارهایی که به وسیله‌ی نوترون‌ها تولید شده (شکل ۳-۷) بسیار کارآمد هستند. معایب این ذرات این است که همانند الکترون‌ها نرخ‌های مقدار پرتوگیری بالا، انتقال دمایی بالایی را نیاز دارد در نتیجه به منظور ایجاد اثرات مشابه به پرتودهی نوترونی در دمای تقریباً ^{o}C ۳۰۰، پرتودهی باید در دماهای حدوداً ^{o}C ۵۰۰ انجام شود. در نتیجه حاشیه‌ی دمایی بالایی برای مطالعه‌ی پرتودهی نوترونی در دماهای بالا وجود ندارد، زیرا دماهای پرتودهی یونی بالا منجر به بازپخت می‌شود. دیگر عیب یون‌های سنگین عمق نفوذ کوتاه و تغییر پیوسته‌ی نرخ مقدار پرتوگیری در سراسر عمق نفوذ است. شکل ۱۱-۱۲ سطح مقطع آسیب برای چندین یون سنگین برخورد کننده به نیکل را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که نرخ آسیب به صورت پیوسته تغییر می‌کند و خیلی سریع فقط در ۲ میکرومتری در زیر سطح به حداکثر

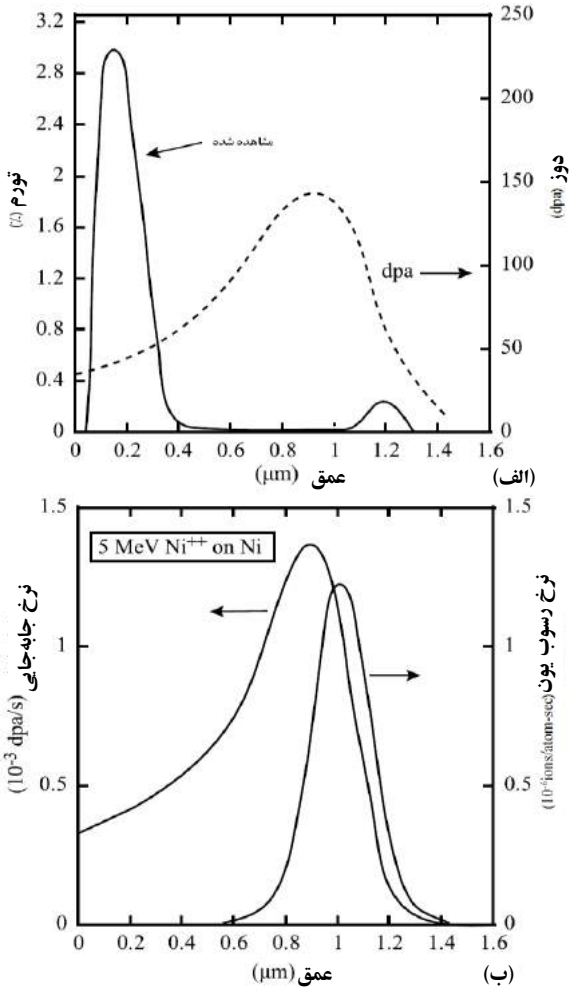
می‌رسد. **در نتیجه، مناطقی در عمق‌های مناسب از سطح به منظور جلوگیری از تغییرات مقدار پرتوگیری و نرخ مقدار پرتوگیری باید قابلیت تکرار نمونه‌گیری را داشته باشند.** خطاهای کوچک (۵۰۰nm) ایجاد شده در مکان‌های حجمی توصیف شده می‌تواند منجر به مقدار پرتوگیری‌ای شود که به اندازه‌ی ضریب ۲ از مقدار هدف متفاوت است.



شکل ۱۱-۱۲. سطح مقطع‌های آسیب برای پرتودهی کربن، آلومینیوم و نیکل هدف نیکلی در انرژی‌های انتخاب شده برای حصول عمق نفوذ مشابه [۱۶].

این مسئله که منحصر به پرتودهی فولاد زنگ نزن یا آلیاژهای پایه‌ی نیکل با یون نیکل است این است که علاوه بر آسیب، هر یون نیکل بمباران کننده بین‌نشین تولید می‌کند. شکل ۱۱-۱۳ الف نشان می‌دهد که پرتودهی یک آلیاژ Fe-15Cr-35Ni با Ni^{++} ۵ MeV منجر به تورم بالا در مناطق میانی زیر سطح در مقایسه با مناطق نزدیک به بیشینه آسیب می‌شود. همان‌طوری که در شکل ۱۱-۱۳ب نشان داده شده است، یون‌های Ni^{++} در موقعیتی فقط زیر پیک منطقه‌ی آسیب به سکون می‌رسند. در نتیجه حتی اگر نرخ پیک آسیب در حدود ۳ برابر مقدار در سطح باشد، تورم در آن موقعیت در مقایسه با سطح با یک ضریب تقریباً ۵ برابری خنثی می‌شود [۱۷]. دلیل این پدیده به این صورت است که

بمباران یون‌های Ni^{++} بین‌نشین‌هایی را ایجاد می‌کند و ازدیاد بین‌نشین‌ها نزدیک به پیک آسیب منجر به کاهش نرخ رشد حفره می‌شود [۱۸، ۱۹].



شکل ۱۱-۱۳. (الف) تورم زیر سطحی نتیجه شده از پرتودهی یونی با یون‌های Ni^{+} با انرژی ۵MeV در یک آلیاژ Fe-15Cr-35Ni در دمای $625^{o}C$ [۱۷]. (ب) نرخ جابه‌جایی و نرخ رسوب یون محاسبه شده برای پرتودهی یونی با Ni^{++} با انرژی ۵MeV روی نیکل [۱۸].

در رژیم نرخ مقدار پرتوگیری ـ دما که باز ترکیبی سازوکار غالب اتلاف عیوب نقطه‌ای است، بین‌نشین‌های ایجاد شده با بمباران یونی Ni^{++} هرگز بازترکیب نمی‌شوند زیرا تولید جای خالی برابری وجود ندارد. بنابراین، بین‌نشین‌های ایجاد شده زمانی که کسر عیوب نقطه‌ای بازترکیب شده بزرگ باشند، مانند منطقه‌ی پیک تورم، کسر بزرگی از عیوب نقطه‌ایِ جذب شده در چاهک‌ها را دربر می‌گیرند.

۱۱-۴-۳ پروتون‌ها

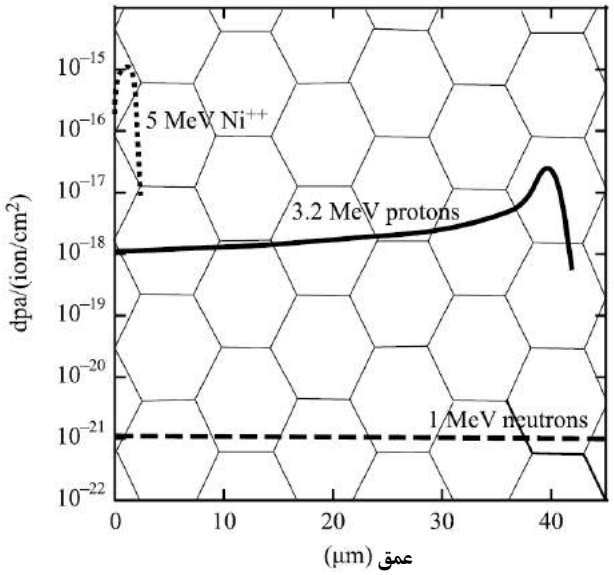
در بسیاری از موارد پرتودهی پروتونی، بر معایب پرتودهی الکترونی و نوترونی غلبه می‌کند. در فقط چند MeV، عمق نفوذ می‌تواند فراتر از ۴۰μm باشد و سطح مقطع آسیب نسبتاً صاف است به گونه‌ای که نرخ مقدار پرتوگیری در طول چند ده میکرونی، کم‌تر از ضریبی در حدود ۲ تغییر می‌کند. به علاوه، عمق نفوذ برای تعیین ویژگی‌هایی مانند سخت شوندگی تابشی از طریق اندازه‌گیری‌های ریزسختی سنجی، و ترک‌های خوردگیِ تنشی از طریق آزمایش‌های شروع ترک مانند تست نرخ کرنش آرام[1]، کافی است. شکل ۱۱-۱۴ (و شکل ۲-۲۵) شمایی از سطح مقطع‌های آسیب برای پروتون با انرژی ۳٫۲ MeV و یون‌های Ni^{++} با انرژی ۵ MeV در فولاد زنگ نزن را نشان می‌دهد. انطباق‌ها روی محور عمقی، ساختار دانه‌ای با اندازه دانه‌ی ۱۰μm است. لازم به ذکر است که با این اندازه دانه، مرزدانه‌های متعدد و حجم پرتودیده قابل توجهی وجود دارند که در آن نرخ آسیب پروتون صاف است.

نرخ مقدار پرتوگیری برای تابش‌های پروتونی از الکترون‌ها یا یون‌ها ۲ تا ۳ برابر کوچک‌تر است در نتیجه فقط به تغییر دمایی متوسطی نیاز دارد؛ اما از آن‌جایی که هنوز 10^{2} تا 10^{3} برابر از پرتودهی نوترونی بزرگ‌تر است، مقدار پرتوگیری‌های متوسط در زمان‌های پرتودهی نسبتاً کوتاه به‌دست می‌آید.

مزیت‌های این روش به این صورت هستند که به علت جرم کوچک پروتون در مقایسه با یون‌های سنگین، انرژی برگشتی کوچک‌تر است و ریخت شناسی آسیب نتیجه شده، با آبشارهای کوچک‌تر و بسیار فاصله‌دارتر از یون‌ها و نوترون‌ها توصیف می‌شود (شکل ۳-۷). هم‌چنین از آن‌جایی که فقط

1. Slow Strain Rate Test

چند MeV برای غلبه بر سد کولنی برای یون‌های سبک لازم است، هم‌چنین یک مقدار کمی از برانگیختگی نمونه وجود دارد که با انرژی پروتون افزایش می‌یابد.

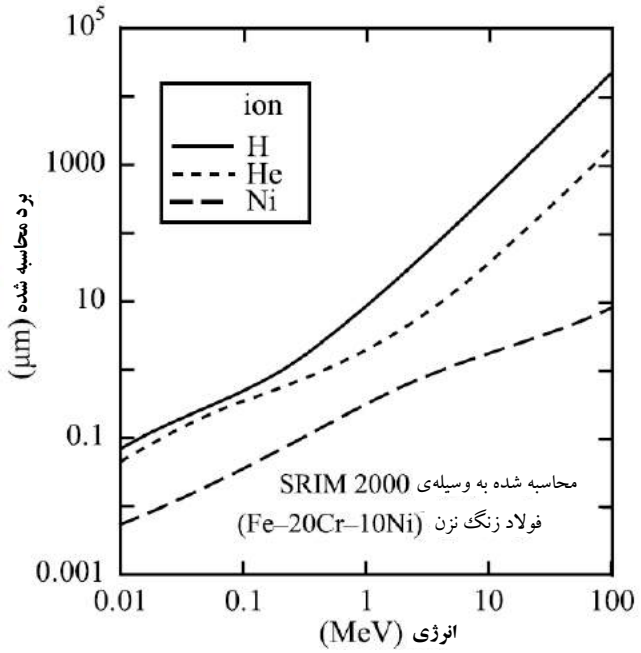


شکل ۱۱-۱۴. سطح مقطع‌های آسیب برای پروتون با انرژی ۳٫۲ MeV و یون‌های Ni^{++} با انرژی ۵ MeV در فولاد زنگ نزن [۱۲].

۱۱-۵ عوامل پرتودهی برای پرتودهی‌های ذرات

در فرایند تنظیم یک آزمایش پرتودهی یونی، تعدای از عوامل که شامل مشخصه‌های پرتو (انرژی، جریان/مقدار پرتوگیری) و برهم‌کنش پرتو- هدف هستند، باید مورد توجه قرار گیرند. یکی از مهم‌ترین مشخصه‌ها عمق نفوذ است. شکل ۱۱-۱۵ برد را برحسب انرژی ذره برای پروتون‌ها، یون‌های هلیوم و یون‌های نیکل در فولاد زنگ نزن نشان می‌دهد که به وسیله‌ی SRIM [۲۰] محاسبه شده است. تفاوت در عمق نفوذ بین یون‌های سبک و سنگین در این محدوده‌ی انرژی بیش‌تر از یک برابر است. شکل ۱۱-۱۶ نشان می‌دهد که چه‌طور چندین عامل دیگرِ تشریح کننده‌ی رفتار هدف در طول پرتودهی پروتونی با انرژی، نرخ مقدار پرتوگیری، زمان رسیدن به dpa ۱، انرژی رسوب داده شده و حداکثر جریان پرتو مجاز (که نرخ مقدار پرتوگیری و مقدار پرتوگیری کلی را تعیین خواهد کرد) تعیین شده در محدوده‌ی دمایی $۳۶۰^{o}C$ تغییر می‌کند. با افزایش انرژی، نرخ مقدار پرتوگیری در سطح

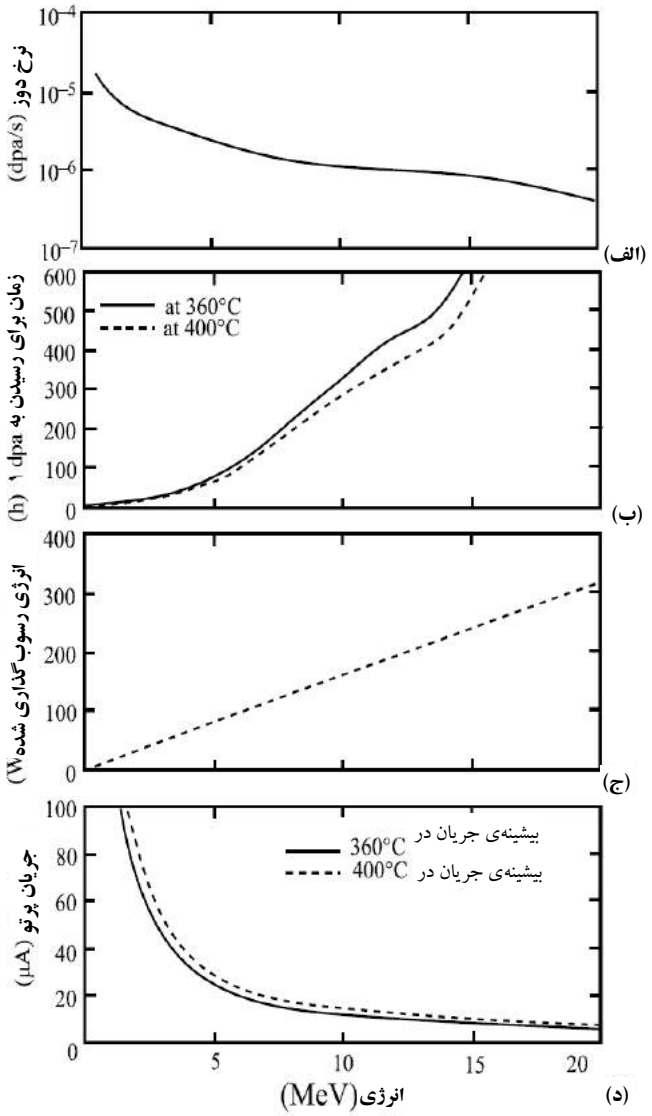
به علت افت در سطح مقطع کشسان کاهش می‌یابد (شکل ۱۱-۱۶ الف). در نتیجه، زمان لازم برای رسیدن به یک سطح مقدار پرتوگیری هدف، و از آن‌رو درجه‌ی پرتودهی، خیلی سریع افزایش می‌یابد (شکل ۱۱-۶ ب). رسوب‌گذاری انرژی به صورت خطی با انرژی پرتو تغییر می‌یابد، که هزینه‌ی حذف حرارت اضافه شده به منظور کنترل دمای ناحیه‌ی پرتودهی شده را افزایش می‌دهد (شکل ۱۱-۱۶ج). نیاز به حذف حرارت به علت انرژی‌های بالاتر، جریان پرتو را برای دمای هدف مشخص محدود خواهد کرد (شکل ۱۱-۱۶د) و حد برای جریان پرتو (یا نرخ مقدار پرتوگیری) منجر به طولانی شدن پرتودهی برای کسب یک مقدار پرتوگیری مشخص می‌شود.



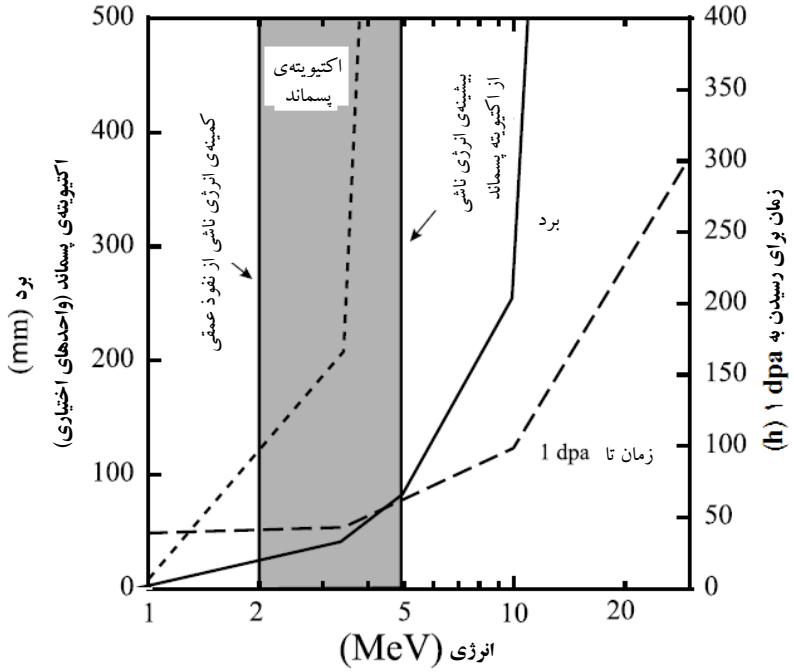
شکل ۱۱-۱۵. برد پروتون‌ها، اتم‌های هلیوم و یون‌های نیکل در فولاد زنگ نزن به صورت تابعی از انرژی یون [۱۲].

شکل ۱۱-۱۷ نشان می‌دهد که چه‌طور عوامل رقابتی یک فرایند پرتودهی با انرژی پرتو تغییر می‌کنند و روابطی را در عوامل پرتو ایجاد می کنند. برای مثال، درحالی‌که در کل عمق بالاتر برای افزایش حجم ماده‌ی پرتو دیده مناسب است، انرژی بالاتر مورد نیاز، نرخ‌های مقدار پرتوگیری پایین‌تری را در نزدیک سطح و اکتیویته پسماند بالاتری را نتیجه می‌دهد. برای پرتودهی پروتونی، محدوده‌ی انرژی

بهینه، که با تعادل میان این عوامل به‌دست آمده، همان‌طوری که به وسیله‌ی منطقه‌ی سایه‌دار نشان داده شده، میان انرژی ۲ و ۵MeV قرار گرفته است.



شکل ۱۱-۱۶. رفتار عوامل پرتو ـ هدف به صورت تابعی از انرژی پرتو تابشیِ پروتونی در $360^{\circ}C$.
(الف) نرخ مقدار پرتوگیری. (ب) زمان لازم برای رسیدن به dpa ۱. (ج) رسوب انرژی و
(د) حد جریان پرتو برای حفظ دمای نمونه در $360^{\circ}C$ [۱۲].

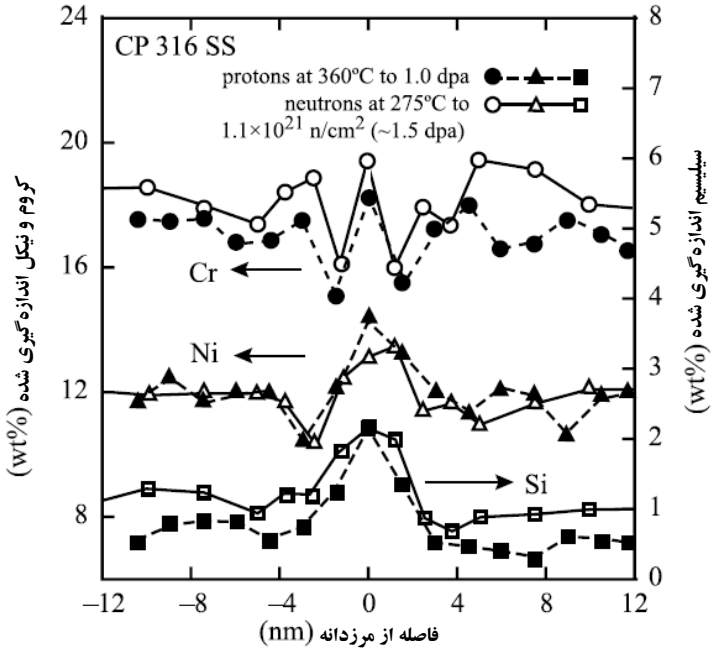


شکل ۱۱-۱۷. تغییر برد یون، اکتیویته‌ی پسماند و زمان برای رسیدن به dpa ۱ به صورت تابعی از انرژی پروتون [۱۲].

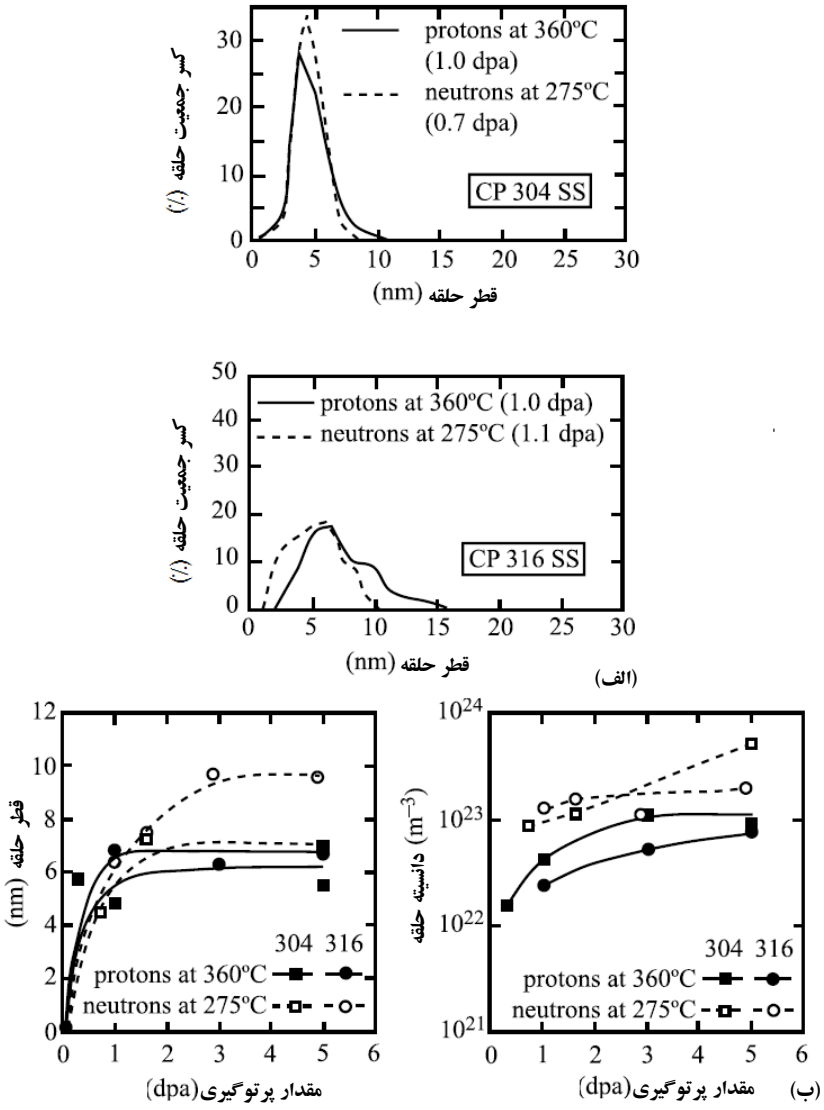
۱۱-۶ شبیه‌سازی آسیب تابش نوترونی با تابش پروتونی

تابش پروتونی به جای ابزار آسیب تابشی، اصلاحات قابل توجهی را متحمل شده است. آزمایشات متعددی انجام شده است و با آزمایشات پرتودهی نوترونی معادل، به منظور تعیین آن‌که آیا پرتودهی پروتونی می‌تواند اثرات پرتودهی نوترونی روی ریزساختار، ریز شیمی و سخت‌شوندگی را ایجاد کند، مقایسه شده است. مثال‌هایی که در ادامه آورده می‌شود تعدادی از اثرات پرتودهی روی چندین آلیاژ را به منظور اثبات ظرفیت پرتودهی پروتونی برای ایجاد اثرات بحرانی پرتودهی نوترونی نشان می‌دهد. شکل‌های ۱۱-۱۸ تا ۱۱-۲۴ مقایسه‌ی مستقیم پرتودهی‌های مشابه روی حرارت‌دهی آلیاژهای مشابه (فولادهای زنگ نزن ۳۰۴ و ۳۱۶ با خلوص تجاری (CP) متعاقب پرتودهی نوترونی در دمای ^{o}C ۲۷۵ یا پرتودهی پروتونی در دمای ^{o}C ۳۶۰ در مقدار پرتوگیری‌های مشابه را نشان می‌دهد. شکل ۱۱-۱۸ رفتار جدایش القایی تابشی برای کروم، نیکل و سیلیسیم در آلیاژ فولاد زنگ نزن بعد از پرتودهی تا تقریباً 1dpa را مقایسه می‌کند. نتایج پرتودهی نوترونی نشانه‌های باز و نتایج پرتودهی پروتونی

نشانه‌های تو پر هستند. این محدوده مقدار پرتوگیری، به منزله‌ی آزمایش نهایی از پرتودهی پروتونی برای ایجاد سطح مقطع تهی‌سازی کروم W شکلِ ایجاد شده با پرتودهی یک ریزساختار حاوی مرزدانه‌های غنی از کروم قبل از پرتودهی، انتخاب شده است. لازم به ذکر است که هر دو سطح مقطع از لحاظ بزرگی و گستردگی فضایی بسیار نزدیک به یک‌دیگر حرکت می‌کند. این مشابهت‌ها برای هر سه عنصر وجود دارد. شکل ۱۱-۱۹ مشابهت در ریزساختار نابجایی را نشان می‌دهد که با توزیع اندازه‌ی حلقه نابجایی (شکل ۱۱-۱۹ الف) و اندازه و عدد دانسیته‌ی حلقه‌های نابجایی (شکل ۱۱-۱۹ب) برای فولادهای زنگ نزن ۳۰۴ و ۳۱۶ اندازه‌گیری شده است. شایان ذکر است که شکل‌های اصلی توزیع اندازه‌های حلقه با هر دو پرتودهی به صورت بیشینه‌ی توزیع تیز برای مورد SS ۳۰۴ و توزیع صاف‌تر با یک دنباله برای مورد SS ۳۱۶ است. مشابهت در اندازه‌ی حلقه برای آلیاژ SS ۳۰۴ خوب است، درحالی‌که حلقه‌ها برای پرتودهی پروتونی آلیاژ ۳۱۶ کوچک‌تر هستند.



شکل ۱۱-۱۸. مقایسه‌ی جدایش مرزدانه‌ای کروم، نیکل و سیلیسیم در فولاد زنگ نزن ۳۱۶ با خلوص تجاری متعاقب پرتودهی با پروتون‌ها و نوترون‌ها تا مقدار پرتوگیری‌های مشابه [۲۱].

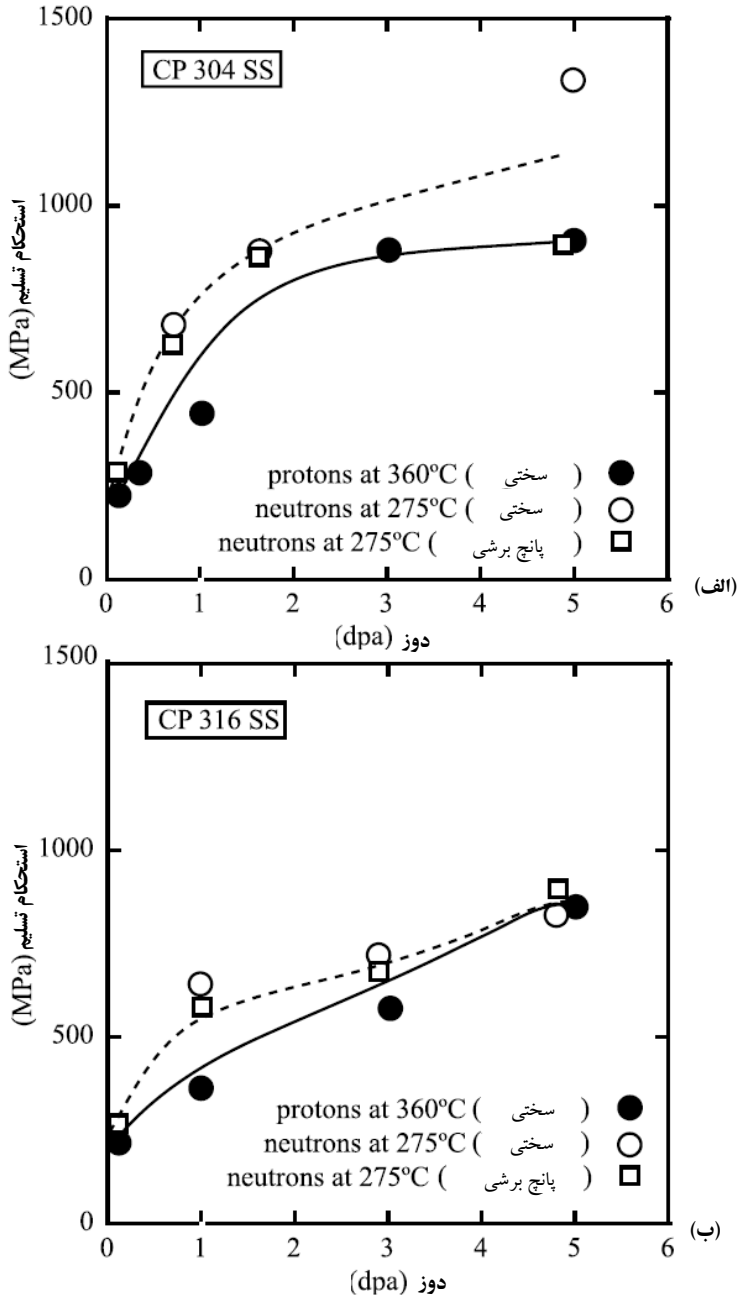


شکل ۱۱-۱۹. مقایسه (الف) توزیع‌های اندازه‌ی حلقه و (ب) قطر حلقه و عدد دانسیته‌ی حلقه برای فولادهای رنگ نزن ۳۰۴ و ۳۱۶ با خلوص تجاری پرتودهی شده با نوترون‌ها و پروتون‌ها تا مقدار پرتوگیری‌های مشابه [۲۱].

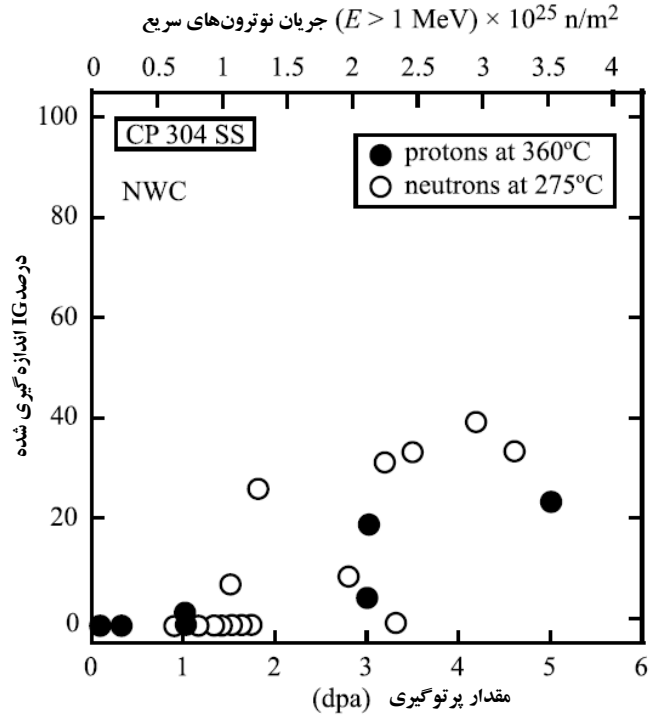
دانسیته‌ی حلقه برای مورد پرتودهی پروتونی از مورد پرتودهی نوترونی در حدود ۳ برابر کوچک‌تر است، که این مقدار مورد انتظار است زیرا دمای پرتودهی پروتونی در مسیر جدایش القایی تابشی (دمای بالاتر) برای ریز ساختار حلقه نابجایی بهینه شده است. **با توجه به آن‌که اندازه‌ی حلقه‌ها و دانسیته‌ها بسیار نزدیک هستند می‌توان بیان کرد که دانسیته‌ی حلقه به وسیله‌ی خوشه‌ای شدن در آبشار تحریک شده و آبشارهای نتیجه شده از پرتودهی پروتونی نسبت به آبشارهای نتیجه شده از پرتودهی نوترونی بسیار کوچک‌تر هستند.** به هرجهت کسر باقی‌مانده از حلقه‌های بین‌نشینی برای پرتودهی پروتونی بسیار بیش‌تر است که به صورت جزیی نرخ تشکیل بیش‌تر حلقه تحت پرتودهی نوترونی را جبران می‌کند و دانسیته حلقه‌ی ۳ برابری را نتیجه می‌دهد [۲۲].

شکل ۱۱-۲۰ مقایسه‌ی سخت شوندگی تابشی بین دو نوع پرتودهی مختلف را نشان می‌دهد. این نتایج با نتایج پرتودهی پروتونی در سختی‌های اندکی پایین‌تر مشابه هستند. شکل ۱۱-۲۱ قابلیت ترک‌های خوردگی تنشی تابشی برای SS ۳۰۴ تجاری را نشان می‌دهد که به وسیله‌ی درصد شکست بین دانه‌ای روی سطح شکست متعاقب آزمایش بار ثابت (نمونه‌های پرتودهی نوترونی شده) و آزمایش نرخ کشش ثابت (نمونه‌ی پرتودهی پروتونی شده) در رآکتور آب جوشان اندازه‌گیری شده است. برخلاف حالت‌های بسیار متفاوت آزمایش، نتایج بسیار مشابه هستند، به گونه‌ای که در هر دو نوع پرتودهی آغاز ترک‌های خوردگی تنشی بین دانه‌ای در حدود dpa ۱ است.

شکل ۸-۴۰ در فصل ۸ رفتار تورم در فولادهای زنگ نزن آستنیتی را به صورت تابعی از مقدار نیکل برای پرتودهی پروتونی، نیکلی و نوترونی نشان می‌دهد. درحالی‌که این آزمایشات روی سری‌های متفاوتی از آلیاژها و تحت شرایط پرتودهی بسیار متفاوتی انجام شده است آن‌ها رفتارهای مشابهی را برای وابستگی تورم به مقدار نیکل نشان می‌دهند. در هر دو آلیاژ با خلوص تجاری، هیچ حفره‌ای در نمونه‌های پرتودهی شده با نوترون یا پروتون تشکیل نشده است.



شکل ۱۱-۲۰. (الف)، (ب) مقایسه‌ی سخت شوندگی در فولادهای زنگ نزن ۳۰۴ و ۳۱۶ با خلوص تجاری پرتودهی شده با نوترون‌ها و پروتون‌ها تا مقدار پرتوگیری‌های مشابه [۲۱].



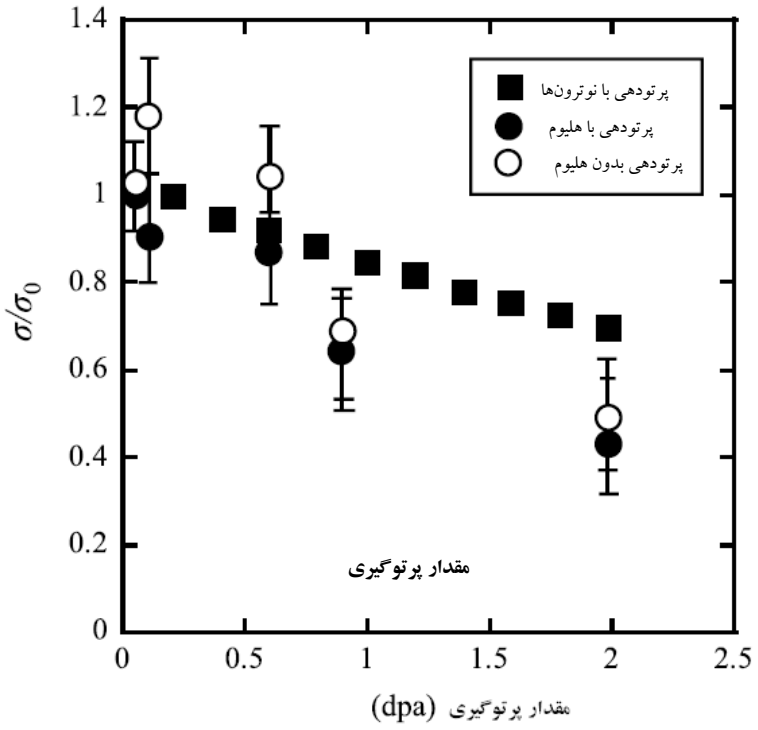
شکل ۱۱-۲۱. مقایسه‌ی گستردگی ترک‌های خوردگی تنشی بین دانه‌ای در فولاد رنگ نزن ۳۰۴ با خلوص تجاری متعاقب آزمایش‌های ترک خوردگی تنشی مشابه از نمونه‌های پرتودهی نوترونی و پروتونی شده از حرارت مشابه [۲۱].

در مثال آخر در مورد آلیاژهای فولاد زنگ نزن، شکل ۱۱-۲۲ رهایش تنش پسماند به وسیله‌ی پرتودهی نوترونی و پروتونی را نشان می‌دهد. در این‌جا نیز با وجود آن‌که آلیاژها و انواع آزمایش‌ها مختلف هستند؛ اما وابستگی مشابهی برای رهایش تنش به مقدار پرتوگیری دیده می‌شود.

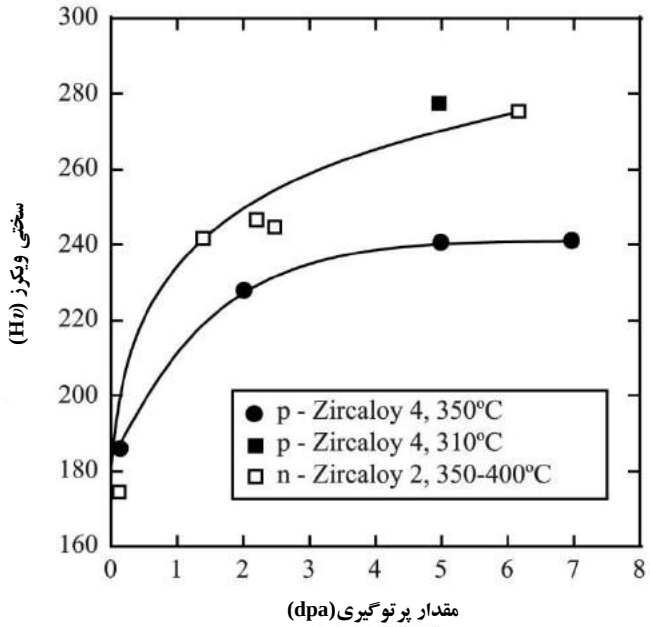
شکل ۱۱-۲۳ سخت شوندگی برای آلیاژهای زیرکولوی[۱] ۲ و ۴ پرتودهی شده با نوترون‌ها و پروتون‌ها را نشان می‌دهد. اگرچه پرتودهی‌ها روی مواد مشابه و نیز با استفاده از عوامل پرتودهی مشابهی انجام نشده است، ولی توافق زیادی در بزرگی و وابستگیِ مقدار پرتوگیری سخت شوندگی وجود دارد. شکل ۱۱-۲۴ نیز بی‌شکل شدگی به علت پرتودهی پروتونی یک رسوب $Zr(Fe,Cr)_2$ را بعد از

۱.آلیاژ از روی قلع، روی، آهن، کروم، نیکل و بقیه زیرکونیوم است و برای قطعات ساختمانی رآکتور به‌کار می‌رود.

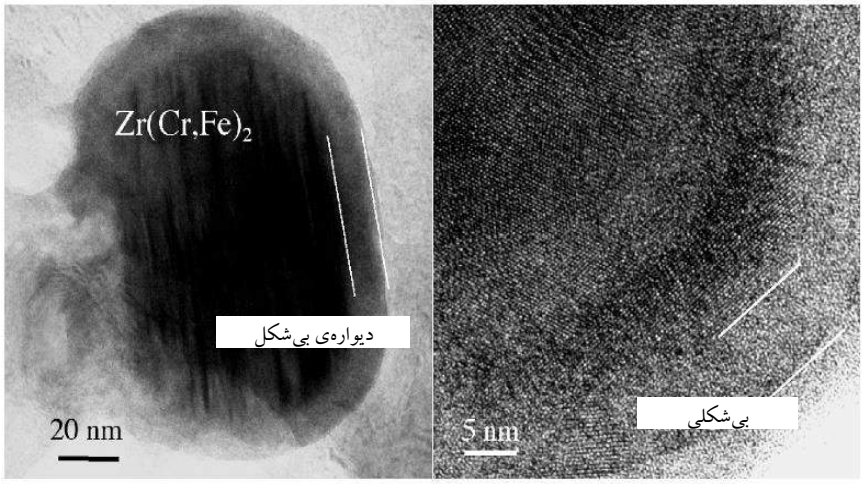
پرتودهی تا 5dpa در $310^{\circ}C$، مشابه با چیزی را نشان می‌دهد که در رآکتور مشاهده می‌شود. این مثال‌ها مجموعه‌ی جامعی از اطلاعات مقایسه‌ای میان پرتودهی پروتونی و نوترونی را ارایه می‌دهد و می‌تواند به جای یک مثال خوب از توانایی ذرات باردار برای شبیه‌سازی اثر پرتودهی نوترونی روی ریزساختار آلیاژ در نظر گرفته شود.



شکل ۱۱-۲۲. مقایسه‌ی رهایش در تنش‌های پسماند بین پرتودهی نوترونی و پروتونی فولاد زنگ نزن بعد از حذف اثر رهایش القا شده حرارتی [۲۳].



شکل ۱۱-۲۳. سخت شوندگی آلیاژ زیرکولوی ۴ پرتودهی شده با پروتون‌های ۳MeV در $310^{o}C$ و $350^{o}C$ و مقایسه با پرتودهی نوترونی آلیاژ زیرکولوی ۲ [۲۴].



شکل ۱۱-۲۴. تصویر معمولی (چپ) و تصویری با بزرگنمایی بالا (راست) از رسوب $Zr(Cr,Fe)_2$ بعد از پرتودهی تا dpa ۵ در $310^{o}C$، که نشان دهنده‌ی بی شکل شدن رسوب است [۲۵].

نام‌گذاری اصطلاحات

C_i: غلظت اتم نوع i

E_d: انرژی جابه‌جایی

k_S^2: شدت چاهک

$l(t)$: نصف پهنای منطقه‌ی تهی شده از کروم

M : مقدار تهی‌شدگی مرزدانه‌ای کروم تعریف شده با معادله‌ی ۱۱-۵

N_S: تعداد عیوب در واحد حجم اتلاف به وسیله‌ی چاهک‌ها

N_R: تعداد عیوب در حجم اتلاف به وسیله‌ی باز ترکیبی

R_S: نسبت اتلاف جای خالی به اتلاف بین‌نشین‌ها

T : انرژی منتقل شده

$P(T)$: کسر برگشتی‌ها میان E_d و T

$W(E_i,T)$: میانگین وزنی طیف برگشتی

$\sigma(E_i,T)$: سطح مقطع پراکنش برای انتقال انرژی در $T+dT$

$\sigma_D(E_i)$: سطح مقطع جابه‌جایی

مخففها

AES : اسپکتروسکوپی الکترون اوژه

CP : خلوص تجاری

IASCC : ترک‌های خوردگی تنشی تابشی

IGSCC : ترک‌های خوردگی تنشی بین دانه‌ای

K – P : کینچن ـ پیس

NRT : نورگت، رابینسون، تورنز

SCC : ترک خوردگی تنشی

SRIM : نیروی بازدارندگی و محدوده‌های یون‌ها در ماده

STEM-EDS : میکروسکوپ الکترونی روبشی عبوری، اسپکتروسکوپی پراکنش انرژی

مسایل

۱۱-۱ آزمایشات اثرات پرتودهی می‌تواند با ذرات پرانرژی مختلفی انجام شود. به هرجهت، بعضی از وقت‌ها نتیجه وابسته به ماهیت ذره‌ی تابیده شده و شرایطی است که تحت آن پرتودهی رخ می‌دهد.

الف) تفاوت‌ها در اثرات پرتودهی برای یک ذره MeV ۱ با ذرات مختلف را تشریح کنید (تا حد ممکن کمی): الکترون، پروتون، نوترون، یون نیکل. در جواب‌هایتان حتماً به موارد زیر اشاره کنید:

i) طیف برگشتی

ii) تابع آسیب

iii) توزیع فضایی عیوب و شکل عیوب

iv) رفتار ثانویه‌ی عیوب به صورت آزاد مهاجرت کننده و خوشه‌های عیب

ب) متأسفانه، پرتودهی‌ها با انواع مختلف ذرات تحت شرایط مشابهی رخ نمی‌دهند. در ادامه دماها و نرخ‌های مقدار پرتوگیری معمول برای پرتودهی با هر یک از انواع ذره آورده شده است که به وسیله‌ی سهولت تولید چنین ذراتی تعیین شده است.

الکترون‌ها: $۵۰۰\ ^oC$، $۱۰^{-۳}$ dpa/s

پروتون‌ها: $۴۰۰\ ^oC$، $۱۰^{-۵}$ dpa/s

یون‌های نیکل: $۵۰۰\ ^oC$، $۱۰^{-۳}$ dpa/s

نوترون‌ها: $۳۰۰\ ^oC$، $۱۰^{-۸}$ dpa/s

جواب قسمت (الف) را برای این شرایط پرتودهی تعیین کنید.

۱۱-۲ سه ذره‌ی مجزا از میان یک ورقه‌ی آهن خالص عبور می‌کنند، نوترون‌ها با انرژی MeV ۱، پرتوهای گاما MeV ۱ و الکترون‌ها با انرژی MeV ۱. برای هر کدام:

الف) بیشینه‌ی انتقال انرژی ممکن به اتم آهن از هر ذره را محاسبه کنید.

ب) فرضیاتی را تعیین کنید که در قسمت (الف) در نظر گرفته‌اید.

ج) آسیب نسبی نتیجه شده از هر ذره را تشریح کنید.

د) برای حداقل کردن آسیب به آهن، آیا این نظر خوبی است که یک سپر را میان ورقه‌ی آهنی و منبع پرتو قرار دهیم؟

۱۱-۳ طیف برگشتی توزین شده برای پروتون‌هایی با انرژی ۱ MeV و نوترون‌های با انرژی ۱ MeV فرودی روی مس را تعیین کنید.

۱۱-۴ با استفاده از شرایط لازم تغییرناپذیری تعیین کنید دمایی را که در آن پرتودهی پروتونی برای تولید موارد زیر باید انجام شود:

الف) مقدار مشابه جدایش القایی تابشی

ب) ریزساختار نابجایی مشابه

چنان‌که پرتودهی در رآکتور سریع در دمای ^{o}C ۵۰۰ انجام شود تعیین کنید که نرخ آسیب پروتونی برابر با 10^{-5} dpa/s است و نرخ آسیب در رآکتور سریع برابر با 8×10^{-8} dpa/s است.

۱۱-۵ روش پرتودهی یونی بهینه برای اهداف زیر را تعیین کنید:

الف) بررسی ریزساختار مقدار پرتوگیری بالا (۱۰۰ dpa) در دمای بالا (^{o}C۵۰۰)

ب) بررسی اثر پرتودهی روی ترک‌های خوردگی تنشی آلیاژ زیرکولوی در آب

ج) ردیابی سیر تکامل بی‌شکل شدن با مقدار پرتوگیری.

مراجع

1. Abromeit C (1994) J. Nucl Mater 216:78–96.
2. Mazey DJ (1990) J. Nucl Mater 174:196.
3. Active Standard (1989) Standard Practice for Neutron Irradiation Damage Simulation by Charged Particle Irradiation, Designation E521-89. American Standards for Testing and Materials, Philadelphia, PA 1989, p D-9.
4. Was GS, Andresen PL (1992) JOM 44(4):8.
5. Andresen PL, Ford FP, Murphy SM, Perks JM (1990) Proceedings of the 4th International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors. National Association of Corrosion Engineers, Houston, TX, pp 1–83.
6. Andresen PL (1992) In: Jones RH (ed) Stress Corrosion Cracking, Materials Performance and Evaluation. ASM International, Meals Park, OH, p 181.
7. Sterbentz JW (2004) Neutronic Evaluation of a 21×21 Supercritical Water Reactor Fuel Assembly Design with Water Rods and SiC Clad/Duct Materials, INEEL/EXT- 04-02096, Idaho National Engineering and Environmental Laboratory. Bechtel BWXT Idaho, LLC, Idaho Fall, ID
8. Kinchin GH, Pease RS (1955) Prog Phys 18:1.
9. Norgett MJ, Robinson MT, Torrens IM (1974) Nucl Eng Des 33:50.
10. Was GS, Allen T (1993) J Nucl Mater 205:332–338.
11. Perks JM, Marwick AD, English CA (1986) AERE R 12121 June.
12. Was GS, Allen TR (2007): In Sickefus KE Kotomin EA Obervaga BP (eds). Radiation Effects in Solids, NATO Science Series II: Mathematics, physics and chemistry, Vol 235, Springer, Berlin, pp 65–98.
13. Ezawa T, Wakai E (1991) Ultramicroscopy 39:187.
14. Ashworth JA, Norris DIR, Jones IP (1992) JNM 189:289.
15. Wakai E (1992) Trans JIM 33(10):884.
16. Whitley JB (1978) Dissertation. Nuclear Engineering, University of Wisconsin-Madison.
17. Garner FA (1983) J Nucl Mater 117:177–197.
18. Lee EH, Mansur LK, Yoo MH (1979) J Nucl Mater 85/86:577–581.
19. Brailsford AD, Mansur LK (1977) J Nucl Mater 71:110–116.
20. Ziegler JF, Biersack JP, Littmark U (1996) The Stopping and Range of Ions in Matter. Pergamon, New York.
21. Was GS, Busby JT, Allen T, Kenik EA, Jenssen A, Bruemmer SM, Gan J, Edwards AD, Scott P, Andresen PL (2002) J Nucl Mater 300:198–216.
22. Gan J, Was GS, Stoller R (2001) J Nucl Mater 299:53–67.

23. Sencer BH, Was GS, Yuya H, Isobe Y, Sagasaka M, Garner FA (2005) J Nucl Mater 336:314–322.
24. Zu XT, Sun K, Atzmon M, Wang LM, You LP, Wan FR, Busby JT, Was GS, Adamson RB (2005) Phil Mag 85(4–7):649–659.

بخش ۳

اثرات مکانیکی آسیب تابشی

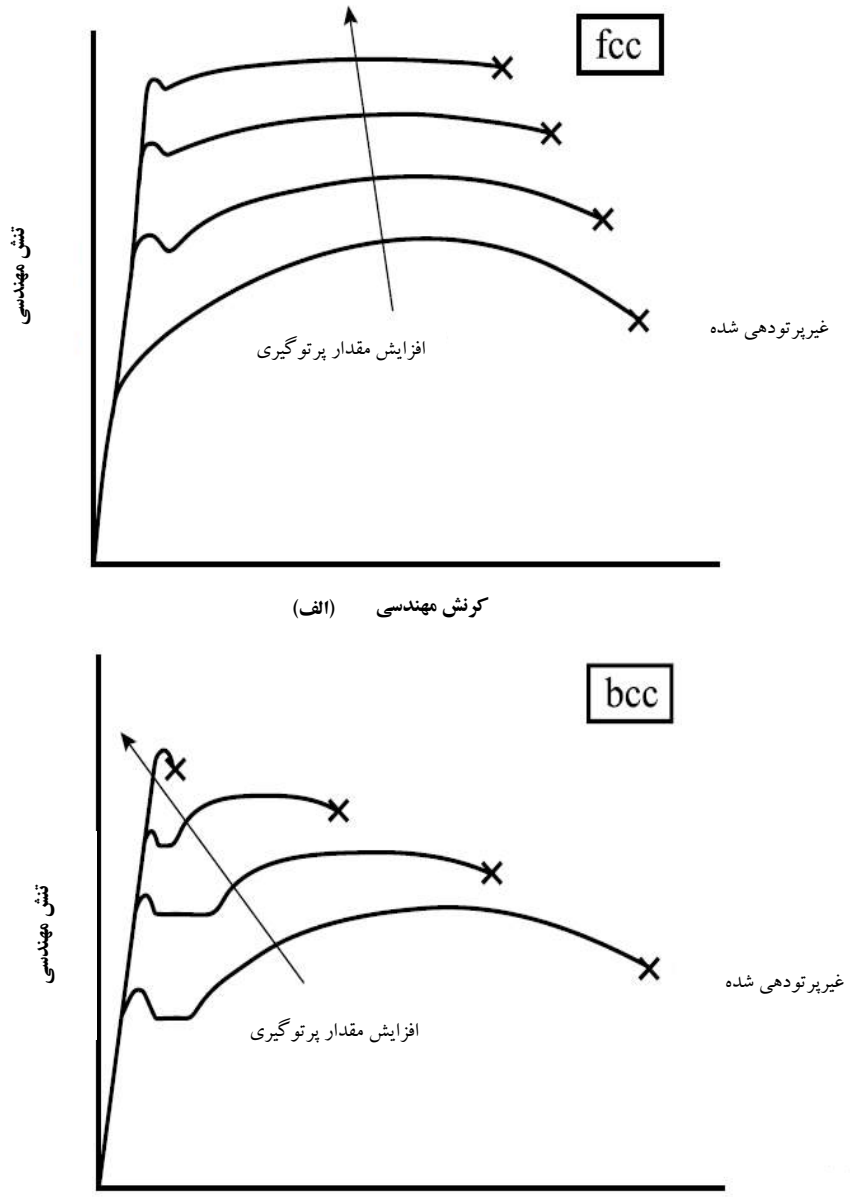
۱۲

سخت‌گردانی و تغییر شکل تابشی

پرتوگیریِ فلزات منجر به افزایش در استحکام تسلیم در محدوده‌ی وسیع دمایی می‌شود و در $T_{irr} < ۰٫۳\ T_m$ بسیار قطعی و مشخص است. منحنی‌های تنش ـ کرنش مهندسی معمول برای فولادهای fcc و bcc در شکل ۱۲–۱ نشان داده شده است. لازم به ذکر است که در هر دو ساختار بلوری، علاوه بر افزایش استحکام تسلیم، انعطاف‌پذیری (اندازه‌گیری شده به وسیله‌ی ازدیاد طول کلی یا ازدیاد طول یکنواخت) کاهش می‌یابد. پرتودهی هم‌چنین استحکام تسلیم، σ_y را بسیار بیش‌تر از استحکام کشش نهایی، σ_{UTS} برای فلزات fcc و bcc افزایش می‌دهد. نزدیک شدن σ_y به σ_{UTS} نتیجه‌ای از اتلاف انعطاف‌پذیری تا حدی است که $\sigma_y = \sigma_{UTS}$ شود و ازدیاد طول یکنواخت برابر با صفر شود. در فلزات bcc آزمایش شده در دماهای پایین، جریان‌های بالا حتی منجر به از بین رفتن تشکیل گلویی می‌شود و شکست در ناحیه‌ی کشسان رخ دهد که به معنی ترد شدن فلز است. سخت‌گردانی القایی تابشی در فلزات fcc و bcc به واسطه‌ی تولید عیوب مختلف توضیح داده شده در فصل‌های ۳، ۷، ۸ و ۹ است:

- خوشه‌های عیب
- ترکیب‌های ناخالصی ـ خوشه‌ی عیب
- حلقه‌های نابجایی (انواع نقص‌دار یا بی‌نقص، جای خالی یا بین‌نشین)
- نابجایی‌های خطی (حلقه‌های نابجایی که نقص‌دار هستند و شبکه‌های نابجایی ریزساختار اصلی را متصل می‌کنند)
- حفرات و حباب‌ها
- رسوبات

این فصل روی سازوکارهای سخت‌گردانی تابشی در فلزات به علت عیوب مختلف تولید شده در اثر پرتودهی تمرکز خواهد کرد. قبل از شروع بحث سخت‌گردانی، بهتر است که مؤلفه‌های اصلی تئوری کشسانی و شکل‌پذیری به صورت خلاصه مرور شود [۱]، زیرا در شکل یک اصل برای فهم اثر تابش روی سخت‌گردانی است.



شکل ۱۲-۱. اثر پرتودهی روی رفتار تنش ـ کرنش در (الف) فولاد زنگ نزن آستنیتی (fcc) و (ب) فولاد فریتی (bcc).

۱۲-۱تغییر شکل کشسان و پلاستیک

۱۲-۱-۱ کشسانی

در منطقه‌ی کشسان، تغییر شکل متناسب با بار است و رابطه‌ی آن‌ها به منزله‌ی قانون هوک[1] شناخته می‌شود:

(۱-۱۲)

$$\sigma = E\varepsilon\,,$$

که σ تنش است، ε کرنش است و E ضریب کشسان در کشش یا فشار است. درحالی‌که نیروی کششی در جهت x ، یک کشیدگی را در طول محور x ، و انقباضی را در طول جهت‌های عرضی y و z تولید می‌کند. کرنش عرضی کسر ثابتی از کرنش طولی است:

(۲-۱۲)

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = -\nu\varepsilon_{xx} = \frac{-\nu\sigma_{xx}}{E},$$

که ν نسبت پواسون است و برای مواد کشسان کاملاً همسان‌گرد مقداری در حدود ۰٫۲۵ است؛ اما برای اکثر فلزات برابر با ۰٫۳۳ است. برای حالت سه بعدی تنش، کرنش‌های نتیجه شده برابر هستند با:

تنش	کرنش x	کرنش y	کرنش z
σ_{xx}	$\varepsilon_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{E}$	$\varepsilon_{yy} = \frac{-\nu\sigma_{xx}}{E}$	$\varepsilon_{zz} = \frac{-\nu\sigma_{xx}}{E}$
σ_{yy}	$\varepsilon_{xx} = \frac{-\nu\sigma_{yy}}{E}$	$\varepsilon_{yy} = \frac{\sigma_{yy}}{E}$	$\varepsilon_{zz} = \frac{-\nu\sigma_{xx}}{E}$
σ_{zz}	$\varepsilon_{xx} = \frac{-\nu\sigma_{zz}}{E}$	$\varepsilon_{yy} = \frac{-\nu\sigma_{zz}}{E}$	$\varepsilon_{zz} = \frac{\sigma_{zz}}{E}$

1. Hooke’s law

با انطباق مؤلفه‌های کرنشی می‌توان نوشت:

(۳-۱۲)

$$\varepsilon_{xx} = \frac{1}{E}[\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})]$$
$$\varepsilon_{yy} = \frac{1}{E}[\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})]$$
$$\varepsilon_{zz} = \frac{1}{E}[\sigma_{zz} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma y_y)] .$$

جمع کردن مؤلفه‌های کرنشی نتیجه می‌دهد که:

(۴-۱۲)

$$\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = \frac{1-2\nu}{E}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) ,$$

و

(۵-۱۲)

$$\sigma_m = 1/3(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$$

تنش میانگین یا تنش ایستایی است و داریم:

(۶-۱۲)

$$\Delta = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$$

کرنش حجمی است. تنش‌های برشی مطابق با روابط زیر کرنش‌های برشی را تولید می‌کند:

(۷-۱۲)

$$\varepsilon_{xy} = \frac{\sigma_{xy}}{\mu} , \quad \varepsilon_{yz} = \frac{\sigma_{yz}}{\mu} , \quad \varepsilon_{xz} = \frac{\sigma_{xz}}{\mu} ,$$

که μ ضریب برشی است.

روابط تنش ـ کرنش برای یک جامد همسان‌گرد سه ثابت کشسانی ν، E و μ دارد که به صورت زیر با یک‌دیگر در ارتباط هستند:

(۸-۱۲)

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} .$$

در جامد کلیِ کشسان ناهمسان‌گرد خطی، بیش‌تر از ۲۱ ثابت کشسان مستقل وجود دارد. از آن‌جایی که ثابت‌ها باید تابع محدودیت‌های هندسی مختلف برای ساختار بلوری مشخص باشند، تعداد ثابت‌ها کشسانی مستقل به صورت قابل توجهی در ساختارهای حاوی درجه‌ی بالایی از تقارن کاهش می‌یابد. برای کرنش‌های کشسان کوچک هیچ‌گونه تزویجی بین عبارات موجود برای تنش و کرنش معمول و معادله‌های موجود برای تنش برشی و کرنش برشی وجود ندارد و می‌توان تنش را برحسب کرنش حل کرد. با نوشتن معادله‌ی ۱۲-۴ برحسب تنش می‌توان نوشت:

(۹-۱۲)

$$\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} = \frac{E}{1-2\nu}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) ,$$

و بازنویسی معادله‌ی اول در معادله‌ی ۱۲-۳:

(۱۰-۱۲)

$$\varepsilon_{xx} = \frac{1+\nu}{E}\sigma_{xx} - \frac{\nu}{E}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) ,$$

و با جایگذاری معادله‌ی ۱۲-۱۰ در داخل معادله‌ی ۱۲-۸ برای حذف σ_{yy} و σ_{zz} می‌توان نوشت:

(۱۱-۱۲)

$$\sigma_{xx} = \frac{E}{1+\nu}\varepsilon_{xx} + \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) ,$$

یا در نماد تانسوری:

(۱۲-۱۲)

$$\sigma_{ij} = \frac{E}{1+\nu}\varepsilon_{ij} + \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}\varepsilon_{ij}\delta_{ij} ,$$

که δ_{ij} دلتای کرونکر[1] با مقادیر $\delta_{ij} = ۱$ برای $i = j$ و $\delta_{ij} = ۰$ برای $i \neq j$ است. با گسترش این عبارت، سه معادله برای تنش معمول و شش معادله برای تنش برشی به‌دست می آید. معادله‌ی ۱۲-۱۲ اغلب با استفاده از ثابت لامه[2] به صورت خلاصه نوشته می‌شود:

(۱۲-۱۳)

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} .$$

با جایگذاری معادله‌های ۱۲-۶، ۱۲-۸ و ۱۲-۱۳ به ترتیب برای Δ، μ و λ در معادله‌ی ۱۲-۱۱ می‌توان نوشت:

(۱۲-۱۴)

$$\sigma_{xx} = 2\mu\varepsilon_{xx} + \lambda\Delta .$$

تنش‌ها و کرنش‌ها می‌توانند به مؤلفه‌های ایستایی[3] و انحرافی[4] تجزیه شوند. مؤلفه‌های ایستایی فقط کشش و فشار خالص را دربرمی‌گیرند درحالی‌که تنش‌های انحرافی، تنش‌های برشی در حالت کلی تنشی را نشان می‌دهند. اعوجاج به وسیله‌ی رابطه زیر به تنش انحرافی مرتبط می‌شود:

(۱۲-۱۵)

$$\sigma'_{ij} = \frac{E}{1+\nu}\varepsilon'_{ij} = 2\mu\varepsilon'_{ij} ,$$

1. Kronecker delta
2. Lam´e constant
3. Hydrostatic
4. Deviatoric

درحالی‌که ارتباط بین تنش هیدروستاتیک و کرنش میانگین برابر است با:

(۱۲-۱۶)

$$\sigma_{ii} = \frac{E}{1-2\nu}\varepsilon_{ii} = 3K\varepsilon_{ii} ,$$

که $K = \frac{E}{3(1-2\nu)}$ ضریب حجمی (ضریب کشیدگی) یا ضریب‌های حجمیِ الاستیسیته است. ضریب کشیدگی نسبت فشار هیدروستاتیک به انبساط است که می‌توان نوشت:

(۱۲-۱۷)

$$K = \frac{\sigma_m}{\Delta} = \frac{-p}{\Delta} = \frac{1}{\beta} ,$$

که p- فشار ایستایی و β قابلیت تراکم یک جامد است. قابل ذکر است که مؤلفه‌ی ایستایی تانسور تنش فقط تغییرات حجمی کشسان را تولید می‌کند و نمی‌تواند منجر به تغییر شکل پلاستیک شود. در نتیجه تنش تسلیم جامد مستقل از تنش ایستایی است. تنش منحرف شونده تنش برشی را دربر می‌گیرد و مسئول تغییر شکل پلاستیکی است.

دو مورد خاص از اهمیت‌های مهندسی تنش صفحه‌ای و کرنش صفحه‌ای است. حالت تنش صفحه‌ای هنگامی که یکی از تنش‌های اصلی صفر باشد رخ می‌دهد مانند ورقه‌ی نازک بارگذاری شده در صفحه‌ی ورق (شکل ۱۲-۲ الف) یا لوله‌ی دیواره‌ی نازک که به صورت داخلی تحت فشار قرار گرفته است. در این مورد تنش‌های اصلی برابرند با:

(۱۲-۱۸)

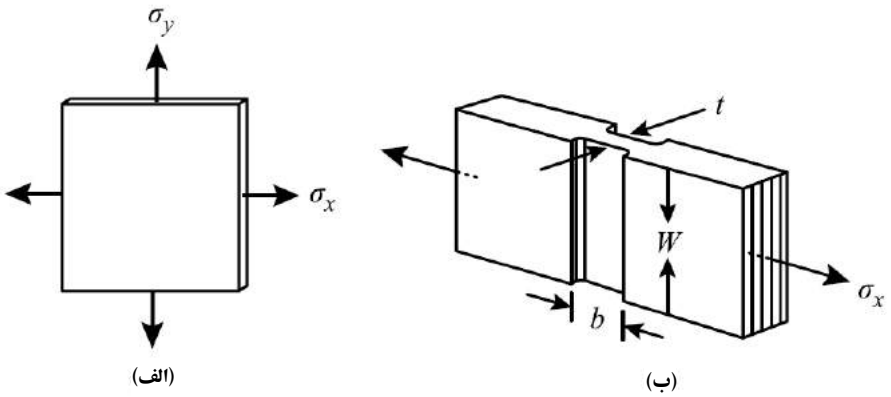
$$\sigma_1 = \frac{E}{1-\nu^2}(\varepsilon_1 + \nu\varepsilon_2) ,$$
$$\sigma_2 = \frac{E}{1-\nu^2}(\varepsilon_2 + \nu\varepsilon_1) ,$$
$$\sigma_3 = 0 .$$

حالت کرنش صفحه‌ای حالتی است که در آن یکی از کرنش‌های اصلی صفر است و هنگامی رخ می‌دهد که یک بعد از دو بعد دیگر بسیار بزرگ‌تر باشد (شکل ۱۲-۲ ب). در این مورد $\varepsilon_3 = \frac{1}{E}\left[\sigma_3 - \nu\left(\sigma_1 + \sigma_2\right)\right]$، و در ترکیب با $\sigma_3 = \nu\left(\sigma_1 + \sigma_2\right)$ می‌توان نوشت:

(۱۲-۱۹)

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{E}[(1-\nu^2)\sigma_1 - \nu(1+\nu)\sigma_2]\ ,$$
$$\varepsilon_2 = \frac{1}{E}[(1-\nu^2)\sigma_2 - \nu(1+\nu)\sigma_1]\ ,$$
$$\varepsilon_3 = 0\ .$$

لازم به ذکر است عبارات موجود در معادله‌های ۱۲-۱۸ و ۱۲-۱۹ برحسب تنش‌های اصلی و کرنش‌های اصلی نوشته شده‌اند که عمود بر صفحات اصلی عمل می‌کنند. صفحات اصلی آن‌هایی هستند که در آن‌ها تنش‌های بیشینه‌ی عمود فعال هستند و تنش‌های برشی غیر فعال هستند.



شکل ۱۲-۲. مثال‌هایی از (الف) حالت تنش صفحه‌ای و (ب) حالت کرنش صفحه‌ای.

انرژی کرنشی، U، انرژی مصرف شده به وسیله‌ی فعالیت نیروهای خارجی در تغییر شکل یک بدنه‌ی کشسان است. کار انجام شده در طول تغییر شکل کشسان به صورت یک انرژی کشسان، ذخیره می‌شود و در طول آزادسازی نیروهای اعمالی بازیابی می‌شود. انرژی برابر با حاصل‌ضرب نیرو، F در

فاصله، δ در سراسر فاصله‌ای است که آن نیرو عمل می‌کند. در تغییر شکل جامد کشسان، نیرو و تغییر شکل به صورت خطی از صفر تا مقدار $1/2F\delta$ افزایش می‌یابد. این کمیت مساحت زیر منطقه‌ی کشسان در منحنی تنش ـ کرنش است که در فصل ۷ نشان داده شده است (شکل ۷-۲۲). اگر مکعب را در معرض تنش کششی در جهت x قرار دهیم، در نتیجه می‌توان عبارتی را برای تغییر در انرژی کرنشی جامد نوشت:

(۱۲-۲۰)

$$\begin{aligned} \mathrm{d}U &= 1/2F\,\mathrm{d}\delta \\ &= 1/2(\sigma_{xx}A)(\varepsilon_{xx}\,\mathrm{d}x) \\ &= 1/2(\sigma_{xx}\varepsilon_{xx})(A\,\mathrm{d}x)\ . \end{aligned}$$

از آن‌جایی که $A\mathrm{d}x$ برابر با افزایش حجم است، انرژی کرنشی در واحد حجم یا دانسیته‌ی انرژی کرنشی برابر است با:

(۱۲-۲۱)

$$\begin{aligned} U &= 1/2\sigma_{xx}\varepsilon_{xx} \\ &= 1/2\frac{\sigma_{xx}^2}{E} \\ &= 1/2\varepsilon_{xx}^2 E\ . \end{aligned}$$

برای تنش برشی خالص:

(۱۲-۲۲)

$$\begin{aligned} U &= 1/2\sigma_{xy}\varepsilon_{xy} \\ &= 1/2\frac{\sigma_{xy}^2}{\mu} \\ &= 1/2\varepsilon_{xy}^2\mu\ . \end{aligned}$$

انرژی کرنش کشسان برای یک حالت تنش سه بعدی با انطباق معادله‌های ۱۲-۲۱ و ۱۲-۲۲ به‌دست می‌آید:

(۱۲-۲۳)

$$U = 1/2(\sigma_{xx}\varepsilon_{xx} + \sigma_{yy}\varepsilon_{yy} + \sigma_{zz}\varepsilon_{zz} + \sigma_{xy}\varepsilon_{xy} + \sigma_{yz}\varepsilon_{yz} + \sigma_{xz}\varepsilon_{xz}) \\ = 1/2\sigma_{ij}\varepsilon_{ij} .$$

با جایگذاری عبارات موجود برای کرنش‌ها در معادله‌های ۱۲-۳ و ۱۲-۷ می‌توان نوشت:

(۱۲-۲۴)

$$U = \frac{1}{2E}(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2 + \sigma_{zz}^2) - \frac{\nu}{E}(\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{yy}\sigma_{zz} + \sigma_{xx}\sigma_{zz}) \\ + \frac{1}{2\mu}(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{xz}^2) ,$$

و با جایگذاری معادله‌ی ۱۲-۴ در داخل معادله‌ی ۱۲-۲۴ داریم:

(۱۲-۲۵)

$$U = 1/2\lambda\Delta^2 + \mu(\varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{yy}^2 + \varepsilon_{zz}^2) + 1/2\mu(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{yz}^2 + \varepsilon_{xz}^2) .$$

لازم به ذکر است که مشتق U نسبت به هر مؤلفه‌ی کرنشی، مؤلفه‌ی تنشی مربوطه را نتیجه می‌دهد:

(۱۲-۲۶)

$$\frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{xx}} = \lambda\Delta + 2\mu\varepsilon_{xx} = \sigma_{xx} \quad \text{and} \quad \frac{\partial U}{\partial \sigma_{xx}} = \varepsilon_{xx} .$$

۱۲-۱-۲ شکل‌پذیری

تغییر شکل کشسان فقط به حالت ابتدایی و انتهایی تنش‌ها و کرنش‌ها بستگی دارد در حالی‌که کرنش پلاستیک وابسته به مسیر بارگذاری است که به وسیله‌ی آن حالت نهایی سیستم به‌دست می‌آید. تنش

مورد نیاز برای این‌که جامد به صورت پلاستیکی به هر کرنش معین توصیف کننده‌ی منحنی سیلان، جاری شود به وسیله‌ی رابطه‌ی سخت‌گردانی قانون توانی تعیین می‌شود:

(۲۷-۱۲)

$$\sigma = K\varepsilon_{\mathrm{p}}^{n} ,$$

که ε_p کرنش پلاستیک است، K تنش در ε_p = ۱٫۰ است و n توان سخت‌گردانی کرنشی است. قابل ذکر است که n =۰ برای رفتار کاملاً پلاستیک و n = ۱ برای یک رفتار کاملاً کشسان است. معمولاً n بین ۰٫۱ و ۰٫۵ است. شکل منحنی سخت‌گردانی قانون توانی برای nهای مختلف در شکل ۱۲-۳ نشان داده شده است. در یک آزمایش کشش، یافتن استحکام تسلیم آسان است. این علاقه وجود دارد که روابط ریاضیاتی برای پیش‌بینیِ شرایطی گسترش یابد که تحت آن تسلیم پلاستیک در زمان در معرض قرار گرفتن یک ماده در برابر هر گونه تنش‌های ترکیبی آغاز شود. به هرجهت در حال حاضر هیچ گونه راهی برای محاسبه‌ی روابط بین مؤلفه‌های تنشی به تسلیم مربوطه در حالت تنش سه بعدی با تسلیم در کشش یک محوری وجود ندارد. تمام معیارهای تسلیم تجربی هستند.

فون میزز[1] پیشنهاد کرد که تسلیم هنگامی رخ خواهد داد که دومین نامتغیر تنش انحرافی بیش‌تر از مقدار بحرانی، k^2 شود یا:

(۲۸-۱۲)

$$k^2 = 1/6\left[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2\right] .$$

مقدار k به وسیله‌ی اعمال این رابطه به آزمایش کشش یک محوری تعیین می‌شود که در آن $\sigma_1 = \sigma_y$، $\sigma_2 = \sigma_3 = 0$ است (σ_y تنش تسلیم است).

(۲۹-۱۲)

$$\sigma_{\mathrm{y}}^2 + \sigma_{\mathrm{y}}^2 = 6k^2 , \quad \text{or} \quad \sigma_{\mathrm{y}} = \sqrt{3}k .$$

1. Von Mises

با جایگذاری معادله‌ی ۱۲-۲۹ در معادله‌ی ۱۲-۲۸ شکل مشابهی از معیار تسلیم فون مایزز به‌دست می‌آید:

(۱۲-۳۰)

$$\sigma_y = 1/\sqrt{2}\left[(\sigma_1-\sigma_2)^2+(\sigma_2-\sigma_3)^2+(\sigma_3-\sigma_1)^2\right]^{1/2},$$

و اگر تنش برشی موجود باشد:

(۱۲-۳۱)

$$\sigma_y = 1/\sqrt{2}\left[(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})^2+(\sigma_{yy}-\sigma_{zz})^2+(\sigma_{zz}-\sigma_{xx})^2+6(\sigma_{xy}+\sigma_{yz}+\sigma_{xz})\right]^{1/2}.$$

تسلیم زمانی رخ می‌دهد که تفاوت‌ها در تنش‌های موجود در سمت راست معادله‌ی بیش‌تر از تنش تسلیم در کشش تک محوری، σ_y شود. برای حالت تنش برشی خالص (برای مثال در تست پیچش)، تنش برشی، σ_s به وسیله‌ی رابطه زیر به تنش‌های اصلی مرتبط است:

(۱۲-۳۲)

$$\sigma_1 = -\sigma_3 = \sigma_s, \quad \sigma_2 = 0,$$

و در تسلیم:

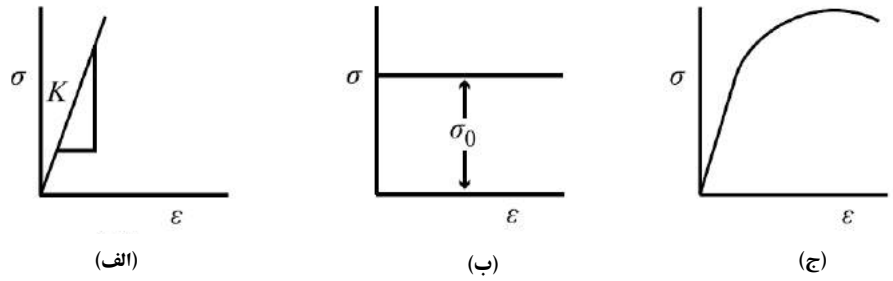
(۱۲-۳۳)

$$\sigma_1^2+\sigma_1^2+4\sigma_1^2 = 6k^2, \quad \text{and} \quad \sigma_1 = k,$$

در نتیجه k، تنش تسلیم در برش خالص است. معیار فون میزز پیش‌بینی می‌کند که تنش تسلیم در پیچش از تنش تک محوری کم‌تر است:

(۱۲-۳۴)

$$k = \frac{1}{\sqrt{3}}\sigma_y = 0.577\sigma_y.$$



شکل ۱۲–۳. منحنی‌های شار ترسیم شده از معادله‌ی ۱۲–۲۷ برای موارد (الف) رفتار کشسان، $n = 1$، (ب) رفتار کاملاً پلاستیک، $n = 0$، (ج) رفتار پلاستیک با مقادیر متوسط n.

دیگر معیار مورد استفاده برای تسلیم ناشی از حالت تنش چندمحوری، معیار ترسکا[1] (یا تنش برشی بیشینه) است، که بر این پایه است که تسلیم هنگامی رخ می‌دهد که بیشینه‌ی تنش برشی به مقدار تنش برشی در آزمایش کشش تک محوری برسد:

(۱۲–۳۵)

$$\sigma_s^{max} = \frac{\sigma_1 - \sigma_3}{2} ,$$

که σ_1 بزرگ‌ترین تنش اصلی جبری است و σ_3 کوچک‌ترین تنش اصلی جبری است. برای کشش تک محوری، $\sigma_1 = \sigma_y$، $\sigma_2 = \sigma_3 = 0$، و تنش برشی تسلیم، σ_{sy} برابر با $\sigma_y/2$ است و معادله‌ی ۱۲–۳۵ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۲–۳۶)

$$\sigma_s^{max} = \frac{\sigma_1 - \sigma_3}{2} = \frac{\sigma_y}{2} = \sigma_{sy} ,$$

در نتیجه معیار تنش برشی بیشینه به صورت زیر مشخص می‌شود:

1. Tresca criterion

(۳۷-۱۲)

$$\sigma_1 - \sigma_3 = \sigma_y .$$

برای حالت تنش برشی خالص، $\sigma_1 = -\sigma_3 = K$ و $\sigma_2 = 0$، در نتیجه طبق معیار تنش برشی بیشینه‌ی تسلیم هنگامی رخ می‌دهد که:

(۳۸-۱۲)

$$\sigma_1 - \sigma_3 = 2k = \sigma_y , \quad \text{or} \quad k = \frac{\sigma_y}{2} .$$

مشاهده شده است که معیار تسلیم ترسکا به صورت نسبتاً مناسبی در آلیاژهایی قابل کاربرد است که یک افت تسلیم را نشان می‌دهند [۲]. آلیاژهایی که به وسیله‌ی یک جریان پلاستیک همگن تسلیم می شوند در کل از معیار فون میزز تبعیت می‌کنند یا بسیار کم‌تر از آن منحرف می‌شوند. در حقیقت، در بسیاری از مواد واقعی سطح تسلیم بین معیار ترسکا و فون میزز است [۲].

۱۲-۱-۳ تست کشش

تست کشش شاید بهترین راه برای نشان دادن رفتار کشسان و پلاستیک مواد باشد. در تست کشش، یک نمونه در معرض نیروی کششی تک محوری قرار می‌گیرد که به صورت پیوسته افزایش می‌یابد، و به صورت هم‌زمان ازدیاد طول نمونه ثبت می‌شود. اطلاعات در دیاگرام تنش ـ کرنش از اندازه‌گیری‌های بار ـ ازدیاد طول رسم می‌شوند، که نتیجه‌ی آن منحنی تنش مهندسی ـ کرنش مهندسی است. پارامترهای مورد استفاده برای توضیح منحنی تنش ـ کرنش عبارتند از:

- استحکام تسلیم
- استحکام کششی
- استحکام شکست
- کرنش یکنواخت
- -کرنش شکست
- کاهش سطح مقطع

شکل ۱۲-۴ منحنی تنش ـ کرنش مهندسی و پارامترهای مورد استفاده برای توصیف نمونه را نشان می‌دهد. میانگین تنش طولی، S برابر با بار، P تقسیم بر سطح اولیه، A_0 است:

(۱۲-۳۹)

$$S = \frac{P}{A_0} .$$

میانگین کرنش خطی، e، نسبت تغییر طول، δ به طول اولیه، L_0 است:

(۱۲-۴۰)

$$e = \frac{\delta}{L_0} = \frac{\Delta L}{L_0} = \frac{L - L_0}{L_0} .$$

منحنی تنش مهندسی ـ کرنش مهندسی تعیین واقعی از مشخصات تغییر شکل یک ماده نیست زیرا آن کلاً بر پایه‌ی ابعاد اولیه‌ی نمونه است که به صورت پیوسته در طول تست تغییر می‌کند.

تنش واقعی، σ و کرنش واقعی، ε بر پایه‌ی مقادیر لحظه‌ای مساحت سطح مقطع و طول هستند و به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۱۲-۴۱)

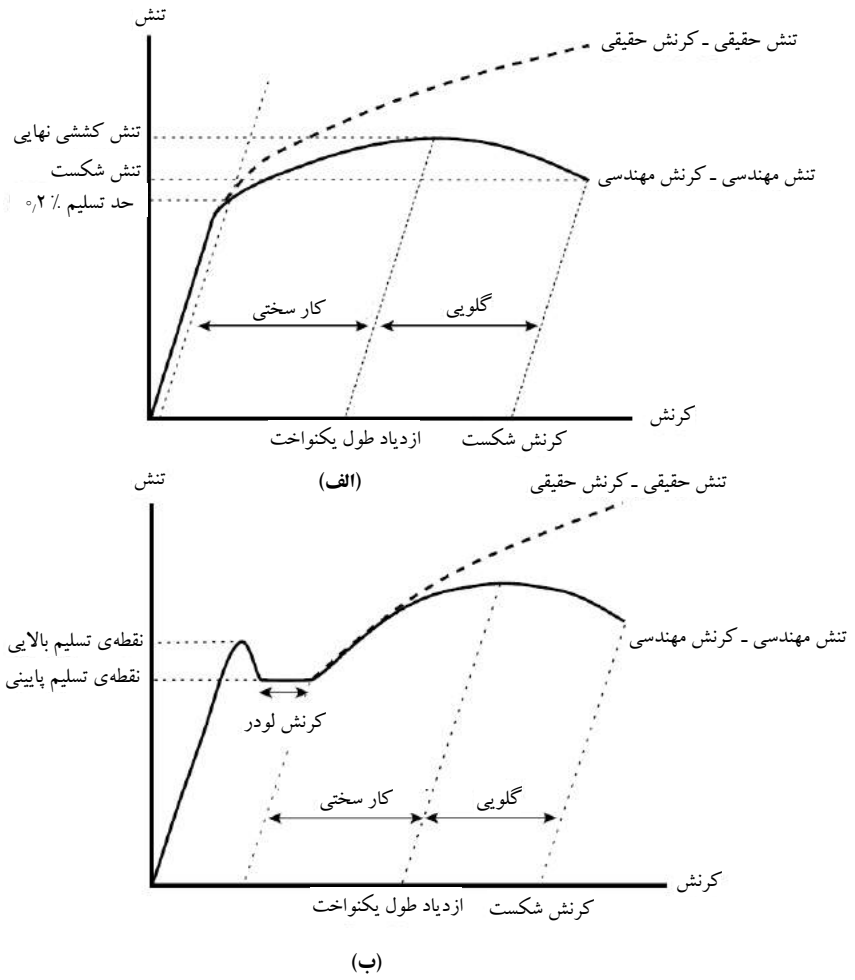
$$\sigma = \frac{P}{A} = S\frac{A}{A_0}$$

(۱۲-۴۲)

$$\varepsilon = \int_{L_0}^{L_f} \frac{dL}{L}$$
$$= \ln \frac{L_f}{L_0} = \ln(e+1) .$$

درحالی‌که کرنش واقعی و کرنش مهندسی در مقادیر کوچک کرنش ($< ۰/۲$) نزدیک به یک‌دیگر هستند، آن‌ها در مقادیر بزرگ کرنش به صورت قابل توجهی از یک‌دیگر فاصله می‌گیرند. رابطه‌ی بین تنش واقعی و مهندسی با توجه به قانون بقای حجم تعیین می‌شود:

$$\frac{A_0}{A}=\frac{L}{L_0}=e+1\Rightarrow \partial=S\frac{A_0}{A}=S\frac{L}{L_0}=S(e+1) \qquad (۴۳-۱۲)$$



شکل ۱۲-۴. منحنی‌های تنش مهندسی ـ کرنش مهندسی و تنش واقعی ـ کرنش واقعی ناشی از تست کشش تک محوری و پارامترهای کلیدی تعیین کننده‌ی منحنی‌ها برای (الف) فلزات fcc و (ب) فلزات bcc.

تا یک محدوده بار مشخص، یک جامد ابعاد اولیه خود را هنگام بار برداری به‌دست می‌آورد. محدوده‌ی باری که ماده در آن به این صورت عمل می‌کند را *محدوده‌ی کشسان* می‌گویند. اگر

بیش‌تر از حد کشسان به نمونه بار اعمال شود، بدنه بعد از حذف بار شکل دایمی خودش را حفظ می‌کند و به ابعاد اولیه باز نمی‌گردد. تنشی که در آن شکل‌پذیری شروع می‌شود، *تنش تسلیم*، σ_y یا YS نامیده می‌شود. تعریفات مختلفی برای تنش تسلیم وجود دارد؛ اما تعریفی که اغلب استفاده می‌شود تنش مرتبط با محل تقاطع منحنی تنش ـ کرنش و خط موازی با بخش کشسان منحنی از نقطه‌ی کرنش ۰٫۲٪ است. استحکام تسلیم به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\sigma_y = \frac{P_{(\text{strain offset}=0.2\%)}}{A_0} . \qquad (۴۴-۱۲)$$

استحکام کششی یا استحکام کششی تسلیم (UTS) بیشینه‌ی بار تقسیم بر مساحت سطح مقطع اولیه است:

$$s_u = \frac{P_{max}}{A_0} . \qquad (۴۵-۱۲)$$

تنش واقعی در بیشینه‌ی بار برابر با استحکام کشش واقعی است و به وسیله‌ی تقسیم بیشینه‌ی بار بر مساحت سطح مقطع در بیشینه‌ی بار است:

$$\sigma_u = \frac{P_{max}}{A_u} , \quad \varepsilon_u = \ln \frac{A_0}{A_u} . \qquad (۴۶-۱۲)$$

با حذف P_{max} از معادله‌های ۱۲-۴۵ و ۱۲-۴۶ می‌توان نوشت:

$$\sigma_u = S_u \frac{A_0}{A_u} = S_u \exp(\varepsilon_u) . \qquad (۴۷-۱۲)$$

تنش شکست، تنش در نقطه‌ی گسیختگی است و به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۴۸-۱۲)

$$S_f = \frac{P_f}{A_0}, \quad e_f = \frac{L_f - L_0}{L_0}$$
$$\sigma_f = \frac{P_f}{A_f}, \quad \varepsilon_f = \ln \frac{A_0}{A_f}.$$

کرنش به صورت یکنواخت در مقطع گیج نمونه در بالای UTS رخ می‌دهد که زمانی است که شروع گلویی شدن یا تغییر شکل موضعی رخ می‌دهد. کرنش واقعی یکنواخت، ε_u به وسیله‌ی کرنش در بار بیشینه تعیین می‌شود:

(۴۹-۱۲)

$$\varepsilon_u = \ln \frac{A_0}{A_u}.$$

کرنش شکست واقعی، ε_f کرنش واقعی بر پایه‌ی سطح مقطع اولیه و سطح بعد از شکست، A_f است:

(۵۰-۱۲)

$$\varepsilon_f = \ln \frac{A_0}{A_f} = \ln \frac{1}{1 - RA},$$

که RA کاهش در مساحت در شکست است:

(۵۱-۱۲)

$$RA = \frac{A_0 - A_f}{A_0}.$$

در پایان، کرنش گلویی شدن موضعی، ε_n کرنش مورد نیاز برای تغییر شکل نمونه از بار بیشینه تا شکست است:

(۵۲-۱۲)

$$\varepsilon_n = \ln \frac{A_u}{A_f}.$$

کمیت نهایی مهم در تست کشش آغاز ناپایداری پلاستیکی است که هنگامی رخ می‌دهد که افزایش در تنش ناشی از کاهش مساحت سطح مقطع بزرگ‌تر از قابلیت تحمل بار فلز می‌شود. این گلویی شدن یا تغییر شکل موضعی در نقطه‌ی بار بیشینه شروع می‌شود و با شرایطی که $dP = 0$ است، تعریف می‌شود:

(۵۳-۱۲)

$$P = \sigma A$$

$$dP = \sigma\, dA + A\, d\sigma = 0\,, \quad \text{و} \quad -\frac{dA}{A} = \frac{d\sigma}{\sigma}$$

و با توجه به قانون بقای حجم، داریم:

(۵۴-۱۲)

$$\frac{dL}{L} = -\frac{dA}{A} = d\varepsilon\,,$$

در نتیجه در نقطه‌ی ناپایداری پلاستیکی می‌توان نوشت:

(۵۵-۱۲)

$$\sigma = \frac{d\sigma}{d\varepsilon}\,.$$

یعنی نقطه‌ی گلویی شدن در بیشینه‌ی بار از منحنی تنش واقعی ـ کرنش واقعی و با یافتن نقطه‌ای روی منحنی که نرخ سخت شوندگی کرنشی برابر با تنش باشد، به‌دست می‌آید. با برگشت به رابطه‌ی منحنی سیلان مشخص شده در معادله‌ی ۱۲-۲۷، توان سخت شوندگی کرنشی به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۵۶-۱۲)

$$n = \frac{d\ln\sigma}{d\ln\varepsilon} = \frac{\varepsilon\, d\sigma}{\sigma\, d\varepsilon}\,, \quad \text{و} \quad \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = n\frac{\sigma}{\varepsilon}\,.$$

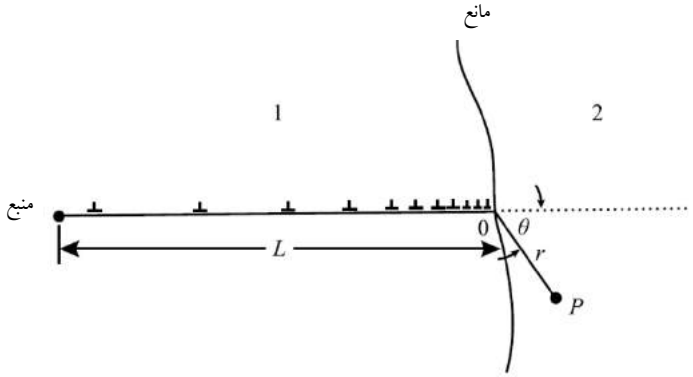
با جایگذاری معادله‌ی ۱۲-۵۵ در معادله‌ی ۱۲-۵۶ عبارت ساده برای کرنش یکنواخت واقعی به‌دست می‌آید:

$$\varepsilon_{\mathrm{u}} = n \ . \qquad (۵۷-۱۲)$$

یعنی، کرنش یکنواخت واقعی برابر با توان سخت‌گردانی کرنشی در معادله‌ی سخت‌گردانی قانون توانی، معادله‌ی ۱۲-۲۷ است.

۱۲-۱-۴ استحکام تسلیم

استحکام تسلیم آغاز پلاستیسیته را نشان می‌دهد و از آن‌رو، یک عامل کلیدی در تعیین رفتار مکانیکی فلزات است. تسلیم می‌تواند به وسیله‌ی آزمایش رفتار نابجایی‌ها در یک فلز تحت تنش فهمیده شود. نابجایی‌های تشکیل شده به وسیله‌ی منابعی مانند منبع فرانک ـ رید، بارها روی صفحات لغزشی در موانعی مانند مرزدانه‌ها، رسوبات یا نابجایی‌های ساکن سپرگذاری می‌شوند. نابجاییِ پیشرو نه تنها روی تنش برشی اعمال شده فعال می‌شود، بلکه به وسیله‌ی تقاطع با دیگر نابجایی‌ها روی صفحه‌ی لغزشی، منجر به تمرکز تنش بالا روی نابجایی پیشتاز در محل سپرگذاری شده می‌شود. سپرگذاری نابجایی هم‌چنین یک تنشی معکوسی را بر نابجایی‌ها از مانع، در جهت مخالف حرکت آن‌ها روی صفحه‌ی لغزش اعمال می‌کند (شکل ۱۲-۵). تنش‌های بالا در منطقه‌ی سپرگذاری شده می‌تواند تسلیم روی دیگر جهات مانع (یا ممکن است که یک ترک در مانع جوانه زده شود، فصل ۱۳ ملاحظه شود) را آغاز کند. تعدا نابجایی‌ها در سپر می‌تواند به وسیله‌ی جمع نیروهای در جهت x بین هر نابجایی در سپر تحت شرایط تعادل مکانیکی تخمین زده شود. تعداد نابجایی‌ها در یک سپر با طول L تحت یک تنش برشی σ_s روی صفحه‌ی لغزش برابر است با [۳]:



شکل ۱۲-۵. سپرگذاری نابجایی در یک مانع در جامد.

$$n = \frac{\pi(1-\nu)L\sigma_s}{\mu b} . \qquad (۵۸-۱۲)$$

در فواصل زیاد از سپر، آرایش n نابجایی می‌تواند شبیه به نابجایی تکی با بردار برگرز nb با نیروی برابر با $nb\sigma_s$ در نظر گرفته شود. تحلیل بسیار پیچیده‌تر از تنش‌ها در رأس سپر به وسیله‌ی استرو[1] [۴] بیان شد که نشان داد که تنش کششی عمود بر خط OP در دانه‌ی همسایه برابر است با:

$$\sigma = \frac{3}{2}\left(\frac{L}{r}\right)^{1/2} \sigma_s \sin\theta \cos\theta/2 . \qquad (۵۹-۱۲)$$

بیشینه مقدار σ در $\theta = ۷۵/۵^{o}$ رخ می‌دهد و می‌توان نوشت:

$$\sigma = \frac{2}{\sqrt{3}}\left(\frac{L}{r}\right)^{1/2} \sigma_s , \qquad (۶۰-۱۲)$$

و تنش برشی فعال در صفحه‌ی OP به صورت زیر مشخص می‌شود:

$$\sigma_P = \beta\sigma_s \left(\frac{L}{r}\right)^{1/2} . \qquad (۶۱-۱۲)$$

اگر مانع یک مرزدانه باشد و فاصله از سر سپر در دانه‌ی ۱ تا نزدیک‌ترین منبع نابجایی در دانه‌ی ۲ در شکل ۱۲-۵ برابر با r باشد، و طول سپر، L برابر با قطر دانه، d در نظر گرفته شود سپس تسلیم هنگامی رخ می‌دهد که تنش برشی در سپر، σ_s به تنش برشی ایجاد کننده‌ی تسلیم، σ_{sy} یا $\sigma_s = \sigma_{sy}$ برسد. اگر σ_{sd} تنش مورد نیاز برای آغاز لغزش در دانه‌ی ۲ باشد، سپس تنش برشی ایجاد کننده تسلیم می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$(\sigma_{sy} - \sigma_{si})\left(\frac{d}{r}\right)^{1/2} = \sigma_{sd} , \qquad (۶۲-۱۲)$$

1. Stroh

که σ_{si} تنش اصطکاکی یا تنش مخالف حرکت نابجایی در صفحه‌ی لغزشی است. معادله‌ی ۱۲-۶۲ می‌تواند برحسب تنش‌های عمودی نوشته شود به صورتی که $\sigma_s = \sigma/m$ که در این رابطه m ضریب اسکات[1] تعریف شده به صورت نسبت تنش برشی تجزیه شده به تنش محوری است:

(۱۲-۶۳)

$$\sigma_y = \sigma_i + m\sigma_{sd}\left(\frac{r}{d}\right)^{1/2} = \sigma_i + k_y d^{-1/2}.$$

معادله‌ی ۱۲-۶۳ معادله‌ی هال ـ پچ[2] است، که وابستگی اندازه دانه به تنش تسلیم را نشان می‌دهد. شایان ذکر است استحکام تسلیم با کاهش اندازه دانه افزایش می‌یابد. در کل مشخص شده است که رفتار تسلیم در فلزات برای اندازه دانه‌های معمول (چند صد میکرون) از این رابطه پیروی می‌کند؛ اما در اندازه دانه‌های بسیار ریز در محدوده‌های نانومتری از این رابطه تبعیت نمی‌کند.

۱۲-۲ سخت‌گردانی تابشی

پرتودهیِ فلز به واسطه‌ی سخت‌گردانی منبعی و سخت‌گردانی اصطکاکی منجر به استحکام دهی فلز می‌شود. سخت‌گردانی منبعی افزایش در تنش مورد نیاز برای شروع حرکت نابجایی روی صفحه‌ی لغزشیش است. تنش اعمالی مورد نیاز برای آزاد کردن نابجایی روی صفحه‌ی لغزشیش تنش بازکردن[3] یا تنش مانع برداری[4] نامیده می‌شود. در هنگام حرکت، نابجایی می‌تواند به وسیله‌ی موانع طبیعی یا موانع تولید شده در اثر پرتودهی متوقف شود که روی صفحه‌ی لغزشی آن قرار گرفته‌اند. هر دو این مفاهیم بعداً بحث می‌شود و سپس برای تشریح نتایج سخت‌گردانی از هر کدام از اثرات القا شده در اثر پرتودهی که قبلاً لیست شده است به‌کار گرفته می‌شود. متذکر شوید که در هر صورت تفاوت واقعی بین سخت‌گردانی منبعی و اصطکاکی مشخص نیست، زیرا سخت‌گردانی شبکه تمام مشخصه‌های تغییر شکل را که به سخت‌گردانی منبعی نسبت داده می‌شود، تولید می‌کند. فقدان تمایز

1. Schmidt factor
2. Hall–Petch
3. Unlocking
4. Unpinning

ناشی از این حقیقت است که فاصله‌ی بین خوشه‌های عیب کم‌تر از طول منبعی است که تنش برشی بحرانی مشاهده شده را تولید خواهد کرد. بنابراین منبع نمی‌تواند بدون تداخل با خوشه‌های شبکه عمل کند [۵]. با وجود این، آن‌ها به صورت مجزا در فصل‌های بعد بررسی می‌شوند. سازوکارهای سخت‌گردانی در ابتدا برای تک بلورهای حاوی یک مانع از یک نوع بحث می‌شوند. برهم نهی سخت‌گردانی از منابع مختلف در تک بلور بعداً به وسیله‌ی توسعه‌ی نظریه‌ی جامد چندبلوری بررسی می‌شود.

۱۲-۲-۱ سخت‌گردانی منبعی

سخت‌گردانی منبعی در فلزات fcc پرتودهی شده و فلزات bcc پرتودهی شده و پرتودهی نشده دیده شد. در فلزات bcc پرتودهی نشده، سخت‌گردانی منبعی به وسیله‌ی نقاط تسلیم بالایی و پایینی در منحنی تنش ـ کرنش آشکار شده است (شکل ۱۲-۴ب) و تصور می‌شود که به وسیله‌ی قفل شدن یا میخ‌کوب شدن خطوط نابجایی با اتم‌های ناخالصی ایجاد شده باشند. قبل از این‌که منبع فرانک ـ رید بتواند تحت تنش اعمال شده شروع به فعالیت کند، خط نابجایی باید از ناخالصی‌ها آزاد شود. این یک تنش بزرگی را برای حرکت نابجایی لازم دارد که باعث ایجاد افت در تنش تسلیم می‌شود. سپس تسلیم در نرخ تنش ثابت (ناحیه‌ی کرنش لودر) تا آغاز کار سختی ادامه می‌یابد که به صورت مشابه با فلزات fcc پیشرفت می‌کند.

سخت‌گردانی منبعی در فلزات fcc پرتودهی شده که در آن‌ها خوشه‌های عیب القایی تابشی در اطراف منابع فرانک ـ رید تنش مورد نیاز برای گسترش حلقه‌ها را افزایش داده و تکثیر منبع را مجاز کرده، دیده می‌شود. زمانی که سطح تنش برای آزادسازی منبع به اندازه‌ی کافی افزایش می‌یابد، نابجایی‌های محرک می‌توانند خوشه‌های کوچک را تخریب کرده و تنش مورد نیاز برای ادامه‌ی تغییر شکل را کاهش می‌دهد.

در فلزات fcc پرتودهی نشده، تنش مورد نیاز برای آغاز حرکت نابجایی تنش آزادسازی منابع فرانک ـ رید در فلز است و به وسیله‌ی معادله‌ی ۷-۳۲ الف به صورت $\sigma_{FR} = \frac{\mu b}{l}$ مشخص می‌شود که μ ضریب برشی است، b بردار برگرز و $l(= 2R)$ فاصله‌ی بین نقاط میخ‌کوب شده‌ی نشان داده شده در شکل ۷-۲۵ است. لازم به ذکر است که تنش به صورت معکوس متناسب با فاصله‌ی بین نقاط میخ‌کوب شده است. آغاز تدریجی مشخصه‌های تسلیم‌شدگی در فلزات fcc در کل به وسیله‌ی

توزیعی از تنش‌های مورد نیاز برای عمل کردن منبع توضیح داده می‌شود. در تنش اعمالی پایین، منابع نابجایی به راحتی عمل کرده (با فاصله‌ی جدایش زیاد بین نقاط میخ‌کوب شده) و شروع به تولید نابجایی می‌کنند. هم‌چنان که نابجایی‌ها تولید می‌شوند و در سراسر شبکه حرکت می‌کنند، شروع به میخ‌کوب شدن کرده و تنش برگشتی را به منبع نابجایی وارد می‌کنند که باعث توقف فعالیت نابجایی‌ها و از آن‌رو کرنش پلاستیک می‌شوند.

سخت‌گردانی منبعی، همان‌طوری‌که با معادله‌ی ۷-۳۲ توضیح داده شد، الزام می‌دارد که قطعه خط نابجایی بین نقاط میخ‌کوب شده خمیده شود که میخ‌کوب شدگی‌های قدرتمندی را نیاز دارد. به هر جهت، آزادسازی نابجایی در مقادیر پایین تنش اعمالی رخ می‌دهد اگر قطعه‌ی خط نابجایی قادر باشد که خودش را قبل از رخ دادن خمیدگی آزاد کند. یعنی تنش‌های اعمالیِ کم‌تر از آن چیزی که برای فعال کردن منبع فرانک ـ رید مورد نیاز است، قادرند قطعه خط نابجایی را از بین نقاط میخ‌کوب شده هل دهند. این فرایند می‌تواند رخ دهد برای مثال، اگر نقاط میخ‌کوب شده ترکیبی از حلقه‌های نابجایی کوچک یا خوشه‌های عیب باشند. تنش مورد نیاز برای باز کردن قطعه‌ای از خط نابجایی با حلقه‌ی کوچک می‌تواند با استفاده از تحلیل موجود در مرجع [۳] تخمین زده شود.

گروهی از حلقه‌ها با مشخصه‌ی لبه‌ایِ آرایش یافته در یک ردیف را در نظر بگیرید که هر کدام بردار برگرز b_l، شعاع r، و فاصله‌ی l را دارند، همان‌گونه که در شکل ۱۲-۶ نشان داده شده است در فاصله‌ی y از نابجایی لبه‌ای مستقیم با بردار برگرز b_{seg} هستند. با استناد به برهم‌کنش بین نابجایی‌های لبه‌ای نشان داده شده در قسمت ۷-۱-۶ فقط عبارت σ_{yy} تنشی را روی حلقه‌ای وارد می‌کند که برای گسترش یا انقباض آن فعالیت می‌کند. نیروی وارد بر حلقه‌ی ناشی از مؤلفه‌ی σ_{yy} تنش از نابجایی لبه‌ای مستقیم برابر با $2\pi r\sigma_{yy}b_l$ است، و کار لازم برای گسترش حلقه برابر است با:

(۱۲-۶۴)

$$\frac{dW}{dr} = 2\pi r\sigma_{yy}b_\ell$$
$$W = \pi r^2\sigma_{yy}b_\ell .$$

با جایگذاری تنش، σ_{yy} تعیین شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۷-۱۵ در داخل معادله‌ی ۱۲-۶۴ و دیفرانسیل‌گیری با توجه به x نیروی بین حلقه و قطعه‌ی لبه‌ای در جهت x به‌دست می‌آید:

(۶۵-۱۲)

$$F_x = \frac{-\partial W}{\partial x} = -\frac{\mu b_\ell b_{\text{seg}} r^2}{1-\nu}\frac{xy(3y^2-x^2)}{(x^2+y^2)^3}\,.$$

سینگ[1] و همکارانش [۶] اشاره کردند که نیرو در زاویه‌ی ۴۰° بین بردار فاصله و صفحه‌ی لغزش نابجایی بیشینه است و مقدار نیرو می‌تواند به صورت تابعی از r/y نوشته شود:

(۶۶-۱۲)

$$F_x^{\max} \approx \frac{0.28\mu b^2}{(1-\nu)}\left(\frac{r}{y}\right)^2 \approx 0.4\mu b^2\left(\frac{r}{y}\right)^2\,,$$

برای $\nu = ۱/۳$ و $b_l = b_{\text{seg}}$ است. مشخص شده است که $F = \sigma_s bl$ است، در نتیجه:

(۶۷-۱۲)

$$\sigma_s = \frac{0.4\mu b}{l}\left(\frac{r}{y}\right)^2\,.$$

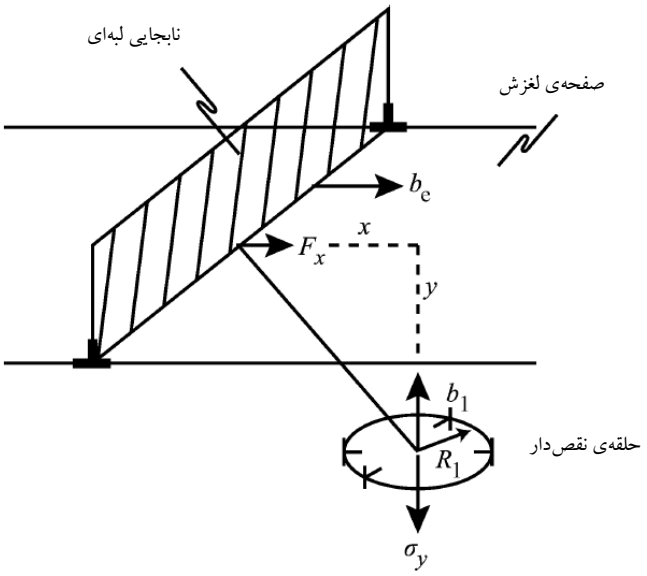
سینگ پیشنهاد کرد که $y = ۱/۵r$ با ریزساختار مشاهده شده سازگار است، که رابطه‌ای را برای تنش برشی برحسب فاصله‌ی حلقه ارایه می‌دهد به صورتی که:

(۶۸-۱۲)

$$\sigma_s = \frac{0.09\mu b}{l}\,.$$

شایان ذکر است که این مقدار تنش برشی به صورت قابل توجهی از مقدار تنش لازم برای آغاز منبع فرانک ـ رید به وسیله خمیده شدن قطعه‌ی نابجایی با $\sigma_{FR} = \frac{\mu b}{l}$ کم‌تر است.

1. Singh



شکل ۱۲-۶. سخت‌گردانی به وسیله‌ی حلقه‌های نقص‌دار ایجاد شده به وسیله‌ی برهم‌کنش میدان‌های تنشی بین نابجایی لبه‌ای متحرک روی صفحه‌ی لغزشیش که در موقعیت موازی قرار گرفته و به فاصله‌ی y از صفحه حلقه جابه‌جا شده است [۱۳].

سینگ و همکارانش هم‌چنین فرض کردند که فرایند بازشدن به وسیله‌ی برهم‌کنش بین بخش لبه‌ای و شبکه‌ای از حلقه‌ها که خیلی خوب مجزا نشده‌اند؛ اما فردیت خود را از دست داده‌اند و به صورت شبکه عمل می‌کنند، رخ می‌دهد. برای این مورد تنش تسلیم می‌تواند به وسیله‌ی تنش لازم برای غلبه بر برهم‌کنش بین دوقطبی‌های نابجایی‌ها تخمین زده شود. این مسئله به صورت جزیی‌تر در فصل ۱۴ بررسی می‌شود که در آن تنش برشی به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۴-۲۳ تعیین می‌شود به صورتی که:

(۱۲-۶۹)

$$\sigma_s = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)y} \approx \frac{0.06\mu b}{y},$$

برای $\nu = 1{,}3$ است.

۱۲-۲-۲ سخت‌گردانی اصطکاکی

سخت‌گردانی اصطکاکی به تنش مورد نیاز برای تحمل تغییر شکل پلاستیک اشاره دارد که اغلب تنش سیلان یا تنش اصطکاکی نامیده می‌شود. نیروهای مسئول برای مقاومت در برابر حرکت نابجایی از طریق شبکه‌ی بلوری ناشی از شبکه‌ی نابجایی و موانعی مانند خوشه‌های عیب، حلقه‌ها، رسوبات و حفره‌ها است. این منابع سخت‌گردانی هم‌چنین به صورت بلند دامنه یا کوتاه دامنه توصیف می‌شوند. تنش‌های بلند دامنه به وسیله‌ی برهم‌کنش‌های نابجایی ـ نابجایی به واسطه‌ی مزیت میدان‌های تنشی آن‌ها ایجاد می‌شوند. تنش‌های کوتاه دامنه منشأ در برهم‌کنش بین نابجایی‌های متحرک و موانع مجزا در صفحه‌ی لغزش دارند. تنش برشی کلی اعمال شده‌ی لازم برای غلبه‌ی نیروهای بلند دامنه و کوتاه دامنه به منظور حرکت نابجایی‌ها برابرند با:

(۱۲-۷۰)

$$\sigma_F = \sigma_{LR} + \sigma_{SR}$$

که σ_F تنش اصطکاکی است و اندیس‌های LR و SR به ترتیب سهم‌های بلند دامنه و کوتاه دامنه را نشان می‌دهند، و σ_{SR} به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۱۲-۷۱)

$$\sigma_{SR} = \sigma_{ppt} + \sigma_{void} + \sigma_{loops} ,$$

که عبارت‌های در سمت راست تساوی به ترتیب رسوبات، حفره‌ها و حلقه‌ها هستند.

تنش‌های بلند دامنه

نیروهای بلند دامنه از اثر متقابل دافعه بین نابجایی متحرک و اجزای شبکه‌ی نابجایی جامد ناشی می‌شوند. نابجایی‌ها در صفحات لغزشی موازی، به علت میدان‌های تنشیِ‌شان نیروهایی را به یک‌دیگر وارد می‌کند که میدان‌های تنشی بلند دامنه را ایجاد می‌کند. با استناد به معادله‌ی ۷-۵۱ که توضیح دهنده نیروی بین نابجایی‌های لبه‌ای است، بیشینه نیرو در زاویه $\theta = 0^{\circ}$ رخ می‌دهد که مقداری از رابطه‌ی زیر را نتیجه می‌دهد:

$$F_x(0^\circ) = F_{\mathrm{LR}} = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)r}\,. \tag{۷۲-۱۲}$$

با در نظر گرفتن ν = ۱٫۳ و فاصله‌ی بین نابجایی‌ها، r از معادله‌ی ۵-۵۷ به صورتی‌که $\frac{1}{\sqrt{\pi\rho_d}}$، که ρ_{d} دانسیته‌ی نابجایی است، می‌توان نوشت:

$$F_{\mathrm{LR}} = \frac{\mu b^2\sqrt{\pi\rho_{\mathrm{d}}}}{\pi 4/3} \approx \frac{\sqrt{\pi}\mu b^2\sqrt{\rho_{\mathrm{d}}}}{4} \approx \alpha\mu b^2\sqrt{\rho_{\mathrm{d}}}\,, \tag{۷۳-۱۲}$$

که α ثابتی با مقدار تقریباً ۰٫۴۴ است. تنش لازم برای غلبه بر این نیرو برابر با $\sigma_{\mathrm{LR}} = F_{\mathrm{LR}}/b$ است و می‌توان نوشت:

$$\sigma_{\mathrm{LR}} = \alpha\mu b\sqrt{\rho_{\mathrm{d}}}\,. \tag{۷۴-۱۲}$$

لازم به ذکر است که اگر تنش بلند دامنه برابر با تنش آزادسازی تعیین شده به صورت عبارت وابسته به اندازه دانه در معادله‌ی ۱۲-۶۳، باشد سپس استحکام تسلیم می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\sigma_{\mathrm{y}} = \sigma_{\mathrm{i}} + \alpha\mu b\rho_{\mathrm{d}}^{1/2}\,. \tag{۷۵-۱۲}$$

معادله‌ی ۱۲-۵۷ در عمل راهی متفاوت برای به‌دست آوردن وابستگیِ تنش تسلیم به اندازه دانه است زیرا مشاهده شده است که دانسیته‌ی نابجایی به صورت $\rho_{\mathrm{d}} = 1/d$ با اندازه دانه، d تغییر می‌کند.

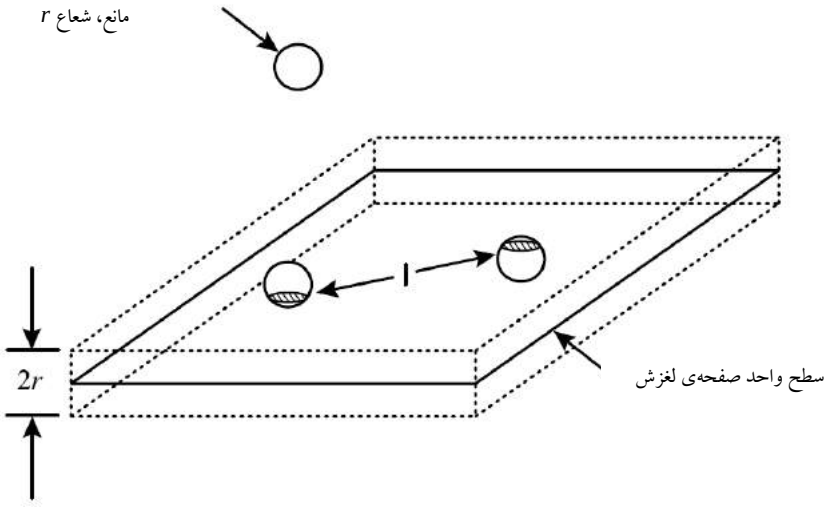
تنش‌های کوتاه دامنه

تنش‌های کوتاه دامنه ناشی از برهم‌کنش بین نابجایی متحرک و مانعی است که در صفحه‌ی لغزش قرار دارند. نیروهای کوتاه دامنه فقط هنگامی به وجود می آیندکه نابجایی با مانع برخورد می‌کند.

نیروهای کوتاه دامنه می‌توانند به برهم‌کنش‌های فعال شده‌ی حرارتی و غیرحرارتی تقسیم‌بندی شوند. برهم‌کنش غیرحرارتی تنش، مستقل از دما است و نتیجه‌ای از خمیده شدن نابجایی در اطراف مانع است. در فرایندهای فعال شده‌ی حرارتی، نابجایی به وسیله‌ی برش سراسریِ موانع یا صعود در روی آن بر مانع غلبه خواهد کرد. هر دو این فرایندها انرژیِ اضافه‌ای را از طریق افزایش در دما نیاز دارند. خمیده شدن نابجایی‌ها در اطراف موانع و برش موانع در این فصل مورد بحث قرار خواهند گرفت و فرایند صعود به صورت جزیی در فصل ۱۴ در مبحث خزش بررسی می‌شود.

تنش اصطکاکیِ ناشی از توزیع موانع، وابسته به میانگین جدایش بین موانع در صفحه‌ی لغزشِ نابجایی متحرک است. شکل ۱۲-۷ یک واحد سطح از یک صفحه‌ی لغزشی به وسیله‌ی بخش‌هایی از گوی‌های کروی با قطر d را نشان می‌دهد که به صورت تصادفی در سراسر جامد در غلظتی از $\mathrm{Ncm^{-3}}$ توزیع شده‌اند. هر کره‌ای که مرکزش در روی ورقه‌ای به حجم d روی صفحه‌ی لغزشی متمرکز شده باشد، صفحه‌ی لغزشی را قطع می‌کند. تعداد موانع در این جزء حجمی برابر با Nd است که برابر تعداد تقاطع‌ها در واحد سطح روی صفحه‌ی لغزشی نیز است. حاصل‌ضرب تعداد تقاطع‌ها در واحد سطح، Nd و مربع فاصله بین موانع، l^2 برابر با واحد است که فاصله‌ی بین موانع را نتیجه می‌دهد:

$$l = (Nd)^{-1/2} . \qquad (۷۶-۱۲)$$



شکل ۱۲-۷. نمایش شماتیکی از تقاطع موانع کروی با شعاع r و فاصله‌ی l با یک واحد سطح از صفحه‌ی لغزشی[۳].

رسوبات

هنگامی که یک نابجایی با مانعی مانند رسوب ناهم‌بسته برخورد می‌کند، برهم‌کنش کوتاه دامنه زمانی رخ می‌دهد که رسوب به صورت فیزیکی با مانع برخورد کند. برای موانع قوی تنش اعمال شده باعث می‌شود که نابجایی‌ها بین موانع خمیده شوند. خمیدگی تا وقتی ادامه می‌یابد که قطعات مجاور با یک‌دیگر تماس پیدا کرده و هم‌دیگر را نابود کنند. این فرایند دقیقاً مشابه با چیزی است که در منبع فرانک ـ رید رخ می‌دهد. متعاقب این فرایند نابجایی می‌تواند به صورت آزاد در طول صفحه‌ی لغزشی خودش ادامه‌ی مسیر دهد تا با مانع بعدی برخورد کند و دوباره فرایند تکرار شود. موانع با یک حلقه‌ی نابجایی در اطراف آن‌ها رها می‌شوند، به صورتی که اکنون مانع قوی‌تر برای نابجایی بعدی به حساب می‌آیند که در ادامه خواهد آمد (شکل ۱۲–۸ الف). تنش کوتاه دامنه‌ی ناشی از آرایشی از موانع با دانسیته‌ی N و اندازه‌ی d به صورت زیر تعیین می‌شود. کشش خطی یک نابجایی لبه‌ای در معادله‌ی ۷–۲۲ به صورت $\Gamma = \frac{\mu b^2}{4\pi}\ln\left(\frac{R}{r_c}\right)$ مشخص شد، که R برابر با شعاع دانه در نظر گرفته شده است و r_c شعاع هسته‌ی نابجایی است و انرژی هسته‌ی نابجایی نادیده در نظر گرفته شده است. از معادله‌ی ۷–۳۱، تنش برشی به وسیله‌ی معادله‌ی $\sigma_s = \Gamma/bR$ با کشش خطی مرتبط است. با جایگذاری Γ از معادله‌ی ۷–۲۲ و برابر قرار دادن $R = l/2$ که l فاصله‌ی مانع است، می‌توان نوشت:

$$\sigma_s \approx \frac{\mu b}{l}\frac{1}{2\pi}\ln\left(\frac{l}{2r_c}\right) . \qquad (۷۷–۱۲)$$

با جایگذاری l در معادله‌ی ۱۲–۷۵ نتیجه می‌شود:

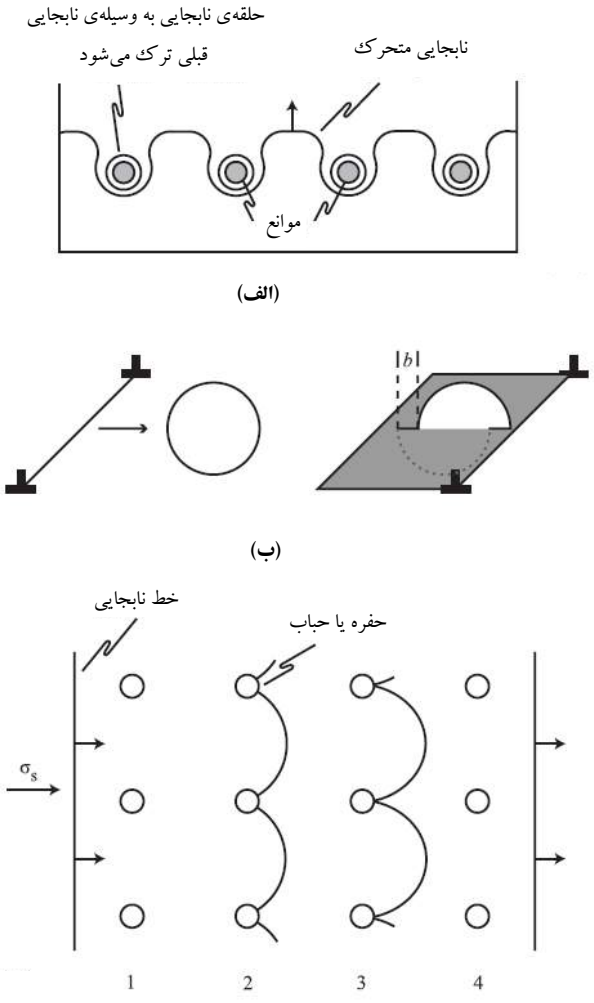
$$\sigma_s \approx \alpha\mu b\sqrt{Nd} , \qquad (۷۸–۱۲)$$

که $\alpha = \frac{1}{2\pi}\ln\left(\frac{l}{2r_c}\right)$ است. تنش اعمال شده در تسلیم، σ_y به وسیله‌ی ضریب تیلور[1]، M به تنش برشی تجزیه شده، σ_s مرتبط است به گونه‌ای که $\sigma_y = M\sigma_s$، و معادله می‌تواند برحسب تنش اعمال شده نوشته شود، به صورتی که:

1. Taylor factor

(۷۹-۱۲)

$$\sigma_y = \alpha M \mu b \sqrt{Nd}\,.$$



شکل ۱۲-۸. (الف) خمیده شدن نابجایی در پیرامون موانع سخت مانند رسوبات، (ب) برش مانعی مانند یک رسوب به وسیله‌ی نابجایی، (ج) تقاطع نابجایی با حفره‌ها.

استولر[1] و زینکل[2] [۷] نشان دادند که M در واقع حد بالایی برای نسبت استحکام تسلیم تک محوری به تنش برشی تجزیه شده است و برای شبکه‌های fcc و bcc برابر با ۳٫۰۶ است. معادله‌ی ۱۲-۷۹ در کل به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۲-۸۰)

$$\Delta\sigma_y = \alpha M \mu b \sqrt{Nd}\ ,$$

که $\Delta\sigma_y$ *افزایش* در استحکام تسلیم ناشی از عیوب با اندازه‌ی d، عدد دانسیته‌ی N و استحکام α است. در حقیقت عبارت α، استحکام مانع مشخص را برحسب مدل سخت‌گردانی اوراوان[3] نشان می‌دهد. یک مانع کاملاً سخت یک مقدار $\alpha = 1$ را خواهد داشت. بعد از فرمول‌بندی اصلی سیگر[4]، سخت‌گردانی مطابق با معادله‌ی ۱۲-۸۰ اغلب سخت‌گردانی *موانع پراکنده* نامیده می‌شود [۸].

خمیدگی نابجایی استحکام‌دهیِ بیش‌تری را به وسیله‌ی موانع ایجاد می‌کند. به هرجهت، برش مانع نیز می‌تواند استحکام‌دهی را فراهم کند. برش مانع به وسیله‌ی سازوکارهای مختلفی منجر به سخت‌گردانی می‌شود که به وسیله‌ی دیتر[5] [۱] به صورت زیر خلاصه شده است:

۱. برش دانه‌ها پله‌ای به پهنای b روی هر دو طرف دانه ایجاد می‌کند و افزایش در مساحت سطح نیاز دارد که کار اضافه‌ای برای برش دانه انجام شود.
۲. اگر دانه‌ها ساختارهای منظم شده‌ای باشند، مانند ترکیبات بین فلزی، سپس برش یک سطح مشترک جدیدی را در درون دانه ایجاد می‌کند که انرژی اضافه‌ای را نیاز دارد.
۳. سخت‌گردانی از تفاوت بین ضریب کشسان زمینه و دانه نیز ناشی می‌شود که کشش خطی نابجاییِ نیازمند تنش اضافی برای برش دانه را تحت تأثیر قرار می‌دهد.
۴. استحکام دهی هم‌چنین ناشی از تفاوت در تنش پیرلز[6] بین دانه و زمینه است.

1. Stoller
2. Zinkle
3. Orowan hardening model
4. Seeger
5. Dieter
6. Peierls stress

شکل ۱۲-۸ ب نتیجه‌ی برش مانع به وسیله‌ی نابجایی را نشان می‌دهد. مانع نتیجه شده بریده شده و نیمه‌های بالایی و پایینی در طول صفحه‌ی لغزش به اندازه‌ی برابر با بزرگی بردار برگرز نابجایی جابه‌جا می‌شوند. برش متوالی مانع روی صفحه‌ی مشابه می‌تواند منجر به جدایش کامل دو بخش شود که منجر به دو مانع کوچک‌تر می‌شود.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از برهم‌کنش نابجایی ـ مانع وسیله‌ای برای به تصویر کشیدن فرایندهای ریزساختاری پیچیده همان‌طوری فراهم می‌کند که در فصل‌های بعدی نشان داده خواهد شد. ذکر این نکته بسیار حایز اهمیت است که به هر جهت شبیه‌سازی‌ها می‌توانند به خوبیِ پتانسیل‌های بین اتمی باشند و ممکن است به وسیله‌ی دیگر عوامل مانند اندازه‌ی حجم شبیه‌سازی شده و نرخ کرنش تأثیر بپذیرند. از آن‌رو، نتایج آن‌ها تا حد زیادی درباره‌ی یک تفسیر کمی دقیق یک تشریح کیفی است.

فیلم‌های ۱۲-۱ تا ۱۲-۳ شبیه‌سازی دینامیک مولکولیِ برهم‌کنش بین نابجایی لبه‌ای مجزا و رسوب کبالت در مس را به صورت تابعی از اندازه‌ی رسوب در دمای ۱۰K و تحت تنش اعمالی ۱۰۰ MPa نشان می‌دهد. اندازه‌ی رسوب در فیلم ۱۲-۱ در حدود ۱٫۵nm است و به وسیله‌ی هر دو جزء نابجایی لبه‌ای بریده می‌شود. فیلم‌های ۱۲-۲ و ۱۲-۳ به ترتیب برای رسوبات ۳ و ۵nm هستند و نشان می‌دهد، که درحالی‌که اولین نابجایی جزیی رسوب را برش می‌دهد مطابق با آن‌چه به صورت شماتیک در شکل ۱۲-۸ الف نشان داده شده است نابجایی جزیی بعدی یک خمیدگی اوراوان و فشردگی را تحمل می‌کند که منجر به باقی‌مانده‌ی حلقه در اطراف رسوب می‌شود. فیلم ۱۲-۴ برش یک رسوب مس ۲nm را نشان می‌دهد همان‌طوری‌که در شکل ۱۲-۸ ب نشان داده شده است بخش اول فیلم رفتار خط نابجایی در فرایند برش و بخش دوم برش رسوب را نشان می‌دهد که منجر به فاصله‌ی بین قسمت بالا و پایین رسوب می‌شود.

برای موردی که سخت شوندگی ناشی از تفاوت در ضریب بین رسوب و زمینه است مانند خوشه‌های بسیار بزرگ جای خالی یا رسوبات غنی از مس در مخازن تحت فشار فریتی مشخص شده است که مدل راسل[1] و براون[2] [۹] بهترین توضیح برای سخت شوندگی را ارایه می‌دهد. آن‌ها نشان دادند که تنش تسلیم در برش تابعی از فاصله‌ی موانع در صفحه‌ی لغزشی، l و زاویه‌ی بحرانی که در آن نابجایی می‌تواند یک مانع را برش دهد، $\emptyset$ است:

1. Russell
2. Brown

(۸۱-۱۲)

$$\sigma_{sy} = 0.8\frac{\mu b}{l}\cos\frac{\phi}{2} \quad \text{for} \quad \phi \leq 100^\circ$$
$$\sigma_{sy} = 0.8\frac{\mu b}{l}\left(\cos\frac{\phi}{2}\right)^{3/2} \quad \text{for} \quad \phi > 100^\circ ,$$

و هنگامی که ϕ = ۰ است، تنش، تنش اوراوان است. آن‌ها نشان دادند که اگر یک نابجایی فصل مشترک را قطع کند و انرژی E_1 در واحد طول را روی یک طرف و انرژی E_2 در واحد طول را در طرف دیگر داشته باشد، سپس تعادل نابجایی این الزام می‌دارد که $E_1\sin\theta_1 = E_2\sin\theta_2$ باشد که θ_1 و θ_2 زوایای بین نابجایی و عمود بر سطوح مشترک است. هنگامی که انرژی نابجایی در رسوب از زمینه کم‌تر است ($E_1 < E_2$)، زاویه‌ی ϕ هنگامی که نابجایی نزدیک به گسیختگی باشد مقدار کمینه‌ای دارد که به صورت $\phi_{min} = 2\sin^{-1}\left(\frac{E_1}{E_2}\right)$ تعیین می‌شود، و استحکام از معادله‌ی ۱۲-۸۱ به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۸۲-۱۲)

$$\sigma_{sy} = 0.8\frac{\mu b}{l}\left[1 - \frac{E_1^2}{E_2^2}\right]^{1/2} \quad \text{for} \quad \sin^{-1}\frac{E_1}{E_2} < 50^\circ$$
$$\sigma_{sy} = 0.8\frac{\mu b}{l}\left[1 - \frac{E_1^2}{E_2^2}\right]^{3/4} \quad \text{for} \quad \sin^{-1}\frac{E_1}{E_2} \geq 50^\circ ,$$

که

(۸۳-۱۲)

$$\frac{E_1}{E_2} = \frac{E_1^\infty \log\frac{r}{r_c}}{E_2^\infty \log\frac{R}{r_c}} + \frac{\log\frac{R}{r}}{\log\frac{R}{r_c}} ,$$

و E^{∞} انرژی در واحد طول نابجایی در محیط نامحدود است، R شعاع خارجی برش (که به صورت نصف فاصله تا منبع بعدی در نظر گرفته می‌شود) و r_c شعاع هسته‌ی نابجایی است. تنش‌ها در معادله‌ی ۱۲-۸۲ به صورت معکوسی وابسته به فاصله‌ی دانه، l هستند و بنابراین هم‌چنان که شعاع دانه افزایش می‌یابد، کاهش می‌یابند (برای کسر حجمی ثابت از رسوبات). به هرجهت ترکیب معادله‌ی ۱۲-۸۳ با معادله‌ی ۱۲-۸۲ یک بیشینه‌ای را در رابطه‌ی بین استحکام و اندازه‌ی رسوب نتیجه می‌دهد. برای حفره‌ها رسوبات در فولادهای مخازن تحت فشار این بیشینه در حدود $2r_c$ (~ 5a) یا تقریباً ۱٫۵ nm است.

حفره‌ها

نابجایی‌ها می‌توانند حفره‌ها را نیز برش دهند اگرچه ساختار حفره‌ی قبل و بعد از برش یکسان است. رسوبات و حفره‌ها در کل به جای موانع سخت با $\alpha \sim 1$ در نظر گرفته می‌شوند. تنها تفاوت بین عبور نابجایی متحرک از بین رسوبات و حفره‌ها این است که در مورد حفره‌ها، بخش‌های نابجایی در زوایای صحیحی با سطح حفره برخورد می‌کنند و هیچ‌گونه حلقه‌ی نابجایی بعد از عبور از بین حفره به جای نمی‌گذارند (شکل ۱۲-۸ ج). هم‌چنان که به وسیله‌ی اولاندر[1] [۳] توضیح داده شده، نیروی لازم برای برش حفره برابر است با:

(۱۲-۸۴)

$$F = \frac{U_V}{R} = \sigma_s b l \ ,$$

که U_v انرژی کرنشی کشسان در یک حجم از جامد معادل با حفره است، R شعاع حفره و l فاصله‌ی حفره روی صفحه‌ی لغزشی است. از معادله‌ی ۷-۲۱ انرژی کشسان در واحد حجم برای یک نابجایی پیچی به صورت $W = \frac{\mu b^2}{8\pi^2 r^2}$ است. انرژی کشسان برهم‌کنش حفره ـ نابجایی می‌تواند به وسیله‌ی انرژی کشسانی در حجم حفره تقریب زده شود:

1. Olander

(۸۵-۱۲)

$$U_V = \int_{r_c}^{R} 4\pi r^2 W \, dr$$
$$= 4\pi \int_{r_c}^{R} \frac{\mu b^2}{8\pi^2} dr$$
$$= \frac{\mu b^2}{2\pi}(R - r_c) \approx \frac{\mu b^2 R}{2\pi} .$$

با جایگذاری در معادله‌ی ۱۲-۸۴ و حل برای σ_s می‌توان نوشت:

(۸۶-۱۲)

$$\sigma_s = \frac{1}{2\pi}\frac{\mu b}{l},$$

که از تنش اوراوان، معادله‌ی ۷-۳۲ الف، به اندازه‌ی یک ضریب $1/2\pi$ کم‌تر است که نشان می‌دهد برش حفره‌ها انرژی کم‌تری را از خمیده شدن در اطراف آن‌ها نیاز دارد. با نوشتن در فرم معادله‌ی ۱۲-۸۰ نتیجه گرفته می‌شود که:

(۸۷-۱۲)

$$\Delta\sigma_y = \alpha M \mu b \sqrt{Nd} , \quad \alpha \approx 0.16$$

بررسی بسیار پیچیده‌تر از برهم‌کنش نابجایی ـ حفره محاسبه‌ی تنش‌های تصویری، خود برهم‌کنشی نابجایی و ناهمسان‌گردی کشسانی بلور است. تنش تصویری باید به منظور ایجاد سطوح بدون کشش حفره به تنش نابجایی اضافه شود. خود برهم‌کنشی نابجایی‌ها به نیروهای جاذبه دوقطبی بین انتهای شاخه‌های نابجایی در یک حفره اشاره دارد که می‌تواند در کشش خوشه‌ها به سمت یک‌دیگر در اطراف حفره کمک کرده و در نتیجه اثرات استحکام بخشی را کاهش دهد. در پایان، ناهمسان‌گردی کشسانی بلور حاوی یک ردیف حفره باید در محاسبات میدان تنشی نابجایی مورد توجه قرار گیرد. وارد کردن این ضرایب در محاسبات تنش لازم برای برش یک حفره در پی نابجایی نشان می‌دهد که

حفره یک مانع بسیار قوی است، و تنش لازم برای برش آن نزدیک به مقدار تنش اوراوان برای موانع غیر قابل نفوذ است. جزییات بیش‌تر از این اثرات در مرجع [۱۰] مشخص شده است.

برهمکنش بین نابجایی‌ها و حفره‌ها در فیلم‌های ۱۲–۵ تا ۱۲–۷ نشان داده شده است. فیلم ۱۲–۵ برهم‌کنش بخش‌های پیشرو و عقبی یک نابجایی لبه‌ای مجزا با یک حفره ۳nm در مس در دمای K ۰ را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که خطوط نابجایی با سطح حفره در سراسر تقاطع در یک زاویه‌ی قائم باقی می‌مانند. فیلم ۱۲–۶ برش یک حفره ۱nm در آهن به وسیله‌ی یک نابجایی و رفتار تنش ـ کرنش ناشی از برهم‌کنش نابجایی ـ حفره را نشان می‌دهد. در این سه فیلم، نیمه‌ی بالایی حفره نسبت به نیمه‌ی پایینی مشخص است. در پایان، فیلم ۱۲–۷ برش‌های تکراری حباب هلیوم با ابعاد ۲٫۶ nm را به وسیله‌ی نابجایی‌های چندتایی تحت تنش برشی اعمالی ۱۰۰ MPa را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که به نظر می‌رسد که حباب در جهت تنش اعمالی، به علت غیرهم‌محور بودن[1] نیمه‌ی بالایی صفحه‌ی لغزش نسبت به نیمه‌ی پایینی مشابه به آن‌چه در شکل ۱۲–۸ ب نشان داده شده، کشیده می‌شود.

حلقه‌ها

برهم‌کنش بین نابجایی متحرک و حلقه در بخش ۱۲–۲–۲ توضیح داده شد که نشان داد که تنش در معادله‌ی ۱۲–۶۸ در حدود $\sigma_s = \frac{0.1\mu b}{l}$ است و برای l مشخص شده در معادله‌ی ۱۲–۷۶ تنش برابر است با:

$$\sigma_s = 0.1\mu b\sqrt{Nd}\,, \qquad (۱۲–۸۸)$$

که کم‌تر از تنش اوراوان است. با نوشتن در شکل معادله‌ی ۱۲–۸۰، افزایش استحکام تسلیم ناشی از حلقه‌ها برابر است با:

$$\Delta\sigma_y = \alpha M\mu b\sqrt{Nd}\,, \quad \text{with} \quad \alpha \approx 0.1\,. \qquad (۱۲–۸۹)$$

1. Offset

انواع برهم‌کنش‌های بین خطوط نابجایی و حلقه‌هایِ توضیح داده شده در این فصل، در فیلم‌های ۱۲–۸ تا ۱۲–۱۲ نشان داده شده است. در فیلم‌های ۱۲–۸ و ۱۲–۹ برهم‌کنش بین نابجایی و حلقه به واسطه‌ی میدان‌های تنشی است. فیلم ۱۲–۸ نشان می‌دهد نابجایی لبه‌ای در مس (لبه روی کره‌های قرمز نابجایی‌های جزیی است)، **با حلقه‌ی کامل حاوی ۳۷ جدایش القایی تابشی (کره‌های سبز) در فاصله‌ی به اندازه‌ی دو قطر حلقه از نابجایی برهم‌کنش می‌کنند.** هر دو نابجایی بردار برگرز $\frac{1}{2}[110]$ را دارند. شایان ذکر است که هم‌چنان که نابجایی حرکت می‌کند، میدان‌های کرنشی واکنش دهنده، حلقه را در جهت نابجایی متحرک حرکت می‌دهند. شکل ۱۲–۹ نشان می‌دهد که یک نابجایی لبه‌ای، یک حلقه‌ی فرانک حاوی ۱۵۳ جدایش القایی تابشی را در ۱۰۰K تحت یک تنش اعمالی ۳۰۰ MPa در مس کنار می‌گذارد. کره‌های آبی، اتم‌ها در بلور fcc هستند و کره‌های زرد رنگ اتم‌ها در نقص در چیده شدن هستند. در طول برهم‌کنش‌های غیرمتقاطع، حلقه‌ی فرانک چرخیده تا تبدیل به حلقه‌ی کامل متحرک شود و سپس لغزیده تا در سطح آزاد نابود شود.

فیلم‌های ۱۲–۱۰ تا ۱۲–۱۲ برهم‌کنش‌هایی را نشان می‌دهد که در آن‌ها نابجایی در تماس با حلقه‌ها هستند. فیلم ۱۲–۱۰ نشان می‌دهد که یک نابجایی پیچی مجزا حلقه‌ی فرانک مشابهی را تحت شرایط مشابهی برش می‌دهد که در فیلم ۱۲–۹ نشان داده شده است. لازم به ذکر است که حلقه‌ی برش داده شده به داخل هسته‌ی نابجایی پیچی جذب می‌شود. فیلم ۱۲–۱۱ مثال دیگری از یک نابجایی پیچی برخوردی با یک حلقه‌ی کامل (با بردار برگرز مشابه) است که در آن حلقه جذب شده و سپس در فاصله‌ی دورتر از نقطه‌ی جذب اصلی نشر می‌شود، و نابجایی روی یک صفحه‌ی لغزش متفاوت لغزش متقاطع می‌کند. فیلم ۱۲–۱۲ یک نابجایی لبه‌ای واکنش دهنده با حلقه‌ی فرانک بدون نقص (۵nm، حاوی ۱۵۳ جدایش القایی تابشی) در آهن ۳۰۰K را نشان می‌دهد که منجر به تخریب حلقه می‌شود.

چهاروجهی نقص در چیده شدن که نوع دیگر عیب نقص‌دار است و در فصل ۷ توضیح داده شد نیز با نابجایی‌ها واکنش داده و می‌تواند در سخت‌گردانی سهیم شود. فیلم ۱۲–۱۳ برهم‌کنش متوالی نابجایی‌های لبه‌ای با یک چهاروجهی نقص در چیده شدن با ۱۵۳ جای خالی در ۱۰۰K تحت یک تنش اعمالی ۱۰۰ MPa در مس را نشان می‌دهد. چهاروجهی نقص در چیده شدن به یک چهاروجهی نقص در چیده شدن کوچک‌تر و یک قاعده‌ی ناقص برش داده شده و برخورد بعدی منجر به جذب

قاعده‌ی ناقص به داخل نابجایی می‌شود. فیلم ۱۲-۱۴ جزییات برهم‌کنش بین نابجایی‌های جزیی لبه‌ای در فیلم ۱۲-۱۳ اما در نرخ آرام‌تر و با یک چهاروجهی نقص در چیده شدن با ۴۵ جای خالی را نشان می‌دهد.

فیلم‌های ۱۲-۱۵ تا ۱۲-۱۷ برهم‌کنش یک نابجایی پیچی با یک چهاروجهی نقص در چیده شدن در مس را نشان می‌دهد. در فیلم ۱۲-۱۵، چهاروجهی نقص در چیده شدن با ۴۵ جای خالی برش داده شده و در فیلم ۱۲-۱۶، چهاروجهی نقص در چیده شدن با ۹۸ جای خالی جذب شده و سپس مجدداً نشر شده است. فیلم ۱۲-۱۷ نشان می‌دهد که یک چهاروجهی نقص در چیده شدن با ۷۸ جای خالی جذب شده و سپس به صورت یک چهاروجهی نقص در چیده شدن کوچک‌تر و یک قاعده‌ی ناقص مجزا مجدداً نشر شده است. یک فیلم زمان حقیقی از برهم‌کنش یک نابجایی ـ چهار وجهی نقص در چیده شدن در مس روی یک نمونه تحت بارگذاری جنبشی در روی یک پایه در میکروسکوپ الکترونی عبوری در دمای اتاق، در فیلم ۱۲-۱۸ نشان داده شده است. چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن به وسیله سرد کردن سریع نمونه‌ی مسی در نمک منجمد بعد از ۲ ساعت بازپخت در ۱۰۷۳K ایجاد شدند. این فیلم میدان تاریک نشان می‌دهد که یک نابجایی به وسیله‌ی یک چهاروجهی نقص در چیده شده میخکوب شده است. نتیجه‌ی برهم‌کنش تشکیل حلقه‌ی کامل است. در آخر، فیلم ۱۲-۱۹ و ۱۲-۲۰ برهم‌کنش نابجایی پیچی در مس با چندین عیب شامل: چهاروجهی نقص در چیده شدن با ۷۸ جای خالی و حلقه‌ی کامل شامل ۶۱ بین‌نشین در فیلم ۱۲-۱۹ و ۹۱ بین‌نشین در فیلم ۱۲-۲۰ را نشان می‌دهد.

تأثیر دما

همان‌طوری‌که در قسمت قبل توضیح داده شد، استحکام مانع و دانسیته، سرعت نابجایی‌ها در چند بلور را تعیین می‌کند. اگر انرژی آزاد گیبس فعال‌سازی برای برش یا عبور از یک مانع برابر با $\Delta G(\sigma_s)$ باشد، سپس سرعت متوسط یک بخش نابجایی، $\bar{v}$ با معادله‌ی زیر مشخص می‌شود [۱۱]:

(۱۲-۹۰)

$$\bar{v} = \beta b \nu \exp\left(-\frac{\Delta G(\sigma_s)}{kT}\right),$$

که β ضریب بی بعد است، b بزرگی بردار برگرز، ν بسامد و σ_s تنش برشی است. عبارت $\Delta G(\sigma_s)$ تابعی از تنش درونی و توزیع موانع است و برای یک آرایش منظمی از موانع، به صورت زیر بیان می‌شود:

(۹۱-۱۲)

$$\Delta G(\sigma_s) = \Delta F \left(1 - \frac{\sigma_s}{\sigma_s^0}\right) ,$$

که ΔF انرژی آزاد کلی (انرژی فعال‌سازی) مورد نیاز برای غلبه بر موانع بدون کمک تنش خارجی است. عبارت σ_s^0 تنشی است که در آن یک نابجایی می‌تواند از بین یک مانع بدون کمک انرژی حرارتی، یا در اصل، تنش سیلان در K ◦ که ΔG =◦ است، حرکت کند:
در صورت وجود آرایش تصادفی از موانع [۱۱] معادله‌ی ۱۲-۹۱ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۹۲-۱۲)

$$\Delta G(\sigma_s) = \Delta F \left[1 - \left(\frac{\sigma_s}{\sigma_s^0}\right)^p\right]^q ,$$

که ۱ ≤ p ≤ ◦ و ۲ ≤ q ≤ ۱ است، و σ_s^0 از جنبه پدیدار شناختی به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۹۳-۱۲)

$$\frac{\sigma_s}{\sigma_s^0} = \left[1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^p\right]^q ,$$

که محدوده‌ی رفتار منطقی و قابل قبول با p = ۲٫۳ و q = ۳٫۲ به‌دست می‌آید [۱۲]. از آن‌جایی که نرخ کرنش متناسب با میانگین سرعت نابجایی است (قسمت ۱۴-۱)، معادله‌ی سرعتی برای مانع مجزا با شکل‌پذیری کنترل شده به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۹۴-۱۲)

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_0 \exp\left\{-\frac{\Delta F}{kT}\left[1 - \left(\frac{\sigma_s}{\sigma_s^0}\right)^p\right]^q\right\} ,$$

که هر دو وابستگی تنشی و دمایی عبور نابجایی از بین یک آرایش تصادفی عیوب را دربر می‌گیرد. سخت‌گردانی ناشی از موانع بلند دامنه و کوتاه دامنه در جدول ۱۲-۱ با استفاده از معادله‌ی ۱۲-۸۰ برای تشریح موانع کوتاه دامنه به صورت خلاصه آورده شده است. قابل ذکر است که مقادیر α می‌تواند به صورت مقادیر قابل توجهی وابسته به نوع عیب تغییر کند. کارهای زیادی برای تعیین مقدار آزمایشگاهی α انجام شده است و ستون ۵ در جدول ۱۲-۱ مقادیر پذیرفته شده اصلی برای α بر پایه کارهای آزمایشگاهی است.

جدول ۱۲-۱. استحکام انواع موانع مختلف که منجر به سخت‌گردانی منبعی و رسوبی در فلزات پرتودیده می‌شوند.

نوع استحکام‌دهی	دسته‌بندی مانع	نوع مانع	افزایش مانع	α
منبعی		حلقه‌ها	حلقه‌های تکی $\sigma_s = \frac{0.09\mu b}{l}$ شبکه‌ی حلقه $\sigma_s \approx \frac{0.06\mu b}{y}$	
اصطکاکی	بلند دامنه	شبکه‌ی نابجایی	$\sigma_{LR} = \alpha\mu b\sqrt{\rho_d}$	$< ۰/۲$
	کوتاه دامنه	رسوبات و حفره‌ها	$\Delta\sigma_y = \alpha M \mu b\sqrt{Nd}$	خمیدگی ۱/۰ برش ۰/۳–۰/۵
		حلقه‌های نابجایی		۰/۲۵–۰/۵
		نقاط سیاه		$< ۰/۲$

۱۲-۲-۳ برهم نهی سازوکارهای سخت‌گردانی

همان‌طوری‌که در فصل‌های ۷، ۸ و ۹ بحث شد، ریزساختار یک فلز پرتودیده می‌تواند کاملاً پیچیده باشد. در مقادیر پرتوگیری بسیار پایین، ریزساختار شامل خوشه‌های عیب و حلقه‌های کوچک است. با افزایش مقدار پرتوگیری ، ریز ساختار حلقه در یک عدد دانسیته و اندازه حلقه مشخص اشباع شده و از آن‌جایی که حلقه‌ها بی‌نقص شده و به جای بخشی از شبکه‌ی خط نابجایی در می‌آیند دانسیته‌ی نابجایی افزایش می‌یابد. در دماهای بالاتر حفره‌ها و حباب‌ها در ریزساختار سهیم می‌شوند و رسوب‌گذاری القایی تابشی نیز می‌تواند در دمای بالا سهیم شود. هر کدام از این ترکیب‌ها یک نوع متفاوتی از مانع برای نابجایی متحرک محسوب می‌شوند. به منظور ارزیابی یک ریزساختار پرتودهی شده واقعی، باید راه‌های مختلف محاسبه برای موانعی با انواع، اندازه و عدد دانسیته‌ی مختلف وجود

داشته باشد. در ادامه چندین نوع از ترکیب‌های مختلف موانع کوتاه دامنه و بلند دامنه همان‌طوری بررسی می‌شود که در ابتدا به وسیله‌ی بمت تشریح شده است[۱۳].

تنش‌های بلند دامنه و موانع کوتاه دامنه

اگر تنش‌های درونی بلند دامنه در شبکه وجود داشته باشد، هم‌چنان که به وسیله‌ی گروهی از نابجایی‌های عمده با بردار برگرز با علامت مشابه رخ می‌دهد، و به علاوه اگر موانع پراکنده با یک برهم‌کنش کوتاه دامنه و یک میانگین فاصله، l_S کوچک‌تر از میانگین طول موج تنش‌های بلند دامنه موجود باشند، میانگین تنش مؤثر موجود برای هل دادن نابجایی روی موانع کوتاه دامنه (σ_{SR}) برابر با تفاوت بین تنش اعمالی، σ_a و تنش σ_{LR} لازم برای حرکت نابجایی‌ها از طریق میدان تنشی بلند دامنه است:

(۹۵-۱۲)

$$\sigma_a = \sigma_{LR} + \sigma_{SR}\,, \quad l_{SR} < l_{LR}\,.$$

در نتیجه تنش کلی ترکیبی از تنش ناشی از دو نوع سخت‌گردانی است مانند آن‌که هر کدام به صورت مستقل عمل می‌کنند. چنین چیزی در صورتی که دو نوع مانع کوتاه دامنه موجود باشند، وجود ندارد.

دو نوع مانع کوتاه دامنه

در ریزساختار پرتودیده‌ی مشتمل بر دو نوع مانع کوتاه دامنه، انطباق (برهم نهی) به گونه‌ای حساس وابسته به استحکام‌ها و غلظت‌های نسبی دو نوع مانع است.

دو مانع قوی

اگر دو نوع مانع قوی باشند به گونه‌ای که نابجایی‌ها به وسیله‌ی سازوکار اورامان برهم‌کنش کنند، نابجایی متحرک نمی‌تواند بین آن‌ها تمایزی قایل شود و جمع دانسیته‌های سطحی، N دو مانع در صفحه‌ی لغزش فاصله‌ی مؤثر مانع را تعیین می‌کند:

(۹۶-۱۲)

$$l = \frac{1}{\sqrt{N_1 + N_2}} ,$$

و

(۹۷-۱۲)

$$\frac{1}{l^2} = \frac{1}{l_1^2} + \frac{1}{l_2^2} ,$$

و در نتیجه:

(۹۸-۱۲)

$$\sigma_a^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 ,$$

که σ_1 و σ_2 تنش‌های بحرانی هستند اگر موانع ۱ و ۲ به ترتیب با فاصله‌های متوسط l_1 و l_2 به صورت مجزا عمل کنند. این مدل جذر مجموع مربعات (RSS) به وسیله‌ی فورمن[1] و ماکین[2] [۱۴] برای اعمال به تعدادی از موانع با استحکام مشابه به‌کار گرفته شد. به هرجهت، رفتار نابجایی وابسته به استحکام مانع متفاوت است. شکل ۱۲-۹ آرایش نهایی خط نابجایی را فقط قبل از تسلیم‌شدگی برای استحکام مانع (α) ۰٫۱، ۰٫۵ و ۰٫۸ نشان می‌دهد [۱۵].

اگر در یک شبکه انواع موانع مختلف وجود داشته باشد که بتوان آن‌ها را با کمک فعال‌سازی حرارتی از بین برداشت و برای آن‌که نیروها (F_1 و F_2) تقریباً مشابه هستند، معادله‌ی ۱۲-۹۸ به دلایل مختلفی به صورت بالا باقی خواهد ماند.

دو مانع با استحکام مختلف

چندین مورد مختلف برای ترکیب‌های موانع ضعیف و قوی وجود دارد. کوکس[3] [۱۶] موردی را در نظر گرفت که در آن موانع بسیار ضعیف و اندکی قوی شرایط زیر را به وجود آوردند:

(۹۹-۱۲)

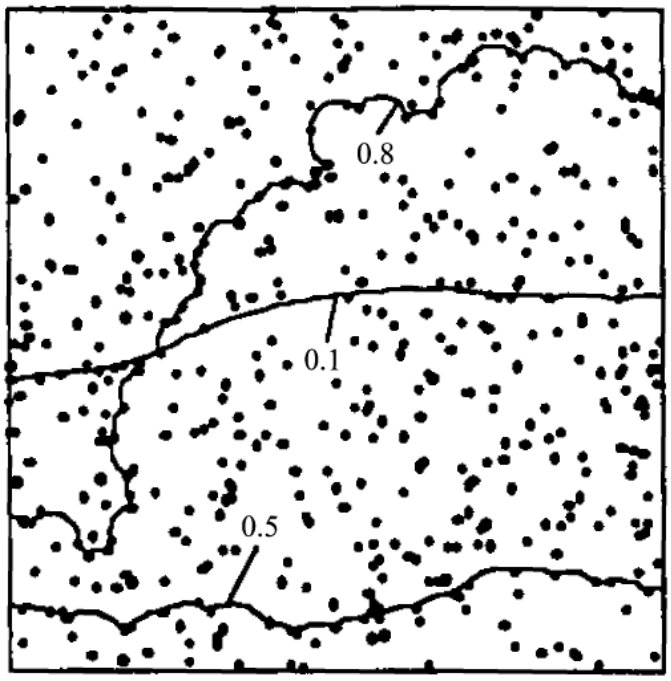
$$F_1 \ll F_2 \quad \text{with} \quad l_1 \ll l_2 .$$

1. Foreman
2. Makin
3. Kocks

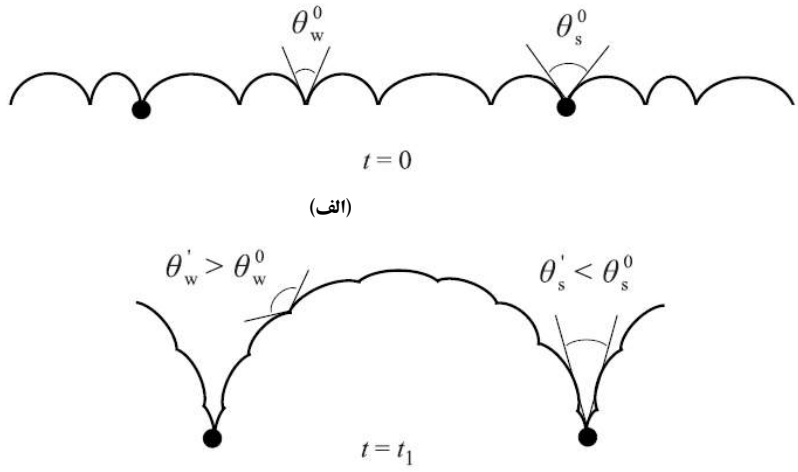
اگر یک بخش نابجایی تحت تنش اعمالی بین دو مانع قوی خمیده شود، آن نابجایی موانع بسیار ضعیف را در مسیرش قطع می‌کند. **بیش‌تر نابجایی در زوایه‌ی بزرگی بین خوشه‌های همسایه‌ی نابجایی در موانع ضعیف خمیده شده و نیروی کوچک‌تری (در یک تنش مشخص) وجود دارد به گونه‌ای که نابجایی برخلاف موانع ضعیف فشرده می‌شود.** به صورت هم‌زمان زاویه بین شاخه‌های همسایه‌ی نابجایی در موانع قوی کوچک‌تر می‌شود و نیروی فعال روی آن‌ها افزایش می‌یابد (شکل ۱۲-۱۰). حالت بحرانی زمانی فرا می رسد که نابجایی می‌تواند از بین موانع ضعیف و قوی به صورت هم‌زمان عبور کند. تنش لازم برای هل دادن نابجایی از بین این آرایش بحرانی برابر است با:

(۱۲-۱۰۰)

$$\sigma_a = \sigma_1 + \sigma_2 .$$



شکل ۱۲-۹. نتیجه‌ی شبیه‌سازی کامپیوتری از شکل خط نابجایی فقط قبل از تسلیم برای استحکام مانع (α) ۰٫۱، ۰٫۵ و ۰٫۸ [۱۵].



شل ۱۲–۱۰. تحرک نابجایی در میدان یک مانع شامل تعدای نابجایی ضعیف و اندکی نابجایی قوی (الف) قبل از اعمال تنش و (ب) بعد از حرکت نابجایی از بین تعدادی نابجایی ضعیف.

فیلم ۱۲–۲۱ فیلم زمان واقعی از برهم‌کنش بین نابجایی ـ عیب در طول کرنش‌گذاری نمونه‌ی مسی پرتودهی شده را نشان می‌دهد. نمونه با $^{+}$keV Kr ۲۰۰ تا یک مقدار پرتوگیری در حدود ^{۱۲}۱۰ i/cm^2 در دمای اتاق در IVEM در آزمایشگاه ملی آرگونه[1] پرتودهی شده است. عیوب غالباً مشتمل بر حلقه‌های فرانک با بردارهای برگرز $\frac{a}{3\langle 111\rangle}$ و یک دانسیته‌ی کمی از چهاروجهی‌های نقص در چیده شدن (۱۰٪) هستند. همان‌طوری‌که نشان داده شده است، نابجایی در یک شیوه‌ی نامنظم و متناوبی با بخش‌های بدون شکست از نقاط میخ‌کوب شده ویژه و هیچ‌گونه جذب عیب قابل ملاحظه‌ای حرکت می‌کند.

اگر هیچ‌گونه شرایط حدی همانند معادله‌ی ۱۲–۹۹ وجود نداشته باشد، از بین برداشتن حرارتی دو نوع از موانع باید برحسب فرایندهایِ به اصطلاح وابسته بررسی شود. برای چنین فرایندهایی زمان انتظار t_s (زمان میانگین که در طول آن یک نابجایی در برابر یک مانع از نوع s فشرده شده تا آن انرژی حرارتی لازم برای غلبه بر آن را به‌دست آورد)، عملیات جمع‌پذیری نظریه را مجاز کرده، در نتیجه زمانی که

1. Argonne National Laboratory

نابجایی برای حرکت در ناحیه‌ی معین نیاز دارد متناسب با $N_1t_1 + N_2t_2$ است. اگر $N_1t_1 >> N_2t_2$ باشد، تنش جاری مؤثر تقریباً فقط به وسیله‌ی مانع نوع ۱ تعیین می‌شود؛ مانع نوع ۲ برای نابجایی تحت تنش لازم برای غلبه بر مانع ۱ شفاف و گذرا است:

(۱۰۱-۱۲ الف)

$$\sigma_a \approx \sigma_1 \quad \text{for} \quad N_1t_1 \gg N_2t_2; \sigma_1 \gg \sigma_2$$

(۱۰۱-۱۲ ب)

$$\sigma_a \approx \sigma_2 \quad \text{for} \quad N_1t_1 \ll N_2t_2; \sigma_1 \ll \sigma_2 \ .$$

به این معنی است که اگر موانع نوع ۲ به یک غلظت ثابتی از موانع نوع ۱ اضافه شود، معادله‌ی ۱۰۱-۱۲ الف برای غلظت‌های پایین پیشنهاد می‌شود و معادله‌ی ۱۰۱-۱۲ ب برای غلظت‌های بالا از موانع نوع ۲ پیشنهاد می‌شود در نتیجه یک تحولی در تنش جاری مؤثر از σ_1 به σ_2 رخ می‌دهد. در موارد حدی غلظت‌های بسیار پایین یا بسیار بالا از موانع نوع ۲، تنش‌هایی که دو نوع از موانع ممکن است به صورت مجزا نیاز داشته باشند، تنش جاری مؤثر را تعیین خواهند کرد.

به صورت خلاصه، هنگامی که موانع استحکام مشابهی را داشته باشند قانون انطباق جذر مجموع مربعات، $\Delta\sigma_{yr} = \sqrt{\sum_i \left(\Delta\sigma_{y,i}\right)^2}$ به خوبی جواب می‌دهد، و قانون انطباق خطی $\Delta\sigma_{yl} = \sum_i \Delta\sigma_{y,i}$ هنگامی که استحکام‌ها مشابه نیستند، کارآمدتر است. اودته[1] [۱۶] نشان داد که سخت‌گردانی در یک ریزساختار مشتمل بر محدوده‌ی وسیعی از موانع با استحکام‌های مختلف بهترین انطباق به وسیله‌ی ترکیبی از مدل‌های جذر مجموع مربعات و جمع خطی، با یک عامل توزین S به صورت زیر به‌دست خواهد آمد:

(۱۰۲-۱۲)

$$(\sigma_y - \sigma_{yr}) = S(\sigma_{yl} - \sigma_{yr})$$

و S می‌تواند به صورت زیر به استحکام‌های موانع مرتبط شود:

1. Odette

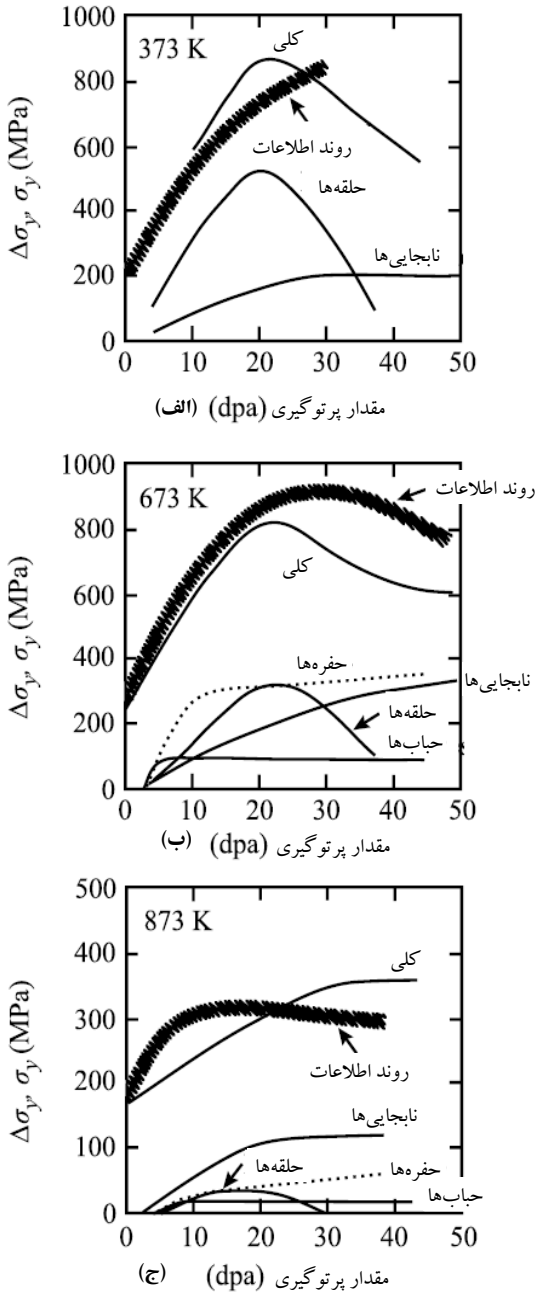
(۱۰۳-۱۲)

$$S \approx \alpha_s - 5\alpha_w + 3.3\alpha_s\alpha_w ,$$

به گونه‌ای که S = ۱ برای قانون جمع خطی و S =۰ برای قانون جذر مجموع مربعات است. مطابق با معادله‌ی ۱۲-۱۰۳، S با افزایش α_w (موانع ضعیف نیرومندمتر) و کاهش α_s (موانع قوی کم دوام‌تر)کاهش می‌یابد. قوانین انطباق برای سازوکارهای مختلف سخت‌گردانی در جدول ۱۲-۲ خلاصه شده است.

با استفاده از معادله‌های ۱۲-۸۰ و ۱۲-۷۵ روندهای مشاهده شده در وابستگی دما و مقدار پرتوگیری برای ρ_d و $\sqrt{Nd}$، و استحکام‌های موانع (α_{voids} = ۱/۰) در جدول ۱۲-۱ گزارش شده است. لوکاس[1] [۱۷] همان‌طوری‌که در شکل ۱۲-۱۱ نشان داده شده است سخت‌گردانی را به صورت تابعی از مقدار پرتوگیری برای سه دمای مختلف تخمین زد. درحالی‌که آن‌ها فقط پیش‌بینی هستند ولی برای نشان دادن سهم‌های نسبی در سخت‌گردانی ترکیب‌های ریزساختاری متفاوت به‌کار می‌روند. در فولادهای زنگ نزن، سخت‌گردانی دما پایین (۱۰۰ ^oC) به وسیله‌ی آسیب نقطه‌ی سیاه[2] و حلقه‌های کوچک در مقادیر پرتوگیری پایین و دانسیته‌ی شبکه در مقادیر پرتوگیری بالاتر کنترل می‌شود. بالای دمای ۴۰۰ ^oC، حفرات و حباب‌ها در سخت‌گردانی سهیم می‌شوند. در دماهای متوسط (نزدیک به ۳۰۰ ^oC)، سخت‌گردانی به علت ترکیب نقطه‌های سیاه، حلقه‌ها و حباب‌های هلیوم بیشینه است. در مقادیر پرتوگیری پایین، حفره‌ها و حلقه‌ها اکثر سخت‌گردانی را فراهم می‌کنند؛ اما در مقادیر پرتوگیری بالاتر، ریزساختار نابجایی منبع اصلی سخت‌گردانی می‌شود. این پیش‌بینی‌ها تا حدی از اطلاعات رآکتور آب سبک در تقریباً ۳۰۰ ^oC [۱۹] و حتی بالای ۴۰۰ ^oC [۲۰، ۲۱] متفاوت هستند که در آن بیشینه‌ای در سختی مشاهده نشده است. این احتمالاً به علت پایداری ریزساختار حلقه تا مقادیر پرتوگیری بالا در دماهای کم‌تر از ۴۰۰ ^oC است. در دماهای بالا (۶۰۰^oC)، سخت‌گردانی به وسیله‌ی نابجایی‌های شبکه کنترل می‌شود. سهم حفره‌ها در مقادیر پرتوگیری بسیار بالا می‌تواند قابل توجه باشد.

1. Lucas
2. Black dot damage



شکل ۱۲-۱۱. مقایسه‌ی پیش‌بینی‌های مدل‌ها از سهم در سخت‌گردانی از ریزساختارهای مختلف تا روند اطلاعات در (الف) ۱۰۰°C، (ب) ۴۰۰°C و (ج) ۶۰۰°C [۱۷].

۱۲-۲-۴ سخت‌گردانی در چند بلورها

در قسمت‌های قبل سخت‌گردانی فقط در تک بلورها مورد توجه قرار گرفت و هیچ محاسبه‌ای برای اثر مرزهای دانه در فلزات چند بلوری در نظر گرفته نشد. در چند بلورها [۱۳]، تنش جاری به وسیله‌ی تأثیر جهت‌گیری‌های مختلف دانه و مرزهای دانه افزایش می‌یابد. همان‌طوری‌که به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۲-۶۳ تشریح شد، تنش تسلیم کششی مطابق رابطه‌ی هال ـ پچ که به صورت $\sigma_y = \sigma_i + k_y d^{-\frac{1}{2}}$ تعیین می‌شود، وابسته به اندازه دانه، d است که σ_i تنش اصطکاکی و k_y تنش به حرکت در آوردن ناجایی از بین موانع است. عبارت k_y بر پایه‌ی این فرضیه است که باند لغزشی یک تمرکز تنش است و این‌که جریان پلاستیک بین دانه‌ها و در نتیجه سراسر جامد چند بلوری هنگامی رخ می‌دهد که تمرکز تنش ناشی از سپرگذاری نابجایی در مرزدانه برای فعال کردن منبع نابجایی در دانه‌ی همسایه کافی است. در مورد آهن، فولاد و مولیبدن اثر پرتودهی روی رابطه‌ی هال ـ پچ افزایش تنش اصطکاکی σ_i با اثر کمی روی k_y برای اندازه‌های دانه کوچک است. برای دانه‌هایی با اندازه‌ی بزرگ‌تر، نمونه‌ها افزایش بیش‌تری را در استحکام تسلیم متحمل می‌شوند که k_y را به مقدار تقریباً صفر کاهش می‌دهد (شکل ۱۲-۱۲).

دانسیته‌ی نابجایی در جامد تحت تغییر شکل پلاستیک به صورت خطی با کرنش، ε مطابق رابطه زیر افزایش می‌یابد:

$$\rho = \rho_0 + A\varepsilon \,, \qquad (۱۰۴-۱۲)$$

و

$$A = \beta / d \,, \qquad (۱۰۵-۱۲)$$

که β ثابت است و d قطر دانه است. از معادله‌ی ۱۲-۷۵ یادآوری می‌شود که استحکام تسلیم به وسیله‌ی رابطه‌ی $\sigma_y = \sigma_i + \mu b \rho_d^{1/2}$ با دانسیته‌ی نابجایی مرتبط است و با استفاده از معادله‌های ۱۲-۱۰۴ و ۱۲-۱۰۵ استحکام تسلیم می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

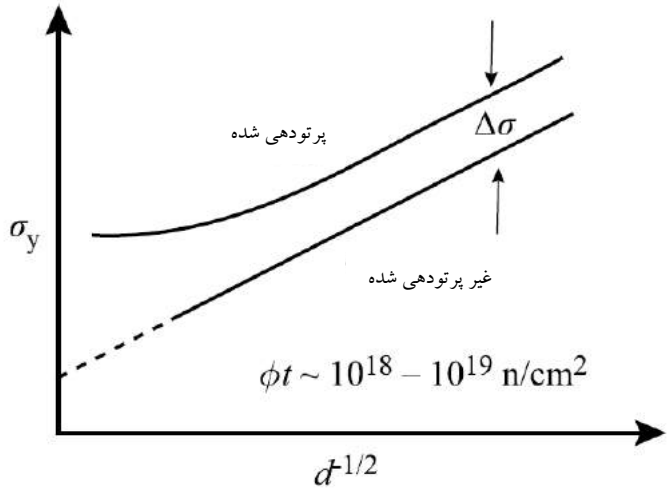
$$\sigma_y = \sigma_i + \mu b \left(\frac{\beta\varepsilon}{d}\right)^{1/2}, \qquad (۱۰۶-۱۲)$$

که معادل با معادله‌ی هال ـ پچ است:

$$k_y = \mu b(\beta\varepsilon)^{1/2}. \qquad (۱۰۷-۱۲)$$

جدول ۱۲-۲. قوانین انطباق برای سخت‌گردانی.

I	تنش‌های بلند دامنه و موانع کوتاه دامنه
	$\sigma_a = \sigma_{LR} + \sigma_{SR}$
II	دو نوع از موانع کوتاه دامنه
A	دو نوع قوی
	$l = \frac{1}{\sqrt{N_1 + N_2}}$
	$\sigma_a^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2$
B	بسیار ضعیف و اندکی قوی
	$F_1 < F_2; \quad l_1 < l_2$
	$\sigma_a = \sigma_1 + \sigma_2$
C	حرکت فعال شده‌ی حرارتی بر روی مانع
	$\sigma_a \approx \sigma_1$ for $N_1 t_1 \gg N_2 t_2;\ \tau_1 \gg \tau_2$
	$\sigma_a \approx \sigma_2$ for $N_1 t_1 \ll N_2 t_2;\ \tau_1 \ll \tau_2$
III	محدوده‌ی وسیعی از استحکام مانع
	$(\sigma_y - \sigma_{yr}) = S(\sigma_{yl} - \sigma_{yr})$
	$S \approx \alpha_s - 5\alpha_w + 3.3\alpha_s\alpha_w$

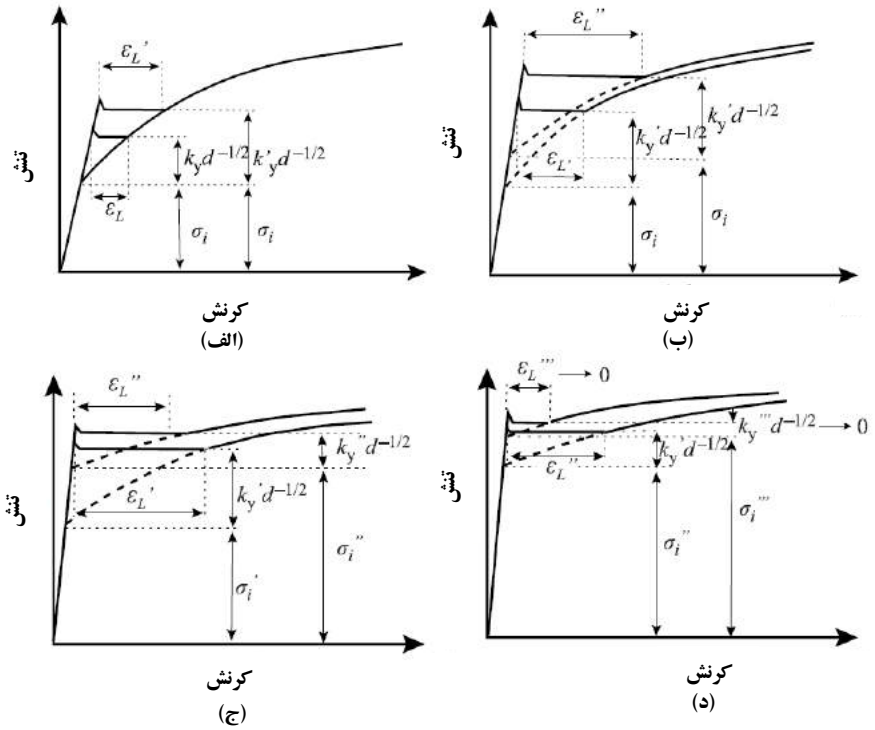


شکل ۱۲-۱۲. اثر پرتودهی روی رابطه‌ی هال ـ پچ برای فولاد فریتی [۱۳].

در این مدل سخت‌گردانی سرد، β اندازه‌ای از قابلیت سخت‌گردانی سرد به علت کاناله شدن نابجایی‌ها است. در فلزات پرتودیده هم‌چنان که β به علت اتلاف سخت‌گردانی کرنشی ناشی از کاناله شدن نابجایی، به صفر نزدیک می‌شود، عبارت $\beta\varepsilon/d$ خیلی کوچک شده و k_y به صفر نزدیک می‌گردد.

اطلاعات به‌دست آمده از فولاد کم آلیاژ Fe-Mn-C برای تشریح گسترش سخت‌گردانی تابشی با استفاده از ضرایب هال ـ پچ و به علاوه ضریب استحکام K و توان سخت‌گردانی کرنشی، n از قانون توانی معادله‌ی سخت‌گردانی استفاده می‌شودکه در معادله‌ی ۱۲-۲۷ مشخص شده است. چهار مرحله‌ی سخت‌گردانی تابشی در فولاد Fe-Cr-Mn با افزایش تصاعدی مقدار پرتوگیری در شکل ۱۲-۱۳ نشان داده شده است. مرحله‌ی A برای مقادیر پرتوگیری بسیار پایین ($۱۰^{۱۵}$ تا $۱۰^{۱۶}$ n/cm^2) رخ می‌دهد و یک افزایش در k_y و افزایش ناچیز در σ_i و عدم تغییر در n و K را به همراه دارد. نتیجه‌ی افزایش در نقطه‌ی تسلیم بالایی و کرنش لودر است. مرحله‌ی B در مقادیر پرتوگیری $۱۰^{۱۸}$ n/cm^2 رخ می‌دهد و افزایشی از σ_i و تغییر کمی در k_y را نشان می‌دهد. در این مرحله هم n و هم K کاهش می‌یابند که منجر به کاهش شیب منحنی تنش ـ کرنش و افزایش در کرنش لودر می‌شود. مرحله‌ی C در شارهای در حدود ۳×۱۰^{۱۸} n/cm^2 رخ می‌دهد و به وسیله‌ی افزایش پیوسته در σ_i و کاهش در k_y تشریح می‌شود. توان سخت‌گردانی کرنشی، n به صورت پیوسته کاهش می‌یابد؛

اما K به آرامی افزایش می‌یابد در نتیجه یک تغییر کوچک در شیب منحنی تنش ـ کرنش و یک کاهش کوچک در کرنش لودر ایجاد می‌شود. در مرحله‌ی D، σ_i به صورت پیوسته افزایش می‌یابد و k_y تا نزدیکی‌های صفر کاهش می‌یابد. هم‌چنین n و K نیز کاهش می‌یابند، در نتیجه کاهش بیش‌تری در شیب منحنی تنش ـ کرنش رخ داده و تقریباً کرنش لودر ناپدید می‌شود. اگرچه توضیح این اثرات پرتودهی روی رفتار تنش ـ کرنش منحصر به سیستم آلیاژی آهن است، تغییرات در عوامل σ_i و k_y با فهم موجود از برهم‌کنش‌های سخت‌گردانی مانعی، کاناله شدن نابجایی و اثرات اندازه دانه و طبیعت متغیر وابستگی سیلانی سخت‌گردانی تابشی در چند بلورها سازگار است. بنابراین به صورت آزمایشگاهی مشاهده شده است که k_y افزایش یا کاهش می‌یابد [۲۲] که پیشنهاد می‌کند که اثر اندازه دانه به خوبی در معادله‌ی ۱۲-۱۲ لحاظ نشده است.



شکل ۱۲-۱۳. تغییرات در منحنی های تنش ـ کرنش برای آهن پرتودهی شده در ۸۰ تا $100^{o}C$ تا مقدار پرتوگیری نوترونی (الف) $10^{16}\ n/cm^2$، (ب) $10^{18}\ n/cm^2$،(ج) $3\times10^{18}\ n/cm^2$، (د) $5\times10^{18}\ n/cm^2 <$ [۱۳].

۱۲-۲-۵ اشباع سخت‌گردانی تابشی

مطابق با مدل سخت‌گردانی موانع پراکنده معادله‌ی ۱۲-۸۰، افزایش در استحکام تسلیم، $\Delta\sigma_y$ به صورت $N^{1/2}$ افزایش می‌یابد. در غیاب سازوکارهایی برای تخریب موانع N متناسب با سیلان کلی است و از آن‌رو سخت‌گردانی تابشی متناسب با $(\phi t)^{1/2}$ است:

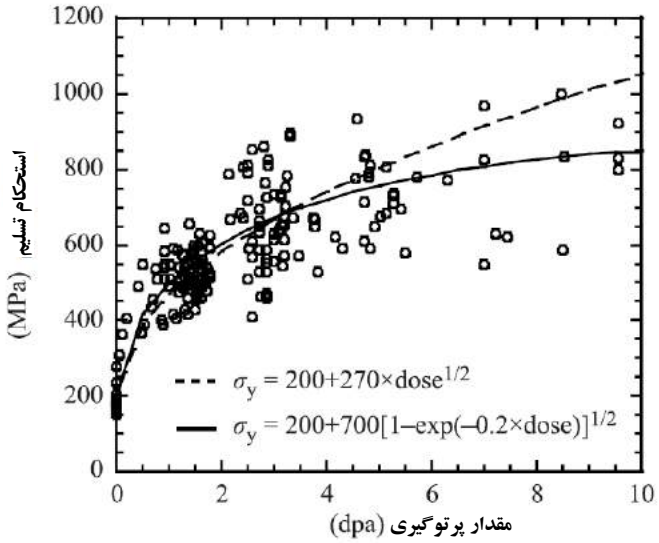
(۱۲-۱۰۸)

$$\Delta\sigma_S \propto (\phi t)^{1/2} .$$

یعنی تعداد موانع به صورت پیوسته و بدون محدودیت با جریان افزایش می‌یابد. این به وضوح معیاری برای مشاهدات ارزیابی ریزساختار نابجایی در دماهای رآکتور آب سبک، فصل ۷، است که در آن دانسیته‌ی حلقه‌ی نابجایی و اندازه با چندین dpa اشباع می‌شوند. به هرجهت در مقادیر پرتوگیری پایین، سخت‌گردانی توضیح داده شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۲-۱۰۸ به صورت معقولانه‌ای صحیح است. شکل ۱۲-۱۴ سخت‌گردانی تابشی در فولادهای زنگ نزن سری ۳۰۰ پرتودهی شده در دمای در حدود $300^{o}C$ و آزمایش شده در حدود دمای مشابه را نشان می‌دهد. قابل ذکر است که سخت‌گردانی می‌تواند در سراسر حدوداً ۵ dpa با وابستگی $(\phi t)^{1/2}$ کاملاً منطبق باشد. بنابراین مدل توضیح داده شده به وسیله‌ی معادله‌ی۱۲-۱۰۸ زمانی که فوق اشباع ریزساختاری نابجایی رخ می‌دهد، به وضوح سخت‌گردانی را بیش از حد برآورد خواهد کرد.

در ادامه‌ی تلاش‌ها برای محاسبه‌ی اشباع سخت‌شوندگی در مقادیر پرتوگیری بالا، ماکین[1] و مینتر[2] [۲۳] فرض کردند که اگر آبشار جابه‌جایی در مجاورت منطقه‌ی موجود یا خوشه رخ دهد، منطقه‌ی جدیدی تشکیل نمی‌شود. این منطقه‌ی ممنوعه حجمی برابر با V دارد. مطابق با این مدل، هم چنان که غلظت افزایش می‌یابد، تشکیل مناطق جدید سخت‌تر می‌شود زیرا حجم موجود برای تشکیل منطقه جدید کاهش می‌یابد.

1. Makin
2. Minter



شکل ۱۲-۱۴. اثر مقدار پرتوگیری روی استحکام تسلیم کششی اندازه‌گیری شده برای فولادهای زنگ نزن سری ۳۰۰ پرتودهی شده و آزمایش شده در دمای حدوداً $300^{o}C$ [۱۹].

نرخ زمانی تغییر دانسیته‌ی مناطق، N به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۱۰۹-۱۲)

$$\frac{dN}{dt} = \zeta \Sigma_s \phi \,(1 - VN) \ ,$$

که ζ تعداد مناطق ایجاد شده در برخورد نوترونی (~۱) است، Σ_s سطح مقطع پراکنش ماکروسکوپی است و ϕ شار نوترون سریع است. عبارت داخل پرانتز کسر حجمی جامد موجود برای ایجاد مناطق جدید را نشان می‌دهد. انتگرال معادله‌ی ۱۲-۱۰۹ برابر است با:

(۱۱۰-۱۲)

$$N = \frac{1}{V}\left[1 - \exp(-\zeta V \Sigma_s \phi t)\right] \ ,$$

و با جایگذاری معادله‌ی ۱۲-۱۰۶ در داخل معادله‌ی ۱۲-۸۰ می‌توان نوشت:

$$\Delta\sigma_y = A\left[1-\exp(-B\phi t)\right]^{1/2}. \qquad (۱۱۱-۱۲)$$

که $A=\alpha M\mu b\left(\frac{d}{V}\right)^{\frac{1}{2}}$، و $B = \zeta V\sum_s$ است. هیگی[1] و حامد[2] [۲۴] تعیین کردند که برای فولادهای زنگ نزن ۳۰۴، ۳۱۶ و ۳۴۷ بالای شارهای n/cm^2 ۱۰^۱۹×۵، افزایش سخت‌گردانی تابشی می‌تواند به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۲-۱۱۱ و با $B = ۲-۳ \times ۱۰^{-۲۱}\ cm^2/n$ تشریح شود. اودته[3] و لوکاس[4] [۲۵] دریافتند که این معادله‌ی مشابه، اطلاعات موجود برای سخت‌گردانی در فولادهای زنگ نزن سری ۳۰۰ پرتودهی شده و آزمایش شده در حدود $۳۰۰\ ^oC$، با $A \approx ۶۷۰\ MPa$ و $B \approx ۰/۵$ با ϕt در واحدهایی از dpa یا $B \approx ۷ \times ۱۰^{-۲۲}\ cm^2/n$ با ϕt در واحدهای از n/cm^2 و با فرض آن‌که $۱\ dpa \approx ۷ \times ۱۰^{۲۰}\ n/cm^2$ است را مناسب می سازد. قابل ذکر است که کاربرد معادله‌ی ۱۲-۱۱۱ با مقادیر مشابه A و B انطباق خوبی را بر اطلاعات موجود در شکل ۱۲-۱۴ فراهم می‌کند. بمت[5] [۲۶] دریافت که برای زیرکولوی ۲، در ۲۸۰ درجه‌ی سانتی‌گراد، $B = ۲/۹۹ \times ۱۰^{-۲۱}\ cm^2/n$ است.

معمولاً توان‌های جریان کم‌تر از ۰/۵ هستند. یاسون[6] [۲۷] در تحلیل یک پایگاه داده بزرگ شامل چندین فولاد زنگ نزن دریافت که افزایش استحکام تسلیم در $۲۸۰\ ^oC$ وابستگی شاری به شکل زیر را دنبال می‌کند:

$$\Delta\sigma_y = a(\phi/10^{20})^b, \qquad (۱۱۲-۱۲)$$

که

- برای فولاد زنگ نزن ۳۰۴ و ۳۰۴L، $a \sim ۲/۰۵$ و $b = ۰/۱۲۴$،
- برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶، $a = ۰/۵۹۵$ و $b = ۰/۴۹۱$،
- برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶L، $a = ۰/۵۱۷$ و $b = ۰/۵۶۲$،

1. Higgy
2. Hammad
3. Odette
4. Lucas
5. Bement
6. Eason

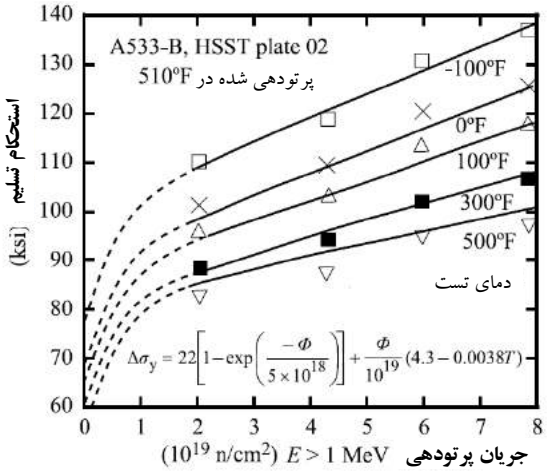
- برای فولاد زنگ نزن ۳۴۷، a = ۱٫۶۲۷ و b = ۰٫۱۲۴.

ویلیامز[1] و هانتر[2] [۲۱] یک شکل اصلاح شده‌ای از معادله‌ی ۱۲-۱۱۱ را مورد استفاده قرار دادند:

(۱۲-۱۱۳)

$$\Delta\sigma_y = A\left[1 - \exp(-B\phi t)\right] ,$$

تا سخت‌گردانی در ورقه‌ی فولادی A533-B را با استفاده از A = ۲۲ ksi (۱۵۲ MPa) و B = ۲ × ۱۰$^{-19}$ cm^2/n مناسب سازند(شکل ۱۲-۱۵).



شکل ۱۲-۱۵. اثر جریان پرتودهی روی استحکام تسلیم فولاد A533-B برای دماهای مختلف آزمایش. منحنی‌ها بر افزایش استحکام تسلیم تعیین شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۲-۱۱۳ منطبق شده‌اند [۲۸].

اشباع هنگامی رخ می‌دهد که تعادل بین ایجاد و تخریب موانع برقرار می‌شود. حلقه‌های بین‌نشینی و جای خالی از خوشه‌های عیب تشکیل می‌شوند. حلقه‌های بین‌نشینی هم‌چنان که تعدادشان افزایش می‌یابد، از لحاظ اندازه رشد می‌کنند. به هرجهت، حلقه‌های جای خالی در کل ناپایدارند و در نتیجه‌ی نشر جای خالی منقبض می‌شوند. حلقه‌های بین‌نشینی به وسیله‌ی بی‌نقص شدن حذف می‌شوند. در

1. Williams
2. Hunter

نتیجه فرمول‌بندی دیگری برای تعداد موانع همراه با عمر، τ این عیوب [۲۹] وجود دارد که در آن دانسیته‌ی عیوب باید مطابق رابطه‌ی زیر گسترش یابند:

(۱۱۴-۱۲)

$$\frac{dN}{dt} = \zeta \Sigma_s \phi - \frac{N}{\tau} ,$$

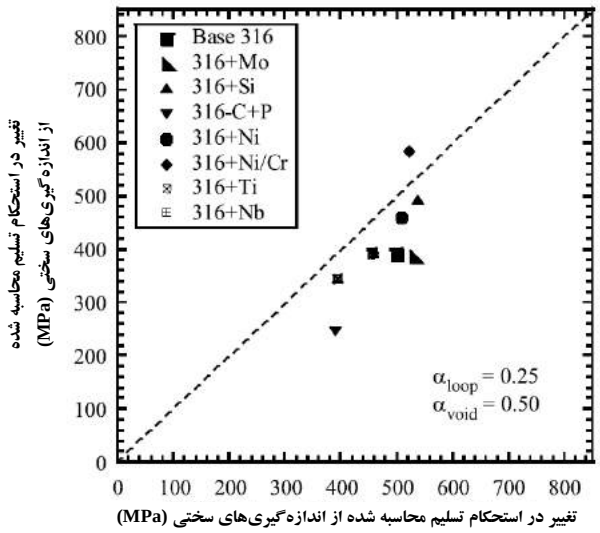
که حلی به شکل زیر دارد:

(۱۱۵-۱۲)

$$N = \zeta \Sigma_s \phi \, \tau [1 - \exp(-t/\tau)] .$$

۱۲-۲-۶ مقایسه‌ی سخت‌گردانی اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده

مدل سخت‌گردانی موانع پراکنده به سخت‌گردانی تابشی آلیاژها در چندین سیستم اعمال شده است. اکثر کاربردهای موفق در مورد فولادهای زنگ نزن آستنیتی و برای ریزساختارهای پرتودیده که به وسیله‌ی حلقه‌ها کنترل می‌شوند، است. شکل ۱۲-۱۶ رابطه‌ی بین استحکام تسلیم اندازه‌گیری شده و محاسبه شده برای یک سری از آلیاژهای محلول جامد را نشان می‌دهد، که تمامی آن‌ها از آلیاژ پایه با ترکیب Fe-18Cr-12Ni-1Mn مشتق شده‌اند و در تک عنصر اضافه شده به آلیاژ متفاوت هستند. آلیاژها با پروتون‌هایی با انرژی ۳٫۲ MeV در دمای ۳۶۰°C تا یک مقدار پرتوگیری ۵٫۵dpa پرتودهی شده‌اند و ریزساختارها به وسیله‌ی TEM بررسی شده‌اند. اندازه‌ی حفره و حلقه و دانسیته برای هر آلیاژ تعیین شده است. فقط آلیاژ پایه‌ی زنگ‌نزن ۳۱۶، ۳۱۶ + Mo و ۳۱۶ + Ni/Cr حاوی حفره هستند. اندازه‌گیری‌های استحکام تسلیم در شکل ۱۲-۱۶ در واقع از اندازه‌گیری‌های ریزسختی (بحث شده در قسمت ۱۲-۲-۸) و مقادیر سختی محاسبه شده از مدل سخت‌گردانی موانع پراکنده، معادله‌ی ۱۲-۸۰ تعیین شده‌اند. در این مورد، α = ۰٫۲۵ برای حلقه‌ها و α = ۰٫۵ برای حفره‌ها بهترین انطباق با اطلاعات را تولید می‌کنند.



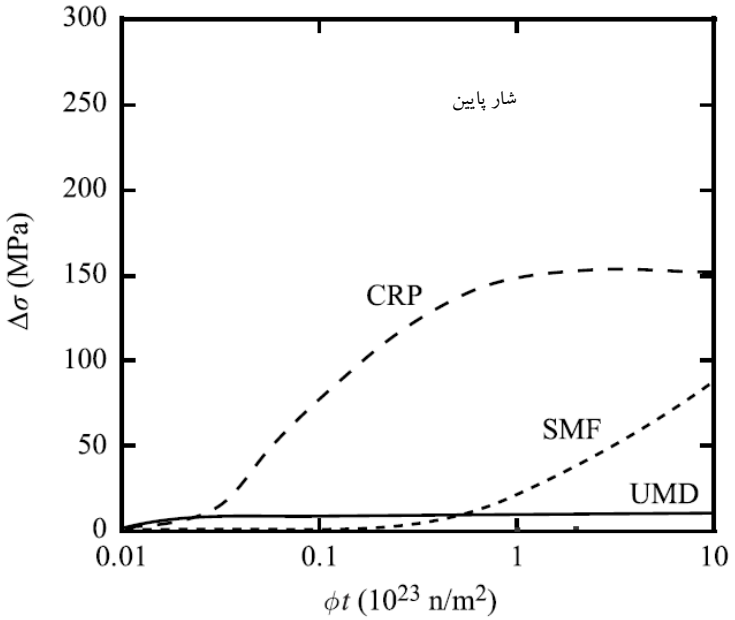
شکل ۱۲-۱۶. هم‌بستگی بین استحکام تسلیم اندازه‌گیری شده و محاسبه شده با استفاده از معادله‌ی ۱۲-۸۰ [۳۰].

استحکام حلقه ۰٫۲۵ با آن‌چه در مقالات [۳، ۱۳، ۱۷، ۳۱، ۳۲، ۳۳، ۳۴] مشاهده شده است، سازگار است. مقادیر α بالاتر از ۰٫۵ برای حلقه‌ها از اطلاعات استحکام‌دهی استنباط شده است [۳۵]. مقدار α برای حفره‌ها (۰٫۵) نصف مقدار تئوری برای استحکام‌دهی اورامان است. به هرجهت، آندو[1] و همکارانش [۳۶] نشان دادند که برش حفره بسیار شبیه به مانع‌گذاری اوراوان است که یک مقدار α = ۰٫۵ را از ۰٫۱ نتیجه می‌دهد. آن‌ها نتیجه گرفتند که مقادیر بالای α مشاهده شده در بعضی از آزمایش‌ها احتمالاً ناشی از تجمع حفره‌ی رسوب است. بررسی‌های انجام شده با میکروسکوپ الکترونی مشخص کرده است که حباب‌ها و رسوبات MC، در فولادهای زنگ نزن آستنیتی جوانه زده و به همراه یک‌دیگر رشد می‌کنند [۳۷]. کلی[2] [۳۸] نشان داد که سخت‌گردانی از مورد مانع تکی، ناشی از دو کره در تماس است و رابطه‌ی زیر را برای جفت حباب ـ رسوب استخراج کردند:

$$\Delta\sigma_{\text{bubble-ppt}} = \frac{0.16M\mu b\sqrt{Nd}}{1-\frac{\sqrt{6}}{3}\sqrt{Nd}}\ln\left(\frac{\sqrt{6}d}{3b}\right) . \qquad (۱۱۶-۱۲)$$

1. Ando
2. Kelly

سخت‌گردانی در فولادهای فریتی مورد استفاده در مخازن تحت فشار رآکتور، به علت نقش عناصر حل شونده‌ای مانند مس، نیکل و منگنز و اثرات دما و شار پرتودهی بسیار پیچیده است. سخت‌گردانی در فولادهای RPV به وسیله‌ی تکامل دو دسته‌ی اولیه از ترکیب‌های فوق ریز: رسوبات غنی از مس (CRP) و ترکیب زمینه (MF) کنترل می‌شود [۳۹]. ترکیب زمینه می‌تواند به ترکیب‌های زمینه‌ی ناپایدار (UMF) و ترکیب‌های زمینه‌ی پایدار (SMF) تقسیم شود به گونه‌ای که MF=UMF+SMF است. رسوبات غنی از مس از یک محلول جامد فوق اشباع به منزله‌ی نتیجه‌ای از افزایش نفوذ تابشی تشکیل می‌شوند. این رسوبات بی‌نهایت کوچک هستند و بهترین توصیف از آن‌ها به صورت عیوب نانو ابعاد است که به مقدار زیادی در سخت‌گردانی شرکت می‌کنند (شکل ۱۲-۱۷). رسوبات غنی از مس ترکیب غالب فولادهای پرتودهی شده RPV را تشکیل می‌دهند که مقدار مس بالاتر از حدود ۰٫۱٪ دارند. اندازه و کسر حجمی آن‌ها با مقدار مس بالای تقریباً ۱٪ افزایش می‌یابد؛ اما عدد دانسیته‌ی آن‌ها در محدوده‌ی ۰٫۲ تا ۰٫۴٪ نسبتاً به مقدار مس غیرحساس است. به این لحاظ اهمیت آن‌ها در سخت‌گردانی تا حدود ۰٫۲۵ تا ۰٫۳۵٪ مس افزایش می‌یابد [۱۶]. رسوبات غنی از مس هم‌چنین می‌توانند وابسته به مقدار این عناصر حل شونده در فولاد، در Ni و Mn افزایش یابند.



شکل ۱۲-۱۷. مؤلفه‌های ریزساختاری سهیم در سخت‌گردانی فولاد فریتی مخزن تحت فشار [۴۰].

ترکیب‌های زمینه‌ی پایدار به خوبی شناخته نشده‌اند؛ اما احتمالاً شامل یک گستره‌ای از ترکیب‌های خوشه عیب ـ عناصر حل شونده هستند که ماهیت دقیق آن‌ها وابسته به متغیرهای متالوژیکی و شرایط پرتودهی است. فسفیدها، کربونیتریدها، فازهای غنی از منگنز، خوشه‌های بزرگ جای خالی و حلقه‌های بین‌نشینی غیرمتحرک احتمالاً مواری از ترکیب‌های زمینه‌ی پایدار هستند. این ترکیبات به علت سخت‌گردانی پسماند در فولادهایی با مقدار مس کم مورد توجه قرار می‌گیرند. ترکیب‌های زمینه ناپایدار در طول پرتودهی یک بازیابی را متحمل می‌شوند و احتمالاً شامل خوشه‌های کوچک جای خالی و بین‌نشین هستند که به صورت مستقیم در آبشارهای جابه‌جایی تولید شده‌اند.

افزایش در استحکام تسلیم در فولادهای RPV به علت پرتودهی می‌تواند به صورت زیر توضیح داده شود[۴۱]:

(۱۱۷–۱۲)

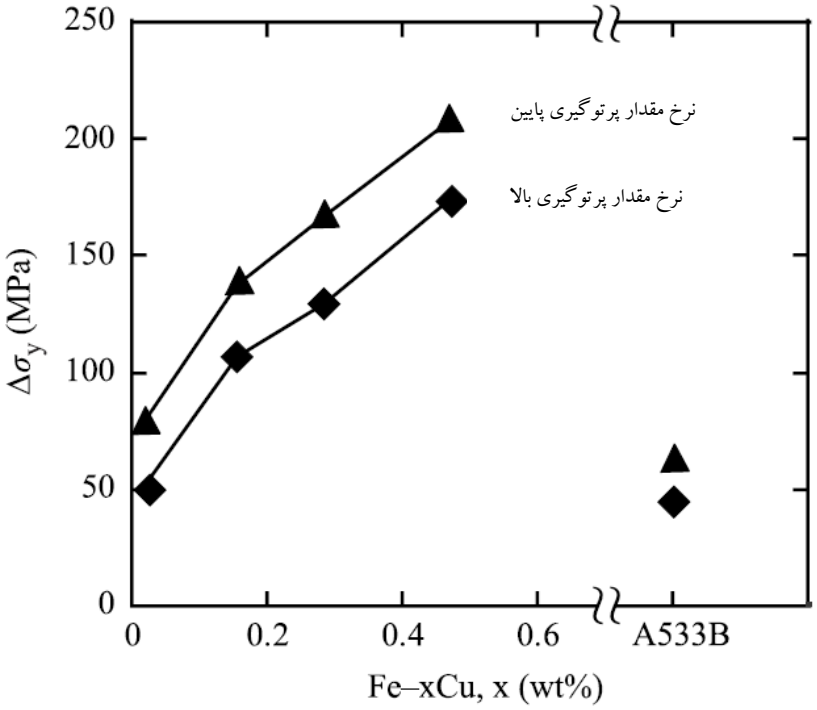
$$\Delta\sigma_{\mathrm{y}} = \Delta\sigma_{\mathrm{yp}} + B\sqrt{\phi t}\ ,$$

که $\Delta\sigma_{\mathrm{yp}}$ سهم ناشی از رسوبات غنی از مس است و $B\sqrt{\emptyset t}$ سهم ناشی از ترکیب‌های زمینه‌ی پایدار است. ضریب B در عبارت دوم وابستگی ترکیبی سخت‌گردانیِ ناشی از ترکیب‌های زمینه‌ی پایدار را دربر می‌گیرد و بین فولادها بسیار متغیر است. اودته و همکارانش [۴۱] وابستگی ترکیبی B برای فولادهای کم مس (۰٫۱٪ >) را شناسایی کردند به صورتی که:

(۱۱۸–۱۲)

$$B = 681\mathrm{P} + 460\mathrm{Cu} + 10.4\mathrm{Ni} + 10.7\mathrm{Mn} - 10[\mathrm{MPa}]\ .$$

شکل ۱۲–۱۸ وابستگی بسیار قوی سخت‌گردانی را به مقدار مس نشان می‌دهد، که اثر عمیقی را روی فولادهای RPV و جوش‌ها دارد.



شکل ۱۲–۱۸. تأثیر مس روی سخت‌گردانی آلیاژهای فولادی فریتی [۴۲].

نرخ مقدار پرتوگیری، افزایش استحکام تسلیم را از طریق عبارت $\Delta\sigma_{yp}$ تحت تأثیر قرار می‌دهد. اودته [۴۱] نشان داد که نرخ‌های بالای پرتوگیری، استحکام تسلیم را به جریان‌های بالاتر (شکل ۱۲–۱۹ الف) در ناحیه‌ی جلوی قسمت صاف منحنی منتقل می‌کند. عبارت رسوبات غنی از مس می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۱۱۹–۱۲)

$$\Delta\sigma_{yp}(\phi t_e) = \Delta\sigma_{ypm}\sqrt{X}\ ,$$

که $\Delta\sigma_{ypm}$ مقدار شرایط پایدار سخت‌گردانی (که نسبتاً به نرخ مقدار پرتوگیری غیرحساس است) است، ϕt_e جریان مؤثر است که به صورت $\phi t_e \approx \phi t\left(\frac{\phi_r}{\phi}\right)^{1/2}$ تعریف می‌شود، و ϕ_r جریان مرجع است.

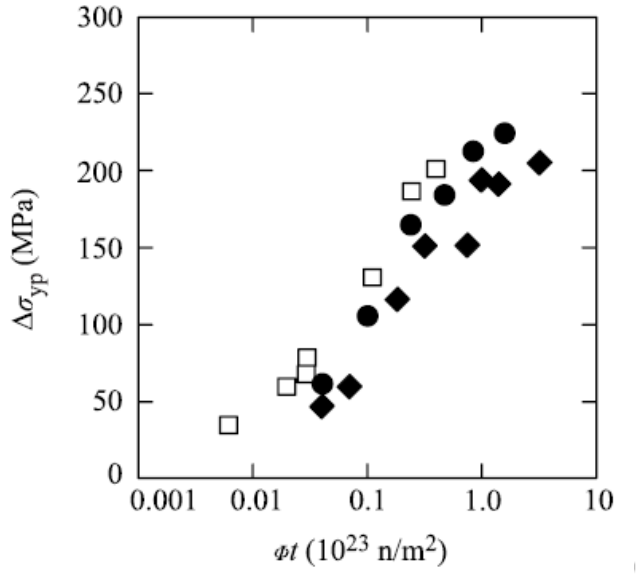
عبارت X به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۱۲۰-۱۲)

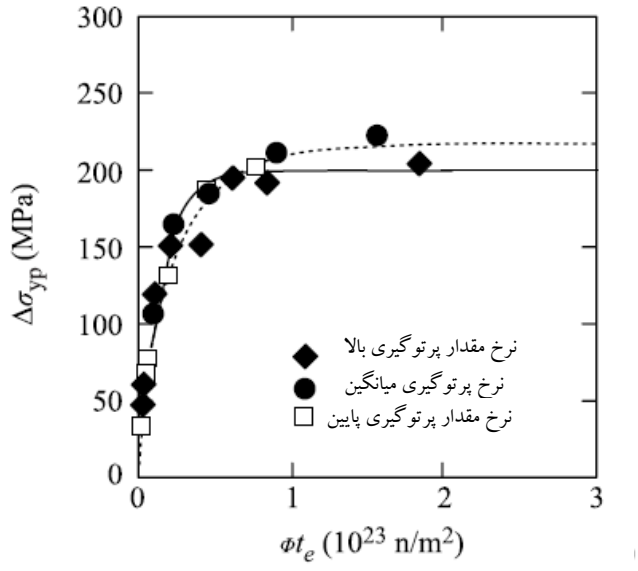
$$X = \left\{1 - \exp\left[-(F\phi t_e)^{\beta}\right]\right\} ,$$

که F و β ضرایب تطبیق هستند. نتیجه به این صورت است که سهم رسوبات غنی از مس در استحکام تسلیم می‌تواند به صورت یک تابعی از ϕt_e (شکل ۱۲-۱۹ب) بیان شود که نشان می‌دهد که افزایش رسوبات غنی از مس می‌تواند با استفاده از جریان مؤثر محاسبه شود.

تلاش‌ها برای اعمال مدل سخت‌گردانی موانع پراکنده برای پیش‌گویی در فولادهای فریتی ـ مارتنزیتی پرتودهی شده با موفقیت‌های کمی همراه بوده است زیرا در کل نتایج از مقادیر اندازه‌گیری شده با یک مقدار قابل توجهی کم‌تر است [۴۳، ۴۴].

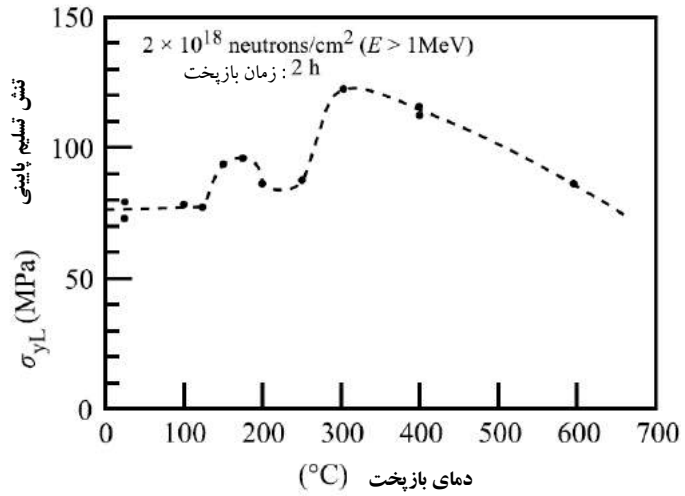


(الف)



(ب)

شکل ۱۲–۱۹. سخت‌گردانی یک فولاد بینیتی نوع A533B حاوی ۰٫۴٪ مس و ۱٫۲۵٪ نیکل بعد از پرتودهی در ۲۹۰°C (الف) به علت رسوبات غنی از مس بر حسب جریان و (ب) به علت رسوبات غنی از مس بر حسب جریان مؤثر [۱۴].



شکل ۱۲-۲۰. سخت‌گردانی بازپختی تابشی در نیوبیوم حاوی wppm ۳۵ کربن، wppm ۴۱ اکسیژن و wppm ۵ نیتروژن متعاقب پرتودهی تا ۲×۱۰^{۱۸} n/cm^2 و بازپخت برای ۲ ساعت. استحکام تسلیم غیر پرتودهی تقریباً MPa ۴۰ است [۴۶].

۱۲-۲-۷ سخت‌گردانی بازپختی تابشی

متعاقب پرتودهی، یک سازوکار سخت‌گردانی اضافه در بازپخت فلزات bcc رخ می‌دهد و به منزله‌ی سخت‌گردانی بازپختی تابشی شناخته می‌شود (RAH)[۴۵]. شکل ۱۲-۲۰ استحکام تسلیم را به صورت تابعی از دمای بازپخت بعد از پرتودهی نیوبیوم حاوی wppm ۳۵ کربن، wppm ۴۱ اکسیژن و wppm ۵ نیتروژن تا ۲×۱۰^{۱۸} n/cm^2 نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که سخت‌گردانی در دمای ۱۲۰^{o}C شروع شده و قبل از کاهش در حدود دمای ۱۸۰^{o}C به مقدار بیشینه می‌رسد. به هرجهت بیشینه‌ی دومی در سخت‌گردانی در دمای ۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد قبل از سقوط استحکام تسلیم به علت بازیابی ظاهر می‌شود. این بیشینه‌ها در سختی به ناخالصی‌های اکسیژن و کربن در فلز نسبت داده می‌شود. مشخص شده است که ناخالصی‌های بین‌نشینی استحکام تسلیم فلزات bcc را افزایش می‌دهند. در حالت پرتودهی شده، عیوب تولید شده در اثر تابش به جای مراکز به دام‌اندازی برای ناخالصی‌های بین‌نشینی عمل می‌کنند. بازپخت، مهاجرت بین‌نشین‌ها به خوشه‌های عیب را ممکن می‌سازد که منجر به تشکیل ترکیب‌های ناخالصی ـ عیب یا استحکام‌دهی خوشه‌های عیب موجود می‌شود که هر دو پدیده در شکل موانعی برای حرکت لغزشی نابجایی‌ها هستند.

در مثال نشان داده شده در شکل ۱۲-۲۰، بیشینه‌ی اول ناشی از مهاجرت اکسیژن به خوشه‌های عیب است و بیشینه‌ی دوم ناشی از مهاجرت کربن است. اندازه‌گیری‌های تغییر در مقاومت ویژه با زمان در دما می‌تواند برای تعیین انرژی فعال‌سازی برای تغییر مقاومت ویژه مورد استفاده قرار گیرد که سپس می‌تواند با انرژی فعال‌سازی برای نفوذ ناخالصی‌ها برای تعیین خصوصیات آن‌ها مقایسه شود. در نیوبیوم، وانادیوم و آلیاژهای آهنی عامل اصلی مسئول برای سخت‌گردانی بازپختی تابشی اکسیژن، کربن و نیتروژن هستند.

۱۲-۲-۸ هم‌بستگی بین سختی و استحکام تسلیم

اکثر اطلاعات در مورد سخت‌گردانی از اندازه‌گیری‌های ایجاد فرورفتگی (دندانه‌گذاری یا سختی‌سنجی) یا منگنه برشی نمونه‌های پرتودهی شده به‌دست می‌آید. روش‌های دندانه‌گذاری شامل ریزسختی سنجی ویکرز و دندانه‌گذاری توپی است. روش ریزسختی سنجی ویکرز از یک فرورونده الماسه هرمی‌شکل استفاده می‌کند که با یک پیش بار مشخص در نمونه فشار داده می‌شود (شکل ۱۲-۲۱ الف). شکل تورفتگی و بزرگی بار، مقدار سختی را تعیین می‌کند که یک اندازه‌ای از مقاومت جامد در برابر تغییر شکل یا سختی است. آزمون منگنه برشی یک عملیات صفحه بری[1] است که در آن یک منگنه‌ی صاف در یک نرخ ثابت s در یک صفحه‌ی گرد به اندازه نمونه میکروسکوپ الکترونی عبوری حرکت داده می‌شود. این صفحه‌ی گرد در طول هر دو صفحه بالایی و پایینی در نگه‌دارنده نمونه فشرده می‌شود. بار روی منگنه به صورت تابعی از جابه‌جایی نمونه اندازه‌گیری می‌شود که برابر با جابه‌جایی فک دستگاه است. تسلیم و بیشینه‌ی بار از منحنی بار منگنه برحسب جابه‌جایی منگنه تعیین می‌شوند. تمام این روش‌ها مزیت‌هایی برای تست کشش دارند زیرا این روش‌ها ساده و سریع هستند، حجم بسیار کمی از مواد پرتودیده را نیاز دارند و در مورد دندانه‌گذاری سختی‌سنجی، با پرتودهی یونی که آسیب محدود به ناحیه‌ی سطحی می‌شود سازگار هستند. در هر صورت از آن‌جایی که سخت‌گردانی در کل به علت ریزساختار پرتودیده به صورت افزایش در تنش تسلیم تعریف می‌شود، تمایل زیادی وجود دارد که اندازه‌گیری‌های سختی را به منظور افزایش سودمندی آن‌ها به استحکام تسلیم ارتباط دهند.

1. Blanking

همان‌طوری‌که در اصل به وسیله‌ی تابور[1] [۴۸] تشریح شد، دندانه‌گذاری‌های ایجاد شده در طول آزمایش‌های سختی به صورت اثرات دایمی قابل تشخیص هستند، در نتیجه دندانه‌گذاری باید در اصل یک اندازه‌ای از ویژگی‌های پلاستیک فلز باشد. این درست است که هنگام حذف فرورونده تغییرکمی در شکل و اندازه رخ می‌دهد؛ اما اثر مهم‌تر جریان پلاستیکی فلز اطراف سر فرورونده است، که ایجاب می‌کند که فشار متوسط بر فرورنده بیش‌تر مرتبط با ویژگی‌های پلاستیک نمونه از ویژگی‌های کشسان است. تابور [۴۸] بر پایه‌ی کارهای پراندتل[2] [۴۹] و هنکی [۵۰] نشان داد که این در واقع حالتی برای آزمون‌های مختلف سختی و خراش است، و اندازه‌گیری‌های سختی می‌تواند برای اندازه‌ای از تنش تسلیم فلز استفاده شود.

در طول دندانه‌گذاری، تنش از طریق یک سر فرورونده به سطح فلز اعمال می‌شود. به هرجهت، از آن‌جایی که سطح سر فرورونده موازی با سطح نمونه نیست، حالت تنش در طول دندانه‌گذاری صرفاً فشاری نیست و در واقع تنش‌ها باید در دو بعد بررسی شوند (در طول و عمود بر محور سر فرورونده). تغییر شکل پلاستیک در طول دندانه‌گذاری هنگامی رخ می‌دهد که آستانه‌ی هابر ـ میزز[3] فرا رسد. در مورد دو بعد، هنگامی که بیشینه‌ی تنش برشی به مقدار بحرانی k برسد رخ می‌دهد:

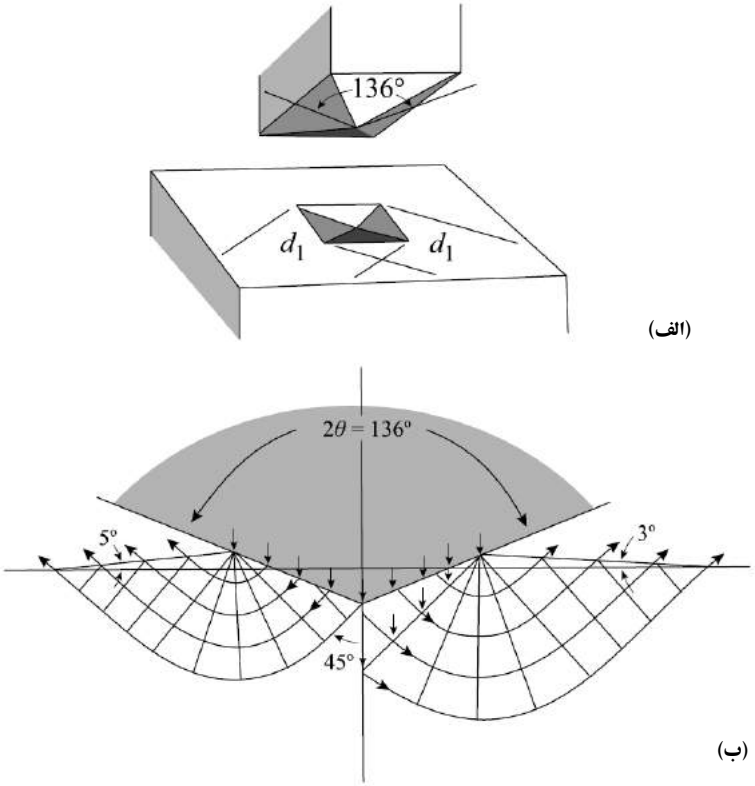
(۱۲۱-۱۲)

$$2k = 1.15\sigma_y ,$$

که σ_y تنش تسلیم است.

شکل هرمی سر فرورونده می‌تواند به جای یک گوه در طول دندانه‌گذاری بررسی شود. الگوی شار پلاستیکی اطراف سر فرورونده در طول دندانه‌گذاری می‌تواند با استفاده از حل پراندتل[4] تعیین شود [۴۹]. الگوی سیلان به صورت شماتیک در شکل ۱۲-۲۱ب برای فرورونده ویکرز نشان داده شده است.

1.Tabor
2. Prandtl
3. Huber–Mises
4. Prandtl



شکل ۱۲-۲۱. نمایش (الف) سر هرمی الماسه استفاده شده در اندازه‌گیری‌های ریزسختی سنجی ویکرز و اثر سر فرورونده در نمونه، و (ب) الگوی سیلان در طول دندانه‌گذاری ویکرز یک فلز [۴۷].

فشار عمود بر سطح سر فرورونده، P می‌تواند به صورت زیر محاسبه شود:

(۱۲۲-۱۲)

$$P = 2k(1 + \pi/2)\,.$$

معادله‌های ۱۲-۱۲۱ و ۱۲-۱۲۲ می‌تواند به صورت زیر با یک‌دیگر ترکیب شوند:

(۱۲۳-۱۲)

$$P = 2k(1 + \pi/2) = 1.15\sigma_y(1 + \pi/2) = 2.96\sigma_y\,.$$

برای یک فرورونده ویکرز:

(۱۲۴-۱۲)

$$H_v \equiv \frac{\text{load}}{\text{contact area}} = 0.927P ,$$

که ۰٫۹۲۷ نسبت مساحت پایه‌ی هرم (برد طی شده) به مساحت وجوح هرم (مساحت تماس) است. با ترکیب معادله‌های ۱۲-۱۲۳ و ۱۲-۱۲۴ می‌توان نوشت:

(۱۲۵-۱۲)

$$H_v = 0.927P = 0.927 \times 2.96\sigma_y = 2.74\sigma_y .$$

با نوشتن این عبارت برحسب استحکام تسلیم رابطه‌ی زیر به‌دست می‌آید:

(۱۲۶-۱۲)

$$\sigma_y = CH_v ,$$

که برای σ_y و H_v در واحدهای kg/mm^2، C = ۰٫۳۶۴ است و برای σ_y در واحد MPa و H_v در واحد kg/mm^2، C = ۳٫۵۵ است.

تابور به صورت آزمایشگاهی برای فلزات مختلف (آلومینیوم، مس و فولاد نرم) نتایج مشابهی را به‌دست آورد. اخیراً لارسون[1] [۵۱] آزمون‌های دندانه‌گذاری را به صورت نظری و عددی مورد مطالعه قرار داده است. به ویژه، وی تحلیل جزء محدود را برای بررسی رفتار کشسان ـ پلاستیک مواد تحت موقعیت‌های تماسی تیز (نانو فرورونده‌ها، فرورونده‌های ویکرزی یا مخروطی، یا حتی تماس چرخ دنده) استفاده کرد. نتایج جزء محدود لارسون در توافق خوبی با نتایج تابور بود که ادعاهای قابلیت تعیین تنش تسلیم از اندازه گیری های سختی ویکرز را تأیید می‌کند.

1. Larsson

بوسبی[1] و همکارانش [۵۲] رابطه‌های موجود را دوباره بررسی کردند و اطلاعات سختی فولادهای زنگ نزن آستنیتی و فولادهای فریتی را برای تعیین عملی هم‌بستگی بین سختی و استحکام تسلیم گردآوری کردند. آن‌ها دریافتند که فولادهای زنگ نزن آستنیتی در کل رابطه‌ی زیر را دنبال می‌کنند:

$$\Delta\sigma_y = 3.03 H_v \,, \qquad (۱۲۷-۱۲)$$

و فولادهای فریتی از رابطه‌ی زیر تبعیت می‌کنند:

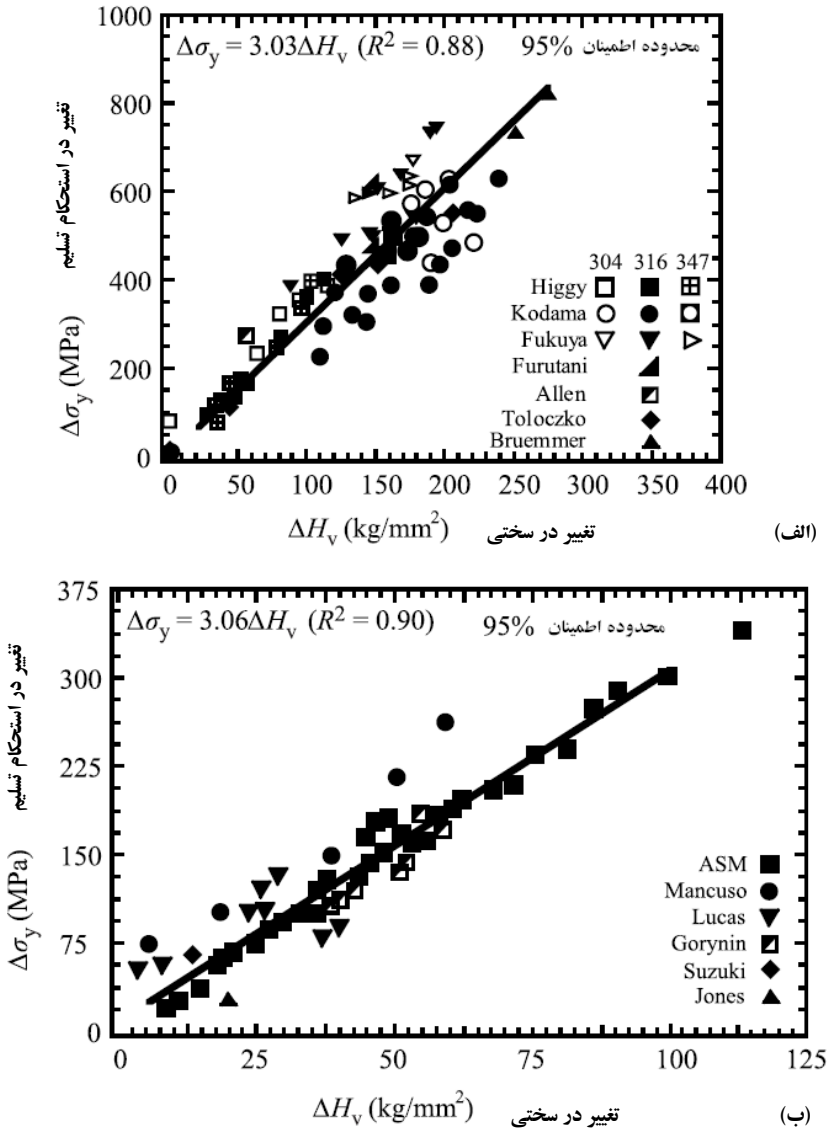
$$\Delta\sigma_y = 3.06 H_v \,. \qquad (۱۲۸-۱۲)$$

شکل‌های ۱۲-۲۲ الف، ب این هم‌بستگی‌ها را برای دو دسته از فولادها نشان می‌دهد. هم‌بستگی‌ها بی‌نهایت نزدیک هستند و می‌توانند برابر با یک‌دیگر در نظر گرفته شوند. درحالی‌که مجموعه‌ی داده‌ها با یک رابطه‌ی خطی منطبق می‌شوند، نویسندگان پیشنهاد کردند که برای فولادهای زنگ نزن آستنیتی نشانه‌هایی از کاهش در شیب با افزایش مقدار سختی وجود دارد. انطباق دو شیبی نتیجه می‌دهد که:

$$\begin{aligned} \Delta\sigma_y &= 3.63\Delta H_v \quad \Delta H_v < 100\,\mathrm{kg/mm^2} \\ \Delta\sigma_y &= 2.13\Delta H_v \quad \Delta H_v > 100\,\mathrm{kg/mm^2}\,. \end{aligned} \qquad (۱۲۹-۱۲)$$

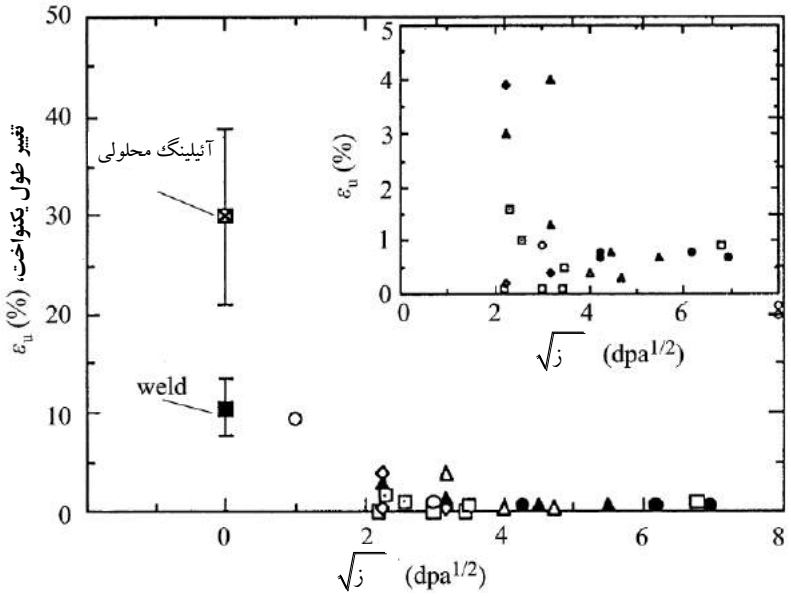
شیب هم‌بستگی در ناحیه‌ی کم بار، نزدیک به مقادیر نظری تابور برابر با ۳٫۵۵ است که این تفاوت به پراکندگی در پایگاه داده‌ها نسبت داده شده است. مقادیر کم‌تر شیب در بارهای بالاتر تفاوت بین آزمون سختی و آزمون کشش را نمایان می‌سازد. درحالی‌که تنش تسلیم در تقریباً ۰٫۲٪ کرنش اندازه‌گیری شده است، آزمون سختی مقادیر کرنش بالاتری را نشان می‌دهد که تخمین زده می‌شود که بین ۸ تا ۱۸٪ باشد [۴۸، ۵۱]. در نتیجه، ماهیت تغییر شکل فلز پرتودیده، هم‌بستگی بین سختی و استحکام تسلیم در سطوح سختی بالاتر را تحت تأثیر قرار می‌دهد.

1. Busby



شکل ۱۲-۲۲. اطلاعات آزمایشگاهی رسم شده به صورت یک تغییر در تنش تسلیم بر حسب تغییر در سختی برای (الف) فولادهای زنگ نزن آستنیتی و (ب) فولادهای فریتی. هم‌بستگی سختی ـ تنش تسلیم با ۹۵٪ محدوده‌ی اطمینان رسم شده است [۵۲].

لوکاس و همکارانش [۵۳] دریافتند که یک ضریب هم‌بستگی ۳٫۵، محدوده‌ی وسیعی از اطلاعات فولاد RPV را متناسب می‌سازد. او هم‌چنین ذکر کرد که این اطلاعات بهترین تطبیق با یک رگرسیون خطی ساده هستند که محور افقی را در حدود ۳۰۰ MPa در یک ΔH_v صفر قطع می‌کند که می‌تواند نتیجه‌ای از این واقعیت باشد که مقادیر ΔH_v مطابق با یک تنش جاری با کرنش پلاستیکی چند درصدی است. در سطوح پایین سخت‌گردانی، به علت برش عیوب کوچک به وسیله‌ی نابجایی، بدون افزایش قابل توجه در ΔH_v، σ_y افزایش می‌یابد. در سطوح بالاتر سخت‌گردانی، که هنگام حضور عیوب سخت‌تر فرا می‌رسد، تنش جاری متناسب با تنش تسلیم افزایش می‌یابد.



شکل ۱۲-۲۳. ازدیاد طول یکنواخت به صورت تابعی از ریشه‌ی دوم مقدار پرتوگیری برای فولادهای زنگ نزن آستنیتی سری ۳۰۰ پرتودهی شده و آزمایش شده در دمای تقریبی ۳۰۰ °C [۲۵].

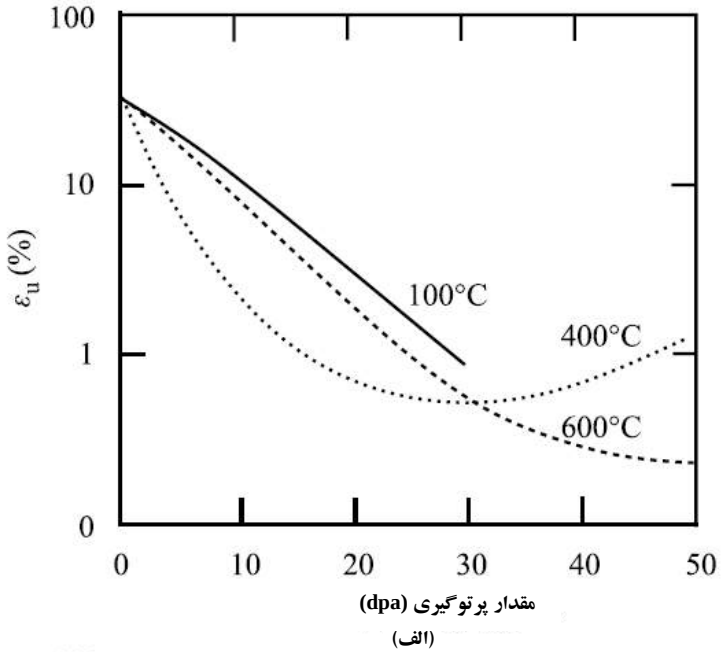
۱۲-۳ تغییر شکل در فلزات پرتودیده

علاوه بر تحمل سخت‌گردانی، فلزات پرتودیده یک کاهش در انعطاف‌پذیری و یک کاهش در کارسختی را نیز متحمل می‌شوند. اتلاف انعطاف‌پذیری با مقدار پرتوگیری در فولادهای آستنیتی پرتودهی شده و آزمایش شده در دمای تقریبی ۳۰۰°C در شکل ۱۲-۲۳ نشان داده شده است. قابل

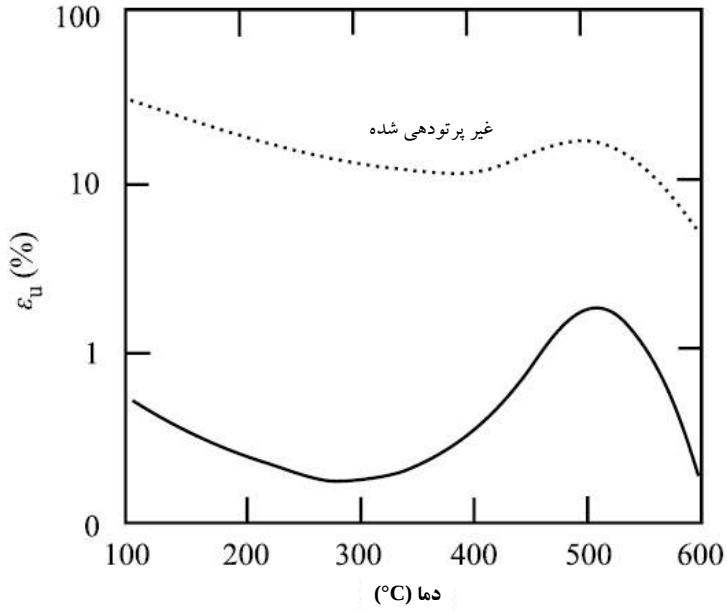
ذکر است که انعطاف‌پذیری از مقادیر ۳۰–۲۰٪ تا مقادیر کم‌تر از ۱٪ به وسیله‌ی dpa ۴ کاهش می‌یابد. همان‌طوری‌که در شکل ۱۲–۱ الف،ب نشان داده شده است کاهش در کارسختی به وسیله‌ی کاهش در تفاوت بین σ_{UTS} و σ_y با افزایش مقدار پرتوگیری مشخص می‌شود. اگر رفتار تنش ـ کرنش فلز، مدل سخت‌گردانی قانون توانی مشخص شده در معادله‌ی ۱۲–۲۷، $\sigma = K\varepsilon^n$ را دنبال کند، سپس همان‌طوری را دنبال می‌کند که در معادله‌ی ۱۲–۵۷ نشان داده شد، ازدیاد طول یکنواخت واقعی ε_u برابر با n است. در نتیجه تغییرات در ε_u با پرتودهی، تغییراتی را دنبال می‌کند که برای رفتار کارسختی تشریح شده به وسیله‌ی n رخ می‌دهد. لوکاس [۱۷] نشان داد که رفتار ε_u برحسب مقدار پرتوگیری برای فولاد زنگ نزن در یک محدوده‌ی دمایی ^{o}C ۵۰۰–۳۰۰ می‌تواند با منحنی‌های موجود در شکل ۱۲–۲۴ الف توصیف شود. ازدیاد طول یکنواخت به صورت قابل توجهی کاهش می‌یابد و در یک مقدار پرتوگیری که با دمای پایین تا ^{o}C ۳۰۰ کاهش می‌یابد به کمینه می‌رسد. وابستگی دمایی اتلاف انعطاف‌پذیری به صورت بسیار دقیق در شکل ۱۲–۲۴ب نشان داده شده است. از آن‌جایی که ترکیبات هسته در رآکتورهای آب سبک در کل در دماهای حدود ^{o}C ۳۰۰ هستند، حداقل انعطاف‌پذیری در آن دما یک نگرانی اصلی است.

اتلاف ازدیاد طول یکنواخت وکارسختی ناشی از علت مشابهی هستند، که این علت برهم‌کنش بین نابجایی‌ها و ریزساختار پرتو دیده است. تا این‌جا فقط روی این مطلب بحث شده که چه‌طور پرتودهی می‌تواند به وسیله‌ی میخ‌کوب کردن نابجایی‌ها به وسیله‌ی موانع منجر به سخت‌گردانی شود. در هر صورت برهم‌کنش نابجایی ـ حلقه می‌تواند منجر به بی‌نقص شدن حلقه و اتصال آن به شبکه‌ی نابجایی شود. در فلزات fcc، بی‌نقص شدن یک حلقه‌ی فرانک می‌تواند با چندین سازوکار رخ دهد. در یکی از این سازوکارها [۵۴] یک نابجایی متحرک با یک بردار برگرز $\frac{a}{2[\bar{1}01]}$ (نشان داده شده به صورت DB در شکل ۱۲–۲۵ الف) یک حلقه‌ی فرانک کوچک با بردار برگرز $\frac{a}{3[\bar{1}11]}$ ($D\delta$ در شکل ۱۲–۲۵ الف) را قطع می‌کند تا یک بخش شاکلی روی صفحه‌ی حلقه با بردار برگرز $\frac{a}{6[\bar{1}\,\bar{1}21]}$ (δB در شکل ۱۲–۲۵ الف) را تشکیل دهد. برهم‌کنش بخش شاکلی با حلقه‌ی نقص‌دار یک تکه مارپیچ روی نابجایی اصلی با بردار برگرز $DB = D\delta + \delta B$ تولید می‌کند و حلقه را حذف

می‌کند. مرحله‌ی دوم واکنش هنگامی رخ می‌دهد که یک نابجایی لغزنده‌ی کامل، $\frac{a}{2[\bar{1}\bar{1}0]}$ با یک حلقه‌ی فرانک ساکن با بردار برگرز $\frac{a}{3[111]}$ واکنش می‌دهد و یک نابجایی $\frac{a}{6[\bar{1}\bar{1}2]}$ مطابق با $\frac{a}{6[\bar{1}\bar{1}2]} = \frac{a}{2[\bar{1}\bar{1}0]} + \frac{a}{3[111]}$ را به وجود می‌آورد [۵۵]. بخش شاکلی ایجاد شده به وسیله‌ی برهم‌کنش، می‌تواند در طول حلقه‌ی فرانک پیچیده شده و نقص در چیده شدن را حذف کرده و با سمت دیگر حلقه‌ی فرانک مطابق $\frac{a}{2[\bar{1}\bar{1}0]} = \frac{a}{6[\bar{1}\bar{1}2]} + \frac{a}{3[11\bar{1}]}$ واکنش دهد. شکل ۱۲-۲۵ ب فرایندی را نشان می‌دهد که در آن حلقه‌ی فرانک قرار گرفته در صفحه‌ی شکل با یک نابجایی کامل متحرک روی بعضی از صفحات دیگر واکنش می‌دهد. حلقه‌ی فرانک نابود شده و تنها یک حلقه در نابجایی $\frac{a}{2[\bar{1}\bar{1}0]}$ تقریباً روی حلقه‌ی فرانک صفحه $\{111\}$ باقی می‌ماند. در نتیجه محصول بدون نقص یک تقاطع نابجایی کامل ـ حلقه‌ی فرانک سریعاً بخشی از شبکه‌ی نابجایی کامل می‌شود. سازوکار سوم [۵۶]، همان‌طوری‌که در شکل ۱۲-۲۵ج نشان داده شده است، تقاطع نابجایی متحرک با حلقه را شامل می‌شود که در آن حلقه روی خودش لغزیده و بخشی از نابجایی لغزنده می‌شود. در پایان، بی‌نقص شدن می‌تواند به وسیله‌ی تشکیل یک حلقه‌ی جزیی شاکلی در درون یک حلقه‌ی فرانک تحریک شود [۵۷]. واکنش بین حلقه‌ی جزیی شاکلی از نوع $\frac{a}{6[11\bar{2}]}$ و حلقه‌ی فرانک مطابق $\frac{a}{2[110]} = \frac{a}{3[111]} + \frac{a}{6[11\bar{2}]}$ پیش می رود و در شکل ۱۲-۲۵د نشان داده شده است.

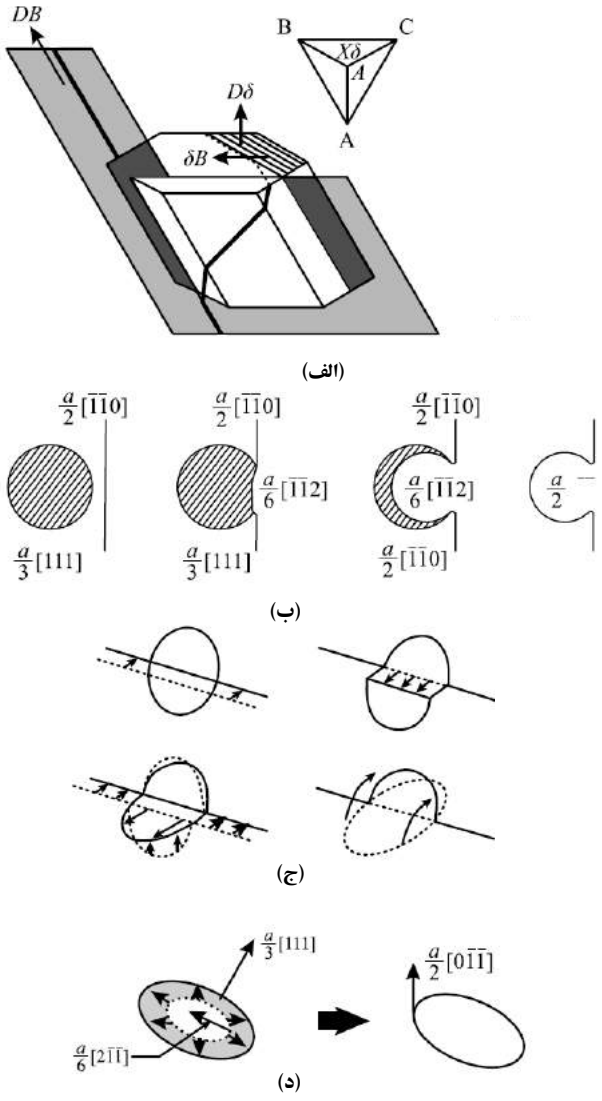


(الف)



(ب)

شکل ۱۲-۲۴. تغییر یکنواخت انعطاف‌پذیری در فولادهای زنگ نزن آستنیتی با (الف) مقدار پرتوگیری و دما و (ب) دما [۱۷].



شکل ۱۲–۲۵. سازوکارهای بی‌نظم شدن حلقه که به وسیله‌ی (الف) استرودل[1] و واشبورن[2] [۵۴]. (ب) گلز[3] [۵۵]. (ج) فورمن وشارپ[4] [۵۶] و تانیگاوا[5] پیشنهاد شده است[۵۷].

1. Strudel
2. Washburn
3. Gelles
4. Foreman and Sharp
5. Tanigawa

در فلزات bcc، حلقه‌های نقص‌دار به ندرت مشاهده می‌شوند زیرا انرژی نقص در چیده شدن بالا است که باعث بی‌نقص شدن در اندازه‌ی حلقه‌های بسیار کوچک است. حلقه‌ی فرانک به شکل $\frac{a}{2[110]}$ است، و نقص در چیده شدن می‌تواند به وسیله‌ی دو واکنش بی‌نقص شدن ممکن [۵۸]:

$$\frac{a}{2[110]} + \frac{a}{2[\bar{1}10]} \rightarrow \frac{a}{2[010]}$$ یا $$\frac{a}{2[110]} + \frac{a}{2[00\bar{1}]} \rightarrow \frac{a}{2[111]}$$

حذف شود، که نتیجه در هر دو مورد یک حلقه‌ی کامل است. بنابراین هر کدام از این واکنش‌های بی‌نقص شدن حذف حلقه‌ی نابجایی از ریزساختار و رشد دانسیته‌ی شبکه‌ی نابجایی است.

۱۲-۳-۱ نقشه‌های سازوکار تغییر شکل

همان‌طوری‌که در فصل ۷ توضیح داده شد، تغییر شکل پلاستیک به وسیله‌ی تنش برشی، کرنش یا نرخ کرنش و دما تشریح می‌شود. فروست[1] و اشبی[2] [۵۹] سازوکارهای تغییر شکل را به پنج گروه تقسیم کردند:

۱. جریان بالای استحکام برش ایده آل
۲. پلاستیسیته دما پایین به وسیله‌ی لغزش نابجایی
۳. پلاستیسیته دما پایین به وسیله‌ی دوقلویی شدن
۴. خزش قانون توانی به وسیله‌ی لغزش نابجایی یا صعود و لغزش
۵. خزش نفوذی

هر کدام از این سازوکارها می‌تواند به سازوکارهای اضافه‌تری تقسیم شود. هنگامی که تنش و دما متغیرهای مستقلی باشند، سپس پاسخ فلز کرنش و نرخ کرنش است. به همین صورت، دما و نرخ کرنش می‌توانند به جای متغیرهای مستقل انتخاب شده و در این حالت پاسخ فلز تنش است.

اگر نرخ کرنش در نقش یک متغیر وابسته انتخاب شود، نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل با ارتباط نرخ کرنش فلز به متغیرهای مستقل تنش برشی و دما تعیین می‌شود. یک نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل،

1. Frost
2. Ashby

نمایشی از سازوکار تغییر شکل در فضای تنش ـ دما است که تنش با تنش بهنجار شده‌ی σ_s/μ نشان داده می‌شود و دما با دمای بهنجار شده‌ی T/T_m نشان داده می‌شود که μ ضریب برشی و T_m دمای ذوب است. نقشه، ارتباطی بین دو متغیر مستقل، σ_{xy} و T و متغیر وابسته $\dot{\varepsilon}$ فراهم می‌کند. یک مثال از چنین نقشه‌ای برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ در شکل ۱۲-۲۶ الف مشخص شده است که در آن تنش بهنجار شده روی محور افقی رسم شده و دمای بهنجار شده روی محور طولی رسم شده است. سازوکارهای مختلف تغییر شکل به وسیله‌ی نواحی مشخص شده در نقشه نشان داده شده‌اند و پاسخ نرخ کرنش یک فلز به ترکیب‌های تنش/ دمایی به وسیله‌ی محاسبه‌ی نرخ کرنش معادل مشخص شده است. در اصل محاسبه‌ی نرخ کرنش یک قانون اساسی در شکل یک معادله‌ی تکی را فراهم می‌کند:

(۱۲-۱۳۰)

$$\dot{\varepsilon} = f(\sigma_s, T)\,.$$

شکل ۱۲-۲۶ الف نشان می‌دهد که بالای استحکام برشی ایده‌آل، فروپاشی پلاستیکی رخ می‌دهد و نرخ کرنش بی‌نهایت است:

(۱۲-۱۳۱)

$$\dot{\varepsilon} = \infty \quad \text{for} \quad \sigma_s \geq \alpha\mu$$
$$\dot{\varepsilon} = 0 \quad \text{for} \quad \sigma_s < \alpha\mu\,,$$

که α وابسته به ساختار بلوری و معیار ناپایداری است و در کل بین ۰٫۰۵ و ۰٫۱ است. در زیر استحکام برشی ایده‌آل، سیلان با لغزش نابجایی‌ها رخ می‌دهد که در اصل به وسیله‌ی موانع محدود شده‌اند. اشبی نرخ کرنشی را که در آن موانع مجزا منطقه‌ی پلاستیکی را کنترل می‌کنند تعیین کرد:

(۱۲-۱۳۲)

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_0 \exp\left[-\frac{Q}{kT}\left(1 - \frac{\sigma_s}{\sigma_s^0}\right)\right]\,,$$

که Q انرژی فعال‌سازی مورد نیاز برای غلبه بر موانع بدون کمک تنش خارجی است و σ_s^0 مؤلفه حرارتی تنش سیلان است. در دماهای پایین و تنش بهنجار شده‌ی بالا، مشاهده شده است که دوقلویی رخ می‌دهد. باین و همکارانش [۶۱] تغییر شکل را برحسب تنش و کرنش تشریح کردند و تعیین

کردند که تنش دوقلویی شدن، σ_t در فلزات چند بلوری می‌تواند به وسیله‌ی تنش بحرانی برای جدایش نامحدود نابجایی‌های جزیی مشخص شود:

(۱۲-۱۳۳)

$$\sigma_t = 6.14 \frac{\gamma_{SFE}}{b} ,$$

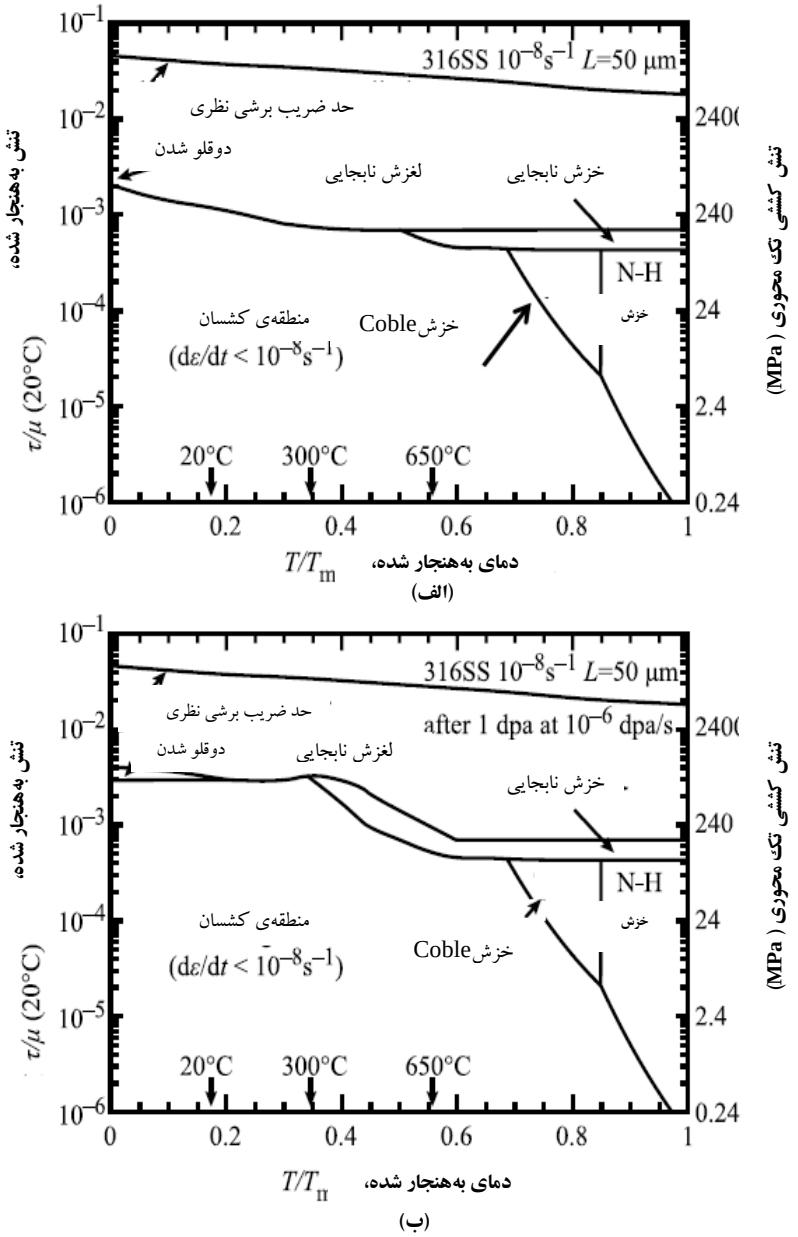
که b بردار برگرز نابجایی جزیی است. معادله‌ی نرخ کرنش برای دوقلویی برابر است با [۵۹]:

(۱۲-۱۳۴)

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_t \exp\left[-\frac{Q_t}{kT}\left(1-\frac{\sigma_s}{\sigma_t}\right)\right] ,$$

که Q_t انرژی آزاد فعال‌سازی برای جوانه‌زنی یک دوقلو بدون کمک تنش خارجی است، σ_t تنش مورد نیاز برای جوانه زنی دوقلویی در غیاب فعال‌سازی حرارتی است و $\dot{\varepsilon}_t$ یک ثابت است. تعادل نقشه‌ی تغییر شکل به سازوکارهای خزشی اشاره دارد و این مطالب به صورت مفصل در فصل ۱۴ بحث شده‌اند.

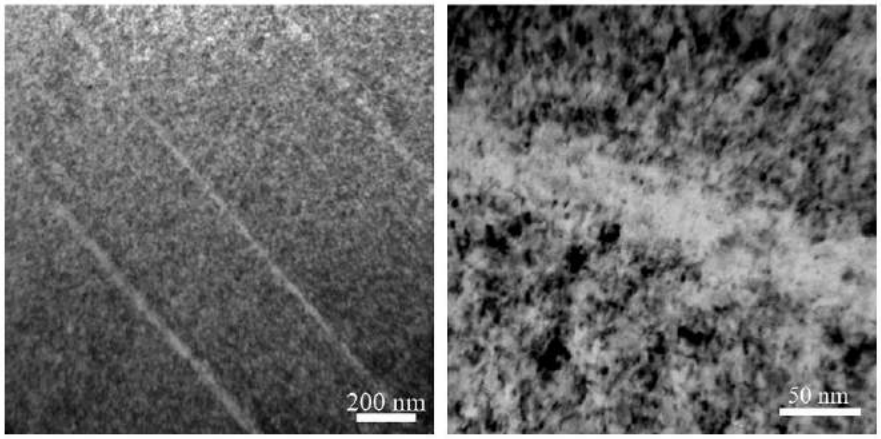
اثر پرتودهی تحت پرتودهی در یک نرخ کرنش $10^{-8}\ s^{-1}$ در شکل ۱۲-۲۶ب نشان داده شده است. به علت سخت‌گردانی تابشی در دماهای زیر T/T_m ۰٫۵، تنش برای لغزش نابجایی افزایش یافته است که منطقه‌ی لغزش نابجایی را کاهش می‌دهد. در بالای این دما، نرم شوندگی القایی تابشی می‌تواند رخ دهد، که باعث کاهش در تنش برای لغزش نابجایی می‌شود و منطقه‌ی لغزش در دماهای بالا را گسترده می‌کند. در دماها و تنش‌های بالا نیز دوقلویی شدن رخ می‌دهد.



شکل ۱۲-۲۶. نقشه‌ی سازوکارهای تغییر شکل برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ با اندازه دانه ۵۰μm و تغییر شکل یافته در نرخ کرنش 10^{-8} s^{-1} برای (الف) شرایط غیرپرتودهی، و (ب) پرتودهی تا ۱dpa در یک نرخ 10^{-6}dpa/s [۶۰].

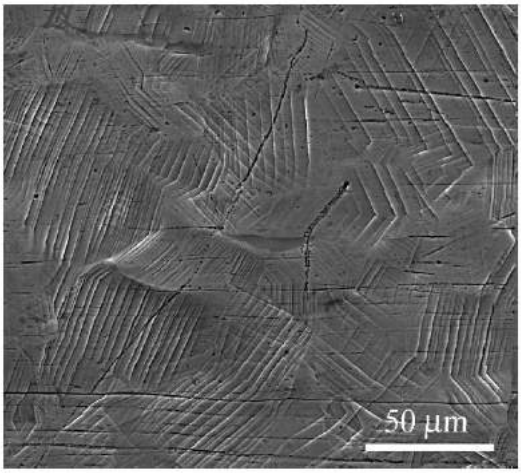
۱۲-۳-۲ تغییر شکل موضعی

برای خوشه‌های عیب و رسوبات هم‌بسته، برش‌های چندتایی می‌تواند این موانع را در صفحه‌ی لغزشی نابجایی حذف کند. در نتیجه در واقع، عبور گروه ابتدایی از نابجایی‌ها در روی صفحه‌ی لغزشی مشخص می‌تواند منجر به تخلیه موانع در صفحه‌ی لغزشی شود که در نتیجه آن نابجایی‌های بعدی می‌توانند نسبتاً راحت‌تر عبور کنند. این فرایند اولین بار در سال ۱۹۶۰ در فلزات bcc مشاهده شده [۶۲، ۶۳]، این فرایند به *کاناله شدن نابجایی‌ها* اشاره دارد و مشاهده شده است که در ساختارهای بلوری fcc، bcc و hcp رخ می‌دهد. به عنوان نتیجه‌ای از کاناله شدن، سخت‌گردانی سرد در کانال‌ها به همراه کرنش یکنواخت ماکروسکوپی تا مقادیر نزدیک به صفر کاهش می‌یابد و تغییر شکل در درون کانال‌ها به شدت موضعی می‌شود. بین[1] و همکارانش [۶۴] دریافتند که تغییر شکل کانال در فلزات پرتودیده در تنش‌های بالا رخ می‌دهد و هم‌چنین تفاوت معمول بین تغییر شکل فلزات پرتودیده و غیرپرتودیده تنش بالا است.



شکل ۱۲-۲۷. تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری از کانال‌های نابجایی در Fe-18Cr-12Ni پرتودهی شده تا ۵٫۵dpa در $360^{\circ}C$ با پروتون‌هایی با انرژی ۳ MeV و کرنش‌گذاری شده تا ۷٪ در $288^{\circ}C$.

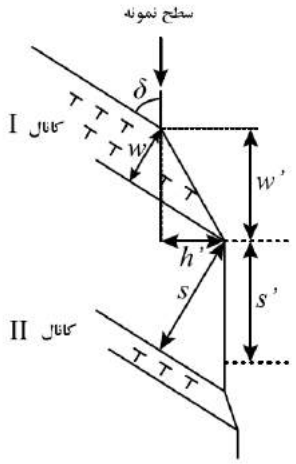
1. Byun



شکل ۱۲-۲۸. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از کانال‌های نابجایی قطع کننده سطح در یک فولاد زنگ نزن آستنیتی پرتودهی شده تا ۵٫۵ dpa با پروتون‌های ۳٫۲ MeV در ۳۶۰°C و متعاقب آن کرنش‌گذاری در $۳ \times ۱۰^{-۷}\ s^{-1}$ تا کرنش پلاستیک ۷٪ در آرگون در دمای ۲۸۸°C.

کانال‌های نابجایی به وسیله‌ی پهنا، فاصله و مقدار کرنش در کانال تشریح می‌شوند. شکل ۱۲-۲۷ تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری کانال‌های نابجایی در Fe-18Cr-12Ni پرتودهی شده تا ۵٫۵ dpa در ۳۶۰°C با پروتون‌هایی با انرژی ۳ MeV و کرنش‌گذاری شده تا ۷٪ در ۲۸۸°C را نشان می‌دهد. پهنای کانال در کل در حدود ۰٫۱ µm است و کانال‌ها به صورت معمول ۱ تا ۳µm از یک‌دیگر فاصله دارند. کانال‌ها در طول دانه‌ها رشد کرده و به مرزدانه‌ها وارد شده و به پایان می‌رسند. در یک نمونه کششی، کانال‌های دانه‌های سطحی به سمت سطح گسترش یافته و پله‌ای را روی سطح تولید می‌کنند. شکل ۱۲-۲۸ یک تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از سطح نمونه‌ی فولاد زنگ نزن پرتودهی شده و کرنش‌گذاری شده تا ۷٪ را نشان می‌دهد، که در آن بزرگی پله سطحی می‌تواند با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) تشریح شود. شکل ۱۲-۲۹ نشان می‌دهد که چگونه تقاطع یک کانال با سطح، به علت عبور نابجایی‌ها روی کانال، تولید پله‌ای به بلندی h می‌کند. برای بلندی h و پهنای w کرنش کانال γ به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\gamma = h/w\ . \qquad (۱۲-۱۳۵)$$



شکل ۱۲-۲۹. تقاطع کانال‌های نابجایی با سطح ایجاد یک پله‌ی s روی سطح و بلندی h و پهنای w می‌کند. کمیت‌های اولیه مقادیر معلوم بلندی و پهنای هستند که به صورت مستقیم اندازه گیری شده‌اند و به منظور تعیین کرنش در کانال باید به مقادیر واقعی تبدیل شوند [۶۵].

تعداد نابجایی‌ها در کانال، n می‌تواند به صورت $n = h/b$ به بلندی پله ارتباط داده شود که b بردار برگرز است. واس[1] و همکارانش [۶۵] نشان دادند که کرنش‌گذاری فولاد زنگ نزن ۳۱۶L تا حدود ۷٪ کرنش اعمالی متعاقب پرتودهی تا ۵٫۵ dpa در ۳۶۰°C منجر به یک میانگین کرنش کانال نزدیک به ۱۰۰٪ می‌شود که به وسیله‌ی عبور ۱۰۰۰ نابجایی روی کانال‌ها ایجاد می‌شود. بنابراین مشاهدات و محاسبات انجام شده با مدل نشان می‌دهد که تعداد اندکی از نابجایی‌ها (کم‌تر از ۵۰) در کانال‌ها باقی می مانند [۶۱، ۶۵]. دو دلیل ممکن برای تعداد پایین نابجایی‌های باقی مانده در کانال‌ها، انتقال لغزشی به دانه‌های همسایه در موردی که صفحات لغزشی به دقت بین دانه‌ها در یک ردیف قرار گرفته یا واکنش نابجایی‌ها با مرزدانه‌ها هستند. هنگامی که کانال نابجایی، مرزدانه را قطع می‌کند، نابجایی‌های در کانال یا به دانه‌ی مجاور منتقل شده یا در مرزدانه سپرگذاری می‌شوند. هنگامی که نابجایی منتقل می‌شود، نابجایی پسماندی را در مرزدانه به جای می‌گذارد. واکنش نابجایی‌هایِ در برگیرنده‌ی مرزدانه‌ها می‌تواند به صورت $\mathbf{b_r = b_1 - b_2}$ بیان شود که $\mathbf{b_r}$ بردار برگرز نابجایی پسماند باقی‌مانده در پشت نابجایی است و $\mathbf{b_1}$ و $\mathbf{b_2}$ به ترتیب بردارهای برگرز نابجایی‌ها در دانه‌های ۱ و ۲ هستند. تعداد

1. Was

نابجایی‌های پسماند در مرزدانه احتمالاً متناسب با بلندی کانال یا کرنش کانال است زیرا سهم نابجایی‌های سپرگذاری شده در مرزدانه نسبتاً کوچک است.

علاوه بر کانالەبندی ایجاد شده به وسیله‌ی تخلیه‌ی عیوب به وسیله‌ی نابجایی‌های لغزنده، مشاهده شده است که تغییر شکل دوقلویی نیز رخ می‌دهد. تغییر شکل دوقلویی شدن یا دوقلویی‌های مکانیکی یک سازوکار تغییر شکل موضعی ایجاد شده به وسیله‌ی نابجایی‌های جزیی است. در فلزات fcc با انرژی نقص در چیده شدن کم، تغییر شکل دوقلویی به وسیله‌ی لغزش نابجایی جزیی شاکلی با علامت مشابه روی صفحات متوالی $\{111\}$ تشکیل می‌شود. در این دوقلویی‌ها کرنش برشی ۷۰٫۷٪ است و عیوب به وسیله‌ی لغزش نابجایی‌های جزیی تخلیه می‌شوند [۶۶]. نابجایی‌های جزیی شاکلی از تجزیه‌ی نابجایی معمولی با بردار برگرز $\frac{1}{2\langle 110\rangle}$ به نابجایی‌های پیشتاز و دنباله با بردارهای برگرز نوع $\frac{1}{6\langle 112\rangle}$ تشکیل می‌شوند. فاصله‌ی جدایش نابجایی‌های جزیی، یا پهنای نقص در چیده شدن، d به صورت زیر تعیین می‌شود:

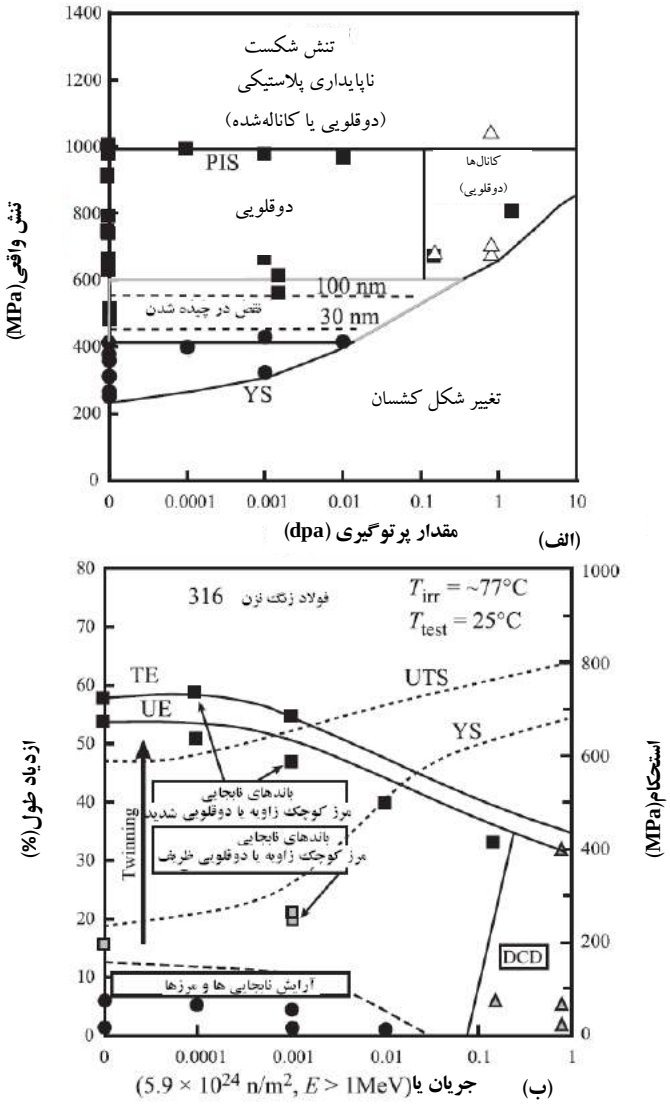
$$d \approx \frac{\mu b^2}{4\pi\gamma_{SFE}}, \qquad (۱۳۶-۱۲)$$

که γ_{SFE} انرژی نقص در چیده شدن است. در فلزاتی با انرژی نقص در چیده شدن پایین، فاصله‌ی جدایش نابجایی‌های جزیی بزرگ است. واس و همکارانش [۶۵] تغییر شکل دوقلویی در تقاطع کانال‌های نابجایی با مرزدانه‌ها را مشاهده کردند که تنش و کرنش بزرگ است. خواه با کانالە شدن یا خواه با دوقلویی شدن، تغییر شکل موضعی تابعی قوی از مقدار پرتوگیری است و موضعی شدن تغییر شکل با مقدار پرتوگیری افزایش می‌یابد. دوقلویی شدن اغلب در دماهای پایین رخ می‌دهد.

بین و هاشیموتو[1] [۶۷] و فارل[2] و همکارانش [۶۸] نقشه حالت‌های تغییر شکل برای آلیاژهای پرتودهی شده را رسم کردند که در این نمودارها حالت تغییر شکل به صورت تابعی از کرنش اعمال شده تشریح می‌شود. نقشه‌ای براساس یا بر پایه‌ی تنش در شکل ۱۲-۳۰ الف و یک نقشه براساس (بر پایه) از پایه‌ی کرنش در شکل ۱۲-۳۰ ب برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ نشان داده شده است. در نقشه‌ی بر

1. Hashimoto
2. Farrell

پایه‌ی تنش، مقادیر پرتوگیری بالاتر منجر به یک افزایش در استحکام تسلیم و یک افزایش در منطقه‌ی تغییر شکل کشسان می‌شود.



شکل ۱۲-۳۰. (الف) نقشه‌ی حالت تغییر شکل بر پایه‌ی تنش برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ در یک فضای تنش ـ مقدار پرتوگیری واقعی (تنش ناپایدار پلاستیک = PIS) [۶۷]. (ب) نقشه‌ی حالت تغییر شکل بر پایه‌ی کرنش برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی نوترونی شده در ^{o}C ۱۰۰-۶۵ و آزمایش شده در دمای اتاق (ازدیاد طول کلی = TE، ازدیاد طول یکنواخت = UE، تغییر شکل کانال نابجایی = DCD) [۶۸].

نام‌گذاری اصطلاحات

A : مساحت صفحه‌ی لغزشی یا حلقی نابجایی یا مساحت سطح مقطع نمونه‌ی کششی بعد از کرنش‌گذاری

A_0 : مساحت سطح مقطع اولیه در نمونه‌ی کشش

$\boldsymbol{b}$: بردار برگرز

d : اندازه دانه یا قطر مانع یا فاصله‌ی جدایش نابجایی‌های جزیی

e : کرنش کشسان

E : ضریب کشسان

F : نیرو

h : بلندی کانال نابجایی

H_v : سختی ویکرز

K : ضریب حجمی یا ثابت در معادله‌ی سخت‌گردانی قانون توانی

k : جذر نامتغیر دوم تنش انحرافیِ مورد استفاده برای معیار تسلیم فون میزز

k_y : تنش آزادسازی

L_0 ،L : طول اصلی و تغییر یافته یک نمونه‌ی کشش. L هم‌چنین طول نابجایی سپرگذاری شده روی صفحه‌ی لغزشی

l : فاصله‌ی بین موانع روی یک صفحه‌ی لغزشی

m : ضریب اشمید

M : ضریب تیلور

n : عدد دانسیته‌ی موانع روی یک صفحه‌ی لغزشی

n : تعداد نابجایی‌ها در یک سپر

p : فشار ایستایی (هیدروستاتیک)

p : بار

r : فاصله‌ی بین مانع تا منبع فرانک ـ رید

r_d : شعاع هسته‌ی نابجایی

R : شعاع یک مانع

S : تنش مهندسی، یا ضریب توزین از معادله‌ی ۱۲-۱۰۳

t : زمان

T : دما

U : انرژی کرنش کشسان

U_V : انرژی کرنش کشسان حجم یک حفره

V : حجم

w : پهنای کانال نابجایی

W : کار

α : سختی مانع

β : تراکم پذیری، قابلیت کار سختی

ϕ: شار نوترون

ϕt : جریان نوترون

ϕt_e : جریان مؤثر نوترون

Δ : کرنش حجمی

δ : افزایش فاصله

ε_{ij}, ε : کرنش و مؤلفه‌های کرنشی

γ : کرنش کانال نابجایی

γ_{SFE} : انرژی نقص در چیده شدن

Γ : کشش خط نابجایی

λ : ضریب لامه

μ : ضریب برشی

ν : نسبت پواسون

ρ_d : دانسیته‌ی نابجایی

σ : تنش کششی

σ_i : تنش اصطکاکی

σ_m : تنش متوسط

σ_s : تنش برشی

σ_s^0 : مؤلفه‌ی حرارتی تنش سیلان

σ_y : تنش تسلیم

σ_{yp} : سهم رسوبات غنی از مس در تنش تسلیم

σ_{ypm} : استحکام تسلیم شرایط پایا

τ : عمر عیب

ζ : تعداد مناطق آسیب ایجاد شده در برخورد نوترون

زیرنویس‌ها

d : نابجایی

f : شکست

i، j یا x، y، z : مؤلفه‌های تنش و کرنش

loop : حلقه‌ها

LR : بلند دامنه

n : گلویی

ppt : رسوبات

s : برش یا قوی

SR : کوتاه دامنه

u : یکنواخت

void : حفره‌ها

V : حفره

w : ضعیف

y : تسلیم

yr : ریشه‌ی میانگین مجذور

yl : مجموع خطی

بالانویس‌ها

n : توان سخت‌گردانی کرنشی

مخفف‌ها

AFM : میکروسکوپ نیروی اتمی

CRP : رسوبات غنی از مس

MF : ترکیب‌های زمینه

RA : کاهش در مساحت

RAH : سخت‌گردانی بازپختی تابشی

RPV : مخزن فشار رآکتور

RSS : ریشه‌ی میانگین مجذور

SEM : میکروسکوپ الکترونی روبشی

SFE : انرژی نقص در چیده شدن

TEM : میکروسکوپ الکترونی عبوری

UMF : ترکیب‌های ناپایدار زمینه

UTS : استحکام تسلیم نهایی

YS : استحکام تسلیم

مسایل

۱۲-۱ ریزساختار پرتودیده مقدار سخت‌گردانی در آلیاژ را تعیین خواهد کرد. هدف محدودکردن سخت‌گردانی تابشی در فلز است. فرض کنید که در ماده‌ی شما تمام سخت‌گردانی از حفره‌ها ناشی می‌شود و هیچ‌گونه تبدیل گازی وجود ندارد. برای یک تعداد ثابت جاهای خالی به دام افتاده در حفره‌ها، شما دانسیته‌ی بزرگی از حفره‌های کوچک یا دانسیته‌ی کوچکی از حفره‌های بزرگ را ترجیح می دهید؟ دلایلتان را توضیح دهید.

۱۲-۲ اگر آلیاژ به وسیله‌ی افزایش شعاع حفره‌هایی با دانسیته‌ی ثابت متورم شود، با چه مقدار پرتوگیری یک تورم دو برابری، آلیاژ را سخت می‌کند؟

۱۲-۳ آزمایشات میکروسکوپ الکترونی از نمونه‌ی فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده در دمای ۴۰۰°C تا جریان نوترون سریع $1 \times 10^{22}\ n/cm^2$ ($E > 0{,}1\ MeV$)، حفره‌هایی با قطر میانگین ۴۰nm و دانسیته‌ی حجمی $2{,}2 \times 10^{15}\ cm^{-3}$ به وجود آمده است. به علاوه، حلقه‌های نقص‌دار با قطر ۱۶nm در دانسیته‌ی حجمی $2{,}2 \times 10^{15}\ cm^{-3}$ نیز به وجود آمده‌اند. افزایش فزاینده در تنش برشی ایجاد شده به وسیله‌ی مانع به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\Delta\tau = \alpha\mu b/l (\mu = 80\,\text{GPa}, b = 2.5 \times 10^{-10}\,\text{m})$$

با فرض این‌که هر دو نوع عیب به صورت یکسری از موانع سخت عمل کنند ($\alpha = 1$ برای حفره‌ها، $\alpha = 1{,}2$ برای حلقه‌های نقص دار) و با آرایش منظم و مربعی توزیع شده باشند:

الف) تغییر در تنش برشی تجزیه شده بحرانی ($\Delta\tau$) ناشی از پرتودهی را محاسبه کنید.

ب) فضای بین‌دانه‌ای آرایشات مربعی چه‌قدر است؟

ج) کدام یک سخت‌گردانی بیش‌تری را ایجاد می‌کنند، حفره‌ها یا حلقه‌ها؟

۱۲-۴ برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده در ۴۰۰°C تا یک جریان نوترون سریع $1 \times 10^{22} n/cm^2$ ($E > 0{,}1\ MeV$) اندازه‌ی حلقه‌ی نابجایی و دانسیته‌ی مورد نیاز برای تولید سخت‌گردانی مشابه با تعداد مشابه حفره مشخص شده در مسئله‌ی ۱۲-۴ را تعیین کنید.

۱۲-۵ یک فولاد مخزن فشار در ۳۰۰ °C تا یک جریان نوترون سریع $10^{22}\ n/cm^2$ پرتودهی شده است. این امیدواری وجود دارد که تغییر در NDT ناشی از چنین پرتودهی محاسبه می‌شود. NDT به

صورت شرایطی که در آن $\sigma_f = \sigma_y$ یا $\sigma_y k_y = 4\mu\gamma d^{-1/2}$ است، تعریف می‌شود. اثر پرتودهی روی سخت‌گردانی منبعی به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$d(\sigma_y k_y) = \sigma_y dk_y + k_y d\sigma_y = 0 ,$$

زیرا عبارت $4\mu\gamma d^{-1/2}$ ضرورتاً در طول پرتودهی ثابت است.

تغییرات در σ_y و k_y ناشی از تغییرات در T و ϕt (ϕt که به وسیله‌ی سخت‌گردانی تابشی یا یک افزایش در تنش اصطکاکی σ_i تعیین می‌شود) برابرند با:

$$\mathrm{d}k_y = \frac{\partial k_y}{\partial T}\mathrm{d}T + \frac{\partial k_y}{\partial \sigma_i}\mathrm{d}\sigma_i$$

$$\mathrm{d}\sigma_y = \frac{\partial \sigma_y}{\partial T}\mathrm{d}T + \frac{\partial \sigma_y}{\partial \sigma_i}\mathrm{d}\sigma_i .$$

با ترکیب این عبارات و نادیده گرفتن اثر تابش روی سخت‌گردانی منبعی ($\frac{\partial k_y}{\partial \sigma_i} = ۰$ و $\frac{\partial \sigma_y}{\partial \sigma_i} = ۱$)

یک افزایش در دمای انتقال $\mathrm{d}T_D$ به‌دست می‌آید:

$$\frac{\mathrm{d}T_D}{\mathrm{d}\sigma_i} = -\left(\frac{\sigma_y}{k_y}\frac{\partial k_y}{\partial T} + \frac{\partial \sigma_y}{\partial T}\right)^{-1} .$$

برای یافتن افزایش در دمای انتقال $\mathrm{d}T_D$ به صورت تابعی از شار، وابستگی تنش اصطکاکی σ_i به ϕt مورد نیاز است. که در نتیجه:

$$\mathrm{d}T_D = \frac{\mathrm{d}T_D}{\mathrm{d}\sigma_i}\frac{\mathrm{d}\sigma_i}{\mathrm{d}(\phi t)}\mathrm{d}(\phi t) .$$

با استفاده از نظریه‌ی ماکین[1] برای سخت‌گردانی مناطق تهی‌شده:

$$\sigma_i = \sigma_i^0 [1 - \exp(-\alpha \nu \Sigma_s \phi t)]^{1/2}$$

و آن‌که

1. Makin's theory

$$\sigma_i^0 = 6.64\,\text{GPa}$$
$$\alpha = 1$$
$$\Sigma_s = 0.26\,\text{cm}^{-1}$$

و یک اندازه خوشه ۶ nm، افزایش در دمای انتقال dT_D بعد از یک افزایش جریان 10^{22} n/cm^2 را محاسبه کنید $dT_D/d\sigma_i \sim 0.3$ °C/MPa است.

۱۲-۶ منطقه‌ی کارسختی منحنی تنش ـ کرنش می‌تواند با رابطه‌ی $\sigma = k\varepsilon^n$ نشان داده شود، که n ضریب کارسختی است. با افزایش تنش تسلیم بیش‌تر از تنش تسلیم نهایی، پرتودهی به صورت مؤثری ضریب کارسختی را کاهش می‌دهد. با استفاده از معیاری ناپایداری پلاستیک، $d\sigma/d\varepsilon = \sigma$، کاهش در ازدیاد طول یکنواخت ناشی از یک پرتودهی را محاسبه کنید که n را به اندازه مقدار Δn کاهش می‌دهد.

۱۲-۷ یک نمونه Ni-1%Al در دمای ۵۵۰ °C با یون‌های نیکل با انرژی ۳٫۵ MeV تا یک مقدار پرتوگیری ۹ dpa پرتودهی می‌شود. ساختار نتیجه شده شامل توزیع حفره‌ی در برگیرنده‌ی 3×10^{14} voids/cm^3 در قطر میانگین ۵۰nm است.

الف) چه تنشی مورد نیاز است تا یک نابجایی سرتاسر آرایشی از این موانع را برش دهد و این تنش چه کسری از تنش کامل اوراوان است؟

ب) با فرض حجم حفره‌ی کلی ثابت، اگر رشد حفره باعث دو برابر شدن اندازه‌ی میانگین حفره شود، تنش چه‌قدر است؟

مسئله را با استفاده از ثابت‌های کشسانی برای نیکل خالص و با فرض یک اندازه دانه ۱۰ μm حل کنید.

۱۲-۸ خط نابجایی در جامد حاوی N حباب با شعاع R در سانتی‌متر مکعب را در نظر بگیرید. تنش برشی، τ_{xy} به جامد اعمال می‌شود که باعث می‌شود که نابجایی در طول صفحه‌ی لغزشش بلغزد. تحت چه شرایطی حباب‌ها می‌توانند به وسیله‌ی نابجایی خمیده شده تا این‌که به وسیله‌ی آن کنار زده شوند.

۱۲-۹ سه نمونه‌ی کششی از فولاد زنگ نزن ۳۱۶ وجود دارد. دوتای آن‌ها در رآکتور تا 10^{21} n/cm^2 در دمای ۳۰۰ °C پرتودهی شده و یکی از آن‌ها پرتودهی نشده است. هر سه نمونه در تست کششی در آزمایشگاه به شیوه‌ی زیر مورد آزمایش شده‌اند: یکی از نمونه‌های پرتودهی شده در دمای اتاق و

دیگری در دمای ^{o}C ۳۰۰ مورد آزمایش قرار گرفتند. نمونه‌ی پرتودهی نشده نیز در دمای ^{o}C ۳۰۰ مورد آزمایش قرار گرفت. نرخ کرنشی در هر سه آزمایش مشابه بود. منحنی‌های تنش مهندسی ـ کرنش مهندسی که ممکن است نتیجه شود را برای هر سه نمونه رسم کرده و نقاط σ_y، σ_{UTS}، σ_f، ε_u و ε_f را مشخص کنید. یک توضیح مختصر مرتبط با این موقعیت‌ها روی منحنی‌ها ارایه دهید.

۱۲-۱۰ منحنی‌های تنش مهندسی ـ کرنش مهندسی را رسم کنید که ممکن است از آزمون کششی در آزمایشگاه روی نمونه‌های مسئله‌ی ۱۲-۹ متعاقب پرتودهی تا 10^{21} n/cm^2 در دمای ۳۰۰ و ^{o}C ۷۰۰ نتیجه شود، و نقاط σ_y، σ_{UTS}، σ_f، ε_u و ε_f را مشخص کنید.

مراجع

1. Dieter GE (1976) Mechanical Metallurgy, 2nd edn. McGraw-Hill, New York.
2. Kocks UF (1970) Metal Trans 1:1121–1143.
3. Olander DR (1976) Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements, TLD- 26711-Pl. Technical Information Center, ERDA, Washington, DC, chap 18.
4. Stroh AN (1954) Proc Roy Soc Vol London 223:404–414.
5. Makin MJ, Sharp JV (1965) Phys Stat Sol 9:109.
6. Singh BN, Foreman AJE, Trinkaus H (1997) J Nucl Mater 249:103–115.
7. Stoller RE, SJ Zinkle (2000) J Nucl Mater 283–287:349–352.
8. Seeger A (1958) Proceedings of 2nd United Nations International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva, vol 6, United Nations, NY, p 250.
9. Russell KC, Brown LM (1972) Acta Metal 20:969–974.
10. Scattergood RO, Bacon DJ (1982) Acta Metal 30:1665–1677.
11. Kocks UF, Arbon AS, Ashby MF (1975) Prog Mater Sci 19:1.
12. Kocks UF (1977) Mater Sci Eng 27:291–298.
13. Bement AL (1972) Rev Roum Phys 17(3):361–380.
14. Foreman AJE, Makin MJ (1967) Can J Physics 45:511.
15. Kocks UF (1969) Physics of Strength and Plasticity. MIT Press, Cambridge, p 13.
16. Odette GR, Lucas GE (1998) Rad Eff Defects Solid 44:189.
17. Lucas GE (1993) J Nucl Mater 206:287–305.
18. Was GS, Busby JT, Andresen PL (2006) Corrosion in the Nuclear Power Industry, ASM Handbook, vol 13C, ASM International, pp 386–414.
19. Was GS, Andresen PL (2007) Effect of Irradiation and Corrosion on SCC in LWRs, Corrosion in the Nuclear Power Industry, vol 13 B, chap 5-A3. American Society for Metals, Metals Park, OH (in press).
20. Zinkle SJ, Maziasz PJ, Stoller RE (1993) J Nucl Mater 206:266–286.
21. Garner FA (1993) J Nucl Mater 205:98–117.
22. Kojima S, Zinkle SJ, Heinisch HL (1989) Grain Size Effect on Radiation Hardening in Neutron-Irradiated Polycrystalline Copper, Fusion Reactor Materials Semiannual Progress Report for Period ending March 31, 1989, DOE/ER-0313/6: 43–49.
23. Makin MJ, Minter FJ (1957) J Inst Metals 24:399.
24. Higgy HR, Hammad FH (1975) J Nucl Mater 55:177–186.
25. Odette GR, Lucas GE (1991) J Nucl Mater 179–181:572–576.
26. Bement AL (1963) HW-74955, p 181.

27. Eason ED (1998) Development, Evaluation and Analysis of the Initial CIR-IASCC Database, EPRI Report TR-108749, Oct 1998, pp 3–7 to 3–10.
28. Williams JA, Hunter CW (1972) Effects of Radiation on Substructure and Mechanical Properties of Metals and Alloys, STM STP 529. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, p 13.
29. Pettersson K (1992) Radiation Effects on Mechanical Properties of Light Water Reactor Structural Materials, TR1TA-MAC-0461. Materials Research Center, The Royal Institute of Technology, Stockholm, March 1992.
30. Was GS, Busby JT (2003) Use of Proton Irradiation to Determine IASCCMechanisms in Light Water Reactors: Solute Addition Alloys, Final Report, Project EP-P3038/C1434, Report #1007440. Electric Power Research Institute, Palo Alto, CA, April, 2003.
31. Garner FA, Hamilton ML, Panayotou NF, Johnson GD (1981) J Nucl Mater 103/104:803–808.
32. Grossbeck ML, Maziasz PJ, Rowcliffe AF (1992) J Nucl Mater 191–194:808–812.
33. Zinkle SJ (1992) In: Stoller RE, Kumar AS, Gelles DS (eds) Effects of Radiation on Materials the 15th International Symposium, ASTM STP 1125. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1992, pp 813–834.
34. Bloom EE (1976) Irradiation strengthening and embrittlement. In: Radiation Damage in Metals. American Society for Metals, Metals Park, OH, pp 295–329.
35. Hashimoto N, Wakai E, Robertson JP (1999) J Nucl Mater 273:95–101.
36. Ando M, Katoh Y, Tanigawa H, Kohyama A, Iwai T (2000) J Nucl Mater 283–287:423– 427.
37. Maziasz PJ (1993) J Nucl Mater 205:118–145.
38. Kelly PM (1972) Scr Metal 6:647.
39. Odette GR, Lucas GE, Klingensmith RD, Stoller RE (1996) In: Gelles DS, Nanstad RK, Kumar AS, Little EA (eds) Effects of Radiation on Materials the 17th International Symposium, STM STP 1270. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1996, pp 606–636.
40. Odette GR,Mader EV, Lucas GE, PhythianW, English CA (1993) In: Kumar AS, Gelles DS, Nanstad RK, Little EA (eds) Effects of Radiation onMaterials the 16th International Symposium, ASTM STP 1175. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1993, p 373.
41. Odette GR, Yamamoto T, Klingensmith D (2005) Phil Mag 85(4–7):779–797.
42. Kasada R, Kitao T,Morishita K, Matsui H, Kimura A (2001) In: Rosinski ST, Grossbeck ML, Allen TR, Kumar AS (eds) Effects of Radiation on

Materials the 20th International Symposium, ASTM STP 1405. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 2001, p 237.
43. Schaeublin R, Gelles D, Victoria M (2002) J Nucl Mater 307–311:197–202.
44. Gupta G, Jiao Z, Ham AN, Busby JT,Was GS (2006) Microstructural evolution of proton irradiated T91. J Nucl Mater 351(1–3):162–173.
45. Wechsler MS, Murty KL (1989) Metal Trans A 20A:2637–2649.
46. Ohr SM, Tucker RP,Wechsler MS (1970) Phys Status Solidi A 2:559–569.
47. McClintock FA, Argon AS (1966) Mechanical Metallurgy of Materials. Addison- Wesley, New York.
48. Tabor D (1956) The physical meaning of indentation and scratch hardness. Brit J of App Phy 7:159 May.
49. Prandtl L (1920) Nachr Ges Wiss, Gottingen, p 74.
50. Hencky H, Agnew Z (1923) Math Mech 3:250.
51. Larsson PL (2001) Investigation of sharp contact at rigid-plastic conditions. Int J Mech Sci 43:895–920.
52. Busby JT, Hash MC, Was GS (2005) J Nucl Mater 336:267–278.
53. Lucas GE, Odette GR, Maiti R, Sheckherd JW (1987) In: Garner FA, Henagar CH, Igata N (eds) Influence of Radiation onMaterials Properties the 13th International Symposium (Part II), STM STP 956. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1987, pp 379–394.
54. Strudel JL, Washburn J (1964) Phil Mag 9:491.
55. Gelles DS (1981) In: Ashby MF, Bullough R, Hartley CS, Hirth JP (eds) Proceedings of Dislocation Modeling of Physical Systems. Pergamon, Oxford, p 158.
56. Foreman AJE, Sharp JV (1969) Phil Mag 19:931.
57. Tanigawa H, Kohyama A, Katoh Y (1996) J Nucl Mater 239:80.
58. Eyre BL, Bullough R (1965) Phil Mag 12:31.
59. Frost HJ, Ashby MJ (1982) Deformation-Mechanism Maps: The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics. Pergamon, New York.
60. Zinkle SJ, Lucas GE (2003) Deformation and Fracture Mechanisms in Irradiated fcc and bcc Metals, US Department of Energy, Semi-annual Report, DOE-ER-0313/34, p 117.
61. Byun TS, Hashimoto N (2006) J Nucl Mater 354:123–130.
62. Eyre BL (1962) Phil Mag 7:2107.
63. Tucker RP,Wechsler MS, Ohr SM (1969) J Appl Phys 40(1):400–408.
64. Byun TS, Farrell K (2004) Acta Materialia 52:1597–1608.
65. Was GS, Jiao Z, Busby JT (2006) In: Gdoutos EE (ed) Proceedings of the 16th European Conference of Fracture. Springer, Berlin Heidelberg New York.
66. Byun TS, Hashimoto N, Farrell K, Lee EH (2006) J Nucl Mater 354:251–264.

67. Byun TS, Hashimoto N, Farrell K (2006) J Nucl Mater 351:303–315.
68. Farrell K, Byun TS, Hashimoto N (2004) J Nucl Mater 335:471–486.

۱۳

شکست و تردی

تردی یک فلز با مقدار تغییر شکل پلاستیک یا خزشی که قبل از شکست رخ می‌دهد، اندازه‌گیری می‌شود. پرتودهی همواره منجر به کاهش انعطاف‌پذیری یک فلز نسبت به شرایط غیرپرتودهی می‌شود. شکست می‌تواند از نوع ترد باشد که در آن یک ترک کوچک سریعاً در سراسر یک ماده گسترش می‌یابد، یا آن‌که شکست می‌تواند بعد از یک زمان طولانی در تنش و بعد از تغییر شکل قابل توجهی رخ دهد. خرابی به واسطه‌ی گسیختگی تنشی و به وسیله‌ی اتصال ترک‌های بین‌دانه‌ای کوچک یا حفره‌هایی رخ می‌دهد که در سرتاسر درون فلز گسترده شده‌اند.

رفتار شکست مواد ساختمانی پرتودیده نه فقط به دلایل امنیت عمومی در مورد سیستم‌های فشار محدود بلکه به دلایل اقتصادی در مورد عملکرد سوخت و پایایی تأسیسات امری حیاتی است. بنابراین تلاش‌های بسیاری برای تعیین محدودیت‌های مکانیکی و مهندسی برای شکست فولادهای مخازن تحت فشار و آلیاژهای مواد هسته رآکتور تحت شرایط متالوژیکی و عملیاتی مختلف انجام شده است. به منظور تأمین راهنمایی‌هایی برای تحلیل طراحی و امنیتی، اطلاعاتی در مورد برخی ویژگی‌های

شاخص گردآوری شده است؛ اما اثرات پرتودهی روی منشأ آغاز ترک و سازوکارهای گسترش آن هنوز تحت بررسی است.

در این فصل در ابتدا فرمول‌بندی‌هایی برای استحکام چسبندگی نظریه‌ی فلزات[1] ارایه خواهد شد و با مقدمه‌ای بر مکانیک شکست دنبال می‌شود. با استفاده از این ابزار نظریه‌ی شکست ترد بیان خواهد شد و این نظریه برای تشریح رفتار شکست فلزات در بازه‌ی تحول کشسان ـ پلاستیک با نظریه‌ی تسلیم در فلزات ترکیب خواهد شد. اثر پرتودهی در ترکیب با دیگر اثرات تردی روی رفتار شکست فولادهای مخازن تحت فشار بررسی خواهد شد که با کاربرد سازوکارهای شکست برای گسترش ترک و رشد ترک خستگی دنبال می‌شود. در پایان نیز تردی دما بالا و سازوکارهای شکست بحث خواهد شد.

۱۳-۱ انواع شکست

فلزات وابسته به نوع آلیاژ، دما، حالت تنش و نرخ بارگذاری انواع مختلفی از شکست را نشان خواهند داد. شکست می‌تواند به دو دسته‌ی اصلی تقسیم‌بندی شود: *شکست نرم* و *شکست ترد*. یک شکست نرم با تغییر شکل پلاستیک قابل ملاحظه قبل و در طول گسترش ترک تشریح می‌شود. شکست ترد در فلزات به وسیله‌ی نرخ سریع گسترش ترک با هیچ‌گونه تغییر شکل برجسته و تغییر شکل بسیار کوچک در حد میکرو توصیف می‌شود. در عمل، مرز میان شکست ترد و شکست نرم اختیاری و وابسته به موقعیتی است که بررسی می‌شود.

شکست ترد اغلب به وسیله‌ی شکست رخی[2] یا جدایش در طول صفحه‌های بلورشناسی با اندیس پایین رخ می‌دهد. حالت شکست رخی، به وسیله‌ی تنش‌های کششی فعال عمود بر صفحه‌ی رخ بلورشناسی کنترل می‌شود. بجز شکست ناشی از تردی مرزدانه‌ای، شکست‌های ترد در فلزات bcc و hcp و نه در فلزات fcc مشاهده شده است. در نمونه‌های چند بلوری، شکست هم‌چنین می‌تواند به صورت درون دانه‌ای[3] که در آن ترک در میان دانه‌ها گسترش می‌یابد یا بین‌دانه‌ای[4] که در آن ترک در طول مرزدانه‌های گسترش می‌یابد، تقسیم بندی شود.

---

1. theoretical cohesive strength
2. Cleavage
3. transgranular
4. intergranular

۱۳-۲ استحکام چسبندگی فلزات

در اکثر شرایط اصلی، استحکام فلزات ناشی از نیروهای چسبندگی میان اتم‌ها است. شکل ۱-۸ در فصل ۱ تغییر در توابع پتانسیلی برای یک اتم در حدود موقعیت تعادلیش را نشان می‌دهد. شکل ۱۳-۱ تغییرات مرتبط در نیروی چسبندگی میان دو اتم را به صورت تابعی از فاصله‌ی جدایش این اتم‌ها نشان می‌دهد. این منحنی از نیروهای جاذبه و دافعه بین اتم‌ها نتیجه شده است. فاصله‌ی بین‌اتمی اتم‌ها در شرایط غیرکرنشی به وسیله‌ی فاصله‌ی طولی a نشان داده می‌شود. اگر بلور در معرض یک بار کششی قرار گیرد، فاصله جدایش میان اتم‌ها افزایش می‌یابد. نیروی دافعه، بسیار سریع با افزایش فاصله از نیروی جاذبه کاهش می‌یابد، در نتیجه یک نیروی خالص میان اتم‌ها بار کششی را متعادل می‌کند. هم‌چنان که بار کششی بیش‌تر افزایش می‌یابد، نیروهای دافعه قابل چشم‌پوشی می‌شوند و نیروی جاذبه به علت افزایش فاصله اتم‌ها کاهش می‌یابد. این نقطه منطبق با یک بیشینه در منحنی است که معادل با استحکام چسبندگی نظریه‌ی ماده است.

اگر فرض شود که بتوان منحنی نیروی چسبندگی را با یک منحنی سینوسی نشان داد، یک تقریب خوبی از استحکام چسبندگی به‌دست می‌آید [۱]:

(۱-۱۳)

$$\sigma = \sigma_{\text{th}} \sin \frac{2\pi x}{\gamma}$$

که σ_{th} استحکام چسبندگی نظری و x جابه‌جایی در فواصل اتمی در شبکه با طول موج λ است. برای جابه‌جایی‌های کوچک $\sin x \approx x$ است و داریم:

(۲-۱۳)

$$\sigma = \sigma_{\text{th}} \frac{2\pi x}{\lambda} .$$

با در نظر گرفتن یک جامد کشسان ترد، از قانون هوک[1] می‌توان نوشت:

1. Hooke's law

(۳-۱۳)

$$\sigma = E\varepsilon = \frac{Ex}{a}.$$

با حذف x از معادله‌های ۱۳-۲ و ۱۳-۳ داریم:

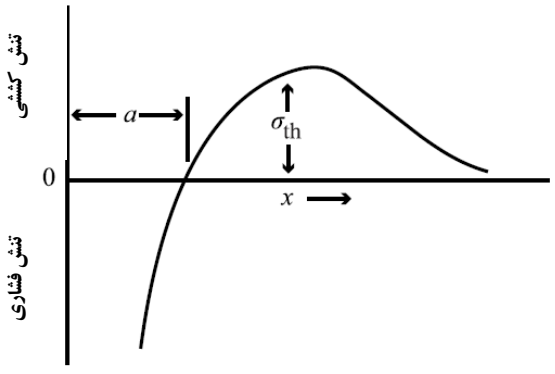
(۴-۱۳)

$$\sigma_{\text{th}} = \frac{\lambda}{2\pi}\frac{E}{a}.$$

هنگامی که در یک جامد ترد شکست رخ می‌دهد، تمام کار صرف شده در تولید شکست صرف ایجاد دو سطح جدید می‌شود. هر کدام از این سطح‌ها یک انرژی سطحی γ در واحدهایی از انرژی بر مساحت واحد را دارد. کار انجام شده در مساحت واحد سطح در ایجاد شکست، U_{f} برابر با مساحت زیر منحنی تنش ـ جابه‌جایی در شکل ۱۳-۱ است:

(۵-۱۳)

$$U_{\text{f}} = \int_0^{\lambda/2} \sigma_{\text{th}} \sin\frac{2\pi x}{\lambda}\,\mathrm{d}x = \frac{\lambda\,\sigma_{\text{th}}}{\pi}$$



شکل ۱۳-۱. نیروی چسبندگی روی یک اتم نسبت به فاصله‌ی جدایش بین اتم‌ها [۱].

که λ طول موج است. این انرژی برای ایجاد دو سطح جدید شکست مورد نیاز است:

(۶-۱۳)

$$\frac{\lambda \sigma_{th}}{\pi} = 2\gamma, \quad \text{یا} \quad \lambda = \frac{2\pi\gamma}{\sigma_{th}},$$

و با جایگذاری در معادله‌ی ۱۳-۴ نتیجه می‌شود که:

(۷-۱۳)

$$\sigma_{th} = \left(\frac{E\gamma}{a}\right)^{1/2}.$$

معادله‌ی ۱۳-۶ تخمینی از تنش نظری مورد نیاز برای ایجاد دو سطح جدید با انرژی سطحی γ است. با در نظر گرفتن مقادیر نمونه‌وار برای ضرایب در معادله‌ی ۱۳-۷ مقادیری برای استحکام شکست نظری به‌دست می‌آید که ۱۰ تا ۱۰۰۰ برابر مقادیری است که برای مواد مهندسی مشخص شده است. برای تشریح این تفاوت، گریفیث[1] [۲] پیشنهاد کرد که یک ماده‌ی ترد شامل تعدادی از ترک‌های ریز است که تمرکز تنش به اندازه‌ی کافی بزرگی را ایجاد می‌کند در نتیجه استحکام چسبندگی نظری، در مناطقی موضعی به تنش اسمی می‌رسد که کم‌تر از مقدار نظری است.

هنگامی که طول یک ترک در فرایند شکست ترد افزایش می‌یابد، ناحیه‌ی سطحی اطراف ترک نیز افزایش می‌یابد. انرژی مورد نیاز برای غلبه بر نیروی چسبندگی اتم‌ها یا به بیان دیگر رشد ترک، نیازمند افزایش در انرژی سطحی است. منبع افزایش انرژی سطحی، انرژی کرنش کشسان است که با گسترش ترک آزاد می‌شود. گریفیث معیار زیر را برای گسترش ترک بیان کرد: «ترک هنگامی گسترش خواهد یافت که کاهش در انرژی کرنش کشسان حداقل برابر با انرژی مورد نیاز برای ایجاد سطح جدید ترک باشد». این معیار می‌تواند برای تعیین بزرگی تنش کششی استفاده می‌شود که تنها دلیل گسترش ترک با اندازه مشخص تا شکست ترد است.

اگر ترک بیضی به طول 2c در صفحه‌ی تخت با ضخامت واحد تحت تنش اعمالی، σ به صورت

1. Griffith

عمود بر صفحه ترک در نظر گرفته شود، سپس حضور ترک انرژی کرنشی کلی را به اندازه‌ی مقدار زیر کاهش می‌دهد [۳]:

(۸-۱۳)

$$U_{\mathrm{E}} = -\frac{\pi c^2 \sigma^2}{E} .$$

کاهش در انرژی کرنشی برای ایجاد دو سطح ترک که انرژی زیر را نیاز دارند در دسترس است:

(۹-۱۳)

$$U_{\mathrm{S}} = 4\gamma c.$$

مطابق با معیار گریفیث ترک تحت تنش اعمالی ثابت σ گسترش خواهد یافت اگر افزایش نمایی در طول ترک هیچ گونه تغییری در انرژی کلی سیستم ایجاد نکند، به عبارت دیگر، افزایش انرژی سطحی با کاهش در انرژی کرنش کشسان جبران شود. با استفاده از معادله‌های ۱۳-۸ و ۱۳-۹، این معیار به صورت زیر می‌تواند بیان شود:

(۱۰-۱۳)

$$\frac{\partial}{\partial c}\left(4\gamma c - \frac{\pi \sigma^2 c^2}{E}\right) = 0 ,$$

و با حل برای تنش می‌توان نوشت:

(۱۱-۱۳ الف)

$$\sigma_{\mathrm{f}} = \left(\frac{2E\gamma_s}{\pi c}\right)^{1/2} .$$

برای شرایط کرنش صفحه‌ای، E با $E/(1-\nu)^2$ جایگزین می‌شود و در نتیجه:

(۱۳-۱۱ ب)

$$\sigma_f = \left(\frac{4E\gamma_s}{(1-\nu)^2\pi c}\right)^{1/2}.$$

معادله‌های ۱۳-۱۱ تنش لازم برای گسترش ترک در ماده‌ی ترد، σ_f، را به صورت تابعی از اندازه‌ی ریز ترک ارایه می‌دهد.

مشخص شده است که حتی فلزاتی که در شیوه‌های کاملاً تردی شکسته می‌شوند، قبل از شکست مقداری تغییر شکل پلاستیکی را متحمل می‌شوند. بنابراین، از لحاظ علمی معادله‌ی گریفیث برای تنش شکست فلزات اعمال نمی‌شود. اوراوان [۴] پیشنهاد کرد که معادله‌ی گریفیث می‌تواند با وارد کردن عبارت نشان دهنده‌ی کار پلاستیکی مورد نیاز برای گسترش دیواره‌ی ترک، γ_p، سازگاری بیش‌تری با شکست ترد در فلزات داشته باشد. در این مورد معادله‌ی ۱۳-۱۱ الف به صورت زیر اصلاح شد:

(۱۳-۱۲)

$$\sigma_f = \left[\frac{2E(\gamma+\gamma_p)}{\pi c}\right]^{1/2} \approx \left(\frac{E\gamma_p}{c}\right)^{1/2}.$$

عبارت انرژی سطحی می‌تواند نادیده گرفته شود زیرا تخمین زده شده که عبارت کار پلاستیکی در مقایسه با مقادیر $1\ J/m^2$ برای γ در حدود 10^2-$10^3\ J/m^2$ است.

۱۳-۳ مکانیک شکست

مکانیک شکست، چقرمگی نسبی مواد مهندسی تحت شرایط مشابه با چیزی را تشریح می‌کند که در عملیات‌های مهندسی به وجود می‌آید. در بررسی این موضوع دیدگاه اروین[1] [۵] همان‌طوری که به وسیله‌ی رید ـ هیل[2] [۶] تشریح شده استفاده می‌شود که در آن کار انجام شده در حرکت یک ترک در فاصله‌ی کوچک، Δx، به منظور تعیین نیروی مؤثر مقاوم در برابر حرکت آن مورد توجه قرار

1. Irwin
2. Read-Hill

می‌گیرد. در محاسبه‌ی این کار او فرض کرد که ترک وارونه حرکت کرده و به جای باز شدن بسته شود. در نتیجه فرض می‌شود که شکل ۱۳- ۲ الف یک انتهای ترک را که در سراسر یک صفحه با پهنای بی‌نهایت و ضخامت واحد گسترده شده و به وسیله یک تنش کششی یکنواخت، σ بارگذاری شده را نشان می‌دهد. همان‌طوری که در شکل ۱۳-۲ ب نشان داده شده است، یک تنش کششی، σ_{yy}، در جهت y روی سطوح بالایی و پایینی ترک در سراسر یک فاصله Δx اندازه‌گیری شده از سر ترک اعمال شده است. در صورتی که σ_{yy} در تمام نقاط به مقدار مشابه با مقداری افزایش یابد که در اصل ترک در نقطه‌ی a داشته است، این تنش می‌تواند ترک را در سراسر فاصله‌ی Δx ببندد. گسترش ترک از نقطه‌ی a تا نقطه‌ی b در شکل ۱۳-۲ج نشان داده شده است.

با در نظر گرفتن یک جز کوچک dx از بازه‌ی Δx، همان‌طوری که در شکل ۱۳-۲ ج نشان داده شده است، جداره‌های مخالف این جز هم‌چنان که جزء بسته می‌شود، در سراسر فاصله‌ی $2Y$ حرکت می‌کنند. نظریه‌ی کشسانی فرض می‌کند که جابه‌جایی سطوح ترک به صورت خطی با تنش مفروض σ_{yy} اعمال شده به سطح ترک تغییر کند. کار انجام شده روی جزءِ کوچک dx، هم‌چنان که σ_{yy} به مقادیری افزایش می‌یابد که ترک را می بندد برابر است با:

(۱۳-۱۳)

$$dW = \frac{2Y}{2}\sigma_{yy}\,dx = Y\sigma_{yy}\,dx\,,$$

و کار لازم برای بستن ترک در سراسر فاصله‌ی کلی Δx برابر است با:

(۱۳-۱۴)

$$\Delta W = \int_0^{\Delta x} Y\sigma_{yy}\,dx\,.$$

هم‌چنین فرض می‌شود که مواد جلوی ترک در معرض شرایط تنش صفحه‌ای هستند. همان‌طوری که در بخش ۱۲-۱ بحث شد در شرایط تنش صفحه‌ای که مؤلفه‌ی تنشی، σ_{zz}، موازی با لبه‌ی ترک برابر با صفر است در نتیجه تمام مؤلفه‌های تنشی در صفحه‌ی ورق قرار می‌گیرند. با این شرایط، نظریه‌ی الاستیسیته پیش‌بینی می‌کند که:

(۱۵-۱۳)

$$\sigma_{yy} = \frac{\sigma\sqrt{c}}{\sqrt{2x}} ,$$

و

(۱۶-۱۳)

$$Y = \frac{2\sigma\sqrt{c}}{E}\sqrt{2\left(\Delta x - x\right)} ,$$

که فاصله‌ی اندازه‌گیری شده از نقطه a در شکل ۱۳-۲ج است، c نصف طول ترک است و σ تنش خارجی اعمال شده است. ارزیابی ΔW در معادله‌ی ۱۳-۱۴ نتیجه می‌دهد که:

(۱۷-۱۳)

$$\Delta W = \frac{\sigma^2 c\pi\Delta x}{E} .$$

از آن‌جایی که مشتق کار با فاصله برابر با نیرو است، اروین نیروی گسترش ترک را به صورت زیر محاسبه کرد:

(۱۸-۱۳)

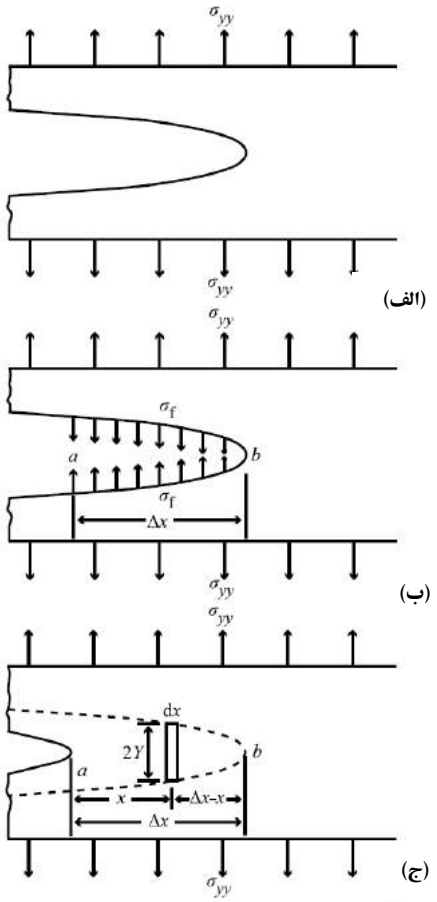
$$G = \frac{\Delta W}{\Delta x} = \sigma_f^2 \frac{c\pi}{E} ,$$

که σ_f تنش اعمال شده در شکست است. این نیرو ممکن است که به جای نیروی لازم برای حرکت ترک در فلز در نظر گرفته شود.لازم به ذکر است که اگر این عبارت با رابطه‌ی گریفیث که در معادله‌ی ۱۳-۱۱ الف مشخص شد مقایسه شود، در نتیجه:

(۱۹-۱۳)

$$G = \frac{\sigma_f^2 c\pi}{E} = 2\gamma ,$$

با توجه به این‌که نیرو در واحد طول اعمال شده روی جبهه‌ی ترک در حال رشد برابر با دو برابر انرژی سطحی ویژه، γ است. این نتیجه انتظار می‌رود که مطابق با نظریه‌ی گریفیث، کار انجام شده در گسترش ترک به انرژی سطحی دو سطح ترک تبدیل می‌شود.



شکل ۱۳-۲. نمایش روش اروین برای تعیین شرایط شکست [۶].

در این مثال، تحلیل اروین به ترک در جامد کشسان ترد اعمال شده است که حرکت آن تغییر شکل پلاستیک جلوی ترک را شامل نمی‌شود. به هرجهت، نظریه‌ی اروین می‌تواند به مسایلی اعمال شود که در آن رشد ترک تغییر شکل پلاستیک را نیز شامل می‌شود، که در آن معادله‌ی ۱۳-۱۹ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۲۰-۱۳)

$$G = 2(\gamma_p + \gamma)\,,$$

که γ انرژی سطحی واقعی و γ_p کار پلاستیک در واحد مساحت در ایجاد سطح است. همان‌گونه که قبلاً نیز توضیح داده شد، در بسیاری از مثال‌های عملی، $\gamma << \gamma_p$ است و γ در مقایسه با γ_p می‌تواند نادیده گرفته شود در نتیجه:

(۲۱-۱۳)

$$G \approx 2\gamma_p\,.$$

در معادله‌ی ۱۳-۲۱ سمت راست معادله‌ی انرژی در واحد ضخامت ورق برای رشد ترک در جامد کشسان است. بنابراین نیروی *مقاومت ترک* نامیده می‌شود و به وسیله‌ی R نشان داده می‌شود. در نتیجه رشد ترک زمانی آغاز می‌شود که نرخ آزادسازی انرژی بحرانی، G_c برابر با نیروی مقاومت ترک، R باشد. از آن‌رو R، نرخی را نشان می‌دهد که در آن انرژی در رشد ترک آزاد می‌شود، سپس:

(۲۲-۱۳)

$$R = \mathrm{d}W/\mathrm{d}c = 2\gamma\,.$$

همان‌طوری که در بالا مشخص شد برای شکست در ورق کشسان ترد، مؤلفه عمودی تنش جلوی ترک به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۲۳-۱۳)

$$\sigma_{yy} = \frac{\sigma\sqrt{c}}{\sqrt{2x}}\,,$$

که x فاصله‌ی جلوی ترک است. لازم به ذکر است که در صورت کسر عبارت موجود در سمت راست معادله، حاصل‌ضرب تنش اعمال شده، σ، و ریشه‌ی دوم c، نصف طول ترک، وجود دارد. این

دو عامل سطح کلی تنش در نقاط جلوی ترک را تعیین می‌کنند. تنش اعمالی بزرگ‌تر یا طول ترک بیش‌تر، منجر به تنش‌های بیش‌تری در هر نقطه در جلو ترک می‌شود. به همین علت اغلب در تحلیل شکست از عامل تعریف شده به منزله‌ی ضریب شدت تنش استفاده می‌شود که حاصل‌ضرب $\sigma\sqrt{c}$ را دربر می‌گیرد. در مورد ترک در ورق کشسان ترد که مؤلفه‌های تنش جلوی ترک مطابق با شرایط تنش صفحه‌ای است، ضریب شدت تنش K به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۲۴-۱۳)

$$K = \sigma\sqrt{c\pi}\,.$$

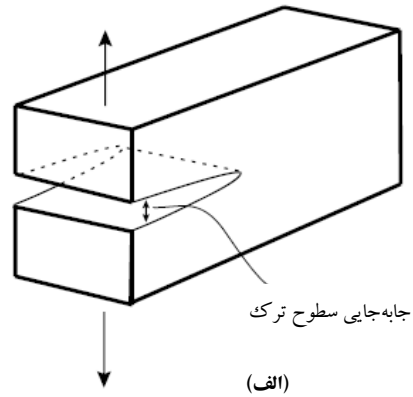
در این مرحله، تعریف سه حالت اصلی شکست همان‌طوری که در شکل ۱۳-۳ نشان داده شده است، آسان است. حالت I، منطبق بر شکستی است که سطوح ترک عمود برخودشان جابه‌جا شده‌اند که یک نوع شکست کششی معمول است. حالت دوم، حالت II، سطوح ترک با یک‌دیگر در جهت عمود بر جبهه‌ی ترک برش داده می‌شوند درحالی‌که در حالت III برش موازی با جبهه‌ی ترک فعال می‌شود.

میدان تنشی در اطراف ترک در جامد، وابسته به حالت است. در مورد حالت I شکست در یک ورق با ترک مرکزی به طول 2c، معادلات برحسب مختصات قطبی، r و θ بیان می‌شوند که r فاصله در صفحه‌ی xy از سر ترک تا یک جز در فضا است و θ زاویه‌ی بین r و محور x است (همان‌طوری که در شکل ۱۳-۴ نشان داده شده است):

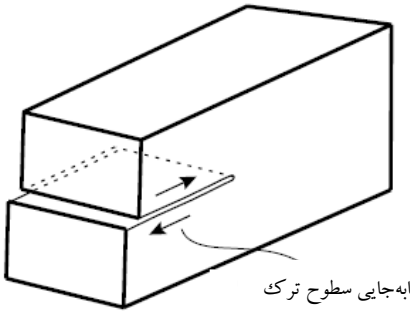
$$\sigma_{xx} = \sigma(c/2r)^{1/2}\cos\frac{\theta}{2}\left[1 - \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{3\theta}{2}\right]$$

$$\sigma_{yy} = \sigma(c/2r)^{1/2}\cos\frac{\theta}{2}\left[1 + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{3\theta}{2}\right]$$

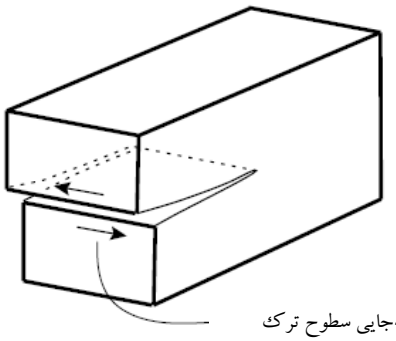
که برای رشد ترک در شرایط تنش صفحه‌ای، $\sigma_{zz} = 0$ و برای رشد ترک در شرایط کرنش صفحه‌ای $\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$.



(الف)

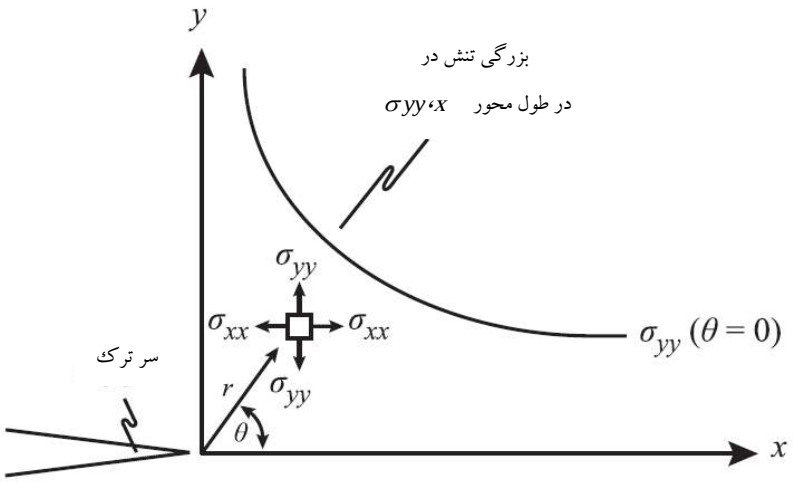


(ب)



(ج)

شکل ۱۳-۳. سه حالت اصلی شکست (الف) حالت I، کششی، (ب) حالت II، برش در جهت عمود بر جبهه‌ی ترک و (ج) حالت III، برش در جهت موازی با جبهه‌ی ترک.



شکل ۱۳-۴. سیستم مختصات برای توضیح میدان تنشی سر ترک همان‌طوری که به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۳-۲۵ تعریف شده است.

(۱۳-۲۵)

$$\sigma_{xy} = \sigma(c/2r)^{1/2} \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{3\theta}{2}$$
$$\sigma_{yz} = \sigma_{xz} = 0\ .$$

این معادله‌ها در درون یک منطقه‌ی محدود در پیرامون سر ترک معتبر هستند. این میدان تنشی می‌تواند برحسب ضریب شدت تنش با استفاده از معادله‌ی ۱۳-۲۴ نوشته شود. برای حالت I، میدان تنشی اطراف سر ترک به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۳-۲۶)

$$\sigma_{xx} = K_I/(2\pi r)^{1/2}\cos\frac{\theta}{2}\left[1 - \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{3\theta}{2}\right]$$
$$\sigma_{yy} = K_I/(2\pi r)^{1/2}\cos\frac{\theta}{2}\left[1 + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{3\theta}{2}\right]$$
$$\sigma_{xy} = K_I/(2\pi r)^{1/2}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{3\theta}{2}\ .$$

هنگامی که تنش اعمالی به نقطه‌ای افزایش می‌یابد که ترک قادر می‌شود سریع حرک کند، یک مقدار بحرانی ضریب شدت تنش به‌دست می‌آید که بالای آن گسترش ترک ناپایدار رخ می‌دهد. این شرایط به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۲۷-۱۳)

$$K_c = \sigma_f \sqrt{c\pi} .$$

کمیت K_c در معنای چقرمگی شکست نامیده می‌شود و به صورت ساده‌ای مرتبط با نیروی گسترش ترک است:

(۲۸-۱۳)

$$G_c = \frac{\sigma_f^2 c\pi}{E} = \frac{K_c^2}{E} ,$$

برای مورد تنش صفحه‌ای و برای کرنش صفحه‌ای معادله‌ی ۱۳-۲۸ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۲۹-۱۳)

$$G_c = \frac{\sigma_f^2 c\pi(1-\nu^2)}{E} = \frac{K_c^2(1-\nu^2)}{E} .$$

ممکن است که G_c و K_c در نقش ضرایبی مورد توجه قرار گیرند که مقاومت یک فلز در برابر گسترش ترک را اندازه‌گیری می‌کنند. بسیار حایز اهمیت است که ذکر شود، روابط بین G_c و K_c به مجموعه‌ی ویژه‌ای از شرایط شکست اشاره دارد که ترک به صورت کشسانی در صفحه‌ی تحت اعمال یک تنش کششی ساده گسترش یابد، و مؤلفه‌های تنشی در جبهه‌ی ترک مطابق با شرایط تنش صفحه‌ای یا کرنش صفحه‌ای باشند. برای دیگر شرایط شکست، روابط بین G_c و K_c متفاوت هستند. در حقیقت، از معادله‌ی ۱۳-۲۱ می‌توان نوشت:

(۳۰-۱۳)

$$G_c = \frac{\sigma_f^2 c\pi(1-\nu^2)}{E} = 2\gamma_p = R\,.$$

برای شکست در حالت I بارگذاری، معمولاً اندیس I به نمادهای K_c و G_c اضافه می‌شود. روابطی که قبلاً ذکر شدند درنهایت می‌توانند به صورت ساده‌ای نوشته شوند:

(۳۱-۱۳)

$$G_{Ic} = \frac{\sigma_f^2 c\pi}{E} = \frac{K_{Ic}^2}{E} \quad \text{or} \quad G_{Ic} = \frac{K_{Ic}^2(1-\nu^2)}{E}\,.$$

تنش‌های سر ترک ناشی از تنش اعمالی می‌تواند منجر به جریان پلاستیکی در سر ترک شود. منطقه‌ی پلاستیکی جلوی سر ترک به شکل کلیه با لب‌های گسترده شده در زیر و بالای صفحه‌ی شکست هستند. سطح مقطعی از ناحیه‌ی پلاستیک در صفحه‌ی xy در شکل ۱۳-۵ نشان داده شده است. بزرگی ناحیه‌ی پلاستیک در صفحه‌ی ترک (صفحه‌ی xy در شکل ۱۳-۵) اغلب به منزله‌ی تخمینی از اندازه‌ی منطقه‌ی پلاستیک در نظر گرفته می‌شود. با استفاده از عبارت σ_{yy} در معادله‌ی ۱۳-۲۶ و ارزیابی آن در $\theta = 0$ عبارت $\sigma_{yy} = K_I / \left(2\pi r_p\right)^{1/2}$ نتیجه می‌شود. با حل برای r_p و با استفاده از $\sigma_{yy} = \sigma_y$ برای تنش صفحه‌ای و $\sigma_{yy} = \sqrt{3}\sigma_y$ برای کرنش صفحه‌ای، که σ_y تنش تسلیم است، می‌توان نوشت:

(۳۲-۱۳)

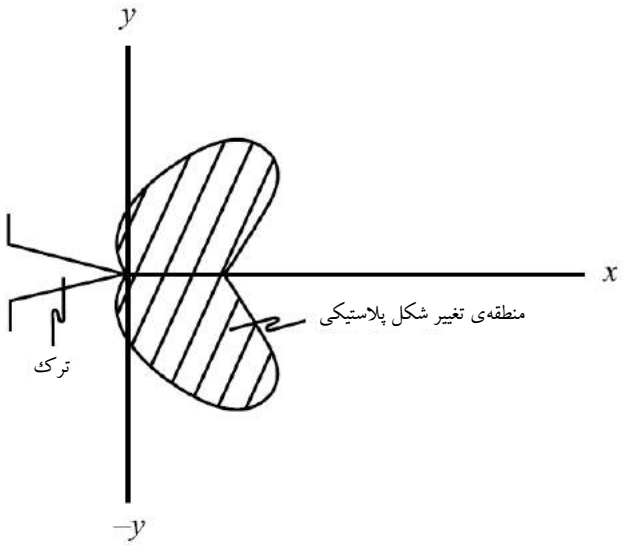
$$r_p = K_I^2 / 2\pi\sigma_y^2\,; \quad \text{تنش صفحه‌ای}$$

(۳۳-۱۳)

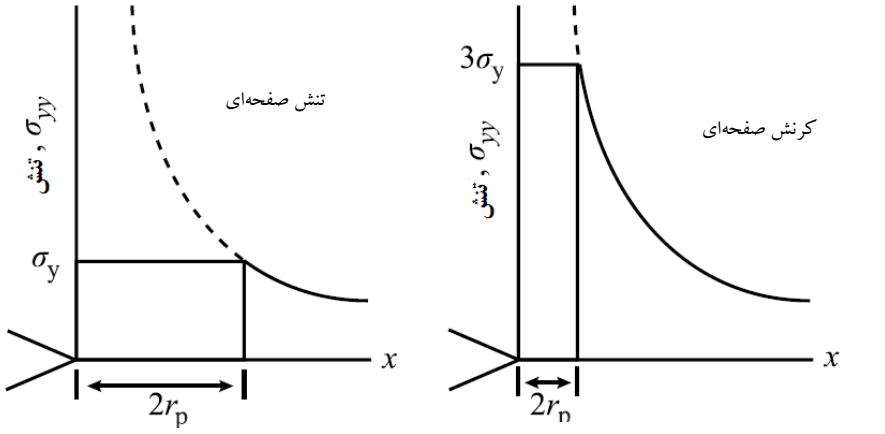
$$r_p = K_I^2 / 6\pi\sigma_y^2\,; \quad \text{کرنش صفحه‌ای}$$

شکل ۱۳-۶ توزیع تنش جلوی ترک را در (الف) تنش صفحه‌ای و (ب) کرنش صفحه‌ای نشان می‌دهد با فرض آن‌که σ_{yy} نمی‌تواند بیش‌تر از σ_y باشد. قابل ذکر است اندازه‌ی منطقه‌ی پلاستیک در

مورد کرنش صفحه‌ای در حدود سه برابر از تنش صفحه‌ای اشاره شده به وسیله‌ی معادله‌های ۱۳-۳۲ و ۱۳-۳۳ کم‌تر است.



شکل ۱۳-۵. سطح مقطع (در صفحه‌ی xy) ناحیه‌ی پلاستیک در جلوی یک سر ترک.



شکل ۱۳-۶. توزیع تنش جلوی یک ترک با فرض آن‌که برای موارد (الف) تنش صفحه‌ای و (ب) کرنش صفحه‌ای، σ_{yy} نمی‌تواند بیش‌تر از σ_y باشد.

۱۳-۴ آزمون‌های مکانیکی شکست

هدف آزمون مکانیکی شکست تعیین ضرایب شکستِ توضیح دهنده‌ی مقاومت فلز در برابر رشد ترک است. حالت I چقرمگی شکست برای تعیین چقرمگی شکست کرنش صفحه‌ای فلز توسعه داده شده است. روش استاندارد برای انجام آزمون شکست در حالت I در استاندارد ASTM E399 توضیح داده شده است [۷]. این استاندارد به نمونه‌های بارگذاری سه نقطه‌ای شده در یک نمونه‌ی شکاف‌دار و نمونه‌ی کشش تراکمی اعمال می‌شود. نمونه‌ی کشش تراکمی یک طراحی معمول نمونه است و در شکل ۱۳-۷ نشان داده شده است. اندازه‌گیری‌های چقرمگی شکست کرنش صفحه‌ای به اعتبار مکانیک شکست خطی کشسان[1] (LEFM) استناد می‌کند. یعنی، فرض شده است که معادله‌ی ۱۳-۲۶ در طول کرنش صفحه‌ای شکست معتبر است زیرا این معادله با استفاده از نظریه‌ی کشسانی استخراج شده‌اند و هیچ‌گونه محاسبه‌ای برای پلاستیسیته ندارد. بنابراین برای آن‌که مکانیک شکست خطی کشسان حفظ شود، اندازه‌ی منطقه پلاستیک جلوی سر ترک که به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۳-۳۳ مشخص شد، باید کوچک باشد. از آن‌جایی که $r_p \alpha 1/\sigma_y^2$ است، استحکام تسلیم نقش مهمی را در اندازه‌ی منطقه‌ی پلاستیک و از آن‌رو، در اعتبار آزمون ایفا می‌کند. استاندارد ASTM E99 الزام می‌دارد که ضخامت نمونه اندازه‌ی کمینه باشد تا از شکست کرنش صفحه‌ای اطمینان حاصل شود. این اندازه به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۱۳-۳۴)

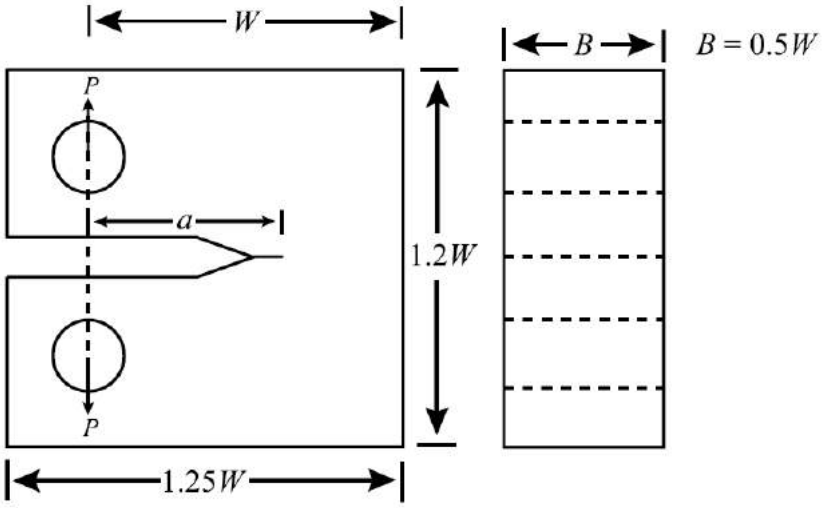
$$B \geq 2.5(K_{Ic}/\sigma_y)^2 ,$$

که B ضخامت نمونه است. به علاوه، طول منطقه‌ی ترک نخورده در ماده که به صورت (W- a) در شکل ۱۳-۷ تعریف شده است، باید بزرگ‌تر از اندازه‌ی منطقه‌ی پلاستیک باشد در نتیجه اندازه‌های زیر مورد نیاز هستند:

(۱۳-۳۵)

$$a \geq 2.5(K_{Ic}/\sigma_y)^2$$
$$B \geq 2.5(K_{Ic}/\sigma_y)^2$$
$$W \geq 5.0(K_{Ic}/\sigma_y)^2 ,$$

1. Linear Elastic Fracture Mechanics



شکل ۱۳-۷. طرح ASTM نمونه‌ی کشش تراکمی برای اندازه‌گیری‌های چقرمگی شکست کرنش صفحه‌ای.

که در این قسمت a نشان دهنده‌ی طول ترک است. شایان ذکر است که معادله‌ی ۱۳-۳۵ مقداری را برای K_{Ic} به منظور تعیین اعتبار نمونه‌ی مورد استفاده برای اندازه‌گیری K_{Ic} لازم دارد. در نتیجه در عمل اگر نمونه‌ی ساخته شده از فلز مورد آزمایش مطابق ملزومات معادله‌ی ۱۳-۳۵ باشد، بزرگی K_{Ic} تخمین زده می‌شود. برای یک نمونه‌ی کششی فشرده، ضریب شدت تنش بر حسب بار اعمال شده، P، ابعاد نمونه، B و W و نسبت طول ترک به پهنای نمونه، a/W، به شکل زیر نوشته می‌شود:

(۱۳-۳۶)

$$K = \frac{P}{BW^{1/2}} \times \times \frac{\left(2+\frac{a}{W}\right)\left[0.886+4.64\left(\frac{a}{W}\right)-13.32\left(\frac{a}{W}\right)^2+14.72\left(\frac{a}{W}\right)^3-5.6\left(\frac{a}{W}\right)^4\right]}{\left(1-\frac{a}{W}\right)^{3/2}},$$

که عبارت اول در سمت راست در اصل تنش اعمال شده است و عبارت دوم اثر طول ترک را منعکس می‌کند.

۱۳-۵ مکانیک شکست کشسان ـ پلاستیک

تعیین چقرمگی شکست کرنش صفحه‌ای برای آزمون‌های عملی وابسته به اعتبار مکانیک شکست خطی کشسان برای یک آزمون مشخص است. اگر استحکام تسلیم بسیار بالا و ضخامت نمونه به اندازه‌ی کافی بزرگ باشد، ملزومات مکانیک شکست خطی کشسان تأمین شده است. به هرجهت، برای تأمین مکانیک شکست خطی کشسان برای اکثر فلزات با استحکام پایین و چقرمگی بالا (حتی در حالت پرتودیده)، نیاز به ضخامت‌های بالا و نزدیک به ۱ متر است. هنگامی که اندازه‌ی منطقه‌ی پلاستیک در یک نمونه برای برهم زدن میدان تنش کشسان به اندازه‌ی کافی بزرگ باشد، تعیین چقرمگی شکست با استفاده از K_{Ic} غیرعملی است. برای به‌دست آوردن اندازه‌ی مقاومت فلز در شکست هنگامی که شکل‌پذیری قابل ملاحظه‌ای وجود داشته باشد، روش‌های دیگری توسعه داده شده است. *انتگرال* J و روش‌های جابه‌جایی دهانه‌ی ترک همان‌طوری به وسیله‌ی رید ـ هیل تشریح شده‌اند[۸]، یکی از روش‌هایی است که خلاصه به آن‌ها اشاره خواهد شد.

انتگرال J پیشنهاد شده به وسیله‌ی ریس[1] یکی از روش‌ها برای تشریح میدان تنش ـ کرنش در سر یک ترک انتگرال مسیری است که به جای نزدیکی به منطقه‌ی سر ترک، به اندازه‌ی کافی دور از سر ترک است.

انتگرال J برای رفتار کشسان یا کشسان ـ پلاستیک به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۳۷-۱۳)

$$J = \int_{\zeta} W\,\mathrm{d}y - T\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\,,$$

که ζ خط واصل در پیرامون سر ترک است که در جهت خلاف عقربه‌های ساعت در نظر گرفته شود، W دانسیته‌ی انرژی کرنشی $\left(\int_0^{\varepsilon}\sigma\mathrm{d}\varepsilon\right)$است T بردار کشش عمود بر یک جزء ds از مسیر ζ است و u بردار جابه‌جایی شکل ۱۳-۸ الف است. $(T_i = \sigma_{ij}n_{ij})$

از دیدگاه فیزیکی‌تر J تفاوت انرژی پتانسیل بین دو بدنه با بارگذاری مشابه و ترک‌هایی با طول متفاوت است یا:

1. Rice

(۳۸-۱۳)

$$J = -\mathrm{d}V/\mathrm{d}c\,,$$

که V انرژی پتانسیل سیستم و J نرخ تغییر انرژی پتانسیل از تغییر در طول ترک با علامت منفی است. در آزمایشات، $\mathrm{d}V/\mathrm{d}c$ با رسم منحنی‌های بار ـ جابه‌جاییِ دو نمونه با طول ترک اولیه‌ی متفاوت به‌دست می‌آیند. همان‌طوری که در شکل ۱۳-۸ ب نشان داده شده است، بارگذاری تا بار ثابت منجر به رشد ترک از طول اولیه c به طول $c + dc$ می‌شود که افزایش در جابه‌جایی با اندازه‌ی δ تولید می‌کند. مساحت بین دو منحنی P ـ δ تفاوت انرژی $\mathrm{d}V$ است و هنگامی که بر $\mathrm{d}c$ تقسیم می‌شود J را نتیجه می‌دهد.

دیدگاه جابه‌جاییِ دهانه‌ی ترک[1] فرض می‌کند که رشد ترک هنگامی رخ می‌دهد که بزرگی کرنش پلاستیک در انتهای ترک به مقدار بحرانی که وابسته به فلز یا آلیاژ است، برسد. این کرنش بحرانی می‌تواند به عنوان معیار شکست استفاده شود. جابه‌جایی سر باز ترک برای ترکی به طول $2c$ در یک ورق نازک بی‌نهایت بزرگ در معرض تنش کششی یکنواخت، σ در فلزی که تغییر شکل پلاستیک در آن در سر ترک رخ دهد، شکل ۱۳-۸ ج، به وسیله‌ی داگدل[2] [۹] تعیین شد به صورتی که:

(۳۹-۱۳)

$$\delta_t = \frac{\pi c \sigma^2}{E \sigma_y}\,.$$

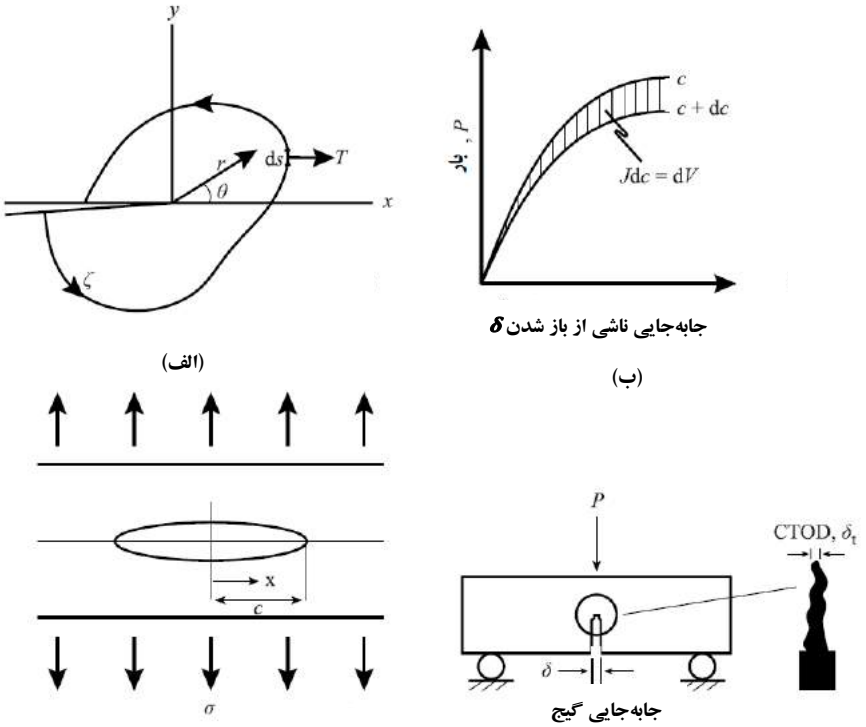
با بازنویسی عبارت نیروی گسترش ترک، معادله‌ی ۱۳-۳۱ و تقسیم طرفین بر σ_y می‌توان نوشت:

(۴۰-۱۳)

$$\frac{G}{\sigma_y} = \frac{\pi c \sigma_f^2}{E \sigma_y}\,,$$

و با جایگذاری معادله‌ی ۱۳-۳۹ در معادله‌ی ۱۳-۴۰ نتیجه گرفته می‌شود که:

1. Crack Opening Displacement Approach
2. Dugdale



شکل ۱۳-۸. (الف) هندسه‌ی سر ترک و دور مسیر انتگرال. (ب) منحنی‌های بار ـ جابه‌جایی برای یک آزمون جابه‌جایی ثابت روی یک ورقه‌ی حاوی ترک‌هایی با طول‌های اولیه اندکی متفاوت برای تعیین انتگرال J. (ج) هندسه‌ی ترک برای تحلیل COD. (د) آزمایش COD که در آن جابه‌جایی با استفاده از یک فک گیره‌ای اندازه‌گیری شده است.

(۴۱-۱۳)

$$G = \sigma_y \delta_t \ ,$$

که منجر به عبارت زیر برای تنش برحسب جابه‌جایی بحرانی سر دهانه‌ی ترک، δ_{ct} برای شکست می‌شود:

(۴۲-۱۳)

$$\sigma_f = \left(\frac{E}{\pi c} \sigma_y \delta_{ct} \right)^{1/2} .$$

جابه‌جایی دهانه‌ی ترک (COD)، δ در فاصله‌ی x از مرکز ترک با جابه‌جایی سر دهانه‌ی ترک، δ_t به صورت زیر در ارتباط است:

(۴۳-۱۳)

$$\delta = \frac{4\sigma}{E}\sqrt{c^2 - x^2 + E^2\delta_t^2/16\sigma^2}\,,$$

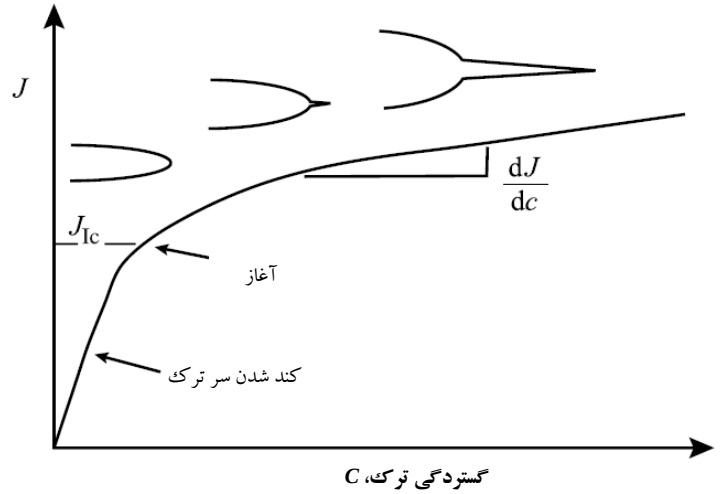
و می‌تواند به وسیله‌ی فک گیره‌ای چسبیده به وجوح نمونه، همان‌طوری که در شکل ۱۳-۸ د نشان داده شده است، اندازه‌گیری شود، که منجر به تشکیل منحنی بار ـ جابه‌جایی در شکل ۱۳-۸ ب می‌شود. لازم به ذکر است هنگامی که x = ۰ باشد اندازه‌گیری روی سطح نمونه در شکل ۱۳-۸ ج انجام می‌شود.

برای رفتار کشسان خطی، انتگرال J برابر با G است. بنابراین، معیار شکست J برای کشسان خطی شبیه به معیار شکست K_{Ic} است. در نتیجه برای شرایط کرنش صفحه‌ای کشسان خطی می‌توان نوشت:

(۴۴-۱۳)

$$J_{Ic} = G_{Ic} = \frac{(1-\nu^2)K_{Ic}^2}{E}\,.$$

با افزایش چقرمگی، بسیاری از مواد به صورت ناگهانی در مقدار مشخص J یا δ شکسته نمی‌شوند. آن‌ها نسبتاً افزایش تدریجی در J و δ را با افزایش طول ترک نشان می‌دهند. منحنی J برحسب طول ترک c، منحنی R نامیده می‌شود. شکل ۱۳-۹ یک منحنی R معمول برای یک ماده نرم را نشان می‌دهد. در ابتدا شیب بسیار زیاد است و به علت کند بودن سر ترک، مقدار کمی از رشد ترک ظاهری وجود دارد. هم‌چنان که J افزایش می‌یابد، مواد سر ترک به صورت موضعی شکسته شده و پیشرفت ترک رخ می‌دهد. یک اندازه‌ای از چقرمگی شکست برای تغییر شکل کشسان ـ پلاستیک J_{Ic} است، که به منزله‌ی رشد ترک پایدار تعریف شده است. از شکل ۱۳-۹، J_{Ic} هنگامی رخ می‌دهد که ترک شروع به رشد می‌کند؛ اما نقطه‌ی دقیقی که J_{Ic} رخ می‌دهد به صورت دقیق تعریف نشده است زیرا این نقطه تا حدی اختیاری است.



شکل ۱۳-۹. شمایی از منحنی R برای یک ماده‌ی نرم [۱۰].

۱۳-۶ شکست ترد

بزرگ‌ترین موفقیت کاربرد مفاهیم مکانیک شکست در مورد شکست ترد است. سه عامل مهم سهیم در شکست نوع رخی که مشخصه‌ی شکست ترد است عبارتند از: (۱) حالت تنش سه محوری، (۲) دمای پایین و (۳) نرخ کرنش بالا. برای تولید شکست ترد هر سه عامل در یک زمان حاضر نیستند. یک حالت تنش سه محوری مانند چیزی که در یک شکاف وجود دارد، و دمای پایین مسئول اکثر شکست‌های سخت از نوع ترد هستند. بنابراین از آن‌جایی که این اثرات در نرخ‌های بالای بارگذاری برجسته می‌شوند، آزمون‌های مختلفی برای تعیین حساسیت مواد در برابر شکست ترد استفاده می‌شود. فرایند شکست ترد شامل سه مرحله است:

۱. تغییر شکل پلاستیک شامل سپرگذاری نابجایی‌ها در طول صفحات لغزشی‌شان در یک مانع،
۲. افزایش تنش برشی در جلوی سپر برای جوانه‌زنی یک ریز ترک،
۳. در بعضی از موارد انرژی کرنش کشسان ذخیره شده، ریز ترک‌ها را برای شکست کامل بدون حرکت بیش‌تر نابجایی در سپرها تحریک می‌کند. اغلب در فلزات، یک مرحله رشد مجزا مشاهده می‌شود که در آن یک تنش افزایش یافته برای گسترش ریز ترک‌ها مورد نیاز است.

تغییر شکل پلاستیک به وسیله‌ی سپرگذاری نابجایی‌ها با نظریه‌ی تسلیم در فلزات بررسی می‌شود که به کوشش کاترل[1] [۱۱] پیشنهاد شده است. این نظریه به فلزاتی اعمال می‌شود که نقطه‌ی تسلیم مشخصی را نشان می‌دهند و می‌تواند برای تعیین تنش شکست استفاده شود. با دانستن استحکام تسلیم و استحکام شکست می‌توان شرایط شکست ترد را استنباط کرد.

نقطه‌ی تسلیم پایینی در فلزات bcc یا در فلزات fcc پرتودهی شده به علت سخت‌گردانی منبعی و سخت‌گردانی اصطکاکی است. کاترل فرض کرد که نابجایی‌ها در تعداد اندکی از دانه‌هایِ تکی، هم به علت آن‌که آرایش این دانه‌ها در قبال بار به گونه‌ای است که بیشینه‌ی تنش برشی تجزیه شده روی صفحه‌ی لغزشی فعال تولید شده یا به علت آن‌که تعداد کم منابع در این دانه‌ها منجر به کاهش تنش‌های آزادسازی می‌شود، آزاد می‌شوند. در این دو مورد، نابجایی‌های تولید شده در دانه‌های تسلیم شده، در برابر مرزدانه سپرگذاری می‌شوند. تنش برشی افزایش یافته در مجاورت سپر، منابع موجود در دانه مجاور را تحریک می‌کند. در نتیجه، هم‌چنان که ماده جریان می‌یابد، تسلیم در سراسر نمونه گسترش می‌یابد.

تنش برشی روی صفحه‌ی لغزشی در دانه‌ی بعدی، بعد از تسلیم دانه‌ی قبلی اعمال می‌شود و تعداد زیادی از نابجایی‌ها را آزاد می‌کند که با مرزدانه‌ی نشان داده شده در شکل ۱۲–۵ متوقف شده‌اند. تنش برشی فعال روی منابع در دانه‌ی ۲ شامل دو مؤلفه‌ی تنش برشی اعمال شده σ_a و تنش برشی ناشی از مجاورت سپر در دانه‌ی ۱ است. تنش برشی ناشی از مجاورت سپر در دانه در معادله‌ی ۱۲–۶۲ مشخص شده است که به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

(۴۵–۱۳)

$$\sigma_2 = \left(\frac{d}{r}\right)^{1/2} (\sigma_a - \sigma_i)$$

که برای محاسبه‌ی تنش اصطکاکی تحمل شده به وسیله‌ی نابجایی‌ها در سپر در دانه‌ی ۱، σ_a به اندازه‌ی σ_i کاهش می‌یابد. با نوشتن معادله‌ی ۱۳–۴۵ برحسب تنش اعمال شده و گروه‌بندی عبارات حاوی $d^{-1/2}$، معادله‌ی هال ـ پچ برای اثر اندازه‌ی دانه روی تسلیم، معادله‌ی ۱۲–۶۳، $\sigma_y = \sigma_i + k_y d^{-1/2}$،

1. Cottrell

به‌دست می‌آید که عبارت دوم در سمت راست سهم سخت‌گردانی منبعی در تنش تسلیم را نتیجه می‌دهد.

زنر[1] اولین بار پیشنهاد کرد که تنش‌های بالای تولید شده در جلوی نابجایی سپرگذاری شده می‌تواند منجر به شکست شود [۱۲]. این مدل در شکل ۱۳-۱۰ نشان داده شده است. تنش برشی فعال روی صفحه‌ی لغزشی، نابجایی‌ها را به سمت یک‌دیگر فشرده می‌کند. در بعضی از مقادیر بحرانی تنش، نابجایی‌ها در جلوی سپر به سمت یک‌دیگر نزدیک شده به گونه‌ای که آن‌ها در داخل یک شکاف ترک یا حفره‌ی نابجایی به بلندی nb و طول $2c$ به یک‌دیگر می‌پیوندند. استرو[2] [۱۳] نشان داد که تمرکز تنش ایجاد شده در جلوی سپر به وسیله تغییر شکل پلاستیک، آزاد نمی‌شود و تنش کششی در سپر به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۱۳-۴۶)

$$\sigma = (\sigma_a - \sigma_i)\left(\frac{L}{r}\right)^{1/2},$$

که σ_a تنش برشی اعمال شده، L طول باند لغزشی قفل شده و r فاصله در صفحه‌ی لغزشی از نابجایی پیش افتاده است. معادله‌ی ۱۳-۴۶ (مشابه معادله‌ی ۱۳-۴۵) می‌تواند برابر با استحکام چسبندگی نظری، معادله‌ی ۱۳-۷، در نظرگرفته شود و داریم:

(۱۳-۴۷)

$$(\sigma_a - \sigma_i)\left(\frac{L}{r}\right)^{1/2} = \left(\frac{E\gamma}{a}\right)^{1/2},$$

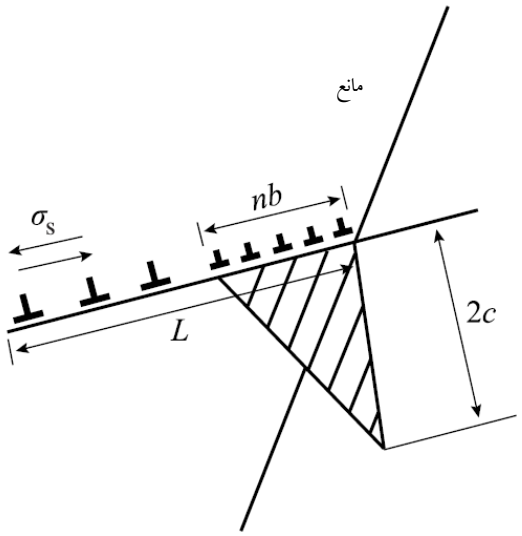
و جوانه‌زنی ترک در شرایط زیر رخ می‌دهد:

(۱۳-۴۸)

$$\sigma_a - \sigma_i = \left(\frac{Er\gamma}{La}\right)^{1/2}.$$

1. Zener
2. Stroh

اگر $r \approx \frac{a}{2}$ و $E \approx 2\mu$ در نظر گرفته شود، سپس معادله‌ی ۱۳–۴۸ به صورت زیر نوشته می‌شود:



شکل۱۳–۱۰. شمایی از تشکیل یک ریز ترک در یک سپر نابجایی لبه‌ای برخلاف یک مانع.

(۴۹–۱۳)

$$\sigma_a - \sigma_i = \left(\frac{2\mu\gamma}{L}\right)^{1/2} .$$

اما از معادله‌ی ۱۲–۵۸، تعداد نابجایی‌ها در باند لغزشی می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

(۵۰–۱۳)

$$n \approx 2(\sigma_a - \sigma_i)\frac{L}{\mu b} ,$$

در نتیجه با حذف L از معادله‌های ۱۳–۴۹ و ۱۳–۵۰ می‌توان نوشت:

(۵۱–۱۳)

$$(\sigma_a - \sigma_i)nb \approx 2\gamma .$$

این شکل از معادله برای جوانه‌زنی ریز ترک به وسیله‌ی کاترل پیشنهاد شده است [۱۱]. این معادله یک معنای فیزیکی مستقیم دارد به نحوی که یک ترک هنگامی تشکیل خواهد شد که کار انجام شده به وسیله‌ی تنش برشی در تولید nb جابه‌جایی برابر با کار انجام شده در حرکت نابجایی برخلاف تنش اصطکاکی به علاوه کار انجام شده در تولید سطوح جدید شکست باشد. برحسب تنش عمود می توان نوشت:

(۵۲-۱۳)

$$\sigma(nb) \approx 4\gamma .$$

با فرض آن‌که منبع نابجایی در مرکز یک دانه به قطر d باشد، در نتیجه $L = \frac{d}{2}$ است و با جایگذاری معادله‌ی ۱۳-۵۱ در معادله‌ی ۱۳-۵۲ می‌توان نوشت:

(۵۳-۱۳)

$$\sigma(\sigma_a - \sigma_i) = \frac{4\mu\gamma_s}{d} .$$

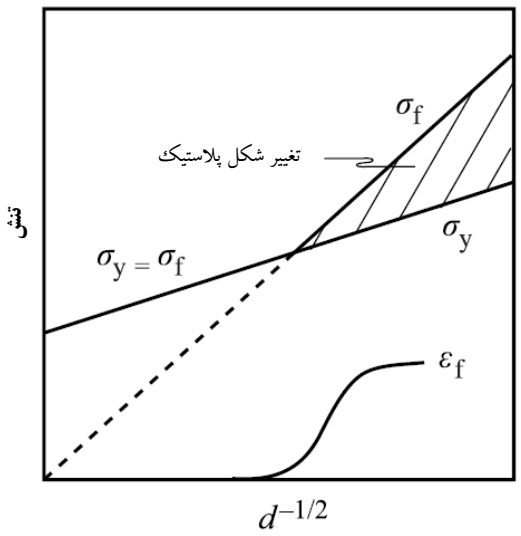
اما از آن‌جایی که در تنش تسلیم، σ_y برابر با σ_a است و $\sigma_y - \sigma_i = k_y d^{-1/2}$ (معادله‌ی ۱۲-۶۳) است، سپس از معادله‌ی ۱۳-۳۲ می‌توان معادله کاترل ـ پچ را نوشت:

(۵۴-۱۳)

$$\sigma = \sigma_f = \frac{4\mu\gamma}{k_y} d^{-1/2} .$$

این معادله تنش لازم برای گسترش یک ریز ترک به طول d در یک شکست ترد را نشان می‌دهد.
وابستگی تنش تسلیم و تنش شکست به اندازه‌ی دانه در یک فولاد کم کربن به شکل ۱۳-۱۱ رسم شده است. لازم به ذکر است که دو خط در یک مقدار مشخص d و σ یک‌دیگر را قطع کرده و این تقاطع نقطه‌ی گذار نرمی به تردی است. در سمت چپ این نقطه‌ی گذار، شکست و تسلیم به صورت

هم‌زمان رخ می‌دهد. به هرجهت، شکست در تنش تسلیم رخ می‌دهد زیرا در این مدل، اول تسلیم رخ می‌دهد. در سمت راست نقطه‌ی گذار، ابتدا تسلیم رخ می‌دهد و کرنش نموی بین σ_f و σ_y به علت کار سختی فلز است. در طول این فرایند، فلز به صورت پلاستیکی تغییر شکل می‌دهد و تنش شکست با کاهش d افزایش می‌یابد. عامل k_y تعداد نابجایی‌هایی را نشان می‌دهد که در درون سپر هنگام آزاد شدن منبع رها شده‌اند. موادی با مقدار بالای k_y (به عبارت دیگر فولادهای فریتی و مولیبدن) در مقایسه با موادی با k_y پایین (برای مثال نیوبیوم و تانتالم) تمایل بیش‌تری به شکست ترد دارند. در فلزات bcc، مقاومت اصطکاکی به سرعت هم‌چنان که دما تا زیر دمای اتاق کاهش می‌یابد، افزایش می‌یابد و منجر به استحاله‌ی نرمی به تردی می‌شوند.



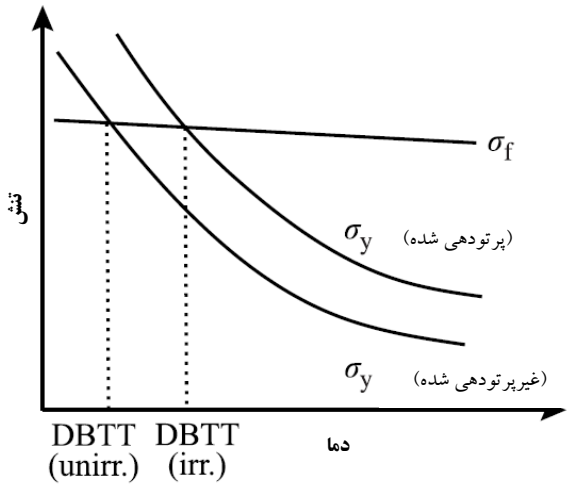
شکل ۱۳-۱۱.اثر اندازه دانه روی تنش تسلیم و شکست یک فولاد کم کربن آزمایش شده در دمای اتاق.

نظریه کاترل ـ پچ توضیحی از چگونگی ترد شدن فولادها در اثر پرتودهی ارایه می‌دهد. عیوب القایی تابشی و خوشه‌های عیب، مؤلفه‌ی اصطکاکی تنش را از تنش تسلیم، σ_i با افزایش مقاومت حرکت نابجایی‌ها افزایش می‌دهند. به هر حال، در فلزات bcc پرتودهی نشده، در غیاب عیوب نقطه‌ای تولید شده‌ی نوترونی (که منجر به پدیده‌ی نقطه‌ی تسلیم بالا و پایین می‌شود)، منابع به وسیله‌ی اتم‌های ناخالصی میخ‌کوب شده‌اند، در نتیجه پرتودهی فقط اثر کوچکی روی k_y دارد. اثر خالص این

تفاوت‌های وابسته به پرتودهی، به این صورت است که استحکام تسلیم از استحکام شکست بسیار بیش‌تر افزایش می‌یابد. شکل ۱۳-۱۲ اثر پرتودهی روی وابستگی دمایی استحکام‌های تسلیم و شکست را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که افزایش در استحکام تسلیم به علت پرتودهی، دمایی را که در آن شکست ترد رخ می‌دهد به دماهای بالاتر منتقل می‌کند. اتلاف جدی در انعطاف‌پذیری در دماهای پایین ناشی از تفاوت حساسیت σ_y و σ_f به آسیب نوترونی است. دمای استحاله نرمی به تردی (DBTT) یا دمای نرمی صفر (NDT) به صورت شرایطی تعریف می‌شود که در آن $\sigma_f = \sigma_y$ می‌شود که از معادله‌ی ۱۳-۵۴ می‌توان نوشت:

(۱۳-۵۵)

$$\sigma_y k_y = 4\mu\gamma d^{-1/2} .$$



شکل ۱۳-۱۲. رابطه‌ی بین وابستگی دمایی تنش تسلیم و استحکام شکست و دمای استحاله نرمی به تردی.

بمت [۱۴] معادله‌ی کاترل ـ پچ برای تنش شکست را به صورت زیر نوشت:

(۱۳-۵۶)

$$\sigma_f = \frac{\beta\mu\gamma_e}{k_S} d^{-1/2} ,$$

که β یک ثابت مرتبط با درجه‌ی سه محوری بودن تنش اعمال شده است، γ_e انرژی سطحی مؤثر ترک ($\gamma + \gamma_p$) است و $k_S = M^{-1}k_y$ است، که M ضریب جهت‌گیری تیلور است و k_y ثابت بیان کننده سهم مرزدانه در استحکام در رابطه‌ی هال ـ پچ (معادله‌ی ۱۲–۶۳) است.

با توجه به معادله‌ی کاترل ـ پچ افزایش القایی تابشی در استحکام تسلیم، k_s را افزایش می‌دهد، یا کاهش در انرژی سطحی مؤثر، γ_e منجر به افزایش تردی می‌شود. از آن‌جایی که در کل تنش شکست، σ_f با پرتودهی تأثیر نمی‌پذیرد و در قبال σ_y کم‌تر وابسته به دما است، تغییر ویژگی‌های القایی تابشی که در بالا ذکر شد، می‌تواند منجر به افزایش قابل توجه در دمای تبدیل نرمی به تردی (تحت معیار $\sigma_y = \sigma_f$) شود که به صورت زیر نشان داده می‌شود:

(۵۷–۱۳)

$$T_c = C^{-1}\left[\ln Bk_s d^{1/2}/(\beta\mu\gamma - k_y k_s)\right] ,$$

که B و C ثوابتی برای بیان وابستگی دمایی σ_i (با نادیده گرفتن تنش‌های بلند دامنه) هستندکه به صورت زیر تعیین می‌شوند:

(۵۸–۱۳)

$$\sigma_i = B\exp(-CT) ,$$

که T دمای مطلق است.

اثرات مورد انتظار پرتودهی روی ضرایب ویژه‌ی معادله‌ی کاترل ـ پچ به وسیله‌ی بمت در جدول ۱–۱۳ تعیین شده است. اگرچه σ_y به صورت قطعی با پرتودهی افزایش می‌یابد، که تنها دلیل برای انتقال اساسی در دمای گذار نرمی به تردی برای فولاد است، اثرات عناصر باقی‌مانده و کانال‌بندی نابجایی روی σ_i و k_s به خوبی مشخص نشده است.

بررسی اثرات پرتودهی روی رابطه‌ی هال ـ پچ برای آهن، فولاد و مولیبدن نتایج مختلفی را نشان داده است. در هر صورت، نتایج نشان داده‌اند که پرتودهی در اندازه دانه‌های نسبتاً کوچک ($d^{-1/2} > \mathrm{mm}^{-1/2}$) اثر کمی را روی k_y دارد و در اندازه دانه‌های بزرگ، k_y را به مقادیر کوچکی کاهش می‌دهد. پرتودهی یک آهن آرمکو (اندازه دانه ۵۰μm) تا مقدار پرتوگیری $۳ \times ۱۰^{۱۸}\ \mathrm{n/cm}^2$

($E > ۱$ MeV) در دمای ۵۰^{o}C منجر به کاهش در k_y از ۳۹۶ MPa$(\mu m)^{1/2}$ تا ۳۰۵ MPa$(\mu m)^{1/2}$ می‌شود [۱۶]. کاهش قابل توجه در k_y برای اندازه دانه‌های بزرگ‌تر در شارهای نوترون بیش‌تر از $۱۰^{۱۸}$ n/cm^2 رخ می‌دهد که آستانه‌ای برای افزایش زیاد در استحکام تسلیم و به همان نسبت افزایش بزرگ در دمای گذار نرمی به تردی است. در این مقادیر پرتوگیری نوترونی خوشه‌های عیب و کانال‌های نابجایی در میکروسکوپ الکترونی دیده می‌شوند.

جدول ۱۳-۱. اثر پرتودهی روی ضرایب در معادله‌ی کاترل ـ پچ، معادله‌ی ۱۳-۵۶ [۱۴].

عبارت	توضیح	اثر پرتودهی
σ_y	تنش تسلیم	افزایش
$\Delta\sigma = \sigma_f - \sigma_y$	افزایش تنش برای شکست	کاهش
β	تنش اعمال شده‌ی سه محوری	.....
μ	مدول برشی	.....
γ_e	انرژی سطحی مؤثر $(\gamma + \gamma_p)$	کاهش
d	اندازه دانه	.....
k_y	شیب پچ	کاهش (d بزرگ)، تغییر کم (d کوچک)
M	ضریب جهت‌گیری تیلور	افزایش به علت کاناله شدن
σ_c	تنش فعال منبعی	افزایش
r	فاصله از منبع تا سپر	کاهش به علت کاناله شدن

برخلاف مشاهدات، کانال‌بندی نابجایی با محدود کردن لغزش متقاطع نابجایی‌ها و با محدود کردن تعداد سیستم‌های لغزشی فعال مورد نیاز برای حفظ پیوستگی مرزدانه‌ها، منجر به افزایش مقدار k_y می‌شود. ممکن است که در پرتودهی مواد ریزدانه خوشه‌های عیب یک مقاوت اضافی کمی را در برابر لغزش اجباری نزدیک مرزدانه‌ها مطابق با مدل جوهانسون[1] برای K_y نشان دهند [۱۷] و در مواد درشت دانه سهم تنش‌های بلند دامنه به علت سپرگذاری نابجایی در تقاطع کانال‌ها یا دیگر موانع (مانند کاربیدها)، تنش‌های معکوس ناشی از مرزدانه‌ها را از بین می‌برد. یعنی، تنش سیلان در کرنش بعد از تسلیم، k_y را مستقل از اندازه دانه می‌کند و مقدار تکثیر نابجایی که در طول تشکیل کانال رخ می‌دهد مشخص نیست، در نتیجه اثرات اندازه دانه روی تسلیم و شکست فلزات bcc پرتودهی شده هنوز مشخص نیست.

1. Johnson

از تحلیل بالا، نه تنها فرضیه در نظر گرفته شده برای تعداد نابجایی‌های پیوسته، nb در شکاف ترک بلکه عبارت انرژی سطحی نیز در کاربرد مدل‌های شکست حایز اهمیت هستند. انرژی سطحی یک عامل بحرانی در تحلیل گسترش ترک‌های موجود، همان‌طوری که به وسیله‌ی نظریه‌های گریفیث [۲]، اوراوان [۴] و اروین [۵] توضیح داده شده، است. چقرمگی شکست کرنش صفحه‌ای، K_{Ic}، برای فولاد پرتودهی شده [۱۸] می‌تواند منجر به کاهش در نیروی بحرانی گسترش ترک، $G_c = \frac{K_{Ic}^2}{E}$ شود که منجر به کاهش در انرژی سطحی مؤثر ($G_c = 2\gamma_e$ هنگام $\sigma = \sigma_f$) می‌شود.

انرژی سطحی مؤثر، γ_e برای فلزات چند بلوری شامل انرژی سطحی ذاتی، γ برای یک صفحه رخ مشخص و یک عبارت γ_p که نشان دهنده آزادسازی پلاستیکی در سر یک ترک است، است. آزادسازی پلاستیکی در سر ترک هم‌چنین به وسیله‌ی تکثیر منبع یا به وسیله لغزش متقاطع گسترده رخ می‌دهد و هر دو فرایند به شدت به وسیله‌ی آسیب تابشی در مراحل اولیه‌ی کرنش پلاستیک محدود می‌شوند. بنابراین، انرژی سطحی مؤثر در تسلیم با افزایش جریان نوترون باید به انرژی سطحی ذاتی نزدیک شود. به هرجهت، اندازه‌گیری‌های γ_e برای فلزات پرتودیده انجام نشده است.

یک توسعه‌ای از نظریه‌ی شکست مرتبط با سهم‌های انرژی سطحی ذاتی، γ و انرژی کار پلاستیکی، γ_p روی شکست رخی در فلزات bcc تحقیقات استین[1] است که به وسیله‌ی بمت گزارش شده است [۱۴]. مشخص شده است که صفحه‌ی رخ که ترک در طول آن رشد می‌کند، صفحه‌ای است که کار پلاستیک روی آن حداقل است و صفحه‌ای نیست که به وسیله‌ی تفاوت‌ها در انرژی سطحی ذاتی تعیین شده است. اگر پتانسیل صفحات شکست قبل از پرتودهی مورد توجه قرار گیرد، صفحه‌ی رخ با کم‌ترین انرژی کار پلاستیکی، γ_p ممکن است صفحه‌ی فعال در شکست رخی باشد اگرچه حتی ممکن است که انرژی سطحی ذاتی آن بزرگ‌تر باشد. بعد از پرتودهی، اگر γ_p به مقدار بسیار کمی نزدیک شود، ممکن است که انرژی سطحی ذاتی نقش کنترل کننده‌ای را در شکست رخی داشته باشد و ممکن است که ترتیب برتری بین دو صفحه‌ی رخ بالقوه (یا بیش‌تر) معکوس شود. تاکنون این احتمال بررسی نشده است.

1. Stein

۱۳-۷ تردی القایی تابشی در فولادهای فریتی

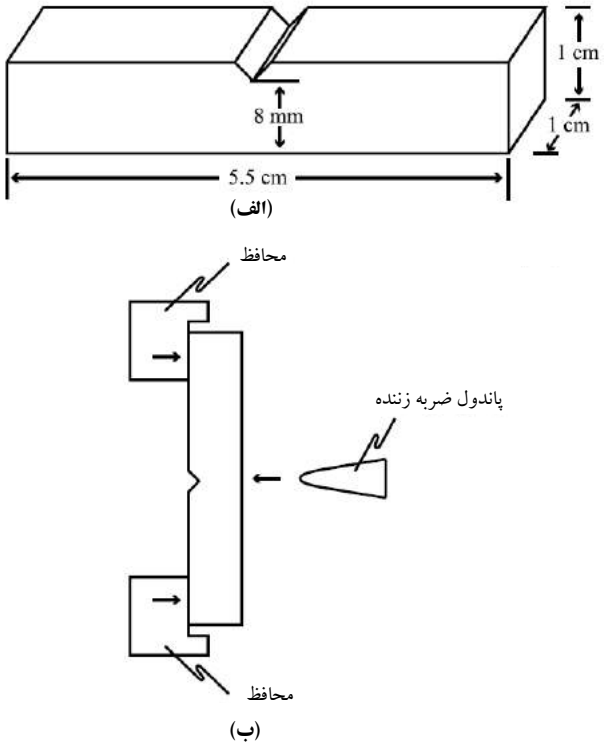
اکثر فولاهای مخازن تحت فشار رآکتورها این مشخصه را دارند که اغلب با کاهش دما متحمل گذار از شکست نرم به ترد می‌شوند. این گذار معمولاً در محدوده‌ی دمایی فقط در حدود ^{o}C ۸۰ رخ می‌دهد [۱۹]. در این محدوده‌ی دمایی، ماهیت میکروسکوپی و ماکروسکوپی شکست به صورت تدریجی از گسیختگی دمبلی نرم به شکست رخی در طول مرزهای بلورشناسی با محدوده‌ی وسیعی از حالت‌های شکست ترکیبی تغییر می‌کند. یکی از آزمون‌های مهم تعیین مشخصات شکست فولادهای مخزن تحت فشار پرتودهی شده آزمون ضربه به مفتول شکاف‌دار[1] است. این آزمون و تفسیر خروجی‌های آن برحسب سازوکارهای شکست در قسمت بعد ارایه خواهد شد.

۱۳-۷-۱ آزمون ضربه مفتول شکاف‌دار

آزمون ضربه‌ی شارپی سال‌ها است که در معنای آزمون اولیه برای تعیین اثرات تابش روی انعطاف‌پذیری مواد استفاده شده است. به هرجهت نتایج به‌دست آمده از آزمایشات میله‌ی شکاف‌دار، مانند آزمایش شارپی به آسانی برحسب ملزومات طراحی بیان نمی‌شوند، زیرا اندازه‌گیری مؤلفه‌های تنش سه محوری در شکاف امکان‌پذیر نیست. بنابراین آزمون ضربه‌ی شارپی به صورت گسترده‌ای در سراسر دنیا به عنوان یک آزمون اندازه‌گیری برای شکست ترد استفاده می‌شود.

نمونه‌ی شارپی سطح مقطعی مربعی شکل (۱۰ mm ×۱۰ ×۱۰) با شکافی V شکل با زاویه‌ی $^{o}۴۵$ و عمق ۲mm با شعاع انحنای ۰٫۲۵mm (شکل ۱۳-۱۳) دارد. نمونه در یک موقعیت افقی نگاه داشته شده و بارگذاری در پشت شکاف به وسیله‌ی ضربه‌ی یک پاندول نوسانی سنگین انجام می‌شود (سرعت ضربه تقریباً ۵ m/s است). نمونه در اثر نیروی واره خمیده شده و در یک نرخ کرنشی بالا در حدود $۱۰۳\ s^{-1}$ شکسته می‌شود.

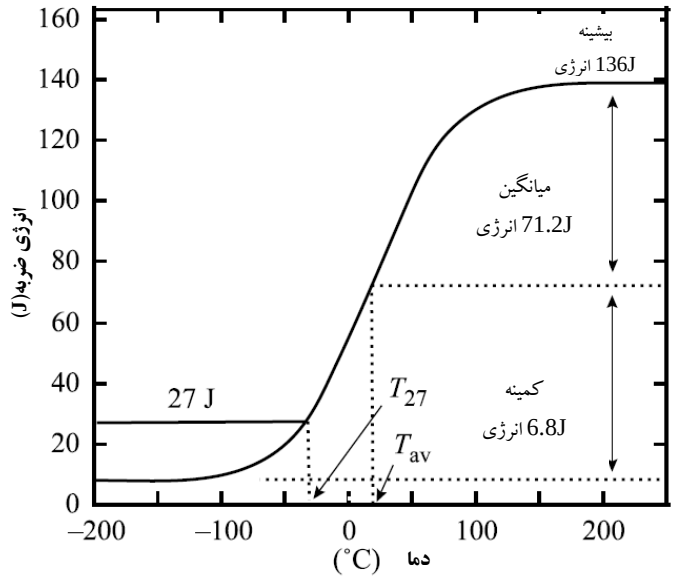
1. Notched bar impact testing



شکل ۱۳-۱۳. (الف) نمونه آزمون ضربه‌ی شارپی شکاف‌دار. (ب) روش اعمال بار بر نمونه.

مقدار اندازه‌گیری شده‌ی اصلی در آزمون ضربه انرژی ذخیره شده در شکست نمونه است. بعد از شکست مفتول آزمون، پاندول تا یک ارتفاع مشخصی بالا آمده که این ارتفاع با افزایش انرژی جذب شده در شکست کاهش می‌یابد. انرژی جذب شده در شکست، که معمولاً به صورت J یا فوت ـ پوند بیان می‌شود، به صورت مستقیم از صفحه‌ی مدرج تنظیم شده در کنار دستگاه خوانده می‌شود. اگر شکست کاملاً نرم باشد، انرژی بالایی و هنگامی که کاملاً ترد باشد انرژی پایینی انتظار می‌رود. انرژی مورد نیاز برای شکست یک نمونه‌ی شارپی را اغلب به صورت C_V نشان می‌دهند که با یک عدد دنبال می‌شود برای مثال C_V 41 J یا C_{41}. از آن‌جایی که ظرفیت جذب انرژی فولاد با دما تغییر می‌کند، آزمون ضربه یک روش ساده‌ای از تغییر حالت شکست یک فولاد به صورت تابعی از دما را فراهم می‌کند. یک منحنی نمونه‌وار نشان دهنده‌ی گذار از رفتار نرم به ترد در شکل ۱۳-۱۴ نشان داده شده است. یکی از نکات مهم این است که گذار تیز نیست و در یک محدوده‌ی دمایی رخ می‌دهد. اگر

سطوح شکست نمونه ضربه بعد از شکست بررسی شود، در کل مشخص می‌شود که یک هم‌بستگی منطقی میان مقدار سطح مقطعی که در یک شیوه‌ی نرم شکسته می‌شود و انرژی مصرف شده در شکست نمونه وجود دارد. نمونه‌های کاملاً نرم سطوح خشن و فیبری دارند درحالی‌که نمونه‌های ترد حاوی یک آرایش نامنظمی از سطوح کوچک روشن هستند که هر کدام از آن‌ها به سطح یک بلور رخ‌دار مرتبط است. در نمونه‌هایی که شکست قسمتی نرم و قسمتی ترد است، شکست ترد یا مناطق روشن در مرکز سطح مقطع دیده می‌شوند. دو مقیاسِ گذار از رفتار ترد به نرم، درصد شکست برشی و گسترش جانبی هستند و هر دو همان‌طوری که منحنی جذب انرژی مشخص شده در شکل ۱۳-۱۴ نشان می‌دهد، وابستگی مشابهی را به دما نشان می‌دهند. بنابراین، انتقال از رفتار نرم به ترد می‌تواند به وسیله‌ی تشریح سطوح شکست نمونه‌های ضربه نیز دنبال شود.

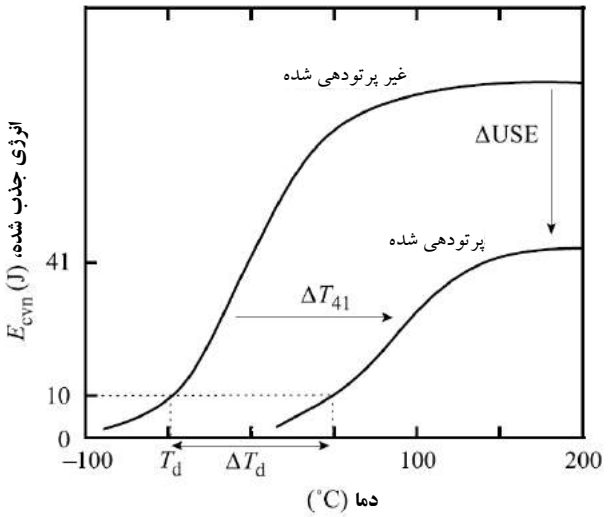


شکل ۱۳-۱۴. نمایش اثر پرتودهی روی منحنی ضربه‌ی شارپی برای یک فولاد مخزن تحت فشار رآکتور که نشان دهنده‌ی یک انتقال در DBTT و یک کاهش در حد انرژی بالایی است.

آزمون ضربه‌ی شارپی به طور گسترده‌ای برای اندازه‌گیری اثر تعدادی از متغیرها روی گذار نرم به ترد استفاده می‌شود. فقدان یک گذار تیز در انرژی مشاهده شده برای نشان دادن جدایش رفتار نرم و ترد، دشواری‌هایی را در تشریح نتایج آزمون ضربه‌ی شارپی به وجود می‌آورد. به هرجهت لازم است که

تعریف مشخصی از این دما وجود داشته باشد زیرا روش‌های مختلفی برای بیان آن وجود دارد. یکی از روش‌ها به این صورت است که دمایی که در آن آزمون ضربه با سطح شکست نصف ترد و نصف نرم شکسته می‌شود، دمای گذار در نظر گرفته می‌شود. روش دوم تعیین دمای گذار، استفاده از معیار انرژی میانگین است: دمای گذار دمایی است که در آن انرژی جذب شده به نصف تفاوت میان انرژی مورد نیاز برای شکست یک نمونه‌ی کاملاً نرم و آن چیزی که برای شکست یک نمونه‌ی کاملاً ترد مورد نیاز است، کاهش یابد. دمایی که در آن یک نمونه‌ی شارپی با یک مقدار ثابت انرژی، به عبارت دیگر ۴۱J، شکسته می‌شود نیز به صورت گسترده‌ای در جایگاه یک مبنا برای دمای گذار در نظر گرفته می‌شود. دمای نرمی صفر به منزله‌ی دمایی تعریف می‌شود که در آن شکست ضرورتاً با هیچ‌گونه تغییر شکل پلاستیک قبلی آغاز می‌شود. مقدار واقعی دمای نرمی صفر با آزمون‌های سقوط وزنه و همان‌طوری تعیین می‌شود که به وسیله‌ی ASTM E208-95a تعریف شده است. از این دما، دمای مرجع(RT_{NDT}) به صورت رابطه‌ی $RT_{NDT} = T_{NDT} - 60^{o}F$ تعیین می‌شود [۲۰].

شکل ۱۳-۱۵ اثر پرتودهی روی یک منحنی شارپی برای یک فولاد مخزن تحت فشار را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که پرتودهی باعث انتقال منحنی به دماهای بالاتر و یک کاهش در سطح انرژی بالایی(USE) می‌شود. به علاوه، شیب منحنی با تابش کاهش می‌یابد. هر سه این ویژگی ها با افزایش شار و سخت گردانی تغییر می‌کند.



شکل ۱۳-۱۵. انتقال دمای گذار به صورت تابعی از تنش تسلیم نتیجه شده از پرتودهی.

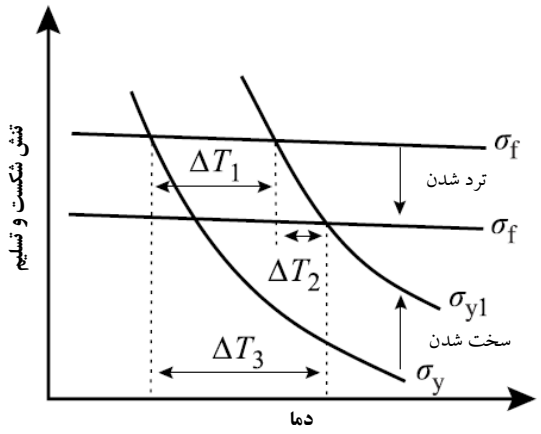
۱۳-۷-۲ DBTT و کاهش در حد انرژی بالایی

انتقال از شکست نرم به ترد قبلاً با کمک رابطه‌ی هال ـ پچ بررسی شد. نشان داده شده است که استحکام تسلیم با دما کاهش می‌یابد و تنش شکست تقریباً مستقل از دما است، در نتیجه تقاطع منحنی تنش شکست و منحنی تنش سیلان به جای دمای گذار نرمی به تردی در نظر گرفته می‌شود (DBTT). پرتودهی باعث افزایش در تنش تسلیم می‌شود و با انتقال نقطه‌ی تقاطع تنش شکست و تنش سیلان به دماهای بالاتر، همان‌طوری که در شکل ۱۳-۱۲ نشان داده شده است، باعث افزایش در دمای گذار نرمی به تردی می‌شود. گذار از رفتار نرم به ترد اغلب به وسیله‌ی تقاطع منحنی شارپی با خط J ۴۱ که به صورت C_{41} نشان داده می‌شود، به‌دست می‌آید و انتقال دمای متناظر میان شرایط پرتودهی شده و پرتودهی نشده به صورت ΔT_{41} نشان داده می‌شود. اودته [۲۱] نشان داد که ΔT_{41} یک تابع غیرخطی از $\Delta\sigma_y$ است و $\Delta T_{41}/\Delta\sigma_y$ با $\Delta\sigma_y$ و T^* افزایش می‌یابد که T^* دمایی است که در آن منحنی‌های تنش شکست و تنش سیلان با یک‌دیگر تقاطع می‌کنند. در نتیجه دمای گذار نرمی به تردی با افزایش در سخت‌گردانیِ ناشی از پرتودهی، با سرعت بیش‌تری از حالت خطی افزایش می‌یابد. جدایش القایی تابشی عناصر ترد کننده مانند فسفر می‌تواند منجر به یک تنزل در تنش شکست شود که منجر به انتقال اضافی در دمای گذار نرمی به تردی می‌شود. این اعتقاد وجود دارد که جدایش فسفر به مرزدانه‌ها در طول پرتودهی همان‌طوری که در فصل ۶ توضیح داده شد، باعث کاهش چسبندگی مرزدانه می‌شود و در نتیجه منجر به افزایش در دمای گذار نرمی به تردی یا کاهش در حد چقرمگی پایینی می‌شود. افزایش اضافه در دمای گذار نرمی به تردی در شکل ۱۳-۱۶ به صورت ΔT_3 نشان داده شده است. اگر هر دو سازوکار فعال باشند، انتقال ترکیبیِ ΔT جایی رخ می‌دهد که مؤلفه‌ها به وسیله‌ی یک جمع خطی همانند شکل ۱۳-۱۶ ترکیب شده باشند.

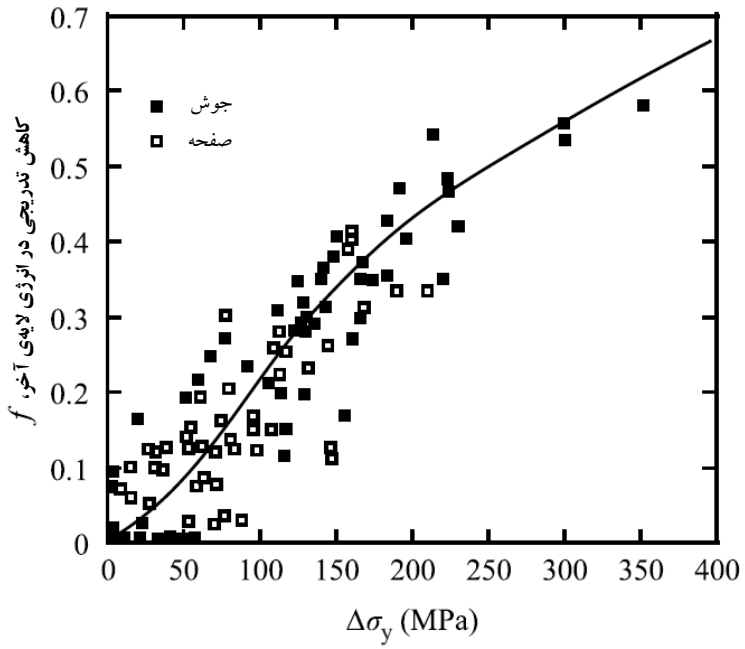
پرتودهی نه فقط دمای گذار نرمی به تردی را افزایش می‌دهد بلکه جذب انرژی برای شکست در قسمت شیب ملایم منحنی گذار را نیز کاهش می‌دهد (شکل ۱۳-۱۵). تغییر در انرژی حد بالایی به منزله‌ی نتیجه‌ای از افزایش تنش تسلیم ناشی از پرتودهی ظاهر می‌شود. شکل ۱۳-۱۷ تغییر جزیی در حد انرژی بالایی، f با تغییر در تنش تسلیم را نشان می‌دهد و به صورت زیر توصیف می‌شود:

(۵۹-۱۳)

$$f = 9\times10^{-4}\Delta\sigma_y \quad \text{for} \quad 0 < \Delta\sigma_y < 40\,\text{MPa}$$
$$= 9\times10^{-4}\Delta\sigma_y + \sqrt{0.02\Delta\sigma_y - 40} \quad \text{for} \quad \Delta\sigma_y > 40\,\text{MPa}\,.$$



شکل ۱۳-۱۶. تغییر تنش تسلیم و تنش شکست با دما و پرتودهی، که منجر به سهم‌های مستقل در انتقال دمای گذار می‌شود [۲۲].



شکل ۱۳-۱۷. کاهش جزیی در حد بالایی انرژی شارپی به صورت تابعی از افزایش استحکام تسلیم ناشی از پرتودهی [۲۱].

علاوه بر انتقال منحنی تنش تسلیم به دماهای بالاتر، پرتودهی هم‌چنین می‌تواند شیب منحنی را کاهش دهد و یک سهم اضافی در انتقال دما را نشان دهد. اودته [۲۱] نشان داد که تغییر شیب انرژی ـ دما می‌تواند به کاهش در حد انرژی بالایی (E_U) مرتبط باشد و آن‌که نسبت حد انرژی بالایی پرتودهی شده به حد بالایی پرتودهی نشده ($f_{Eu} = E_{U,i} / E_U$) به صورت تجربی با $\Delta\sigma_y$ مرتبط است:

(۶۰-۱۳)

$$\Delta T_s(^\circ C) \approx \frac{3720}{E_u}\left(\frac{1-f_{Eu}}{f_{Eu}}\right).$$

دمای گذار نتیجه شده می‌تواند به صورت زیر نشان داده شود:

(۶۱-۱۳)

$$\Delta T = \Delta T_1 + \Delta T_2 + \Delta T_s .$$

کاهش در حد انرژی بالایی به افزایش در مقدار شکست برشی روی سطوح شکست مرتبط است [۲۳]. باوجوداین، اعتقادی وجود دارد که اثر پرتودهی روی حد انرژی بالایی به علت کاهش در سخت‌گردانی کرنشی است و موضعی شدن سیلان منجر به نرمی کم‌تر و یک حالت تنش سه محوری افزایش یافته در نتیجه‌ی افزایش استحکام می‌شود [۲۱]. همان‌طوری که در فصل ۱۲ بحث شد، موضعی شدن سیلان در تشکیل کانال نابجایی در فولادهای فریتی پرتودیده رخ می‌دهد و این ممکن است که به کاهش نرمی در منطقه‌ی شکست نرم نسبت داده شود.

۱۳-۷-۳ روش منحنی اصلی

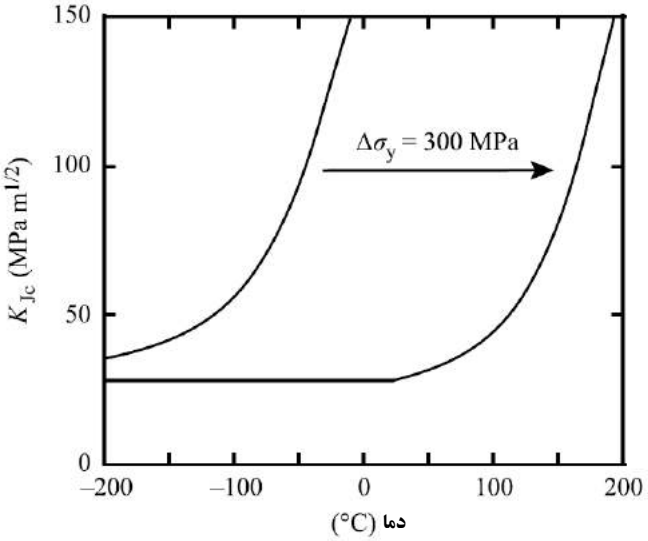
یک از نکات مهم در به‌دست آوردن فولادهای بی‌نقص مخازن تحت فشار رآکتورهای تحت پرتودهی این است که این توانایی وجود داشته باشد که به صورت کمی چگونگی تأثیرپذیری چقرمگی شکست فولاد به وسیله‌ی پرتودهی را تعیین کرد. پرتودهی منحنی چقرمگی شکست را به دماهای بالاتر منتقل می‌کند. شکل ۱۳-۱۸ نشان می‌دهد که اثر پرتودهی جابه‌جا کردن منحنی چقرمگی شکست به سمت راست محور دما است. به صورت قابل توجهی، شیب منحنی قبل و بعد از

پرتودهی مشابه است. در حقیقت، مشاهده شده است که در یک گستره‌ای از فولادهای فریتی، منحنی‌های گذار چقرمگی شکست یک شکل مشخصی دارند. شکل ثابت اشاره به این نکته دارد که چقرمگی شکست برای این مواد می‌تواند به وسیله‌ی یک‌سری از منحنی‌ها توضیح داده شود که فقط در موقعیتشان روی منحنی دمایی متفاوت است. این مبنایی برای مفهوم منحنی اصلی است. مطابق با این مفهوم یک منحنی چقرمگی شکست می‌تواند به وسیله‌ی یک عامل تکی تعیین شود که موقعیت منحنی اصلی روی محور دما را ثابت می‌کند. این پارامتر به صورت T_0 نشان داده می‌شود و به عنوان دمایی تعریف می‌شود که در آن چقرمگی شکست متوسط برای یک نمونه‌ی چقرمگی شکست $1T$ (ضخامت ۲۵٫۴ mm)، معادل با ۱۰۰ $\text{MPam}^{1/2}$ (۹۱ $\text{ksi in}^{1/2}$) است. منحنی اصلی به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۶۲-۱۳)

$$K_{\text{Jc(med)}} = 30 + 70\exp(0.019(T - T_0))$$

که T دمای آزمایش، T_0 دمای مرجع تعریف شده به صورت بالا و $K_{\text{Jc(med)}}$ چقرمگی شکست متوسط در واحد $\text{MPa m}^{1/2}$ است. چقرمگی شکست متوسط به صورت زیر تعریف می‌شود:

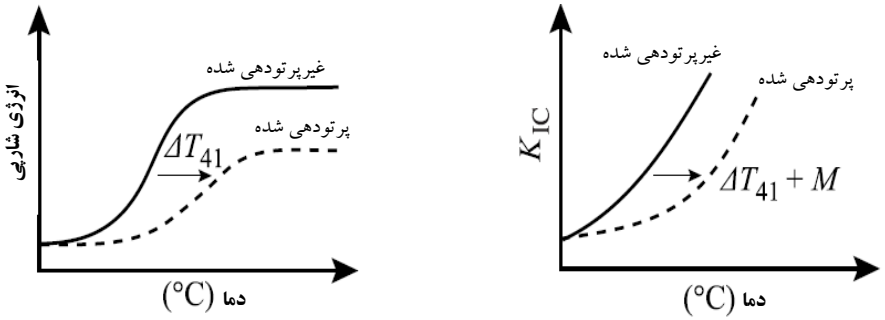


شکل ۱۳-۱۸. جابه‌جایی منحنی چقرمگی شکست با پرتودهی

$$K_{\mathrm{Jc(med)}} = \sqrt{\frac{J_c E}{(1-\nu^2)}}\ , \qquad (۶۳-۱۳)$$

که E مدول یانگ، ν نسبت پواسون و J_c مقدار انتگرال J در آغاز شکست رخی است و از مساحت زیر منحنی بار ـ نابجایی تعیین می‌شود.

از لحاظ تاریخی در برنامه‌های نظارت رآکتور، از نمونه‌های شارپی شکاف‌دار جهت آزمایش‌های چقرمگی شکست استفاده شده است. این نمونه‌ها بعد از آن‌که مورد آزمایش قرار گرفته‌اند، در کپسول‌های حفاظتی قرار داده شده و سپس انتقال در انرژی ضربه‌ی ناشی از پرتودهی محاسبه می‌شود. شکل ۱۳-۱۹ نشان می‌دهد که در اصل تغییر در دمای گذار نرمی به تردی اندازه‌گیری شده در آزمون ضربه باید قابل ارتباط به انتقال منحنی چقرمگی شکست باشد.



شکل ۱۳-۱۹. اعمال انتقال دمای گذار در آزمایش شارپی به آزمایش چقرمگی شکست. (الف) انرژی ضربه‌ی شارپی، و (ب) چقرمگی شکست [۲۴].

سوکولو[1] و همکارانش [۲۵] یک‌سری از آزمایشات را روی مواد جوش حاوی مقدار بالای مس، نیکل و منگنز پرتودهی شده در ۲۸۸ °C تا یک شار $۰٫۷۴ \times ۱۰^{۱۹}\ \mathrm{n/cm^2}$ $(E > ۱\ \mathrm{MeV})$ انجام دادند. منحنی‌های شارپی قبل و بعد از پرتودهی در شکل ۱۳-۲۰ نشان داده شده است و افزایشی را در ΔT_{41} به اندازه‌ی ۱۶۹ °C و کاهش ۴۰ J را در حد بالای انرژی نشان می‌دهند. آزمایشات چقرمگی شکست، روی نمونه‌های $۰٫۵T$ و $۱T$ CT ساخته شده از آلیاژ مشابه و پرتودهی شده تحت شرایط مشابه انجام

1. Sokolov

شد. روش تسلیم غیربارگذاری[1] برای تعیین انتگرال J برحسب گسترش ترک استفاده و از آن مقدار J_c تعیین شد و سپس با استفاده از معادله‌ی ۱۳-۶۳ به مقدار بحرانی ضریب شدت تنش تبدیل، و آزمون‌های تطبیقی برای تعیین $K_{Jc(med)}$ استفاده قرار شد. چقرمگی شکست متوسط در شکل ۱۳-۲۱ رسم شده است و از تعریف منحنی اصلی، انتقال مقدار T_0 تعیین شده در ۱۰۰ MPa $m^{1/2}$ برابر با ۱۶۵ ^oC است که در توافق خوبی با مقدار ΔT_{41} شارپی ۱۶۹ ^oC است.

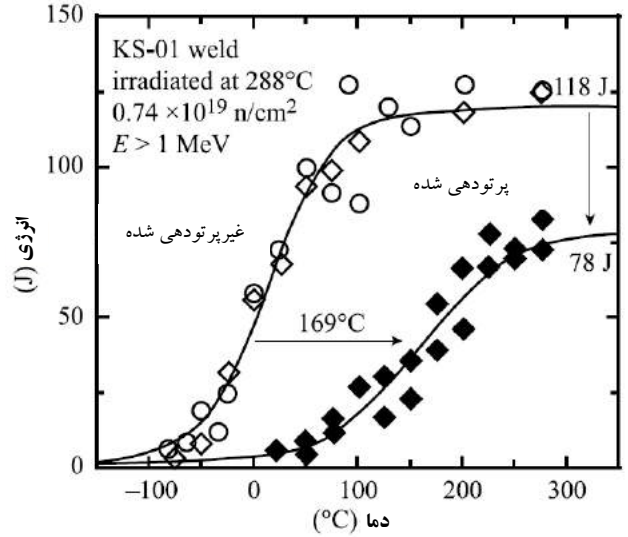
روش تخمین چقرمگی شکست از یک دمای مرجع، که دمای مرجع تنظیم شده[2] (ART) نامیده می‌شود [۲۶]،استفاده می‌کندکه به صورت زیر تابعی از انتقال دمای شارپی است:

$$ART = RT_{NDT} + \Delta T_{41} + M \,, \qquad (۱۳-۶۴)$$

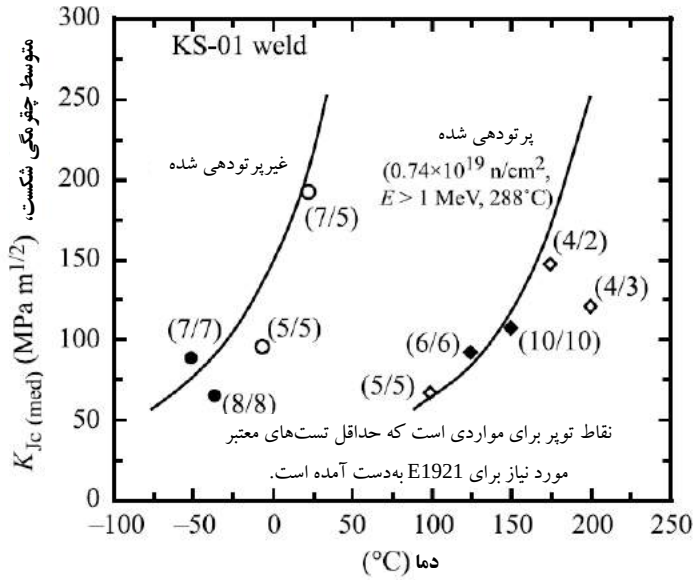
که RT_{NDT} دمای مرجع نرمی صفر برای مواد پرتودیده است، ΔT_{41} انتقال دمای شارپی در C_V = ۴۱ J است و Mضریب اطمینان است که در جوش‌ها برای محاسبه‌ی عدم اطمینان در RT_{NDT} و ΔT_{41} مقدار ۳۶ ^oC در نظر گرفته می‌شود. در این روش پایش زیاد مجموعه اطلاعات در نمونه‌های شارپی می‌تواند برای تعیین چقرمگی شکست فولادهای پرتودیده استفاده شود که برای قطعی کردن بی‌نقصی مخازن تحت فشار هم‌چنان که سال‌ها از عمر آن‌ها می‌گذرد، تعیین کننده است.

یک نکته‌ی مهم دیگر در تعیین بی‌نقصی مخازن تحت فشار وجود شیب‌های ناشی از ضخامت آن‌ها است. با توجه به آن‌که ضخامت مخزن تحت فشار بیش از ۲۰۰mm است، جریان نوترونی، دما و تنش در طول دیواره‌ی مخزن تغییر می‌کنند. تغییر در دما و جریان نوترون باعث می‌شود که ریز ساختار به صورت تابعی از موقعیت در مخزن تغییر کند. از آن‌جایی که در قطر داخلی رآکتور، جریان بیشینه و دما کمینه است، سخت‌گردانی و ترد شوندگی در این منطقه بیش‌تر است. آن‌که تنش در سطح بیشینه است به این معنی است که چقرمگی شکست در سطح داخلی مخزن کم‌ترین است (شکل ۱۳-۲۲). با افزایش چقرمگی، ترک‌های ریز آغاز شده در سطح داخلی در داخل مواد رشد خواهند کرد که یک ضریب امنیت بیش‌تری را در برابر ترک‌های سرتاسری در دیواره فراهم می‌کند.

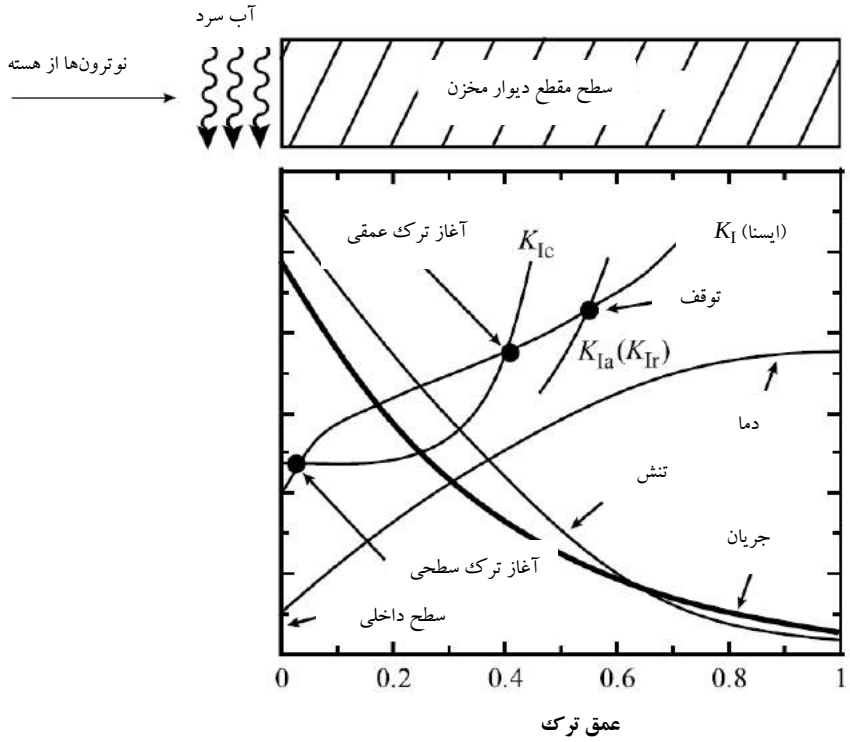
1. Unloading compliance method
2. Adjusted Reference Temperature



شکل ۱۳–۲۰. انرژی ضربه‌ی شارپی بر حسب دمای آزمایش برای فلز جوش در شرایط پرتودهی نشده و هم‌چنین متعاقب پرتودهی تا $۰٫۷۴ \times ۱۰^{۱۹}$ n/cm^2 ($E > ۱٫۰$ MeV) در ۲۸۸ °C [۲۵].



شکل ۱۳–۲۱. چقرمگی شکست متوسط فلز جوش مشابه در شرایط غیرپرتودهی و متعاقب پرتودهی تحت شرایط مشابه مربوط به آزمون شارپی در شکل ۱۳–۲۰ [۲۵].



شکل ۱۳-۲۲. دما، جریان، تنش و شیب چقرمگی نتیجه شده در سرتاسر ضخامت دیواره‌ی مخزن تحت فشار رآکتور.

۱۳-۷-۴ عوامل مؤثر بر درجه‌ی ترد شوندگی

به علت آن‌که سخت‌گردانی تابشی عامل اساسی مؤثر بر تردی است، عوامل مشابهی که روی سخت‌گردانی تأثیرگذار هستند نیز تردی را تحت تأثیر قرار می‌دهند. این عوامل عبارتند از:

- ترکیب فولاد و ریزساختار
- دمای پرتوگیری
- محیط نوترونی

اثرات ریزساختار و ترکیب

یکی از عوامل قابل توجه برای بهبود دمای گذار نرمی به تردی فولاد مخزن تحت فشار تأثیر ریزساختار روی تنش شکست است. تنش شکست بحرانی می‌تواند به وسیله‌ی کاهش طول مسیر متوسط نابجایی (λ) در فولاد افزایش یابد که این کاهش طول مسیر در فولادهای پرلیتی به وسیله‌ی کاهش اندازه دانه ($d = ۲\lambda$) و در فولادهای تمپر شده به وسیله‌ی کاهش در فضای بین‌دانه‌ای ($l = \lambda$) بین کاربیدهای پراکنده شده (موانع سخت) حاصل شود [۲۶].

اگرچه پالایش در اندازه دانه و پراکندگی کاربید می‌تواند تنش شکست را به مقادیر فراتر از تنش تسلیم افزایش دهد، که به موجب آن دمای گذار ایستایی و جنبشی کاهش می یابند، ولی سخت‌گردانی تابشی می‌تواند این اثرات را برعکس کند.

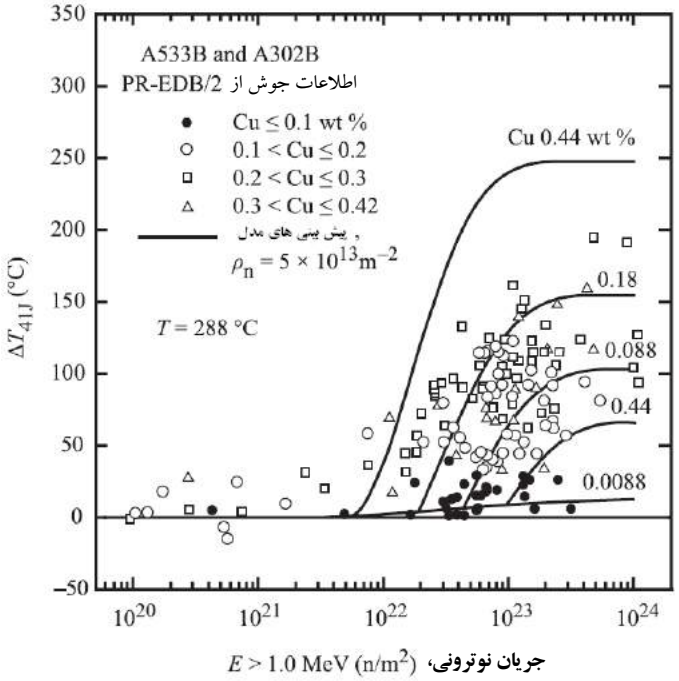
هم‌چنین پیشنهاد شده است که فراوانی مرزدانه‌ها در فولادهای ریز دانه به منزله‌ی یک تله‌ی بسیار مؤثر برای عیوب عمل می‌کند. این نقش زمانی بسیار مهم است که عناصر بین‌نشینی آزاد (و ترد کننده) مانند نیتروژن به صورت همگن به دام می‌افتند که در نتیجه اثرات آن‌ها روی ویژگی‌های ماکروسکوپی فولاد پرتودیده کاهش می‌یابد. به هرجهت، همان‌طوری که قبلاً بحث شد، جدایش مرزدانه‌ای عناصری مانند فسفر می‌تواند منجر به تردی مرزدانه شود.

همانند مورد سخت‌گردانی، حضور عناصر جانشینی مانند مس، نیکل، منگنز و فسفر سطح تردی در فولادهای Mn-Mo قابل استفاده در مخازن تحت فشار رآکتورهای ایالات متحده را کنترل می‌کند. عامل غالب سخت‌گردانی و از آن‌رو ویژگی ترد شوندگی رسوب غنی از مس است که رسوبات هم‌بسته‌ی بسیار کوچک (۱-۳nm) با مقدار بالای مس دارندکه می‌تواند در عدد دانسیته‌های بالاتر از $۱۰^{۲۳}\ m^{-3}$ تشکیل شود. رسوبات غنی از مس، نیکل، منگنز و هم‌چنین مقادیر کمی از فسفر و سیلیسیم هستند. هم نیکل و هم منگنز باندهای بسیار قوی با مس در رسوب تشکیل می‌دهند و حجم رسوب را افزایش می‌دهند. در هر صورت، افزایش مقادیر نیکل و منگنز اثر سخت شوندگی را تقویت می‌کند.

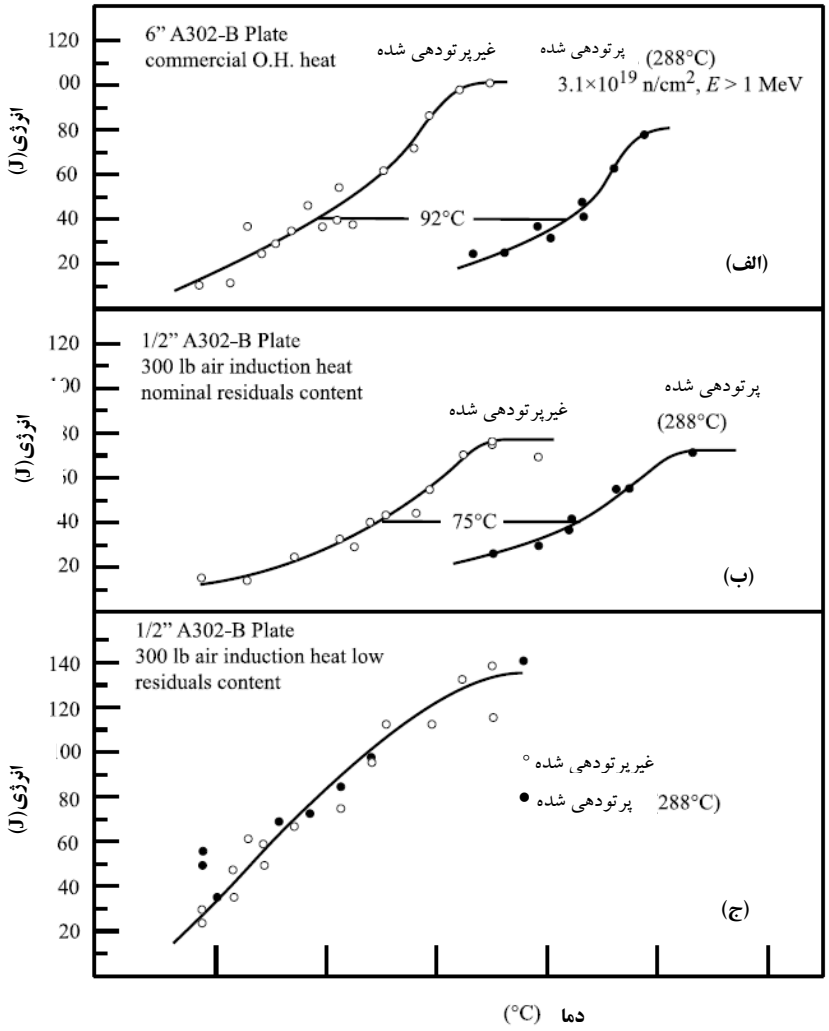
اثر مس روی تردی فولاد A533B در شکل ۱۳-۲۳ نشان داده شده است. بنابراین از مطالعه‌ی NRL بزرگ روی نقش پسماندها (ناخالصی‌ها) در ترد شوندگی تابشی، نتیجه گرفته شده است که فولادهای تمیز (مقادیر کم فسفر، گوگرد، مس، آرسنیک، آنتی موآن و غیره) حساسیت پرتودهی پایینی را نشان می‌دهند [۲۸]. در حقیقت، این امکان وجود دارد که فولادهایی با مقدار پسماند کم که حساسیت بسیار کمی را نسبت به پرتودهی نشان می‌دهند، گسترش داد (شکل ۱۳-۲۴).

با وجود تأثیر عناصر پسماند روی پایدارسازی تابشی عیوب، اثرات دیگر این عناصر روی رفتار ضربه است، که ممکن است در حساسیت تردشوندگی تابشی مهم باشد.

عناصر پسماندی که لغزش متقاطع را محدود می‌کنند، باعث سخت شوندگی قابل ملاحظه‌ی زمینه می‌شوند و انرژی سطحی شکست را کاهش می‌دهند. فسفر به شدت در تمام این سه فرایند سهیم می‌شود، مس یک محلول جامد سخت کننده‌ی بسیار قوی است و سیلیکون، وانادیوم، آلومینیوم و کبالت سهولت لغزش متقاطع را کاهش می‌دهند.



شکل ۱۳-۲۳. تأثیر مقدار مس روی انتقال دمای جوش‌های A533-B و A302-B پرتودهی شده در ۲۸۸°C [۲۸].

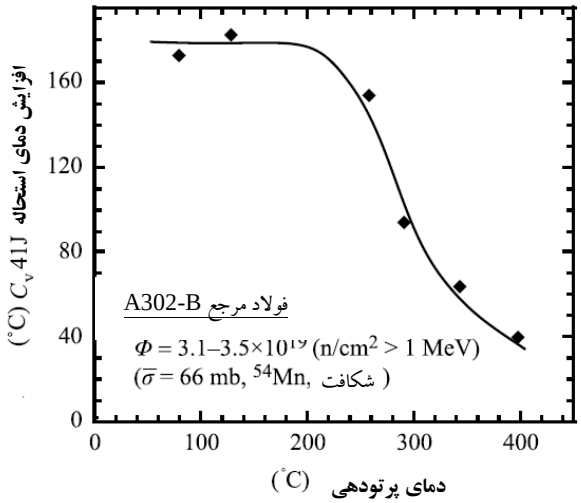


شکل ۱۳-۲۴. مقایسه‌ی حساسیت ترد شوندگی تابشی در ورقه‌ی A302-B. (الف) حرارت‌دهی تجاری. (ب) حرارت‌دهی القایی هوایی با پسماندهای اسمی. (ج) حرارت‌دهی القایی هوایی با پسماندهای اندک [۲۹].

تأثیر دما

همان‌طوری که به وسیله‌ی منحنی‌های شارپی و چقرمگی شکست نشان داده شده است، سطح تردی به صورت تدریجی با دمای پرتودهی بالاتر کاهش می‌یابد. این اثر جلوه‌ای از فرایند بازپخت است که در دماهای بالاتر تسریع می‌شود. سازوکارهای مسئول برای تأثیرگذاری روی استحکام فولادهای

مخازن تحت فشار (مقاومت نابجایی به وسیله‌ی رسوبات القایی تابشی، خوشه‌های عیب ـ عنصر حل شده) ضرورتاً فرایندهای دما پایین هستند و این فرایندها در دماهای نزدیک به ^{o}C ۴۰۰ در فولاد بازپخت می‌شوند. شکل ۱۳–۲۵ کاهش در افزایش دمای گذار برای یک جریان مشخص را با افزایش دمای پرتودهی نشان می‌دهد. مفهوم این منحنی به این صورت است که پرتودهی در دمای‌های بالاتر منجر به تردی کم‌تری نسبت به پرتودهی در دماهای پایین‌تر می‌شود.



شکل ۱۳–۲۵. تأثیر دمای پرتودهی روی افزایش دمای گذار برای یک فولاد A302-B [۱۹].

تأثیر محیط نوترون

به خوبی مشخص شده است که اندازه‌ی تردی تابع قوی از جریان نوترون است به گونه‌ای که دمای گذار سریعاً با جریان افزایش می‌یابد. تلاش‌هایی انجام شده است تا ویژگی انتقال دمای گذار را به صورت تابعی از جریان نوترونی بیان کند. یک مدل ساده به این صورت است:

(۶۵–۱۳)

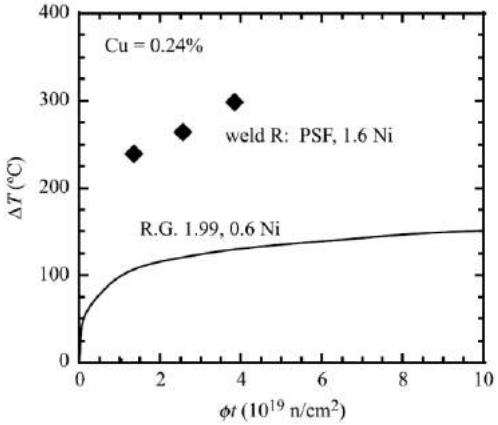
$$\Delta T_{41} = A(\varphi t)^n \ ,$$

که ΔT_{41} انتقال دمای گذار انرژی شارپی در ۴۱ J یا چقرمگی شکست در φt ۱۰۰ $MPam^{1/2}$ است و n/cm^2 ($E > ۱/۰$ MeV) جریان نوترونی در واحدهایی از است. مقدار توان، n وابسته به نوع فولاد تغییر می‌کند. مقدار میانگین n برای فولادهای امریکاییِ پیشرفته برابر با ۰/۵ است [۳۰] اما این مقدار برای فولادهای روسی نزدیک به ۰/۳۳ است [۳۱]. راهنمای نشان دهنده‌ی کمیته‌ی تنظیم مقرارت امریکا (NCR) با شماره‌ی 1.99(RG 1.99),Rev. 2 [۳۲] رابطه‌ی زیر را بیان کرده است:

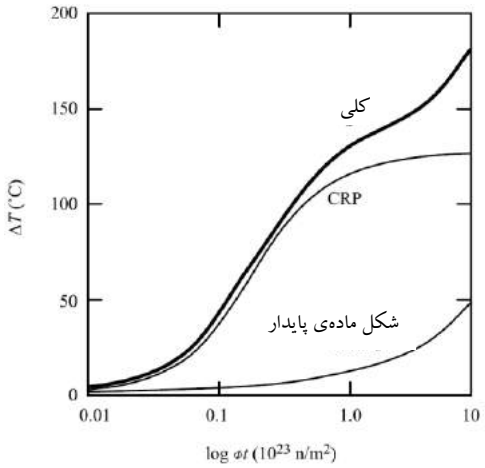
$$\Delta T_{41} = A\Phi^{(0.28-0.1\log\Phi)}, \qquad (۶۶-۱۳)$$

که Φ جریان نوترون در واحدهایی از n/cm^2 ۱۰^{۱۹} ($E >$ ۱ MeV) است. یک مثال از رفتار دمای گذار با جریان برای فلز جوش ۰24%Cu-1.6%Ni. پرتودهی شده در ۲۹۰^{o}C در شکل ۱۳-۲۶ نشان داده شده است [۳۳] و با راهنمای تنظیم مقررات امریکا با شماره‌ی ۱/۹۹ [۳۲] مقایسه شده است. متأسفانه واکنش فولادهای متفاوت، و تأثیر دیگر عوامل در مقدار A منعکس شده است و منجر به پراکندگیِ زیادی شده است. به علاوه مشخص شده است که تمایل زیادی به اشباع وجود دارد که هم‌چنین به شدت به وسیله‌ی دیگر عوامل نیز تأثیر می پذیرد. همان‌طوری که در شکل‌های ۱۲-۱۷ و ۱۳-۲۷ نشان داده شده است، اثر رسوبات غنی از مس روی سخت‌گردانی و تردی در مقادیر پرتوگیری بالا به علت تهی‌شدگی مس از زمینه اشباع می‌شود.

یک عامل مهم نقش شار یا نرخ مقدار پرتوگیری روی تردی است. در شارهای بسیار پایین ($< ۱۰^{۱۴}$ n/m^2s)، رشد رسوبات غنی از مس به علت افزایش نفوذ مس به دلیل فرایندهای حرارتی، افزایش می‌یابد. در شارهای بسیار بالا ($>> ۱۰^{۱۶}$ n/m^2s)، دانسیته‌ی بالای عیوب ناپایدار زمینه تأثیرگذار و حایز اهمیت می‌شوند. این عیوب اتلاف جاهای خالی و بین‌نشین‌ها را افزایش می‌دهد که منجر به کاهش افزایش نفوذ تابشی می‌شود و در نتیجه رشد رسوبات غنی از مس را کاهش می‌دهد. در منطقه‌ی شار متوسط ($۱۰^{۱۵}$ - $۱۰^{۱۶}$ n/m^2s)، شار تأثیر قابل توجهی روی تردی دارد که در آن سخت شوندگی و ترد شوندگی به صورت $\phi^{-\frac{1}{2}}$ تغییر می‌کند (شکل ۱۲-۱۹ الف). این اعتقاد وجود دارد که سازوکار این اثر شامل افزایش به دام‌اندازی عناصر حل شده و به علاوه بازترکیبی افزایش یافته و یک راندمان بالا برای افزایش نفوذ تابشی است.



شکل ۱۳-۲۶. اثر جریان نوترون ($E > ۱$ MeV) روی دمای گذار در فلز جوش 0.24%Cu-1.6%Ni پرتودهی شده در ۲۹۰°C [۳۳].



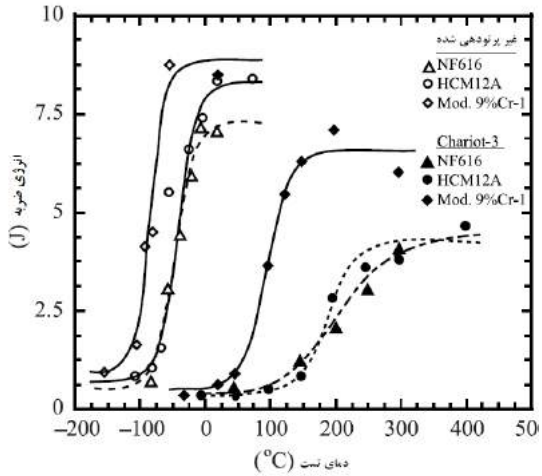
شکل ۱۳-۲۷. تأثیر رسوبات غنی از مس روی وابستگی دمای گذار به جریان [۳۴].

۱۳-۷-۵ تردشوندگی فولادهای فریتی ـ مارتنزیتی

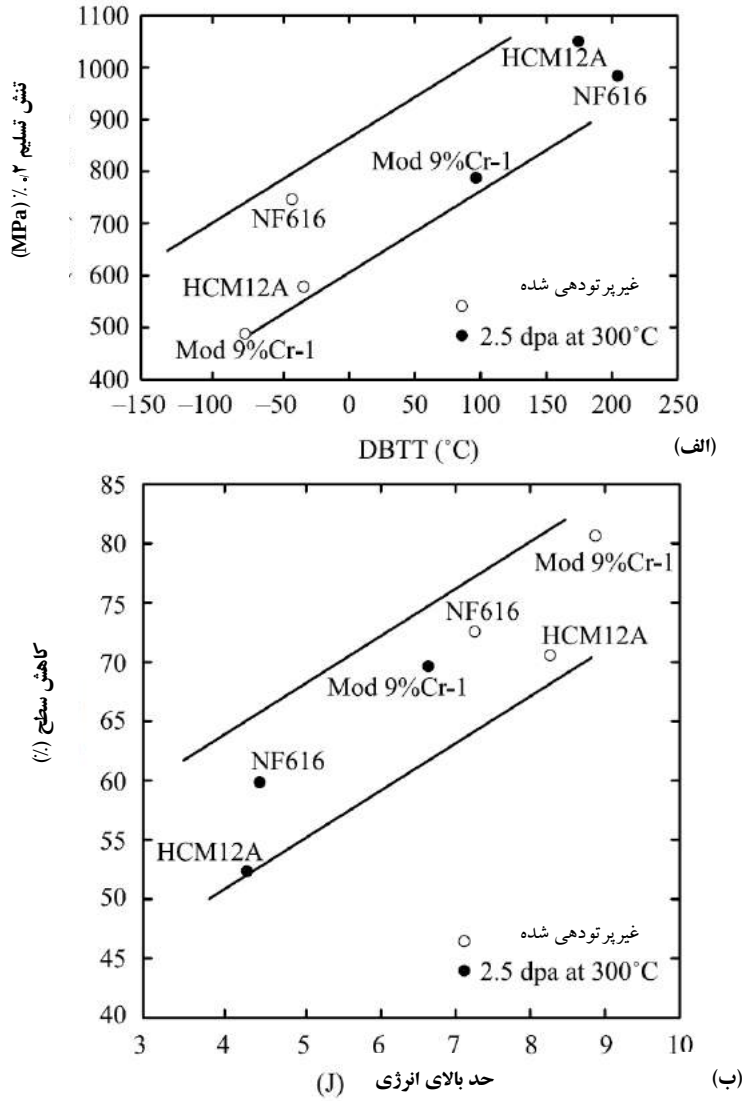
فولادهای فریتی ـ مارتنزیتی به علت مقاومت آن‌ها در برابر تورم و تردشوندگی هلیومی و پتانسیل بالای آن‌ها برای اکتیو شدن پایین به صورت گسترده‌ای در سیستم‌های رآکتوری پیشرفته شکافت و گداخت استفاده می‌شوند.

این فولادها به صورت ساختارهای دو فازی فریتی ـ مارتنزیتی هستند و می‌توانند برای بهینه‌سازی چقرمگی و استحکام دما بالا مورد عملیات حرارتی قرار گیرند. عملیات حرارتی استاندارد شامل یک

بازپخت محلولی به منظور آستنیته کردن کامل ریزساختار و حل کردن کاربیدها و به علاوه یک عملیات بازپخت مجدد برای آزادسازی تنش‌ها و افزایش چقرمگی است. ریزساختار نتیجه شده شامل تیغه‌های مارتنزیتی بازپخت شده‌ی تشکیل دهنده‌ی زیر دانه‌ها در زمینه‌ی فریتی با دانسیته‌ی بالای نابجایی است. به هرجهت، همانند فولادهای کم آلیاژ مورد استفاده برای مخازن تحت فشار رآکتورهای حرارتی مستعد شکست ترد هستند. شکل ۱۳–۲۸ یک‌سری از منحنی‌های شارپی برای سه فولاد فریتی ـ مارتنزیتی: 9Cr-1Mo اصلاح شده، NF616(12Cr-2W) و HCM12A(12Cr-2W-1Cu) قبل و بعد از پرتودهی در یک رآکتور شار بالا تا ۲٫۵ dpa در ^{o}C ۳۰۰ در پتن (هلند) را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که هر سه آلیاژ انتقال دمای گذار قابل توجهی را نشان می‌دهند. انتقال برای فولاد 9Cr-1Mo، ۱۷۵ درجه‌ی سانتی‌گراد است که برای HCM12A و NF616 به ترتیب ۲۲۵ و ۲۴۹ درجه‌ی سانتی‌گراد است. تمام فولادها، کاهشی را در حد انرژی بالایی بین ۲٫۲ و J ۴٫۰ نشان می‌دهد. مشابه فولادهای کم آلیاژ، استحکام تسلیم می‌تواند همان‌طوری که در شکل ۱۳–۲۹ الف نشان داده شده است با دمای گذار نرمی به تردی ارتباط داده شود. به هرجهت کاهش در حد انرژی بالایی می‌تواند با کاهش در مساحت هم‌چنان که در شکل ۱۳–۲۹ ب نشان داده شده است ارتباط داده شود.



شکل ۱۳–۲۸. منحنی‌های دمای گذار برای فولادهای فریتی ـ مارتنزیتی مختلف که با استفاده از نمونه‌های شارپی کوچک اندازه‌گیری شده است [۱۳].



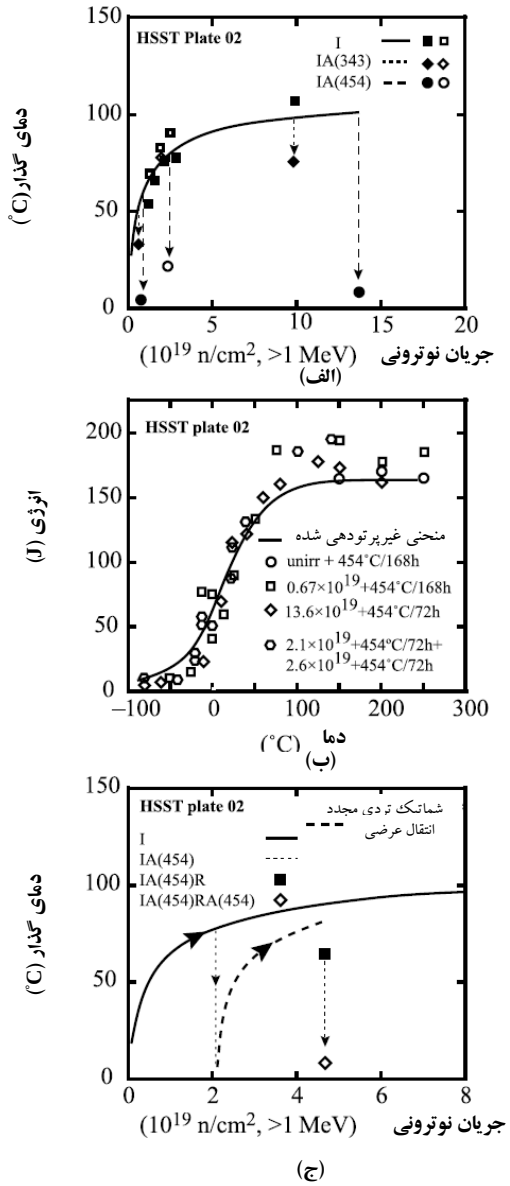
شکل ۱۳-۲۹. ارتباط بین (الف) استحکام تسلیم و دمای گذار نرمی به تردی و (ب) کاهش در مساحت و حد انرژی بالایی[۳۵].

۱۳-۷-۶ بازپخت و پرتودهی مجدد

یکی از راه‌های معکوس کردن اثرات تردشوندگی ناشی از پرتودهی بازپخت حرارتی عیوب برای بازگرداندن ویژگی‌های چقرمگی که به وسیله‌ی پرتودهی نوترونی کاهش یافته، است. به هر حال نتیجه‌ی بازپخت وابسته به نرخ تردشوندگی در فولاد باز پرتودهی شده است. بازپخت فولادهای مخازن تحت فشار پرتودهی شده در دمای نزدیک به $۴۵۰^{o}C$ برای ۷۰ تا ۱۵۰ ساعت تقریباً بازیابی کاملی از دمای گذار، حتی بعد از پرتودهی تا شارهای بسیار بالا ($> ۱ \times ۱۰^{۲۰}\ n/cm^2$) را فراهم می‌کند [۳۰]. بازپخت تحت این شرایط یک کاهش قابل توجهی را در دانسیته و کسر حجمی رسوبات غنی از مس فراهم می‌کند. عملیات بازپخت هم‌چنین رسوبات باقی‌مانده را درشت کرده و در نتیجه منجر به کاهش کلی مس در محلول می‌شود [۳۱]. مقدار پایین مس در محلول حساسیت آلیاژ بازپخت شده به تردشوندگی را کاهش می‌دهد و آلیاژ مجدداً یک نرخ تردشوندگیِ پایینی را از شرایط غیرپرتودهی شده نشان می‌دهد. شکل ۱۳-۳۰ الف-ج اثر بازپخت و پرتودهی مجدد روی تردی یک ورقه A533B کلاس ۱ را نشان می‌دهد. شکل ۱۳-۳۰ الف افزایش در ΔT_{41} با جریان تا تقریباً $۱٫۴ \times ۱۰^{۲۰}\ n/cm^2$ را نشان می‌دهد. نتایج منحنی‌های شارپی بعد از بازپخت در $۴۵۴^{o}C$ برای زمان‌های بین ۷۲ و ۱۶۸ ساعت (شکل ۱۳-۳۰ ب) هیچ‌گونه تفاوتی را از منحنی‌های نمونه‌های غیرپرتودهی شده نشان نمی‌دهد. پرتودهی مجدد تا $۴٫۷ \times ۱۰^{۱۹}\ n/cm^2$ در مورد نمونه‌ای که در ابتدا تا $۲ \times ۱۰^{۱۹}\ n/cm^2$ پرتودهی شده و سپس در ۴۵۴ درجه‌ی سانتی‌گراد به مدت ۷۲ ساعت بازپخت شده، سخت شوندگی کم‌تری را از پرتودهی اصلی ایجاد می‌کند. انتقال دمای گذار اندازه‌گیری شده در شکل ۱۳-۳۰ ج به وسیله‌ی نمادهای توپر نشان داده شده است که کاملاً زیر انتقال افقی ترد شوندگی مجدد (خط نقطه چین) پیش‌بینی شده به وسیله‌ی راهنمای NCR 1.162 است.

نمادهای توپر انتقال شارپی در J ۴۱ می‌باشند و نمادهای

توخالی انتقال K_{Jc} در $MPam^{1/2}$ ۱۰۰ می‌باشد



شکل ۱۳–۳۰. تأثیر پرتودهی و بازپخت در یک ورقه‌ی فولاد A533B روی (الف) انتقال دمای گذار، (ب) منحنی شارپی و (ج) انتقال دمای گذار متعاقب پرتودهی مجدد [۳۱].

۱۳-۷-۷ خستگی

هنگامی که فلز در معرض تنش‌های سیکلی قرار می‌گیرد، تغییرات ساختاری اساسی در آن ایجاد می‌شود. این تغییرات فرایند خستگی را به مراحل زیر تقسیم می‌کند:

۱. شروع ترک آغاز گسترش آسیب خستگی است که می‌تواند به وسیله‌ی بازپخت حرارتی مناسب حذف شود.

۲. رشد ترک باند لغزشی، عمیق شدن ترک اولیه روی صفحاتی با تنش برشی بالا را شامل می‌شود که در بسیاری از منابع به منزله‌ی مرحله‌ی I رشد ترک در نظر گرفته شده است.

۳. رشد ترک روی صفحاتی با تنش کششی بالا، رشد ترک در جهت عمود بر بیشینه‌ی تنش کششی را دربر می‌گیرد که به منزله‌ی رشد ترک مرحله‌ی II در نظر گرفته می‌شود.

۴. پارگی نهایی نرم هنگامی رخ می‌دهد که ترک به طول کافی رسیده به نحوی که سطح مقطع باقی‌مانده نمی‌تواند بار اعمال شده را تحمل کند، که مرحله‌ی III است.

عمر خستگی به وسیله‌ی منحنی S-N که در آن تعداد سیکل‌ها تا پارگی برحسب تنش رسم شده است (تنش بیشینه یا میانگین)، اندازه‌گیری می‌شود. منحنی‌های S-N در کل تا پارگی خستگی در یک تعداد سیکل بالا ($N > ۱۰^۵$) اجرا می‌شود و در این محدوده‌ی تنش اساساً کشسان است، اگرچه تغییر شکل پلاستیک نیز در یک مقیاس میکرو رخ می‌دهد. در تنش‌های بالاتر، که تغییر شکل به وسیله‌ی انعطاف‌پذیری کلی و کرنش کنترل شده توصیف می‌شود، آزمون‌های خستگی سیکل پایین برای تعیین عمر خستگی در این منطقه مناسب هستند. درحالی‌که دامنه‌ی تنش در یک آزمون خستگی سیکل بالا ثابت است، ضریب شدت تنش همان‌طوری که به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۳-۲۷ پیش‌بینی شده، هم‌چنان که طول ترک با تعداد سیکل‌ها زیاد می‌شود، افزایش می‌یابد. افزایش در طول ترک مرتبط با تغییر در ΔK است به صورتی که:

(۱۳-۶۷)

$$\Delta K = K_{\max} - K_{\min} = (\sigma_{\max} - \sigma_{\min})\sqrt{\pi c}\,.$$

فرایند رشد ترک خستگی به دو مرحله که وابسته به بزرگی ΔK است، تقسیم می‌شود. نرخ گسترش ترک در خستگی به صورت $\mathrm{d}a/\mathrm{d}N$ نشان داده می‌شود (شکل ۱۳-۳۱ الف). در مرحله‌ی I، ترک در

ابتدا در طول باندهای لغزشی دایمی گسترش می‌یابد. در فلز چند بلوری، قبل از آن‌که گسترش ترک به مرحله‌ی II تغییر کند، ترک فقط در حدود چند قطر دانه گسترش می‌یابد. نرخ گسترش ترک در مرحله‌ی I در کل بسیار آرام است و در حدود چند نانومتر در هر سیکل است. سطح شکست در شکست مرحله‌ی I به شدت تراش‌دار است (صفحه‌های متعدد و کوچک را دارد). شکل ۱۳-۳۱ ب یک نمایش شماتیک از مراحل I و II را در طول گسترش ترک خستگی در فلزات نشان می‌دهد.

گسترش ترک مرحله‌ی II به وسیله‌ی یک فرایند کندشدن[1] پلاستیکی رخ می‌دهد [۳۷] که در شکل ۱۳-۳۲ نشان داده شده است. در شروع سیکل بارگذاری سر ترک تیز است (شکل ۱۳-۳۲ الف). هم‌چنان که بار کششی اعمال می‌شود، دندانه‌های کوچک دوتایی در سر ترک، لغزش را در طول صفحات در زاویه 45^{o} از صفحه‌ی ترک متمرکز می‌کنند (شکل ۱۳-۳۲ ب). هم‌چنان که ترک به بیشینه‌ی گستردگی خود می‌رسد (شکل ۱۳-۳۲ ج)، ترک با برش پلاستیکی رشد کرده و در زمان مشابه سر ترک‌ها نیز پهن می‌شوند. هنگامی که بار به حالت فشاری تغییر می‌کند جهت لغزش در انتهای مناطق وارونه می‌شود (شکل ۱۳-۳۲ د). وجوح ترک به سمت یک‌دیگر فشرده شده و سطح جدید ترکِ ایجاد شده در کشش، به داخل صفحه‌ی ترک فشرده می‌شود (شکل ۱۳-۳۲ ه) که به صورت جزیی به وسیله‌ی پیچش چین‌دار شده تا یک سر ترکی ایجاد شود که مجدداً تیز شده است. سپس سر ترکی که مجدداً تیز شده آماده گسترش می‌شود و دوباره در سیکل تنشی بعدی کند می‌شود (شکل ۱۳-۳۲ و).

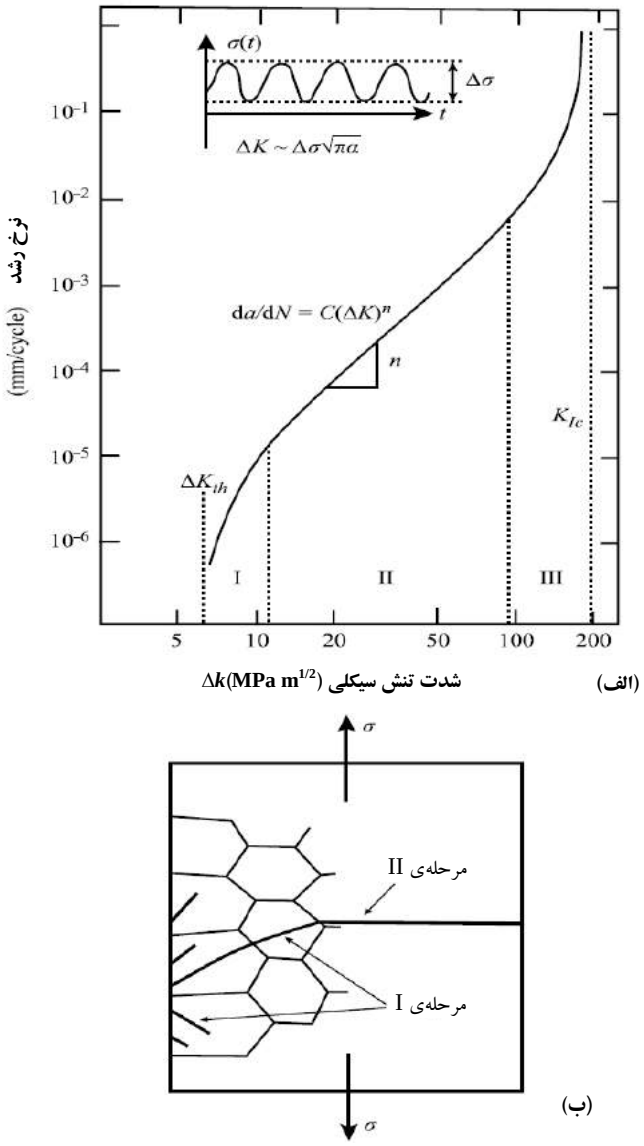
تحقیقات قابل توجهی برای تعیین قوانین گسترش ترک خستگی برای رشد مرحله‌ی II انجام شده است. در کل، هدف در آزمایش‌های نرخ رشد ترک خستگی، حفظ شرایط کاملاً کشسان در نمونه‌ی آزمون است که به موجب آن این امکان وجود دارد که نتایج برحسب شدت تنش سر ترک تعریف شده به وسیله‌ی مکانیک شکست خطی کشسان تفسیر شود. نرخ رشد ترک در مرحله‌ی II به وسیله‌ی معادله‌ی پاریس[2] توضیح داده می‌شود:

(۱۳-۶۸)

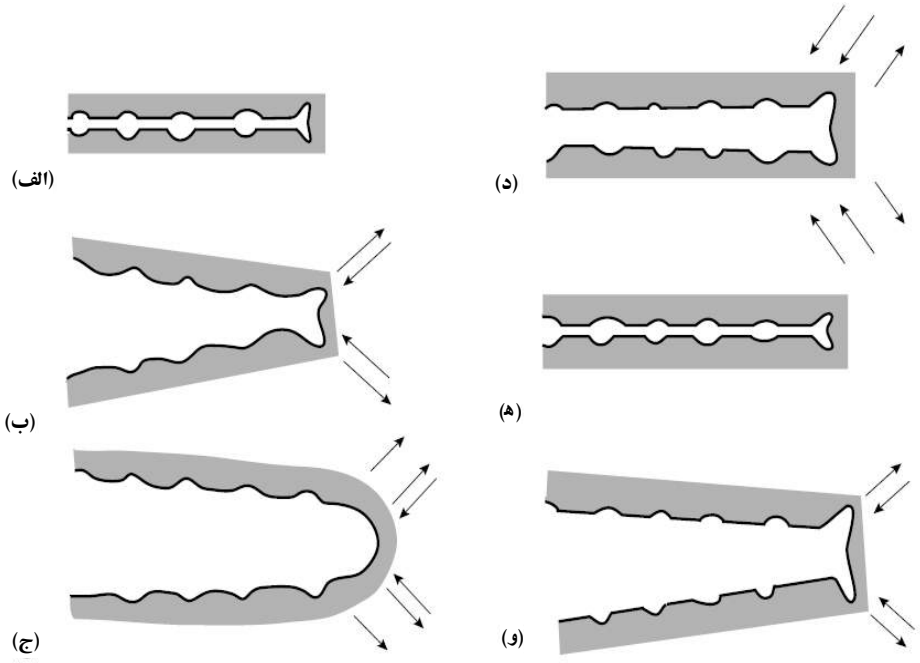
$$\frac{\mathrm{d}a}{\mathrm{d}N} = C(\Delta K)^n$$

1. Blunting
2. Paris equation

که da/dN افزایش نموی در طول ترک در هر سیکل است، C و n ثابت هستند و ΔK محدوده‌ی ضریب شدت تنش تعیین شده در معادله‌ی ۱۳-۶۷ هستند.



شکل ۱۳-۳۱. (الف) نمایش شماتیک رفتار رشد ترک خستگی در یک محیط خنثی به صورت تابعی از محدوده‌ی ضریب شدت تنش، ΔK، و (ب) نمایش شماتیک مراحل I و II در گسترش ترک خستگی در یک فلز [۳۶].

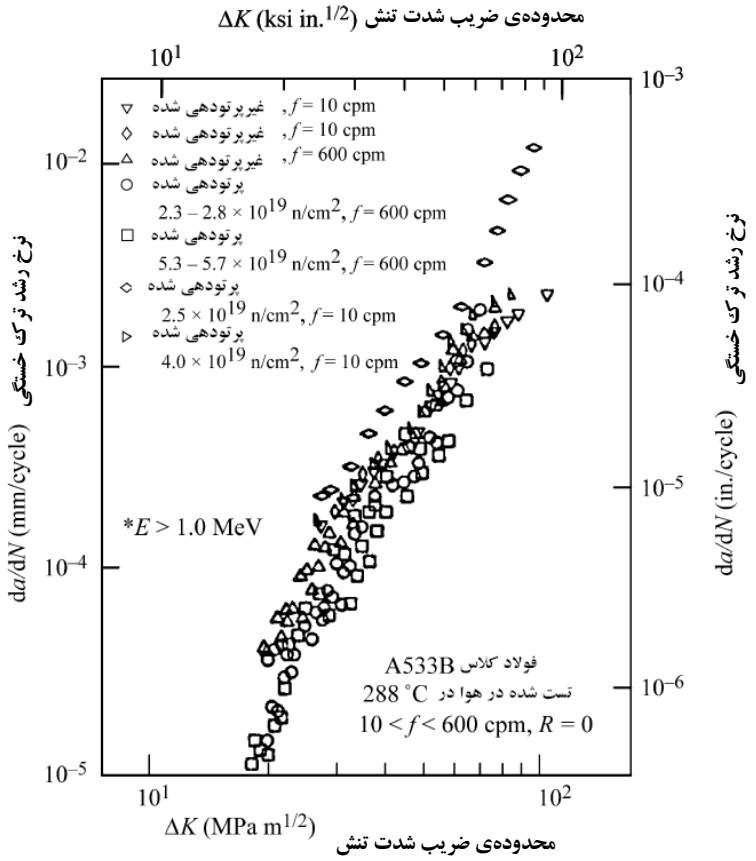


شکل ۱۳-۳۲. فرایند کند شدن پلاستیکی رشد ترک‌های خستگی مرحله II [۳۷].

(لازم به ذکر است که معمولاً رشد ترک در سیکل به صورت $\mathrm{d}a/\mathrm{d}N$ و نرخ رشد ترک به صورت $\mathrm{d}a/\mathrm{d}t$ نشان داده می‌شوند که a طول ترک است). علاوه بر مشخصات ΔK، نسبت K_{max} به K_{min} یک عامل مهم در تشریح تنش متوسط در طول بارگذاری سیکلی است و به جای نسبت R معرفی می‌شود به گونه‌ای که $\Delta K = K_{max}(1\text{-}R)$ است.

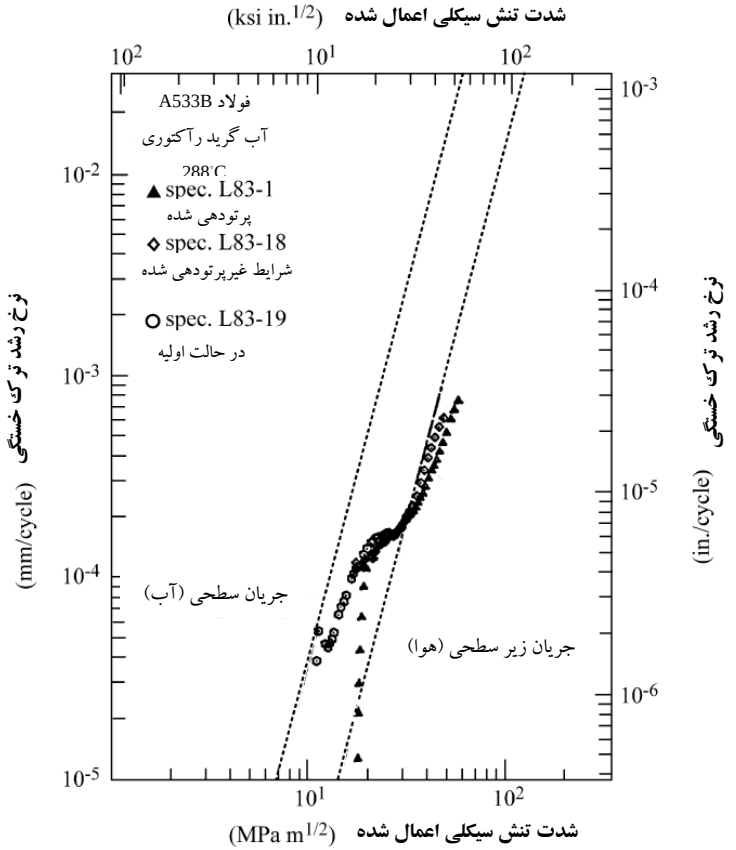
لازم به ذکر است که رشد مرحله‌ی III ترک خستگی به وسیله‌ی چقرمگی شکست ایستایی، K_{Ic} محدود شده است. نرخ رشد ترک خستگی اولیه به وسیله‌ی مقدار آستانه‌ی افزایش شدت تنش، ΔK_{th} تعریف می‌شود که در زیر آن ترک نمی‌تواند گسترش یابد.

رفتار چقرمگی شکست به روشنی مرتبط با مفاهیم رشد ترک خستگی است، زیرا چقرمگی شکست یک معیار پایان عمر برای پایان رشد ترک خستگی است. یکی از تغییرات بسیار عمیق القا شده در اثر پرتودهی نوترونی کاهش در چقرمگی شکست است. از آن‌رو اثر پرتودهی نوترونی روی رشد ترک خستگی فولادهای مخازن تحت فشار یک اهمیت قابل توجه است. پیشرفت‌های قابل توجه با استفاده از روش‌های LEFM برای تشریح اثر پرتودهی نوترونی روی رفتار گسترش ترک خستگی فولادهای مخازن تحت فشار به‌دست آمده است. مشاهدات کلی به این صورت است که پرتودهی نوترونی در اغلب موارد اثر زیان بار قابل توجهی را روی رفتار رشد ترک خستگی فولادهای مخازت تحت فشار در یک محیطی با اتمسفر هوا ندارد (شکل ۱۳-۳۳).



شکل ۱۳-۳۳. رفتار رشد ترک خستگی فولاد A533-B کلاس ۱ پرتودهی شده و پرتودهی نشده در هوا در ۲۸۸°C [۳۸].

در محیط‌های آبی تحت فشار[1]، مشخص شده است که پرتودهی نرخ‌های رشد را به مقادیری فراتر از آن چیزی افزایش نمی‌دهد که ناشی از خود محیط است (شکل ۱۳-۳۴). در نتیجه، بعد از آزمایش‌های قابل توجه، هیچ گونه اثر قابل تشخیصی از پرتودهی روی نرخ رشد ترک خستگی فولادهای مخازن تحت فشار وجود ندارد. به هرجهت یک محدوده وسیعی از متغیرهای خارجی مانند شکل موج، دما، نرخ‌های بارگذاری و مخصوصاً محیط با یک‌دیگر ترکیب می‌شوند و موقعیت‌های بدتری را به وجود می‌آورند. نقش محیط در رشد ترک در فصل ۱۵ مورد بحث قرار خواهد گرفت.



شکل ۱۳-۳۴. نرخ‌های رشد ترک خستگی برای فولاد A533-B پرتودهی شده و پرتودهی نشده در رآکتورهای آبی تحت فشار دما بالا [۳۹].

1. Pressurized water

۱۳-۸ شکست و خستگی آلیاژهای آستنیتی در دماهای پایین تا متوسط

فولادهای زنگ نزن آستنیتی در ساختمان بسیاری از هسته‌ها در رآکتورهای آب سبک استفاده می‌شوند که در محدوده‌های دمایی پایین تا متوسط ($< ۴۰۰\ ^oC$) عمل می‌کنند. همان‌طوری که در فصل ۱۲ نشان داده شد، در این محدوده‌ی دمایی افزایش‌های قابل توجهی در استحکام تسلیم (بالاتر از ۵ برابر) رخ می‌دهد که همراه با یک کاهش شدید در انعطاف‌پذیری است (از تقریباً ۳۰٪ تا $< ۱٪$). اثر این تغییر ویژگی‌های مکانیکی روی شکست و خستگی در قسمت بعد بررسی می‌شود.

۱۳-۸-۱ اثر پرتودهی روی چقرمگی شکست

چقرمگی شکست فولادهای زنگ‌نزن پرتودهی شده در محدوده‌ی دمای‌های متوسط، خیلی سریع با مقدار پرتوگیری کاهش می‌یابد. شکل ۱۳-۳۵ الف روند موجود در چقرمگی شکست برای شرایط بازپخت محلولی و کار سرد را به صورت خلاصه نشان می‌دهد، که K_{Ic} به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۳-۲۷ تعیین شده است. شکل ۱۳-۳۵ ب کاهش در K_{Ic} را به صورت تابعی از مقدار پرتوگیری نوترونی بالای ۴۰ dpa برای فولادهای زنگ نزن ۳۰۴ و ۳۱۶ پرتودهی شده و آزمایش شده بین دماهای ۲۰۵ و ۴۲۷^oC را نشان می‌دهد. در حقیقت، مقدار J_{Ic} از مقادیر بین ۶۰۰ و $۸۲۳\ kJ/cm^2$ در شرایط غیرپرتودهی به مقادیر کم‌تر از $۲۰\ kJ/cm^2$ برای تقریباً ۶dpa در فولاد زنگ‌نزن ۳۰۴ پرتودهی شده و آزمایش شده در ۲۸۸^oC افت می‌کند [۴۲]. در شکست کشسان ـ پلاستیک، مقاومت به رشد ترک به وسیله‌ی ضریب پارگی[1]، T_m تشریح می‌شود که به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۱۳-۶۹)

$$T_m = \frac{dJ}{da}\frac{E}{\sigma_0^2},$$

که dJ/da شیب منحنی مقاومت J برحسب افزایش در طول ترک، a است و σ_o تنش سیلان است که تقریباً میانگین استحکام‌های تسلیم و نهایی است. ضریب پارگی نیز به صورت قابل توجهی در این محدوده‌ی دمایی در نتیجه‌ی پرتودهی نوترونی کاهش می‌یابد.

1. Tearing modulus

اودته و لوکاس[1] [۴۳] یک رابطه‌ی مقیاسی را برای تشریح وابستگی چقرمگی شکست به پرتودهی استفاده کردند:

(۷۰–۱۳)

$$\frac{K_{\mathrm{Ic}}^{\mathrm{irr}}}{K_{\mathrm{Ic}}^{\mathrm{unirr}}} = \sqrt{\frac{e_{\mathrm{u}}^{\mathrm{irr}}}{e_{\mathrm{u}}^{\mathrm{unirr}}} \frac{\sigma_0^{\mathrm{irr}}}{\sigma_0^{\mathrm{unirr}}}} ,$$

که e_{u} کرنش مهندسی یکنواخت است. انطباق این معادله به اطلاعات چقرمگی شکست چندین فولاد آستنیتی به وسیله‌ی خط پررنگ در شکل ۱۳–۳۵ ب نشان داده شده است. درحالی‌که این معادله انطباق خوبی با اطلاعات دارد؛ اما این رابطه نمی‌تواند یک مبنای فیزیکی برای کاهش در چقرمگی فراهم کند. در عوض، این معادله پیشنهاد می‌کند که اتلاف چقرمگی شکست با پرتودهی ناشی از تغییر حالت شکست است.

در شرایط غیرپرتودهی، فلزات نرمی مانند فولادهای زنگ نزن که در آن حفره‌ها در منطقه‌ی پلاستیک جلوی سر ترک جوانه‌زده و رشد می‌کنند تا نهایتاً به وسیله‌ی گلویی شدن بخش باقی‌مانده به سر ترک به متصل شوند، با پارگی دمبلی نرم شکسته می‌شوند (شکل ۱۳–۳۶ الف) [۴۱]. در مقادیر پرتوگیری پایین، پرتودهی می‌تواند به وسیله‌ی نرم شدن و تغییر شکل موضعی اتصال حفره‌ها را شتاب دهد. به هم پیوستگی به وسیله‌ی نفوذ گلویی (DN) هنگامی رخ می‌دهد که پهنای ریزحفره تقریباً برابر با فاصله‌ی لبه‌ی حفره تا سر ترک کند شده باشد. به هم پیوستگی در کرنش پایین‌تر نیز به وسیله‌ی گلویی شدن موضعی (LN) بین حفره و سر ترک رخ دهد. در هر دو مورد، چقرمگی شکست با رابطه‌ی زیر به ضرایب تغییر شکل ارتباط داده شود:

(۷۱–۱۳)

$$K_{\mathrm{Jc}} = \sqrt{1.5\beta r^* \sigma_0 E'} ,$$

1. Lucas

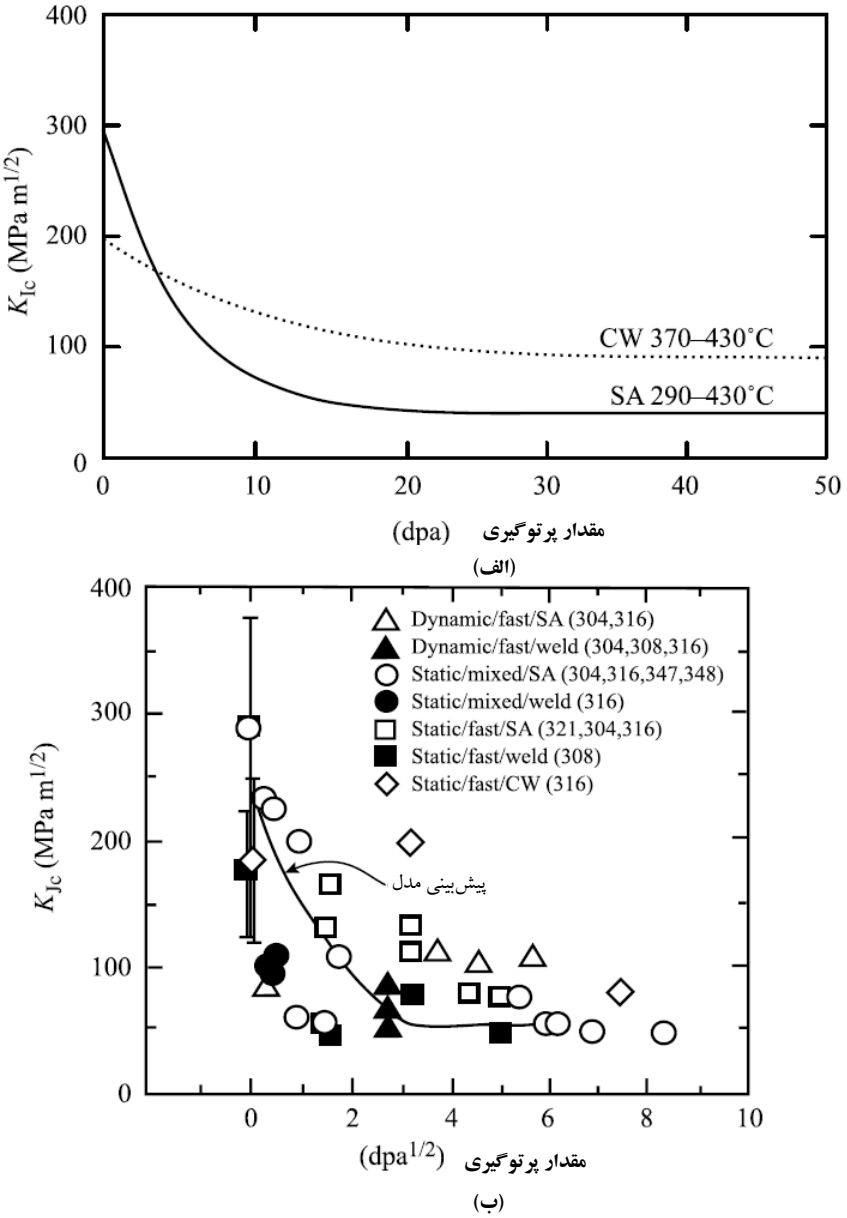
که β نسبت باز شدن ترک به فاصله تا حفره‌ی بعدی در نقطه‌ی اتصال ترک ـ حفره ($\beta = \delta/r^*$) است، و $E' = E/(1-\nu^2)$ است. مقدار β هم‌چنان که تغییر شکل به صورت فزاینده‌ای موضعی می‌شود، کاهش می‌یابد. در مقادیر پرتوگیری بالا، پیشرفت ترک به احتمال بسیار زیاد به وسیله‌ی تغییر شکل ناهمگن در منطقه‌ی جلوی ترک به علت کانال‌بندی شدید نابجایی‌ها در جامد کنترل می‌شود. در این مورد، شکست به وسیله‌ی یک فرایندی رخ می‌دهد که در آن تغییر شکل در داخل یک‌سری از بخش‌های پلاستیک پشت سر ترک متمرکز شده است (شکل ۱۳-۳۶ ب) ، و در سراسر منطقه‌ای به طول L_z گسترش می‌یابد. رشد ترک هنگامی رخ می‌دهد که ظرفیت جابه‌جایی آخرین بخش، Δ_z به زیر تنش موضعی σ_z برسد:

(۷۲-۱۳)

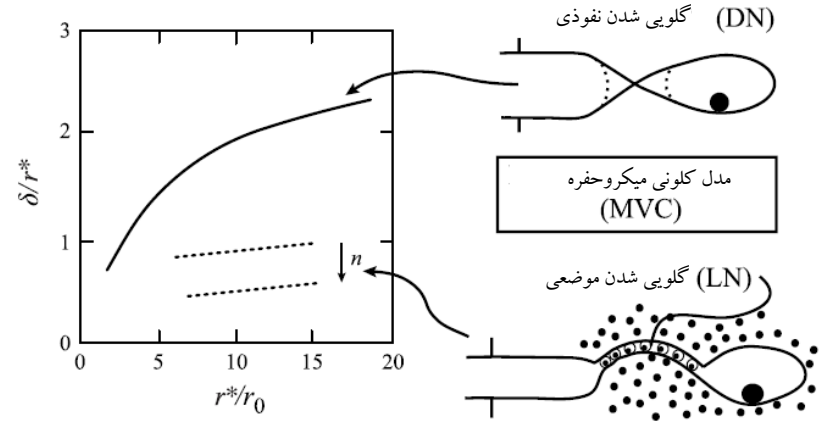
$$K_{Jc} = \sqrt{0.5\Delta_z\sigma_z E'}\ .$$

درحالی‌که این مدل‌ها با نقش افزایش موضعیِ سیلان پلاستیکی با مقدار پرتوگیری سازگار است، آزمایشات تأیید کننده‌ای نیز در حال انجام است.

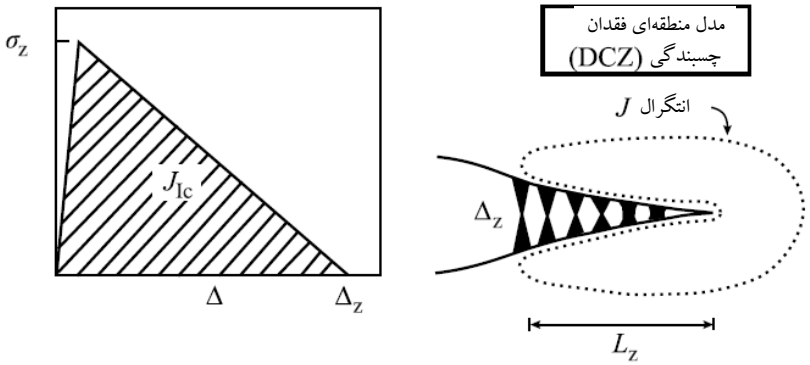
علاوه بر تغییر فرایند شکست نرم، پرتودهی هم‌چنین منجر به تغییر حالت شکست از پارگی دمبلی نرم به رخی می‌شود. مشخص شده است که انعطاف‌پذیری تغییر شکل مارتنزیتی را در فولادهای زنگ نزن آستنیتی که ممکن است به وسیله‌ی یک سازوکار شبه رخی شکسته می‌شوند، القا کند. به هر حال چنین فرایندهایی هنگامی که تغییر شکل در دماهای کم‌تر از $300\ ^oC$ رخ می‌دهد، غیر محتمل هستند.



شکل ۱۳–۳۵. تغییر چقرمگی شکست با مقدار پرتوگیری برای (الف) فولادهای زنگ نزن آستنیتی کار سرد شده و بازپخت محلولی شده [۴۰]، و (ب) برای فولادهای زنگ نزن آستنیتی مختلف پرتودهی شده و آزمون شده در دماهای بین ۲۰۵ و ۴۲۷°C [۴۱].



(الف)



(ب)

شکل ۱۳-۳۶. مدل‌های شکست نرم. (الف) مدل به هم پیوستگی ریزحفره‌ها: نسبت باز شدن ترک، δ به فاصله از حفره‌ی بعدی در نقطه‌ی اتصال ترک، r^* برحسب کمیت r^* بهینه شده به وسیله‌ی شعاع ناخالصی اولیه، r_0. (ب) مدل منطقه‌ی فقدان چسبندگی: نرخ رشد ترک به وسیله‌ی پارگی بخش‌های پلاستیکی متصل کننده‌ی سطوح یک ترک مجازی [۴۱].

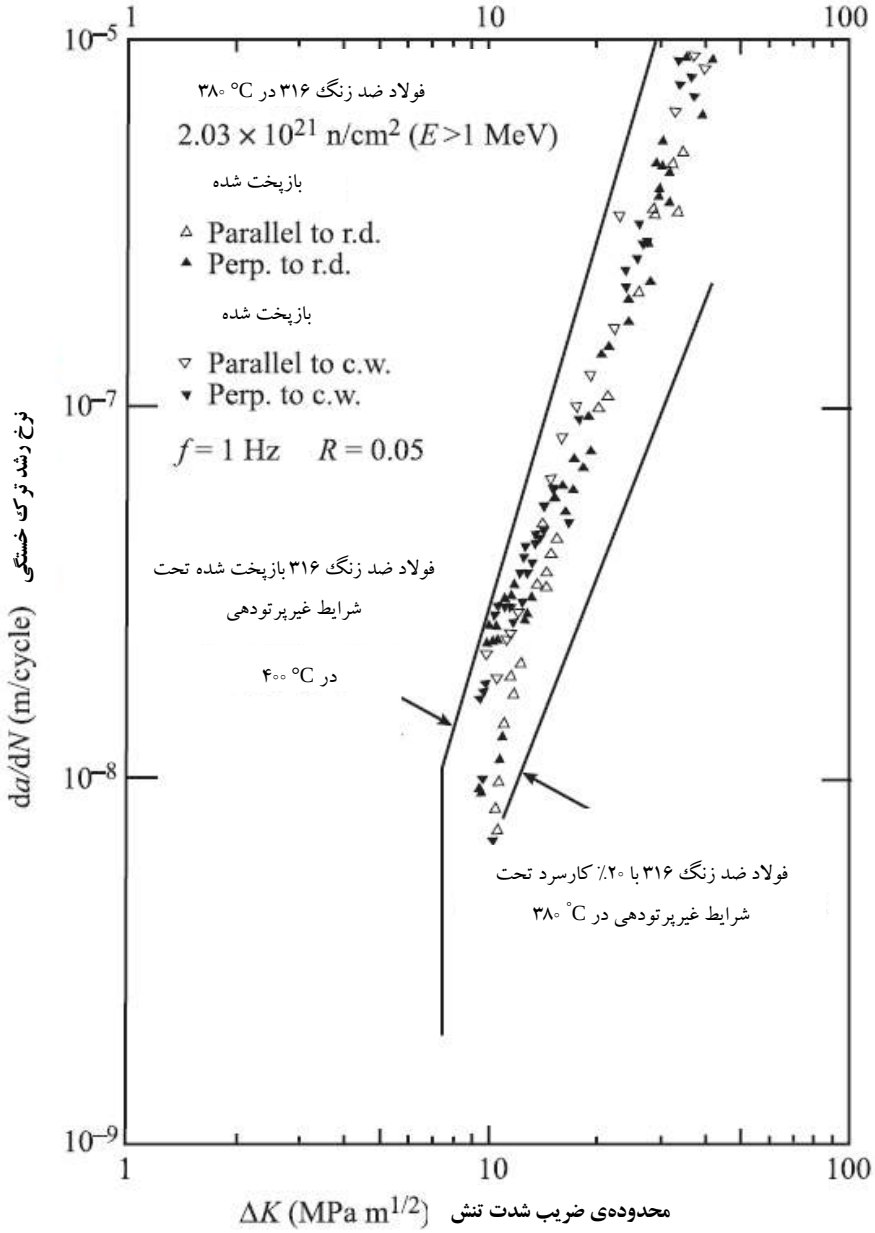
۱۳-۸-۲ اثر پرتودهی روی خستگی

به علت کاهش کرنش یکنواخت و افزایش تغییر شکل پلاستیک موضعی در نتیجه‌ی پرتودهی، این انتظار وجود دارد که رشد ترک خستگی نیز باید تحت تأثیر قرار گیرد. به ویژه، در مرحله‌ی رشد ترک خستگی III، که نرخ رشد به وسیله‌ی چقرمگی شکست محدود می‌شود، شکل ۱۳-۳۱ الف، کاهش در چقرمگی شکست در نتیجه پرتودهی منجر به افزایش در نرخ رشد ترک می‌شود. در

مرحله‌ی I، محدوده‌ی شدت تنش آستانه ΔK_{th} به محیط شیمیایی، نسبت R، جدایش ناخالصی‌ها در مرزدانه و به تمایل مواد استحکام بالا به تحمل موضعی شدن سیلان حساس است. بررسی حساسیت مورد آخر به وسیله‌ی اطلاعات تجربی نشان می‌دهد که ΔK_{th} با افزایش استحکام تسلیم در ۳۱۶SS غیرپرتودهی شده کاهش می‌یابد [۴۴]. در نتیجه، موضعی شدن شدید انعطاف‌پذیری در نتیجه‌ی پرتودهی منجر به کاهش شدت تنش آستانه می‌شود.

به هر جهت اطلاعات موجود در مورد اثر پرتودهی روی خستگی در فولادهای زنگ نزن آستنیتی در محدوده‌ی دماهای میانی اکثراً در مرحله‌ی II است که به وسیله‌ی معادله‌ی پاریس توضیح داده شده است. در این منطقه، گسترش ترک در اصل وابسته به ویژگی‌های جامد کشسان است و کم‌تر وابسته به ریزساختار و فرایندهای تغییر شکل پلاستیکی است. اطلاعات محدودی نشان می‌دهد که در حقیقت نرخ رشد ترک نسبتاً به پرتودهی تا مقادیر پرتوگیری بالاتر از حدود ۳۰ dpa غیرحساس است. شکل ۱۳-۳۷ نشان می‌دهد که نرخ رشد ترک فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده تا $۲٫۰۳ \times ۱۰^{۲۱}$ n/cm^2 در ۳۸۰^oC در سمت بالا به وسیله‌ی رشد ترک در ورقه‌ی نوردی بازپخت شده و در سمت پایین به وسیله‌ی ورق ۲۰٪ کارسرد شده که هر دو حالت در شرایط غیرپرتودهی شده هستند، محدود شده است. بنابراین پرتودهی فولادهای زنگ نزن آستنیتی تا مقادیر پرتوگیری پایین یا متوسط منجر به افزایش قابل اندازه‌گیری در رشد ترک خستگی نمی‌شود. به هرجهت، با افزایش دما، تولید و انباشت هلیوم در داخل حباب‌ها می‌تواند گسترش ترک خستگی را تحت تأثیر قرار دهد که در فصل بعد بحث خواهد شد.

با وجود این انتظار می‌رود که تحت پرتودهی، عمر خستگی کم چرخه باید به علت کاهش انعطاف‌پذیری کاهش یابد و عمر خستگی پر چرخه باید به علت افزایش استحکام افزایش یابد. این رفتار در حقیقت برای فولاد زنگ نزن ۳۰۴ در دمای اتاق و ۳۲۵^oC متعاقب پرتودهی تا ۸×۱۰^{۲۲} n/cm^2 ($E > ۰٫۱$ MeV) در یک دمای ۴۰۰^oC بررسی می‌شود [۴۶]. اثر سودمند پرتودهی در HCF احتمالاً ناشی از این حقیقت است که برخلاف سخت گردانی قابل توجه و کاهش در ضریب کارسختی در حدود ۲٫۷، آلیاژ تا ۵-۴٪ ازدیاد طول، انعطاف‌پذیر باقی می‌ماند.



شکل ۱۳–۳۷. اثر پرتودهی تا $۲٫۰۳ \times ۱۰^{۲۱}$ n/cm^2 ($E > ۱$ MeV) در دمای ۳۸۰°C روی نرخ رشد ترک خستگی در ورقه‌ی نوردی بازپخت شده و ورق ۲۰٪ کارسرد شده نوع ۳۱۶SS [۴۵].

۱۳-۹ تردی دما بالا

سیستم‌های هسته‌ای که در منطقه‌ی دما بالا کار می‌کنند شامل رآکتور سریع، رآکتورهای شکافت پیشرفته، رآکتورهای گداخت و سیستم‌هایی برای تبدیل هسته‌ای پسماندها هستند. در این سیستم‌ها سه دسته آلیاژهای فولادهای زنگ نزن آستنیتی، فولادهای فریتی ـ مارتنزیتی و آلیاژهای وانادیم به منزله‌ی اولین انتخاب‌ها برای ترکیبات قلب رآکتورها هستند. این آلیاژها بر پایه‌ی استحکام دما بالایشان انتخاب می‌شوند. به هرجهت، سازوکارهای تخریب منطقه‌ی دما بالا می‌تواند سودمندی آن‌ها را محدود کند.

ماهیت شکست در دمای بالا کاملاً متفاوت از حالت شکست نشان داده شده به وسیله‌ی فلزات و آلیاژها متعاقب آزمون‌های کششی در دماهای پایین است. شکست در دماهای پایین بیش‌تر ناشی از برش سراسری دانه‌های فلز است (به عبارت دیگر شکست درون دانه‌ای) و اغلب بعد از تغییر شکل محسوسی رخ می‌دهد. حالت شکستی که اغلب مرحله‌ی III خزش دما بالا یا تغییر شکل در یک آزمون کششی دما بالا را به پایان می‌رساند، نوع بین‌دانه‌ای است. هم‌چنان که دما افزایش می‌یابد (بالای T/T_m ۰٫۳)، مرزدانه‌ها استحکامشان را در قبال زمینه از دست می‌دهند. در این دماها، لغزش مرزدانه‌ای غالب است و شکست بین‌دانه‌ای با ترک خوردن لبه زنری[1] در نقاط اتصال مرزدانه‌ای[2] (تنش‌های بالاتر و دماهای پایین‌تر)، با شکست پیوسته فازهای ترد مرزدانه‌ای به وسیله‌ی تشکیل حفره‌ی مرزدانه‌ای (تنش‌های پایین‌تر یا دماهای بالاتر)، یا به وسیله‌ی تردی هلیومی از طریق حباب‌های مرزدانه‌ای رخ می‌دهد.

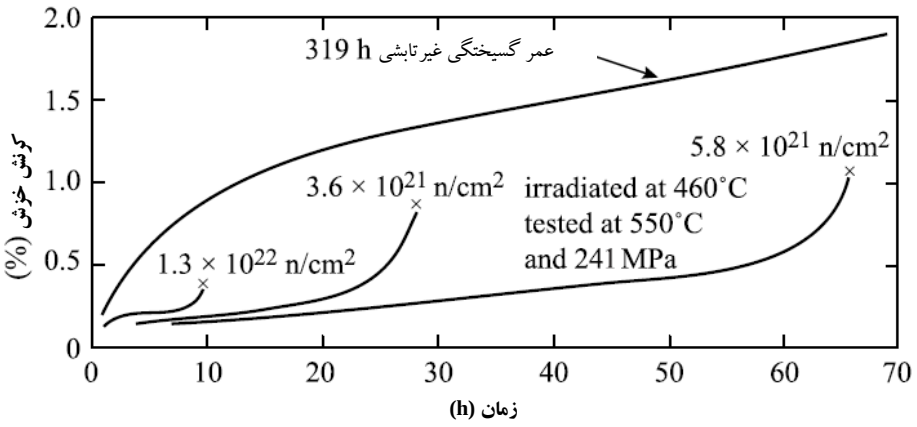
اثر پرتودهی روی تردی دما بالای آلیاژها در آزمون گسیختگی خزشی اندازه‌گیری می‌شود. گسیختگی خزشی به پارگی یک نمونه‌ی در معرض تنش‌های کاملاً کم‌تر از تنش تسلیم برای دوره‌های زمانی طولانی اشاره می‌کند. تغییر شکل، نسبت به تغییر شکل پلاستیک سریع آزمون کشش به وسیله‌ی خزش رخ می‌دهد (فصل ۱۴). در آزمایش پارگی خزشی، زمان تخریب یا عمر گسیختگی، t_f و ازدیاد طول در نقطه‌ی پارگی، ε_f اندازه‌گیری می‌شوند. به شرط آن‌که خزش حالت پایدار در بخش اصلی آزمون حکم‌فرما باشد، این کمیت‌ها به صورت زیر با یک‌دیگر در ارتباط هستند:

1. Zener wedge cracking
2. Grain boundary juncture

(۷۳-۱۳)

$$t_f = \frac{\varepsilon_f}{\dot{\varepsilon}}$$

که $\dot{\varepsilon}$ نرخ خزش حالت پایدار است. ویژگی‌های پارگی خزشی وابسته به اندازه‌ی پرتودهی، دماهای پرتودهی و درجه‌ی کار سرد نمونه وابسته است. این متغیرها به صورت مستقیم نرخ خزش و ازدیاد طول در شکست، ε_f را کنترل می‌کنند. عمر گسیختگی، t_f به وسیله‌ی متغیرهای مشابه تحت تأثیر قرار می‌گیرد زیرا این کمیت نسبت ε_f به $\dot{\varepsilon}$ است. شکل ۱۳-۳۸ اثر جریان نوترون سریع روی ویژگیِ پارگی خزشی یک فولاد زنگ نزن آستنیتی را نشان می‌دهد. اطلاعات مشخص می‌کند که هم نرخ خزش $\dot{\varepsilon}$ و هم ازدیاد طول تا شکست ε_f در نمونه‌های پرتودهی شده کاهش می‌یابد. فرایندهایی که $\dot{\varepsilon}$ را تحت تأثیر قرار می‌دهند در فصل ۱۴ بحث شده است (خزش تابشی)، درحالی‌که سازوکارهای که ازدیاد طول تا شکست ε_f را کاهش می‌دهند، به عبارت دیگر حفره‌های مرزدانه‌ای، لغزش‌های مرزدانه‌ای و تردی هلیومی در این قسمت بررسی می‌شوند.



شکل ۱۳-۳۸. اثر پرتودهی روی پارگی خزشی فولاد زنگ نزن ۳۰۴ آنیل شده‌ی پرتودهی شده در ۳۷۰-۴۶۰°C و آزمایش شده در ۵۵۰°C و ۲۴۱ MPa [۴۷].

۱۳-۹-۱ حفره‌های مرزدانه‌ای و حباب‌ها

در دماهای بالا، نفوذ سریع است و اعمال یک تنش می‌تواند منجر به جوانه‌زنی و رشد حفره‌ها در مرزدانه‌هایی شود که عمود بر تنش اعمالی هستند. جوانه‌زنی و رشد حفره، به وسیله‌ی خزش تسهیل می‌شود که در دماهای بالای T_m ۰٫۳ بسیار مهم است. تنش‌های با مقادیر کم‌تر از تنش مورد نیاز برای تشکیل ترک‌های لبه‌ای می‌توانند منجر به تشکیل و رشد حفره‌های مرزدانه‌ای شوند. زمانی که یک حفره تشکیل می‌شود، به وسیله‌ی نفوذ سریع در طول مرزدانه‌ها رشد می‌کند تا مساحت سطح مقطع باقی‌مانده به اندازه‌ای کوچک می‌شود که نمی‌تواند بار اعمال شده را تحمل کند و شکست به وسیله‌ی اتصال حباب‌ها یا به احتمال بیش‌تر به وسیله‌ی گسترش ترک در سراسر آرایش حفره‌های مرزدانه‌ای رخ می‌دهد. اگر هلیوم موجود باشد، می‌تواند رشد حفره‌ها را از طریق اثرگذاری روی فشار روی سطوح حفره و در نتیجه کاهش در زمان پارگی شتاب بخشد.

در تحلیل تردیِ ناشی از رشد حفره یا حباب در مرزدانه‌ها، در ابتدا صرفاً رشد نفوذی حفره‌ها بررسی می‌شوند. به هرجهت وجود یک تنش کششی در دمای بالا منجر به تولید خزش می‌شود که می‌تواند به همراه نفوذ رشد حفره‌ها را شتاب دهد. رشد حفره به وسیله‌ی نرخ کلی خزش کنترل می‌شود. در پایان رشد حفره‌ی مرزدانه‌ای به وسیله‌ی لغزش مرزدانه بررسی می‌شود که فرایند بسیار مهمی است که در دماهای بالا استحکام مرزدانه‌ها را کاهش می‌دهد.

رشد نفوذی حفره‌ها یا حباب‌ها

رشد نفوذی حفره‌ها روی مرزدانه‌ها اولین بار توسط هال[1] و ریمر[2] [۴۸] و بر پایه‌ی فرضیات زیر مورد تحلیل قرار گرفت:

- برای آن‌که حفره از نظر شکلی، کروی باقی بماند نفوذ در سراسر سطح حفره به اندازه‌ی کافی سریع است.
- نفوذ مرزدانه‌ای بر نفوذ حجمی غالب است.
- خود دانه‌ها صلب هستند و حرکت آن‌ها در جهت عمود بر مرز اجباری نیست.

1. Hull
2. Rimmer

- جاهای خالی به وسیله‌ی مرزدانه‌ها فراهم می‌شوند و حفره با تنش اعمال شده در تعادل است، $\sigma = 2\gamma/R$.

فرض شده است که حفره‌ها روی یک صفحه‌ی مربعی در صفحه‌ی مرزدانه آرایش پیدا کرده‌اند به گونه‌ای که فاصله‌ی میان حفره‌های همسایه $2b$ است. ضخامت مرزدانه‌ها به صورت δ_{gb} نشان داده می‌شود و جاهای خالی ایجاد شده در حلقه‌های کوچک اطراف مرزدانه به سمت حفره نفوذ کرده و منجر به رشد آن می‌شوند. با توجه به فرضیات اولیه، غلظت جای خالی در سطح حفره با $p = 0$، با رابطه‌ی زیر تعیین می‌شود:

(۱۳-۷۴)

$$C_v(R) = C_v^0 \exp\left(\frac{2\gamma}{R}\frac{\Omega}{kT}\right) .$$

شار جاهای خالی به حفره برابر است با:

(۱۳-۷۵)

$$J_{gb} = \frac{D_{gb}\nabla\mu}{kT\Omega} ,$$

که $\Delta\mu$ شیب پتانسیل شیمیایی است و D_{gb} ضریب نفوذ مرزدانه‌ای است. برای یک حفره با شعاع R، پتانسیل شیمیایی برابر با $\mu = \sigma\Omega$ است و شیب برابر است با:

(۱۳-۷۶)

$$\nabla\mu = \frac{\Omega}{b}\left(\sigma - \frac{2\gamma}{R}\right) ,$$

و شار جای خالی به حفره برابر است با:

(۱۳-۷۷)

$$J_{gb} = \frac{D_{gb}}{kTb}\left(\sigma - \frac{2\gamma}{R}\right) .$$

با فرض آن‌که حفره به صورت کروی باقی بماند، نرخ زمانی تغییر حفره برابر است با:

(۷۸-۱۳)

$$\frac{dV}{dt} = \left(2\pi R\delta_{gb}\right) J_{gb}\Omega = \frac{2\pi D_{gb}\delta_{gb}\Omega R}{kTb}\left(\sigma - \frac{2\gamma}{R}\right),$$

و نرخ رشد اندازه‌ی حفره برابر است با:

(۷۹-۱۳)

$$\frac{dR}{dt} = \dot{R} = \frac{D_{gb}\delta_{gb}\Omega}{kTRb}\left(\sigma - \frac{2\gamma}{R}\right).$$

این مدل رشد نفوذی حفره فرض می‌کند که نفوذ در سطح حفره از نفوذ در طول مرزدانه بسیار سریع‌تر است و در نتیجه اجازه می‌دهد که حفره کروی باقی بماند. به هر جهت اگر این فرضیه درست نباشد، سپس فرض خواهد شد که حفره به شکل عدسی باشد و رشد به شدت به تنش وابسته خواهد بود. برای تنش‌های پایین نشان داده شده است که[۴۹]:

(۸۰-۱۳)

$$\dot{R} = \frac{D_S\delta_S\Omega\sigma^3}{2kT\gamma^2}, \quad \text{for} \quad 3.5\frac{\sigma b}{\gamma}X \ll 1,$$

و

(۸۱-۱۳)

$$\dot{R} = \frac{(D_{gb}\delta_{gb})^{3/2}}{2(D_S\delta_S)^{1/2}}\frac{\Omega\sigma^{3/2}}{kTb^{3/2}\gamma^{1/2}}, \quad \text{for} \quad 3.5\frac{\sigma b}{\gamma}X \gg 1,$$

که $X = D_S\delta_S/D_{gb}\delta_{gb}$ است، D_S ضریب نفوذ سطحی و δ_S ضخامت سطح یا عمقی که در آن نفوذ سطحی رخ می‌دهد، هستند.

اگر در حفره‌ها هلیوم انباشته شده باشد، در نتیجه می‌تواند به واسطه‌ی مزیت فشار درونی به رشد حفره کمک کند. در این مورد، معادله‌ی ۱۳-۷۴ با وارد کردن فشار در درون حفره اصلاح می‌شود:

(۱۳-۸۲)

$$C_v(R) = C_v^0 \exp \frac{\Omega}{kT}\left[\left(\frac{2\gamma}{R} - p\right)\right],$$

و قانون رشد برای حباب‌های پر از هلیوم برابر است با:

(۱۳-۸۳)

$$\dot{R} = \frac{D_{gb}\delta_{gb}\Omega}{kTRb}\left(\sigma - \frac{2\gamma}{R} + p\right).$$

رشد حفره‌ی قانون توانیِ کنترل شده‌ی خزشی[1] کادک[2] [۵۰] نقش خزش در رشد حفره‌ی مرزدانه‌ای را مورد بازبینی قرار داد و بررسی او در این قسمت به صورت خلاصه آورده شده است. رشد حفره در یک مرزدانه‌ی تکی درصورتی می‌تواند رخ دهد که جابه‌جایی‌های دانه در واکنش به رشد حفره به وسیله‌ی جریان خزشی در دانه‌ی مجاور تطبیق داده شود. در محدوده‌ی دمایی موجود برای مواد در سیستم‌های هسته‌ای، خزش نابجایی، حالت خزش غالب است و هر دو سازوکار خزش نابجایی حرارتی و القایی تابشی به صورت کامل در فصل ۱۴ تشریح شده‌اند. باوجوداین ، اگر رشد حفره خیلی سریع‌تر از آن باشد که بتوان آن را به وسیله‌ی نرخ خزش تطبیق داد، بار به وسیله‌ی حفره‌ها به محیط اطراف پراکنده می‌شود تا تنش روی حفره‌ها به مقداری کاهش یابد که با سیلان جامد به وسیله‌ی خزش سازگار باشد. اثر خالص کاهش در نرخ رشد حفره است به گونه‌ای که نرخ رشد حفره به وسیله‌ی نرخ خزش کنترل شود. در این مورد [۴۶]، رشد حفره‌ی اجباری مطابق نرخ زیر رخ می‌دهد:

1. Power-Law Creep-Controlled Void Growth
2. Cadek

(۸۴-۱۳)

$$\dot{R} = \frac{1}{2.5}\left(\frac{b}{R}\right)^2 d_f \dot{\varepsilon}\ ,$$

که $\dot{\varepsilon}$ نرخ خزش است و d_f قطر رویه‌ی دانه است. در مقایسه با وابستگی خطی تنش برای رشد نفوذی حفره، رشد اجباری خزشیِ قانون توانی متناسب با σ^n است و از رابطه‌ی قانون توانی خزش: $\dot{\varepsilon} = A\left(\frac{\sigma}{B}\right)^n$ می‌توان نوشت:

$$\dot{R} = \frac{A}{2.5}\left(\frac{b}{R}\right)^2 \left(\frac{\sigma}{B}\right)^n d_f\ , \qquad (۸۵-۱۳)$$

که n اغلب بین ۲ و ۳ است.

تزویج خزش نفوذی و قانون توانی

نفوذ متوسط تا کاملاً خالص یا قانون توانی محدود کننده‌ی رشد حفره، رشد تحریک شده‌ی خزشی قانون توانی و نفوذ را مرتبط می‌کند. در این حالت، رشد نفوذی حفره با خزش قانون توانی زمینه‌ی اطراف تحت تأثیر قرار می‌گیرد به گونه‌ای که فاصله‌ی نفوذ در مرز کاهش یافته و رشد شتاب می‌گیرد. در این منطقه، نرخ رشد حجمی حفره برابر است با:

(۸۶-۱۳)

$$\dot{V} = 2\pi R^3 A\left(\frac{\sigma b^2}{B(b^2 - R^2)}\right)^n\ ,$$

و قانون رشد به صورت زیر نتیجه می‌شود:

(۸۷-۱۳)

$$\dot{R} = \frac{RA}{2}\left(\frac{\sigma b^2}{B(b^2 - R^2)}\right)^n\ .$$

از رابطه‌ی خزش قانون توانی، معادله‌ی ۱۳-۸۷ می‌تواند برحسب نرخ خزشی، $\dot{\varepsilon}$ نوشته شود به گونه‌ای که:

(۱۳-۸۸)

$$\dot{R} = \frac{R}{2}\dot{\varepsilon}\left(\frac{b^2}{b^2 - R^2}\right)^n .$$

معادله‌های ۱۳-۸۷ و ۱۳-۸۸ در تنش‌های بالا اعمال می‌شوند که تغییر شکل خزشی غالب است. در تنش‌های پایین نرخ رشد به وسیله‌ی نفوذ کنترل می‌شود و نرخ رشد حفره با معادله‌های ۱۳-۸۴ و ۱۳-۸۵ تشریح می‌شود.

کرنش پارگی و زمان پارگی

زمان مورد نیاز تا پارگی به وسیله‌ی انتگرال قانون رشد از $R = R_0$، اندازه‌ی اولیه‌ی حفره تا $R = R_f$ که R_f اندازه‌ی حفره در پارگی است، به‌دست می‌آید:

(۱۳-۸۹)

$$t_f = \int_{R_0}^{R_f} \frac{dR}{\dot{R}} .$$

معادله‌ی ۱۳-۸۹ می‌تواند برحسب کسر مساحت حفره‌ها نوشته شود، به صورتی که:

(۱۳-۹۰)

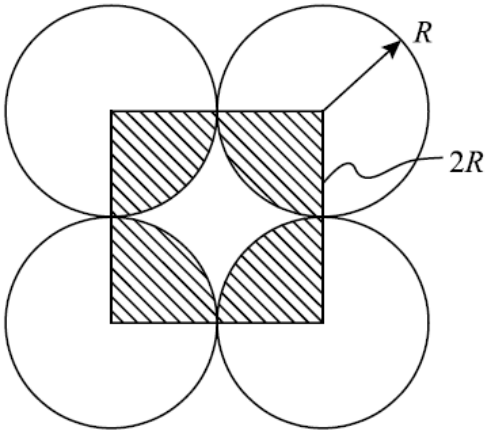
$$t_f = \int_{f_0}^{f_f} \frac{df}{f} ,$$

که $f = R^2/b^2$ کسر مساحت حفره‌ها است. مساحت کسری اشغال شده به وسیله‌ی حفره‌ها در نقطه‌ای که حفره‌ها به یک‌دیگر می‌رسند، در شکل ۱۳-۳۹ نشان داده شده است. هنگامی که حفره‌ها با یک‌دیگر تماس پیدا می‌کنند، فاصله‌ی جدایش برابر با $b = 2R$ می‌شود و کسر مرزدانه که به وسیله حفره‌ها پوشش داده شده به وسیله‌ی ناحیه‌ی خط‌چین شده در شکل ۱۳-۳۹ تعیین می‌شود. مساحت

سطح مقطع حفره‌ها روی مرزدانه‌ها برابر با $4 \times (\pi R^2/4)$ است و مساحت مرزدانه برابر با $b^2 = (2R)^2$ است، در نتیجه نسبت برابر است با $f = \pi R^2/(2R)^2 = \pi/4$. به هر حال، پارگی زمانی رخ می‌دهد که سطح مقطع باقی‌مانده نمی‌تواند افزایش تنش را تحمل کند. معمولاً معیار شکست $f_f = ۰/۲۵$ پذیرفته شده است [۵۱]. کرنش در زمان پارگی به صورت زیر تعیین می‌شود. برای یک حفره با حجم $4/3\pi R^3$ در یک مرزدانه با مساحت $\pi b^2 - \pi R^2$، جابه‌جایی نسبی دانه‌ها برابر با $u = \dfrac{4/3\pi R^3}{\pi b^2}$ است، و کرنش در پارگی برابر با u/d است، که d قطر متوسط دانه است و می‌توان نوشت:

(۹۱-۱۳)

$$\varepsilon_f = 4/3 f_f^{3/2} \frac{b}{d},$$



شکل۱۳-۳۹. نمایش حفره‌های مرزدانه‌ای در زمانی که سطوح حفره‌ها با یک‌دیگر تماس می‌یابند.

و با اعمال معیار شکست $f_f = ۰/۲۵$ نتیجه می‌شود که:

(۹۲-۱۳)

$$\varepsilon_f \cong 0.17 \frac{b}{d}.$$

کوکس[1] و اشبی[2] [۴۷] عبارتی را برای زمان پارگی برای تمام سازوکارهای رشد توضیح داده شده در این قسمت تعیین کردند. برای رشد حفره کاملاً نفوذی، زمان پارگی برابر است با:

(۹۳-۱۳)

$$t_f \cong t_n + \frac{0.17}{\phi_0 A}\left(\frac{B}{\sigma}\right),$$

که

(۹۴-۱۳)

$$\phi_0 = \frac{2D_{gb}\delta_{gb}\Omega}{kTb^3}\frac{B}{A},$$

و t_n زمان جوانه‌زنی حفره است. برای منطقه‌ی خزش قانون توانی یا به علت تزویج نفوذ مرزدانه‌ای و خزش قانون توانی، کرنش پارگی به وسیله‌ی کرنش ناشی از خزش در نمونه به منزله‌ی یک جمع کلی که ناشی از حفره‌ها است تعیین می‌شود[۴۷].

(۹۵-۱۳)

$$\varepsilon_f = t_f\dot{\varepsilon} + 0.17\frac{b}{d},$$

(۹۶-۱۳)

$$t_f = t_n + \frac{1}{n\dot{\varepsilon}}.$$

1. Cocks
2. Ashby

۱۳-۹-۲ لغزش مرزدانه

هم‌چنان که دمای فلز افزایش می‌یابد، شکست تحت تنش‌های اعمال شده از درون دانه‌ای به بین‌دانه‌ای تغییر می‌یابد. شکل ۱۳-۴۰ رابطه‌ی میان استحکام زمینه دانه و مرزدانه را به صورت تابعی از دما و نرخ کرنش نشان می‌دهد. تقاطع بین استحکام دانه‌ها و مرزدانه‌ها به منزله‌ی دمای چسبندگی برابر[1] (ECT) نام‌گذاری می‌شود که به دمایی اشاره دارد که استحکام دانه‌ها و مرزدانه‌ها برابر است. بالای دمای چسبندگی برابر شکست مرزدانه‌ای بسیار محتمل است درحالی‌که در زیر آن شکست درون دانه‌ای مرجح است. در شکل ۱۳-۴۰ نقش نرخ کرنش روی دمای چسبندگی برابر نشان داده شده است. کاهش نرخ کرنش، دمای چسبندگی برابر را به دماهای پایین‌تری سوق می‌دهد که اهمیت زیاد فرایندهای مرزدانه‌ای در تعیین استحکام شکست فلز را بیان می‌کند.

در دماهای منطقه‌ی خزشی، تنش‌ها یا نرخ‌های کرنشی پایین باعث می‌شوند که شکست به وسیله‌ی ترک‌های لبه‌ای پیشرو در شکست در طول سطح دانه کنترل شود که در نتیجه تقاطع و اتصال آن‌ها منجر به شکست نهایی می‌شود. در تنش‌های پایین‌تر، شکست خزشی بین‌دانه‌ای به وسیله‌ی تشکیل، رشد و به هم پیوستگی حفره‌های مرزدانه‌ای، همان‌طوری که در قسمت قبل بحث شد، کنترل می‌شود. منطقه‌ی تنش پایین تا متوسط جایی است که لغزش مرزدانه (GBS) می‌تواند منجر به ترک خوردن و شکست شود. تحت این شرایط، دانه‌ها قادرند در نتیجه‌ی تشکیل حفره‌ها یا ترک‌ها در نقاط سه‌تایی همان‌طوری که در شکل ۱۳-۴۱ نشان داده شده است، در طول مرزدانه‌ها بلغزند. این فرایند شبیه به تشکیل ترک لبه در شکست ترد توضیح داده شده در قسمت ۱۳-۶ است؛ اما در دمای بالا، منبع کرنش برای قرار داشتن در باند لغزشی در زمینه، در مرزدانه است. تشکیل حفره‌ی مرزدانه‌ای، تنش‌های بالای موضعی در نقاط سه‌تایی را آزاد می‌کند. در حقیقت، لغزش مرزدانه مسئول تشکیل و رشد حفره‌ی مرزدانه‌ای است.

لغزش مرزدانه‌ای منشأ در فرایند خزش نابجایی دارد. نابجایی‌های تولید شده در یک دانه مجاور به علت خزش قانون توانی به وسیله‌ی لغزش به داخل یک مرزدانه به یک‌دیگر می‌پیوندند. این نابجایی‌ها می‌توانند به وسیله‌ی ترکیب لغزش و صعود در طول مرزدانه حرکت کنند. لغزش به وسیله‌ی بازشدن حفره‌های مرزدانه انجام می‌شود و نرخ لغزش مرزدانه متناسب با مؤلفه‌ی بردار برگرز موازی با صفحه مرزدانه است و به وسیله‌ی صعود کنترل می‌شود [۵۰]. از آن‌جایی که لغزش مرزدانه به وسیله‌ی لغزش

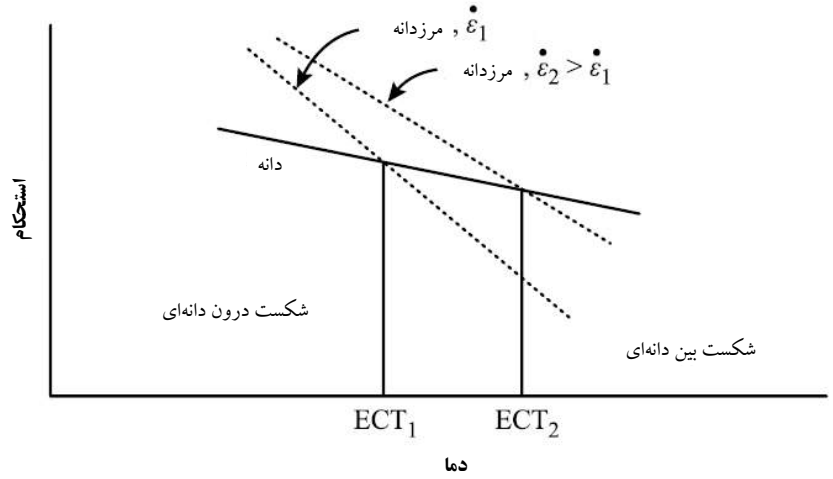
1. Equicohesive Temperature

نابجایی‌های مشابهی ایجاد می‌شود که باعث تغییر شکل دانه شده‌اند ارتباط خطی بین کرنش ناشی از لغزش مرزدانه، ε_{gbs} و کرنش کلی خزش، ε وجود دارد. نرخ کرنش ناشی از لغزش مرزدانه به صورت زیر به وسیله‌ی لانگدون[1] تعیین شده است [۵۲]:

(۹۷-۱۳)

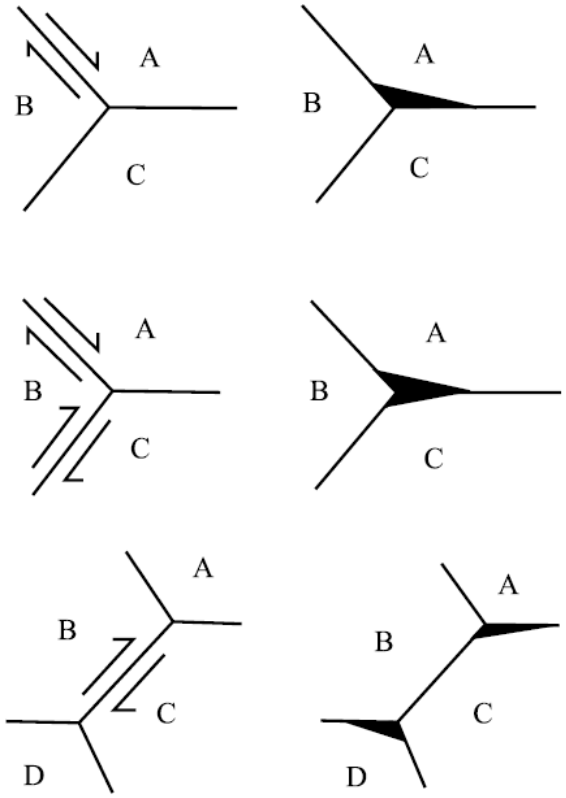
$$\dot{\varepsilon}_{gbs} = AD_{vol}\frac{b^2\sigma^2}{\mu\, d kT}\ ,$$

که D_{vol} ضریب نفوذ حجمی و d میانگین قطر دانه است.

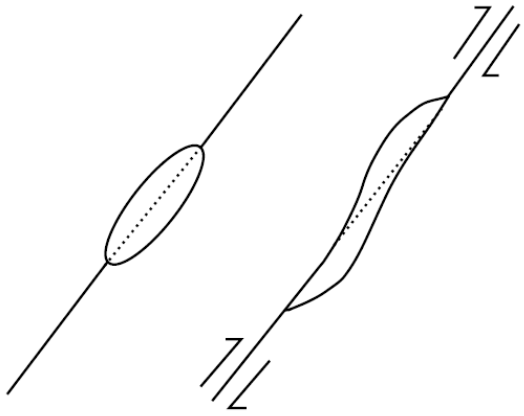


شکل ۱۳-۴۰. دمای چسبندگیِ برابر متمایز کننده‌ی شکست درون دانه‌ای از شکست بین دانه‌ای به صورت تابعی از دما و نقش نرخ کرنشی روی دمای چسبندگی برابر.

1. Langdon



شکل ۱۳-۴۱. ترک‌های بین دانه‌ای ناشی از لغزش مرزدانه.



شکل ۱۳-۴۲. اثر لغزش مرزدانه روی شکل حفره‌های مرزدانه‌ای.

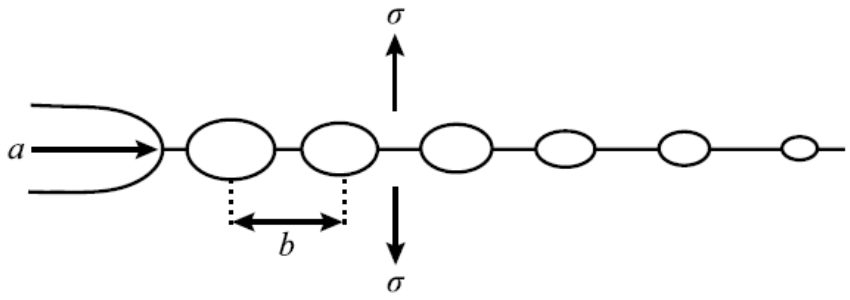
لغزش مرزدانه‌ای می‌تواند منجر به رشد ترک مانند حفره‌ها شود که ناشی از اعوجاج و تیز شدن شکل حفره به گونه‌ای که نفوذ سطحی تحریک شود، است. همان‌طوری که در شکل ۱۳-۴۲ نشان داده شده است، لغزش مرزدانه‌ها حفره‌های سوزنی شکلی را تولید می‌کند که در آن‌ها نفوذ سطحی یک نقش بسیار مهمی را در رشد ایفا می‌کند. بنابراین، نرخ رشد حفره مرتبط با نرخ لغزش مرزدانه‌ها است. اثر خالص لغزش مرزدانه، افزایش انتقال ماده در طول مرزدانه‌ها در اثر افزایش ضریب نفوذ مرزدانه‌ای و شتاب دادن به رشد حفره است.

۱۳-۹-۳ رشد ترک مرزدانه‌ای

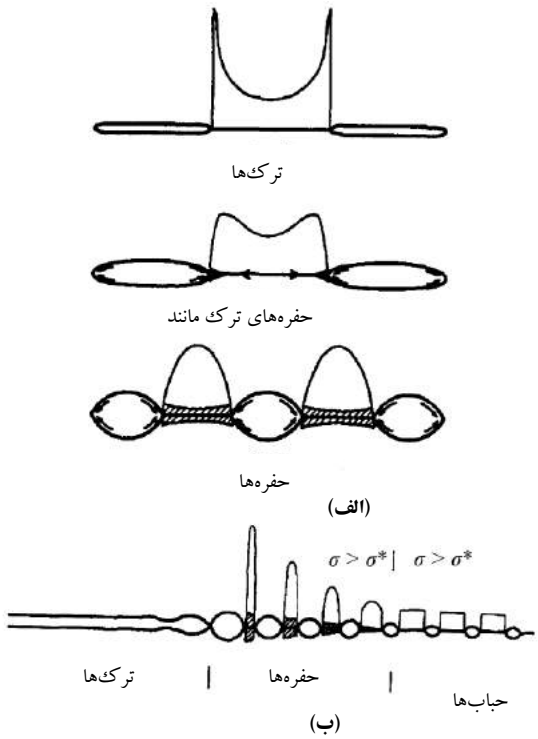
درحالی‌که اتصال حفره‌ها در روی سطوح مرزدانه‌ای منجر به شکست مرزدانه‌ای می‌شود، رشد و به هم پیوستگی حفره به علت توزیع غیریکنواخت آن‌ها در مرزدانه‌ها، در نرخ های بسیار متفاوتی رخ می‌دهد. بنابراین اتصال موضعی و تشکیل یک ترک که به مرزدانه‌های مجاور گسترش می‌یابد، یک سازوکار محتمل برای رشد ترک خستگی بین‌دانه‌ای است. **ترک‌ها هم به وسیله‌ی نفوذ جاهای خالی به سر ترک و هم به وسیله‌ی رسوب اتم‌ها در سطوح مرزدانه‌ای، سیلان پلاستیکی یا افزایش نفوذی سیلان پلاستیکی رشد می‌کنند.** در هر دو این موارد، ترک‌ها به صورت مرحله‌ای به وسیله‌ی جوانه‌زنی و رشد حفره‌هایی که به صورت موفقیت‌آمیزی به ترک متصل شده‌اند، رشد می‌کند. شکل ۱۳-۴۳ گسترش ترک در طول مرزدانه‌ی حفره‌دار را نشان می‌دهد. همان‌طوری که در بخش ۱۳-۳ نشان داده شد، میدان تنشی جلوی سر ترکِ جامد تنش‌دار، به واسطه‌ی حضور ترک تقویت شده و این تنش، رشد حفره‌های نزدیک به سر ترک را افزایش می‌دهد. شکل ۱۳-۴۴ الف توزیع تنش جلوی ترک‌های مرزدانه‌ای، حفره‌ها و حفره‌های ترکی شکل را نشان می‌دهند و شکل ۱۳-۴۴ ب رشد ترک به وسیله‌ی رشد حفره‌ی ناپایدار و به هم پیوستگی جلوی سر ترک را نشان می‌دهد. هنگامی که هلیوم وجود دارد، رشد ترک‌ها و حباب‌ها به وسیله‌ی جذب گاز انجام می‌شود و ذخیره‌ی هلیوم فاکتور مهم و کلیدی در محدود کردن رشد آن‌ها است. تریکاس[1] [۵۳] نشان داد که رشد ترک زیر حد بحرانی به وسیله‌ی به هم پیوستگی حفره‌ها، در فشار هلیوم بالا و دماهای پایین غالب است درحالی‌که رشد حفره‌ی تحریک شده در اثر تنش در دماهای بالا و مقادیر کم هلیوم غالب است و رشد حباب تحریک شده گازی در مقادیر بالاتر هلیوم در جامد اهمیت پیدا می‌کنند (شکل

1. Trinkhaus

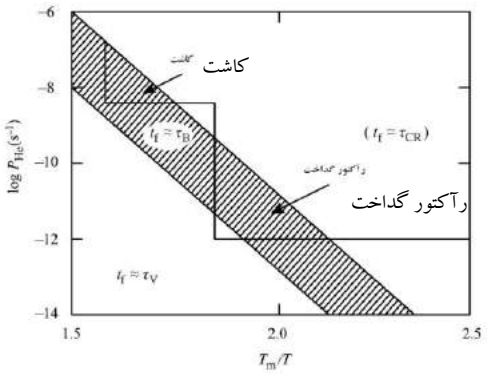
۱۳-۴۵). سازوکارهای تردی و شکست دما بالای بحث شده در بخش‌های قبل، در این قسمت به جامدات پرتودهی شده و پرتودهی نشده اعمال می‌شود. بنابراین مناسب است که سازوکارهایی دوباره تکرار شوند که به وسیله‌ی آن پرتودهی می‌تواند فرایندهای تردی و شکست را شتاب دهد. اول جوانه‌زنی حفره‌ها در جامد تحت تنش، به واسطه‌ی مزیت رشد حفره‌ی القایی تابشی به آسانی رخ می‌دهد. همان‌طوری که قبلاً نشان داده شد، هلیوم تولید شده به وسیله‌ی استحاله‌های هسته‌ای اندازه‌ی حفره‌ی بحرانی برای پایداری را کاهش می‌دهد و در نتیجه رشد حفره‌ها و حباب‌ها را افزایش می‌دهد. هر دو این فرایندها رشد حفره‌های مرزدانه‌ای را شتاب می‌بخشند و در نتیجه زمان فرا رسیدن پارگی را کاهش می‌دهند. در دماهای بالا که استحکام مرزدانه‌ها از زمینه کاهش می‌یابد، سخت گردانی تابشی می‌تواند تفاوت آن‌ها را زیاد کرده و شکست در طول مرزدانه‌ها را مساعد کند. رخداد کاناله شدن نابجایی‌ها منجر به موضعی شدن تغییر شکل و انتقال مؤثر انعطاف‌پذیری به مرزدانه می‌شود که می‌تواند لغزش مرزدانه را تسریع کرده و در تشکیل و رشد حفره‌ی مرزدانه‌ای سهیم شود. در پایان، جذب هلیوم استحاله‌ای در داخل حفره‌های مرزدانه‌ای می‌تواند رشد ترک مرزدانه‌ای را به وسیله‌ی اتصال حفره‌ها یاری کند. در نتیجه در مجموع، درحالی‌که تردی مرزدانه‌ای دما بالا مشخصه‌ی تغییر شکل و شکست در فلزات پرتودهی نشده است، پرتودهی در طول تغییر شکل می‌تواند به صورت قابل توجهی این فرایندها را افزایش داده و زمان لازم برای فرا رسیدن پارگی را کوتاه می‌کند.



شکل ۱۳-۴۳. گسترش یک ترک به وسیله‌ی رشد حفره‌های جلوی سر ترک.



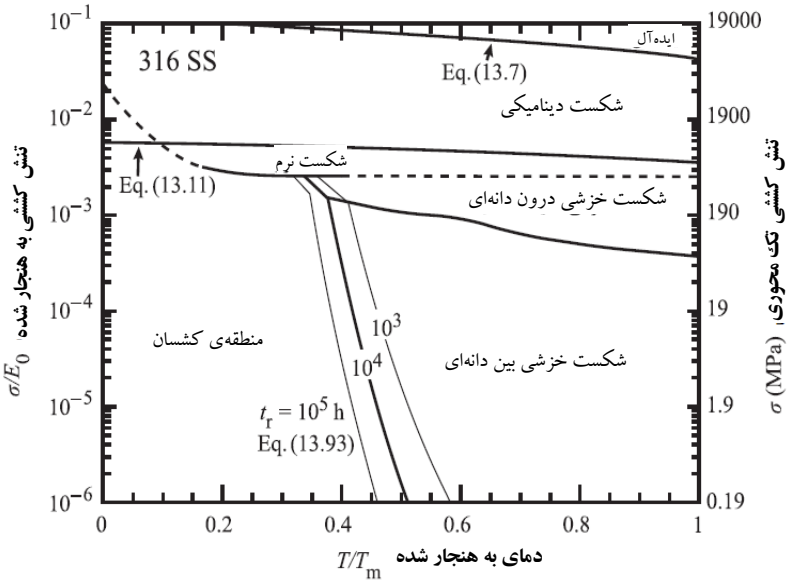
شکل ۱۳-۴۴. نمایش شماتیک از (الف) توزیع تنش میان ترک‌ها، حفره‌ها و حفره‌های ترکی شکل، و (ب) رشد یک ترک به وسیله‌ی رشد ناپایدار حفره و به هم پیوستگی جلوی سر ترک [۵۳].



شکل ۱۳-۴۵. سازوکارهای کنترل کننده‌ی عمر، t_f یک نمونه‌ی تحت تنش، رشد پایدار حبابِ تحریک شده به وسیله‌ی گاز، τ_B، رشد ناپایدار حفرهِ تحریک شده به وسیله‌ی تنش، τ_V و رشد ترکِ زیر حد بحرانی به وسیله‌ی به هم پیوستگی حفره‌ها، τ_{CR} [۵۳].

۱۳-۹-۴ نقشه‌های سازوکار شکست

مشابه با نقشه‌های سازوکار تغییر شکل توضیح داده شده در فصل ۱۲، نقشه‌های نوع اشبی سازوکارهای شکست می‌تواند برای نشان دادن مناطق برای انواع مختلف شکست به صورت تابعی از تنش بهنجار شده و دمای بهینه استفاده شود [۵۴]. در این نقشه‌ها، زمان پارگی برای تعیین مرز میان سازوکارهای مختلف شکست شود. متأسفانه معادله‌های اساسیِ توضیح دهنده‌ی شکست برای سازوکارهای مختلف به خوبی تشریح نشده‌اند. نقشه‌ی شکست برای فولاد زنگ نزن که به وسیله‌ی زینکل[1] [۵۵] تهیه شده است در شکل ۱۳-۴۶ نشان داده شده است. بالاترین خط استحکام شکست ایده‌آل آلیاژها را تشریح می‌کند که به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۳-۱۱ تعیین شده است. مرز میان منطقه‌ی کشسان و منطقه‌ی شکست خزشی بین‌دانه‌ای به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۳-۹۳ تشریح شده است. اثر پرتودهی روی نقشه‌ی سازوکار شکست، تغییرات سراسری در زمان لازم تا پارگیِ مشخص کننده‌ی مرزهای منطقه است. در فلزات fcc، اثر اولیه‌ی پرتودهی، روی منطقه‌ی شکست خزشی بین‌دانه‌ای به علت تردی هلیومی دما بالا است. در فلزات bcc سخت‌گردانی تابشی منطقه‌ی شکست رخی را افزایش خواهد داد.



شکل ۱۳-۴۶. نقشه‌ی سازوکار شکست برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ [۵۵].

1. Zinkle

نام‌گذاری اصطلاحات

a : ثابت شبکه، هم‌چنین طول ترک

B : ضخامت نمونه‌ی کشش تراکمی

b : نصف فاصله‌ی میان حفره‌ها روی مرزدانه

c : نصف طول ترک

C_v : انرژی جذب شده در یک آزمون شارپی شکاف‌دار، همچنین غلظت جای خالی

d : اندازه دانه یا قطر مانع یا فاصله جدایش نابجایی‌های جزیی

d_f : قطر سطوح جانبیِ دانه

D : ضریب نفوذ

e_u : کرنش مهندسی ازدیاد طول یکنواخت

E : ضریب کشسان

E_U : حد بالایی انرژی شارپی

f : تغییر جزیی در حد انرژی بالایی. هم‌چنین کسر مساحت حفره‌ها در مرزدانه‌ها

f_f : معیار شکست برای کسر مساحت مرزدانه‌ها

F : کار انجام شده به وسیله‌ی یک نیروی خارجی

G : نیروی گسترش ترک

G_c : نیروی گسترش ترک مطابق با چقرمگی شکست

J : مقدار انتگرال J، تعریف شده در معادله‌ی ۱۳-۳۷

k : ثابت بولتزمان

K : ضریب شدت تنش

K_c : چقرمگی شکست

K_{Jc} : چقرمگی شکست معادل با J_c

$K_{Jc(med)}$: متوسط چقرمگی شکست

k_s : افزایش القایی تابشی در تنش تسلیم

k_y : ضریب آزادسازی یا سهم سخت‌گردانی منبعی در تنش تسلیم

L : طول سپر نابجایی روی یک صفحه‌ی لغزشی

M : ضریب تیلور

n : تعداد نابجایی‌ها در یک سپر

P : بار

r_p : اندازه‌ی منطقه‌ی پلاستیک

RT_{NDT}: ضریب مرجع انعطاف‌پذیری صفر

R : شعاع حفره

T : زمان

t_f : عمر پارگی خزشی

t_n : زمان جوانه‌زنی حفره

T : دما

T^* : دمایی که در آن منحنی‌های تنش جریان و تنش شکست یک‌دیگر را قطع می‌کنند

T_0 : دمای مرجع برای منحنی اصلی

ΔT_{xy} : انتقال دمای گذار شارپی در یک مقدار C_V از xy

U_E : انرژی کرنش کشسان

U_f : کار برای ایجاد یک سطح به وسیله‌ی شکست

U_S : کاهش در انرژی کرنشی ناشی از تشکیل سطوح ترک

V: حجم، هم‌چنین انرژی پتانسیل سیستم

W: کار، هم‌چنین پهنای نمونه‌ی کشش تراکمی

β : ثابت مرتبط با درجه‌ی سه محوری بودن تنش اعمال شده. هم‌چنین نرخ باز شدن ترک به فضای حفره، معادله‌ی ۱۳-۷۱

ε : کرنش

ε_f : کرنش شکست

$\dot{\varepsilon}$: کرنش خزش

ϕ: شار نوترونی

ϕt: جریان نوترونی

Δ_z : جابه‌جایی آخرین بخش در سر ترک

δ : جابه‌جایی دهانه‌ی ترک، COD

δ_t : جابه‌جایی سر دهانه‌ی ترک، CTOD

γ : انرژی سطحی

γ_e : انرژی سطحی مؤثر

γ_p : عبارت کار پلاستیک

λ: فاصله‌ی طول موج شبکه

μ : ضریب برشی، هم‌چنین پتانسیل شیمیایی

ν: نسبت پواسون

Ω : حجم اتمی

σ : تنش کششی

σ_a : تنش اعمال شده

σ_f : تنش شکست

σ_i : تنش اصطکاکی

σ_0 : تنش سیلان

σ_{th} : استحکام چسبندگی نظریه

σ_y : تنش تسلیم

τ: عمر عیب

زیرنویس‌ها

c : مقدار بحرانی K، G یا J برای آغاز شکست

f : شکست، هم‌چنین پایان

gb : مرزدانه

gbs : لغزش مرزدانه

I، II، III : حالت شکست

R : پارگی

S : سطح

u : یکنواخت، هم‌چنین جابه‌جایی

v : جای خالی

V: حفره

vol : حجم

0 : ابتدا

بالانویس‌ها

n : توان روی تنش در معادله‌ی خزش، هم‌چنین توان روی ΔK در معادله‌ی نرخ رشد ترک در معادله‌ی ۱۳-۶۸

مخفف‌ها

COD : **جابه‌جایی دهانه‌ی ترک**

CRP : رسوبات غنی از مس

DBTT : دمای گذار نرمی به تردی

ECT : دمای چسبندگی برابر

GBS : لغزش مرزدانه

LEFM : مکانیک شکست خطی کشسان

NDT : دمای انعطاف‌پذیری صفر

RPV : مخزن تحت فشار رآکتور

USE : حد انرژی بالایی

مسایل

۱۳–۱ در یک فولاد AISI 4340، γ_e، انرژی سطحی مؤثر در محاسبه‌ی کار انجام شده در گسترش ترک در حدود $۱٫۵ \times ۱۰^{۳}$ Pa m در نظر گرفته می‌شود. با فرض اندازه دانه ASTM 8:

الف) تنش برای گسترش یک ترک با طول برابر با میانگین قطر دانه را محاسبه کنید. $E = ۲۰۰$ GPa.

ب) با استفاده از مقدار محاسبه شده در بخش (الف) طول ترک برای شکست ناپایدار در این فولاد با مقدار مشخص $K_{Ic} = ۵۸$ MPam$^{1/2}$ را محاسبه کند.

۱۳–۲ یک اندازه‌گیری چقرمگی شکست که در -۴۰^{o}C انجام شده است، یک مقدار نیروی گسترش ترک G_{Ic} برابر با ۷٫۰۸ N/m را برای یک فولاد کم کربن با اندازه دانه ۲۳μm و $E = ۲۰۷$ GPa نتیجه می‌دهد. انرژی سطحی مؤثر $\gamma_e = \gamma_s + \gamma_p$ در واحد (Pa m) مرتبط با گسترش ترک را محاسبه کنید.

۱۳–۳ با علم به آنکه استحکام تسلیم یک فولاد مخزن تحت فشار می‌تواند با استفاده از رابطه‌ی هال ـ پچ (معادله‌ی ۱۳–۵۴) تشریح شود، وابستگی دمایی هر کدام از عبارت های زیر را تشریح کنید:

الف) چرا چقرمگی شکست با افزایش دما افزایش می‌یابد درحالی‌که استحکام تسلیم کاهش می‌یابد.

ب) چه‌طور منحنی‌های چقرمگی شکست و استحکام تسلیم رسم شده به صورت تابعی از دما ممکن است در صورت پرتودهی نمونه تغییر کند.

۱۳–۴ یک ورقه‌ی فولادی با پهنای ۳۰۵ mm و ضخامت ۶٫۳۵mm را در نظر بگیرید. این ورقه ترکی به بلندی ۲۵٫۴ mm در طول هر لبه دارد.

الف) نیروی لازم برای گسترش ترک در ۲۵۴mm باقی‌مانده در طول پهنای ورقه را محاسبه کنید.

ب) نیروی لازم برای شکستن ورقه در کشش را در صورتی که هیچ‌گونه ترکی وجود نداشته باشد محاسبه کنید. فرض کنید که استحکام شکست برابر با ($۱۰^{۵}$ psi) ۷×۱۰^{۶} MPa باشد.

ج) نیروی مورد نیاز برای شکست ورقه در کشش در استحکام چسبندگی نظری را محاسبه کنید.

برای فولاد ($۱۴٫۵ \times ۱۰^{۶}$ psi) $E = ۱۰۰$ GPa، $\gamma_s = ۱$ J/m^2، $a = ۳ \times ۱۰^{-۱۰}$ m.

۱۳–۵ یک منحنی انرژی ضربه شارپی را برای یک فولاد کم کربن قبل و بعد از پرتودهی در ۳۰۰ ^{o}C تا ۲×۱۰^{۱۹} n/cm^2 رسم کنید.

الف) رفتار پرتودهی برحسب σ_y و σ_f را تشریح کنید.

ب) فاکتورهایی که دمای نرمی صفر و انرژی حد نرمی را تحت تأثیر قرار می‌دهند را بیان کنید. سازوکار و جهت تغییر را تشریح کنید.

۱۳-۶ حباب‌های هلیومی با شعاع ۱۰۰nm را در نظر بگیرید که روی مرزدانه قرار گرفته‌اند.

الف) برای چه اندازه‌ای از شعاع، حباب‌ها تحت تأثیر یک تنش کششی برابر با نصف مقدار بحرانی برای ناپایداری رشد می‌کنند؟

ب) دو حباب به یک‌دیگر می پیوندند. اندازه‌ی تعادلی حباب جدید چه‌مقدار است؟

۱۳-۷ دیواره‌ی اول رآکتور گداخت ساخته شده از فولاد زنگ نزن آستنیتی در معرض شار نوترون $5 \times 10^{14}\ \text{n/cm}^2$ $(E > 1\ \text{MeV})$ و تنشی برابر با نصف استحکام تسلیم پرتودهی نشده قرار می‌گیرد. بعد از ۳۰۰ روز، این فولاد به وسیله TEM مورد تحلیل قرار می‌گیرد. مشاهده می‌شود که ۳۰٪ مرزدانه-ها به وسیله‌ی حفره‌ها یا حباب‌ها (غیرقابل تشخصی در TEM) با یک میانگین اندازه ۵۰nm پوشیده می‌شوند. با اطلاعات مشخص زیر پیش‌بینی از زمان پارگی و سازوکارهای گسیختگی ارایه دهید:
$\sigma_y = 280\ \text{MPa}$، $d = 20\ \mu\text{m}$، $\gamma_{ss} = 5\ \text{MPa}$، نرخ خزش حالت پایدار $\dot{\varepsilon} = C\sigma\phi$ و $C = 1{,}3 \times 10^{-27}\ \text{cm}^2/\text{MPa}$.

۱۳-۸ در $300\ ^{o}\text{C}$، ۲ درصد حجم یک جامد به وسیله‌ی حباب‌های تعادلی اشغال شده است، تمام این حباب‌ها شعاع R_i دارند. فرض می‌شود که تعداد اتم‌های گازی برای تمام موارد مطرح شده در زیر بدون تغییر باقی بماند. رفتار گاز ایده‌آل فرض می‌شود، بنابراین تعداد اتم‌های گازی در یک حباب تعادلی برابر است با $m = \frac{4\pi R^2}{3}\frac{2\gamma}{kT}$.

الف) اتم‌های ناخالصی به سطح حباب‌ها جدایش می‌یابند که منجر به کاهش ۳۰٪ در انرژی آزاد سطح، γ، می‌شود. مقدار کسر حجمی اشغال شده به وسیله‌ی حباب‌ها بعد از آن‌که تعادل مجدداً برقرار می‌شود چه‌قدر است.

ب) سپس دما به $800\ ^{o}\text{C}$ افزایش می‌یابد، که منجر به نفوذ ناخالصی‌ها به حجم می‌شود، و مقدار γ به مقدار اولیه باز می‌گردد. کسر حجمی اشغال شده به وسیله‌ی حباب‌ها بعد از برقراری تعادل مجدد را محاسبه کنید.

ج) برای شرایط ابتدایی مشابه (۲ درصد در $300\ ^{o}\text{C}$)، حباب‌ها در گروه‌های ۱۰تایی به یک‌دیگر پیوسته و به تعادل می رسند. کسر حجمی نتیجه شده به وسیله‌ی اشغال حباب‌ها چه‌قدر است؟

۱۳-۹ یک میله‌ی سوخت تحت تنش اعمالی ۱۴۰ MPa به واسطه‌ی تردی هلیومی در کرنش ۱٪ تخریب می‌شود. چه غلظتی از هلیوم (در واحد ppm اتمی) در فلز برای ایجاد شکست در این مقدار کرنش لازم است؟ دمای پرتودهی برابر با ۷۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد است.

مراجع

1. Dieter GE (1976) Mechanical Metallurgy, 2nd edn. McGraw-Hill, New York.
2. Griffith AA (1968) Trans Am Soc Met 61:871–906.
3. Inglis CE (1913) Trans Inst Nav Archit 55(1):219–230.
4. Orowan E (1950) In: Fatigue and Fracture of Metals. Wiley, New York.
5. Irwin GR (1958) Encyclopedia of Physics, IV. Springer, Berlin Heidelberg New York.
6. Reed-Hill RE (1973) Physical Metallurgy Principles, 2ndedn. D Van Nostrandm New York.
7. ASTM (2005) E399-05 Standard Test Method for Linear-Elastic Plane-Strain Fracture Toughness KIc of Metallic Materials. ASTM International, West Conshohocken, PA.
8. Reed-Hill RE (1992) Physical Metallurgy Principles, 3rd edn. PWS, Boston.
9. Dugdale DS (1960) J Mech Phys Solids 8:100.
10. Anderson TL (1995) Fracture Mechanics, 2nd edn. CRC, New York, p 142.
11. Cottrell AH (1958) Trans AIME 212:192.
12. Zener C (1948) In: Fracturing of Metals. American Society for Metals, Metals Park, Ohio.
13. Stroh AH (1957) Adv Phys 6:418.
14. Bement AL (1972) Rev Roum Phys 17(4):505.
15. Petch NJ (1957) Fracture. Wiley, New York, p 54.
16. Murty KL (1999) J Nucl Mater 270:115–128.
17. Johnson AA (1962) Phil Mag 7:177.
18. Mager TR, Hazelton WS (1969) Radiation Damage in Reactor Materials, vol I. IAEA, Vienna, p 317.
19. Steele LE (1975) Neutron Irradiation Embrittlement of Reactor Pressure Vessel Steels.IAEA, Vienna.
20. ASTM (2000) E 208-95, Standard Test Method for Conducting Drop-Weight Test to Determine Nil-Ductility Transition Temperature of Ferritic Steels. ASTM International,West Conshohocken, PA.
21. Odette GR, Lambrozo PM,Wullaert RA (1985) In: Garner FA, Perrin JS (eds) Effects of Irradiation on Materials the 12th International Symposium, ASTM STP 870. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, pp 840–850.
22. English CA, Ortner SR, Cage G, ServerWL, Rosinski ST (2001) In: Rosinski ST, Grossbeck. ML, Allen TR, Kumar AS (eds) Effects of Radiation on Materials the 20th International Symposium, ASTM STP

1405. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 2001, pp 151–173.
23. Hausild P, Kyta M, Karlik M, Pesck P (2005) JNM 341:184–188.
24. Odette GR, Lucas GE (1996) J Non Destructive Eval 15:137.
25. Sokolov MA, Nanstad RK, Miller MK (2004) J ASTM Int 1(9):123–137.
26. Lott RG, Rosinski ST, Server WL (2004) J ASTM Int 1(5):300–310.
27. Hahn GT, Rosenfield AR (1966) Acta Metal 14:815.
28. Stoller RE (2004) J ASTM Int 1(4):326–337.
29. Steele LE, Hawthorne JR (1967) ASTM STP-426, Effects of Irradiation on Structural Materials. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, p 534.
30. Steele LE, Davies LM, Ingham T, Brumovsky M (1985) Garner FA, Perrin JS (eds)
Effects of Irradiation on Materials the 12th International Symposium. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1985, pp 863–899.
31. Sokolov MA, Chernobaeva AA, Nanstad RK, Nikolaev YA, Korolev YN (2000) In: Hamilton ML, Kumar AS, Rosinski ST, Grossbeck ML (eds) Effects of Radiation on Materials the 19th International Symposium, ASTM STP 1366. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 2000, pp 415–434.
32. U S Nuclear Regulatory Commission (1998) Regulatory Guide 199, Radiation Embrittlement of Reactor Vessel Materials, Revision 2. US Nuclear Regulatory Commission,Washington, DC, May 1998.
33. Odette GR, Lucas GE (1998) Rad Eff Defects Solid 44:189.
34. Odette GR, Lucas GE (2001) JOM July:18–22.
35. Horsten MG, van Osch EV, Gelles DS, Hamilton ML (2000) In: Hamilton ML, Kumar AS, Rosinski ST, Grossbeck ML (eds) Effects of Radiation on Materials the 19th International Symposium, ASTM STP 1366. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 2000, pp 579–593.
36. Callister WD (1991) Materials Science and Engineering, an Introduction. Wiley, New York.
37. Laird C (1967) Fatigue Crack Propagation, ASTM STP-415. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1967, p 131.
38. James LA (1977) Nucl Safety 18(6):791.
39. Cullen WH, Watson HE, Taylor RE, Loss FJ (1981) J Nucl Mater 96:261.
40. Lucas GE (1993) J Nucl Mater 206:287–305.
41. Odette GR, Lucas GE (1992) J Nucl Mater 191–194:50–57.
42. US Nuclear Regulatory Commission (2003) Fracture Toughness and Crack Growth Rates of Irradiated Austenitic Stainless Steels, NUREG/CR-6826. US Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC, p 21.

43. Odette GR, Lucas GE (1991) J Nucl Mater 179–181:572.
44. Wolfer WG, Jones RH (1981) J Nucl Mater 103/104:1305–1314.
45. Lloyd G (1982) J Nucl Mater 110:20–27.
46. Murty KL, Holland FR (1982) Nucl Technol 58:530–537.
47. Bloom EE (1976) Irradiation strengthening and embrittlement. In: Radiation Damage in Metals. American Society for Metals, Metals Park, OH, pp 295–329.
48. Hull D, Rimmer DE (1959) Phil Mag 4:673.
49. Nix WD, Yu KS, Wang JS (1983) Metal Trans 14A:563.
50. Cadek J (1988) Creep in Metallic Materials, Materials Science Monographs 48. Elsevier, New York.
51. Cocks ACF, Ashby MF (1982) Prog Int Mat Sci 27:189–244.
52. Langdon TG, Vastava RB (1982) In: Rhode RW, Swearengen JC (eds) Mechanical Testing for DeformationModel Development, ASTMSTP 765. American Society for Testing and Materials, Philadelphia, PA, 1982, p 435.
53. Trinkaus H, Ullmaier H (1994) J Nucl Mater 212–215:303–309.
54. Teirlinck D, Zok F, Embury JD, Ashby MF (1988) Acta Metal 36:1213–1228.
55. Li M, Zinkle SJ (2007) J Nucl Mater 361(2–3) 192–205.

۱۴

خزش تابشی و رشد

خزش، تغییر شکل وابسته به زمان فلز تحت بار ثابت و در دمای بالا ($T/T_m > ۰/۳$) است. واکنش فلز در برابر ازدیاد طول با کرنش تعریف شده در معنای کرنش اسمی، ε، با توجه به طول اولیه‌ی نمونه محاسبه می‌شود:

(۱-۱۴)

$$\varepsilon = \int_{l_0}^{l} \frac{\mathrm{d}l}{l_0} = \frac{l - l_0}{l_0} ,$$

یا کرنش واقعی، ε_T، از طول لحظه‌ای نمونه به صورت زیر محاسبه می‌شود:

(۲-۱۴)

$$\varepsilon_T = \int_{l_0}^{l} \frac{\mathrm{d}l}{l} = \ln \frac{l}{l_0} = \ln(1 + \varepsilon) .$$

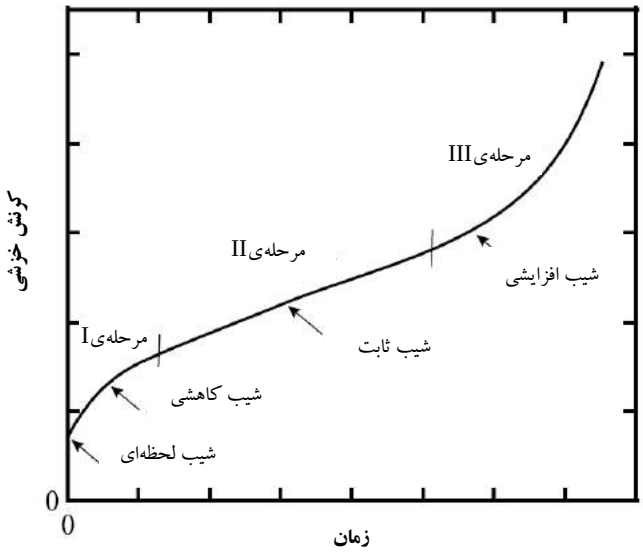
کرنش اسمی یا مهندسیِ مرتبط با تنش اسمی یا مهندسی مطابق با سطح مقطع اولیه نمونه است درحالی‌که کرنش واقعی مرتبط با تنش واقعی مطابق با سطح مقطع لحظه‌ای است. مؤلفه‌های کرنشی کشسان، غیرکشسان و پلاستیک هستند. کرنش کشسان لحظه‌ای، مستقل از زمان است و بعد از آزادسازی تنش برگشت‌پذیر است. کرنش کشسان برگشت‌پذیر است؛ اما وابسته به نرخ کرنش است. کرنش پلاستیک وابسته به زمان و غیربرگشت‌پذیر است و به صورت یک تغییر حجم ثابت در شکل یا اعوجاج نمونه تشریح می‌شود. خزش به مؤلفه‌ی وابسته به زمان کرنش پلاستیک اشاره دارد.

در کل، خزش یک فرایند به شدت وابسته به دما است که تشکیل حرارتی جاهای خالی و حرکت جاهای خالی از طریق نفوذ حجمی یا مرزدانه‌ای یا صعود نابجایی‌ها روی موانع و لغزش در طول صفحات لغزشی را نیاز دارد. احتمال تشکیل جای خالی و احتمال حرکت جای خالی یا نابجایی متناسب با $\exp(-Q/kT)$ است که Q انرژی فعال‌سازی برای فرایندهای محدوده شده‌ی سرعتی است. افزایش دما، انرژی حرارتی مورد نیاز برای غلبه بر موانع و سدهای مقابل حرکت نابجایی‌ها را فراهم می‌کند. خزش وابسته به تنش نیز است و ماهیت وابستگی تنشی اطلاعات در مورد سازوکاری را فراهم می‌کند که خزش به وسیله‌ی آن رخ می‌دهد. به علت تولید عیوب اضافی، پرتودهی می‌تواند خزش را تسریع کند.

خزش تابشی به شدت وابسته به دما نیست زیرا تشکیل جاهای خالی و خود بین‌نشین‌ها از تشکیل به وسیله‌ی فرایندهای حرارتی، بیش‌تر به وسیله‌ی جابه‌جایی‌های اتمی پر انرژی فراهم می‌شوند. خزش در کاربردهای رآکتوری در نواحی دما متوسط، شار نوترون/یون بالا و تنش پایین بسیار حایز اهمیت است. به هرجهت قبل از استنباط و فهم نقش پرتودهی در خزش، لازم است که سازوکارهای اصلی خزش حرارتی بررسی شوند.

۱۴-۱ خزش حرارتی

در بسیاری از آلیاژها، خزش حرارتی از طریق یک‌سری از مراحلی حاصل می‌شود که در شکل ۱۴-۱ نشان داده شده است. در مرحله‌ی I، فلز سخت‌گردانی کرنشی را متحمل می‌شود که منجر به کاهش در نرخ کرنشی با زمان می‌شود. مرحله‌ی II در زمان‌های طولانی‌تر، به علت تغییر شکل موضعیِ ناشی از افزایش در نرخ کرنش، گلویی شدن رخ می‌دهد.

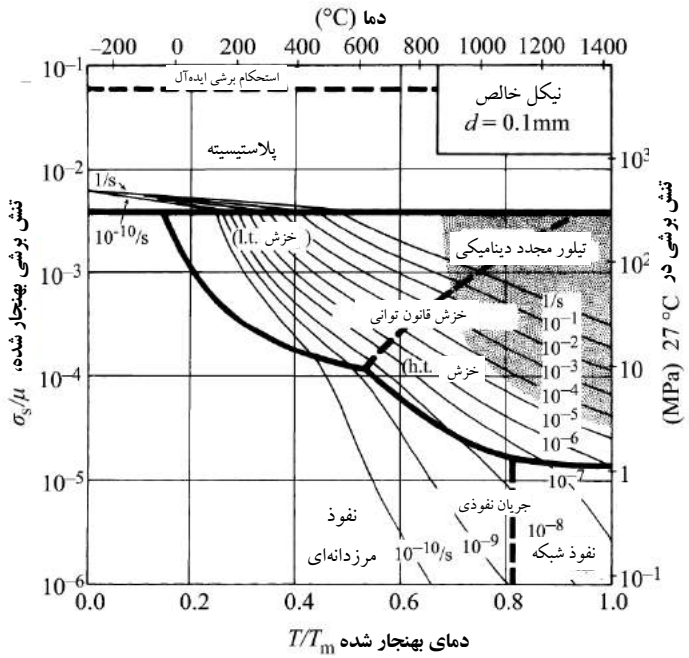


شکل ۱۴-۱. منحنی خزش یک فلز که نشان دهنده‌ی سه مرحله‌ی خزش است.

بین این دو مرحله، مرحله‌ی II وجود دارد که در طول آن نرخ خزش ثابت یا مقدار بسیار اندکی است. در این منطقه، سخت‌گردانی کرنشی به وسیله‌ی بازیابی متعادل می‌شود در نتیجه نرخ خزش نسبتاً ثابت باقی می‌ماند. خزش در این منطقه در حکم خزش حالت پایدار یا خزش ثانویه در نظر گرفته می‌شود. این منطقه هم‌چنین اهمیت صنعتی بسیار زیادی دارد زیرا اکثر عمر کاری قطعه در این منطقه سپری می‌شود. متغیرهای نشان دهنده‌ی تغییر شکل پلاستیک تنش برشی (σ_s)، دما (T)، نرخ کرنش($\dot{\varepsilon}$)، کرنش (ε) یا زمان (t) هستند. متغیرهای مستقل کلیدیِ پوشش دهنده‌ی خزش در فلزات در کاربردهای عملی دما و تنش هستند و سازوکارهای تغییر شکل می‌توانند با توجه به این متغیرها تشریح شوند. هم‌چنان که در فصل ۱۲، بخش ۱۲-۳ بحث شد، نقشه سازوکار تغییر شکل نوع اشبی می‌تواند برای تشریح فرایندهای تغییر شکل مختلف به صورت تابعی از تنش و دمای بهنجار شده استفاده شوند. در فصل ۱۲ روی نواحی توصیف شده به وسیله‌ی فروپاشی پلاستیکی و لغزش نابجایی تمرکز شد. در این فصل روی مناطقی که انعطاف‌پذیری وابسته به سرعت یا خزش را نشان می دهند تمرکز خواهد شد.

شکل ۱۴-۲ نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل برای نیکل خالص را نشان می‌دهد. در آغاز معادلاتی برای نرخ کرنش گسترش داده می‌شوند. نرخ کرنش در منطقه‌ی لغزش نابجایی‌ها به وسیله‌ی معادله‌ی

اوراوان تعیین می‌شود که یک رابطه‌ای بین نرخ کرنش و سرعت نابجایی است که به صورت زیر تعیین می‌شود. هنگامی که یک نابجایی به صورت کامل در طول یک صفحه‌ی لغزشی حرکت می‌کند، نیمه‌ی بالایی بلور از نیمه‌ی پایینی به اندازه‌ی یک بردار برگرز، b برش داده می‌شود (شکل ۱۴-۳ الف،ب). اگر نابجایی تا اندازه‌ای روی بلور حرکت کند، یا یک فاصله Δx، سپس سطح بالایی به اندازه مقدار $b\Delta x/x$ نسبت به صفحه‌ی پایینی تغییر مکان می‌دهد (شکل ۱۴-۳ ج). در نتیجه جابه‌جایی نیمه‌ی بالایی بلور از نیمه‌ی پایینی وابسته به کسری از طول بلور که لغزیده شده، است. اگر مساحت صفحه‌ی لغزش برابر با A باشد، سپس $b\Delta A/A$ عبارت معادل با مقدار $b\Delta x/x$ است. کرنش برشی، ε_s برابر با جابه‌جایی تقسیم بر ارتفاع بلور، Z است و می‌توان نوشت:



شکل ۱۴-۲. نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل برای نیکل خالص که در آن نرخ‌های کرنشی و سازوکارهای تغییر شکل به صورت تابعی از تنش برشی و دمای بهنجار شده تعیین شده‌اند [۱۱].

(۳-۱۴)

$$\varepsilon_s = \frac{b\Delta A}{A}\frac{1}{z}.$$

که عبارت ZA برابر با حجم بلور، V است. برای n نابجایی به طول l که یک میانگین فاصله $\overline{\Delta x}$ را روی صفحه‌ی لغزشی حرکت کرده‌اند، مساحت پیموده شده به وسیله‌ی نابجایی، ΔA، می‌تواند به صورت $nl\,\overline{\Delta x}$ نوشته شود، در نتیجه:

(۴-۱۴)

$$\varepsilon_s = \frac{nbl\overline{\Delta x}}{V} .$$

عبارت nl/V برابر با دانسیته‌ی نابجایی متحرک، ρ_m است و اگر نابجایی‌ها در بازه‌ی زمانی Δt فاصله‌ای را طی کنند، معادله‌ی ۱۴-۴ می‌تواند به صورت یک نرخ کرنشی نوشته شود:

(۵-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_s = \rho_m b v_d ,$$

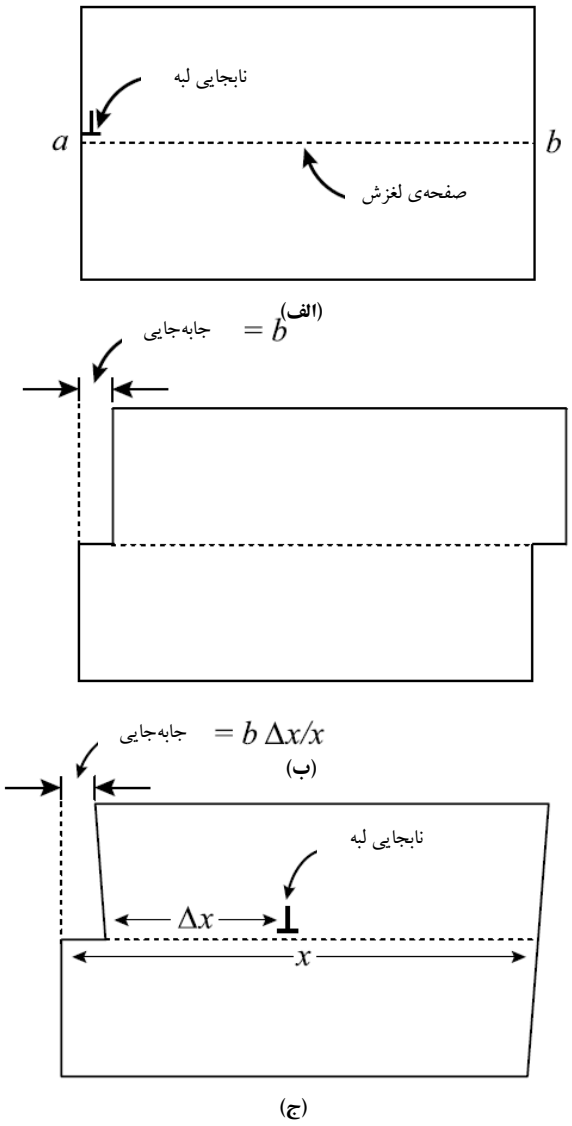
که $\dot{\varepsilon}_s$ نرخ تنش برشی است و v_d میانگین سرعت نابجایی است. معادله‌ی ۱۴-۵ می‌تواند برحسب نرخ کرنش کششی، $\dot{\varepsilon}$ نوشته شود به گونه‌ای که:

(۶-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = 1/2\rho_m b v_d ,$$

که ۱٫۲ یک ضریب تقریبی آرایش اسمیت[1] است.

1. Approximate schmid orientation factor



شکل ۱۴-۳. جابه‌جایی نیمه‌های یک بلور به علت عبور یک نابجایی در طول صفحه‌ی لغزش آن.

در حالت پایدار، ρ_m فقط تابعی از تنش و کرنش است. همان‌طوری‌که در معادله‌ی ۷-۳۲ ب مشخص شد، تنش برشی $\sigma_s = \mu b/R$ است که μ ضریب برشی و R نصف فاصله تا نابجایی بعدی است. از آن‌جایی که R متناسب با $\rho^{-1/2}$ است، سپس معادله‌ی ۷-۳۶ ب به صورت زیر در می‌آید:

(۷-۱۴)

$$\rho_m = \alpha \left(\frac{\sigma_s}{\mu b} \right)^2 ,$$

که α ثابتی در حدود واحد است. شکل معادله‌ی ۷-۱۴ وابسته به فرایند محدود کننده‌ی انعطاف‌پذیری در دمای پایین، موانع مجزا، مقاومت شبکه یا کشش فونون/الکترون است [۱].
انعطاف‌پذیری دمای بالا به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر تشریح می‌شود:

(۸-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = c \left(\frac{\sigma_s}{\mu} \right)^n ,$$

که n بین ۳ و ۱۰ تغییر می‌کند و خزش قانون توانی نامیده می‌شود. خزش قانون توانی می‌تواند به وسیله‌ی لغزش، لغزش فعال شده در اثر صعود، یا خزش هارپر ـ دورن[1] رخ می‌دهد که هر کدام از این فرایندها با یک وابستگی متفاوت به تنش تشریح می‌شوند. در تنش‌های بسیار بالا (بالای $\mu 10^{-3}$)، نرخ کرنش بیش‌تر از چیزی است که به وسیله‌ی خزش قانون توانی پیش‌بینی می‌شود و این منطقه‌ی تخریب قانون توانی نامیده می‌شود که نرخ خزش به شکل زیر تعیین می‌شود:

(۹-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = B \exp(A\sigma_s) \exp\left(\frac{-Q}{kT} \right) ,$$

که انرژی فعال‌سازی Q اغلب بیش‌تر از مقادیر خود نفوذی است.

1. Harper–Dorn creep

در دماهای بالا (پایین‌ترین بخش سمت راست نقشه در شکل ۱۴-۲)، سیلان نفوذی می‌تواند خزش را تحریک کند. برای خزش کنترل شده به وسیله‌ی نفوذ شبکه، نرخ خزش به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۱۴-۱۰)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{A\sigma_s \Omega D_{vol}}{kTd^2} ,$$

که D_{vol} ضریب نفوذ حجمی است و d اندازه دانه است. هنگامی که نفوذ مرزدانه‌ای غالب است، نرخ خزش به صورت d^{-3} تغییر می‌کند:

(۱۴-۱۱)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{A\pi\delta_{gb}\sigma_s \Omega D_{gb}}{kTd^3} ,$$

و D_{gb} نفوذپذیری مرزدانه‌ای و δ_{gb} ضخامت مؤثر مرزدانه است. معادله‌های ۱۴-۱۰ و ۱۴-۱۱ می‌توانند برای تشریح خزش به صورت زیر با یک‌دیگر ترکیب شوند:

(۱۴-۱۲)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{A\sigma_s \Omega D_{eff}}{kTd^2} ,$$

که ضریب نفوذ مؤثر، D_{eff} به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۱۴-۱۳)

$$D_{eff} = D_{vol}\left[1 + \frac{\pi\delta gb}{d}\frac{D_{gb}}{D_{vol}}\right] .$$

یک بحث کامل‌تر از خزش نفوذی در قسمت ۱۴-۱-۲ ارایه خواهد شد. در ادامه ابتدا روی خزش نابجایی به منزله‌ی سازوکار اولیه مرتبط با خزش تابشی تمرکز خواهد شد.

۱۴-۱-۱ خزش نابجایی

صعود و لغزش

در مدل صعود و لغزش، خزش به وسیله‌ی زمان مورد نیاز برای صعود یک نابجایی، که با مانعی مانند حفره یا حلقه‌ی قفل شده، به یک صفحه‌ی لغزشی کنترل می‌شود که در آن صفحه با مانعی تقاطع نکند. صعود منجر به لغزش آزاد نابجایی می‌شود. موانع قفل کننده‌ی لغزش یک نابجایی روی صفحه‌ی لغزشیش باعث می‌شوند که نابجایی‌های اضافیِ تولید شده به وسیله‌ی یک منبع مجاور در پشت مانع سپرگذاری شوند، همان‌طوری‌که در شکل ۱۴-۴ نشان داده شده است. میدان‌های تنشی نابجایی‌ها تداخل کرده و یک تنش افزایشی را روی نابجایی در جلوی سپر ایجاد می‌کنند. کرنش نتیجه شده برای یک جامد با دانسیته‌ی نابجایی متحرک، ρ_{m}، که هر نابجایی با یک تنش σ به حرکت در آمده و فاصله‌ی متوسط l را می‌لغزد برابر است با:

(۱۴-۱۴)

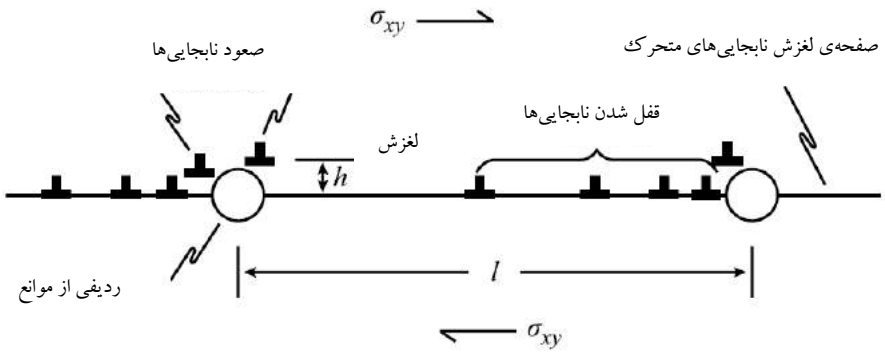
$$\varepsilon = \rho_{\mathrm{m}} b l \ .$$

نرخ کرنش نیز برابر است با:

(۱۴-۱۵)

$$\dot{\varepsilon} = b\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\rho_{\mathrm{m}} l) = b\rho_{\mathrm{m}}\frac{\mathrm{d}l}{\mathrm{d}t} + bl\frac{\mathrm{d}\rho_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t} \ ,$$

که $\overline{\upsilon} = \dfrac{\mathrm{d}l}{\mathrm{d}t}$ سرعت متوسط لغزش و $\dfrac{\mathrm{d}\rho_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t}$ نرخ تولید نابجایی‌ها است. فرض می‌شود که $\rho_{\mathrm{m}}\overline{\upsilon} \gg l\dfrac{\mathrm{d}\rho_{\mathrm{m}}}{\mathrm{d}t}$ است، در نتیجه خزش با سرعت نابجایی‌ها و نه با تولید نابجایی کنترل می‌شود، سپس نرخ خزش مشابه با مقدار مشخص شده در معادله‌ی ۱۴-۵، $\dot{\varepsilon} = \rho_{\mathrm{m}} b\,\overline{\upsilon}$ است. به هرجهت، اگر نابجایی متحرک با موانعی در طول مسیرش برخورد کند، که اغلب آن‌ها را مغلوب می‌کند، باید سرعت در زمانی که نابجایی به وسیله‌ی مانع نگاه داشته شده و نه فقط برای حرکت آن روی صفحه‌ی لغزشی محاسبه شود. سرعت مؤثر می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:



شکل ۱۴-۴. شمایی از سپرگذاری نابجایی‌ها پشت یک مانع روی صفحه‌ی لغزشی نابجایی‌ها.

(۱۶-۱۴)

$$\bar{v} = \frac{l}{t} = \frac{l}{t_c + t_g},$$

که t_g زمان سپری شده در لغزش و t_c زمان سپری شده به وسیله‌ی سپرگذاری است و l فاصله‌ی بین موانع است. همان‌طوری‌که در بخش بعد نیز بحث خواهد شد، نابجایی‌ها به وسیله‌ی صعود به یک صفحه‌ی لغزشی بر موانع غلبه می‌کنند. زمان مورد نیاز برای صعود بیش‌تر از لغزش است، در نتیجه معادله‌ی ۱۴-۱۶ به صورت زیر اصلاح می‌شود:

(۱۷-۱۴)

$$\bar{v} \approx \frac{l}{t_c}.$$

برای یک نابجایی با بلندی h ، زمانی را که نابجایی صرف صعود به صفحه‌ی لغزشی و کنار گذاشتن مانع می‌کند، به صورت زیر نوشته شود:

(۱۸-۱۴)

$$t_c = \frac{h}{v_c},$$

که υ_c سرعت صعود است. با جایگذاری معادله‌های ۱۴-۱۷ و ۱۴-۱۸ در معادله‌ی ۱۴-۶ می‌توان نوشت:

(۱۴-۱۹)

$$\dot{\varepsilon} = \rho_m b l \frac{\upsilon_c}{h} .$$

معادله‌ی ۱۴-۱۹ نشان می‌دهد که تعیین نرخ خزشی در گرو تعیین بلندی مانع و سرعت صعود نابجایی است. ارتفاع مانع در بخش بعد تعیین می‌شود.

بلندی مانع

اغلب نابجایی‌ها، مانعی در برابر حرکت دیگر نابجایی‌ها هستند. معادله‌ی ۷-۵۱ نیروی وارد بر یک نابجایی لبه‌ای ناشی از یک نابجایی لبه‌ای ساکن را تشریح می‌کند. این نیرو دو مؤلفه یکی در جهت x (در طول صفحه‌ی لغزشی) و دیگری در جهت y (عمود بر صفحه‌ی لغزش) دارد. از معادله‌ی ۷-۵۱ این نیروها برابر هستند با:

(۱۴-۲۰ الف)

$$F_x = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)r}(\cos\theta\cos 2\theta)$$

(۱۴-۲۰ ب)

$$F_y = -\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)r}\sin\theta(2+\cos 2\theta) ,$$

با جایگذاری r با استفاده از $y = \cos\theta$، داریم:

(۱۴-۲۱ الف)

$$F_x = \frac{G}{y}\sin\theta\cos\theta\cos 2\theta = \frac{G}{y}g_x(\theta)$$

(۱۴-۲۱ ب)

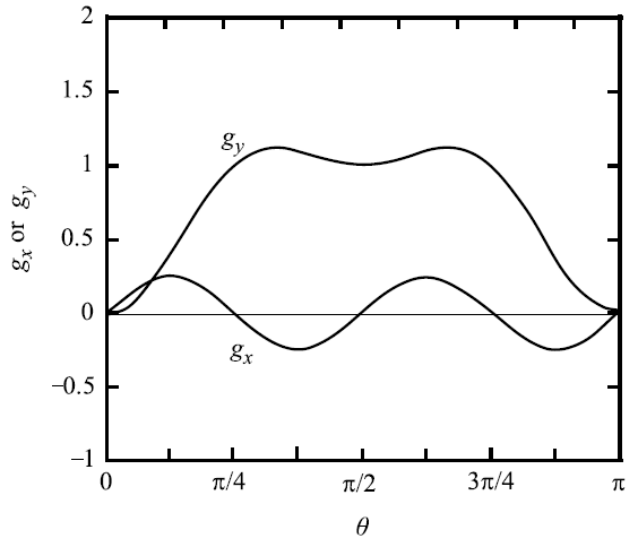
$$F_y = -\frac{G}{y}\sin^2\theta(2+\cos 2\theta) = -\frac{G}{y}g_y(\theta)\ .$$

که $G = \frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)}$ و $g_{x,y}(\theta)$ توابعی از θ در معادله‌ی ۱۴-۲۱ هستند. نیروی وارد بر نابجایی متحرک ناشی از تنش برشی اعمال شده برابر با $F = \sigma_{xy}b$ است. این نیرو به وسیله‌ی نیروی ناشی از دافعه‌ی نابجایی ساکن، معادله‌ی ۱۴-۲۱ الف متعادل می‌شود و می‌توان نوشت:

(۱۴-۲۲)

$$\sigma_{xy}b = F_x = \frac{G}{y}g_x(\theta)\ .$$

نابجایی قفل شده در معرض نیروی صعودی فراهم شده به وسیله‌ی F_y معادله‌ی ۱۴-۲۱ب نیز قرار دارد. تحت این نیرو، نابجایی در جهت عمود بر صفحه‌ی لغزشیش صعود خواهد کرد تا به نقطه‌ای برسد که صفحه‌ی لغزشی هیچ مانع دیگری را قطع نکند. در طول صعود، زاویه بین دو نابجایی از مقادیر نزدیک به $\theta = 0$ شروع به افزایش می‌کند. با بررسی تغییر نیرو بین دو نابجایی به صورت تابعی از زاویه و فاصله‌ی جدایش r، که در شکل ۷-۳۳ نشان داده شده است، وابستگی زاویه‌ای نیروها در شکل ۱۴-۵ در سراسر یک محدوده‌ی $0 \leq \theta \leq \pi$ برای فاصله‌ی جدایش معین شده به وسیله‌ی y مجدداً رسم می‌شود که وابستگی زاویه‌ای به وسیله‌ی $g_{x,y}(\theta)$ در معادله‌ی ۱۴-۲۱ و $y = r\sin\theta$ مشخص شده است. لازم به ذکر است که نیروهای مهار کننده بین دو نابجایی در آغاز با θ افزایش می‌یابد. زمانی که زاویه به $\pi/8$ می‌رسد نیروهای مهار کننده در مقدار بیشینه هستند. اگر نیروی ناشی از تنش اعمال شده با نیروی مهار کننده در تعادل باقی بماند، سپس برای مقادیر θ بالای $\pi/8$ تنش اعمال شده بیش‌تر از نیروی مهار کننده است و نابجایی برای حرکت روی موانع آزاد خواهد بود. با برابر قرار دادن $g_x(\theta)$ با مقدار بیشینه در معادله‌ی ۱۴-۲۲ و انتخاب مقدار y در این نقطه در جایگاه ارتفاع مانع، h که نابجایی برای آن‌که قادر باشد به لغزشش ادامه دهد باید بر آن غلبه کند، می‌توان نوشت:



شکل ۱۴-۵. رسم مؤلفه‌های زاویه‌ای، $g_x(\theta)$ و $g_y(\theta)$ نیرو روی یک نابجایی لبه‌ای ناشی از یک نابجایی لبه‌ای ساکن که y فاصله‌ی جدایش عمودی بین دو نابجایی است.

(۱۴-۲۳)

$$h = y = \frac{G}{4\sigma_{xy} b}$$
$$= \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)\sigma_{xy}} \sim \frac{\mu b}{16\sigma_{xy}} \quad \text{for} \quad \nu \sim 1/3 .$$

هنگامی که n نابجایی در صفحه‌ی لغزشی در برابر مانع وجود دارند، تنش موجود در معادله‌ی ۱۴-۲۳ در n ضرب می‌شود.

سرعت صعود

یک نابجایی لبه‌ای با بردار برگرز b که در معرض یک تنش σ عمود بر صفحه‌ی اضافی اتم‌ها قرار دارد، در جهت عمود بر صفحه‌ی لغزشی صعود می‌کند. صعود به وسیله‌ی جذب یا نشر جاهای خالی در هسته نابجایی رخ می‌دهد. فرض می‌شود که این فرایند در طول تمام امتداد خط نابجایی رخ دهد.

هنگامی که جامد تحت تنش اعمالی σ (کششی مثبت است) است، غلظت جاهای خالی در تعادل با نابجایی به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۲۴-۱۴)

$$C(R) = C_{\mathrm{v}}^{0} \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) ,$$

که Ω حجم اتمی C_v^0 و غلظت تعادلی جاهای خالی در فاصله‌ی R در جامد است که R فاصله‌ی بین نابجایی‌ها در جامد است که به صورت $R = 1/\sqrt{\pi\rho_d}$ مشخص می‌شود که ρ_{d} دانسیته‌ی نابجایی است به گونه‌ای که $\pi R^2\rho_{\mathrm{d}} = 1$ است (مساحت هر نابجایی× نابجایی‌ها در واحد سطح = ۱). فاصله‌ی R هم‌چنین سلول واحدی را تعریف می‌کند که به صورت میانگین مجموعه‌ی نابجایی‌های ρ_{d} را در جامد تکثیر می‌کند.

شار جاهای خالی به نابجایی‌ها که به وسیله‌ی تفاوت در غلظت جاهای خالی بین هسته‌ی نابجایی و شعاع استوانه‌ی سلول واحد، که به وسیله‌ی R تعریف شده، تحریک شده برابر است با:

(۲۵-۱۴)

$$J = 2\pi r D_{\mathrm{v}} \frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{v}}}{\mathrm{d}r} ,$$

که C_{v} غلظت جاهای خالی در ناحیه $r_{\mathrm{c}} < r < R$ (r_{c} شعاع هسته‌ی نابجایی است) است و با معادله‌ی نفوذ در مختصات استوانه‌ای تشریح می‌شود:

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{v}}}{\mathrm{d}r}\right) = 0 , \qquad (۲۶-۱۴)$$

با شرایط مرزیِ:

$$C_{\mathrm{v}}(R) = C_{\mathrm{v}}^{0} \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) \qquad (۲۷-۱۴)$$

$$C_{\mathrm{v}}(r_{\mathrm{c}}) = C_{\mathrm{v}}^{0} .$$

حل معادله‌ی ۱۴–۲۶ با توجه به شرایط مرزی موجود در معادله‌ی ۱۴–۲۷ برابر است با:

$$C_v = C_v^0 - C_v^0 \left[1 - \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right)\right] \frac{\ln R/r}{\ln R/r_c} . \quad (۱۴–۲۸)$$

برای $\frac{\sigma\Omega}{kT}$ کوچک، می‌توان توان را به صورت $e^x \sim x+1$ تقریب زد و معادله‌ی ۱۴–۲۸ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$C_v = C_v^0 \left(1 + \frac{\sigma\Omega}{kT}\right) \frac{\ln R/r}{\ln R/r_c} . \quad (۱۴–۲۹)$$

با ارزیابی شیب سطح مقطع غلظتی در $r = r_c$ می‌توان نوشت:

$$\frac{dC_v}{dr} = C_v^0 \frac{\sigma\Omega}{kT} \frac{1}{\ln R/r_c} \frac{1}{r_c} , \quad (۱۴–۳۰)$$

و شار، معادله‌ی ۱۴–۲۵ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$J_v = \frac{2\pi D_v C_v^0 \sigma\Omega}{kT \ln R/r_c} . \quad (۱۴–۳۱)$$

جریان جاهای خالی به نابجایی‌ها در واحد طول برابر است با $J\Omega$، یا Jb^3 است که $\Omega \sim b^3$ خواهد بود.

$$v_c = \frac{2\pi D_v C_v^0 \sigma\Omega b^2}{kT \ln R/r_c} = \frac{2\pi D_{vol} \sigma b^2}{kT \ln R/r_c} , \quad (۱۴–۳۲)$$

برای $D_v C_v^0 \Omega = D_{vol}$ است.

اکنون تمام عوامل مورد نیاز برای تعیین نرخ خزش ناشی از صعود و لغزش نابجایی‌ها روی موانع وجود دارد. یادآوری می‌شود که نرخ خزش تعیین شده به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۴-۱۹ برابر با $\dot{\varepsilon} = \rho_m b l \frac{\upsilon_c}{h}$ است. برای موردی که نابجایی‌ها به وسیله‌ی منابع فرانک ـ رید ایجاد شده‌اند، نرخ خزش به صورت حاصل‌ضرب دانسیته‌ی منبع فرانک ـ رید، ρ_{FR}، در مساحت پیموده شده به وسیله‌ی منبع در بردار برگرز، Ab، و عکس زمان انتظار، $\frac{\upsilon_c}{h}$ به‌دست می‌آید:

$$\dot{\varepsilon} = \rho_{FR} A b \frac{\upsilon_c}{h} . \qquad (۱۴-۳۳)$$

با جایگذاری h از معادله‌ی ۱۴-۲۳ و υ_c از معادله‌ی ۱۴-۳۲ نتیجه گرفته می‌شود که:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{16\pi^2 \rho_{FR} A b^3 D_{vol} \sigma (1-\nu) n \sigma_{xy}}{\mu b k T \ln R/r_c} . \qquad (۱۴-۳۴)$$

تعداد نابجایی‌ها، n در سپر برابر است با [۲]:

$$n = \frac{\pi (1-\nu) l \sigma_{xy}}{\mu b} , \qquad (۱۴-۳۵)$$

که l طول سپر است و تنش برابر با $\sigma = n\sigma_{xy}$ است [۲]. با جایگذاری در معادله‌ی ۱۴-۳۴ می‌توان نوشت:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{16\pi^2 \rho_{FR} A D_{vol} (1-\nu)^3 l^2 \sigma_{xy}^4}{\mu^3 k T \ln R/r_c} . \qquad (۱۴-۳۶)$$

ورتمن[1] [۳، ۴] پیشنهاد کرد که کمیت $\rho_{FR} A l^2$ متناسب با σ_{xy}^{-1} است که در نتیجه:

1. Weertman

(۳۷-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{C\pi^2 D_{\mathrm{vol}}(1-\nu)^3 \sigma_{xy}^3}{\mu^3 kT \ln R/r_{\mathrm{c}}},$$

که C یک ثابت است. مطابق با معادله‌ی ۱۴-۳۷ نرخ خزش ناشی از صعود و لغزش متناسب با ضریب خودنفوذی و تنش با توان ۳ است.

صعود و نابودی

نابجایی‌های صعود کننده نیز می‌توانند با دیگر نابجایی‌های با علامت مخالف برخورد کرده، و نیروی جاذبه‌ی ایجاد شده بین آن‌ها صعود را تحریک کرده و در نتیجه منجر به نابودسازی متقابل نابجایی‌ها می‌شود [۵]. شکل ۱۴-۶ حلقه‌های نابجایی جدا از یک‌دیگر قرار گرفته و صفحه‌های لغزشی متفاوت را نشان می‌دهد. نابجایی‌های با علامت مخالف نیروی جاذبه‌ای را متحمل می‌شوند که باعث می‌شود آن‌ها به سمت یک‌دیگر صعود کرده و نابود شوند. این سازوکار بسیار حایز اهمیت است که وسیله‌ای برای محدود کردن دانسیته‌ی نابجایی در جامد است. نرخ خزش با استفاده از معادله‌ی مشابه برای صعود در روی موانع و به وسیله‌ی لغزش نابجایی‌ها (شکل ۱۴-۷)، تعیین می‌شود. یعنی:

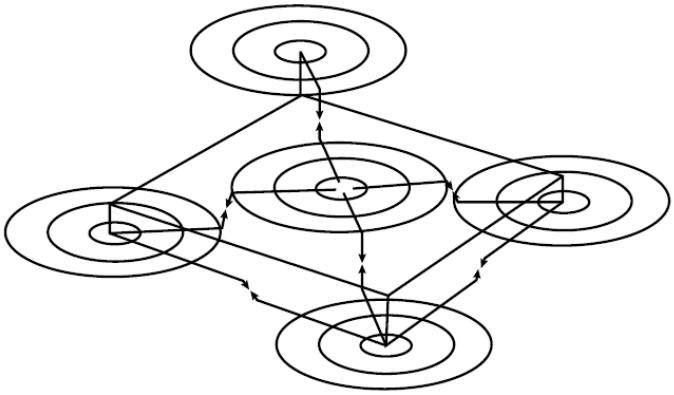
(۳۸-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \rho_{\mathrm{FR}} A b \frac{v_{\mathrm{c}}}{h} = \dot{\varepsilon} = \frac{\rho_{\mathrm{FR}} A b}{t_{\mathrm{c}}},$$

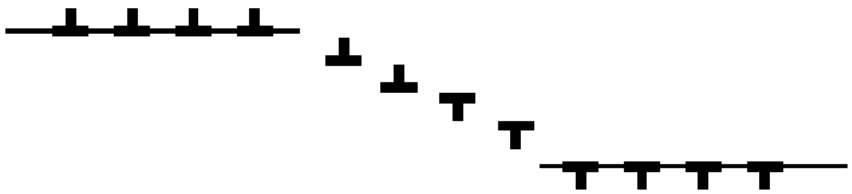
که t_{c} زمان انتظار تعریف شده به صورت $\frac{v_c}{h}$ است. سرعت صعود مشابه با مقدار تعیین شده در معادله‌ی ۱۴-۳۲ است؛ اما در این‌جا بلندی، فاصله‌ی میان دو نابجایی است که به سمت یک‌دیگر صعود می‌کنند. با برگشت به نیروی صعود ایجاد شده به وسیله‌ی تنش عمود، معادله‌ی ۱۴-۲۲ نشان داده شده است که:

(۳۹-۱۴)

$$\sigma = \frac{F_y}{b} \cong -\frac{G}{by}.$$



شکل ۱۴-۶. صعود نابجایی‌ها به سمت یک‌دیگر برای نابودسازی متقابل



شکل ۱۴-۷. آرایش شبکه‌ای از منابع فرانک ـ رید که نابجایی‌ها را تولید کرده که سپس برای نابود شدن صعود می‌کنند [۵].

نرخ نزدیک شدن دو نابجایی با علامت مخالف برابر با $2\upsilon_c$ است و با ترکیب معادله‌ی ۱۴-۳۲ برای υ_c و معادله‌ی ۱۴-۳۹ برای σ می‌توان نوشت:

(۱۴-۴۰)

$$\mathrm{d}y/\mathrm{d}t = 2v_c = -2\left(\frac{2\pi bD_{\mathrm{vol}}G}{kT\ln R/r_c y}\right),$$

و با انتگرال‌گیری معادله‌ی ۱۴-۴۰ بین محدوده‌های $y = h$ در $t = 0$ و $y = 0$ در $t = t_c$ نتیجه می‌شود که:

(۱۴-۴۱)

$$t_c = \frac{kT\ln R/r_c h^2}{8\pi bD_{\mathrm{vol}}G}.$$

برای n نابجایی تولید شده به وسیله‌ی منبع فرانک ـ رید، زمان انتظار برای هر نابجایی برابر با t_c/n است که n به صورت l / h تقریب زده می‌شود [۳]:

(۴۲-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\rho_{FR} A b^2 8\pi l D_{vol} G}{kT \ln R/r_c h^3} .$$

در معادله‌ی ۴۲-۱۴، A ناحیه‌ی پیموده شده به وسیله‌ی نابجایی است و می‌تواند به وسیله‌ی πl^2 تقریب زده شود، که فاصله‌ی بین منابع روی صفحه‌ی لغزشی به صورت $(h.\rho_{FR})^{-1/2}$ تعیین می‌شود که ρ_{FR} دانسیته‌ی منبع است و h فاصله‌ی میان منابع عمود بر صفحه‌ی لغزششان است. با جایگذاری عبارات A و در معادله‌ی ۴۲-۱۴ نتیجه گرفته می‌شود که:

(۴۳-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{8\pi^2 b^2 D_{vol} G}{kT \rho_{FR}^{0.5} \ln R/r_c h^{4.5}} .$$

با جایگذاری معادله‌های ۲۳-۱۴ و ۲۱-۱۴ به ترتیب برای h و G داریم:

(۴۴-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{C\pi^{5.5}(1-\nu)^{3.5} D_{vol} \sigma_{xy}^{4.5}}{kT \rho_{FR}^{0.5} b^{0.5} \mu^{3.5} \ln R/r_c} ,$$

که C ثابتی است که عبارت‌های عددی را در برمی‌گیرد. قابل ذکر است که وابستگی تنشی در این مدل برای مقدار ۳ در حالت صعود به لغزش، برابر با ۴٫۵ است. در هر دو مدل صعود، نرخ خزش متناسب با D_{vol} یا $\exp(-E_{vol} / kT)$ است.

۱۴-۱-۲ خزش نفوذی

در منطقه‌ی دما بالا، تنش پایین در نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل، اگر نقش نابجایی‌ها نادیده گرفته شود، سپس نفوذ اتمی به وسیله‌ی جاهای خالی خزش را کنترل می‌کند. همان‌طوری که در شکل ۸-۱۴ الف

نشان داده شده است، یک دانه‌ی ایده‌آل مکعبی با طول لبه‌ی d را در نظر بگیرید که روی آن تنشی اعمال شده است. وجوح به مثابه‌ی منابع و چاهک‌هایی برای جاهای خالی عمل می‌کنند. تحت تنش اعمالی، جاهای خالی مسیرهای نشان داده شده به صورت خط‌چین را دنبال می‌کنند و اتم‌ها در جهت مخالف حرکت خواهند کرد (خطوط پررنگ). لازم به ذکر است که جریان جاهای خالی از وجوح فعال شده به وسیله‌ی تنش کششی به وجوح فعال شده به وسیله‌ی تنش فشاری است. جریان اتم در جهت مخالف، از وجوح فعال شده به وسیله‌ی تنش فشاری به وجوح فعال شده به وسیله‌ی تنش کششی است. تصویر واقعی‌تر از این فرایند به وسیله‌ی شکل ۱۴-۸ ب نشان داده شده است. ایجاد جای خالی روی سطح فعال شده به وسیله‌ی تنش فشاری، σ به علت فعال‌سازی حرارتی مستلزم این است که انرژی آزاد ایجاد جای خالی به مقدار $\sigma\Omega$، کار صرف شده برای انتقال حجم Ω، افزایش یابد. جای خالی ایجاد شده روی سطح فعال شده به وسیله‌ی تنش کششی، σ به این معنی است که انرژی آزاد به اندازه مقدار مشابه، $\sigma\Omega$ کاهش خواهد یافت. بنابراین، در تعادل، غلظت جای خالی در وجوح مربوطه برابر است با:

$$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{t}} = C_{\mathrm{v}}^{0} \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) \qquad (۴۵-۱۴)$$

$$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{c}} = C_{\mathrm{v}}^{0} \exp\left(\frac{-\sigma\Omega}{kT}\right),$$

که σ برابر با بزرگی تنش و بالانویس‌های t و c به ترتیب به کشش و فشار اشاره می‌کنند. نرخ جریان جای خالی، A در مساحت d^2 که به وسیله‌ی تنش فعال شده برابر است با:

$$A = J_{\mathrm{v}} d^2 . \qquad (۴۶-۱۴)$$

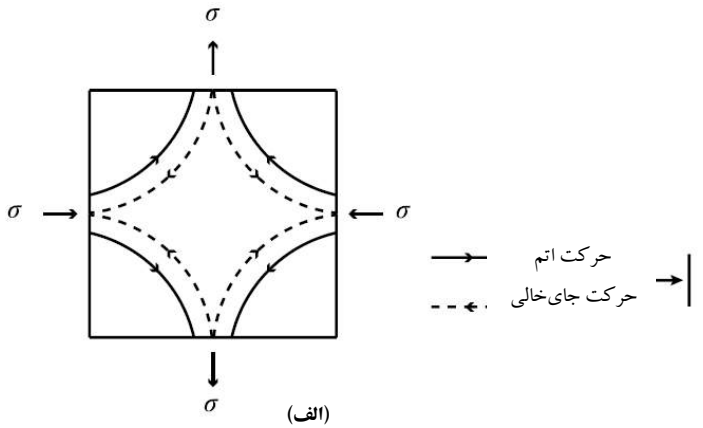
بزرگی جریان جای خالی، J_{v} به وسیله‌ی قانون فیک تعیین می‌شود:

$$J_{\mathrm{v}} = D_{\mathrm{v}} \frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}x} \approx \kappa D_{\mathrm{v}} \frac{C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{t}} - C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{c}}}{d}, \qquad (۴۷-۱۴)$$

که D_v ضریب نفوذ جای خالی و κ ضریب متناسب‌سازی بین مسیر متوسط نفوذ جای خالی و لبه‌ی مکعب d است. با جایگذاری معادله‌های ۱۴-۴۵ و ۱۴-۴۷ در معادله‌ی ۱۴-۴۶ می‌توان نوشت:

(۱۴-۴۸)

$$A = D_v C_v^0 \kappa d \left[\exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) - \exp\left(\frac{-\sigma\Omega}{kT}\right) \right] .$$



شکل ۱۴-۸. ایده‌آل‌سازی (الف) یک تصویر بسیار واقعی از جای خالی و جریان اتمی بین وجوح دانه‌ها (ب) هم محور شده با جهت‌های کششی و فشاری تنش‌های اعمال شده.

با در نظر گرفتن آن‌که $D_{vol} = D_v C_v^0 \Omega$ است و آن‌که تفاوت در عبارت‌های نمایی می‌تواند با استفاده از تابع سیسنوسی هذلولی نوشته شود، معادله‌ی ۱۴-۴۸ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۴۹-۱۴)

$$A = \frac{2\kappa \, \mathrm{d} D_{\mathrm{vol}}}{\Omega} \sinh(\sigma \Omega / kT) \, .$$

کرنش حجم اتمیِ Ω منتقل شده به وجوح فشاری در واحد مساحت (d^2) تقسیم بر بعد، d است:

(۵۰-۱۴)

$$\varepsilon = \frac{\Omega}{d^2} \frac{1}{d}.$$

از آن‌جایی که نرخ جریان جاهای خالی به مرزدانه برابر با A است، سپس نرخ کرنش به صورت زیر نتیجه می‌شود:

(۵۱-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = A \frac{\Omega}{d^3} = \frac{2\kappa D_{\mathrm{vol}}}{d^2} \sinh(\sigma \Omega / kT) \, ,$$

و برای $\sigma \Omega kT$ کوچک (~۱)، عبارت سینوسی می‌تواند برابر با مقدار داخل پرانتز تقریب زده شود و در نتیجه:

(۵۲-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = B_{\mathrm{vol}} \frac{D_{\mathrm{vol}} \sigma \Omega}{d^2 kT} \, ,$$

که B_{vol} برابر ثابت 2κ است. لازم به ذکر است که نرخ خزش تا توان $n = 1$ به وسیله‌ی تنش کنترل می‌شود و به صورت معکوس متناسب با مربع اندازه دانه است. وابستگی دمایی، به وسیله‌ی ضریب نفوذ حجمی D_{vol} یا $\exp(-E / kT)$ کنترل می‌شود و مشابه با چیزی است که از خزش نابجایی توضیح داده شده در قسمت قبل ناشی شده بود. گسترش این سازوکار به چند بلورها [۶] عبارت دقیقاً مشابهی را نتیجه می‌دهد. خزش نفوذیِ ناشی از نفوذ حجمی یا شبکه‌ای اتم‌ها از راه جاهای خالی خزش

نابارو ـ هرینگ[1] (N-H) نامیده می‌شود [۷، ۸].

در دماهایی زیر محدوده‌ای که خزش نابارو ـ هرینگ رخ می‌دهد، نفوذ مرزدانه‌ای انتقال جرم را کنترل می‌کند. کوبل[2] [۹] اولین بار عبارتی را برای نفوذ کنترل شده به وسیله‌ی مرزدانه با فرض دانه‌های کروی استخراج کرد که این عبارت به صورت زیر است:

(۵۳-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = B_{\mathrm{gb}} \frac{D_{\mathrm{gb}} \delta_{\mathrm{gb}} \sigma \Omega}{\pi d^3 kT} .$$

در این عبارت، D_{gb} ضریب نفوذ مرزدانه‌ای، δ_{gb} پهنای مرزدانه و ثابت B_{gb} تقریباً برابر با ۱۴۸ است [۶]. لازم به ذکر است که درحالی‌که وابستگی تنشی مشابه با خزش N-H است، وابستگی اندازه دانه برای d^{-2} خزش N-H، در خزش کوبلی برابر با d^{-3} است. به علت ماهیت نفوذ مرزدانه‌ای در برابر نفوذ حجمی، خزش کوبل در دماهای پایین غالب است و خزش N-H در دماهای بالاتر غالب است و در دماهای میانی هر دو خزش سهیم هستند. نرخ خزش نفوذی می‌تواند به وسیله‌ی معادله‌ی معمول زیر تشریح شود:

(۵۴-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = B \frac{\sigma \Omega}{d^2 kT} D_{\mathrm{eff}} ,$$

همان‌طوری‌که قبلاً نشان داده شد، D_{eff} ضریب نفوذ مؤثر است که به وسیله‌ی رابطه‌ی زیر مشخص می‌شود:

(۵۵-۱۴)

$$D_{\mathrm{eff}} = D_{\mathrm{vol}} \left(1 + \frac{\pi}{d} \frac{D_{\mathrm{gb}} \delta_{\mathrm{gb}}}{D_{\mathrm{vol}}} \right) ,$$

1. Nabarro–Herring
2. Coble

و ثابت B برابر با ۱۴ است [۶]. نفوذ مرزدانه‌ای در مقادیر بزرگ‌تر D_{gb}/D_{vol} و برای اندازه دانه‌های کوچک‌تر d در نرخ خزش سهیم خواهد بود.

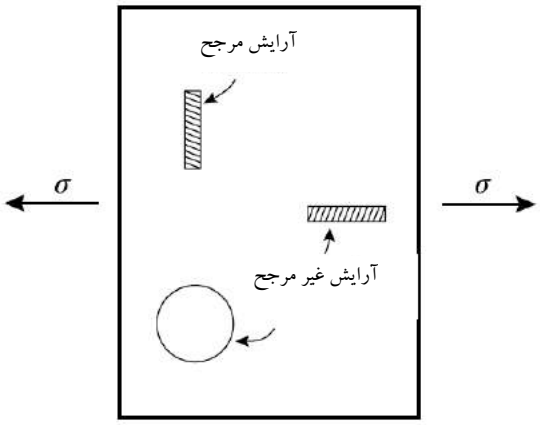
۱۴-۲ خزش تابشی

پرتودهی به صورت قابل توجهی نرخ خزش را بیش‌تر از نرخ خزش حرارتی افزایش می‌دهد، یا خزش را در مناطق دمایی القا می‌کند که خزش حرارتی چشم‌پوشی می‌شود. هم فولاد زنگ نزن و هم آلیاژهای زیرکونیوم، نرخ‌های خزش تابشی را نشان می‌دهند که به صورت قابل توجهی از نرخ‌های خزش حرارتی در دمای مشابه بیش‌تر است. در حقیقت، در دماهای هسته رآکتور آب سبک، خزش حرارتی چشم‌پوشی می‌شود؛ اما نرخ خزش تابشی می‌تواند فراتر از $10^{-6}\ s^{-1}$ باشد. پرتودهی تعداد بین‌نشین‌ها و جاهای خالی را در جامد افزایش می‌دهد؛ اما اثر این افزایش صرفاً تسریع خزش حرارتی نیست. در حقیقت، همان‌طوری که نشان داده خواهد شد، پرتودهی نرخ‌های خزش نفوذی را تسریع نمی‌کند. لازم است که خزش تابشی از دیدگاه افزایش تولید عیب، اعمال یک تنش و گسترش ریزساختار تابشی بررسی شود. تشکیل و رشد حلقه‌ها و حفره‌ها نقش مهمی را در فرایندهای خزشی ایفا می‌کنند. همان‌طوری‌که نشان داده خواهد شد، جوانه‌زنی حلقه‌های نابجایی القا شده در اثر تنش و خمیده شدن خطوط نابجایی به وسیله‌ی جذب ترجیحی بین‌نشین‌ها با کمک تنش، می‌تواند برای بخش زودگذار تنش استفاده شود؛ اما صعود و لغزش برای تشریح خزش حالت پایدار مورد نیاز است. بخش‌هایی که در ادامه بحث خواهند شد سازوکارهای مسئول برای خزش در فلزات تحت پرتودهی شده و وابستگی آن‌ها به متغیرهای مستقل نرخ مقدار پرتوگیری، دما و تنش و به علاوه ریزساختار را نشان می‌دهند.

۱۴-۲-۱ جوانه‌زنیِ ترجیحیِ القایی تنشیِ حلقه‌ها

اعمال یک تنش خارجی احتمال جوانه‌زنی حلقه‌های بین‌نشینی روی صفحاتی با آرایش مرجح را افزایش می‌دهد. حلقه‌های بین‌نشینی می‌توانند با احتمال بیش‌تری روی صفحات عمود بر یک تنش کششی اعمال شده از صفحات موازی با تنش جوانه بزنند. حلقه‌های جای خالی با احتمال کم‌تری روی صفحات عمود (غیرهم‌محور) با تنش کششی جوانه‌زنی می‌کنند و با احتمال بیش‌تری روی

صفحات موازی (هم‌محور) با تنش جوانه می‌زنند. در هر دو مورد جوانه زنی ترجیحی حلقه‌ها می‌تواند منجر به افزایش طول جامد در جهت موازی با تنش کششی اعمال شده می‌شود (شکل ۱۴-۹).



شکل ۱۴-۹. شمایی از تأثیر تنش روی جوانه‌زنی حلقه‌های نابجایی.

این فرایندِ جوانه‌زنی ترجیحی القایی حلقه‌ها در اثر تنش، سازوکار SIPN خزش تابشی، نام‌گذاری می‌شود [۱۰]. اگر f کسر اضافی حلقه‌های بین‌نشینی هم محور باشد، در نتیجه غلظت حلقه‌های هم محور، N_{AL} [۱۱] برابر است با:

(۵۶-۱۴)

$$N_{AL} = 1/3(1-f)N_L + fN_L ,$$

و غلظت حلقه‌های غیرهم‌محور، N_{NL} برابر است با:

(۵۷-۱۴)

$$N_{NL} = 2/3(1-f)N_L ,$$

که N_L غلظت کلی حلقه‌ها است. کسر اضافی حلقه‌های بین‌نشینی هم‌محور به صورت زیر تعیین می‌شود.

اگر n بین‌نشین قبل از آن‌که تراکم بین‌نشینی مورد نیاز باشد قادر به تشکیل یک حلقه‌ی بین‌نشینی باشد احتمال آن‌که چنین مجموعه‌ای ، p، در واکنش به تنش عمود شکل بگیرد، برابر است با:

(۵۸-۱۴)

$$p_i = \exp\frac{\sigma_i n\Omega}{kT} \Bigg/ \sum_{j=1}^{n_0} \exp\frac{\sigma_j n\Omega}{kT} ,$$

که اندیس i به جهت‌گیری iامین از n_0 جهت‌گیری حلقه‌ی ممکن اشاره دارد و تعداد حلقه‌ها در جهت‌گیری i امین برابر است با:

(۵۹-۱۴)

$$N_{\mathrm{L}}^{i} = p_i N_{\mathrm{L}} .$$

با تعریف f به جای کسر اضافی حلقه‌های بین‌نشینی در جهت iامین می‌توان نوشت:

(۶۰-۱۴)

$$p_i N_{\mathrm{L}} = \frac{1}{n_0}\left(1 - \sum_{j=1}^{n_0} f_j\right) N_{\mathrm{L}} + f_i N_{\mathrm{L}}, i = 1 \ldots n_0 ,$$

که در نتیجه:

(۶۱-۱۴)

$$f_i = \left(\exp\frac{\sigma_i n\Omega}{kT} - 1\right) \Bigg/ \sum_{j=1}^{n_0} \exp\frac{\sigma_j n\Omega}{kT} .$$

می‌توان رابطه را با کاهش n_0 جهت ممکن به سه جهت عمود بر هم کاهش داد. در نتیجه، برای تنش محوری عمود بر جهت $i = ۱$، دو جهت عمود دیگر ($i = ۲$ و ۳) $p_2 = p_3 = 0$ را خواهند داشت و در نتیجه:

(۶۲-۱۴)

$$f_1 = \left(\exp\frac{\sigma_1 n\Omega}{kT} - 1\right) \Big/ \left(\exp\frac{\sigma_1 n\Omega}{kT} + 2\right),$$

و $f_2 = f_3 = 0$ است.

با استفاده از نتایج معادله‌ی ۱۴-۶۲، کرنش خزشی ناشی از عدم تقارن در جمعیت حلقه‌ها برابر است با:

(۶۳-۱۴)

$$\varepsilon = 2/3\left[\pi r_{\mathrm{L}}^2 b N_{\mathrm{AL}} - 1/2\pi r_{\mathrm{L}}^2 b N_{\mathrm{NL}}\right].$$

با جایگذاری N_{AL} و N_{NL} از معادله‌های ۱۴-۵۶ و ۱۴-۵۷ داریم:

(۶۴-۱۴)

$$\varepsilon = 2/3 f \pi r_{\mathrm{L}}^2 b N_{\mathrm{L}},$$

که b بردار برگرز است و r_{L} میانگین شعاع حلقه است. نرخ خزش با مشتق زمانی کرنش خزشی تعیین شده در معادله‌ی ۱۴-۶۴ به‌دست می‌آید:

(۶۵-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = 4/3 f b \pi r_{\mathrm{L}} N_{\mathrm{L}} \dot{r}_{\mathrm{L}},$$

و با تعریف $\rho_{\mathrm{L}} = 2\pi r_{\mathrm{L}} N_{\mathrm{L}}$ به منزله‌ی طول خط حلقه در واحد حجم می‌توان نوشت:

(۶۶-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = 2/3 f b \rho_{\mathrm{L}} \dot{r}_{\mathrm{L}}.$$

اگر آرگومان عبارت نمایی در بیان موجود برای f در معادله‌ی ۱۴-۶۲ در مقایسه با ۱ کوچک باشد، سپس توان می‌تواند به صورت $\exp(x) \sim x+1$ جایگزین می‌شود و در نتیجه:

(۶۷-۱۴)

$$f = \frac{\sigma n \Omega}{3kT} ,$$

که اندیس تنش از بین رفته و معادله‌ی ۱۴-۶۶ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۶۸-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{2}{9}\frac{\sigma n b \Omega}{kT}\rho_L \dot{r}_L .$$

لازم به ذکر است که نرخ خزش متناسب با تنش و نرخ رشد حلقه، $\dot{r}_L$، است. بریلسفورد[1] و بولوگ[2] [۱۰] نشان دادند که نرخ خزش در صورتی که ریزساختار پرتودهی شده فقط شامل حلقه‌ها و حفره‌ها در نقش چاهک باشد و نرخ جذب جاهای خالی به وسیله‌ی حفره‌ها برابر با نرخ جذب بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی حلقه‌ها باشد، وابسته به تورم است. در معادله‌ی ۱۴-۶۵، حاصل‌ضرب $2\pi r_L b$ (مساحت لبه‌ی حلقه‌ای با ضخامت b) و $\dot{r}_L$ حجم بین‌نشین اضافه شده به حلقه است. با ضرب‌در N_L (حلقه / واحد حجم)، افزایش کسر حجمی حلقه به علت جذب خالص بین‌نشین‌ها به‌دست می‌آید. اگر این فرایند با جذب خالص برابر از جاهای خالی به حفره‌ها به منظور تولید یک نرخ تورم جزیی، $\dot{S}$ ، متعادل شود، سپس معادله‌ی ۱۴-۶۵ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۶۹-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = 2/3 f \dot{S} .$$

با جایگذاری f با استفاده از معادله‌ی ۱۴-۶۷ برای موردی که n کوچک است، نتیجه می‌شود که:

(۷۰-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{2}{9}\frac{\sigma n \Omega}{kT}\dot{S} ,$$

و برای تعمیم موردی که دانسیته‌ی کلی نابجایی برابر با $\rho = \rho_L + \rho_N$ باشد، می‌توان نوشت:

1. Brailsford
2. Bullough

(۷۱-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{2}{9}\frac{\sigma n \Omega}{kT}\frac{\rho_L}{\rho}\dot{S}\,.$$

حال آن‌که آیا SIPN بتواند به درستی برای کرنش‌های خزشی مشاهده شده محاسبه شود موضوعی است که در بسیاری از مباحث آمده است. متیوس[1] و فینس[2] [۱۲] دلایل مخالفین SIPN را بررسی و ذکر کردند، درحالی‌که مشاهدات افزایش در جهت‌گیری ترجیحی حلقه‌ها با تنش کششی را تأیید می‌کنند، حتی اگر فرض شود که n بزرگ باشد (۳۰-۱۰)، بزرگی کرنش خزشی اندازه‌گیری شده در حدود ۲ تا ۴ برابر از مقدار اندازه‌گیری شده به وسیله‌ی جهت‌گیری ترجیحی بزرگ‌تر است. بزرگ‌ترین محدودیت این مدل به این صورت است، زمانی که حلقه جوانه می‌زند نرخ کرنش به وسیله‌ی مقدار پرتوگیری تعیین می‌شود و مستقل از تنش است. در نتیجه خزش باید در صورت حذف تنش تا زمانی ادامه یابد که جوانه‌زنی کامل شود. هم‌چنین، اگر جوانه‌زنی قبل از اعمال تنش رخ دهد، خزش نباید رخ دهد. به وضوح، SIPN نمی‌تواند تمام خزش مشاهده شده را محاسبه کند؛ اما ممکن است که سازوکار موجود برای بخشی از نرخ کرنش خزشی مشاهده شده باشد. تعریف از جوانه‌زنی حلقه، جذب ترجیحی عیوب به وسیله‌ی حلقه‌ها در نتیجه‌ی تنش اعمالی است، که در قسمت بعد بررسی می‌شود.

۱۴-۲-۲ جذب ترجیحی القایی تنشی[3]

در حالت پایدار، چندین فرایند مجزا وجود داردکه می‌توانند منجر به خزش جامد تحت پرتودهی و تنش شود. آن‌ها عبارتند از (۱) انتقال اتم‌ها از صفحات موازی با تنش اعمال شده به صفحات عمود بر تنش اعمال شده، (۲) لغزش نابجایی‌ها روی صفحات متمایل به جهت تنش، و (۳) صعود و لغزش نابجایی‌ها ناشی از گرایش بین‌نشینیِ نابجایی. اولی به منزله‌ی *جذب ترجیحی القایی تنشی* (SIPA) نام‌گذاری شده و فرایند دوم *جذب ترجیحی لغزشیِ*[4] (PAG) نامیده می‌شود [۱۳]. جذب ترجیحی لغزشی در نتیجه‌ی جذب ترجیحی القایی تنشی است ولی یک مؤلفه اضافی در کرنش خزشی است

1. Matthews
2. Finnis
3. Stress Induced Preferential Absorption
4. Preferred Absorption Glide

زیرا این مؤلفه سهم لغزش در کرنش خزشی را تشریح می‌کند درحالی‌که جذب ترجیحی القایی تنشی فقط سهم صعود در کرنش خزشی را بیان می‌کند. سازوکار سوم، کرنش خزشی ناشی از فرایند صعود و لغزش در نتیجه‌ی جذب خالص بین‌نشین‌ها روی نابجایی‌های تمام جهات است (به عبارت دیگر بدون کمک تنش) و در اصل فرایندی مشابه مدل صعود و لغزش توضیح داده شده در قسمت ۱۴-۱ است ولی برای موردی که منبع عیب بین‌نشین‌های اضافی را دارد. لازم به ذکر است که این فرایند به همراه تورم است زیرا جریان مازاد جاهای خالی متناظر، در حفره‌ها انباشته شده که باعث تورم می‌شود. منشأ جذب ترجیحی برهم‌کنش میان نابجایی‌ها و عیوب است. در جذب ترجیحی القایی تنشی معمول، منشأ برهم‌کنش کشسان میان میدان تنش بلند دامنه‌ی نابجایی و آن عیب است. دیگر سرچشمه‌های جذب ترجیحی القایی تنشی، نفوذ ناهمسان‌گرد و نفوذ کشسانی[1] است. علی‌رغم تفاوت در جزییات منشأ برهم‌کنش، تمام این سازوکارها منجر به جذب ترجیحی بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی نابجایی‌ها می‌شود. شار بین‌نشین‌های اضافه‌ی جذب شده به وسیله‌ی نابجایی‌ها با جهت تشریح شده به وسیله‌ی j و دانسیته‌ی ρ_j برابر است با:

$$J_j = \rho_j \Omega \left(z_{\mathrm{i}}^{dj} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} \right) , \qquad (۷۲-۱۴)$$

که $z_{\mathrm{i,\upsilon}}^{\mathrm{d}j}$ راندمان‌های به دام‌اندازی نابجایی‌های جهت، j، هستند، D_{iv} ضرایب نفوذی هستند و C_{iv} به ترتیب غلظت‌های حجمی بین‌نشین‌ها و جاهای خالی هستند. متغیر، $C_{\upsilon}^{\mathrm{d}j}$ غلظت جاهای خالی در تعادل با جهت نابجایی j است. برای تنش کششی تک محوری که j = ۱ است:

$$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}1} = C_{\mathrm{v}}^{0} \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) \qquad (۷۳-۱۴)$$

و

$$C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}2} = C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}3} = C_{\mathrm{v}}^{0} . \qquad (۷۴-۱۴)$$

1. Elastodiffusion

شار بین‌نشین‌ها، J_j می‌تواند به صورت زیر به سرعت صعود مرتبط شود:

(۷۵-۱۴)

$$J_j = b\rho_j v_j \ ,$$

که ρ_j دانسیته‌ی نابجایی‌ها با صفحات عمودشان بر j است. با جایگذاری J_j از معادله‌ی ۱۴-۷۵ در داخل معادله‌ی ۱۴-۷۲ و حل برای v_j می‌توان نوشت:

(۷۶-۱۴)

$$v_j = \frac{\Omega}{b}\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j}\right) \ .$$

با جایگذاری معادله‌ی ۱۴-۷۶ در داخل معادله‌ی ۱۴-۵ نرخ کلی خزش به‌دست می‌آید:

(۷۷-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_j = \Omega\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j}\right)\rho_j \ .$$

اما معادله‌ی ۱۴-۷۷ سهم‌های ناشی از تورم حفره‌ای را نیز دربر می‌گیرد. این مؤلفه‌ی کرنش، فقط یک سوم تورم حجمی است، یا $\varepsilon = 1/3(\varepsilon_1+\varepsilon_2+\varepsilon_3)$ و نرخ کرنش تورمی، $\dot{\varepsilon}_S$ برابر است با:

(۷۸-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_S = \frac{\Omega}{3}\sum_{n=1}^{3}\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}n} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}n} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}n} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}n}\right)\rho_n \ .$$

خزش به علت صعود ناشی از جذب ترجیحی بین‌نشین‌ها در نابجایی‌ها برابر است با:

(۷۹-۱۴)

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}_j =& \Omega(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}j})\rho_j \\ &- \frac{\Omega}{3}\sum_{n=1}^{3}\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}n} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}n} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}n} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}n} n\right)\rho_n \ .\end{aligned}$$

برای نابجایی‌هایی که به صورت همسان‌گرد در سه جهت عمود بر یک‌دیگر توزیع شده‌اند:

(۸۰-۱۴)

$$\rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = \rho/3 \,.$$

با جایگذاری معادله‌های ۱۴-۷۳ و ۱۴-۷۴ برای غلظت تعادلی جای خالی و معادله‌ی ۱۴-۸۰ برای دانسیته‌ی نابجایی در معادله‌ی ۱۴-۷۹ برای جهت تنش A = ۱ = j (جهت‌های هم‌محور) می‌توان نوشت:

(۸۱-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_{\text{climb}} = \frac{2}{9}\Omega\rho \left\{ \underbrace{\left[\Delta z_{\text{i}}^{\text{d}} D_{\text{i}} C_{\text{i}} - \Delta z_{\text{v}}^{\text{d}} D_{\text{v}} C_{\text{v}}\right]}_{\text{SIPA}} + \underbrace{D_{\text{v}} C_{\text{v}}^{0} \left[z_{\text{v}}^{\text{dA}} \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) - z_{\text{v}}^{\text{dN}} \right]}_{\text{PE}} \right\} ,$$

که ، $\Delta z_{\text{i,v}}^{\text{dN}}$ $\Delta z\text{-}\Delta z_{\text{i,v}}^{\text{dN}}$ $=_{\text{i,v}}^{\text{dA}}$ $\Delta z_{\text{i,v}}^{\text{d}}$ و $\Delta z_{\text{i,v}}^{\text{dA}}$ راندمان به دام‌اندازی نابجایی‌های هم‌محور و راندمان به دام‌اندازی نابجایی‌های غیرهم‌محور را نشان می‌دهد (۲ = j). عبارت اول در داخل کروشه نرخ خزش صعودی نابجایی به علت جذب ترجیحی بین‌نشین‌ها، یا جذب ترجیحی القایی تنشی را نشان می‌دهد.

(۸۲-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_{\text{SIPA}} = \frac{2}{9}\Omega\rho \left[\Delta z_{\text{i}}^{\text{d}} D_{\text{i}} C_{\text{i}} - \Delta z_{\text{v}}^{\text{d}} D_{\text{v}} C_{\text{v}}\right] \,.$$

عبارت دوم در داخل کروشه نرخ خزش صعودی نابجایی ناشی از نشر ترجیحی جاهای خالی را نشان می‌دهد، PE [۱۳]:

(۸۳-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_{\text{PE}} = \frac{2}{9}\Omega\rho D_{\text{v}} C_{\text{v}}^{0} \left[z_{\text{v}}^{\text{dA}} \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) - z_{\text{v}}^{\text{dN}} \right] \,.$$

اگر تفاوت در راندمان‌های به دام‌اندازی (ترجیحی) نابجایی‌ها در جهات مختلف حذف شوند، به عبارت دیگر $\Delta z_i^d = \Delta z_i^d = 0$، عبارت اول از بین رفته و نرخ خزش صرفاً ناشی از فرایندهای حرارتی است.

۱۴-۲-۳ صعود و خزش ناشی از جذب ترجیحی

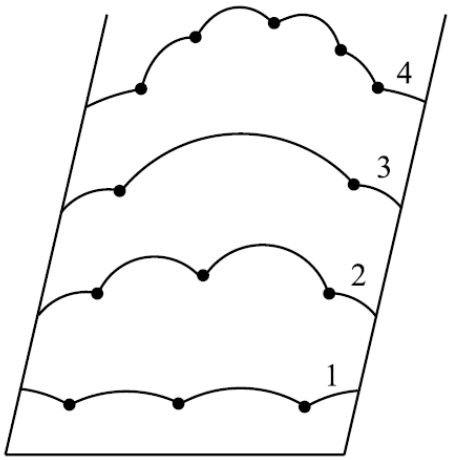
در حالی جذب ترجیحی القایی تنشی سازوکاری را برای خزش به وسیله‌ی صعود نابجایی فراهم می‌کند، نابجایی‌ها هم‌چنین می‌توانند به وسیله‌ی لغزش در خزش سهیم شوند اگر قادر باشند که بر موانع موجود در صفحه‌ی لغزششان به وسیله‌ی فرایند صعود غلبه کنند [۱۳].

تحت تنش اعمالی، نابجایی‌های قفل شده لغزش خواهند کرد، تا به آرایشی برسند که نیروی بازگردانندگیِ ناشی از کشش خطی به وسیله‌ی تنش اعمال شده متعادل شود. از آن‌جایی که نابجایی‌ها قفل شده‌اند، خزش به کرنش کشسان مشخص شده به وسیله‌ی معادله‌ی $\varepsilon = \sigma/E$ محدود می‌شود. صعود، نابجایی‌ها را قادر می‌سازد تا بر نقاط قفل شده‌ی ابتدایی غلبه کنند. بخش‌های آزاد شده بین نقاط قفل کننده‌ی جدید خمیده می‌شوند تا دوباره کشش خطی به وسیله‌ی تنش اعمال شده متعادل شود. شکل ۱۴-۱۰ فرایندی را نشان می‌دهد که به وسیله‌ی آن بخش‌هایی از نابجایی‌ها که بین نقاط قفل شده خمیده شداند، از نقاط قفل کننده آزاد شده و دوباره قفل می‌شوند. هر سیکلی از صعود و لغزش تا قفل شدن علاوه بر کرنش ناشی از صعود، یک خمیدگیِ کشسانی را نتیجه می‌دهد که به همراه هم کرنش خزشی کلی در جامد را تشکیل می دهند، در تمام این مدت، شبکه نابجایی آرایش خود را حفظ می‌کند. این سازوکار هم‌چنین به منزله‌ی خزش ناپایدار نیز در نظر گرفته می‌شود زیرا در مقادیر پرتوگیری پایین رخ می‌دهد. به هرجهت، از آن‌جایی که خطوط نابجایی بعد از صعود روی نقاط قفل شده نیز به خمیده شدن ادامه می‌دهند، این فرایند در خزش حالت پایدار نیز در نظر گرفته شود.

مشابه با معادله‌ی ۱۴-۱۹، نرخ خزش ناشی از صعود و لغزش می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۱۴-۸۴)

$$\dot{\varepsilon}_{CG} = \varepsilon \frac{v_c}{l} ,$$



شکل ۱۴-۱۰. شمایی از لغزش به وسیله‌ی خمیدگی نابجایی‌ها و قفل شدن و آزاد شدن بخش‌های نابجایی.

که ε کرنش ناشی از تغییر شکل کشسان، υ_c سرعت صعود و l فاصله بین نقاط قفل شده است. هنگامی که قفل شوندگی به وسیله‌ی دانسیته‌ی نابجایی‌های شبکه ایجاد می‌شود، l به صورت $l = 1/\sqrt{\pi\rho_d}$ است و ρ_d دانسیته‌ی نابجایی است. سپس معادله‌ی ۱۴-۸۴ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۴-۸۵)

$$\dot{\varepsilon}_{CG} = \varepsilon(\pi\rho_d)^{1/2} v_c \,.$$

سرعت صعود می‌تواند از معادله‌ی ۱۴-۷۶ و با اضافه کردن و کم کردن مؤلفه‌های سرعتی ناشی از تورم حجمی به‌دست آید:

(۱۴-۸۶)

$$\begin{aligned} v_j = \frac{\Omega}{b} \Bigg[& \left(z_i^{dj} D_i C_i - z_v^{dj} D_v C_v + z_v^{dj} D_v C_v^{dj} \right) \\ & - \frac{1}{3\rho_j} \sum_{n=1}^{3} \left(z_i^{dn} D_i C_i - z_v^{dn} D_v C_v + z_v^{dn} D_v C_v^{dn} \right) \rho_n \Bigg] \\ & + \frac{\Omega}{3b\rho_j} \sum_{n=1}^{3} \left(z_i^{dn} D_i C_i - z_v^{dn} D_v C_v + z_v^{dn} D_v C_v^{dn} \right) \rho_n \,. \end{aligned}$$

معنی فیزیکی عبارت‌های موجود در معادله‌ی ۱۴-۸۶ به صورت زیر است. عبارت اول در داخل کروشه سرعت صعود ناشی از تمام فرایندهای سهیم در جذب جاهای خالی و بین‌نشین‌ها و نشر جاهای خالی است. عبارت دوم در داخل کروشه صعود ناشی از جذب خالص عیوب نقطه‌ای و نشر در نابجایی‌هایی است که فقط منتسب به تورم هستند. تفریق این عبارت از عبارت اول در داخل کروشه، اثر خالص سرعت صعود ناشی از فرایندهای حفظ کننده‌ی حجم را نتیجه می‌دهد که شامل جذب ترجیحی القایی تنشی و نشر ترجیحی جاهای خالی است. عبارت آخر در معادله‌ی ۱۴-۸۶ سرعت صعود نابجایی ناشی از تورم غیرهمسان‌گرد است. عبارت‌های در داخل کروشه مسئول فرایندهای صعود و لغزش در غیاب تورم هستند. با استفاده از معادله‌ی ۱۴-۸۰ و سرعت میانگین نابجایی‌ها که با رابطه‌ی زیر تعیین می‌شود:

(۱۴-۸۷)

$$v = \frac{|v_1| + |v_2| + |v_3|}{3} ,$$

معادله‌ی ۱۴-۸۶ به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۴-۸۸)

$$v = \frac{\Omega}{3b}\left\{\left|z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{d1}\right| + 2\left|z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d2}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d2}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d2}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d2}}\right|\right\} .$$

هنگامی که جذب و نشر ترجیحی بدون وقوع تورم رخ می‌دهد، تعداد بین‌نشین‌های جذب شده باید به وسیله‌ی تعداد جاهای خالی جذب شده متعادل شوند، در نتیجه:

(۱۴-۸۹)

$$\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}}\right) = 2\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d2}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d2}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d2}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d2}}\right) ,$$

و معادله‌ی ۱۴-۸۸ به صورت زیر در نوشته می‌شود:

(۹۰-۱۴)

$$v = \frac{2}{3}\frac{\Omega}{b}\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}}\right) .$$

با جایگذاری سرعت صعود تعیین شده در معادله‌ی ۱۴-۹۰ در داخل معادله‌ی خزشی برای صعود و لغزش، معادله‌ی ۱۴-۸۵، داریم:

(۹۱-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_{\mathrm{CG}} = \frac{2}{3}\frac{\varepsilon}{b}\Omega\,(\pi\rho_{\mathrm{d}})^{1/2}\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d1}}\right) .$$

بعد از مقداری تغییر شکل در معادله‌ی ۱۴-۹۱، منصور [۱۳] نشان داد که نرخ خزش صعودی و لغزشی می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۹۲-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_{\mathrm{CG}} = \frac{4}{9}\frac{\varepsilon\Omega}{b}\Omega(\pi\rho_{\mathrm{d}})^{1/2} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} \Delta z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} ,$$

که $\Delta z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}$ بعد از معادله‌ی ۱۴-۸۱ تعریف شده است. لازم به ذکر است که در هر دو معادله‌ی ۱۴-۸۲ و ۱۴-۹۲، عبارت $\Delta z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}$ ظاهر می‌شود که تفاوت در راندمان به دام‌اندازی بین نابجایی‌های هم محور شده و غیرهم‌محور شده را نشان می‌دهد و در نتیجه وابسته به تنش است. منصور بیان کرد که $\Delta z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} = \Delta z_{\mathrm{i}}'\varepsilon$ (که $\Delta z_{\mathrm{i}}'$ مستقل از تنش است) است، در نتیجه $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{SIPA}} \propto \varepsilon$ و $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{CG}} \propto \varepsilon^2$ است، و از آن‌جایی که $\varepsilon = \sigma/E$ در نتیجه $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{SIPA}} \propto \sigma$ و $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{CG}} \propto \sigma^2$. هم‌چنین همان‌طوری که در بخش ۵-۱-۳ نشان داده شده، برای مورد تسلط چاهک‌ها، عبارت C_{i} متناسب با نرخ تولید عیب، K_0، و برای مورد تسلط بازترکیبی متناسب با $K_0^{1/2}$ است. هم‌چنین باید ذکر شود که از آن‌جایی که هیچ نیازی برای جذب ترجیحی خالص بین‌نشین‌ها در تمام نابجایی‌های لبه‌ای وجود ندارد، خزش می‌تواند در غیاب تورم رخ دهد.

۱۴-۲-۴ صعود و لغزش تحریک شده به وسیله‌ی گرایش نابجایی

تحلیل قسمت قبل خزشی را تشریح کرد که به وسیله‌ی جذب ترجیحیِ القایی تنشیِ بین‌نشین‌ها در نابجایی‌ها تحریک شده است. نرخ خزش مؤلفه‌های صعودی و لغزشی دارد و فرایند خزش به وسیله‌ی خمیده شدن تکه‌های نابجایی و متعاقب آن صعود و آزاد شدن تکه‌ها از نقاط میخ‌کوب شده کنترل می‌شود. در این قسمت خزش تحریک شده به وسیله‌ی گرایش نابجایی‌ها با جذب ترجیحی بررسی می‌شود. به وضوح برای آن‌که جذب خالصی از بین‌نشین‌ها به وسیله‌ی نابجایی‌ها وجود داشته باشد لازم است که جذب خالص برابری از جاهای خالی به وسیله‌ی دیگر چاهک‌ها در جامد وجود داشته باشد. فرض شده است که چاهک‌ها حفره‌ها باشند. خزش ناشی از جذب اضافه‌ی بین‌نشین‌ها در نابجایی‌ها معادل با سازوکارهای صعودی و لغزشی خزش حرارتی بحث شده در قسمت ۱۴-۲ است؛ اما با جایگزینی جذب بین‌نشینی به وسیله‌ی جذب جای خالی است. برای این مورد به معادله‌ی ۱۴-۱۹ ارجاع داده می‌شود که نرخ خزش را برحسب سرعت صعود، υ_c و ارتفاع مانع، h بیان می‌کند. معادله‌ی ۱۴-۷۵ سرعت صعود را برحسب شار جذب بین‌نشین‌ها در نابجایی‌ها ارایه می‌دهد. در صورتی که فقط صعود ناشی از گرایش نابجایی در نظر گرفته شود، معادله‌ی ۱۴-۷۲ برای شار بین‌نشین‌ها به صورت زیر در نوشته می‌شود:

(۱۴-۹۳)

$$J = \rho_m \Omega \left[z_i^d D_i C_i - z_v^d D_v C_v^d \right] ,$$

و با جایگذاری عبارت J در معادله‌ی ۱۴-۹۳ در ۱۴-۷۵ و حل برای υ_c نتیجه گرفته می‌شود که:

(۱۴-۹۴)

$$v_c = \frac{\Omega}{b} \left[z_i^d D_i C_i - z_v^d D_v C_v^d \right] .$$

معادله‌ی ۱۴-۹۴ می‌تواند به صورت مستقیم از معادله‌ی ۱۴-۸۶ و با نادیده گرفتن نشر حرارتی، $C_v^{dj} \sim 0$، به‌دست آید و این الزام را ایجاد می‌کند که zs برای نابجایی‌ها هیچ‌گونه وابستگیِ آرایشی نداشته باشد، در نتیجه $Z_v^{dj} = Z_v^d$ و $Z_i^{dj} = Z_i^d$ است. ارتفاع مانع در معادله‌ی ۱۴-۲۳

مشخص شده است و در مورد یک نابجایی سپر گذاری شده در برابر یک مانع، تنش σ_{xy} به وسیله‌ی $n\sigma_{xy}$ جایگزین می‌شود که n تعداد نابجایی‌ها در سپر است که به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۴-۳۵ تعیین می‌شود. با جایگذاری معادله‌ی ۱۴-۹۴ برای υ_c، معادله‌ی ۱۴-۲۳ برای h و معادله‌ی ۱۴-۳۵ برای n در داخل معادله‌ی ۱۴-۱۹ می‌توان نوشت:

(۱۴-۹۵)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\rho_{\mathrm{m}} l^2 \Omega 8\pi^2 (1-\nu)^2 \sigma_{xy}^2}{(\mu b)^2} \left[z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} \right] .$$

هنگامی که خزش به وسیله‌ی تورم تحریک می‌شود، نرخ جذب بین‌نشین‌ها در نابجایی‌ها با نرخ جذب مشابهی از جاهای خالی به وسیله‌ی حفره‌ها متعادل می‌شود:

(۱۴-۹۶)

$$\rho_{\mathrm{m}} (J_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} - J_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}) = A_{\mathrm{v}}^{\mathrm{V}} - A_{\mathrm{i}}^{\mathrm{V}} = \frac{1}{\Omega} \frac{\Delta \dot{V}}{V} .$$

با جایگذاری معادله‌ی ۱۴-۹۶ در معادله‌ی ۱۴-۹۵ نتیجه می‌شود که:

(۱۴-۹۷)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\rho_{\mathrm{m}}}{\rho_{\mathrm{d}}} \frac{8\pi^2 l^2 (1-\nu)^2 \sigma_{xy}^2}{(\mu b)^2} \frac{\Delta \dot{V}}{V} ,$$

که عبارت $\rho_{\mathrm{m}}/\rho_{\mathrm{d}}$ کسر دانسیته‌ی نابجاییِ متحرک است که می‌تواند در خزش سهیم باشد. هم‌چنین باید ذکر شود که فلزات پرتودیده اغلب سپرگذاری در موانع را نشان نمی‌دهند. در این مورد، تعداد نابجایی‌ها در سپر، n، برابر با تنظیم شده و نرخ خزش متناسب با تنش است. وولفر[1] و همکارانش [۱۴] نشان دادند هنگامی که موانع از نوع حلقه‌های فرانک هستند، نرخ خزش متناسب با تنش و با توان $n = ۱$ است.

1. Wolfer

۱۴-۲-۵ خزش گذرا

خزش می‌تواند قبل از رسیدن حالت پایدار به وسیله‌ی غلظت‌های جاهای خالی و بین‌نشین‌ها رخ دهد. چنین خزشی به منزله‌ی خزش گذرا شناخته می‌شود. سه فرایند *خزش گذرا* که بسیار مهم هستند عبارتند از: جذب گذاری القایی لغزشی[1]، جذب گذاری القایی آغازین[2] و خزش آبشاری[3].

جذب گذاری القایی لغزشی

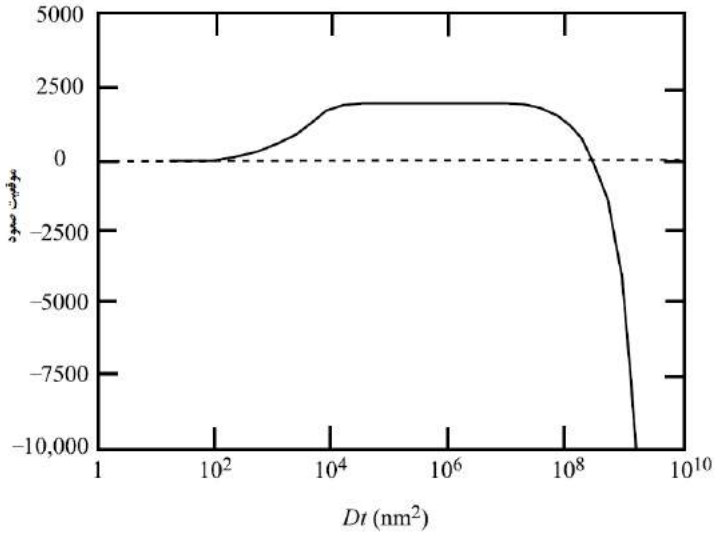
در خزش صعودی و لغزشی، فرایند صعود مرحله محدود کننده است زیرا لغزش بی‌نهایت سریع رخ می‌دهد. در حقیقت، فرایند لغزش به اندازه‌ای سریع است که غلظت‌های حالت پایدار عیوب نقطه‌ای نمی‌تواند در نابجایی‌ها حفظ شود. در نتیجه، نابجایی‌ها در تلاش برای برقراری مجدد سطح مقطع‌های نفوذی حالت پایدار عیوب نقطه‌ای در موقعیت‌های جدیدشان، سریعاً جاهای خالی و بین‌نشین‌ها را جذب می‌کنند [۱۵]. بنابراین جاهای خالی و بین‌نشین‌ها در تعداد برابری جذب نمی‌شوند و عدم تعادل در نرخ جذب منجر به تشکیل خزش گذار می‌شود که جذب گذاری القایی لغزشی نامیده می‌شود.

شکل ۵-۳ در فصل ۵ نشان می‌دهد که در حالت پایدار، غلظت جای خالی حجمی در حالت پایدار چندین برابر بزرگ‌تر از غلظت بین‌نشین‌ها است. در نتیجه جریان جاهای خالی به نابجایی‌ها باعث افزایش صعود مثبت می‌شود که منجر به آزادسازی نابجایی‌ها از یک مانع می‌شود و به وسیله‌ی لغزش منجر به تولید خزش می‌شود. شکل ۱۴-۱۱ افزایش صعود در نتیجه جذب جاهای خالی اضافی قبل از به‌دست آمدن سطح مقطع‌های حالت پایدار را نشان می‌دهد.

صعود اولیه نشان داده شده در جهت مثبت برابر با صعود گذرای جای خالی است، و صعود منفی در زمان‌های بالاتر ($Dt > ۱۰^{۸}\ \mathrm{nm}^2$) صعود بین‌نشینی تحریک شده‌ی گرایشی است. اگر صعود گذرای مثبت برای فرار از مانع به اندازه‌ی کافی بزرگ باشد، نابجایی به مانع بعدی می‌لغزد. اگر صعود گذرا نامناسب باشد، سرانجام صعود حالت پایدار حرکت نابجایی را معکوس کرده و فرار در جهت منفی رخ می‌دهد. زمانی که حالت پایدار فرا رسد، سپس صعود به علت جذب ترجیحی القایی تنشی (که در قسمت قبل توضیح داده شده) به وسیله‌ی بین‌نشین‌های اضافه کنترل می‌شود. این شکل از صعود گذرا

1. Glide-induced transient absorption
2. Start up-induced transient absorption
3. Cascade creep

می‌تواند منجر به نرخ‌های خزشی بالا در دماهای پایین شود، جایی که غلظت حالت پایدار جای خالی تا زمانی که دما خیلی پایین نیست، بالا است و در نتیجه نفوذ جای خالی محدود کننده است.



شکل ۱۴-۱۱. صعود نابجایی برای واحد طول نابجایی در واحدهای بهنجار شده برای غلظت حالت پایدار جای خالی تقسیم بر $۱۰^{۱۸}$. ضرایب نفوذ در واحدهایی از nm^2/s و یک نرخ صعود حالت پایدار مطابق با ۱٪ از شار بین‌نشینی کلی فرض شده است[۱۵].

جذب گذرای القایی آغازین

در رخدادهای دما پایین با آغاز پرتودهی می‌تواند خزش قابل توجهی رخ دهد. این فرایند خزش، که جذب گذرای القایی آغازین نامیده می‌شود به وسیله‌ی جذب بین‌نشین‌ها قبل از حالت پایدار زمانی رخ می‌دهد که بین‌نشین‌ها متحرک هستند؛ اما برای واکنش با نابجایی‌ها، نفوذ جای خالی برای آن‌ها بسیار آرام است[۱۶]. با بررسی مجدد شکل ۵-۳، در آغاز پرتودهی در دماهای پایین، غلظت جاهای خالی و بین‌نشین‌ها به صورت خطی با زمان افزایش می‌یابد تا بین‌نشین‌ها شروع به جذب شدن در چاهک‌ها کنند. در این نقطه از زمان که ثابت زمانی τ_2 تعریف می‌شود، غلظت بین‌نشین‌ها به حالت شبه پایدار می‌رسد درحالی‌که افزایش غلظت جاهای خالی ادامه می‌یابد. افزایش پیوسته‌ی جاهای

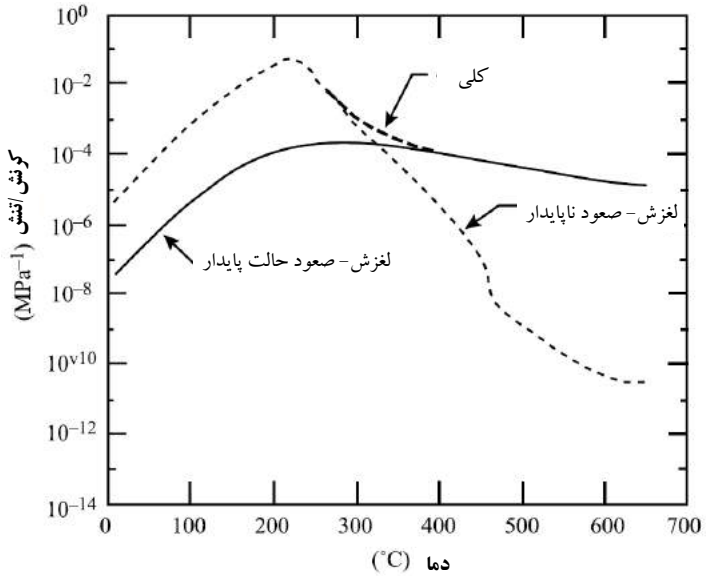
خالی باعث رخداد بازترکیبی می‌شود و در نتیجه منجر به کاهش در غلظت بین‌نشین‌ها و یک نرخ پایین تری از افزایش جای خالی با زمان می‌شود. با افزایش اضافی در غلظت جای خالی، بازترکیبی فرایند اتلاف (در $t = \tau_4$) ایجاد کننده‌ی یک کاهش چشم‌گیر در نرخ اتلاف بین‌نشینی و یک نرخ کم‌تری از افزایش جای خالی را کنترل می‌کند. در پایان، حالت پایدار هنگامی فرا می‌رسد که غلظت جای خالی به اندازه‌ی کافی بالا باشد تا جاهای خالی با چاهک‌ها واکنش دهند.

مشارکت بین‌نشین‌ها در خزش در طول این مرحله‌ی گذرای آغازین می‌تواند به وسیله‌ی تعیین تعداد بین‌نشین‌های اضافه، N_i، که به وسیله‌ی نابجایی‌ها در هر بازه‌ی زمانی در شکل ۵-۳ جذب شده‌اند، تخمین زده شود. برای مثال در بازه‌ی زمانی $\tau_4 - \tau_2$ تعداد بین‌نشین‌های تولید شده برابر با $K_0(\tau_4 - \tau_2)$ است، و تعداد باقی‌مانده برابر با $K_0/K_{is}C_s$ است، در نتیجه تعداد بین‌نشین‌های جذب شده به وسیله‌ی نابجایی‌ها برابر است با:

(۹۸-۱۴)

$$N_i = K_0(\tau_4 - \tau_2) - K_0/K_{is}C_s \ .$$

با استفاده از تحلیل مشابه، تخمین‌هایی می‌تواند برای تعداد بین‌نشین‌های جذب شده در طول بازه‌ی زمانی $\tau_3 - \tau_4$ یا تا رسیدن حالت پایدار در نقطه‌ی پایان حالت گذرا به‌دست آید. جذب بین‌نشین‌ها منجر به لغزش فعال شده در اثر صعود همان‌طوری که با معادله‌ی ۱۴-۹۲ توضیح داده شد، می‌شود با این تفاوت که N_i با C_i جایگزین شده است. شکل ۱۴-۱۲ نشان می‌دهد که کرنش خزشی کلی در فولادهای زنگ نزن آستنیتی می‌تواند با جذب گذرای القایی ابتدایی در دماهای در محدوده‌ی 300^oC و نزدیک به محدوده‌ی 200^oC برای آلیاژهای فریتی کنترل شود. از این جهت جذب گذرای القایی آغازین سازوکار مهم خزشی در دمای پایین و در طول مرحله‌ی آغازی از پرتودهی است.



شکل ۱۴-۱۲. تغییر شکل خزشی در واحد تنش به صورت تابعی از دما برای آلیاژهای آستنیتی با استفاده از مدل لغزشی فعال شده در اثر صعود (شرایط حالت پایدار) و مدل جذب گذرای القایی آغازین [۱۶].

خزش آبشاری

یکی از مدل‌های خزش گذرای ساده بر پایه‌ی اثر تنش روی حجم آبشار جابه‌جا شده است. همان‌طوری‌که به وسیله‌ی برینکمن و ویدرسیچ[1] [۱۷] تشریح شده است، اگر در طول رخداد آبشار جابه‌جایی باری بر جامد اعمال شود، کرنش کشسان در منطقه‌ی آبشار به صورت موضعی رهاییده شده و قابل تغییر نیست. نرخ کرنش این فرایند به صورت زیر تعیین می‌شود:

(۹۹-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_{\text{cas}} = \varepsilon_{\text{e}} V_{\text{cas}} \alpha N \sigma_{\text{s}} \phi \ ,$$

که کرنش کشسان $\varepsilon_{\text{e}} = \sigma/E$ است و V_{cas} حجم آبشار، α تعداد آبشارها در هر واقعه‌ی پراکنش نوترونی، N دانسیته‌ی عدد اتمی در جامد، σ_{s} سطح مقطع پراکنش نوترونی و ϕ شار نوترون سریع

1. Wiedersich

هستند. متویس[1] و فینیس[2] [۱۲] ذکر کردند که این نرخ خزش برآورد شده کم‌تر از خزش تابشی مشاهده شده در مواد ساختمانی پرتودهی نوترونی شده است. بنابراین از آن‌جایی که تولید عیب به صورت پیوسته در سراسر زمان و فضا رخ نمی‌دهد و همه‌ی عیوب از منطقه‌ی معیوب فرار نمی‌کنند، ممکن است که کرنش ایجاد شده به وسیله‌ی اثرات آبشاری حایز اهمیت باشند. بخش نابجایی می‌تواند حرکات مکرر و منظم صعودی را در پاسخ به نوسانات در غلظت موضعی جای خالی ایجاد شده در نزدیکی آبشار داشته باشد. منصور[3] [۱۸] اثرات آبشاری را در مدل لغزش فعال شده به وسیله‌ی صعود با جایگزینی $\frac{\upsilon_c}{h}$ در معادله‌ی ۱۴-۱۹ به وسیله‌ی بسامد آزادسازی تکه نابجایی‌های قفل شده، ω محاسبه کرد:

(۱۴-۱۰۰)

$$\dot{\varepsilon} = \rho b l \omega ,$$

که:

(۱۴-۱۰۱)

$$\omega = \sum_{j-1}^{h} R_j F_j ,$$

و F_j بسامدی است که با آن یک بخش نابجایی به ارتفاع حداقل h صعود می‌کند:

(۱۴-۱۰۲)

$$F_j = 4\pi N \sigma_s \phi \int_0^{\infty} \rho^2 P_j \, dr ,$$

1. Matthews
2. Finnis
3. Mansur

و P_j احتمال صعود j یا بیش‌تر است. عبارت R_j، احتمال پیدا شدن نابجایی در فاصله‌ی jb از نقطه‌ی رفع مانع شده است و به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۱۰۳-۱۴)

$$R_j = \rho_j/\rho \ .$$

بسامدهای آزادسازی و از آن‌رو نرخ‌های خزشی تعیین شده با استفاده از این مدل با آن‌هایی مقایسه می‌شوندکه از صعود تحریک شده در اثر جذب ترجیحی یا صعود در اثر تحریک تورمی محاسبه شده‌اند[۱۸].

۱۴-۲-۶ بی‌نقص شدن حلقه

دیگر برهم‌کنش ممکن میان تنش اعمال شده و حلقه‌های بین‌نشینی که می‌تواند کرنش خزشی را تولید کند، بی‌نقص شدن حلقه‌ها است. همان‌طوری‌که در فصل ۷ بحث شد، حلقه‌های نابجایی رشد کرده و در نتیجه ناپایدار و بی‌نقص شده تا بخشی از شبکه‌ی نابجایی شوند. این فرایند معادل با تولید نابجایی‌های متحرک است که در فرایند خزش به وسیله‌ی جذب ترجیحیِ القایی تنشی، جذب ترجیحی لغزشی یا صعود و لغزش تحریک شده با گرایش بین‌نشین‌ها سهیم می‌شوند. بیشینه‌ی شعاعی که یک حلقه می‌تواند رشد کند، R_{max}، به وسیله‌ی دانسیته‌ی حلقه‌ی کنترل شده و به صورت زیر مشخص می‌شود:

(۱۰۴-۱۴)

$$\frac{4\pi}{3}\rho_\ell R_{max}^3 = 1 \ .$$

هنگامی که حلقه‌ها برهم‌کنش می‌کنند، آن‌ها به یک‌دیگر پیوسته و در دانسیته‌ی نابجایی شبکه سهیم می‌شوند. برهم‌کنش میان نابجایی‌های تکی و حلقه‌ها منجر به بی‌نقص شدن می‌شود که هم‌چنین می‌توانند در شبکه سهیم شوند (فصل ۱۲، قسمت ۱۲-۳). هم‌چنان که دانسیته‌ی نابجایی‌ها افزایش می‌یابد، نرخ برهم‌کنش حلقه‌ها با شبکه افزایش می‌یابد و شعاع حلقه به مقداری در حدود چند طول

شبکه، $\rho_N^{-1/2}$، محدود می‌شود که ρ_N دانسیته‌ی نابجایی شبکه است. بی‌نقص شدن حلقه می‌تواند به کرنش خزشی تابشی نسبت داده شود زیرا حضور تنش می‌تواند به جوانه‌زنی حلقه‌های بی‌نقص با آرایش مطلوب کمک کند که در نتیجه منجر به افزایش احتمال بی‌نقص شدن می‌شود. اعمال تنش برشی در صفحه‌ی حلقه‌ها، تعداد بیش‌تری از حلقه‌ها را وادار خواهد کرد که برای تولید برش خالص از بلور که در شکل خزش ظاهر می‌شود، در جهت مطلوب تنش برش داده شوند. اگر ρ دانسیته‌ی کلی نابجایی‌ها باشد و ρ_s تعداد حلقه‌های نابجایی قرار گرفته روی صفحه‌ای باشد که تنش برشی برای آن بیشینه است، تعداد حلقه‌های بریده شده در جهتی که به وسیله‌ی لیویت[1] [۱۹] تعیین شده برابر است با:

(۱۰۵-۱۴)

$$\rho_1 = \frac{\rho_s \exp\left(\frac{\pi R_c^2 b\sigma}{kT}\right)}{\exp\left(\frac{\pi R_c^2 b\sigma}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\pi R_c^2 b\sigma}{kT}\right)},$$

که R_c، اندازه‌ی حلقه‌ی بحرانی برای بی‌نقص شدن (مقدار بیشینه به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۴-۱۰۴ تعیین شده) است، و σ تنش است. تعداد حلقه‌های برش داده شده در جهت مخالف برابر با $\rho_2 = \rho_s - \rho_1$ است، و کرنش ناشی از بی‌نقص شدن حلقه‌ها برابر است با:

(۱۰۶-۱۴)

$$\varepsilon = \bar{A} b_s (\rho_1 - \rho_2),$$

که $\bar{A}$ میانگین مساحت حلقه است، b_s بزرگی بردار برگرز واکنش تولید کننده‌ی کرنش است. با جایگذاری ρ_1 و ρ_2 در معادله‌ی ۱۴-۱۰۶ و میانگین‌گیری کرنش در تمام جهات ممکن حلقه (که یک فاکتور ۱٫۳۰ را نتیجه می‌دهد) می‌توان نوشت:

1. Lewthwaite

(۱۰۷-۱۴)

$$\varepsilon = \frac{\rho \bar{A} b_s}{30} \left[\frac{\exp\left(\frac{\pi R_c^2 b\sigma}{kT}\right) - \exp\left(\frac{\pi R_c^2 b\sigma}{kT}\right)}{\exp\left(\frac{\pi R_c^2 b\sigma}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\pi R_c^2 b\sigma}{kT}\right)} \right] .$$

عبارت در داخل کروشه می‌تواند به صورت تانژانت هایپر بلوکی نوشته شود و درنتیجه:

(۱۰۸-۱۴)

$$\varepsilon = \frac{\rho \bar{A} b_s}{30} \tanh(\pi R_c^2 b\sigma / kT) .$$

اگر آرگومان در مقایسه با ۱ کوچک باشد، سپس $\tanh x \sim x$ است و معادله‌ی ۱۴-۱۰۸ به صورت زیر در نوشته می‌شود:

(۱۰۹-۱۴)

$$\varepsilon = \frac{\rho \bar{A} b_s}{30} \pi R_c^2 b\sigma / kT .$$

اگر رشد حلقه به وسیله‌ی تورم تحریک شده باشد، سپس $\rho \bar{A} b_s$ با $\Delta \dot{V} / V$ جایگزین می‌شود، حجم حلقه‌ی $\pi R_c^2 b$ با حجم عیوب در حلقه‌ی $n_c \Omega$ برابر گرفته شده و عبارت $\frac{k_L^2}{k_L^2 + k_N^2}$ به مقدار محاسبه شده برای دانسیته‌ی نابجایی شبکه اضافه می‌شود تا نرخ خزش برحسب نرخ تورم محاسبه شود:

(۱۱۰-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\Delta \dot{V}}{V} \frac{k_L^2}{k_L^2 + k_N^2} \frac{\pi R_c^2 b\sigma / kT}{30} .$$

متویس و فینیس [۱۲] بیان کردند که شعاع بی‌نقص شدن در آلیاژهای آستنیتی بزرگ است و نرخ خزش می‌تواند قابل توجه باشد؛ اما به علت اندازه‌ی حلقه بحرانی کوچک در فلزات bcc، سهم آن کوچک خواهد بود.

۱۴-۲-۷ بازیابی خزش

تمام سازوکارهای خزش تابشی بحث شده تا این‌جا، رشد دانسیته‌ی نابجایی را مجاز کرده یا در آن سهیم شدند؛ اما هیچ‌گونه محاسبه‌ای برای حذف نابجایی‌ها با توجه به آن‌که در طول خزش رخ می‌دهند، ارایه نداده است. متویس و فینیس [۱۲] نرخ تغییر در دانسیته‌ی نابجایی را برحسب نرخ خزش بیان کردند:

$$\dot{\rho} = \frac{\dot{\varepsilon}}{bl} - 2\rho^{3/2} v_{\mathrm{c}} \,, \tag{۱۱۱-۱۴}$$

که l طول متوسط لغزش نابجایی و v_c سرعت صعود است. عبارت اول نرخ تولید نابجایی‌ها به علت خزش، معادله‌ی ۱۴-۱۴، و عبارت دوم اتلاف ناشی از نابودسازی است. با در نظر گرفتن حد حالت پایدار $\dot{\rho}=0$، نرخ خزش حالت پایدار برحسب دانسیته‌ی نابجایی بیان می‌شود به صورتی که:

$$\dot{\varepsilon} = 2bl\rho^{3/2} v_{\mathrm{c}} \,. \tag{۱۱۲-۱۴}$$

وابستگی تنشی به وسیله‌ی دانسیته‌ی نابجایی، سرعت صعود و طول لغزش تعیین شده است. دانسیته‌ی نابجایی مطابق با معادله‌ی ۱۴-۷ (که در آن عبارت، α در مخرج در داخل خوشه‌ها ظاهر شده است) $\rho = \dfrac{\sigma^2}{\alpha^2 \mu^2 b^2}$ با تنش تغییر می‌کند و عبارت σ^3 را در نرخ خزش تعیین شده در معادله‌ی ۱۴-۱۱۲ سهیم می‌کند. برای جذب ترجیحی القایی تنشی، از معادله‌ی ۱۴-۸۲ می‌توان نوشت:

$$v_{\mathrm{SIPA}} = \frac{2}{9}\frac{\Omega}{b}\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}\right) \,, \tag{۱۱۳-۱۴}$$

و با جایگذاری در معادله‌ی ۱۴-۱۱۲ و برابر قرار دادن $\Omega = b^3$ نتیجه گرفته می‌شود که:

(۱۱۴-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{4}{9}\frac{\sigma^3 l}{\alpha^3 \mu^3}\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}\right) .$$

اگر l به وسیله‌ی موانع غیرقابل نفوذ ثابت شده باشد، در نتیجه مستقل از تنش می‌شود و وابستگی تنشیِ نرخ خزش برابر با σ^3 می‌شود. بنابراین، اگر l به وسیله‌ی دانسیته‌ی نابجایی تعیین شود، سپس با جایگذاری برای l از معادله‌ی ۱۴-۸۴ و بیان دانسیته‌ی نابجایی برحسب تنش، معادله‌ی ۱۴-۷ می‌توان نوشت:

(۱۱۵-۱۴)

$$\dot{\varepsilon} = \frac{4}{9}\frac{\sigma^2 b}{\sqrt{\pi}\alpha^2 \mu^2}\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{i}} C_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}} + z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} D_{\mathrm{v}} C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}\right) ,$$

که وابستگی تنشی برابر با σ^2 است که مشابه با وابستگی تنشی در جذب ترجیحی لغزشی و صعودی مشخص شده در معادله‌ی ۱۴-۹۵ است.

۱۴-۲-۸ خزش نفوذی: چرا هیچ‌گونه اثری از پرتودهی وجود ندارد

تمام سازوکارهای خزش تابشی بحث شده تا این‌جا بر پایه‌ی فعالیت نابجایی‌ها هستند زیرا مادامی که خزش نفوذی سازوکار خزش حرارتی موجود است که به وسیله‌ی تابش تأثیر نمی‌پذیرد و می‌تواند به صورت زیر تعریف شود. نفوذ خزشی نابارو ـ هرینگ در قسمت ۱۴-۱-۲ را در نظر بگیرید. مشخص شده که خزش با یک تفاوت در غلظت تعادلی جاهای خالی در مرزدانه‌های آرایش یافته در موازات جهت‌های تنش فشاری و کششی، معادله‌ی ۱۴-۴۵، تحریک شده است. تحت پرتودهی، معادله‌ی ۱۴-۴۷ برای گنجاندن بین‌نشین‌ها به صورت زیر اصلاح می‌شود:

(۱۱۶-۱۴)

$$J_{\mathrm{v}} = D_{\mathrm{v}}\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{v}}}{\mathrm{d}x} - D_{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{i}}}{\mathrm{d}x} \approx \kappa D_{\mathrm{v}}\frac{C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{t}} - C_{\mathrm{v}}^{\mathrm{c}}}{d} - \kappa D_{\mathrm{i}}\frac{C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{t}} - C_{\mathrm{i}}^{\mathrm{c}}}{d} .$$

با جایگذاری C_v^t و C_v^c از معادله‌های ۱۴-۴۵ و برای C_i^t و C_i^c با استفاده از معادله‌های مشابه و با علامت‌هایی معکوس روی آرگومان‌های عبارات نمایی به علت اثر مخالف تنش روی بین‌نشین‌ها، می‌توان نوشت:

(۱۴-۱۱۷)

$$J_v = \kappa D_v \frac{C_v^0 \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) - C_v^0 \exp\left(-\frac{\sigma\Omega}{kT}\right)}{d} - \kappa D_i \frac{C_i^0 \exp\left(-\frac{\sigma\Omega}{kT}\right) - C_i^0 \exp\left(\frac{\sigma\Omega}{kT}\right)}{d}.$$

با اعمال این تقریب که $\frac{\sigma\Omega}{kT}$ در مقایسه با یک کوچک است، داریم:

(۱۴-۱۱۸)

$$J_v = \frac{2\kappa\sigma\Omega}{dkT}\left(D_v C_v^0 + D_i C_i^0\right) \approx \frac{2\kappa\sigma\Omega}{dkT} D_v C_v^0,$$

که این تقرب به علت این حقیقت است که اگرچه D_i از D_v بزرگ‌تر است، ولی C_v^0 بسیار بزرگ‌تر از C_i^0 است. شار جای خالی تعیین شده در معادله‌ی ۱۴-۱۱۸ مشابه مقدار تعیین شده در معادله‌ی ۱۴-۴۷ است و در نتیجه هیچ‌گونه اثری از پرتودهی روی خزش نابارو – هرینگ وجود ندارد که به این دلیل است که نرخ خزش به وسیله‌ی تفاوت در مقادیر تعادلی عیوب در مرزدانه‌ها تحریک شده است و این مقادیر وابسته به غلظت جاهای خالی یا بین‌نشین‌ها در زمینه نیست. پرتودهی به صورت ساده‌ای می‌تواند برای افزایش جریان عیوب به هر مرز به صورت برابر، بدون تغییری در مقدار خالص به‌کار گرفته شود. آرگومان‌های مشابهی به خزش کوبلی اعمال می‌شود. بدین لحاظ خزش نفوذی به وسیله‌ی پرتودهی تأثیر نمی پذیرد و نمی‌تواند در خزش تابشی سهیم باشد.

۱۴-۲-۹ مقایسه‌ی نظریه با اطلاعات خزش

خزش اولیه بسیار مشابه با خزش حرارتی تشریح می‌شود. خزش حرارتی با یک نرخ خزشی که در ابتدا بالا است و با مقدار پرتوگیری یا جریان پرتودهی کاهش می‌یابد و به حالت پایدار یا خزش ثانویه که به صورت کلی با مقدار پرتوگیری خطی است، تغییر حالت می‌دهد. تفاوت بین خزش تابشی و خزش حرارتی در بزرگی است. نرخ‌های خزش تابشی از خزشی که صرفاً ناشی از فرایندهای حرارتی است بسیار بزرگ‌تر است. از سازوکارهای بحث شده، محاسبات جوانه‌زنی ترجیحی القایی تنشی برای ماهیت‌گذرای منطقه‌ی خزش اولیه مناسب است؛ اما نمی‌تواند خزش حالت پایدار را تشریح کند. در طول خزش حالت پایدار، نرخ خزش متناسب با نرخ تورم است و ارتباط آن‌ها با معادله‌ی تجربی زیر توضیح داده می‌شود [۲۰]:

(۱۱۹-۱۴)

$$\dot{\bar{\varepsilon}}/\bar{\sigma} = B_0 + D\dot{S}\,,$$

که $\dot{\bar{\varepsilon}}/\bar{\sigma}$ نرخ کرنش مؤثر در واحد تنش و dpa است و $\bar{\sigma}$ تنش مؤثر، B_0 وارفتگی[1] خزشی، D ضریب جفت شوندگی خزش ـ تورم و $\dot{S}$ نرخ تورم حجمی لحظه‌ای در dpa است. در غیاب تورم، فقط عبارت اول مناسب است و معادله‌ی وابستگی خزشی به تنش با توان $n = ۱$ را پیش بینی می‌کند:

(۱۲۰-۱۴)

$$\dot{\bar{\varepsilon}} = B_0\bar{\sigma}\phi\,.$$

معادله‌ی ۱۴-۱۱۹ تجربی است ولی این رابطه به صورت نظری نیز می‌تواند تعیین شود. معادله‌ی ۸-۱۲۲ برای تورمی که در آن نشر حرارتی جاهای خالی و بازترکیبی قابل چشم‌پوشی هستند، یادآوری می‌شود. با فرض آن‌که تنها چاهک‌های عیوب نقطه‌ای، حفره‌ها و نابجایی‌ها هستند و آن‌که شدت چاهک نابجایی بسیار بزرگ‌تر از شدت چاهک حفره است، سپس معادله‌ی ۸-۱۲۲ به صورت زیر نوشته می‌شود:

1. Compliance

(۱۲۱-۱۴)

$$\dot{R} = \frac{K_0(z_{\mathrm{i}} - z_{\mathrm{v}})\Omega}{Rz_{\mathrm{i}}z_{\mathrm{v}}\rho_{\mathrm{d}}} ,$$

و نرخ تورم حفره برابر است با:

(۱۲۲-۱۴)

$$\dot{V} = 4\pi R^2 \dot{R}\rho_V = \frac{4\pi R K_0 \rho_V \Omega (z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} - z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}})}{z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}} \rho_{\mathrm{d}}} .$$

با جایگذاری عبارت موجود برای C_{i} از معادله‌های ۵-۳۱ و ۵-۶۴ در معادله‌ی ۱۴-۸۲ برای خزش جذب ترجیحیِ القایی تنشی که فقط عبارت اول باقی‌مانده است، نرخ خزش می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

(۱۲۳-۱۴)

$$\dot{\varepsilon}_{\mathrm{SIPA}} = \frac{2}{9}\frac{\Omega\rho_{\mathrm{d}}\Delta z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} K_0}{z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}\rho_{\mathrm{d}}} ,$$

و نسبت نرخ خزش به تورم برابر است با:

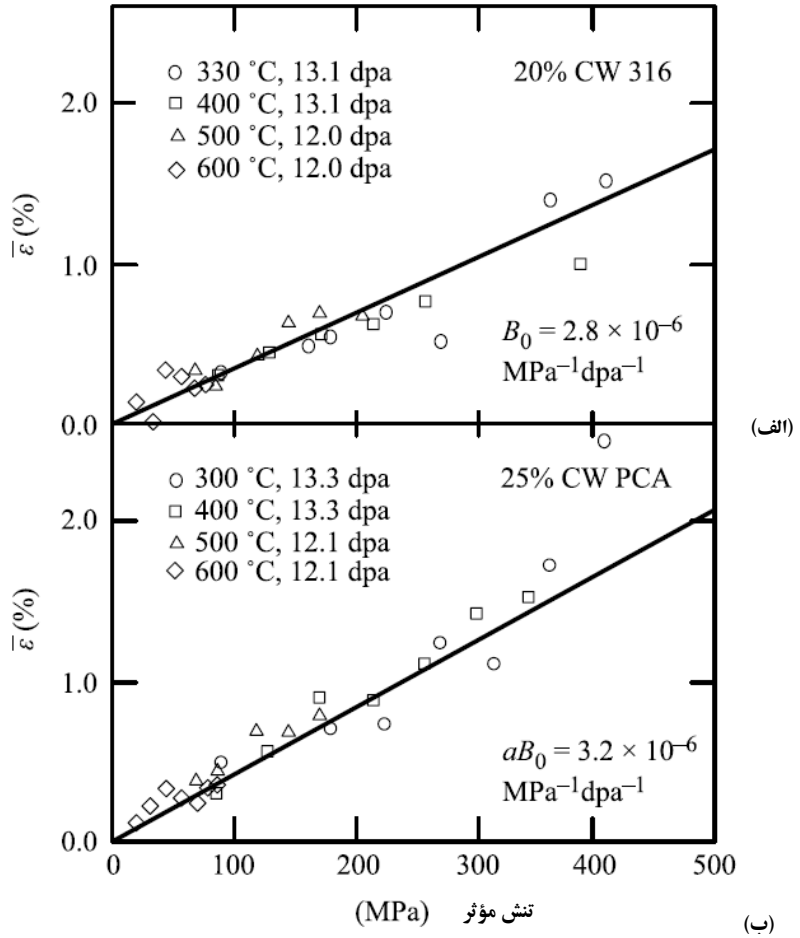
(۱۲۴-۱۴)

$$\frac{\dot{\varepsilon}_{\mathrm{SIPA}}}{\dot{V}} = \frac{2}{9}\delta\frac{z_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}\rho_{\mathrm{d}}}{4\pi R_{\mathrm{V}}\rho_{\mathrm{V}}} ,$$

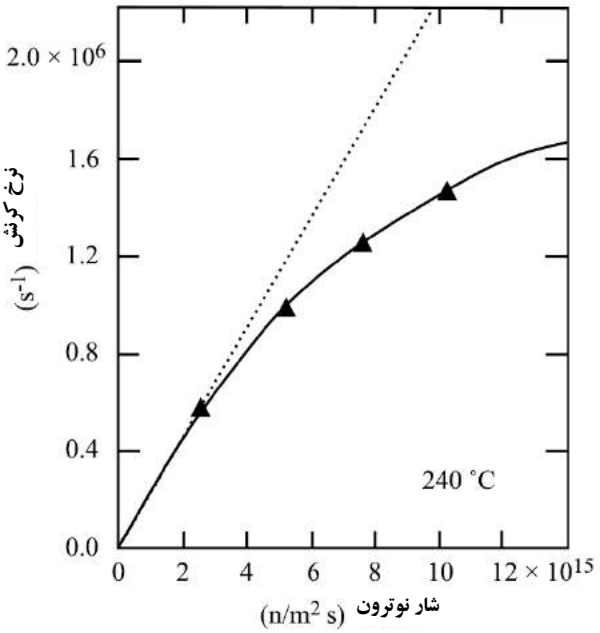
که $\delta = \frac{\Delta z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}}{\left(z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} - z_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}\right)}$ است. وابستگیِ خطی نرخ خزش به تورم حفره‌ها به خزش صعودی ـ لغزشی نیز اعمال می‌شود.

اطلاعات قابل توجهی برای تأیید این وابستگی وجود دارد، بعضی از اطلاعات متقاعد کننده در شکل ۱۴-۱۳ نشان داده شده است که یک مقدار تقریبیِ برابر با ۳×۱۰^{-۶} $\mathrm{MPa^{-1}dpa^{-1}}$ را برای B_0 نشان

می‌دهد. وابستگیِ نرخ خزشی به تنش تا توان $n = ۱$ تأییدی را برای سازوکار جذب ترجیحیِ القایی تنشی خزش فراهم می‌کند. لازم به ذکر است که کرنش‌ها در سراسر محدوده‌ی مورد مطالعه‌ی مستقل از دما ظاهر می‌شوند، که خزش تابشی را به منزله‌ی سازوکار پشتیبان نرخ کرنش از خزش حرارتی تأیید می‌کند که وابستگی دمایی بسیار زیادی را دارد. هم‌چنین مشاهده شده است که نرخ خزش در دماهای پایین به صورت $\phi^{1/2}$ تغییر می‌کند، شکل ۱۴-۱۴، که وابستگی B_0 به شار را به صورت (نرخ



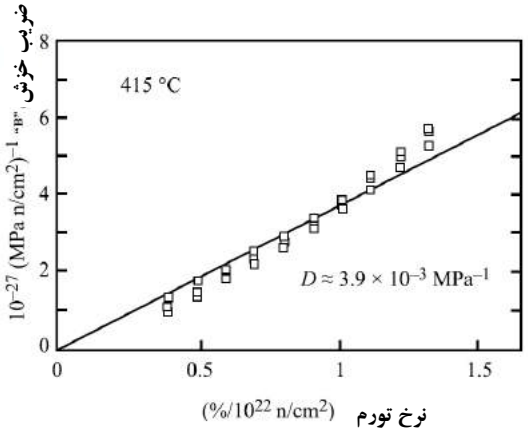
شکل ۱۴-۱۳. وابستگی کرنش خزشی بهنجار شده به تنش مؤثر در (الف) 316 CW 20% و (ب) CW PCA 25%، در گستره‌ی دمایی و در درون محدوده‌ی مقدار پرتوگیری باریک از ۱۲٫۰ تا ۱۳٫۳ dpa [۲۰].



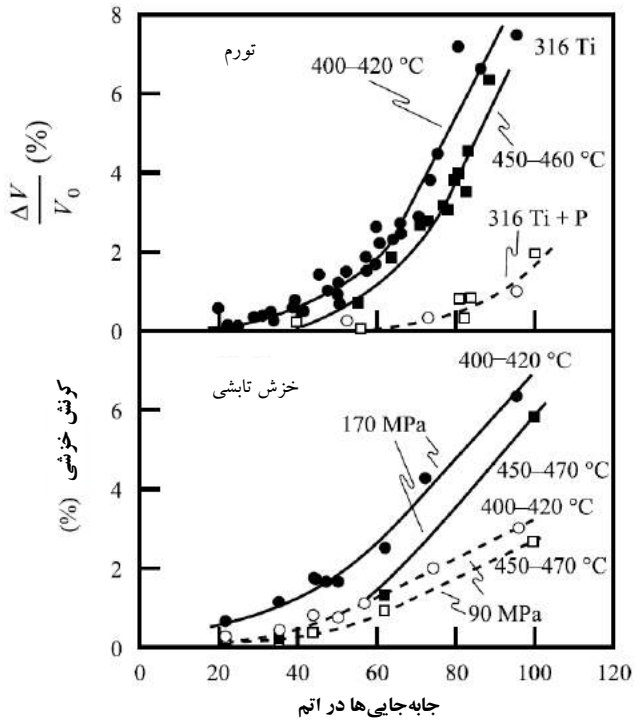
شکل ۱۴-۱۴. خزش تابشی در نیکل چند بلور بازپخت شده و پرتودهی شده در دمای ^{o}C ۲۴۰ در RTNS-II با نوترون‌های MeV ۱۴ [۲۰].

dpa) نتیجه می‌دهد. هنگامی که تورم آغاز می‌شود، نرخ خزش مطابق با عبارت $\dot{DS}$ در معادله‌ی ۱۴-۱۱۹، با تورم تحریک می‌شود. بعضی از نتایج اولیه و متعاقد کننده‌ی مؤید این جفت‌شدگی و اتصال بین خزش و تورم در شکل ۱۴-۱۵ برای فولاد زنگ نزن آستنیتی ۳۰۴ بازپخت شده و پرتودهی شده در EBR-II نشان داده شده است. این اتصال پیش‌تر به وسیله‌ی ارتباط قوی بین خزش و تورم در آزمایشات لوله‌های تحت فشار در رآکتور PHENIX (شکل ۱۴-۱۶) تأیید شده بود. مقادیر نمونه‌وار برای D تقریباً برابر با MPa^{-1} ۱۰$^{-۲}$ است. گارنر[1] [۲۰] یک توضیح بسیار کاملی از وابستگی‌های B_0 و D به عوامل مختلف مؤثر بر خزش ارایه کرد. درحالی‌که وارفتگیِ خزشی و عبارت اتصال ثوابت دقیقی نیستند، رابطه‌ی میان خزش، تنش، شار و تورم به خوبی به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۴-۱۱۹ نشان داده شده است.

1. Garner



شکل ۱۴-۱۵. هم‌بستگی ضرایب خزش تابشی با نرخ‌های تورم برای پرتودهی فولاد زنگ نزن بازپخت شده ۳۰۴ در EBR-II [۲۰].



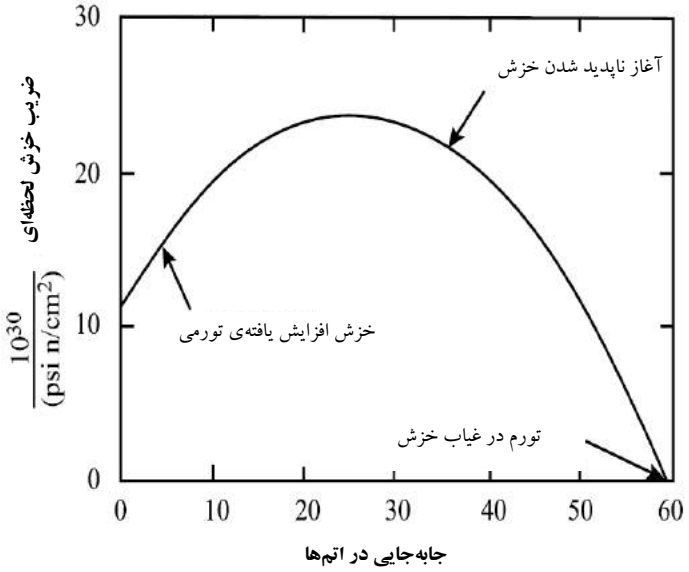
شکل ۱۴-۱۶. کرنش‌های تورمی و خزشی در دو فولاد فرانسوی پرتودهی شده در تیوپ‌های تحت فشار در رآکتور PHENIX [۲۰].

پیچیدگی خزش تابشی و وابستگی شدید آن به ریزساختار پرتودیده به وسیله‌ی گارنر و همکارنش [۲۱] مشاهده و ذکر شده است که در سطوح بالای پرتوگیری، نرخ خزش تابشی می‌تواند تا صفر کاهش یابد. این پدیده در شکل ۱۴-۱۷ نشان داده شده است که در آن ضریب خزش لحظه‌ای در فولاد زنگ نزن پرتودیده در EBR-II در دمای $۵۵۰^{o}C$ به مقدار بیشینه افزایش می‌یابد و سپس در مقادیر پرتوگیری بالا تا صفر تنزل می‌یابد.

لازم به ذکر است که تغییر شکل تا نقطه‌ای که وارفتگیِ خزش به صفر نزدیک می‌شود متوقف نشده و تغییر شکل می‌تواند به صورت کلی به وسیله‌ی کرنش ناشی از تورم، $\varepsilon_{linear} = \varepsilon_{swelling}/3$ محاسبه شود.

این رخداد منشأ در گسترش شبکه‌ی نابجایی و ریزساختار حلقه دارد. تحت پرتودهی و تنش اعمال شده، خزش به ناهمسان‌گردی ریزساختار نابجایی حساس است و برای فرایندهایی نظیر جذب ترجیحیِ القایی تنشی و جذب ترجیحی لغزشی، علاوه بر جوانه‌زنی ترجیحی القایی تنشی محاسبه می‌شود. در غیاب تورم، درجه‌ی ناهمسان‌گردی با مقدار پرتوگیری افزایش می‌یابد. هنگامی که حفره‌ها شروع به شکل‌گیری می‌کنند، آن‌ها جاهای خالی را مصرف می‌کنند و شار تطبیقی بین‌نشین‌ها از نابجایی‌ها نسبت به مورد فقدان حفره و تسلط نابجایی افزایشی را در نرخ خزش ایجاد می‌کنند که مصادف با شروع تورم است. هنگامی که حفره‌ها چاهک‌های غالب می‌شوند، آن‌ها جاهای خالی و بین‌نشین‌ها را در تعداد زیاد جذب می‌کنند.

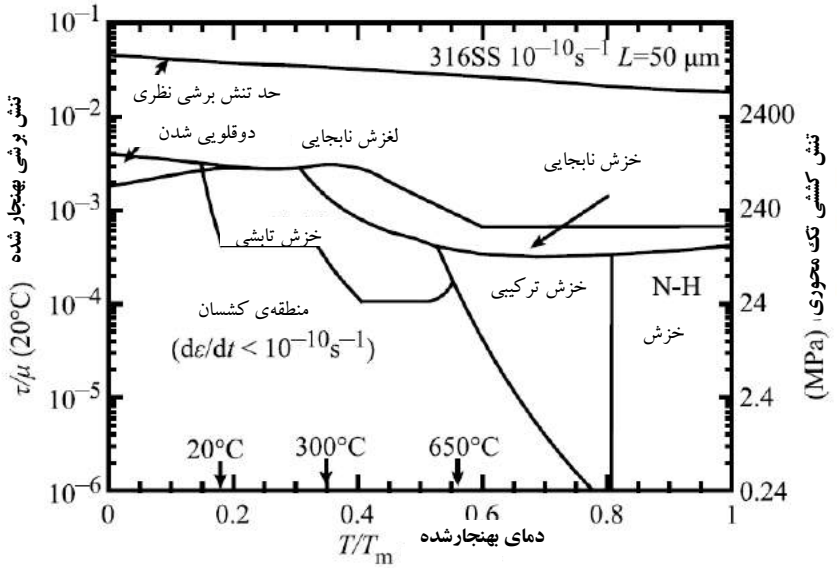
در نتیجه علاوه بر کاهش در نرخ خزش ایجاد شده به وسیله‌ی شار کوچک بین‌نشین‌های اضافه به نابجایی‌ها، اشباع در تورم به علت جذب پایین جاهای خالی اضافه نیز وجود دارد. وابستگی خزش به ترکیب و شرایط متالوژیکی تا درجه‌ی زیادی به وسیله‌ی پاسخ تورم به آن عوامل در منطقه‌ای تعیین می‌شود که خزش با تورم کنترل می‌شود.



شکل ۱۴-۱۷. ضریب خزش لحظه‌ای تعیین شده از اندازه‌گیری‌های کرنشی تیوپ‌های تحت فشار از فولادهای زنگ نزن، پرتودهی شده در رآکتور EBR-II در ^{o}C ۵۵۰ [۲۰].

۱۴-۲-۱۰ اصلاح تابشی نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل

نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ می‌تواند برای محاسبه‌ی خزش تابشی اصلاح شود. شکل ۱۴-۱۸ نقشه‌ی تغییر شکل برای SS ۳۱۶ را نشان می‌دهد که به شیوه‌ی مشابه با شکل ۱۲-۲۶ در نرخ کرنشی $10^{-10}\ s^{-1}$ ایجاد شده است[۲۲]. در این نرخ کرنشی، خزش تابشی در ناحیه‌ی دمای متوسط مشاهده می‌شود. در زیر ^{o}C ۲۰۰، تحرک بین‌نشینی و در نتیجه نرخ خزش تابشی کاهش می‌یابد. در بالای ^{o}C ۶۰۰، خزش کوبلی سازوکار غالب خزش است. بنابراین منطقه‌ی خزش تابشی، در دماهای متوسط و تنش‌های متوسط قرار گرفته و می‌تواند به وسیله‌ی معادلات ترکیبی برای وابستگی نرخ کرنشی خزش تابشی تعیین شده در معادله‌ی ۱۴-۱۱۹ تشریح شود که در آن عبارت اول ناشی از خزش نابجایی (بخش دمای پایین منطقه‌ی خزش تابشی) و عبارت دوم ناشی از خزش تحریک شده‌ی تورمی (بخش دمای بالا) است. اثر خالص پرتودهی، گسترش وابستگیِ سرعتی تغییر شکل به تنش‌های پایین‌تر است.



شکل ۱۴-۱۸. نقشه‌ی سازوکار تغییر شکل برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده تا ۱ dpa برای نرخ کرنشی پلاستیک 10^{-10} s^{-1} [۲۲].

۱۴-۳ رشد تابشی و خزش در آلیاژهای زیرکونیوم

علاوه بر تورم و خزش، پدیده‌ی دیگری نیز رخ می‌دهد که منجر به کرنش‌هایی در بعضی از مواد تحت پرتودهی می‌شود. این پدیده *رشد* نامیده می‌شود. *تورم*، انبساط حجمی همسان‌گرد جامد بدون تنش خارجی است. *خزش*، اعوجاج جامد با حفظ حجم تحت تنش اعمالی است. *رشد*، اعوجاج جامد با حفظ حجم بدون اعمال تنش است. رشد فقط در سیستم‌های غیرمکعبی مشاهده می‌شود زیرا این پدیده به شدت وابسته به ناهمسان‌گردی ساختار بلوری است. به همین دلیل، رشد تابشی می‌تواند در فلزات hcp مانند زیرکونیوم و منیزیوم قابل توجه باشد. زیرکونیوم در دمای کم‌تر از ^{o}C ۸۶۳ در فاز α (hcp) پایدار است و بین دمای ^{o}C ۸۶۳ تا T_m در فاز β (bcc) پایدار است. زیرکونیوم آلفا نسبت c/a ایده‌آل ۱٫۵۸۹ دارد. سه نوع صفحه، نقش کلیدی را در تغییر شکل و رفتار رشد زیرکونیوم آلفا و آلیاژهای آن ایفا می‌کنند:

- منشور I $(10\bar{1}0)$ و منشور II $(10\bar{2}0)$
- هرم $(11\bar{2}1)$، $(11\bar{2}2)$، $(11\bar{1}2)$

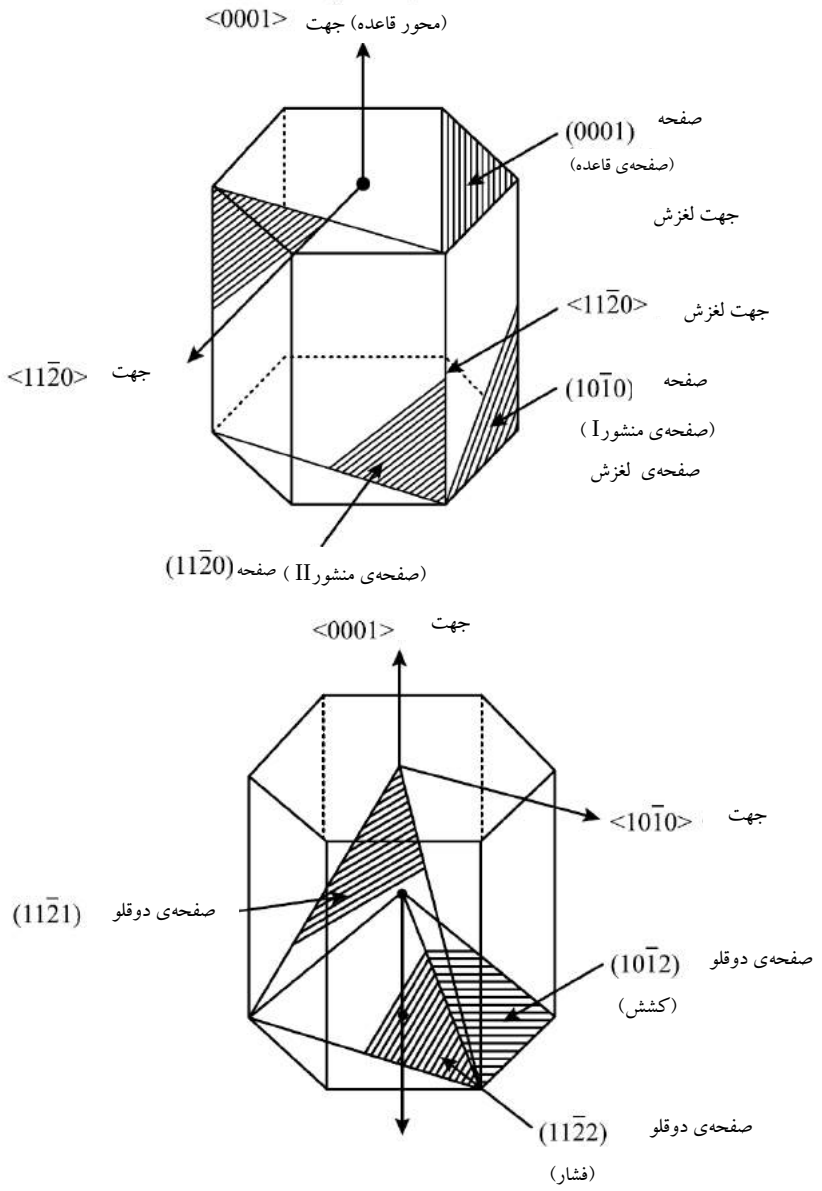
- قاعده (0001)

هم‌چنین صفحات $(10\bar{1}2)$ و $(11\bar{2}2)$ نیز بسیار حایز اهمیت هستند. صفحات منشور، هرم و قاعده در شکل ۱۴-۱۹ نشان داده شده است.

تغییر شکل در فلزات hcp به وسیله‌ی لغزش و دوقلویی شدن رخ می‌دهد. برای تنش‌های در طول محور a، لغزش اصولاً روی صفحه‌ی منشور I $(10\bar{1}0)$ در جهت $(11\bar{2}0)$ رخ می‌دهد. در تنش‌های بالاتر، لغزش روی صفحات $(10\bar{1}1)$ و $(1\bar{1}2)$ هرم رخ می‌دهد و در یک جهت $\langle c+a \rangle$ یا در طول $(11\bar{2}3)$ رخ می‌دهد. در دماهای بالاتر، لغزش می‌تواند روی صفحه‌ی قاعده‌ی (0001) در جهت a، $\langle 1\bar{2}10 \rangle$ رخ دهد. دوقلویی شدن هم‌چنین یک حالت تغییر شکل معمول در فلزات hcp است. دوقلویی شدن برای تنش‌هایی که دارای مؤلفه در جهت c روی یکی از چهار صفحه هرمی هستند، رخ می‌دهد. سیستم‌های لغزشی برای تغییر شکل در طول جهت c و تابعی از دما در جدول ۱۴-۱ مشخص شده است.

جدول ۱۴-۱. سیستم‌های لغزشی برای تغییر شکل در زیرکونیوم.

	کشش (محور C)		فشار (محورC)	
دما	صفحه	جهت	صفحه	جهت
پایین	$(11\bar{2}1)$	$< \bar{1}\bar{1}26 >$	$(11\bar{2}2)$	$< \bar{1}\bar{1}23 >$
بالا	$(10\bar{1}2)$	$< \bar{1}011 >$	$(10\bar{1}1)$	$< \bar{1}012 >$



شکل ۱۴-۱۹. صفحات منشوری، هرمی و قاعده در یک ساختار hcp [۲۳].

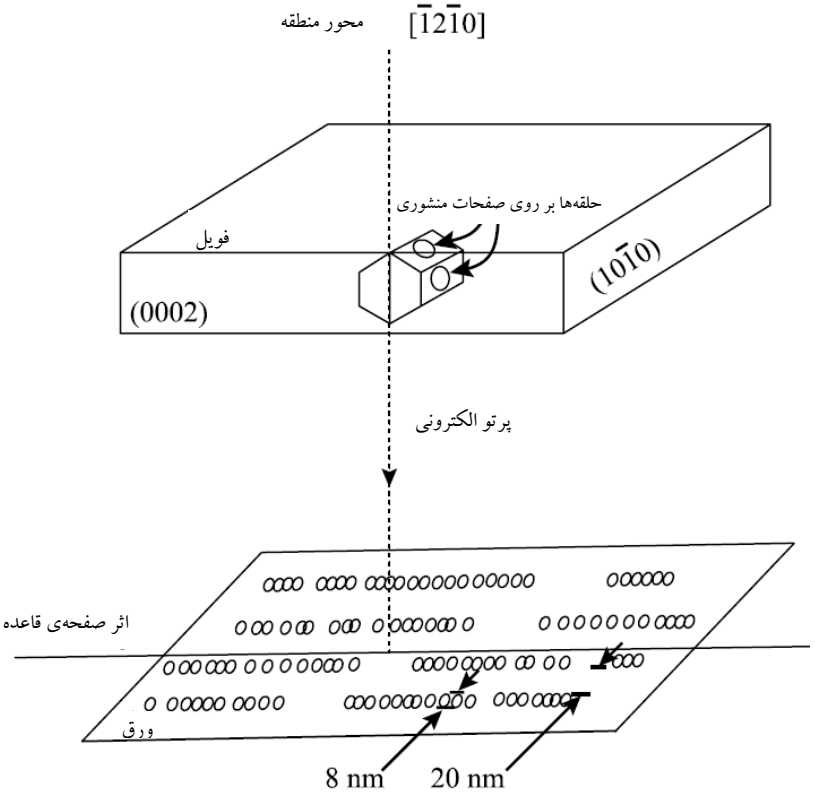
لازم به ذکر است که سطوح متفاوت از تنش برای به‌دست آوردن سازوکارهای تغییر شکل مختلف لازم است. از آن‌رو تنش مورد نیاز برای ایجاد تغییر شکل پلاستیک تابعی از جهت است. بلوری که ویژگی‌های وابسته به جهت دارد، ناهمسان‌گرد نامیده می‌شود.

روش‌های تولید تجاری، منجر به تولید ترکیبات زیرکونیومی شده است که در آن دانه‌ها در طول جهت‌های ترجیحی بلور هم‌محور شده‌اند. آرایش ترجیحی جهت‌های بلوری در معنای بافت شناخته می‌شود و مفهوم بافت در ترکیبات زیرکونیومی این است که ماهیت ناهمسان‌گرد تک بلور در ماده‌ی چند بلوری نیز بروز کند. به علاوه بافت با تغییر شکل تغییر می‌کند و این به منزله‌ی چرخش بافت شناخته می‌شود. بافت به وسیله‌ی تعداد f_i یا کسر قطب‌های قاعده در جهت i تعیین مقدار می‌شود که $i = L, T, N$ به ترتیب برای طولی، عرضی و عمودی است. لازم به ذکر است که همیشه $f_L + f_T + f_N = 1$ است.

۱۴-۳-۱ ریزساختار آلیاژهای زیرکونیوم پرتودیده

به منظور فهم رشد و خزش در جامد ناهمسان‌گرد، باید استنباطی از ماهیت ریزساختار پرتودیده وجود داشته باشد. یکی از نتایج اولیه‌ی ساختار بلور زیرکونیوم و آلیاژهای آن نفوذ ناهمسان‌گرد است [۲۴]. نتیجه‌ی دیگر این است که کرنش انبساطی خود بین‌نشین‌ها در زیرکونیوم در قبال اکثر جامدات مکعبی کوچک‌تر است که منجر به برهم‌کنش‌های کشسان کوچک‌تر بین نابجایی‌ها و بین‌نشین‌ها می‌شود. در نتیجه منجر به افزایش پایداری حلقه‌ی جای خالی نیز می‌شود. در حقیقت، این عدم انطباق انبساطی کوچک ممکن است که آسانیِ تطبیق اتم‌های گازی بین‌نشینی را تشریح کند. ریزساختار پرتودیده آلیاژهای زیرکونیوم می‌تواند به صورت زیر خلاصه شود.

حلقه‌های بین‌نشینی و جای خالی نوع $\langle a \rangle$ در صفحه‌ی منشوری $\langle 1120 \rangle$ در طول پرتودهی نوترونی جوانه زده و رشد می‌کنند. هر دو در دماهای بین ۳۰۰ و ۴۵۰ ^{o}C در تعداد تقریباً برابری موجود هستند؛ اما حلقه‌های جای خالی در بالای این محدوده به علت نشر حرارتی ناپایدار می‌شوند. تعداد نسبی حلقه‌های جای خالی و بین‌نشینی وابسته به نزدیکی چاهک‌های گرایش‌دار برای جاهای خالی و بین‌نشین‌ها است. حلقه‌های نابجایی نوع $\langle a \rangle$ خودشان را در لایه‌های موازی با صفحه‌ی قاعده همان‌طوری منظم می‌کنند که در شکل ۱۴-۲۰ نشان داده شده است.



شکل ۱۴-۲۰. دیاگرام شماتیک از آرایش حلقه‌های نابجایی روی صفحات منشوری در زیرکونیوم پرتودهی شده [۲۵].

در مقادیر پرتوگیری بالای حدود n/m^2 $۱۰^{۲۵} \times ۲٫۵$، در محدوده‌ی دمایی ۳۰۰ تا ^{o}C ۵۰۰، مؤلفه‌های $\langle c \rangle$ نابجایی‌ها شروع به گسترش روی صفحات هرمی و قاعده می‌کنند. ترکیب آخر حلقه‌های جای خالی بردار برگرز $1/6\langle 2023 \rangle$ را دارند. این عقیده وجود دارد که حلقه‌های جای خالی قاعده در آبشارهای برخوردی جوانه می زنند و پایداری خودشان را مدیون عناصر حل شونده‌ای هستند که انرژی نقص در چیده شدن را کاهش داده و خودشان را در اندازه‌ی کوچک پایدار می‌سازند. جدایش ناخالصی‌ها در نابجایی‌های نزدیک حلقه‌ها یا نفوذ ناهمسان‌گرد، احتمالاً عوامل بسیار مهم کنترل کننده‌ی رشد حلقه هستند. عوامل اضافی که در مؤلفه‌های $\langle c \rangle$ حلقه‌ها مهم هستند، تنش و بزرگی بردار برگرز هستند.

در همه‌ی دماها، رشد حلقه‌ی نابجایی در طول پرتودهی در شبکه سهیم است و بازیابی شبکه‌ی نابجایی در دماهای کم‌تر از ^{o}C ۴۰۰ قابل توجه نیست. مؤلفه‌ی $\langle c \rangle$ چاهک‌های جای خالی احتمالاً چاهک‌های جای خالی خالص هستند و نابجایی‌های نوع $\langle a \rangle$ شاید چاهک‌های بین‌نشینی خالص باشند. این حقیقت که مؤلفه‌ی $\langle c \rangle$ حلقه‌ها روی صفحات قاعده در اصل مشخصه‌ی جای خالی را دارند، هم‌چنین دلالت بر این دارد که مؤلفه‌ی $\langle c \rangle$ نابجایی‌های شبکه نیز چاهک‌های جای خالی هستند زیرا آن‌ها به شیوه‌ی مشابهی صعود می‌کنند.

مرزهای دانه در شکل چاهک‌هایی برای عیوب بین‌نشینی در طول پرتودهی زیرکونیوم بازپخت شده به‌کار گرفته می‌شوند. گرایش، وابسته به آرایش مرزدانه‌ها و برای صفحات مرزدانه‌ای کمینه هستند که موازی با صفحه‌ی (0001) قاعده است. حفره‌ها می‌توانند در زیرکونیوم در دماهای بین ۳۵۰ و ^{o}C ۵۰۰ تشکیل شوند، و تشکیل آن‌ها یک تابع قوی از ناخالصی‌ها و حضور گازهای غیرحل شونده است.

هنگامی که حفره‌ها تشکیل می‌شوند، تمایل دارند که در ذرات فاز دوم قرار گیرند. در حقیقت، فقدان گازهای انحلال ناپذیر احتمالاً یکی از دلایل ناپایداری حفره‌ها و در عوض پایداری مؤلفه‌ی $\langle c \rangle$ حلقه‌ها است. در فلزات مکعبی، گازهای انحلال‌ناپذیر نقش بسیار مهمی را در پایداری خوشه‌های جای خالی کوچک در برابر تخریب حلقه‌های جای خالی دارند.

در پایان، پرتودهی تشکیل (ZrSn یا ZrNb)، انحلال یا توزیع مجدد و رسوب‌گذاری مجدد فازهای بین فلزی حاوی زیرکونیوم، آهن و کروم یا نیکل را وابسته به دما، مقدار عناصر حل شده و مقدار پرتوگیری القا می‌کند. تعادل مجدد عناصر حل شده در زمینه می‌تواند روی فرایندهای خزش و رشد تأثیر داشته باشد.

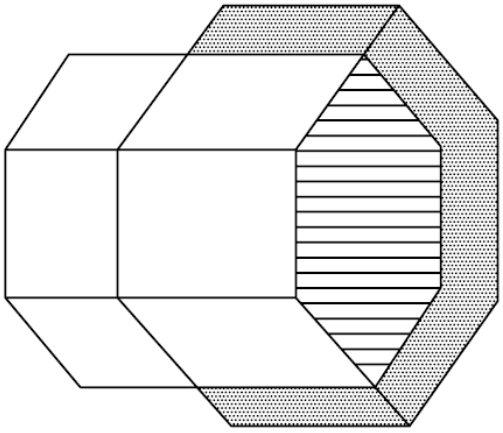
۱۴-۳-۲ رشد تابشی

فهم رشد در تک بلور زیرکونیوم بسیار آسان است. اندازه‌گیری‌های رشد تک بلور زیرکونیوم در ابتدا به وسیله‌ی باکلی[1] در سال ۱۹۶۲ [۲۶] گزارش شد. تغییر شکلی که رخ می‌دهد شامل انبساطی در طول محور a و انقباضی در طول محور c با بزرگی است که منجر به صفر شدن تغییر حجم کلی شبکه می‌شود، که با مفهوم رشد در شکل فرایند اعوجاج با حجم ثابت سازگار است. نتایج این مشاهدات

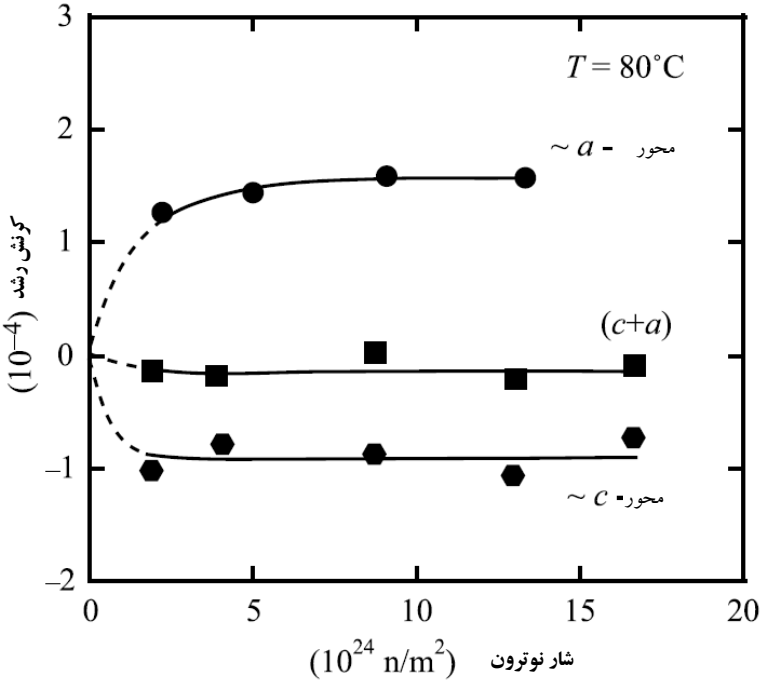
1. Buckley

منجر به یکی از اولین مدل‌های رشد تابشی شد که این مدل بین‌نشین‌های متراکم شده به صورت حلقه‌های نابجایی روی صفحات منشوری قرار گرفته و جاهای خالی از مناطق تهی شده به منظور تشکیل حلقه‌های جاهایِ قرار گرفته روی صفحات قاعده تجزیه می‌شوند. همان‌طوری‌که به صورت شماتیک در شکل ۱۴-۲۱ نشان داده شده است این فرایند معادل با انتقال اتم‌ها از صفحات قاعده به صفحات منشوری از طریق عیوب نقطه‌ای القایی تابشی است. کرنش‌های رشد تک بلور زیرکونیوم به صورت تابعی از جریان نوترونی در شکل ۱۴-۲۲ نشان داده شده است که در آن کرنش رشد مثبت بزرگ در جهت $\langle a \rangle$، کرنش رشد منفی در جهت $\langle c \rangle$ و کرنش تقریباً صفر در جهت $\langle c+a \rangle$ وجود دارد. مشاهدات تفصیلی TEM [۲۸، ۲۹] از ساختار حلقه‌ی نابجایی زیرکونیوم نشان می‌دهد که رشد تابشی را متحمل شده است. تمام حلقه‌های نابجایی القایی تابشی بردارهای برگرز از نوع $b = 1/3\,11\bar{2}0$، یا حلقه‌های نوع $\langle a \rangle$ را دارند و هیچ نشانه‌ای از مؤلفه‌های $\langle c \rangle$ حلقه‌ها نیست. مادامی که حلقه‌هایی با بردارهای برگرز نوع $\langle c \rangle$ بتوانند برای انبساط محور a محاسبه شوند، آن‌ها برای انقباض محور c محاسبه نمی‌شوند. در حقیقت، بعد از کرنش اولیه در حدود $۱۰^{-۴}$، رشد سریعاً به اشباع می‌رسد. پرتودهی تا مقادیر پرتوگیری بسیار بالا نشان می‌دهد که در حقیقت اشباع موقتی است و کرنش رشد در بالای $۲٫۵ \times ۱۰^{۲۵}\ n/m^2$ رفتار منقطعی[1] را نشان می‌دهد (شکل ۱۴-۲۳). رشد منقطع، به جوانه زنی و رشد مؤلفه‌ی $\langle c \rangle$ به حلقه‌های جای خالی نسبت داده می‌شود [۲۷]. مدارک موجود، جوانه‌زنی دانسیته‌ی پایینی از حلقه‌ها با بردار برگرز $1/6\,20\bar{2}3$ را تأیید می‌کند که تا اندازه‌های نسبتاً بزرگ ($۱۰۰\ nm <$) رشد می‌کند. در حقیقت، مقدار زیادی از کرنش رشد در زیرکولوی ۲ در جریان‌های بالا می‌تواند به وسیله‌ی نابودسازی بین‌نشین‌های اضافی در حلقه‌های نوع $\langle a \rangle$ و نابجایی‌های شبکه با نابودسازی جاهای خالی متشابه در مؤلفه‌ی $\langle c \rangle$ حلقه‌ها محاسبه شود [۳۰].

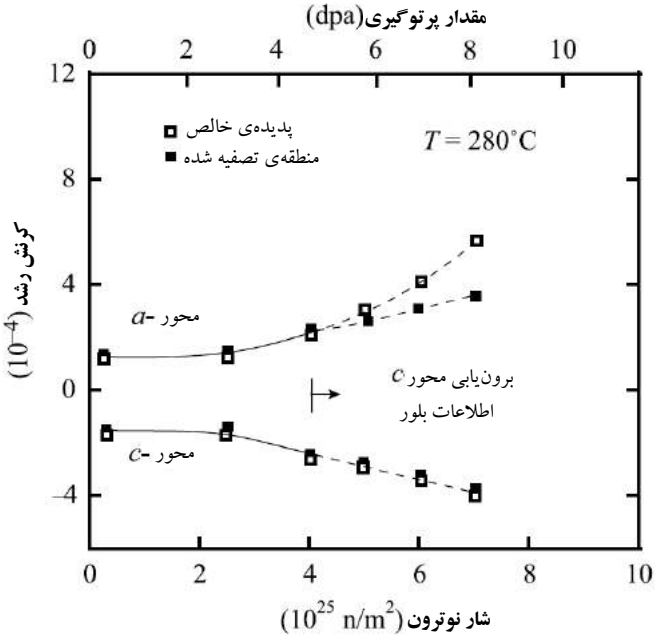
1. Breakaway



شکل ۱۴-۲۱. شمایی از تغییر در شکل تک بلور زیرکونیوم آلفا که به وسیله‌ی تراکم بین‌نشین‌ها روی صفحات منشوری و به هم پیوستگی مناطق تهی‌شده جای خالی روی صفحات قاعده تولید شده است.



شکل ۱۴-۲۲. کرنش‌های رشد تک بلورهای بازپخت شده‌ی زیرکونیوم به صورت تابعی از جریان نوترونی در دمای $80^{\circ}\mathrm{C}$ [۲۷].



شکل ۱۴-۲۳. رشد در جریان‌های بالا برای تک بلور زیرکونیوم بازپخت شده‌ی در دمای ^{o}C ۲۷۳ که نشان دهنده‌ی شروع رشد منقطع در جریان n/m^2 ۱۰^{۲۵} × ۲/۵ است [۲۷].

در آلیاژهای زیرکونیوم چند بلوری، رشد تابشی شامل سه مؤلفه است: (۱) ناپایداری کوتاه مدت به علت تغییرات ریزساختاری القایی تابشی مانند خوشه‌های عیب یا حلقه‌ها، (۲) مؤلفه‌ی رشد حالت پایدار وابسته به بافت بلورشناسی، و (۳) ناپایداری بلند مدتِ وابسته به بافت به علت رشد منقطع [۲۹]. کرنش رشد در جهت معین از چند بلور، d می‌تواند به وسیله‌ی تعداد f به بافت بلورشناسیِ آن مرتبط شود و متناسب با ضریب ناهمسان‌گردی رشد، G_{d} است:

(۱۲۵-۱۴)

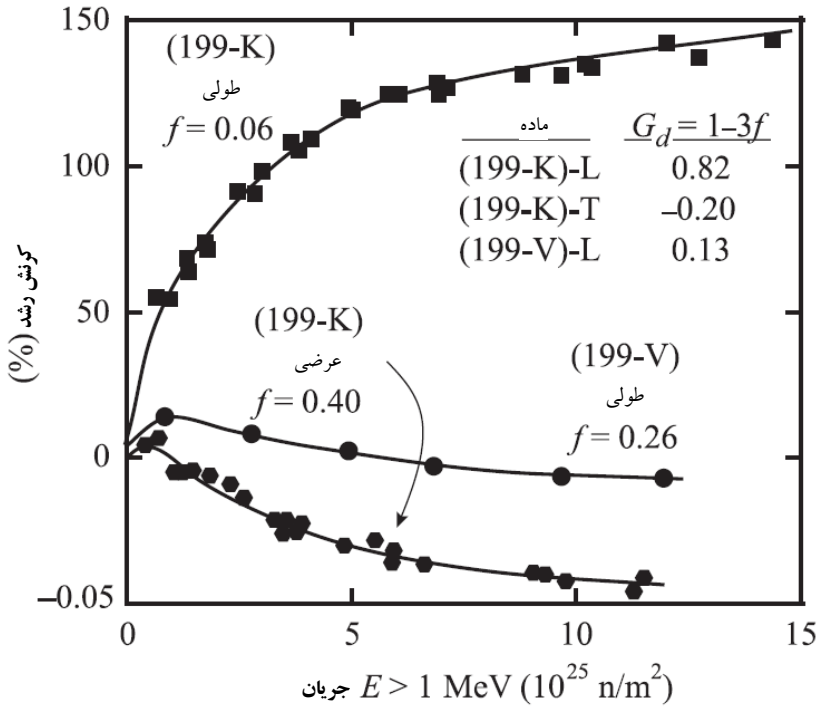
$$G_{\mathrm{d}} = 1 - 3f_{\mathrm{d}}^{b},$$

که f_{d}^{b} کسر تجزیه شده‌ی قطب‌های قاعده در جهت d است. مقادیر f_{d}^{b} از شکل قطب‌های قاعده تعیین می‌شود که از پراش پرتو ایکس و با استفاده از رابطه‌ی زیر به‌دست آمده است:

(۱۲۶-۱۴)

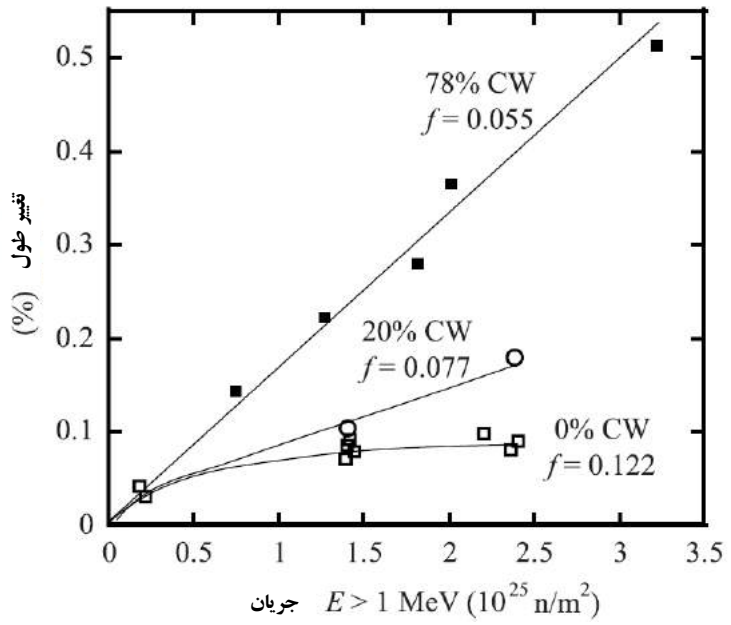
$$f_{\mathrm{d}}^{b} = \sum_{q} V_q \cos^2 q \,,$$

که V_{q} کسر حجمی دانه‌ها در زاویه‌ی q از جهت d با قطب‌های قاعده است. اگر کسر تجزیه شده‌ی قطب‌های قاعده در جهت معین برابر با $\frac{1}{3}$ باشد، سپس مطابق با معادله‌ی ۱۴-۱۲۵، رشد در آن جهت باید صفر باشد. آدامسون [۳۲] نشان داد که نرخ رشد در جهت‌های طولی، عرضی و مقطعی در زیرکولوی ۲ تبلور مجدد یافته و کار سرد شده که در $^{\mathrm{o}}\mathrm{C}$ ۲۸۷ و $^{\mathrm{o}}\mathrm{C}$ ۳۲۷ پرتودهی شده است به خوبی مطابق این معادله است. شکل ۱۴-۲۴ نشان می‌دهد که رفتار رشد زیرکولوی ۲ تبلور مجدد یافته در $^{\mathrm{o}}\mathrm{C}$ ۵۷ نیز معادله‌ی ۱۴-۱۲۵ را دنبال می‌کند.



شکل ۱۴-۲۴. وابستگی بافتی رشد تابشی ورقه‌ی زیرکولوی ۲ در $^{\mathrm{o}}\mathrm{C}$ ۵۷ [۳۳].

رشد تابشی به صورت ضعیفی وابسته به اندازه دانه است به صورتی که دانه‌های کوچک‌تر منجر به رشد بزرگ‌تری می‌شوند. رشد تابشی هم‌چنین وابسته به کار سرد است به گونه‌ای که کارسرد بالاتر منجر به کرنش رشد بیش‌تری می‌شود (شکل ۱۴-۲۵). مشخص شده است که رشد وابسته به جریان است؛ اما مدارک زیادی برای تأیید وابستگی شاری وجود ندارد. در پایان، مشاهده شده است که رشد با دما افزایش می‌یابد و در بالای حدوداً ۴۰۰°C به علت مقداری افزایش در حجم، رشد با سرعت بیش‌تری افزایش می‌یابد. هم‌چنین پیشنهاد شده است که عناصر ناخالصی مانند آهن می‌توانند مؤلفه‌ی $\langle c \rangle$ نطفه‌های حلقه را پایدار سازند و آن‌ها را قادر به رشد سازند. هم‌چنین مشاهده شده است که پرتودهی، رسوبات غنی از آهن و کروم را بی‌شکل می‌سازد [۳۴] که باعث توزیع مجدد آهن در زمینه می‌شود [۳۵]. این فرایند انحلال می‌تواند منبعی برای آهن برای پایدارسازی مؤلفه‌ی $\langle c \rangle$ حلقه در جریان‌های بالا باشد.



شکل ۱۴-۲۵. اثر کار سرد روی رشد تابشی در زیرکولوی ۴ پرتودهی شده در نزدیک دمای ۲۸۲ °C [۳۱].

هالت[1] [۳۶] مدلی را تشریح کرد که این مدل حساسیت نرخ رشد به ریزساختار را با تخمین احتمالات نابودسازی برای بین‌نشین‌ها، و برای جاهای خالی در چاهک‌های مختلف ریزساختاری نشان می‌دهد. او در نظر گرفت که رشد به وسیله‌ی تفاوت در ناهمسان‌گردی مهاجرت بین‌نشین‌ها و جاهای خالی تحریک می‌شود که در آن رشد (f-۳-۱) می‌تواند در ریزساختارهای کارسرد شده به وسیله‌ی افرازش جاهای خالی به نابجایی‌های شبکه‌ی $\langle c+a\rangle$ و افرازش بین‌نشین‌ها به نابجایی‌های نوع a رخ دهد. وابستگی خطیِ نرخ رشد زیرکولوی۲ کار سرد شده و تنش‌گیری شده به وسیله‌ی مهاجرت سریع جاهای خالی با انرژی مهاجرت پایین ۰٫۷ eV کنترل می‌شود. رشد منقطع در جریان‌های بالا، به علت حضور حلقه‌های صفحه‌ی قاعده است که به جای چاهک‌های جای خالی قوی عمل می‌کنند.

۱۴-۳-۳ خزش تابشی

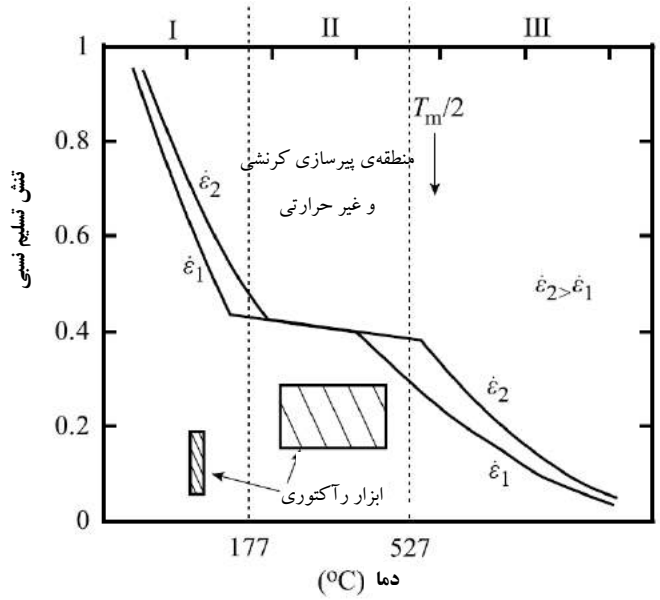
تغییر شکل وابسته به زمان در آلیاژهای زیرکونیوم ترکیبی از خزش حرارتی، خزش تابشی و رشد است. درحالی‌که مؤلفه‌ی خزش حرارتی در دمای‌های کاری رآکتور در کل در صورت غیرقابل چشم‌پوشی نبودن، کوچک است، مؤلفه‌های خزش تابشی و رشد به راحتی قابل تفکیک نیستند. وابستگی ویژگی‌های کششی و خزشی زیرکونیوم غیرپرتودهی شده به دما می‌تواند به سه منطقه همان‌طوری تقسیم شود که در شکل ۱۴-۲۶ نشان داده شده است. زیر حدوداً ^{o}C ۱۷۵، تتنش تسلیم با دما کاهش می‌یابد؛ اما خزش زیر تنش تسلیم وابستگی شدیدی به دما ندارد. منطقه‌ی II منطقه‌ی غیرحرارتی خزش است و بین حدوداً ۱۷۵ تا ۵۲۳ گسترده می‌شود که در آن بازیابی مکانیکی، پیرسازی کرنشی را متعادل کرده و اثر خالص آن به این صورت است که خزش مستقل از دما است؛ اما خیلی سریع به خزش حالت پایدار نمی‌رسد. در دماهای بالای ^{o}C ۵۲۳ وابستگی شدید استحکام تسلیم به دما و افزایش بازیابی منجر به نرخ‌های خزش حالت پایدار در تنش ثابت می‌شود.

در رآکتور، خزش معادله‌ی پدیدار شناختی زیر را دنبال می‌کند:

(۱۲۷-۱۴)

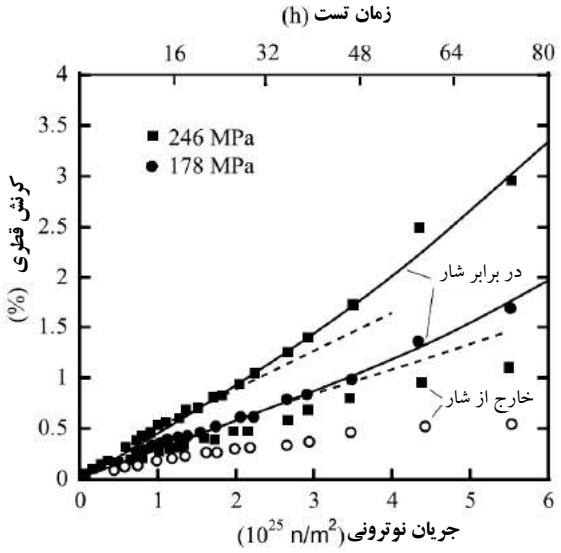
$$\dot{\varepsilon} = A\sigma^{n}\phi^{p}G_{\mathrm{d}}\exp(-Q/kT)[f(t)\text{ or }g(\varepsilon)]\,,$$

1. Holt

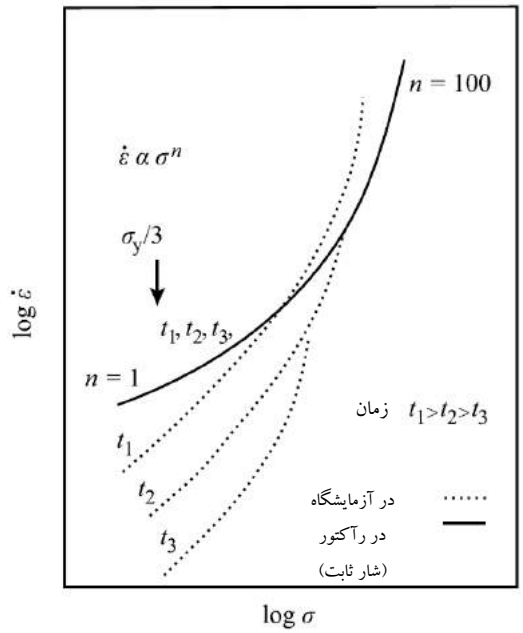


شکل ۱۴–۲۶. وابستگی دمایی استحکام تسلیم آلیاژهای زیرکونیوم [۳۱].

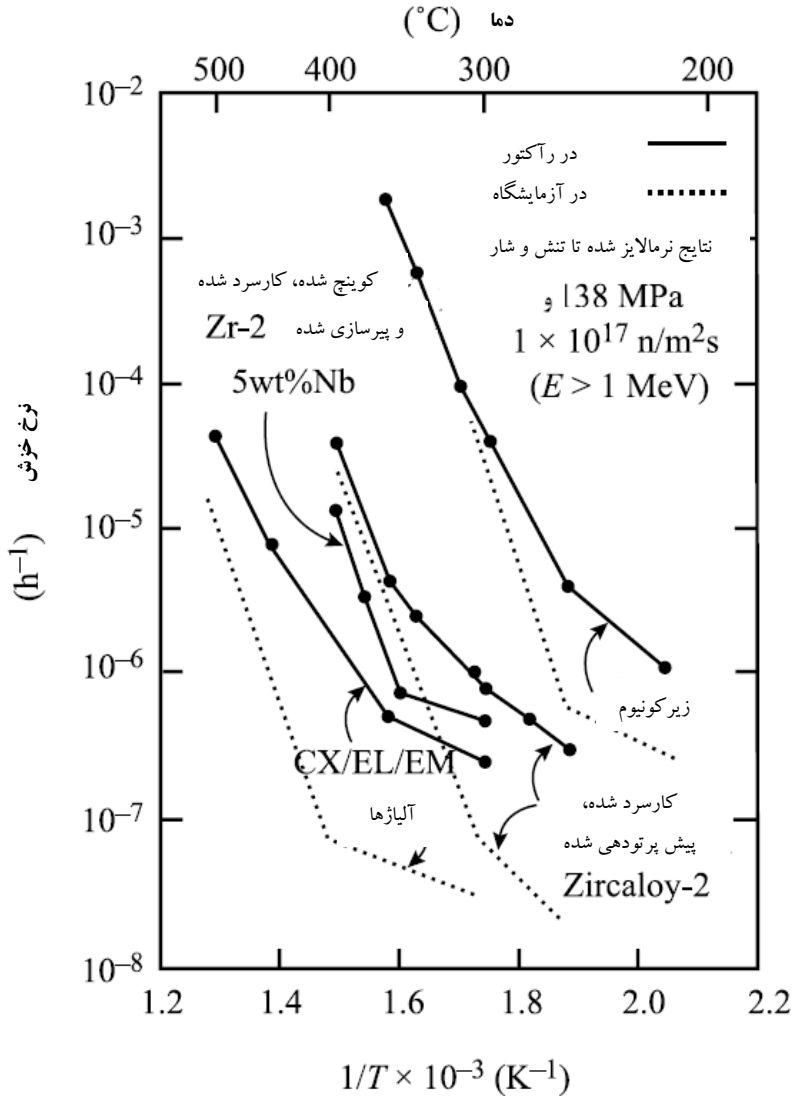
که $f(t)$ و $g(\varepsilon)$ به ترتیب توابعی از زمان و کرنش هستند، و عبارت دیگر قبلاً تعریف شده‌اند. درحالی‌که وابستگی شاری در کل به صورت خطی در نظر گرفته شده است، روابط نشان می‌دهد که مقدار p در شارهای پایین (10^{16} n/m^2s) بین ۰٫۲۵ و ۰٫۸۵ است و در شارهای بالا (10^{18} n/m^2s) به مقدار مجانبی ۱٫۰ می‌رسد [۳۱]. هم‌چنین مشخص شده است که نمای شار با دما کاهش می‌یابد و در بالای ۵۲۳ °C چشم‌پوشی می‌شود (منطقه‌ی III) [۳۷]. وابستگی به جریان در کل خطی است؛ اما اطلاعات موجود نشان می‌دهند که در جریان‌های بالا ($> \sim 2 \times 25^{10}$ n/m^2)، تغییر وضعیتی در نرخ خزش وجود دارد (شکل ۱۴–۲۷). خزش آلیاژهای زیرکونیوم به شدت وابسته به دما است. در دمای ۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد و تنش پایین ($< 1{,}3\sigma_y$)، $n = 1$ است. با افزایش تنش به مقادیر ۲۰۰ و ۴۰۰ MPa، n به مقدار ۲ افزایش می‌یابد و سپس در تنش‌های بالاتر به سرعت افزایش یافته و می‌تواند در تنش‌های ۶۰۰ MPa به مقدار ۱۰۰ برسد (شکل ۱۴–۲۸). زیر حدود ۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد، وابستگی دمایی خزش ضعیف است و انرژی فعال‌سازی بین ۱۶ و ۴۰ kJ/mol است (شکل ۱۴–۲۹). وابستگی دمایی به سرعت با دما افزایش می‌یابد و Q می‌تواند از ۲۰۰ kJ/mol تجاوز کند. به هرجهت دمای تحول برای Q وابسته به ترکیب آلیاژ، شرایط متالوژیکی و تنش است [۳۱].



شکل ۱۴-۲۷. کرنش خزشی قطری در لوله‌های Zr-1.5Nb کارسرد شده و پرتودهی شده در ۲۹۷°C و شار نوترون سریع $۲٫۱ \times ۱۰^{۱۷}$ n/m^{2}s [۳۱].



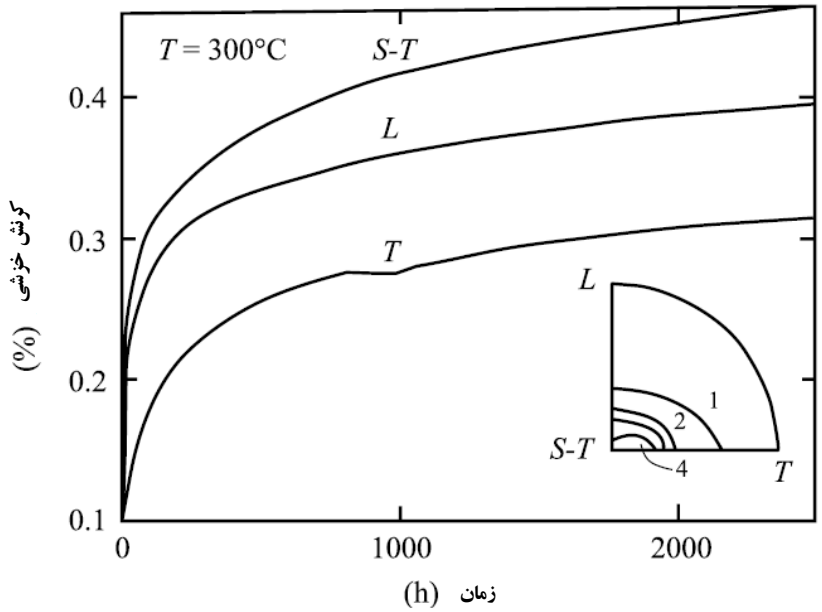
شکل ۱۴-۲۸. شماتیک وابستگیِ تنشی خزش درون رآکتوری در آلیاژهای زیرکونیوم در حدود ۳۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد [۳۱].



شکل ۱۴-۲۹. وابستگیِ دمایی خزش درون رآکتوری در آلیاژهای زیرکونیوم [۳۱].

خزش به شدت وابسته به بافت است، که این وابستگی به منزله‌ی ضریب ناهمسان‌گردی در معادله‌ی ۱۴-۱۲۷ گنجانده شده است. همان‌طوری‌که در شکل ۱۴-۳۰ نشان داده شده است وابستگی به بافت در محدوده‌ی خزش اولیه زیاد است. این اعتقاد وجود دارد که خزش در آلیاژهای زیرکونیوم به علت لغزش نابجایی‌های نوع $\langle a \rangle$ روی صفحات منشوری با لغزش ثانویه‌ی نابجایی‌های نوع $\langle c + a \rangle$ روی

صفحات هرمی است. در زیرکولوی ۲ و Zr-2.5%Nb، لغزش نابجایی‌های نوع $\langle a \rangle$ در ۹۰٪ از کرنش کلی سهیم هستند [۳۸]. محتمل‌ترین سازوکار برای تشریح خزش در تنش پایین، سازوکار جذب ترجیحیِ القایی تنشی است. همان‌طوری‌که قبلاً بحث شد، این سازوکار یک وابستگیِ تنشیِ $n = ۱$ دارد که با خزش در تنش پایین سازگار است. منشأ نفوذ کشسانیِ جذب ترجیحیِ القایی تنشی [۳۹] که در آن نفوذ بین‌نشین‌ها در میدان تنش اعمال شده ناهمسان‌گرد است، با افرازش بین‌نشین‌ها به حلقه‌های نوع $\langle a \rangle$ سازگار است که صعود و لغزش آن‌ها را آسان‌تر می‌کند.



شکل ۱۴–۳۰. خزش زیرکولوی ۲ کارسرد شده در ۲۰۷ MPa و ۳۰۰ ^{o}C [۳۱].

نام‌گذاری اصطلاحات

A: مساحت صفحه‌ی لغزش یا حلقه‌ی نابجایی

$\bar{A}$:میانگین مساحت حلقه

a: ثابت شبکه

b: بردار برگرز

B_0: وارفتگیِ خزشی

$C_{v,i}$: غلظت جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

$C^0_{v,i}$: غلظت تعادل حرارتی جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

d: اندازه‌ی دانه

D: ضریب تطابق خزش ـ تورم

D_{eff}: ضریب نفوذ مؤثر

D_{gb}: ضریب نفوذ مرزدانه‌ای

$D_{i,v}$: ضریب نفوذ بین‌نشین، جای خالی

D_{vol}: ضریب نفوذ حجمی

E: انرژی یا ضریب کشسان

E_{vol}: انرژی فعال‌سازی برای نفوذ حجمی

f^b_d : کسر تجزیه شده‌ی قطب‌های قاعده در جهت d

f_i: کسر حلقه‌های بین‌نشینی هم‌محور شده در جهت i. هم‌چنین کسر تجزیه شده‌ی قطب‌های قاعده‌ی سلول واحد hcp در جهت i

F_i: مؤلفه نیرو در جهت i

F_j: بسامدی که با آن نابجایی به ارتفاع h صعود می‌کند

G_d: ضریب ناهمسان‌گردی

h: ارتفاع مانع روی صفحه لغزش

k: ثابت بولتزمان

$k^2_{v,i}$: شدت کلی چاهک برای جاهای خالی، بین‌نشین‌ها

$k^2_{L,N}$: شدت چاهک برای حلقه‌ها، شبکه‌ها

l: طول لغزش روی صفحه‌ی لغزش

J: شار

n: تعداد بین‌نشین‌های مورد نیاز برای تشکیل یک حلقه‌ی بین‌نشینی، هم‌چنین تعداد نابجایی‌ها در سپر

n_0: تعداد آرایشات ممکن حلقه‌ها

N: عدد دانسیته‌ی اتمی

N_L: عدد دانسیته‌ی حلقه‌های نابجایی

P_j: احتمال یک صعود نابجایی از j یا بیش‌تر

r_c: شعاع هسته‌ی نابجایی

r_L: شعاع حلقه‌ی نابجایی

R_c: اندازه‌ی بحرانی حلقه برای بقا

R_j: احتمال یافتن یک نابجایی در فاصله‌ی j از نقطه‌ی آزاد شده

R_{max}: بیشینه‌ی شعاع حلقه‌ی نابجایی

$\dot{S}$: نرخ تورم

t: زمان

T: دما

T_m: دمای ذوب

υ_c: سرعت صعود نابجایی

υ_d: میانگین سرعت نابجایی

V: حجم

V_{cas}: حجم آبشار

V_q: کسر حجمی دانه‌ها با صفحات قاعدشان در زاویه q از جهت d

$\frac{\Delta \dot{V}}{V}$: نرخ تورم

$z^{dj}_{i,v}$: ضرایب به دام‌اندازی نابجایی‌های آرایش j

$\Delta z^{d}_{i,v}$: تفاوت در ضرایب به دام‌اندازی بین حلقه‌های هم‌محور شده و هم‌محور نشده

α: تعداد چاهک‌ها در رخداد پراکنش نوترونی

ϕ: شار نوترون

δ : ضخامت مؤثر مرزدانه

ε_s : کرنش برشی

$\dot{\varepsilon}$: نرخ کرنش

$\frac{0}{\varepsilon}$: نرخ کرنش مؤثر (یا خزش)

$\dot{\varepsilon}_m$:نرخ تورم

ε ، ε_{ij}: کرنش و مؤلفه‌های کرنشی

ε_e: کرنش کشسان

μ : ضریب برشی

ν : نسبت پواسون

ω: بسامد آزادسازی بخش‌های نابجایی قفل شده

Ω : حجم اتمی

ρ ، $\rho_{m,L,N}$: دانسیته‌ی نابجایی کلی، مؤلفه‌های متحرک، حلقه و شبکه

ρ_{FR}: دانسیته‌ی منبع فرانک ـ رید

σ، σ_{ij} : تنش و مؤلفه‌های تنشی

σ_s : سطح مقطع پراکنش نوترونی، هم‌چنین تنش برشی

$\overline{\sigma}$: تنش مؤثر

اندیس‌ها

c : صعود

d : نابجایی

eff : مؤثر

FR : فرانک ـ رید

g : لغزش

gb : مرزدانه

i, v : بین‌نشین، جای خالی

NL : حلقه‌ی غیرهم‌محور

L : حلقه

m : متحرک

N : شبکه

s : برش

S : تورم

vol : حجم

بالانویس‌ها

c : فشاری

dA : حلقه‌های نابجایی هم‌محور

dN : حلقه‌های نابجایی غیرهم‌محور

D : نابجایی

V : حفره

n : توان تنش

p : توان شار

t : کشش

مخفف‌ها

GC : لغزش و صعود

FR : فرانک ـ رید

N-H : نابارو ـ هرینگ

PA : جذب ترجیحی

PAG : جذب ترجیحی لغزشی

PE : نشر ترجیحی

SIPA : جذب ترجیحیِ القایی تنشی

SIPN : جوانه‌زنی ترجیحی القایی تنشی

مسایل

۱۴-۱ با برگشت به نرخ رشد حفره‌ی محاسبه شده در مسئله‌ی ۸-۴ در فصل ۸:

الف) نرخ خزش تابشی برای فولاد زنگ نزن را به صورت تابعی از دما و تنش برشی اعمال شده محاسبه کنید. عدد دانسیته‌ی حفره برابر با $۲ \times ۱۰^{۱۵}\ \mathrm{cm}^{-3}$ را برای محاسبه‌ی نرخ خزش فرض کنید.

ب) ناحیه‌ای را در فضای تنش ـ دما که در آن نرخ خزش کم‌تر از ۰٫۰۱٪ در ساعت باقی بماند، شناسایی کنید.

۱۴-۲ در مدل هسکت[1] از خزش تابشی با تجزیه‌ی حلقه‌ی جای خالی در اثر افزایش تنش، مناطق تهی شده با کم‌تر از $m_c \sim ۲۰۰$ جای خالی در جامد به صورت صفحات جای خالی باقی می‌مانند. برای $m < m_c$، حجم برای هر صفحه با اندازه‌ی m برابر با $m\Omega$ است. با استفاده از تابع توزیع مربع‌معکوس برای اندازه‌ی صفحه‌ی جای خالیِ (یا منطقه‌ی تهی شده) تولید شده به وسیله‌ی برخورد نوترونی، تورم ناشی از صفحات غیرتجزیه شده در غیاب تنش اعمالی در جریان سریع برابر با $۱۰^{۲۰}$ نوترون در سانتی‌متر مربع را محاسبه کنید. فرض کنید که $\sum_s = 0.2\ \mathrm{cm}^{-1}$، $\Omega = ۰٫۰۱۲\ \mathrm{nm}^3$، و $\nu = ۵۰۰$ جفت فرانکل در هر برخورد نوترون سریع.

۱۴-۳ یک پیچ اینکونل ۷۱۸ برای نگه‌داری یک قطعه‌ی مکانیکی رآکتور به صفحه به‌کار برده می‌شود. عمر پیچ به واسطه‌ی رهایش تنش (ناشی از خزش تابشی) تعیین می‌شود. اگر بار تا ۱۰٪ بار اولیه سقوط کند، پیچ باید تعویض شود. برای مقادیر پرتوگیری پایین به وسیله‌ی پیچ، فرض کنید که نرخ خزش $\dot{\varepsilon}$ در طول پرتودهی متناسب با نرخ آسیب جابه‌جایی $\dot{\phi}$ و تنش مؤثر σ باشد:

(۱۴-۱۲۸)

$$\dot{\varepsilon} = -B\dot{\phi}\sigma$$

1. Hesketh

الف) مقدار پرتوگیری (در dpa) را هنگامی محاسبه کنید که تنش پیچ تا ۱۰٪ مقدار اولیه تنزل می‌یابد. فرض کنید که ضریب کشسان E برابر با مقدار ثابت $۷/۶ \times ۱۰^{۱۰}$ Pa باشد و ضریب خزشی B برابر با مقدار ثابت $۱/۶ \times ۱۰^{-۶}$ $MPa^{-1}dpa^{-1}$ باشد.

ب) به علت تغییرات در نقشه‌های بارگذاری سوخت، نرخ dpa در پیچ تا ۵۰٪ بعد از ۵ dpa کاهش می‌یابد. مجدداً مقدار پرتوگیری کلی برای رسیدن به ۱۰٪ پیش بار اولیه را محاسبه کنید. آیا این زمان تعویض پیچ را تغییر می‌دهد؟

۱۴-۴ نابجایی که جاهای خالی و بین‌نشین‌ها را در نرخ‌های متفاوت جذب کرده است، صعودی را نشان می‌دهد. سرعت صعود υ_c به وسیله‌ی رابطه‌ی $\upsilon_c = \left(J_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}} - J_{\mathrm{v}}^{\mathrm{d}}\right)b^2$ که $J_{\mathrm{i}}^{\mathrm{d}}$ شار بین‌نشین‌ها در واحد طول خط نابجایی است و b بردار برگرز است، تعیین می‌شود.

اگر اندازه‌ی میانگین موانع برابر با ۱۰۰nm باشد، زمان متوسط مورد نیاز برای صعود نابجایی‌ها روی همه‌ی موانع در آلومینیوم fcc در $۲۰۰\ ^{\circ}C$ در شار نوترون تک انرژی $۱۰^{۱۴}$ n/cm^2s (E = ۱ MeV) را محاسبه کنید. فرض کنید که موانع چاهک‌هایی برای عیوب نقطه‌ای نباشند و آن‌که سنتیک‌ها محدود شده‌ی نفوذی هستند.

$$T_{\mathrm{m}} = 660\,^{\circ}\mathrm{C}$$
$$a = 0.30\,\mathrm{nm}$$
$$Q_f^{\mathrm{v}} = 3.2\,\mathrm{eV}$$
$$Q_{\mathrm{m}}^{\mathrm{v}} = 0.62\,\mathrm{eV}$$
$$Q_{\mathrm{i}}^{\mathrm{v}} = 0.66\,\mathrm{eV}$$
$$Q_{\mathrm{i}}^{\mathrm{v}} = 0.12\,\mathrm{eV}$$
$$S_{\mathrm{th}}^{\mathrm{v}} = 0.7\,\mathrm{k}$$
$$S_{\mathrm{th}}^{\mathrm{i}} = 8\,\mathrm{k}$$
$$S_{\mathrm{m}}^{\mathrm{v}} = S_{\mathrm{m}}^{\mathrm{i}} = 0$$
$$\nu = 10^{13}\,\mathrm{s}^{-1}$$
$$\rho_{\mathrm{d}} = 10^{9}\,\mathrm{cm}^{-2}$$
$$b = 0.2\,\mathrm{nm}$$

۱۴-۵ آزمایش خزش روی نمونه‌های فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی نشده (T_m = ۱۷۵۰ K) در دمای ۳۰۰ و ۷۰۰ °C در آزمایشگاه در تنش پایین انجام شده است. مقایسه‌ی آزمایشات انجام شده روی جفت دومی از نمونه‌های SS ۳۱۶ در دماهای مشابه، در طول پرتودهی در شار نوترون ($E > ۱$ MeV) ۱×۱۰^{۱۴} n/cm^2s انجام شده است. جفت سوم از نمونه‌ها در آزمایشگاه در دمای مشابه بعد از پرتودهی تا جریان $۱۰^{۲۱}$ n/cm^2 در دماهای آزمایش بررسی می‌شوند.

الف) برای هریک از دماها منحنی رسم کنید. منحنی‌های خزش مورد انتظار برای هر یک از این آزمایشات را رسم، نشانه‌گذاری و تشریح کنید.

ب) چه سازوکارهایی برای کنترل خزش در هر مرحله از این آزمایشات انتظار می‌رود؟

۱۴-۶ نمونه‌ی فولاد زنگ نزن ۳۱۶ پرتودهی شده در دمای ۷۰۰ °C در مسئله‌ی ۱۴-۵ در کرنش ۱٪ در تست خزش مردود می‌شود. این خرابی به تردی هلیومی نسبت داده می‌شود و محاسبات نشان می‌دهد که مقدار کلی هلیوم در فلز برابر با $۱۰^{۱۷}$ در سانتی‌متر مکعب است و اندازه دانه برابر با ۲۰ μm است و تورم در نقطه‌ی خرابی برابر با ۳۰٪ است. تنش در نقطه‌ی خرابی چه‌قدر است؟

۱۴-۷ معادله‌ی کلی برای خزش حرارتی برابر است با:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{ADμb}{kT}\left(\frac{\sigma}{\mu}\right)^n\left(\frac{b}{d}\right)^p$$

که

$$D = D_0 \exp(-Q/kT)$$

که D = ضریب نفوذ، d = اندازه دانه، b = بردار برگرز، k = ثابت بولتزمان، T = دما (K)، μ = ضریب برشی، σ = تنش اعمال شده، n = توان تنش، p = معکوس توان اندازه دانه و A = پارامتر بی بعد هستند.

الف) آیا هیچ کدام از متغیرهای تشریح کننده‌ی خزش به وسیله‌ی پرتودهی تأثیر می‌پذیرند؟
ب) اگر به این صورت است، چه‌طور افزایش نرخ جابه‌جایی در طول پرتودهی تا چندین برابر نرخ خزش را در آلیاژ خالص با دانسیته‌ی چاهک بسیار پایین تغییر می‌دهد؟

۱۴-۸ رابطه‌ی کلی بین خزش و تورم به صورت زیر نوشته می‌شود:

(۱۴-۱۱۹)

$$\dot{\bar{\varepsilon}}/\bar{\sigma} = B_0 + D\dot{S}$$

با مقایسه‌ی این معادله با معادله‌ی خزش کلی در مسئله‌ی ۱۴-۷، مشخص می‌شود که توان تنش برابر با ۱ است. این نکته چه چیزی را در مورد سازوکارهای احتمالی خزش یادآوری می‌کند؟

مراجع

1. Frost HJ, Ashby MJ (1982) Deformation Mechanism Maps: The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics. Pergamon, New York.
2. Olander DR (1976) Fundamental Aspects of Nuclear Reactor Fuel Elements, TLD- 26711-Pl. Technical Information Center, ERDA, Washington, DC chap 19.
3. Weertman J (1955) J Appl Phys 26(10):1213.
4. Weertman J (1968) Trans ASM 61:681.
5. Weertman J (1957) J Appl Phys 28(3):362.
6. Cadek J (1988) Creep in Metallic Materials. Elsevier, New York.
7. Nabarro FRN (1948) Report on Conference on Strength of Solids. Physical Society, London, p 75.
8. Herring C (1950) J Appl Phys 21:437.
9. Coble RL (1963) J Appl Phys 34:1679.
10. Brailsford AD, Bullough R (1973) Phil Mag 27:49.
11. Bullough R (1985) In: Dislocations and Properties of Real Materials, Proceedings of Royal Society, London. The Institute of Metals, London, p 283.
12. Matthews JR, Finnis MW (1988) J Nucl Mater 159:257.
13. Mansur LK (1979) Phil Mag A 39(4):497.
14. Wolfer WG, Foster JP, Garner FA (1972) Nucl Technol 16:55.
15. Mansur LK (1992) Mater Sci Forum 97–99:489–498.
16. Grossbeck ML, Mansur LK (1991) JNM 179–181:130–134.
17. Lewthwaite GW (1973) Scr Metal 7:75.
18. Brinkman JA, Wiedersich H (1964) In: Proceedings of the Symposium on Flow and Fracture of Metals and Alloys in Nuclear Environment, STP 380. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, p 3.
19. Mansur LK, Coghlan WA, Reiley TC, Wolfer WG (1981) J Nucl Mater 103/104:1257.
20. Garner FA (1994) In: BRT Frost (ed) Materials Science and Technology, chap. 6, vol 10A. VCH, New York, p 419.
21. Garner FA, Grossbeck ML (1994) Fusion Materials Semi-annual Progress Report DE/ER-0313/16. US DOE, Oak Ridge, TN, March 1994.
22. Zinkle S, Lucas GE (2003) Deformation and Fracture Mechanisms in Irradiated FCC and BCC Metals, US Department of Energy, Semi-annual Report, DOE-ER-0313/34. US DOE, Washington, DC.
23. Klepfer HH (ed) (1962) Proceedings of the USAEC Symposium on Zirconium Alloy Development, US Atomic Energy Commission, GEAP4089, vol II, p 13–11.

24. Griffiths M (1988) J Nucl Mater 159:190.
25. Northwood DO (1977) At Energy Rev 15(4):547.
26. Buckley SN (1962) Uranium and Graphite. Institute of Metals, London, p 445.
27. Carpenter GJC, Zee RH, Rogerson A (1988) J Nucl Mater 159:86.
28. Fidleris V (1975) At Energy Rev 13:51.
29. Northwood DO, Fidleris V, Gilbert RW, Carpenter GJC (1976) J Nucl Mater 61:123.
30. Griffiths M, Gilbert RW (1987) J Nucl Mater 150:169.
31. Fidleris V (1988) J Nucl Mater 159:22.
32. Adamson RB, Tucker RP, Fidleris V (1982) In: Zirconium in the Nuclear Industry the 5th Symposium, STP 754. American Society for Testing and Materials,West Conshohocken, PA, p 208.
33. Fidleris V, Tucker RP, Adamson RB (1987) Zirconium in the Nuclear Industry the 7th Symposium, STP 939. American Society for Testing and Materials,West Conshohocken, PA, 1987, p 49.
34. Lemaignan C, Motta AT (1994) In: Frost BRT (ed) Materials Science and Technology, chap 7, vol 10B. VCH, New York, p 1.
35. Zu XT, Sun K, Atzmon M, Wang LM, You LP, Wan FR, Busby JT, Was GS, Adamson RB (2005) Phil Mag 85(4–7):649–659.
36. Holt RA (1988) J Nucl Mater 159:310.
37. Nichols FA (1969) J Nucl Mater 20:249.
38. Christodoulou N, Causey AR, Woo CH, Tome CN, Klassen RJ, Holt RA (1993) In: Kumar AS, Gelles DS, Nanstad RK, Little EA (eds) Proceedings of the 16th International Symposium on Effects of Radiation on Materials, ASTM STP 1175. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 1993, pp 1111–1128.
39. Woo CH (1984) J Nucl Mater 120:55.

۱۵

ترک‌گذاری محیطی فلزات و آلیاژهای پرتودیده

یک نگرانی فزاینده در مورد تأسیسات نیروی الکتریکی در سرتاسر جهان، تخریب اجزای سازنده‌ی هسته در رآکتورهای نیروی هسته‌ای است که تقریباً ۱۷ درصد تولید نیروی الکتریسته‌ی جهان را فراهم می‌کند. خرابی‌هایی در اجزای هسته‌ی رآکتور آب جوشان (BWR) و تا حدی کم‌تر در اجزای هسته‌ی رآکتور آب تحت فشارِ (PWR) مرکب از آلیاژهای زنگ نزن پایه‌ی نیکلی و آهنی رخ می‌دهد که جریان نوترونی قابل توجهی را در محیط‌های آبی اکسیژنی و هیدروژنی در دمای ۲۷۰ – ۳۴۰ ^{o}C دریافت می‌کنند. به علت آن‌که قابلیت ترک‌دار شدن وابسته به عوامل زیادی مانند ترکیب آلیاژ و ریزساختار، تنش، پرتودهی و محیط است، سازوکارهای تخریب به منزله‌ی ترکِ خوردگی تنشی (ترک حاصل از تنش خوردگی) با کمک پرتودهی[1] (IASCC) نامیده می‌شود. در آغاز، اجزای تأثیر پذیرفته نسبتاً کوچک بودند (پیچ‌ها یا واشرها) یا اجزایی بودند که برای تعویض طراحی شده بودند (میله‌های سوخت، تیغه‌های کنترل، یا میله‌های تجهیزات). با توجه به مطالعات اولیه، بسیاری از اجزای ساختاری (پیچ‌های بافل رآکتور آب تحت فشار و پوشش‌های هسته‌ی رآکتور آب

1. Irradiation Assisted Stress Corrosion Cracking

جوشان) در نقش اجزای حساس به IASCC شناسایی شدند. مقالات اخیر [۱-۵] دانش موجود مرتبط به آزمون سرویس IASCC و بررسی‌ها و محدودیت‌های آزمایشگاهی برای کنترل مناسب را تشریح می‌کنند.

اهمیت جریان نوترونی روی IASCC به خوبی در شکل ۱۵-۱ نشان داده شده است. ترک‌های خوردگی تنشی بین دانه‌ای[1] (IG) در فولادهای زنگ نزن آستنیتی هم‌چنان زیاد می‌شوند که جریان شبه آستانه بحرانی افزایش می‌یابد. مقدار پرتوگیری تا ترک‌گذاری به شبه آستانه اشاره دارد زیرا مقدار وابسته به عوامل محیطی و ماده است. ترک‌گذاری در آب اکسیژنه شده رآکتور آب جوشان در جریان‌های بالای حدوداً $۲-۵ \times ۱۰^{۲۰}$ n/cm^2 ($E > ۱$ MeV) مشاهده می‌شود که مطابق با حدوداً ۰٫۳ – ۰٫۷ جابه‌جایی در هر اتم (dpa) است (شکل ۱۵-۲). درحالی‌که وابستگی به جریان در ترک خوردگی قوی نیست، ترک‌گذاری در طول آزمایش درجای ترک خوردگی تنشی در فولادهای زنگ نزن پرتودهی شده در قلب رآکتور با نرخ کرنش آرام رخ می‌دهد. رخداد ترک خوردگی در آزمایش‌های بعد از پرتودهی نشان می‌دهد که اثرات دایمی پرتودهی (تغییرات مواد) در اصل مسئول قابلیت IASCC است، اگرچه اثرات در جایی مانند رهایش خزش تابشیِ تنش‌های باقی مانده جوش و افزایش تنش‌های ناشی از تورم نیز می‌توانند حایز اهمیت باشند. در حقیقت، IASCC می‌تواند در صورت همراهی پرتودهی با محیط خورنده رخ دهد. اگر مورد اول غایب باشد، ترک خوردن می‌تواند حذف شده یا به شدت کاهش یابد.

IASCC می‌تواند به اثرات پرتودهی روی (۱) شیمی آب (پرتوکافت)، و (۲) ویژگی‌های مواد، همان‌طوری تقسیم‌بندی شود که در شکل ۱۵-۳ نشان داده شده است. واکنش ترک خوردگی به تغییرات در شیمی آب برای مواد پرتودهی شده و پرتودهی نشده مشابه است. در هر دو مورد افزایش عمیقی در جنبش محیط ترک‌گذاری با افزایش در پتانسیل خوردگی بالای حدوداً ۱۰۰ mV_{SHE} وجود دارد [۷-۹].

در پتانسیل خوردگی بالا، نرخ رشد ترک به شدت با افزایش ناخالصی‌ها (مخصوصاً کلرید یا سولفات) به آب خالص در هر دو مورد پرتودهی یا غیرپرتودهی افزایش می‌یابد.

در آزمایشات بعد از پرتودهی عوامل غالب مرتبط با پرتودهی، تغییرات ریزساختاری و ریزشیمیایی هستند که می‌توانند مسئول رفتار آستانه مانند در بسیاری از موارد مانند پتانسیل خوردگی، ناخالصی‌ها،

1. Intergranular

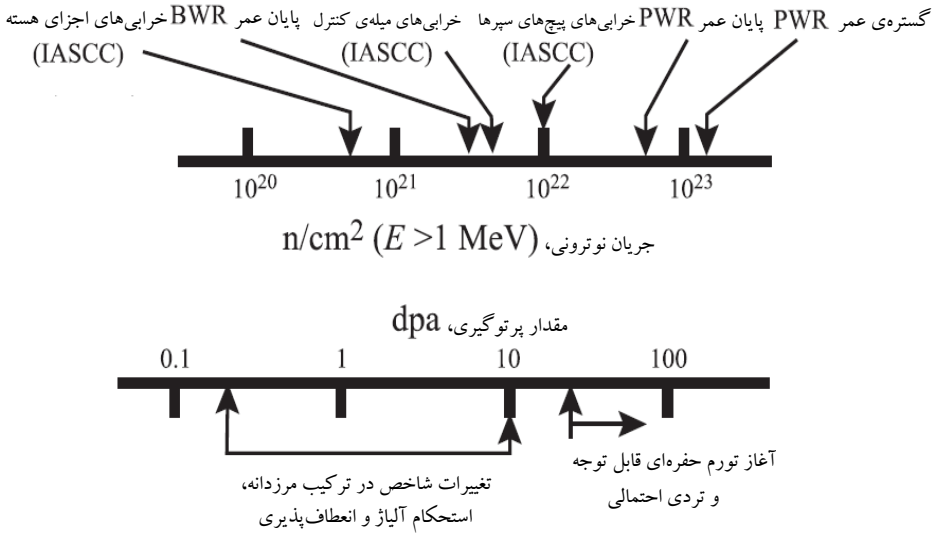
درجه‌ی حساس‌سازی، تنش، دما و غیره باشند. اگر منابع تنشی حاضر در طول پرتودهی (به عبارت دیگر، تنش‌های پسماند جوش، یا بارگذاری ناشی از تورم) در طول آزمایش‌های بعد از پرتودهی نیز حاضر باشند، دیگر پدیده‌های تابشی مانند رهایش خزشی تابشی و تورم می‌توانند اثرات دایم باشند. اثرات پرتودهی سریع (در چند ثانیه) در ابتدا به علت تحرک بالای گونه‌ها در آب، تعادل جنبشی را در آب ایجاد می‌کنند. در فلزات، تعادل جنبشی فقط بعد از dpaهای زیاد، برای مثال چندین سال پرتودهی به‌دست می‌آید.

از آن‌جایی که جدایش القایی تابشی اکثر فلزات، سخت‌گردانی تابشی و گسترش ریزساختارهای مرتبط به صورت مجانبی به تعادل دینامیکی نزدیک می‌شوند، دیگر عوامل (نظیر جدایش القایی تابشی سیلیسیم، یا تشکیل رسوب یا انحلال) ممکن است مهم شوند.

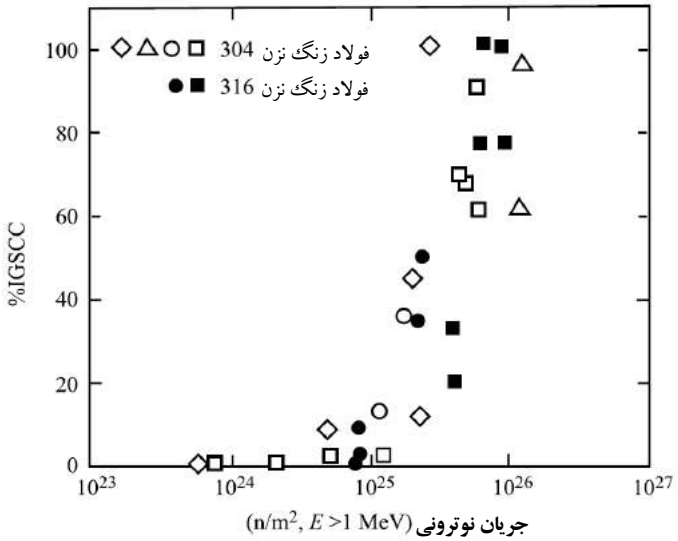
اطلاعات آزمایش‌های نرخ کرنش آرام بعد از پرتودهی (SSRT) روی فولادهای زنگ نزن نشان داد که جریان آستانه‌ی مشخصی (اگرچه غیرتغییرناپذیر) وجود دارد که در آن IASCC تحت شرایط رآکتور آب سبک مشاهده می‌شود [۸].

عبارت آستانه در این‌جا برای تشریح منطقه‌ای استفاده می‌شود که ترک‌گذاری به شدت با جریان افزایش می‌یابد؛ اما به این معنی نیست که ترک‌گذاری در زیر آستانه وجود ندارد یا آن‌که در آستانه‌ی ترک‌گذاری اشباع می‌شود. به علت آن‌که این آستانه در یک کسری از چند dpa (وابسته به آلیاژ، تنش، شیمی آب و غیره) رخ می‌دهد، شکل ۱۵-۲، ممکن است که اثرات درجا (پتانسیل خوردگی، هدایت، دما) حایز اهمیت باشند؛ اما فقط اثرات تابشی دایمی (تغییرات ریزساختار و ریزشیمیایی) می‌توانند مسئول رفتار آستانه مانند برحسب جریان در آزمایش‌های بعد از پرتودهی باشند.

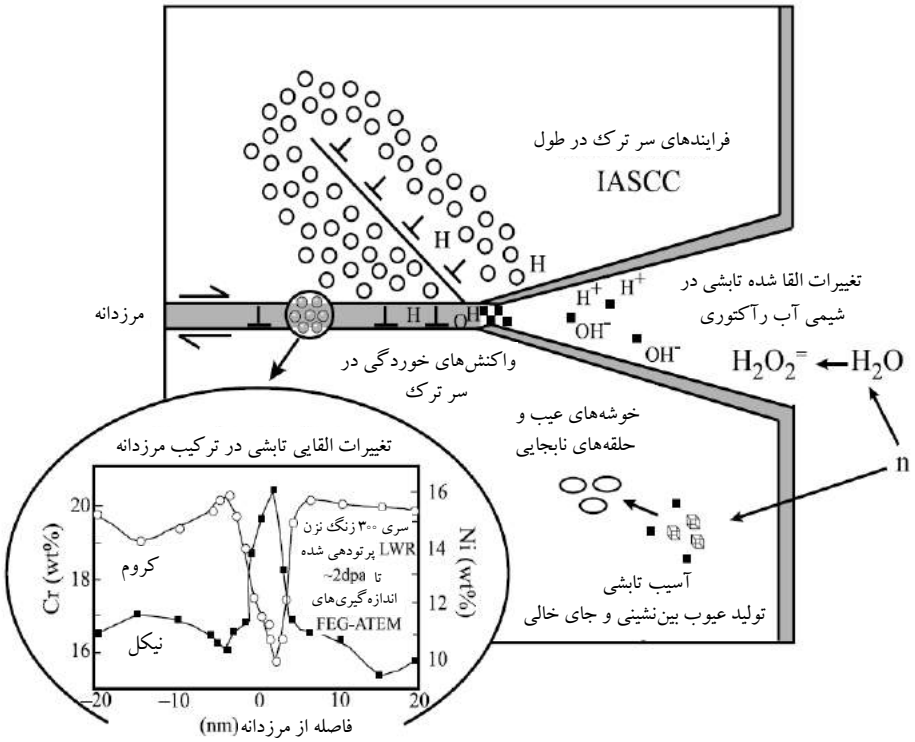
بخش‌های بعدی با آموزشی در مورد ترکِ خوردگیِ تنشی شروع می‌شود و با بررسی اثرات پرتودهی روی شیمی آب و خود آلیاژ دنبال می‌شود. اثر پرتودهی روی ترکِ خوردگیِ تنشی در آزمایش بدنه‌های تجاری بحث خواهد شد و سپس بررسی‌هایی اثرات آن روی شیمی آب و ریزساختار آلیاژ انجام خواهد شد.



شکل ۱۵-۱. اثرات جریان نوترونی روی قابلیت ترکِ خوردگی تنشی با کمک پرتودهی در فولادهای زنگ نزن در محیط‌های رآکتور آب سبک [۶].



شکل ۱۵-۲. وابستگی ترک‌گذاری در پرتودهی نوترونی SS ۳۰۴ و SS ۳۱۶ با خلوص بالا به جریان نوترونیِ انرژی بالا [۴].

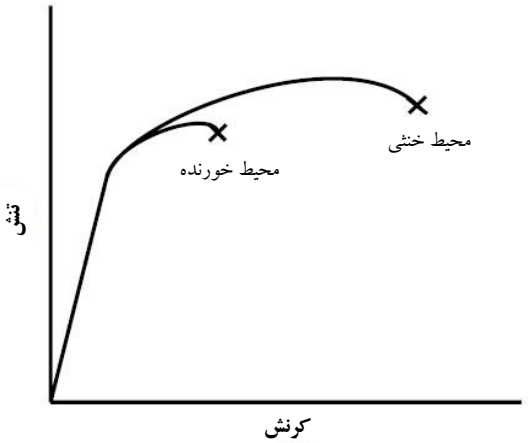


شکل ۱۵-۳. نمایش شماتیک از نحوه‌ی تأثیرپذیری گسترش ترک در طول IASCC فولادهای زنگ نزن آستنیتی در رآکتورهای آب سبک [۶].

۱۵-۱ ترکِ خوردگی تنشی: آموزش

ترکِ خوردگیِ تنشی، ترک‌گذاری نابهنگام آلیاژ در حضور تنش کششی و محیط خورنده است. از لحاظ تاریخی، این اعتقاد وجود دارد که ترکِ خوردگیِ تنشی فقط هنگامی رخ می‌دهد که سه شرطی که عبارتند از آلیاژ مستعد، محیط ویژه و تنش کششی مهیا شود. در عمل اکثر *آلیاژها* در سراسر محدوده‌ی دمایی مستعد ترکِ خوردگیِ تنشی هستند. عبارت آلیاژ باید به صورت گسترده‌ای برای فلزات تجاری خالص ثبت شده تفسیر شود زیرا ترکِ خوردگیِ تنشی تابع قوی از مقدار ناخالصی‌های فلزات خالص است. به صورت مشابه، لازم است که محیط به صورت گسترده‌ای نسبت به پتانسیل تمام محیط‌ها نسبت به دیگر گازهای نجیب تفسیر شود زیرا بسیاری از گازها، محلول‌های آبی و فلزات مایع می‌توانند ترکِ خوردگیِ تنشی را افزایش دهند. مشخصه‌ی اختصاصی ترکِ

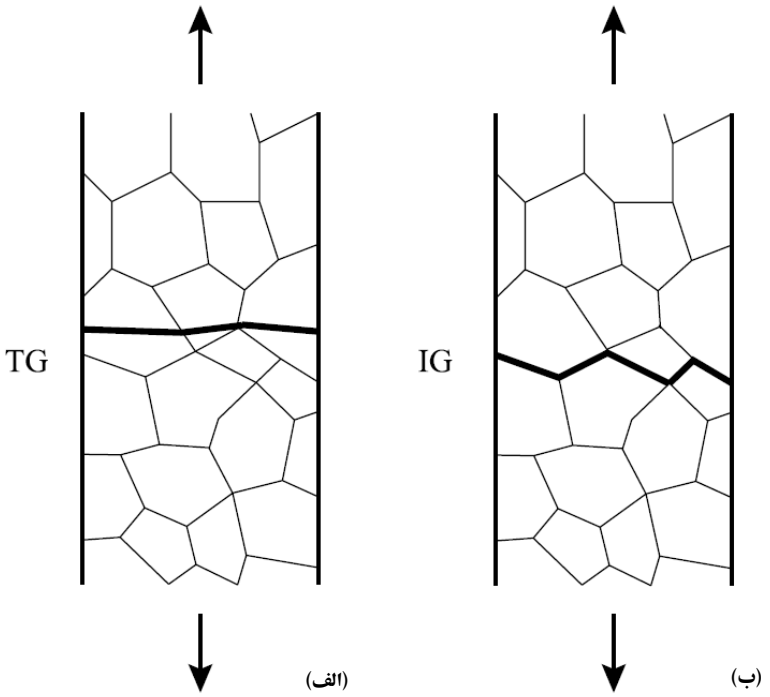
خوردگیِ تنشی نیاز به تنش است. درحالی‌که خوردگی موضعی می‌تواند در محیط عاری از تنش رخ دهد، ترکِ خوردگیِ تنشی فقط با تحمیل تنش کششی رخ می‌دهد. شکل ۱۵-۴ منحنی تنش ـ کرنش را برای آلیاژ در محیط خنثی در مقایسه با موردی نشان می‌دهد که در آن آلیاژ مستعد به ترکِ خوردگی تنشی است. ترکِ خوردگیِ تنشی کرنش تا نقطه‌ی پارگی و هم‌چنین بیشینه‌ی تنش را کاهش می‌دهد. ترک‌گذاری می‌تواند درون دانه‌ای[1] (TG) (مانند فولاد زنگ نزن ۳۰۴ در $MgCl_2$ جوشان در 154^oC) یا بین دانه‌ای (مانند فولاد زنگ نزن در آب 288^oC، شکل ۱۵-۵) باشد. برای نمونه، هنگامی که نرخ خوردگی کلی بالا باشد، قابلیت ترکِ خوردگیِ تنشی پایین است و هنگامی که نرخ خوردگی کلی پایین باشد، قابلیت ترکِ خوردگیِ تنشی بالا است.



شکل ۱۵-۴. اثر محیط روی رفتار تنش ـ کرنش فلزات تحت ترکِ خوردگی تنشی.

اغلب بین ترکِ خوردگی تنشی، تردی هیدروژنی و خستگی خوردگی تفاوت وجود دارد. در این‌جا ترکِ خوردگی تنشی برای اشاره به دسته‌ی بزرگی از ترک‌گذاری در فلز یا آلیاژ به علت فرایندهای شیمیایی یا الکتروشیمیاییِ مشتمل بر ترکیبی از محیط و تنش استفاده می‌شود. در این بحث هیدروژن تولید شده به وسیله‌ی واکنش‌های خوردگی تا زمانی که جذب هیدروژن از حالت گازی وجود نداشته باشد، شکلی از ترک خوردگی تنشی است. ترکِ خوردگیِ تنشی اغلب به وسیله‌ی بارگذاری ثابت یا بارگذاری فزاینده‌ی یکپارچه برحسب بارگذاری سیکلی، از خستگی خوردگی متمایز می‌شود.

1. Transgranular



شکل ۱۵-۵. شمایی از (الف) ترکِ خوردگی تنشی درون دانه‌ای و (ب) ترکِ خوردگی تنشی بین دانه‌ای.

خستگی خوردگی و تردی هیدروژنی در بخش‌های بعدی مورد بحث قرار خواهند گرفت. ترکِ خوردگی تنشی اغلب بعضی از مشخصه‌های زیر را نشان می‌دهد [۱۰]:

- موضعی شدن آسیب در تشکیل ترک‌های درون دانه‌ای یا بین دانه‌ای،
- بعضی از آلیاژهای بسیار مستعد اغلب بسیار مقاوم در برابر خوردگی هستند (برای مثال نرخ خوردگی فولاد زنگ نزن در $MgCl_2$ جوشان تقریباً صفر است؛ اما بسیار مستعد در برابر TGSCC است)،
- مقاومت در برابر ترکِ خوردگیِ تنشی وابسته به ترکیب آلیاژ است،
- ترکِ خوردگیِ تنشی وابستگی قوی به ریزساختار را نشان می‌دهد،
- آلیاژهایی که در محیط خنثی نرم هستند، در شیوه‌ی تردی تخریب می‌شوند،
- پلاریزاسیون کاتدی آغاز ترکِ خوردگیِ تنشی را به تعویق می‌اندازد.

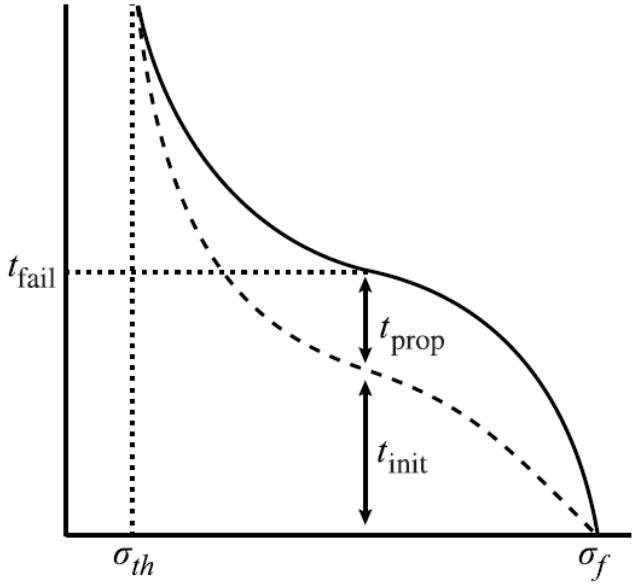
ترکِ خوردگی تنشی اغلب مدت زمانی را برای رخ دادن لازم دارد که زمان نهفتگی شناخته می‌شود. متعاقب آغاز ترک، ترک‌ها در نرخ آرامی گسترش می‌یابند تا تنش در قطعه‌ی باقی‌مانده فراتر از تنش شکست برود و پارگی ناشی از بار بیش از اندازه رخ می‌دهد. فرایند ترکِ خوردگیِ تنشی اغلب به وسیله‌ی مراحل زیر توصیف می‌شود:

- آغاز ترک که با گسترش مرحله‌ی ۱ دنبال می‌شود،
- مرحله‌ی ۲ یا گسترش حالت پایدار ترک،
- گسترش ترک مرحله‌ی ۳ یا پارگی نهایی.

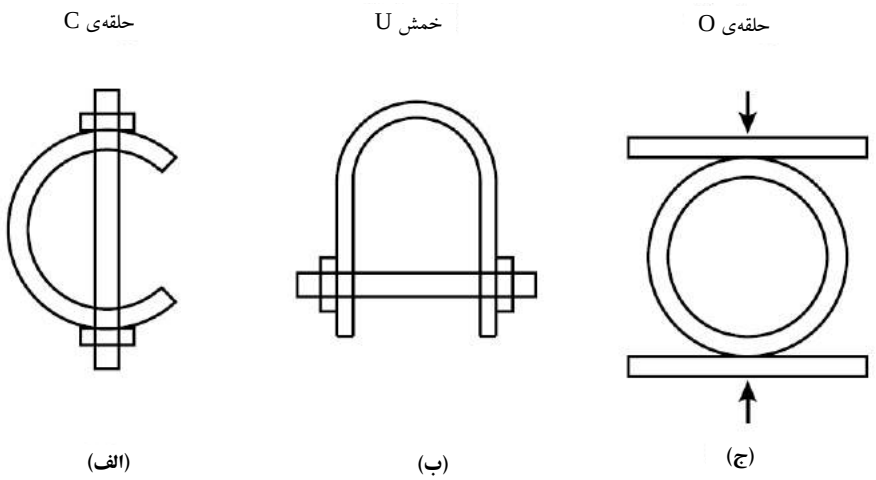
به هرجهت، و نه تمام آلیاژها این مراحل را نشان می‌دهند و مراحل ممکن است به راحتی از یک‌دیگر قابل تشخیص نباشند. برای تشخیص و شناسایی این سه مرحله شکست، آزمایش‌های مختلف ترکِ خوردگیِ تنشی گسترش یافته است و در این قسمت به صورت خلاصه توضیح داده می‌شود.

۱۵-۱-۱ آزمون‌های ترکِ خوردگیِ تنشی

تست‌های ترکِ خوردگی تنشی به سه دسته‌ی اصلی تقسیم می‌شوند: بارگذاری ایستایی نمونه‌های صاف، بارگذاری ایستایی نمونه های پیش ترک‌دار و آزمایش نرخ کرنش آرام. بارگذاری ایستایی نمونه‌های صاف، زمان لازم تا پارگی را به صورت تابعی از تنش اعمال شده در جایگاه اندازه‌ای از درجه قابلیت ترکِ خوردگی تنشی ارایه می‌دهند. شکل ۱۵-۶ منحنی زمان تا پارگی را برحسب تنش برای آلیاژ متحملِ ترکِ خوردگی تنشی نشان می‌دهد. حداقل تنشی که در آن پارگی رخ می‌دهد به منزله‌ی تنش آستانه، σ_{th} برای ترکِ خوردگیِ تنشی شناخته می‌شود. زمان پارگی هم زمان نهفتگی، t_{init} و هم زمان گسترش، t_{prop} را در بر می گیرد در نتیجه $t_{fail} = t_{init} + t_{prop}$ است. این آزمایش برای تعیین بیشینه‌ی تنشی که می‌تواند بدون خرابی ترکِ خوردگیِ تنشی در محیط ویژه اعمال شود استفاده می‌شود. مثال‌هایی از این تست‌ها حلقه C، خمش U و حلقه O هستند که در شکل ۱۵-۷ نشان داده شده است. در این تست‌ها، نمونه تا خمیدگی ثابتی تنش‌گذاری می‌شود و سپس در این موقعیت برای مدت زمان آزمون نگاه داشته می‌شود. در این شیوه، رهایش تنش می‌تواند رخ دهد در نتیجه تنش می‌تواند با پیشرفت آزمایش کاهش یابد. بدین لحاظ، آزمایش‌های بار ثابت گسترش پیدا کرده‌اند که در آن بار در طول آزمایش ثابت باقی می‌ماند.

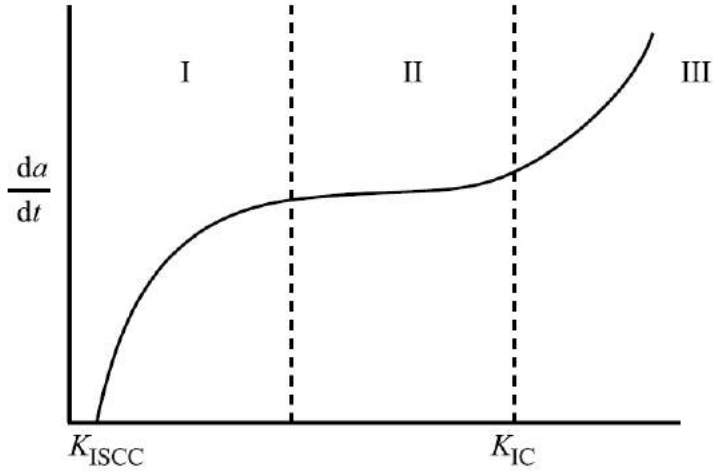


شکل ۱۵-۶. زمان پارگی به صورت تابعی از تنش برای آلیاژ تحت ترکِ خوردگی تنشی.
زمان پارگی مجموع زمان آغاز ترک و زمان گسترش ترک است.



شکل ۱۵-۷. آزمون‌های خمیدگی ثابت معمول مورد استفاده برای تعیین قابلیت نسبی آلیاژ در برابر ترکِ خوردگی تنشی. (الف) حلقه‌ی C، (ب) خمش U، و (ج) حلقه‌ی O.

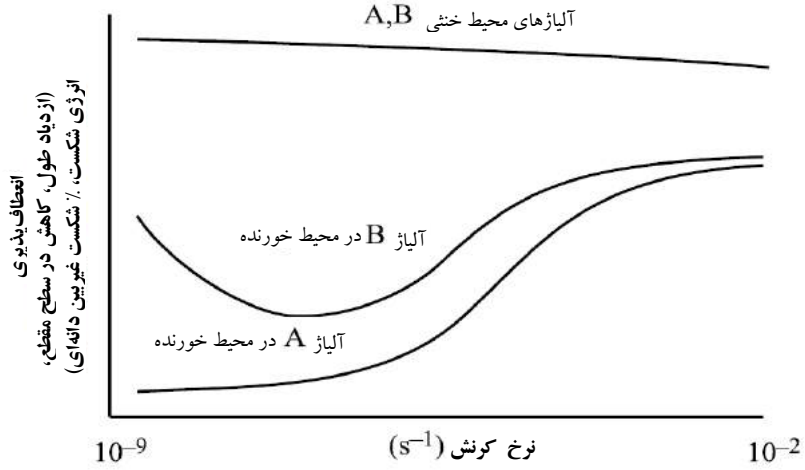
در بارگذاری ایستایی نمونه‌های پیش ترک‌دار، یک بار ثابت یا جابه‌جایی دهانه‌ی ترک ثابت به نمونه با پیش ترکی مانند نمونه‌ی کشش تراکمی (CT) یا نمونه‌ی تیر آزاد دو طرفه (DCB) اعمال می‌شود. طول ترک به صورت تابعی از زمان، اندازه‌گیری می‌شود که منجر به نرخ گسترش ترک (یا سرعت ترک) می‌شود که می‌تواند به صورت تابعی از شدت تنش، K، تشریح شود. شکل ۱۵–۸ منحنی از $\mathrm{d}a/\mathrm{d}t$ را برحسب منحنی K نشان می‌دهد که در آن سه مرحله‌ی ترک‌گذاری مشخص شده است. همان‌طوری که در فصل ۱۳ بحث شد، K تابعی از تنش اعمال شده، هندسه‌ی نمونه و ریشه‌ی دوم طول ترک است. در غیاب محیط خورنده، شکست هنگامی رخ می‌دهد که $K_{\mathrm{Ic}} \geq K$ (چقرمگی شکست کرنش صفحه‌ای) باشد. اثر محیط خورنده‌ی کاهش مقدار K است که در آن ترک رخ می‌دهد. وجود مشخصه‌ی حالت پایدار از ترک‌های مرحله‌ی II می‌تواند ناشی از محیط باشد. یعنی، در منطقه‌ای که محیط اثر شدیدی دارد، سرعت ترک وابسته به ضریب شدت تنش است.



شکل ۱۵–۸. نرخ رشد ترک به صورت تابعی از شدت تنش سر ترک. لازم به ذکر است که منطقه‌ی II وابسته به شدت تنش است که اثر محیط خورنده را نشان می‌دهد.

آزمون نرخ کرنش آرام، اعمال کرنش افزایشیِ تدریجی را شامل می‌شود که معمولاً با اعمال نرخ جابه‌جایی ثابت روی میله‌ی صاف یا نمونه‌ی پیش ترک‌دار انجام می‌شود. انعطاف‌پذیری در محیط خورنده، اندازه‌ای از قابلیت ترکِ خوردگیِ تنشی است و در برابر نرخ کرنش رسم می‌شود و می‌تواند با مقدار آن در محیط خنثی مقایسه شود (شکل ۱۵–۹). همان‌طوری که نشان داده شده است،

مقیاس‌های مختلفی برای نشان دادن حساسیت استفاده می‌شود مانند کرنش تا پارگی، کاهش مساحت، انرژی شکست یا درصدی از سطح شکست که ناشی از ترکِ خوردگیِ تنشی بوده است (درون دانه‌ای یا بین دانه‌ای). قابلیت ترکِ خوردگی تنشی به صورت کاهش در انعطاف‌پذیری در نرخ‌های کرنش پایین معلوم می‌شود زیرا زمان کافی برای محیط وجود دارد تا ترکِ خوردگیِ تنشی را القا کند. هم‌چنان که نرخ کرنش افزایش می‌یابد، زمان موجود برای خوردگی کاهش می‌یابد و انعطاف‌پذیری به مقادیر موجود در محیط خنثی نزدیک می‌شود. در نرخ‌های بسیار پایین، هم‌چنان که نرخ کرنش برای حفظ اثر محیط بسیار پایین نگاه داشته می‌شود، انعطاف‌پذیری می‌تواند افزایش یابد. آزمایش‌هایی که به منزله‌ی کشش نرخ کشیدگی ثابت[1] (CERT) یا کشش نرخ کرنش پایین[2] (SSRT) شناخته می‌شوند، شاخص‌های بسیار دقیقی از قابلیت نسبی آلیاژها به ترک خوردن در محیط یا برای مطالعه‌ی تأثیر متغیرهای متالوژیکی هستند. به هرجهت از آن‌جایی که آن‌ها مراحل آغاز و گسترش را ترکیب می‌کنند، در تعیین مرحله‌ی آغازین مؤثر نیستند. در اغلب موارد این آزمایشات برای ارزیابی ترکِ خوردگیِ تنشی متوسط تا شدید مؤثر هستند.



شکل ۱۵-۹. وابستگی نرخ کرنش مقادیر مختلف انعطاف‌پذیری. آلیاژهایی با هیچ‌گونه اثر محیطی، وابستگی نرخ کرنشی کمینه‌ای را دارند. در محیط خورنده، نرخ‌های کرنش پایین بسیار مخرب هستند و باعث کاهش زیاد در انعطاف‌پذیری می‌شوند [۱۰].

1. Constant Extension Rate Tensile
2. Slow Strain Rate Tensile

۱۵-۱-۲ فرایندهای ترکِ خوردگیِ تنشی

سازوکارهای ویژه‌ای از ترکِ خوردگیِ تنشی بعداً بحث خواهند شد؛ اما در این قسمت لازم است که فرایندهای اساسی ماورای این سازوکارها مورد توجه قرار گیرند. بسیاری از سازوکارهای پیشنهاد شده برمبنای فرایندهای آندی یا کاتدی هستند؛ اما بعضی صرفاً اکسیداسیون شیمیایی هستند. سازوکار باید نرخ‌های گسترش واقعی ترک، شکل‌های شکست نگاری و تشکیل ترک‌ها را مورد تشریح قرار دهد. به لحاظ اتمی این مقادیر چگونگی شکسته شدن پیوندهای اتمی را تشریح می‌کنند که در حقیقت به وسیله‌ی اکسیداسیون شیمیایی یا انحلال و حلال‌پوشی شیمیایی یا شکست مکانیکی (نرم یا ترد) رخ می‌دهند. نهایتاً فرض شده است که شکست مکانیکی به وسیله‌ی برهم‌کنش‌های میان ماده و محیط تحریک القا شده است. باید فرایندها و رخدادهای مشخصی رخ دهد تا گسترش ترک پایدار ممکن شود. شکل ۱۵-۱۰ سر ترک را نشان می‌دهد که در آن گسترش ترک از واکنش‌های موجود در فلز جلوی ترک منتشر شده، نتیجه شده است. عوامل تعیین کننده‌ی نرخ گسترش ترک عبارتند از [۱۰]:

۱. انتقال جرم در طول ترک به سر ترک،
۲. واکنش‌ها در محلول نزدیک ترک،
۳. جذب سطحی در سر ترک یا نزدیک سر ترک،
۴. نفوذ سطحی،
۵. واکنش‌های سطحی،
۶. جذب به درون حجم،
۷. نفوذ حجمی به منطقه‌ی پلاستیک جلوی سر ترک،
۸. واکنش‌های شیمیایی در حجم،
۹. نرخ گسیختگی پیوندهای درون اتمی.

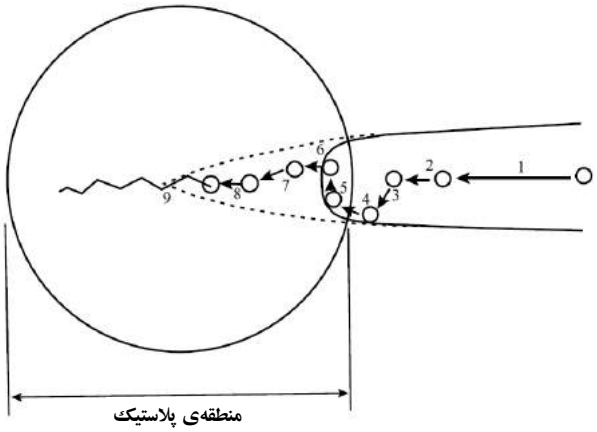
علاوه بر این فرایندها، غیرفعال شدن لایه‌ی سطحی به وسیله‌ی اکسید محافظ سطحی فرایند مهمی است که می‌تواند به شدت ترک‌گذاری خوردگی تنشی را تحت تأثیر قرار دهد. عوامل محیطی که می‌توانند گسترش ترک در محلول‌های آبی را تحت تأثیر قرار دهند عبارتند از:

- دما
- فشار
- گونه‌های حل شونده

- غلظت مواد حل شده و فعالیت
- pH
- پتانسیل الکتروشیمیایی
- روانروی محلول
- نرخ آشفتگی/جریان

عامل مهم در فرایند ترک‌گذاری این است که محیط احاطه کننده‌ی موقعیت‌هایی مانند سر ترک می‌تواند به صورت قابل توجهی متفاوت از چیزی باشد که در محلول حجمی است. اگر تغییر در محیط حجمی، تشکیل محیط بحرانی ترک خوردگی تنشی را در جوانه ترک ممکن سازد، سپس گسترش ترک نتیجه خواهد شد. اگر حجم نتواند این محیط موضعی سر ترک را حفظ کند، گسترش ترک به تأخیر خواهد افتاد. نرخ‌های گسترش ترک خوردگی تنشی هم‌چنین با تعدادی از عوامل مکانیکی و متالورژیکی تأثیر می‌پذیرند، مانند:

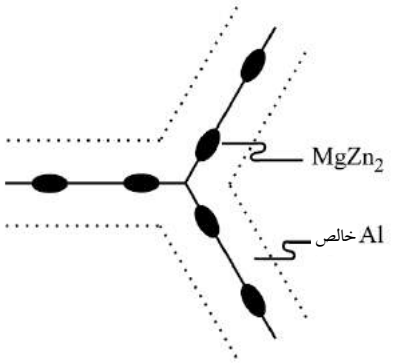
- بزرگی تنش اعمال شده یا ضریب شدت تنش، K
- نرخ تنش: تنش صفحه‌ای برحسب کرنش صفحه‌ای
- مد بارگذاری در سر ترک
- ترکیب آلیاژ (اسمی و موضعی)
- شرایط متالورژیکی (فازهای ثانویه در مرزدانه و زمینه، ترکیب فازی و شکل، اندازه دانه، جدایش مرزدانه‌ای، سطح استحکام، تنش‌های باقی مانده)
- هندسه ترک (طول، تناسب ابعاد، دهانه‌ی ترک)



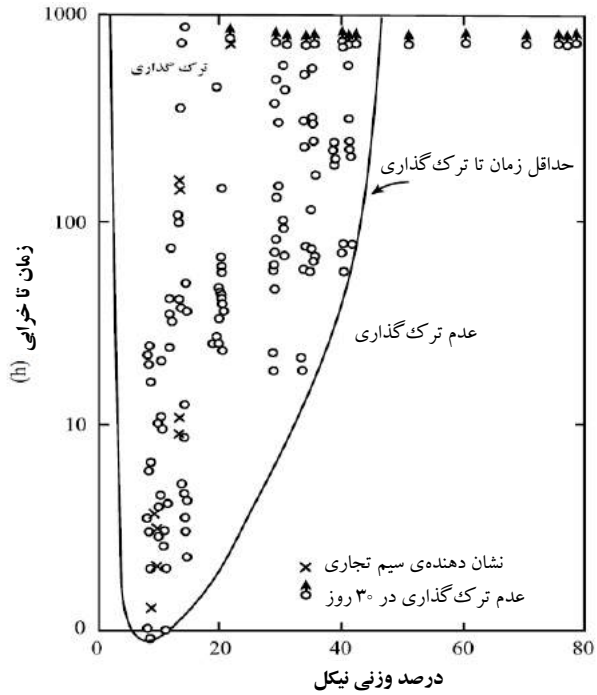
شکل ۱۵-۱۰. شمایی از فرایندهای سر ترک که ممکن است در طول گسترش ترک با کمک محیط رخ دهند [۱۰].

۱۵-۱-۳ شرایط متالورژیکی

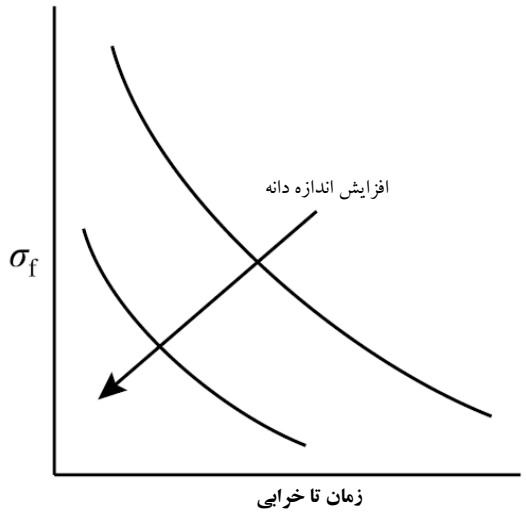
هم‌چنان که قبلاً ذکر شد، فلزات خالص از آلیاژها یا فلزات خالص تجاری حساسیت کم‌تری در قبال ترک خوردگی تنشی دارند [۱۱]. به هرجهت، عبارت خالص ممکن است که به معنی ۹۹/۹۹۹٪ یا بهتر باشد، بنابراین عبارتی بسیار کلی است. از طرف دیگر شیمی مرزدانه و ساختار اغلب نقش بسیار حایز اهمیتی را در ترک خوردگی تنشی ایفا می‌کند. ترک خوردگی بین دانه‌ای آهن با خلوص بالا، ناشی از ناخالصی‌های مرزدانه‌ای است. آلیاژ ۷۰۷۵ آلومینیوم (Al-Zn-Mg) به صورت بین دانه‌ای در کلریدها و هالیدها به علت تهی‌سازی مرزدانه‌ای منیزیوم و روی شکسته می‌شود که به علت رسوب‌گذاری $MgZn_2$ در مرزدانه است (شکل ۱۵-۱۱). فاز $MgZn_2$ به صورت ترجیحی حل شده و منجر به ایجاد حفره‌هایی در مرزدانه می‌شود و پیوندهای ضعیف شده آلومینیوم به صورت مکانیکی گسیخته می‌شوند. وابستگی قوی ترک‌گذاری در آلیاژهای Fe-18Cr-xNi به مقدار نیکل در $MgCl_2$ جوشان مثالی از اثر مقدار حجمی آلیاژ روی ترک خوردگی تنشی است. بالاترین قابلیت ترک خوردگی در غلظتی در حدود ۸٪ نیکل رخ می‌دهد، شکل ۱۵-۱۲، غلظتی است که در آن نرخ خوردگی کلی کم‌ترین است. اندازه دانه می‌تواند ترک خوردگی تنشی را تحت تأثیر قرار دهد، به این صورت که قابلیت ترک خوردگی با اندازه دانه افزایش می‌یابد. هم‌چنان که دانه‌ها بزرگ‌تر می‌شوند، نابجایی‌های سپرگذاری شده در مرزدانه‌ها بزرگ‌تر می‌شوند، و کرنش‌ها و تنش‌های موضعی بالاتری را تولید می‌کنند (مطابق رابطه‌ی هال ـ پچ) و قابلیت ترک خوردگی تنشی افزایش می یابد (شکل ۱۵-۱۳).



شکل ۱۵-۱۱. تشکیل $MgZn_2$ و تهی‌شدن Mg و Zn از مرزدانه که منجر به مرزدانه‌ی ضعیف و ترک‌گذاری خوردگی تنشی بین دانه‌ای در آلیاژ Zn-Mg می‌شود.



شکل ۱۵-۱۲. اثر مقدار نیکل روی ترکِ خوردگی تنشی در آلیاژهای Fe-Cr-Ni در معرض محلول $MgCl_2$ ۴۲٪ جوشان در 154^oC [۱۲].



شکل ۱۵-۱۳. اثر اندازه دانه روی رابطه‌ی میان تنش پارگی و زمان تا پارگی به وسیله‌ی ترک خوردگی تنشی.

۱۵-۱-۴ آغاز ترک و انتشار ترک

فرایند ترکِ خوردگی تنشی اغلب به مراحل آغاز و انتشار تقسیم می‌شود. مکان‌های معمول برای آغاز ترک خوردگی تنشی عبارتند از:

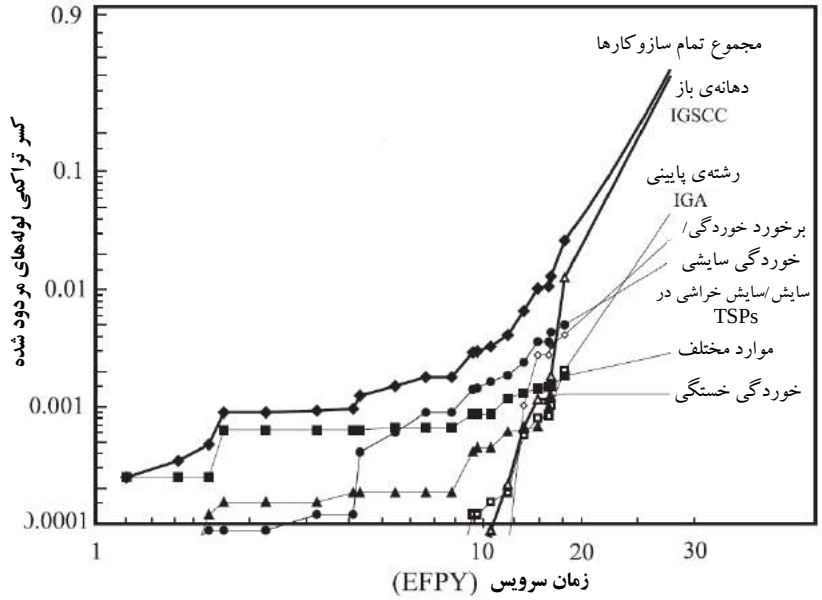
- ترکیب‌های سطحی از پیش موجود یا خورده شده مانند شکاف‌ها یا برآمدگی‌های تیز،
- حفره‌های القا شده در اثر خوردگی
- خوردگی بین دانه‌ای یا فرایندهای انحلال لغزشی[1]. ترک خوردگی تنشی آغاز شده از طریق خوردگی بین دانه‌ای تفاوت موضعیِ شیمیِ مرزدانه را نیاز دارد (برای مثال فولاد زنگ نزن حساس شده برای جدایش مرزدانه‌ای). ترک خوردگی تنشی آغاز شده به وسیله‌ی انحلال لغزشی، خوردگی موضعی در صفحات لغزشی پیش آمده در مواد نقص در چیده شدن پایین را نیاز دارد.

درحالی‌که آغاز ترک جنبه‌ی بسیار مهمی است، به علت پیچیدگی فرایندها و دشواری تعریف فازهای ابتدایی، دانش کافی در زمینه‌ی مرحله‌ی آغاز ترک‌های خوردگی تنشی وجود ندارد. به علاوه تمایز مابین آغاز ترک و مراحل گسترش نامشخص است. با وجود این اهمیت مرحله‌ی آغاز ترک نباید بیش از اندازه در نظر گرفته شود. شکل ۱۵-۱۴ منحنی‌ای از کسر خرابی انباشته از آلیاژ اینکونل ۶۰۰ (Ni-16Cr-9Fe) لوله‌های ژنراتور بخار را به صورت تابعی از سال‌های پرتوگیری مؤثر در توان کامل[2] (EFPY) را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که ترک‌گذاری روی سمت دیگر (دهانه‌ی باز در IGSCC) در پایه‌ی داغ حتی ۱۰ سال بعد از راه‌اندازی ظاهر نمی‌شود. با وجود این بعد از ۱۳ سال، این مد تخریب به دیگر مدهای تخریب در ژنراتور ترکیبی بخار غالب می‌شود. در حقیقت نرخ رشد به اندازه‌ای بالا بوده است که تصمیم گرفته شده است که ژنراتور بخار دو سال بعد از جمع‌آوری این اطلاعات تعویض شود. در این مورد به وضوح ، آغاز ترک زمان قابل توجهی را نیاز دارد؛ اما زمانی که ترک آغاز شده، گسترش ترک با سرعت زیادی انجام می‌شود.

ممکن است که ترک‌ها در درزهای ریز سطحی از قبل موجود، آغاز شوند یا ممکن است که فرایندهای خوردگی، ترک سطحی را به وسیله‌ی حفره‌دار کردن یا خوردگی موضعی، به عبارت دیگر، حمله‌ی مرزدانه‌ای یا خوردگی گریفیث ایجاد کنند. به هرجهت شرایطی که در آن ترک

1. Slip-dissolution
2. Effective Full Power Years

گسترش خواهد یافت، ضرورتاً مشابه نیستند. ملزومات ترمودینامیکی و شرایط سینتیکی باید با یک‌دیگر همراه شده تا ترک آغاز شود یا رشد کند.



شکل ۱۵-۱۴. کسر تراکمیِ لوله‌های ژنراتور بخار مردود شده برای مدهای تخریب مختلف در دوره‌ی کاری ژنراتور بخار. لازم به ذکر است که دهانه‌ی باز IGSCC (*خط نازک*) تا ۱۰ سال قابل اندازه‌گیری نیست، بعد از ۱۳ سال این مد تخریب از دیگر مدهای تخریب در ژنراتور ترکیبی بخار غالب می‌شود.

ترمودینامیک ترک خوردگی تنشی

شرایط ترمودینامیکی ترک خوردگی تنشی مرتبط با اکسیداسیون به این صورت هستند که از لحاظ ترمودینامیکی باید انحلال فلز در الکترولیت ممکن باشد و آن‌که فیلم محافظ، مانند اکسید یا نمک، باید از لحاظ ترمودینامیکی پایدار و کاملاً انحلال ناپذیر باشد. تمایل فلز برای خورده شدن به وسیله‌ی معادله‌ی نرست[1] تعیین می‌شود، که نیروی پتانسیل الکتروموتوری[2] را نشان می‌دهد، نیروی پتانسیل الکتروموتوری سلول برحسب فعالیت محصولات و واکنش دهنده‌های سلول برابر است با:

1. Nernst Equation
2. Electromotive force potential

(۱-۱۵)

$$E - E^0 = \frac{-RT}{nF} \ln \frac{a_{\text{product}}}{a_{\text{reactant}}} ,$$

که E پتانسیل الکترود تعادلی و E^0 پتانسیل الکترود استاندارد، T دما، n تعداد الکترودهای موجود در واکنش، F ثابت فارادی و a فعالیت است. پتانسیل الکترود به صورت زیر مرتبط با انرژی آزاد است:

(۲-۱۵)

$$\Delta G = -nFE .$$

در نتیجه، احتمال خوردگی فلز وابسته به این است که آیا پتانسیل واقعی الکترود، بالا یا پایین پتانسیل الکترود تعادلی آن‌ها باشد. اگر پتانسیل الکترود بالای پتانسیل تعادلی باشد، سپس واکنش اکسیداسیون پیش خواهد رفت. واکنش‌ها می‌تواند مطابق با نیروی پتانسیل الکتروموتوری‌شان تنظیم شوند که در نقش سری‌های نیروی الکتروموتوری در جدول ۱۵-۱ نشان داده شده است. در این جدول، واکنش‌ها به صورت واکنش‌های احیا نوشته شده‌اند که از سمت چپ به راست با پتانسیل استاندارد مرتبط پیش می‌روند. در انتهای بی اثر این سری‌ها فلزات نجیب طلا و پلاتین قرار دارند، درحالی‌که انتهای فعال دربر گیرنده‌ی عناصر فعال پتاسیم و سدیم است. این واکنش‌ها نیم واکنش‌های سلولی هستند زیرا فقط نیمی از واکنش‌های کامل شامل واکنش‌های آندی و کاتدی را دربر می‌گیرند. به هرجهت، جدول ابزار معمول برای مقایسه‌ی موقعیت‌های نسبی واکنش‌ها از مقیاس استاندارد است.

مثالی از تعیین نیروی پتانسیل الکتروموتوری سلول، خوردگی روی با احیای کاتدی هیدروژن (یا اکسیژن) است. واکنش‌های آندی و کاتدی و واکنش کل به صورت زیر نوشته می‌شوند:

آندی: $Zn \rightarrow Zn^{2+} + 2e^-$

کاتدی: $2H^+ + 2e^- \rightarrow H_2$ ($O_2 + 4H^+ + 4e^- \rightarrow 2H_2O$)

کلی: $Zn + 2H^+ \rightarrow Zn^{2+} + H_2(g)$

جدول ۱۵-۱. استاندارد نیروهای پتانسیل الکتروموتوری (پتانسیل‌های احیاء) [۱۱].

	واکنش	پتانسیل استاندارد E^0, (volts vs. SHE)
نجیب	$Au^{3+} + 3e^- = Au$	+1.498
	$Cl_2 + 2e^- = 2Cl^-$	+1.358
	$O_2 + 4H^+ + 4e^- = 2H_2O$ (pH 0)	+1.229
	$Pt^{3+} + 3e^- = Pt$	+1.2
	$O_2 + 2H_2O + 4e^- = 4OH^-$ (pH 7)	+0.82
	$Ag^+ + e^- = Ag$	+0.799
	$Hg_2^{2+} + 4e^- = 2Hg$	+0.788
	$Fe^{3+} + e^- = Fe^{2+}$	+0.771
	$O_2 + 2H_2O + 4e^- = 4OH^-$ (pH 14)	+0.401
	$Cu^{2+} + 2e^- = Cu$	+0.337
	$Sn^4 + 2e^- = Sn^{2+}$	+0.15
	$2H^+ + 2e^- = H_2$	0.000
	$Pb^{2+} + 2e^- = Pb$	−0.126
	$Sn^{2+} + 2e^- = Sn$	−0.136
	$Ni^{2+} + 2e^- = Ni$	−0.250
	$Co^{2+} + 2e^- = Co$	−0.277
	$Cd^{2+} + 2e^- = Cd$	−0.403
	$Fe^{2+} + 2e^- = Fe$	−0.440
	$Cr^{3+} + 3e^- = Cr$	−0.744
	$Zn^{2+} + 2e^- = Zn$	−0.763
	$2H_2O + 2e^- = H_2 + 2OH^-$	−0.828
	$Al^{3+} + 3e^- = Al$	−1.662
	$Mg^{2+} + 2e^- = Mg$	−2.363
	$Na^+ + e^- = Na$	−2.714
فعال	$K^+ + e^- = K$	−2.925

پتانسیل‌های الکترودهای تعادلی و پتانسیل سلول مرتبط با واکنش‌ها مطابق با معادله‌ی ۱۵-۱ به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$E_{Zn} = E^0_{Zn} - \frac{0.0257}{2} \ln \frac{a_{Zn^{2+}}}{a_{Zn}}, \quad a_{Zn} = 1 ,$$

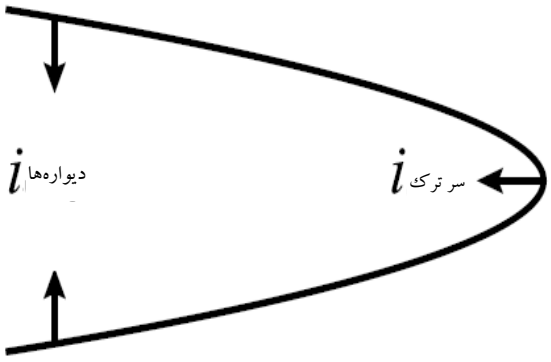
$$E_{H_2} = E^0_{H_2} - \frac{0.0257}{2} \ln \frac{p_{H_2}}{a^2_{H^+}} ,$$

$$E_{cell} = E_{Zn} + E_{H_2}$$

$$= E^0_{Zn} + E^0_{H_2} - \frac{0.0257}{2} \ln a_{Zn^{2+}} + 0.0257 pH - \frac{0.0257}{2} \ln p_{H_2} .$$

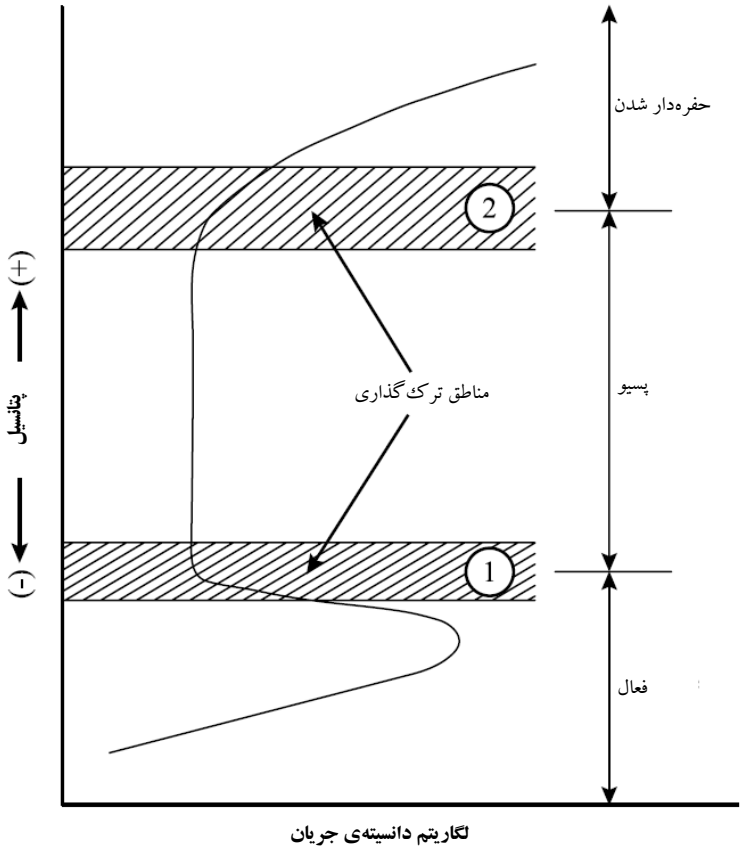
از این‌رو پتانسیل سلول برای واکنش کلی تابعی از pH، اکتیویته‌ی یون‌های Zn^{2+} و فشار گاز هیدروژن است.

بدون اکسیداسیون یا انحلال آندی، ترک‌ها پیشرفت نخواهند کرد. رخداد هم‌زمان تشکیل فیلم و اکسیداسیون در طول رشد ترکِ خوردگی تنشی می‌تواند از شکل ۱۵-۱۵ فهمیده شود، که ترک را نشان می‌دهد که در آن انحلال در سر ترک و دیواره‌ها رخ داده است. نسبت جریان‌های آندی از دیواره‌ها نسبت به سر ترک عامل بحرانی است. نسبت $i_{\text{سر}} / i_{\text{دیواره‌ها}}$ باید کم‌تر از ۱ باشد تا ترک گسترش یابد در غیر این صورت سر ترک کند خواهد شد.



شکل ۱۵-۱۵. نمایش شماتیک نشان دهنده‌ی جریان خوردگی از دیواره‌ها و سر یک ترک.

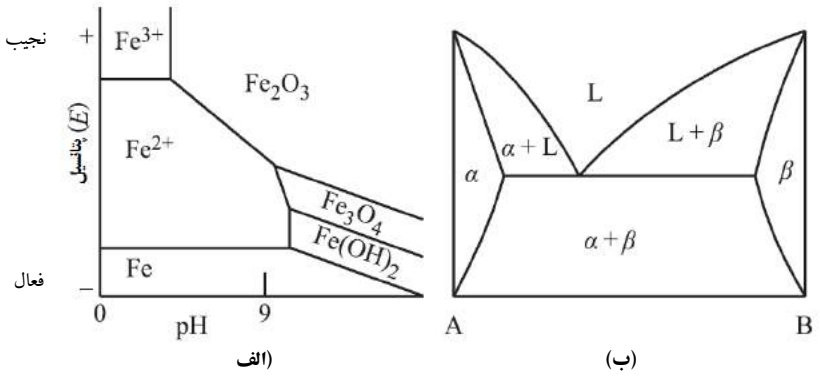
شکل ۱۵-۱۶ منحنی پلاریزاسیون را برای آلیاژ فعال ـ غیرفعال نشان می‌دهد.لازم به ذکر است که دو منطقه وجود دارد که در آن رخ دادن ترک خوردگی تنشی بسیار محتمل است. در منطقه‌ی ۱، آلیاژ در گذار فیلم فعال به غیرفعال قرار دارد در نتیجه شرایط هم‌زمان برای تشکیل فیلم روی دیواره‌ی ترک‌ها و خوردگی در سر ترک‌ها وجود دارد. در منطقه‌ی ۲، شرایطی وجود دارد که در آن پتانسیل، بالای پتانسیل حفره‌دار شدن است و ترک‌ها می‌توانند از حفره‌ها آغاز شوند. از لحاظ عملی، IGSCC می‌تواند در سرتاسر محدوده‌ی بین مناطق ۱ و ۲ رخ دهد زیرا غیرهمگنی‌های شیمیایی در مرزدانه، واکنش الکتروشیمیاییِ متفاوتی را از مواد حجمی تولید می‌کند.



شکل ۱۵-۱۶. منحنی شماتیک پلاریزاسیون آندی که نشان دهنده‌ی محدوده‌های پتانسلی است که در سرتاسر آن‌ها قابلیت ترکِ خوردگی تنشی رخ می‌دهد [۱۳].

نمودارهای پوربه

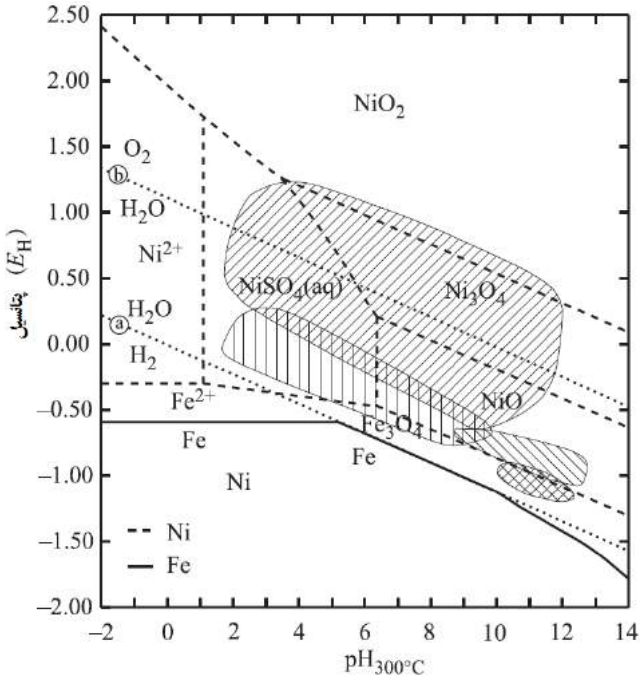
حوزه‌های پایداری شکل‌های مختلف فلز؛ حالت فلزی، یون‌های فلزی، اکسیدها و غیره می‌توانند به صورت نمایش گرافیکی نشان داده شوند که به منزله‌ی نمودار پایداری پوربه شناخته می‌شوند و به وسیله‌ی مارسل پوربه[1] فراهم شده است [۱۴]. این نمودار بر پایه‌ی محاسبات ترمودینامیکی برای تعدادی از گونه‌های شمیایی مشخص و تعادل مابین آن‌ها است. پیش‌بینی آن‌که آیا فلز خورده می‌شود یا خیر، از نمودار پتانسیل ـ pH امکان‌پذیر است؛ اما تعیین مدت زمانی که فلز وجود خواهد داشت یا مقدار سریع بودن خوردگیِ آن امکان‌پذیر نیست. شکل ۱۵–۱۷ الف نمودار پوربه برای آهن در آب و در $25\ ^{o}C$ را نشان می‌دهد که فعالیت‌های یونی در 10^{-6} تنظیم شده‌اند. نمودار تعادلی با نمودار فازی تعادلی قابل مقایسه است، شکل ۱۵–۱۷ب، که در آن تعادل فازی بین فلز، یون‌های فلزی و اکسیدهای فلزی در محلول‌های آبی به خوبی نشان داده شده است. در این نمودارها، خطوط افقی واکنش‌های خالص انتقال بار را نشان می‌دهند که فقط مشتمل بر الکترون‌ها و گونه‌های احیا شده و اکسید شده و نه پروتون‌ها هستند. از آن‌رو ، آن‌ها به وسیله‌ی pH تأثیر نمی‌پذیرند. خطوط عمودی واکنش‌های بر پایه‌ی اسیدی را نشان می‌دهند که در آن‌ها هیچ‌گونه انتقال باری وجود ندارد و از آن‌رو مستقل از پتانسیل هستند. واکنش‌های دربرگیرنده‌ی انتقال الکترونی و پروتونی به وسیله‌ی خطوط شیب‌دار نشان داده می‌شوند.



شکل ۱۵–۱۷. مقایسه‌ی (الف) نمودار پوربه با (ب) نمودار فازی. هر دو نمودار مناطقی را که در آن‌ها فازهای مختلف به صورت ترمودینامیکی پایدار هستند نشان می‌دهند.

1. Marcel Pourbaix

مکان‌یابی از مناطقی که در آن‌ها ترکِ خوردگی تنشی روی نمودار پوربه رخ می‌دهد، فازهایی را که مرتبط با ترک خوردگی هستند تعیین می‌کند. شکل ۱۵–۱۸ نمودار پوربه برای نیکل و آهن را در آب ^{o}C ۳۰۰ نشان می‌دهد که در آن ترکِ خوردگی تنشی با پتانسیل‌ها و pHهایی همراه است که خط پایداری Ni/NiO را دنبال می‌کنند. اثر بسیاری از عوامل محیطی مانند pH، غلظت اکسیژن و دما روی شرایط ترمودینامیکی برای ترکِ خوردگی تنشی به نحوه تأثیرگذاری روی نمودار پتانسیل ـ pH مرتبط است. برای موادی که در آن‌ها ترکِ خوردگی تنشی با سازوکار رشد ترک القایی هیدروژنی رخ می‌دهد، ملزومات ترمودینامیکی برای رشد ترک با خط احیای هیدروژن (a) کنترل می‌شود. محدوده‌ی پتانسیل‌هایی که در آن هیدروژن برای ایجاد رشد ترک موجود است، با کاهش pH افزایش یافته و بسیار اکسید کننده‌تر می‌شود. به هر جهت، پتانسیل و pH در سر ترک می‌توانند اساساً از مقدار آن‌ها در سطح آزاد به علت تولید، واکنش و نفوذ اکسیژن یا یون‌های فلزی به درون ترک متفاوت باشد. این فرایندها منجر به کاهش در پتانسیل و انتقال در pH می‌شوند. در محیط‌های اسیدی، واکنش‌های آندی و کاتدی برابرند با:



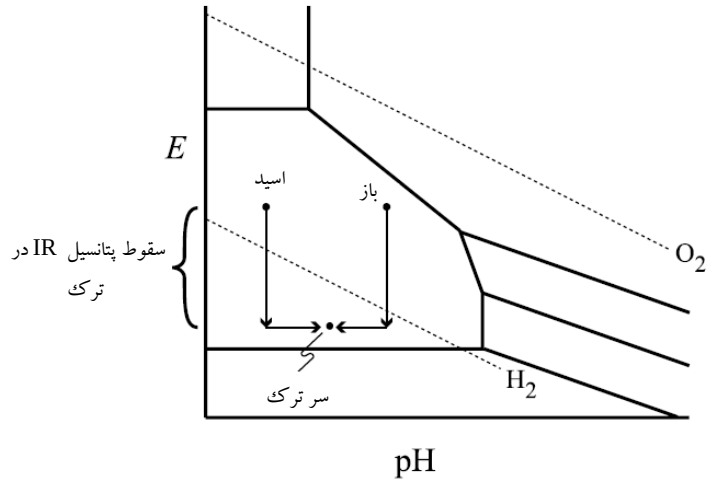
شکل ۱۵–۱۸. شیوه‌های ترک خوردگی تنشی مختلف به صورت تابعی از پتانسیل و pH که روی نمودارهای پایداری نیکل و آهن در ^{o}C ۳۰۰ رسم شده است [۱۵].

آندی : $M \rightarrow M^{2+} + 2e^-$
کاتدی : $O_2 + 4H^+ + 4e^- \rightarrow 2H_2O$

مصرف H^+ منجر به افزایش در pH می‌شود. در محیط‌های قلیایی واکنش‌های آندی و کاتدی برابرند با:

آندی : $M \rightarrow M^{2+} + 2e^-$
کاتدی : $O_2 + 2H_2O + 4e^- \rightarrow 4OH^-$

اما به علت هیدرولیز فلزی محیط قلیایی، واکنش $M^{2+} + 2H_2O \rightarrow M(OH)_2 + 2H^+$ وجود دارد و pH کاهش می‌یابد. در هر دو مورد، مقاومت افزایش یافته در ترک یا گریفیث به علت حباب‌های گازی، برای مثال، منجر به افت اهمی ایجاد کننده‌ی کاهش در پتانسیل سر ترک از سطح نمونه در حدود بالای چند صد میلی‌ولت می‌شود. نتیجه‌ی این فرایندها برای آب گازدار که در آن شرایط سر ترک به سمت پتانسیل‌های پایین و pH متوسط تحریک شده است در شکل ۱۵-۱۹ نشان داده شده است که هر دو آن‌ها به صوت قابل توجهی از مقادیر آن‌ها در سطح نمونه متفاوت است.



شکل ۱۵-۱۹. نمودار پوربه شماتیک که نشان دهنده‌ی تغییر در پتانسیل و pH محلول‌های حجمی قلیایی و اسیدی بر حسب سر ترک است.

جنبش‌شناسی ترک خوردگی تنشی

در شرایط ترمودینامیکی برای ترک خوردگی تنشی، عوامل محیطی مانند پتانسیل، pH، غلظت اکسیژن و دما به همراه هندسه‌ی ترک و شیمی سر ترک، به شدت جنبش‌های رشد ترک را تحت تأثیر قرار می‌دهند. نرخ خوردگی، یا جریان خوردگی با $i_{corr} = i_a = i_c$ تعیین می‌شود که i_a جریان آندی و i_c جریان کاتدی است. یعنی، به علت بقای بار، نرخ اکسیداسیون آندی باید برابر با نرخ احیا کاتدی باشد. جریان‌های آندی و کاتدی از نظر بزرگی در پتانسیلی که به منزله‌ی پتانسیل خوردگی شناخته می‌شود، E_{corr} برابر هستند. نرخ‌های خوردگی از طریق رابطه‌ی زیر به پتانسیل خوردگی مرتبط هستند:

(۳-۱۵)

$$i_a = i_0 e^{(1-\beta)\eta F/RT}, \quad i_c = i_0 e^{-\beta\eta F/RT},$$

که i_0 دانسیته‌ی تبادل جریان، β ضریب تقارن، و η اضافه ولتاژ تعریف شده به صورت $\eta = E_{corr} - E$ است که E پتانسیل تعادلی برای واکنش‌های کاتدی و آندی است. از آن‌رو، معادله‌ی ۱۵-۳ نشان می‌دهد که جریان‌های آندی و کاتدی به وسیله‌ی تفاوت میان پتانسیل خوردگی و پتانسیل‌های تعادلی استخراج شده‌اند.

برای موردی که ترک تنها به وسیله‌ی انحلال آندی رشد می‌کند، گسترش کلی ترک تابعی از انتقال کلی بار آندی (انتگرال جریان در کل زمان) در سر ترک است و بنابراین، سرعت ترک تابعی از میانگین دانسیته‌ی جریان سر ترک است. برای گسترش ترک تحت انحلال آندی خالص با روابط فارادی، سرعت معینی نتیجه می‌شود:

(۴-۱۵)

$$\dot{a} = \frac{da}{dt} = \frac{i_a M}{nF\rho},$$

که i_a دانسیته‌ی جریان آندی از سطح باز، M جرم اتمی، n ظرفیت، F ثابت فارادی و ρ دانسیته است.

معادله‌ی ۱۵-۴ فرض می‌کند که سر ترک در حالت لخت[1] باقی‌مانده درحالی‌که دیواره‌های ترک نسبتاً غیرفعال است (برای جلوگیری از کند شدن سر ترک). تعدادی از عوامل می‌توانند سرعت ترک را کاهش دهند، که قاعده‌ی کلی آن‌ها تشکیل فیلم است که سر ترک را پوشش می‌دهد. دیگر عواملی که می‌توانند سرعت ترک را محدود کنند عبارت است از:

- محدودیت نفوذ گونه‌ها به داخل یا بیرون از ترک
- رشد ترک دور از تنش اصلی
- تغییر در شیمی موضعی آلیاژ
- خوردگی دیواره‌ی ترک

۱۵-۱-۵ سازوکارهای ترکِ خوردگی تنشی

ترکِ خوردگی تنشی، با توجه به ماهیتش، به فرایندهای شیمیایی و الکتروشیمیایی دربرگیرنده‌ی واکنش‌های اکسیداسیون و احیا اشاره دارد که تمایل ترمودینامیکی آن‌ها به وسیله‌ی معادله‌ی نرنست توضیح داده می‌شود. تحت شرایط مشخص، این واکنش‌ها خودشان را به شکل ترکِ خوردگی تنشی نمایان می‌سازند. سازوکاری‌هایی که به وسیله‌ی آن این ترک‌ها شکل گرفته و گسترش می‌یابند، کاملاً در توافق نیستند. نظریه‌های پیشتاز، ترکِ خوردگی تنشی مسیر فعال[2] و مدل گسیختگی فیلم هستند.

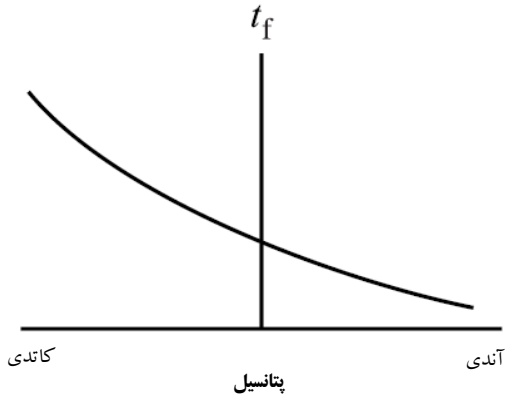
ترکِ خوردگی تنشی مسیر فعال

ترکِ خوردگی تنشی مسیر فعال اولین بار در سال ۱۹۴۰ برای تشریح حمله‌ی مرزدانه‌ای سریع تشریح شد و بر پایه‌ی ایجاد سلول‌های گالوانیکی بین فلز اصلی و مسیرهای آندی تنظیم شده به وسیله‌ی فازهای ناهمگن (یا عناصر جدایش یافته) در طول مرزدانه‌ها یا صفحات لغزشی است. ترکِ خوردگی تنشی مسیر فعال هم‌چنین به انحلال ترجیحی فاز در آلیاژ اشاره دارد. تنش‌های اعمال شده فیلم‌های اکسیدی را پاره کرده و سطوح فلزی جدید را در معرض انحلال قرار می‌دهند. عقیده‌ی پشت این نظریه به این صورت است که انحلال ترجیحی در صفحات لغزشی و به علت افزایش تعداد

1. Bare condition
2. Active path

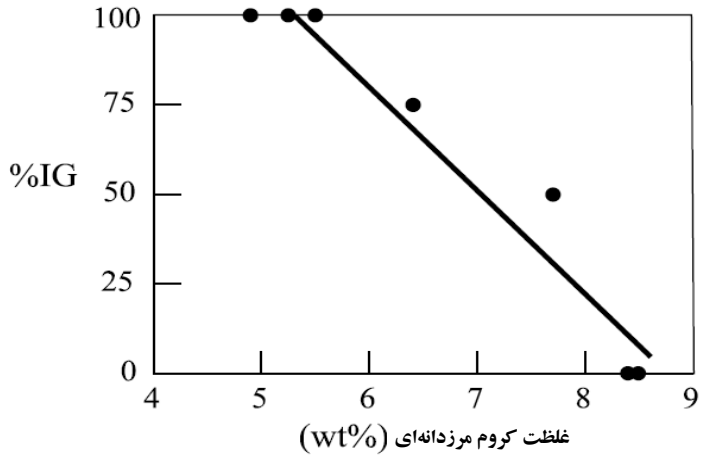
موقعیت‌های مرجح رخ می‌دهد. تغییر شکل پلاستیک در اصل تغذیه‌ی ماده‌ی لخت به الکترولیت برای مصرف با اثر خالص افزایش دانسیته‌ی جریان تبادل است و از آن‌رو منجر به افزایش نرخ خوردگی می‌شود. ترکِ خوردگی تنشی مسیر فعال باید وابستگی زمان تا پارگی را به جریان دنبال کند که به وسیله‌ی منحنی موجود در شکل ۱۵–۲۰ توضیح داده می‌شود. به هرجهت، انحلال الکتروشیمیایی در سر ترک تمایل به کند کردن ترک دارد تا آن‌که در گسترش آن سهیم شود. در نتیجه ترکِ خوردگی تنشی مسیر فعال توضیح قابل پذیرش برای ترک‌های خوردگی تنشی نیست.

باید ذکر شود که خوردگی مسیر فعال می‌تواند در جدایش بین دانه‌ای سهیم شود. شکست بین دانه‌ای آلیاژهای Ni-Cr-Fe در تتراتیونات سدیم[1]، $Na_2S_4O_6$ (pH~ ۳–۴)، به شدت وابسته‌ی سطح کروم مرزدانه‌ای است (شکل ۱۵–۲۱). این عقیده وجود دارد که ترک خوردگی به وسیله‌ی حمله‌ی بین دانه‌ای با کمک تنش رخ می‌دهد که در آن نقش تنش باز کردن سر ترک برای در دسترس بودن محلول حجمی است که سپس باعث انحلال ترجیحی در طول مرزدانه‌ها می‌شود. این مثال از فرایندهای تحریک شده به وسیله‌ی انحلال آندی با کمک تنش است و بر پایه‌ی گسیختگی فیلم نیست.



شکل ۱۵–۲۰. رفتار زمان تا گسیختگی برای سازوکار ترکِ خوردگی تنشی مسیر فعال.

1. Sodium terathionate

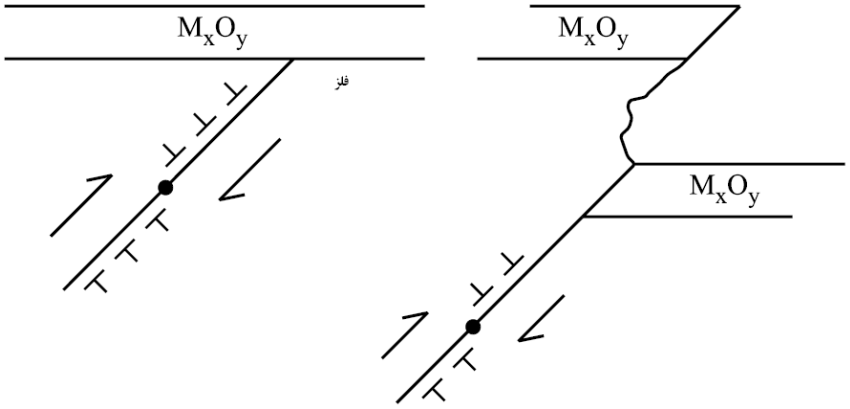


شکل ۱۵-۲۱. درصد شکست بین دانه‌ای برحسب غلظت کروم مرزدانه‌ای برای آلیاژ Ni-16Cr-9Fe تنش‌گذاری شده در ۰٫۰۱۷ مولار $Na_2S_4O_6$ در دمای ^{o}C ۲۵ [۱۶].

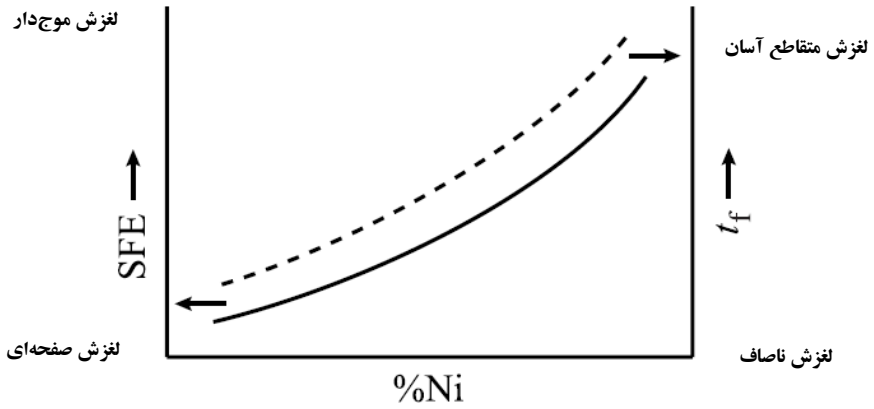
مدل گسیختگی فیلم

مقاومت خوردگی اکثر آلیاژها به فیلم غیرفعال روی سطح نسبت داده می‌شود. هنگامی که تنش کافی اعمال شود، فیلم به وسیله‌ی تنش‌های برشی روی صفحات لغزشی که به صورت مناسبی آرایش یافته‌اند، شکسته شده یا آسیب می‌بیند (شکل ۱۵-۲۲)؛ اما قابلیت ترکِ خوردگی تنشی وابسته به ماهیت لغزش است. در آلیاژهایی با انرژی نقص در چیده شدن بالا جدایش نابجایی‌های کلی به نابجایی‌های جزیی غیرمحتمل است. از آن‌جایی که نابجایی‌های جزیی به منظور لغزش متقاطع باید با یک‌دیگر ترکیب شوند، آلیاژهایی با انرژی نقص در چیده شدن بالا لغزش متقاطع آسانی را نشان می‌دهند درحالی‌که آلیاژهایی با انرژی نقص در چیده شدن پایین لغزش متقاطع را نشان نمی‌دهند. در نتیجه آلیاژهایی با انرژی نقص در چیده شدن پایین لغزش مسطحی را نشان می‌دهند که در آن تغییر شکل روی صفحات لغزشی نسبتاً کمی رخ می‌دهد و به وسیله‌ی باندهای لغزشی به صورت منظم فاصله‌دار شده، مشابه ریخت‌شناسی کانال‌های نابجایی بحث شده در فصل ۱۲، توصیف می‌شوند. شکل ۱۵-۲۳ اثر مقدار نیکل در آلیاژهای آستنیتی روی انرژی نقص در چیده شدن و زمان مورد نیاز تا پارگی به همراه نقش ماهیت لغزش را نشان می‌دهد. آلیاژهایی با انرژی نقص در چیده شدن پایین (مقدار کم نیکل) لغزش *مسطح* و پایدار و زمان مورد نیاز تا پارگی اندکی را نشان می‌دهند درحالی‌که

آلیاژهایی با انرژی نقص در چیده شدن بالا (مقدار بالای نیکل) می‌توانند با نشان دان صفحات لغزشی *موج‌دار* و زمان بالای مورد نیاز تا پارگی لغزش متقاطع کنند.

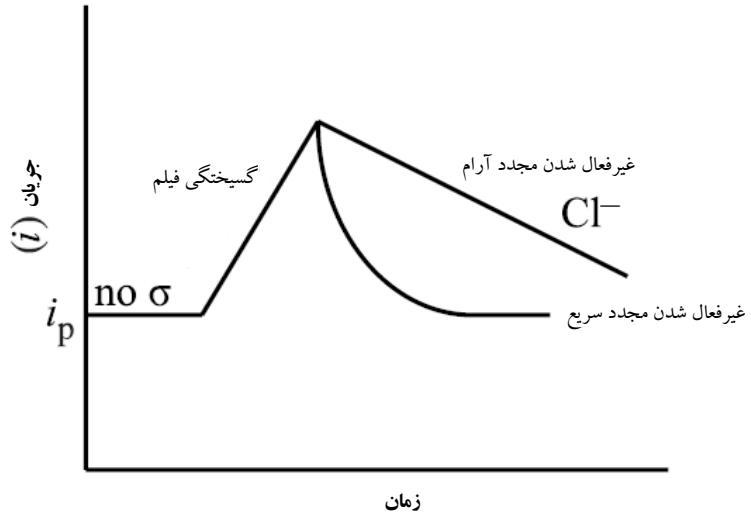


شکل ۱۵-۲۲. نمایش شماتیک از فرایندهایی که به وسیله‌ی آن‌ها لغزش می‌تواند منجر به گسیختگی فیلم اکسیدی شود که در نتیجه منجر به تشدید خوردگی قبل از غیرفعال شدن می‌شود.

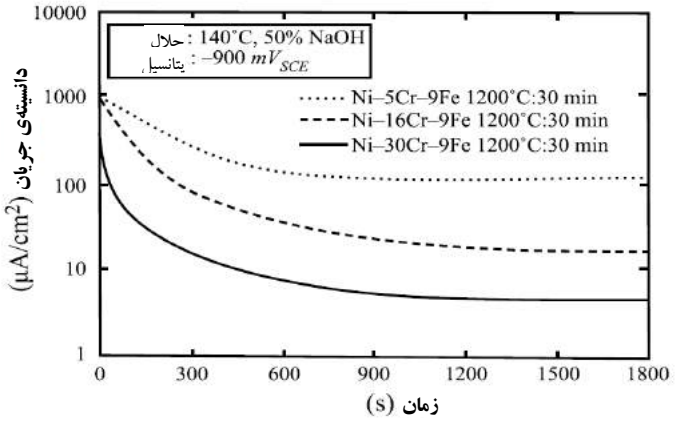


شکل ۱۵-۲۳. وابستگی انرژی نقص در چیده شدن (که مشخصه‌ی لغزش را تعیین می‌کند) و زمان تا پارگی به مقدار نیکل در یک آلیاژ آستنیتی Fe-Cr-Ni.

غیرفعال شدن مجدد سطح در معرض خوردگی احتمالاً رخ خواهد داد؛ اما نرخ غیرفعال شدن، نرخ گسترش ترک را کنترل می‌کند. اگر غیرفعال شدن مجدد بسیار سریع رخ دهد، حمله‌ی خوردگی فقط باعث افزایش بسیار کوچک رشد ترک می‌شود. اگر غیرفعال شدن مجدد خیلی آرام رخ دهد، خوردگی سر ترک را کند می‌کند. از آن‌رو نرخ متوسطی وجود دارد که در آن خوردگی به منظور بیشینه کردن رشد ترک و بدون کند کردن آن رخ می‌دهد. شکل ۱۵-۲۴ نشان می‌دهد که چگونه نرخ غیرفعال شدن مجدد در پتانسیل، E_1 می‌تواند با محیط تغییر کند. یون‌های کلراید در کند کردن غیرفعال‌سازی مجدد مؤثر هستند. در نتیجه درحالی‌که خوردگی ناشی از ترکِ خوردگی تنشی فولادهای زنگ نزن در اسید سولفوریک در دمای اتاق رخ نمی‌دهد؛ اما اضافه کرن Cl^- به اسید سولفوریک قابلیت ترکِ خوردگی تنشی را القا می‌کند که احتمال می‌رود به علت کاهش نرخ غیرفعال شدن مجدد باشد. در حقیقت، ترکیب آلیاژ می‌تواند به صورت مؤثری نرخ غیرفعال‌سازی مجدد را تحت تأثیر قرار دهد. شکل ۱۵-۲۵ نشان می‌دهد که افزایش کروم در آلیاژ Ni-Cr-Fe در واقع نرخ غیرفعال شدن مجدد را افزایش می‌دهد که منجر به کاهش در قابلیت ترکِ خوردگی تنشی می‌شود.



شکل ۱۵-۲۴. رفتار جریان خوردگی در آزمایش غیرفعال‌سازی مجدد که در آن تنش اعمال شده منجر به گسیختگی فیلم و غیرفعال‌سازی مجدد می‌شود. گونه‌های خورنده در محلول می‌توانند باعث کند شدن غیرفعال‌سازی مجدد شوند.



شکل ۱۵-۲۵. کاهش جریان، یا نرخ غیرفعال‌شدن مجدد آلیاژ Ni-Cr-Fe به صورت تابعی از مقدار کروم، نشان می‌دهد که غیرفعال‌شدن مجدد با مقادیر بالاتر کروم بسیار سریع رخ می‌دهد [۱۷].

۱۵-۱-۶ مدل پیش‌گویانه برای گسترش ترک

اجزای ساختاری ساخته شده از فولادهای زنگ نزن، آلیاژهای پایه‌ی نیکلی و فولادهای فریتی همگی مستعد ترک‌گذاری محیطی در محیط‌های رآکتورهای آب سبک هستند. ریخت‌شناسی ترک‌گذاری در این محیط‌ها به خوبی که عوامل مختلف ماده، تنش و محیط روی قابلیت ترک خوردگی دارند، برحسب اثری شناخته شده است. برای این سیستم‌ها، فورد و اندرسون [۷، ۸، ۹، ۱۸] فرضیه‌ی کاری را برای سازوکار ترک‌گذاری توسعه دادند که بر پایه‌ی مدل اکسیداسیون لغزشی/ گسیختگی فیلم است و مربوط به محیط سر ترک است. در این مدل پیشرفت ترک به واکنش‌های اکسیداسیونی مرتبط می‌شود که در سر ترک رخ می‌دهد به صورتی که فیلم محافظ به وسیله‌ی کرنش افزایشی در زمینه‌ی دربرگیرنده، گسیخته می‌شود. رخدادهای گسیختگی با تناوب، t_f رخ می‌دهد که به وسیله‌ی کرنش شکست اکسید و نرخ کرنش در سر ترک تعیین می‌شود. مقدار پیشرفت ترک وابسته به (به وسیله‌ی قانون فارادی) دانسیته‌ی بار اکسیداسیون مرتبط با انحلال و رشد ترک (غیرفعال‌سازی) روی سطح فلز اصلی، مشابه با چیزی است که به وسیله‌ی معادله‌ی ۱۵-۴ توضیح داده شده است:

(۵-۱۵)

$$\dot{a} = \frac{M}{nF\rho}\frac{Q_f}{t_f},$$

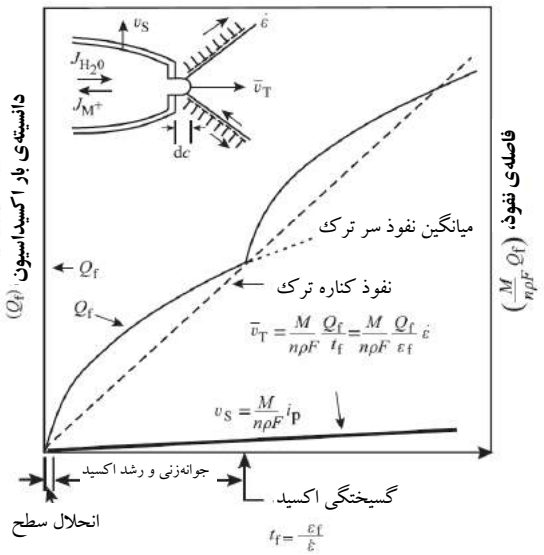
که

$$t_{\mathrm{f}} = \frac{\varepsilon_{\mathrm{f}}}{\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ct}}} \ , \tag{۶-۱۵}$$

با تعیین سرعت میانگین ترک برحسب نرخ کرنش سر ترک می‌توان نوشت:

$$\bar{v}_{\mathrm{T}} = \dot{a} = \frac{M}{nF\rho}\frac{Q_{\mathrm{f}}}{\varepsilon_{\mathrm{f}}}\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ct}} \ , \tag{۷-۱۵}$$

که Q_{f} انتقال بار در شکست، ε_{f} کرنش شکست و $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ct}}$ نرخ کرنش سر ترک است. دانسیته‌ی بار اکسیداسیون و نرخ گسترش ترک به صورت تابعی از زمان در نمودار شماتیک شکل ۱۵-۲۶ نشان داده شده است. لازم به ذکر است که دانسیته‌ی بار اکسیداسیون به صورت سهمی‌وار با زمان مطابق با مدل اکسیداسیون حالت جامد تغییر می‌کند [۱۹]، و سرعت پیشرفت ترک میانگینی در سراسر بازه زمانی است. واکنش‌ها در سر ترک به صورت پیچیده‌ای برای محیط‌ها و شیمی مواد مختلف با زمان تغییر می‌کند، و میانگین نرخ رشد ترک نتیجه شده، $\bar{v}_{\mathrm{T}}$ در شکل کلی به صورت زیر بیان می‌شود:



شکل ۱۵-۲۶. شمایی از دانسیته‌ی بار اکسیداسیون برحسب وابستگیِ زمانی برای سر ترک کرنش‌گذاری شده و وجوح غیرکرنش‌گذاری شده ترک که مدل گسیختگی فیلم را دنبال می‌کند. [۱۸].

$$\bar{v}_{\mathrm{T}} = \frac{M}{nF\rho}\frac{i_{\mathrm{a}}t_0^{\mathrm{m}}}{(1-m)\varepsilon_{\mathrm{f}}^{\mathrm{m}}}\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ct}}^{\mathrm{m}} \qquad (۸-۱۵)$$

$$= f(m)\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ct}}^{\mathrm{m}}\ , \qquad (۹-۱۵)$$

که $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ct}}$ نرخ کرنش در سر ترک است و سهم‌های مکانیکی را به ترک گذاری وارد می‌کند، i_{a} جریان انحلال سطح آزاد است و t_0 و m عوامل غیرفعال‌سازی مجدد هستند که اثرات ویژگی‌های شیمیایی محیط و ماده روی رشد ترک با کمک محیط است.

مدل، ترکیبی از سه مفهوم اصلی و عناصر پیش‌بینی کننده است: (۱) نرخ گسیختگی فیلم (متناسب با نرخ کرنش سر ترک)، (۲) شیمی محلول در سر ترک، و (۳) جنبش‌های نتیجه شده از اکسیداسیون/غیرفعال‌سازی مجدد در پیرامون سر ترک متعاقب رخداد پارگی فیلم. اکثر عواملی که اثرات شیمی آب و ماده را دربر می‌گیرند، در یک ضریب m ادغام می‌شوند که شیب جریان غیرفعال‌سازی مجدد روی منحنی لگاریتم ـ لگاریتم را نشان می‌دهد. سپس فرمول‌های نرخ کرنش سر ترک، محاسبه‌ی بسامد رخدادهای پارگی فیلم و در واقع پیش‌گویی نرخ رشد ترک محیطی در بارگذاری پیوسته، آب و مشخصه‌های ماده را ممکن می‌سازد. برای مثال، تابع f در معادله‌ی ۱۵–۸ ممکن است به شکل $f(\mathrm{m}) \sim \mathrm{Am}^{3.6}$ باشد، که m تابعی از شیمی آب و شیمی ماده است و شاخصی از سطح حساسیت در برابر ترک‌دار شدن است که برای حساسیت بالا $m \to ۰/۳$ و برای حساسیت پایین $m \to ۱$ نزدیک می‌شود. نرخ کرنش سر ترک تابعی از شدت تنش سر ترک است و ممکن است که به صورت $\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ct}} = BK^4$ نشان داده شود. در نتیجه نرخ رشد ترک برابر است با:

$$\bar{v}_{\mathrm{T}} = Am^{3.6}(BK^4)^{\mathrm{m}}\ . \qquad (۱۰-۱۵)$$

۱۵–۱–۷ مدل‌های مکانیکی شکست

ترک‌ها از نتیجه‌ی واکنش‌های خوردگی نیز رخ می‌دهند، اما هنگامی که رفتارشان درقبال واکنش‌های خوردگی، به وسیله‌ی تنش تحریک شده باشد، شکست آن‌ها به صورت مکانیکی رخ می‌دهد. مدل‌های مختلفی برای تشریح ترک‌گذاری به وسیله فرایندهای شکست مکانیکی وجود دارد.

تحت شرایط مشخص، آرایش ظریفی از کانال‌های القایی تابشی در نقطه‌ای مشاهده می‌شود که پله‌های لغزشی روی سطح نمونه ظاهر می‌شوند. کانال‌ها در قطر و طول نمونه رشد کرده تا تنش در بخش باقی‌مانده به نقطه‌ای افزایش یابد که بار نتواند به وسیله‌ی سطح مقطع کاهش یافته تحمل شده و شکست به واسطه‌ی افزایش بیش از حد بار رخ دهد. مطابق با *مدل خوردگی تونلی*، ترک‌ها به وسیله‌ی رشد تناوبی تونل و شکست نرم گسترش می‌یابند. تکثیر ترک‌ها به وسیله‌ی این سازوکار باید منجر به شکست دندانه‌دار سطوح با به هم پیوستگی مشهود ریزترک‌ها شود. این ریخت‌شناسی با ریخت‌شناسی شکست ترک خوردگی تنشی درون دانه‌ای بسیار سازگار است.

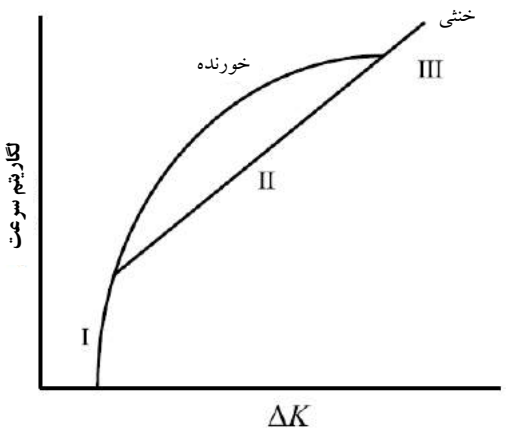
بر پایه‌ی مطالعات شکست نگاری، نتیجه گرفته شده است که شکست رخی فرایند ترد خودبه‌خودی نیست بلکه به وسیله‌ی لغزش‌های متناوب در سر ترک به همراه تشکیل حفره‌های بسیار ریز در جلوی ترک رخ می‌دهد. هم‌چنین پیشنهاد شده است که جذب شیمیایی گونه‌های محیطی جوانه‌زنی نابجایی‌ها در سر ترک تسهیل را می‌کند، و در نتیجه فرایندهای برشی مسئول برای شکست ترد رخی را افزایش می‌دهد. سازوکار پلاستیسیته‌ی افزایشی جذبی[1]، بر پایه‌ی جذب گونه‌های خورنده به منظور افزایش شکست رخی است.

در مدل گسیختگی کدر شده[2]، یک سطح ترد روی فلز تشکیل می‌شود و تحت تنش اعمالی شکسته می‌شود. شکست، سطح فلز را جهت واکنش سریع برای تشکیل مجدد فیلم در دسترس قرار می‌دهد. ترک به وسیله‌ی دوره‌های موفق رشد فیلم و شکست پیشرفت می‌کند. با فرض آن‌که فیلم در طول مرزدانه جلوی سر ترک نفوذ کند، مدل به شکست بین دانه‌ای اختصاص داده شده است. ترکیب اصلی این سازوکار به این صورت است که شکست تماماً در درون فیلم اکسیدی و نه در درون فلز رخ می‌دهد.

سازوکار رخی القایی فیلم[3]، لایه یا فیلم سطحی نازک تشکیل شده روی سطح را حفظ می‌کند که به وسیله‌ی تشکیل ترک ترد در لایه دنبال می‌شود. ترک از فصل مشترک فیلم ـ زمینه بدون اتلاف سرعت عبور کرده و به پیشرفت در زمینه‌ی نرم در طول جهت بلورشناسی مشخص ادامه می‌دهد. ترک سرانجام کند شده و متوقف می‌شود و این چرخه دوباره تکرار می‌شود. این مدل سطوح کوچک رخی روی سطح شکست و ماهیت غیرپیوسته گسترش ترک را تشریح می‌کند. فرض آن‌که

1. Adsorption-enhanced plasticity
2. Tarnish rupture model
3. Film-induced cleavage

ترک ترد در زمینه‌ی نرم به گسترش ادامه دهد در صورتی می‌تواند توجیح شود که ترک تیز باشد و در سرعت‌های بالایی گسترش یابد.



شکل ۱۵-۲۷. اثر محیط خورنده روی رفتار سرعت ترک با ΔK در آزمایش خوردگی خستگی.

اولین بار به وسیله‌ی اولینگ[1] پیشنهاد شد که *سازوکار جذب* (*تنش ـ جذب*) برای تشکیل ترک در شیشه و دیگر جامدات ترد مرتبط به معیار گریفیث است. هم‌چنین پیشنهاد شده است که جذب هر نوع گونه‌ای که انرژی سطحی را کاهش می‌دهد، باید برای تشکیل ترک مناسب باشد. با یادآوری عبارت تنش شکست، σ_f از فصل ۱۳ داریم:

(۱۱-۱۵)

$$\sigma_f = \left(\frac{2E\gamma}{\pi c}\right)^{1/2},$$

که E ضریب یانگ، γ انرژی سطحی و $2c$ طول ترک است. کاهش در انرژی سطحی، به عبارت دیگر، از آن‌جایی که ممکن است که با جذب Cl^- روی سطح یک فولاد زنگ نزن رخ می‌دهد، منجر به کاهش در تنش مورد نیاز برای شکست می‌شود. متأسفانه، پذیرفتن این مدل برای تعمیم به علت دشوار بودن تعیین انرژی در محیط دشوار است.

1. Uhlig

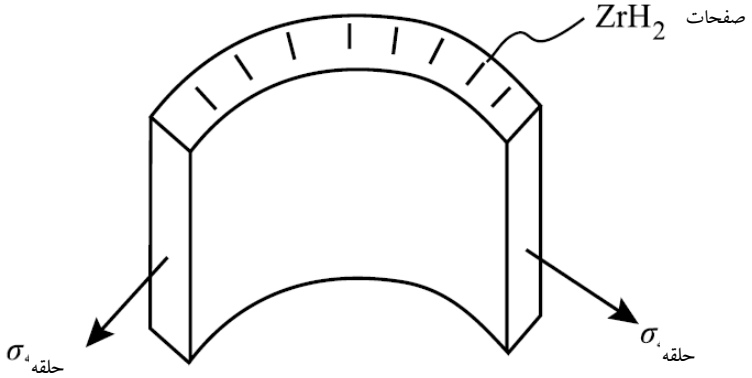
۱۵-۱-۸ خستگی خوردگی

آسیب به وسیله‌ی خستگی خوردگی فعالیت مرتبط با خوردگی و خستگی است که بیش‌تر از چیزی است که با جمع هر دو فرایند فعال به صورت جداگانه ایجاد می‌شود. در اتمسفر، خستگی به وسیله‌ی لغزش موضعی در درون دانه‌های فلز که به وسیله‌ی تنش تناوبی حاصل می‌شود، پیشرفت کرده که منجر به پله‌های لغزشی در سطح فلز می‌شود. جذب هوا روی سطوح فلزی در دسترس، از جوش خوردن مجدد در دوره‌های معکوس جلوگیری می‌کند (لغزش برگشت‌ناپذیر). اعمال پیوسته‌ی تنش، برآمدگی‌هایی (بیرون آمدگی‌ها) را روی سطح فلز و فرورفتگی‌هایی را در زیر آن ایجاد می‌کند. خوردگی تغییر شکل پلاستیک را به وسیله‌ی تشکیل شبکه جاهای خالی سطحی تشدید کرده، به ویژه جاهای خالی دوتایی که سریعاً به داخل فلز در دمای اتاق نفوذ کرده و تغییر شکل پلاستیک را به وسیله‌ی تسهیل‌سازی صعود نابجایی‌ها تشدید می‌کنند. در نرخ خوردگی بالاتر، میزان دسترسی جاهای خالی دوتایی بالاتر است و تشکیل برآمدگی‌ها و فرورفتگی‌ها بسیار قطعی‌تر است. بسامدهای پایین‌تر، تخریب‌های بالاتری را تولید می‌کند زیرا زمان بیش‌تری در هر سیکل برای رخ دادن خوردگی موجود است. شکل ۱۵-۲۷ نشان می‌دهد که اثر محیط در مقادیر میانی ΔK بیش‌تر است.

۱۵-۱-۹ تردی هیدروژنی

تردی هیدروژنی با ورود هیدروژن به داخل آلیاژ به واسطه‌ی فرایندهای خوردگی، حفاظت کاتدی یا فشار بیش از حد هیدروژن رخ می‌دهد. مشخصه‌ی معمول ترک‌های هیدروژنی این است که تأخیر ویژه‌ای در زمان ظهور ترک‌ها بعد از اعمال تنش وجود دارد. این ناشی از زمان مورد نیاز برای نفوذ هیدروژن به ناحیه‌ی مشخص نزدیک به جوانه‌ی ترک و رسیدن به یک غلظت بحرانی است. تردی هیدروژنی معمولاً منجر به شکست بین دانه‌ای می‌شود و در نرخ‌های کرنشی پایین، بسیار محتمل‌تر است. چندین سازوکار وجود دارد که به وسیله‌ی آن‌ها هیدروژن باعث تردی می‌شود. *سازوکار چسبندگی* زدایی به این صورت است که هیدروژن اتمی استحکام چسبندگی فلز ـ فلز را کاهش می‌دهد. *تئوری فشار* بر پایه‌ی رسوب‌گذاری هیدروژن به عنوان یک گاز در عیوب داخلی است. فشار گسترش یافته به وسیله‌ی رسوب‌گذاری به تنش اعمال شده اضافه می‌شود و منجر به کاهش تنش اعمالی برای شکست می‌شود. اگر فرایند رخ داده به اندازه‌ای نزدیک به سطح باشد که لایه‌ی نازک فلزی بالای آن را تغییر شکل بدهد، تاول‌ها می‌توانند شکل بگیرند. تغییر در تئوری فشار،

سازوکار حمله‌ی هیدروژنی است که ناشی از واکنش میان هیدروژن و کربن به منظور تشکیل متان است. علاوه بر تشکیل حباب‌های گازی متان فشار بالا، واکنش منجر به دکربوره شدن و تضعیف آلیاژ می‌شود. اولینگ پیشنهاد کرد *جذب مستقیم* هیدروژن انرژی سطحی مورد نیاز برای تشکیل ترک را کاهش می‌دهد، در نتیجه تنش شکست کاهش می‌یابد. تشکیل فاز ترد هیدریدی[1](ترکیب هیدروژن‌دار)، به عبارت دیگر ZrH_2 یاTiH_2، نیز می‌تواند منجر به القای تردی فلز شود. حجم مخصوص هیدرید در قبال فلزی که از آن تشکیل می‌شود بیش‌تر است که به همراه ریخت شناسی دیسک مانند هیدرید باعث می‌شود که فلز در لبه‌ی دیسک هیدریدی و در صورتی که تنش اعمالی عمود بر صفحه دیسک کوچک باشد، تنش کششی بالایی را متحمل شود. در آلیاژهای زیرکونیوم، دیسک‌های کوچک روی صفحات قاعده تشکیل می‌شوند که در جهت شعاعی غلاف‌های سوخت هم‌محور هستند، که به علت فشار در غلاف‌ها باعث تنش کشش بالایی در فلز در لبه‌های دیسک می‌شود (شکل ۱۵-۲۸). هیدروژن هم‌چنین با نابجایی‌ها نیز واکنش می‌دهد. نیرو محرکه‌ی شیمیایی مسئول تشکیل نابجایی‌ها است که سپس هیدروژن‌های اضافی را به داخل شبکه منتشر کرده و ضریب شدت تنش بالایی را در سر ترک وارد می‌کند. این سازوکار پلاستیسیته‌ی موضعی القایی هیدروژنی[2] (HELP) می‌تواند اثرات دما بالای هیدروژن را تشریح کند. ترک‌های القایی هیدروژنی سازوکار حایز اهمیت در فولادهای فریتی، آلیاژهای پایه‌ی نیکل و آلیاژهای تیتانیوم و آلومینیوم است.



شکل ۱۵-۲۸. آرایش دیسک‌های کوچک ZrH_2 در غلاف‌های سوخت زیرکولوی تحت اعمال تنش دایره‌ای.

1. Hydride
2. Hydrogen-induced localized plasticity

۱۵-۲ اثرات پرتودهی روی شیمی آب

۱۵-۲-۱ پرتوکافت و اثرات آن روی پتانسیل خوردگی

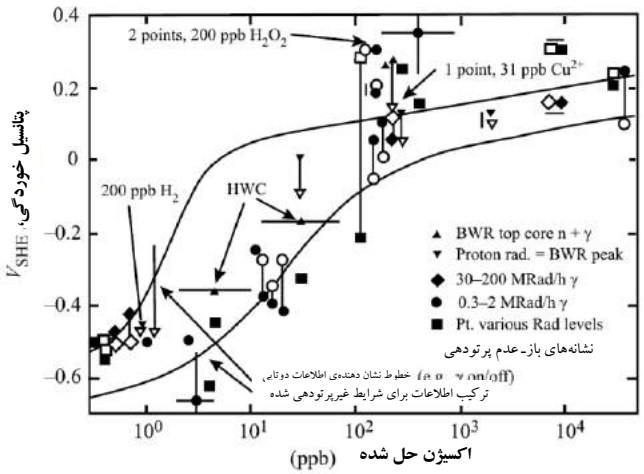
به صورت گسترده‌ای تأیید شده است که قابلیت ترک خوردگی تنشی اساساً تحت تأثیر پتانسیل خوردگی است [۱، ۷، ۲۰، ۲۱]. در این زمینه، چیزی که رآکتورهای آب جوشان را از رآکتورهای آب تحت فشار متمایز می‌کند غلظت پایین هیدروژن در رآکتورهای آب جوشان است، که تشکیل پرتوکافتی اکسید کننده‌ها را مجاز می‌کند. بالای تقریباً ۵۰۰ ppb (۵٫۶ cc/kg) هیدروژن، تشکیل پرتوکافتی اکسنده‌ها متوقف شده و پتانسیل خوردگی در کمینه‌ی ترمودینامیکی خودش باقی می‌ماند (که تابعی از دما، فیوگاسیته H_2 و pH است). رآکتورهای آب جوشان به علت جداسازی‌های H_2 از فاز بخار که آغازگر تشکیل حدوداً ۱٫۴ راه‌های فعال‌سازی میله‌های سوخت است، نمی‌توانند چنین سطوح هیدروژنی را کسب کنند. در نتیجه پرتوکافت تأثیر بسزایی روی رآکتورهای آب جوشان دارد و در این بخش بررسی می‌شود.

آب بر اثر پرتوهای یونیزه کننده به گونه‌های اولیه‌ی مختلفی [۲۲-۲۵] که شامل رادیکال‌ها (به عبارت دیگر e^-_{aq}، H، OH، HO_2) و مولکول‌ها (به عبارت دیگر H_2O_2، H_2، O_2) که می‌توانند اکسنده (به عبارت دیگر O_2، H_2O_2، HO_2) یا کاهنده (به عبارت دیگر e^-_{aq}، H، H_2) باشند، تجزیه می‌شوند. گونه‌های غالب که برای بیش‌تر از چند ثانیه پایدار هستند H_2O_2 و H_2، با O_2 تشکیل شده از تجزیه H_2O_2 هستند. به علت جداسازی H_2 از فاز بخار و فرار نبودن H_2O_2، آب برگشتی در رآکتور آب جوشان (تقریباً ۷۸ درصد کل جریان آب)، غنی از اکسنده‌ها است. غلظت گونه‌های پرتوکافت شدیداً متناسب با ریشه‌ی دوم شار پرتودهی در آب خالص است. طیف تابشی انرژی ـ شدت غلظت تمام گونه‌های پرتوکافت را تحت تأثیر قرار می‌دهد که به منزله‌ی راندمان یا مقدار G تشریح می‌شود (مولکول‌های تولید شده در هر ۱۰۰ eV جذب شده به وسیله‌ی آب). در رآکتورهای آب سبک برای پرتودهی نوترون سریع نسبت به پرتودهی گاما، مقدار G برای اکثر گونه‌ها در حدود ضریب ۳ است. بر خلاف این تشابه، تأثیر تابش نوترون سریع نسبت به پرتودهی گامای اولیه بسیار بیش‌تر است زیرا نرخ ته نشست انرژی، یا متوسط انتقال انرژی خطی (LET)، بیش‌تر است (۴۰eV/nm برای نوترون‌های سریع در مقابل ۰٫۰۱eV/nm برای تابش گاما [۲۵]). هم‌چنین شار نوترون در رآکتورهای آب سبک (به عبارت دیگر میانگین هسته تقریباً برابر با $۱٫۰۳ \times ۱۰^۹$ Rad/h و بیشینه $۱٫۶۸ \times ۱۰^۹$ Rad/h در رآکتور آب جوشان با دانسیته‌ی نیروی ۵۱ W/cc) از شار گاما ($\approx ۰٫۳۴ \times ۱۰^۹$ Rad/h) بسیار بالاتر

است [۵]. در حقیقت، سطوح متوسط گاما موجود در لوله‌ی انتقال گاز در ساختمان بیرونی هسته‌ی رآکتور آب جوشان در عمل بازترکیبی هیدروژن و اکسنده‌های مختلف را افزایش می‌دهد [۲۳، ۲۶]. در حالت کلی، سهم نوترون‌های حرارتی و ذرات بتا در پرتوکافت در رآکتورهای آب سبک کوچک است. در بسیاری از فرایندهای الکتروشیمیایی، اثرات جامع اکسنده‌ها و کاهنده‌های مختلف روی ترک‌گذاری محیطی به خوبی از طریق تغییرات در پتانسیل شیمیایی توضیح داده می‌شود که ترمودینامیک و تأثیرات جنبشی اکثر واکنش دهنده‌ها را کنترل می‌کنند. از آن‌جایی که پتانسیل‌های الکتروشیمیایی، از طریق معادله نرنست، معادله‌ی ۱۵-۱، به صورت لگاریتمی وابسته به غلظت‌های موضعی اکسندها، کاهنده‌ها و یون‌ها هستند، افزایش‌های القایی تابشی در غلظت گونه‌های مختلف تا چندین برابر بزرگی، اثرات نسبتاً کوچکی را روی پتانسیل خوردگی در آب داغ دارد. به علاوه، پتانسیل‌های خوردگی، ترکیبی از پتانسیل‌های در برگیرنده‌ی تعادل واکنش‌های آندی و کاتدی روی سطح فلز هستند که وابسته به غلظت گونه‌های اکسید کننده و کاهنده است. در غلظت‌های پایین اکسنده‌ها، پتانسیل‌های خوردگی پایین VSHE ۰٫۵- ≈ از جنبش‌های انتقال جرم محدود نتیجه می‌شوند (به عبارت دیگر انتقال اکسیژن به سطح فلز). در این منطقه، انتقال بسیار قطعی در پتانسیل خوردگی با پرتودهی رخ می‌دهد، که احتمال می‌رود که ناشی از تشکیل پرتوکافتی گونه‌های اکسنده در درون لایه‌ی راکد محدود کننده انتقال جرم باشد.

رابطه‌ی بین اکسیژن حل شده و پتانسیل خوردگی در آب داغ به صورت تابعی از نوع پرتودهی و شار در شکل ۱۵-۲۹ نشان داده شده است که در آن نقاط متصل شده اطلاعات به‌دست آمده از آزمایشات کنترلی تابشی on/off را نشان می‌دهد. منحنی‌های موجود در شکل ۱۵-۲۹ نوار پراکندگی برای اطلاعات به‌دست آمده تحت شرایط غیرپرتودهی را نشان می‌دهد. پراکندگی مشابهی نیز در اطلاعات پتانسیل خوردگی پرتودهی شده در شکل ۱۵-۲۹ وجود دارد و متشکل از اثرات واقعی و خطاهای آزمایشگاهی است. شکل ۱۵-۲۹ نشان می‌دهد که افزایش کوچک؛ اگر وجود داشته باشد، در پتانسیل خوردگی، از منابع پرتودهی نتیجه شده است که نوترون‌ها یا سهم‌های مشابهی (به عبارت دیگر پروتون‌های پر انرژی مورد استفاده) را دربر نمی‌گیرد. بعضی از مطالعات با استفاده از پرتودهی گاما [۱، ۲۰] کاهش قابل توجهی را در پتانسیل خوردگی به خصوص در محدوده‌ی میانی اکسیژن حل شده (به عبارت دیگر ۱۰ تا ppb ۲۰۰) نشان داده‌اند. این با افزایش باز ترکیبی گونه‌های اکسنده یا کاهنده

سازگار است که در ناحیه‌ی لوله‌های انتقال گاز رآکتورهای آب جوشان رخ می‌دهد [۲۶] و متکی بر کاهش ترک خوردگی تنشی با استفاده از شیمی *هیدروژن آب* است (HWC).



شکل ۱۵–۲۹. اثر پرتودهی روی پتانسیل خوردگی فولاد زنگ نزن ۳۰۴ در آب ۲۸۸°C. منحنی‌ها دلالت بر محدوده‌ی مقادیر معمول در اطلاعات پتانسیل خوردگی غیرپرتودهی شده دارند[۱].

در موردی که نوترون‌ها یا پروتون‌ها استفاده می‌شوند افزایش پایدار و قابل توجهی در پتانسیل خوردگی مشاهده می‌شود. مشخص شده است که در آب داغ حاوی غلظت‌های پایین اکسیژن حل شده و فاقد هیدروژن حل شده، افزایش ۰٫۲۵+ V در پتانسیل خوردگی رخ دهد. در غلظت‌های بالاتر اکسیژن ورودی (به عبارت دیگر ۲۰۰ ppb ≈)، اطلاعات انتقال قابل توجهی (به ویژه ۰٫۱+ تا ۰٫۱۵ V) را در پتانسیل خوردگی برای شرایط پرتودهی نشان دهنده‌ی شارهای بیشینه‌ی هسته‌ی رآکتور آب سبک نشان می‌دهند؛ افزایش کمی برای غلظت‌های اکسیژن ورودی مرتبط، به عبارت دیگر با اشباع اتمسفری (تقریباً ۸٫۸ ppm اکسیژن) یا اشباع اکسیژنی (تقریباً ۴۲ ppm در STP) مشاهده می‌شود. افزایش مشابه در پتانسیل خوردگی برای افزودنی‌های پیروکسید هیدروژن (H_2O_2 ppb ۲۰۰) مشاهده می‌شود که ممکن است پیشنهاد کند، H_2O_2 عامل اصلی در افزایش پتانسیل خوردگی تحت شرایط پرتودهی باشد.

اندازه‌گیری‌های درجا در هسته‌ی رآکتورهای آب جوشان نشان می‌دهد که پتانسیل خوردگی که در شیمی آب معمولی تقریباً برابر با ۰٫۲+ تا ۰٫۲۵+ V_{SHE} است، با افزایش مقدار کافی اکسیژن حل شده در رآکتور آب جوشان می‌تواند تا بیش‌تر از ۰٫۵V کاهش یابد [۲۷].

این مطلب با اندازه‌گیری‌های دیگری تأیید شده است [۲۸] که افزایش بسیار کوچک در اثر پرتودهی در پتانسیل خوردگی را نشان می‌دهند، هنگامی که آب ورودی کاملاً هوازدایی شده و دربرگیرنده‌ی هیدروژن حل شده‌ی متوسط (۲۰۰ ppb H_2 <، ۰ ppb O_2) باشد. به هر جهت، در سطوح بالای H_2، هسته کاهنده شده و غلظت کمی از N^{16} (تبدیل شده از O^{16}) از NO_3^- قابل حل به NO_x و NH_3 فرار تغییر می‌یابد که باعث افزایش بزرگ در سطح تابش در خطوط بخار و توربین‌ها می‌شود.

اثر پرتودهی روی پتانسیل خوردگی در درون ترک یا شکاف کوچک نیز حایز اهمیت است زیرا احتمال تشکیل محیط اکسنده‌ی خالص در ترک می‌تواند منجر به افزایش پتانسیل خوردگی به بالای پتانسیل موجود در دهانه‌ی ترک شود. در غیاب پرتودهی، اندازه‌گیری‌ها در آب دما بالا در شکاف‌های کوچک مصنوعی و در سر ترک‌های رشد کننده، و از رفتار رشد ترک کوتاه نشان می‌دهند که پتانسیل خوردگی برای تمام غلظت‌های حجمی اکسیژن پایین باقی می‌ماند (به عبارت دیگر، V_{SHE} ۰٫۱±۰٫۵− در آب خالص در دمای ۲۸۸ ^oC)، که نشان می‌دهد مصرف کامل اکسیژن در درون ترک، هم‌چنان رخ می‌دهد که در قسمت ۱۵-۱-۴ در صفحه‌ی ۱۱۴۴ بحث شد. اندازه‌گیری‌های اخیر از اثرات پرتودهی در شکاف کوچک نشان می‌دهد که افزایش در پتانسیل خوردگی در هسته به ۰٫۰۵ V > محدود می‌شود؛ این با تفسیر اطلاعات پتانسیل خوردگی موجود روی سطوح آزاد [۱، ۷، ۲۰، ۲۹] سازگار است. این تغییرات کوچک به صورت قابل توجهی تفاوت پتانسیلی تقریباً ۰٫۷۵V (۰٫۲۵V_{SHE}+ (نزدیک دهانه) منهای ۰٫۵ V_{SHE}− (در ترک)) در ترک را تحت پرتودهی در شرایط معمولی شیمی آب رآکتور آب جوشان تحت تأثیر قرار نمی‌دهد. تفاوت پتانسیلی به همراه دیگر عوامل، سازوکار افزایشی را کنترل می‌کند که می‌تواند منجر به افزایش فعالیت آنیون و تغییر pH در سر ترک شود [۸، ۹، ۲۱].

۱۵-۲-۲ اثر پتانسیل خوردگی روی IASCC

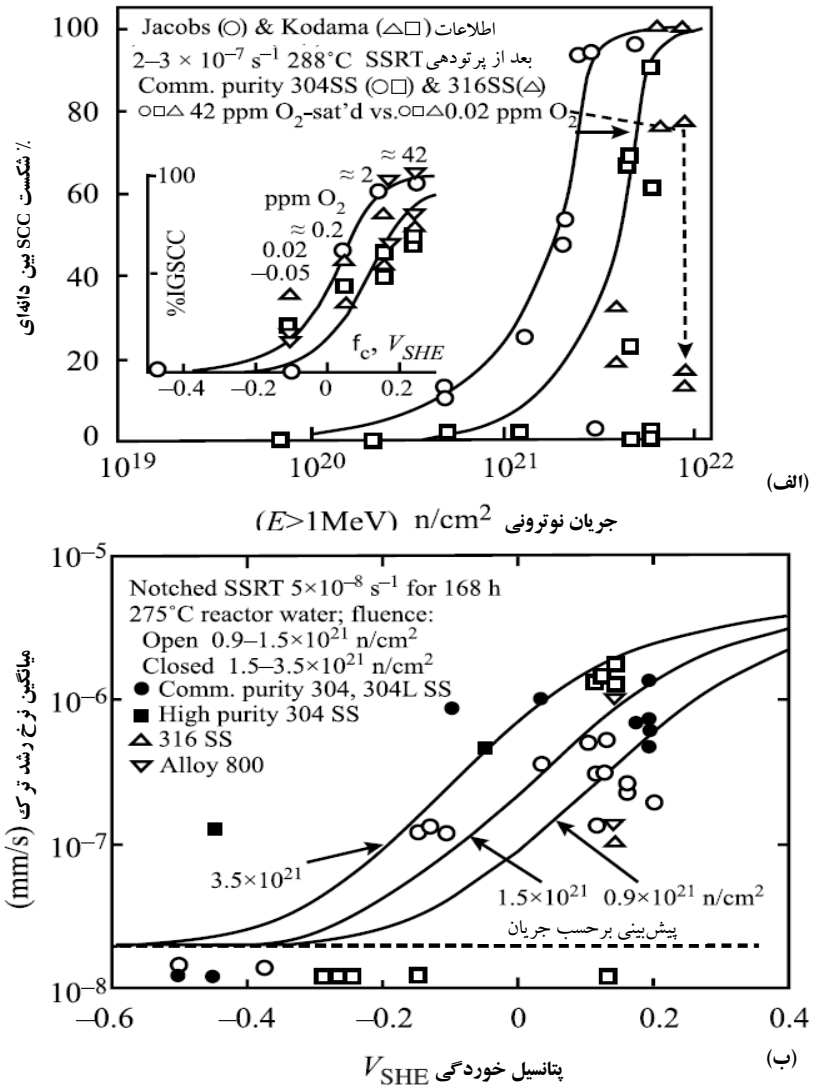
آزمون‌های آزمایشگاهی با استفاده از آزمایش نرخ کرنش آرام در آب داغ با اکسیژن و/یا پیروکسید هیدروژن به منظور افزایش پتانسیل خوردگی برای شبیه‌سازی اثر پرتودهی روی آلیاژهای پیش پرتودهی شده انجام شده است.

آزمایشات انجام شده به وسیله‌ی ژاکوب و همکارانش [۳۰] روی فولاد زنگ نزن پرتودهی شده تا $۳\times۱۰^{۲۱}\ n/cm^2$ اثر قوی اکسیژن حل شده (و در نتیجه پتانسیل خوردگی) روی IASCC را نشان داد (شکل ۱۵-۳۰ الف). به صورت مشابه الجانبرگ[1] اثر شدیدی از پتانسیل خوردگی را روی نرخ رشد ترک نشان داد (شکل ۱۵-۳۰ ب). از آن‌جایی که پتانسیل خوردگی تابع حساس به مقدار اکسیژن است، افزایش مقدار اکسیژن منجر به افزایش پتانسیل خوردگی و نرخ‌های رشد ترک بالاتر می‌شود.

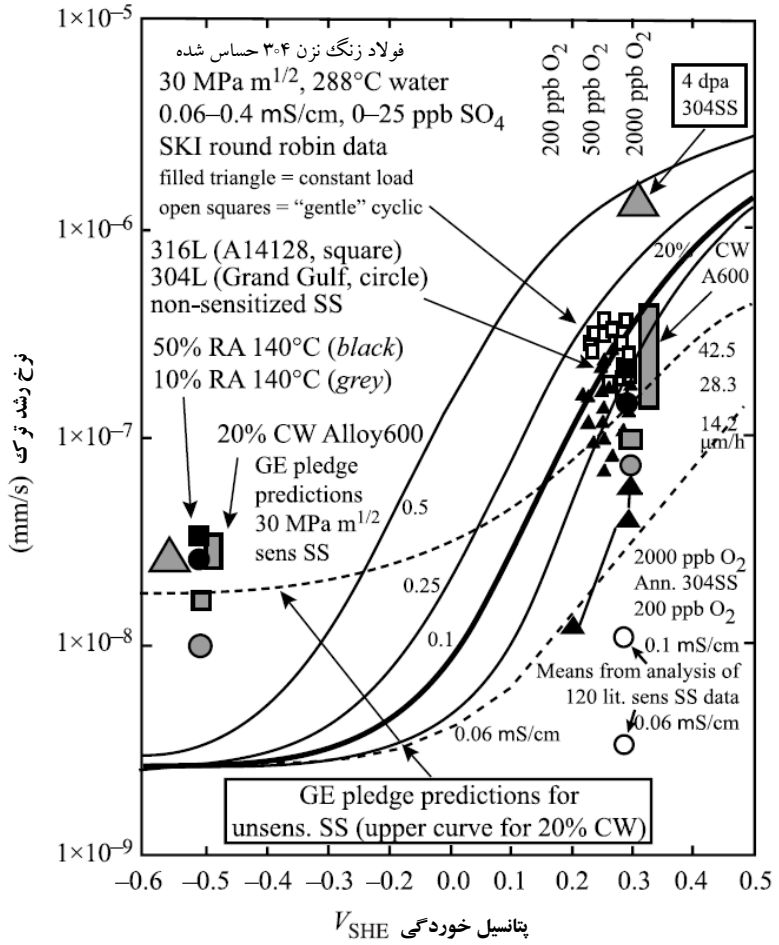
مطالعات درجا روی نمونه‌های مکانیک شکست فولاد زنگ نزن ۳۰۴ حساس شده در کوره و در معرض پرتو در رآکتور آب جوشان نشان داده است که پتانسیل‌های خوردگی بالاتر اندازه‌گیری شده در هسته از لوله‌های آب گردش مجدد، نرخ‌های رشد ترک به صورت قابل توجهی بالاتر را نشان می‌دهند. آزمایش‌های نرخ رشد ترک غیر درجا روی فولاد SS ۳۰۴ پرتودهی شده (تا ۴dpa) یکی از مثال‌های مناسب از نرخ رشد ترک در پتانسیل خوردگی بالا، به همراه اثر قوی پتانسیل خوردگی کاهش یافته است. این اطلاعات با دیگر اطلاعات پرتودهی شده و غیر پرتودهی شده در شکل ۱۵-۳۱ بر پایه‌ی اندازه‌گیری‌های هم زمان پتانسیل خوردگی و نرخ رشد ترک در نمونه‌های مکانیکی شکست قابل مقایسه هستند؛ منحنی‌های ضمیمه شده پیش‌گویی‌های مدل را نشان می‌دهد [۵].

به وضوح اطلاعات درجا به صورت مطلوبی با طیف اطلاعات پرتودهی نشده و اطلاعات به‌دست آمده از نمونه‌های مکانیکی شکست از فولاد زنگ نزن ۳۰۴ حساس شده کوره‌ای با استفاده از پرتودهی پروتون‌های پر انرژی برای شبیه‌سازی ترکیب پرتودهی نوترونی و گاما موجود در رآکتورها، مشابه است. این اطلاعات این فرضیه را تقویت می‌کند که افزایش پتانسیل خوردگی منجر به نرخ رشد ترک بالاتر می‌شود و اثر پرتودهی روی شیمی آب به صورت افزایش پتانسیل خوردگی از طریق تشکیل رادیکال‌ها و غلظت‌های اکسیژن بالاتر است.

1. Ljungberg



شکل ۱۵–۳۰. (الف) وابستگی IASCC به جریان نوترون سریع هم‌چنان که در آزمایش‌های نرخ کرنش آرام در $۳٫۷\times۱۰^{-۷}$ s^{-1} در آب ^{o}C ۲۸۸ در فولادهای زنگ نزن نوع ۳۰۴ پیش پرتودهی شده، اندازه‌گیری شده است. اثر پتانسیل خوردگی از طریق تغییرات در اکسیژن حل شده در جریان n/cm^2 ۲×۱۰^{۲۱} ≈ نشان داده شده است [۳۰]. (ب) مقایسه‌ی نرخ‌های رشد ترک پیش‌بینی و مشاهده شده برای فولادهای زنگ نزن پرتودهی شده در رآکتور آب جوشان در ^{o}C ۲۸۸ تا جریان‌های مختلف. نمونه‌های کششی شکاف‌دار در نرخ کرنش آرام در آب خالص ^{o}C ۲۸۸ آزمایش شده و بعد از کرنش/زمان مشخص گسیخته شدند [۳۱].



شکل ۱۵-۳۱. روابط مشاهده و پیش‌بینی شده از نرخ رشد ترک برحسب پتانسیل خوردگی برای فولاد زنگ نزن ۳۰۴ حساس شده کوره‌ای در K ثابت برابر با ۲۷٫۵ $MPa\sqrt{m}$. اطلاعات مشاهده شده در آبِ دارای هدایت بین ۰٫۱ تا ۰٫۳ µS/cm به‌دست آمده است. روابط پیش‌بینی شده، حساسیت نرخ رشد ترک به تغییرات در ترکیب‌های پتانسیل خوردگی و خلوص آب (۰٫۱ تا ۰٫۵ µS/cm) را نشان می‌دهد. مثلث بزرگ از نمونه‌ی پرتودهی شده‌ی SS ۳۰۴ تا dpa ۴ به‌دست آمده است. دایره‌ها و مستطیل‌های بزرگ‌تر فولاد زنگ نزن کار سرد شده و آلیاژ ۶۰۰ را نشان می‌دهند [۷، ۸، ۹، ۳۲، ۳۳].

۱۵-۳ مشاهدات تعمیراتی و آزمایشگاهی از اثرات پرتودهی روی ترک خوردگی تنشی

۱۵-۳-۱ آلیاژهای آستنیتی

چشم‌انداز تاریخی از تجربه‌های تعمیر IASCC آموزنده است زیرا این پدیده به دهه‌ی ۱۹۶۰ باز می‌شود، و مشاهدات و نتایج اولیه تصویر دقیقی از مشخصات مهم، ماهیت کلی و ارتباط گسترده با اجزای تأسیسات اتمی را پیشنهاد می‌کند. IASCC اولین بار در اوایل دهه‌ی ۱۹۶۰ گزارش شد [۱، ۷، ۲۰] و ترک‌گذاری بین دانه‌ای غلاف‌های سوخت فولاد زنگ نزن را دربر می‌گرفت. یافته‌ها و نتایج به این صورت بود که ریخت‌شناسی ترک‌گذاری بین دانه‌ای غالب بوده است و شروع ترک‌گذاری چندتایی از سمت آب رخ می‌دهد. در مقابل، فقط ترک‌گذاری نرم و درون دانه‌ای در آزمون‌های مکانیکی انجام شده بعد از پرتودهی در محیط‌های خنثی و در دماها و نرخ‌های کرنش متفاوت مشاهده شد. عموماً رسوب کاربیدی مرزدانه‌ای به وسیله‌ی میکروسکوپ نوری و الکترونی عبوری مشاهده نمی‌شود (اگرچه حساس‌سازی حرارتی قبلی در بعضی از موارد وجود دارد). هم‌بستگی میان زمان تا پارگی و سطح تنش گزارش شده است، به این صورت که پارگی در ابتدا در میله‌های دیواره‌ی نازک با فاصله‌های هوایی کوچک سوخت تا غلاف رخ می‌دهد که کرنش‌های تورمی بزرگ‌تر است. رخداد ترک‌گذاری بزرگ در مناطق شار حرارتی بالا که مطابق با جریان بالا و برهم‌کنش سوخت ـ غلاف زیاد است (بالاترین کرنش‌ها و تنش‌ها)، رخ می‌دهد. غلاف‌های فولاد زنگ نزن مشابه در تعمیر رآکتور آب تحت فشار، موارد پارگی بین دانه‌ای کم‌تری را نشان دادند. در آن زمان پارگی‌های رآکتور آب تحت فشار به شرایط غیر شیمیایی یا گسیختگی تنشی نسبت داده می‌شد.

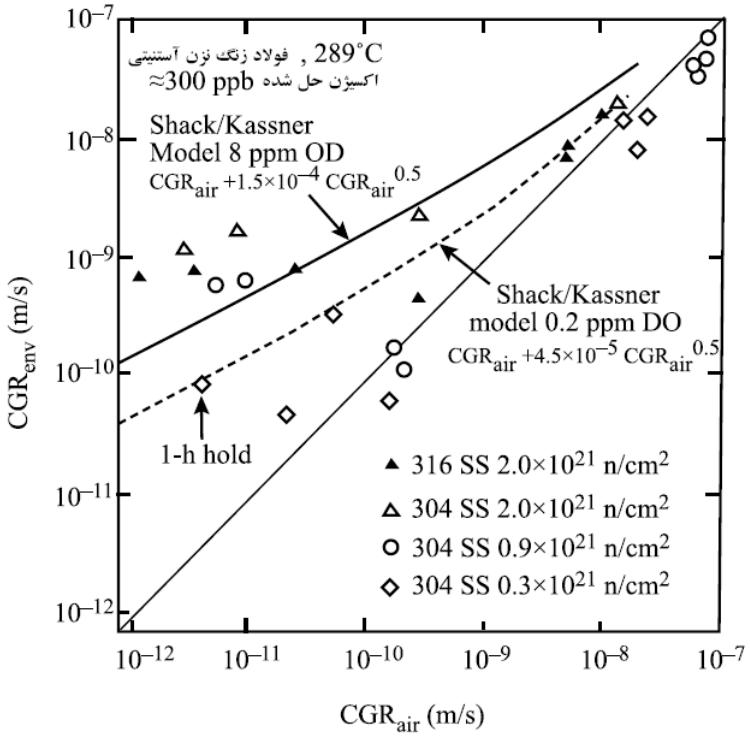
IASCC هم‌چنین در تعداد بسیار زیادی از قطعات هسته‌های از جنس فولاد زنگ نزن (و آلیاژ نیکل)، مانند نگاه‌دارنده‌های منبع نوترون در ۱۹۷۶ و تیوب‌های جذب کننده‌ی میله‌ی کنترل در سال ۱۹۷۸ مشاهده شده بود [۱]. تیوب‌های تجهیزات خشک کننده و دسته‌های تیغه‌های کنترل و سپرها که در معرض تنش‌های پایینی بودند نیز ترک خوردند اگرچه در کل این ترک خوردگی‌ها بیش‌تر در موقعیت‌های شکاف‌دار در جریان‌های بالا رخ داده بود [۵]. از سال ۱۹۹۰ تاکنون رخدادهای IASCC بسیار متعددی به ویژه در پوشش‌های هسته در رآکتور آب جوشان [۱، ۷، ۲۰، ۲۹] و پیچ‌های سپر در رآکتور آب تحت فشار مشاهده شده است.

جدول ۱۵-۲ خلاصه‌ای از گسیختگی‌های گزارش شده در اجزای داخلی رآکتورها را نشان می‌دهد همان‌طوری که مشخص است IASCC به طراحی مشخص رآکتور محدود نشده است. برای مثال، خرابی‌های غلاف‌های سوخت فولاد زنگ نزن در رآکتورهای آب تحت فشار تجاری اولیه و در رآکتورهای تست رآکتور آب تحت فشار گزارش شده است. در مدار آزمایش رآکتور آب تحت فشار میلتون غربی[1]، پارگی بین دانه‌ای غلاف‌های سوخت فولاد زنگ نزن ۳۰۴ بازپخت شده در خلأ در آب آمونیاکی (pH =۱۰) در ^{o}C ۳۱۶ هنگامی مشاهده شده است که غلاف‌ها بالای تنش تسلیم بارگذاری شده‌اند. به صورت مشابه، IASCC در بست‌های شکاف‌دار میله‌های سوخت[2] از جنس فولاد زنگ نزن در SGHWR وینفریت[3]، یک نیروگاه ۱۰۰ مگاواتی که در آن آب سبک در درون تیوب‌های فشار جوشانده می‌شود که منجر به افزایش در شیمی مایع سردکننده مشابه دیگر رآکتورهای آب سبک جوشان می‌شود، مشاهده شده است.

مقایسه‌های نوع رآکتور نیز در آزمون‌های لوله‌های تورمی انجام شده در هسته‌ی رآکتور آب جوشان و رآکتور آب تحت فشار روی گستره‌ای از انواع فولاهای زنگ نزن ۳۰۴، ۳۱۶ و ۳۴۸ تجاری و خلوص بالا و آلیاژهای X-750، X-718 و X-625 انجام شده است. تورم به وسیله‌ی تغییر ترکیب Al_2O_3 و B_4C در درون لوله‌ها کنترل می‌شود؛ آخرین تورم‌ها نیز ناشی از تبدیل نوترونی بور به هلیوم است. ردیفی از نمونه‌های به صورت اسمی مشابه در داخل هسته رآکتور در موقعیت لوله‌های سوخت قرار داده شدند. تفاوت در حساسیت IASCC بین دو نوع رآکتور اندک بود. درحالی‌که اطلاعات موجود به وضوح ارتباطی را بین IASCC در رآکتورهای آب جوشان و رآکتورهای آب تحت فشار تقویت می‌کند، کاملاً مشخص است که پتانسیل خوردگی بالا در رآکتورهای آب جوشان ترک خوردگی تنشی را تشدید می‌کند، و در مقدار کم‌تر، شار و دمای بالا در رآکتورهای آب تحت فشار نیز ترک خوردگی تنشی را تشدید می‌کند.

1. West milton
2. Fuel element ferrules
3. Winfrith

اطلاعات آزمایشگاهی موارد مشاهده شده در تأسیسات برحسب اثر تشدیدی پرتودهی را تقویت می‌کنند. از آن‌جایی که اطلاعات آزمایشگاهی بعد از پرتودهی که در آن پرتوکافت آب عامل تأثیرگذار نیست، جمع‌آوری شده است، استنباط می‌شود که اثرات پرتودهی که مسئول ترک‌گذاری‌های مشاهده شده هستند، از تغییرات ریزساختاری حاصل شده‌اند. شکل ۱۵-۳۲ اثر پرتودهی روی نرخ رشد ترک فولاد زنگ نزن ۳۰۴ و ۳۱۶ تحت چرخه‌های متوالی در آب $289^{o}C$ با خلوص بالا و تقریباً ppb ۳۰۰ اکسیژن حل شده در مقایسه با هوا را نشان می‌دهد.



شکل ۱۵-۳۲. مقایسه‌ی نرخ رشد ترک در فولادهای زنگ نزن آستنیتی تحت چرخه‌های متوالی در آب $289^{o}C$ با خلوص بالا و تقریباً ppb ۳۰۰ اکسیژن حل شده در مقایسه با هوا [۳۶].

جدول ۱۵-۲. تجربه‌های تعمیر IASCC [۵].

قطعه	آلیاژ	نوع رآکتور	منبع احتمالی تنش
پوشش سوخت	304 SS	BWR	تورم سوخت
پوشش سوخت	304 SS	PWR	تورم سوخت
*پوشش سوخت	20%Cr/25%Ni/Nb	AGR	تورم سوخت
غلاف‌های پوشش سوخت	20%Cr/25%Ni/Nb	SGHWR	ساخت
نگه‌دارنده‌های منابع نوترونی	304 SS	BWR	جوشکاری و متورم شدن
تیوب‌های خشک کن	304 SS	BWR	ساخت
تجهیزات			
تیوب‌های جذب کننده	304/304L/316L SS	BWR	تورم B_4C
میله‌ی کنترل			
پیچ‌های کاپ‌های	304 SS	BWR	ساخت
میله‌ی سوخت			
میخ پرچ‌های	304 SS	BWR	ساخت
میله‌های کنترل			
دسته تیغه کنترل	304 SS	BWR	تنش پایین
ورقه‌ی تیغه‌ی کنترل	304 SS	BWR	تنش پایین
تیغه‌های کنترل	304 SS	PWR	تنش پایین
تیغه‌های کنترل	304 SS	BWR	تنش پایین
صفحه‌ای			
**پیچ‌های مختلف	A-286	PWR & BWR	سرویس
**پیچ‌های خشک کن	A-286	BWR	سرویس
جداکننده‌های بخار			
**پیچ‌های سر پوشش	600	BWR	سرویس
پیچ‌های مختلف	X-750	BWR & PWR	سرویس
پین‌های نگه‌دارنده	X-750	PWR	سرویس
تیوب هدایت کننده			
میله‌های پمپ جت	X-750	BWR	سرویس
واشرهای مختلف	X-750	BWR & PWR	سرویس
واشرهای مختلف	718	PWR	سرویس
پیچ‌های سپرها	316 SS Cold-work	PWR	گشتاور پیچشی، تورم جزیی
هسته‌ی پوشش	304/316/347 /L SS	BWR	تنش باقی‌مانده‌ی جوشکاری
موج‌بر بالایی	304 SS	BWR	تنش پایین (خم شدن)

* ترک خوردگی در سوخت AGR که در طول ذخیره‌سازی در مخزن سوخت رها شده رخ داده است.

** ترک‌گذاری داخلی هسته‌ها که دور از شارهای نوترون و گامای بالا رخ داده است.

خط 45^{o} نشان می‌دهد که هیچ‌گونه اثر محیطی روی ترک‌گذاری وجود ندارد و دو منحنی، نرخ‌های رشد ترک مورد انتظار برای فولادهای زنگ نزن آستنیتی پرتودهی نشده در آب فوق خالص با ۸ ppm (خط پررنگ) یا ۰٫۲ ppm (خط چین) اکسیژن حل شده را نشان می‌دهند [۳۶]. با مقایسه‌ی اطلاعات موجود از سطوح مختلف جریان‌های نوترونی، مشخص است که محیط و سطح جریان نرخ رشد ترک را تحت تأثیر قرار می‌دهند. نرخ رشد ترک در SS ۳۰۴ پرتودهی شده تا $2\times10^{21}\ n/cm^2$ بیش‌تر از یک برابر بزرگ‌تر از نمونه‌ی پرتودهی شده تا $0.3\times10^{21}\ n/cm^2$ است.

در اوایل دهه‌ی ۱۹۹۰، مدارک میدانی و آزمایشگاهی از IASCC، حاکی از این بودند که ترک‌گذاری، با کمک محیط انجام می‌شود و به همین دلیل رفتار پیوسته‌ی منسجمی در عکس‌العمل‌ها در محدوده‌های وسیعی از جریان، پتانسیل خوردگی، دما، تنش و غیره وجود دارد. جایی که افزایش پتانسیل خوردگی در رآکتورهای آب جوشان، گرایش به سمت افزایش قابلیت IASCC را تقویت می‌کند (به عبارت دیگر، شکل ۱۵-۳۰ الف و ۱۵-۳۱)، رآکتورهای آب تحت فشار باید قابلیت کم‌تری را از IASCC داشته باشند. به هرجهت دیگر عوامل متمایز کننده رآکتورهای آب تحت فشار از رآکتورهای آب جوشان، دماهای بالاتر، تقریباً ۱۰ برابر شار نوترونی در اجزای ساختاری هسته، فیوگاسیته هیدروژن بالاتر، و شیمی آب بوراتی ـ لیتیومی (به انضمام احتمال جوشیدن موضعی و سلول‌های غلظتی حرارتی در شکاف‌ها از پرتودهی گاما که می‌تواند منجر به محیط‌های خورنده موضعی شود) هستند. نقش احتمالی جدایش القایی تابشی سیلیسیم خصوصاً در محاسبه‌ی تفاوت‌های محدود در پاسخ‌های ترک خوردگی تنشی در پتانسیل بالا (رآکتور آب جوشان) در مقابل پتانسیل پایین (رآکتور آب تحت فشار) در جریان‌های بالا حایز اهمیت است.

دو مثال همه جانبه از ترک خوردگی تنشی با کمک پرتودهی، پوشش‌های هسته رآکتور آب جوشان و پیچ‌های سپر رآکتورهای آب تحت فشار هستند اگرچه قابلیت ترک خوردگی تنشی در دیگر نواحی مانند اجزای تیغه‌های کنترل، اجزای سوخت، موج بر[1] بالای رآکتور آب جوشان، و غیره نیز وجود دارد. ترک خوردگی تنشی در پوشش‌های هسته‌ی رآکتور آب جوشان تقریباً به صورت انحصاری نزدیک جوش‌ها (هم محیط پیرامون و هم محیط عمودی) رخ می‌دهد، و در ابتدا از سمت سطوح داخلی (ID) و سطوح خارجی (OD) مشاهده می‌شود (پوشش‌ها جریان بالایی هسته را از

1. Top guide

جریان گردش مجدد پایینی جدا می‌کنند که در حلقه‌های بین پوشش و مخزن فشار رخ می‌دهد). لوله‌ی قطر بالای جوش داده شده حساسیت ذاتی به ترک خوردگی تنشی دارد، که در اصل مرتبط با تنش‌های پسماند باقی مانده و کرنش‌های انقباضی جوش است، و ترک‌گذاری در نواحی جریان پایین و جریان متوسط مشاهده می‌شود. هم‌چنین مشاهده شده است که کارهای سطحی شدید منجر به تشدید IASCC در پوشش‌های هسته می‌شود. مقدار افزایش در قابلیت ترک خوردگی تنشی به وسیله‌ی پرتودهی، محدود است زیرا درحالی‌که سخت‌گردانی تابشی و جدایش القایی تابشی رخ می‌دهد؛ اما خزش تابشی نیز تنش‌های پسماند جوش را آزاد می‌کند.

خرابی‌های گسترده پیچ‌های سپر رآکتور آب تحت فشار در آغاز دهه‌ی ۱۹۹۰ رخ داد [۳۴، ۳۵] اگرچه تفاوت‌های بزرگی در یک کارخانه نسبت به کارخانه دیگر و یک جریان حرارتی نسبت به جریان حرارتی دیگر وجود داشت. اکثر پیچ‌های سپر از فولاد زنگ نزن ۳۱۶ ساخته شده و به منظور افزایش استحکام تسلیم تا تقریباً ۱۵٪ کار سرد شدند. قبلاً در رآکتور آب تحت فشار سپر با ساختار ترکیبی وجود داشت زیرا سوخت یک کانال احاطه کننده نداشت، در نتیجه ساختار سپر باید به منظور توزیع خوب جریان آب، با هندسه‌ی سوخت تطبیق داده شود. صفحات پیشین سپر معمولاً از فولاد زنگ نزن ۳۰۴ بازپخت شده ساخته می‌شدند. به علت نزدیکی آن‌ها به سوخت، جریان‌های بسیار بالایی، بالای ۸۰ dpa ~ محاسبه شده تا پایان عمر اصلی، را دریافت می‌کردند. شارهای بالای گاما، حرارت‌دهی قابل توجهی را در قطعات ایجاد می‌کند، به خصوص در طراحی‌هایی که سردکننده‌ی رآکتور آب تحت فشار دسترسی خوبی به ساقه پیچ ندارد، به صورتی که در بعضی از موارد تخمین زده شده که دما ۴۰ درجه‌ی سانتی‌گراد بالای دمای خنک کننده باشد.

شکل ۱۵-۳۳ تصاویری از ترک‌گذاری بین دانه‌ای در پیچ سپر توضیح داده شده در مبحث تورم در فصل ۸ را نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که ترک‌ها در ناحیه‌ی تماس ساقه‌ی پیچ و گل پیچ رخ داده است. ترک‌ها کاملاً بین‌دانه‌ای هستند و در بیش از نیمی از ضخامت پیچ گسترش یافته‌اند.



شکل ۱۵-۳۳. ترک‌های در پیچ سپر از جنس فولاد زنگ نزن ۳۱۶ کار سرد شده. محل ترک‌ها مقدار پرتوگیری نوترون در حدود ۷ dpa در ۳۱۰ ^{o}C را دریافت کرده است.

تعداد رخدادهای IASCC در حال گسترش است و مشخص شده است قطعات بسیاری در رآکتورهای آب سبک مستعد این پدیده هستند. گرایش‌ها و هم‌بستگی‌های کلی برای IASCC می‌تواند به صورت زیر خلاصه شود:

- زمانی عقیده بر این بود که ترک‌های بین‌دانه‌ای مرتبط با اثرات تابشی در فولاد زنگ نزن بازپخت محلولی شده، فقط در جریان‌های بالای $\approx ۰٫۳ \times ۱۰^{۲۱}$ n/cm^2 رخ می‌دهد، ترک-های بین‌دانه‌ای قابل توجه در پوشش‌های هسته رآکتور آب جوشان در محدوده‌ی وسیعی از جریان‌ها مشخص کرد که چنین برتری (آستانه‌ی جریان واقعی) صادق نیست. البته مشاهدات ترک خوردگی تنشی در فولادهای زنگ نزن غیرحساس شده (با یا بدون کار سرد) نیز مفهوم غیرقابل دفاع جریان آستانه را نشان می‌دهد که در زیر آن هیچ‌گونه ترک خوردگی تنشی رخ نمی‌دهد. این موضوع هم‌چنین برای آستانه‌ها در پتانسیل خوردگی، ناخالصی‌های آب و غیره نیز قابل بیان است.
- جریان، قابلیت ترک خوردگی تنشی را تحت تأثیر قرار می‌دهد؛ اما معمولاً این تأثیرگذاری بسیار پیچیده است. ترک خوردگی تنشی در پوشش‌های رآکتور آب جوشان

و در پرچ‌های سپر رآکتور آب تحت فشار همیشه شدیداً وابسته به جریان نیستند، دلیل مهم برای این موضوع خزش تابشی است که رهایش تنش از جوش‌ها و پیچ‌ها را تولید می‌کند.

- تنش‌های بالا یا کرنش‌های دینامیک در اغلب رخدادهای ابتدایی وجود دارد. بنابراین ترک‌گذاری در تنش‌های کاملاً پایین در جریان‌های بالا و زمان‌های پرتوگیری عملیاتی بالا مشاهده شده است. اطلاعات میدانی و آزمایشگاهی نشان می‌دهد که IASCC در تنش‌های کم‌تر از ۲۰٪ تنش تسلیم تابشی و در شدت تنش‌های کم‌تر از $10\ MPam^{1/2}$ رخ می‌دهد.
- یک اثر قوی از پتانسیل خوردگی از اطلاعات گسترده‌ی آزمایشگاهی و میدانی مشخص شده است. اثر آن در کل از جریان‌های پایین تا بالا پایدار است، اگرچه تغییر مقداریِ مرتبط با تغییرات در پتانسیل متغیر است. تمایل مواد به تغییرات القایی تابشیِ بالا در سطح سیلیسم، ممکن است اثر بسیار محدودی از پتانسیل خوردگی را نشان دهد. پتانسیل آستانه‌ی واقعی مشخص وجود ندارد زیرا مواد پرتودهی شده، در آب هوازدایی شده نیز IASCC را نشان می‌دهند.
- قابلیت هدایت محلول (یعنی، ناخالصی‌ها، به خصوص کلریدها و سولفات‌ها) به شدت گرایش به ترک‌گذاری در آب رآکتور آب جوشان را تحت تأثیر قرار می‌دهد. این وابستگی به اندازه‌ی برابری به مناطق شار پایین و بالا و به فولاد زنگ نزن و آلیاژهای پایه نیکل اعمال می‌شود.
- به علت قابلیت هندسه‌ی شکاف برای ایجاد محیط بسیار خورنده در شکاف‌ها به علت شیب پتانسیل شیمیایی (در رآکتورهای آب جوشان) یا در دما (بیش‌تر مربوط به رآکتورهای آب تحت فشار)، ترک‌گذاری را دشوارتر می‌کند.
- کار سرد اغلب ترک‌گذاری را سخت‌تر می‌کند (مخصوصاً سطوحی که به صورت خشن صیقلی شده‌اند)، اگرچه کار سرد می‌تواند آغاز بعضی از اثرات پرتودهی را به تأخیر بیندازد.
- دما عامل مهم روی IASCC است که هم شروع ترک و هم نرخ رشد ترک را افزایش می‌دهد.

- برای حساسیت به IASCC کاربیدهای مرزدانه‌ای و تهی‌شدگی کروم مورد نیاز نیست، اگرچه فولادهای زنگ نزن حساس شده کوره‌ای به شدت مستعد به ترک‌گذاری در هسته هستند. تهی‌سازی کروم نقص ابتدایی را به جای می‌گذارد ولی اثر آن در محیط‌هایی که pH تغییر کرده بسیار قطعی نیست، زیرا تهی‌سازی کروم هنگامی گسترش می‌یابد که شیب‌های پتانسیلی یا حرارتی وجود دارد. نقش نیتروژن، گوگرد، فسفر و دیگر جداشونده‌های مرزدانه‌ای نیز کم‌تر مشخص شده است.
- جریانی که در آن IASCC مشاهده می‌شود وابسته به تنش اعمالی، کرنش، پتانسیل خوردگی، هدایت محلول، هندسه ترک و غیره است. در هدایت‌های به اندازه‌ی کافی بالا، ترک‌گذاری در فولاد زنگ نزن بازپخت محلولی شده در آزمایشگاه و در تأسیسات مشاهده می‌شود. در نتیجه، مفهوم جریان آستانه (یا تنش، پتانسیل خوردگی، یا غیره) از لحاظ علمی گمراه کننده است زیرا قابلیت ترک‌گذاری و ریخت‌شناسی بیش از بسیاری از عوامل مرتبط، کاملاً پیوسته با یک‌دیگر مطرح شده‌اند.

اطلاعات میدانی و آزمایشگاهی موجود در اوایل دهه‌ی ۱۹۸۰، و به علاوه دانش اساسی جامع از ترک‌گذاری محیطی در آب داغ، منجر به این فرضیه شد که از میان اثرات بی‌شمار ممکن پرتودهی، فاکتورهای بسیار مهم، جدایش القایی تابشی در مرزدانه‌ها، سخت‌گردانی تابشی (افزایش استحکام تسلیم)، مد تغییر شکل، رهایش خزشی تابشی (از تنش‌های حجمی ثابت، یعنی در جوش‌ها و پیچ‌ها)، و پرتوکافت (افزایش پتانسیل خوردگی در رآکتور آب جوشان‌ها) هستند. دیگر فاکتورها نیز می‌توانند در بعضی از موارد مهم باشند مانند تشکیل حفره که می‌تواند تافنس شکست را تحت تأثیر قرار دهد و می‌تواند تورم تفاضلی را تولید کند که منجر به بارگذاری مجدد قطعاتی مانند پیچ‌های سپر می‌شود.

۱۵-۳-۲ آلیاژهای فریتی

آلیاژهای فریتی نیز مستعد ترک‌گذاری افزایشی محیطی در آب دما بالا هستند. نقش پرتودهیِ تنها، روی نرخ رشد ترک خستگی در فولادهای مخازن تحت فشار در فصل ۱۳ مورد بحث قرار گرفت، که مشخص شد که پرتودهی به تنهایی نمی‌تواند نرخ رشد ترک را تشدید کند. به هرجهت، نرخ‌های رشد ترک به وسیله‌ی محیط تأثیر می‌پذیرند. در حقیقت، محیط، عوامل بارگذاری و عوامل ماده تماماً

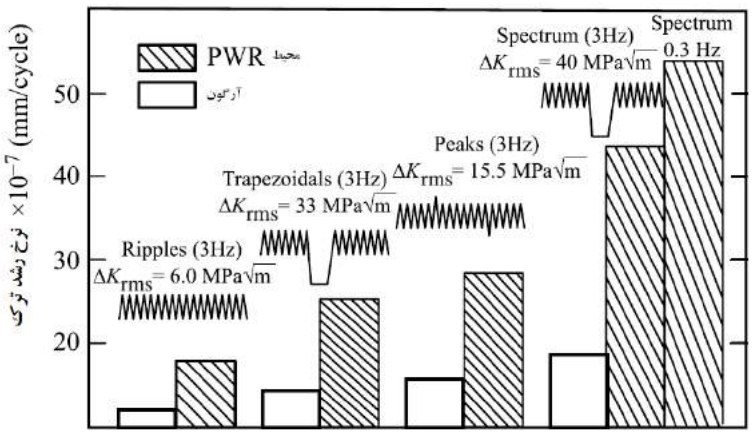
روی نرخ رشد ترک در آب دما بالا مؤثر هستند. در کل، نرخ رشد در هر دوره با موارد زیر افزایش می‌یابد.

عوامل محیطی: افزایش غلظت اکسیژن، افزایش هدایت، افزایش دما،

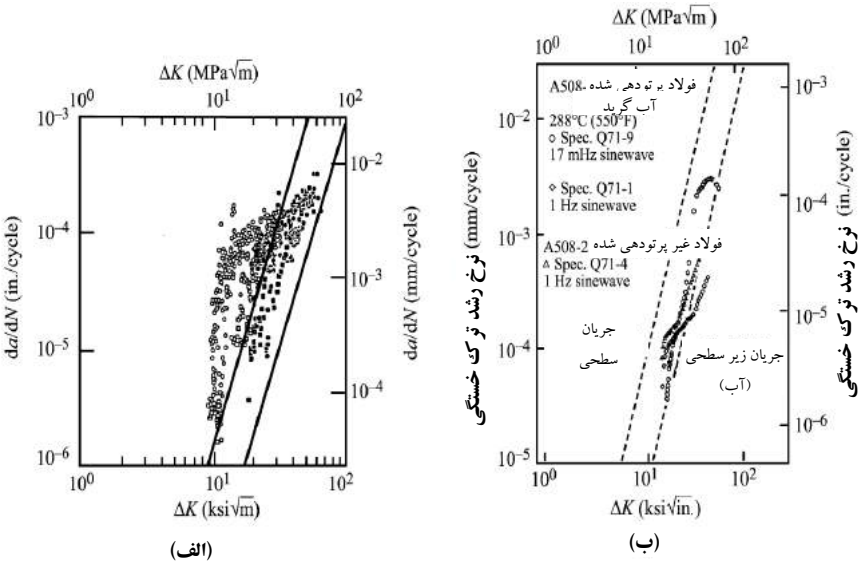
عوامل بارگذاری: افزایش نسبت R (تنش میانگین بالاتر)، کاهش بسامد، ناپایداری‌ها و دوره‌های تناوبی ایستا در شکل موج بارگذاری،

عوامل ماده: افزایش مقدار سولفور در آلیاژ

برای مثال، شکل ۱۵–۳۴ اثر محیط، بسامد و شکل موج بار روی نرخ رشد ترک خستگی در فولاد A508 را نشان می‌دهد. در محیط رآکتور آب تحت فشار، بسامد پایین‌تر، ناپایداری‌ها و توقف‌های زمانی در شکل موج‌ها، نرخ رشد ترک را افزایش می‌دهند. اثر محیط روی ترک‌گذاری در شکل ۱۵–۳۵ الف نشان داده شده است، که نرخ رشد ترک خستگی را به صورت تابعی از ΔK برای فولادهای A533B و جوش‌ها در آب رآکتور آب تحت فشار نتیجه می‌دهد. خط ممتد پر رنگ در سمت راست، محدوده‌ی نرخ رشد ترک استانداردهای مخزن فشار و دیگ بخار در هوا و وابستگی ΔK به da/dN را نشان می‌دهد. شکل ۱۵–۳۵ ب نیز نشان می‌دهد که در آب رآکتور در ^{o}C ۲۸۸، تأثیر پرتودهی فقط کمینه کردن ازدیاد نرخ رشد ترک ناشی از محیط است.



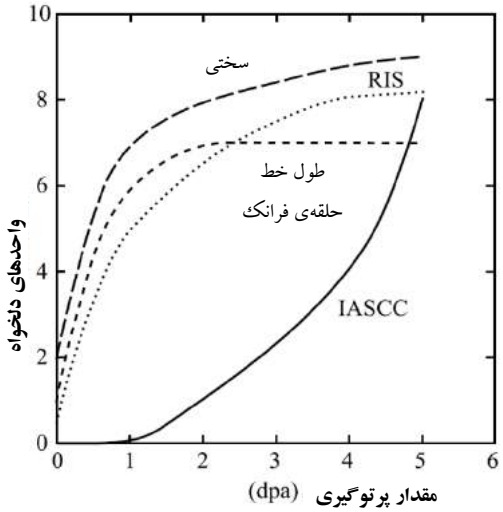
شکل ۱۵–۳۴. اثر محیط، بسامد و ناپایداری‌ها روی رفتار رشد ترک خستگی فولاد A533B در معرض یک‌سری از بارگذاری‌های مختلف [۳۷].



شکل ۱۵-۳۵. (الف) گردآوری اطلاعات نرخ رشد ترک خستگی برای فولادهای A533B و فلزات جوش در آب رآکتور آب تحت فشار. خط پایینی حد نرخ رشد ترک در هوا در بخش A در ASME XI 1972 است. ● = فلز پایه، ○ = R ،۰٫۲ ■ = جوش‌ها، ۰٫۲ = R، ○ = فلز پایه، ۰٫۷ = R، □ = جوش‌ها، ۰٫۷ = R [۳۷]. (ب) نرخ‌های رشد برحسب ضریب شدت تنش دوره‌های اعمال شده برای فولاد A508-2 پرتودهی شده و پرتودهی نشده [۳۸].

۱۵-۴ سازوکارهای IASCC

درحالی‌که سازوکارهایی که به وسیله‌ی آن‌ها پرتودهی، ترک‌گذاری خوردگی تنشی را تحت تأثیر قرار می‌دهد هنوز به صورت دقیق مشخص نشده است، تئوری‌های موجود در ۵ گروه تقسیم‌بندی می‌شوند: (۱) تهی‌سازی مرزدانه‌ای کروم در اثر القای تابشی، (۲) سخت‌گردانی تابشی، (۳) تغییر شکل موضعی، (۴) اکسیداسیون انتخابی داخلی ، (۵) خزش تابشی. دشواری در تعیین نقش پرتودهی در ترک خوردگی تنشی به علت وجود هم‌زمان چندین اثر مختلف است. شکل ۱۵-۳۶ نمایش شماتیک از افزایش در جدایش القایی تابشی، ریزساختار نابجایی و سخت‌گردانی تابشی را نشان می‌دهد و تمام این عوامل با نسبت تقریباً مشابهی با مقدار پرتوگیری تابشی افزایش می‌یابند. قسمت‌های بعدی سازوکارهایی که به وسیله‌ی آن این فرایندها می‌توانند IGSCC را تحت تأثیر قرار دهند، توضیح می‌دهد.



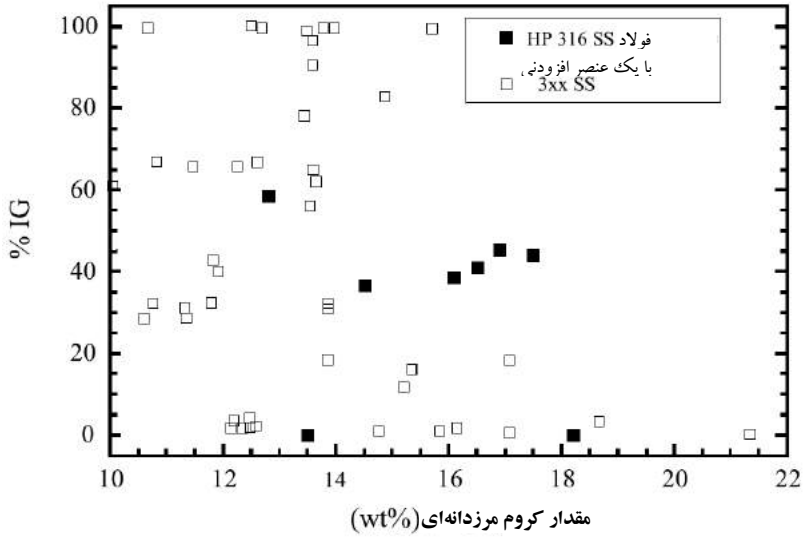
شکل ۱۵-۳۶. نمودار شماتیک نشان دهنده‌ی افزایش در تمام عوامل (جدایش القایی تابشی (RIS)، حلقه‌ها، سختی) و قابلیت ترک خوردگی تنشی با مقدار پرتوگیری [۴].

۱۵-۴-۱ تهی‌سازی کروم مرزدانه‌ای

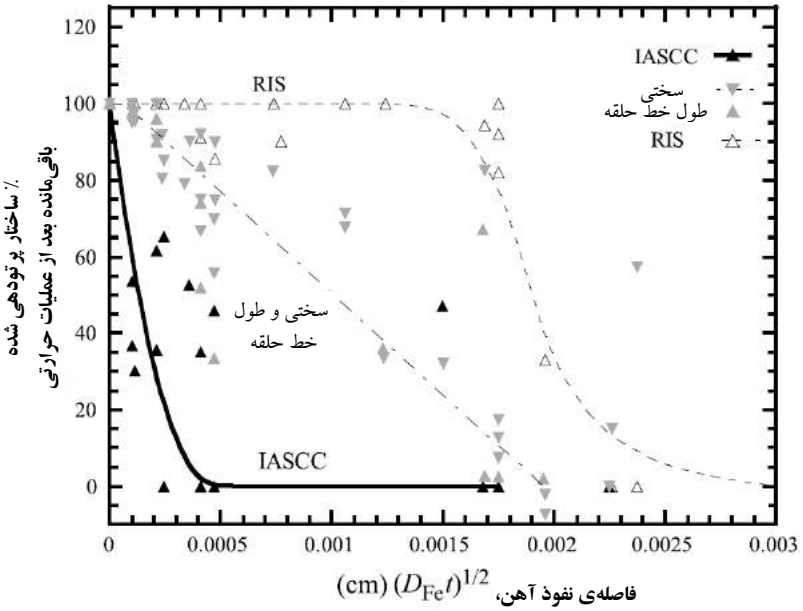
همان‌طوری که در فصل ۶ توضیح داده شد، پرتودهی در محدوده‌ی دمایی مربوط به قطعات هسته رآکتور آب سبک منجر به جدایش مرزدانه‌ای می‌شود که به وسیله‌ی کاهش قابل توجه در مقدار کروم نمایان می‌شود. کروم به وسیله‌ی تشکیل فیلم اکسیدی کروم در غیرفعال‌سازی آلیاژهای آستنیتی سهیم می‌شود و اتلاف آن از مرزدانه‌ها می‌تواند منجر به از دست رفتن اثرناپذیری موضعی شود. تهی‌سازی کروم از مرزدانه‌ها در فولادهای زنگ نزن آستنیتی و آلیاژهای پایه‌ی نیکل منجر به IGSCC در آب دما بالا می‌شود [۳۹]. با مقایسه، اتلاف کروم به علت جدایش القایی تابشی دلیلی برای ایجاد IASCC در شرایط پرتودهی است. اطلاعات موجود این فرضیه را تا حدی به وسیله‌ی نشان دادن تمایل کلی در افزایش IGSCC% با کاهش غلظت کروم مرزدانه‌ای تقویت می‌کنند (شکل ۱۵-۳۷). به هرجهت اطلاعات پراکندگی قابل توجهی را نشان می‌دهند، بعضی از آن‌ها به ماهیت تصادفی آغاز ترک که در آزمون کرنش‌گذاری الکترود، ذاتی است؛ اما برای تشریح تمام متغیرها غیرمحتمل است، نسبت داده شود.

اخیراً، آزمایشات بازپخت بعد از پرتودهی برای متمایز کردن اثرات مختلف پرتودهی ناشی از تفاوت‌ها در مشخصات آنیلینگ آن‌ها مورد استفاده قرار گرفته است. شکل ۱۵-۳۸ نشان می‌دهد که

از عمده ترکیب‌های ریزساختاری القایی تابشی، جدایش القایی تابشی در بازپخت هم دما به آرامی بازیابی می‌شود و در اصل در دوره‌ی زمانی که در طول آن قابلیت ترک خوردگی تنشی کاملاً حذف می‌شود، تغییر ناپذیر است. این نتیجه که با چندین مطالعه با استفاده از انواع مختلف پرتودهی سازگار است، توجه ویژه‌ای را روی سخت‌گردانی و تغییر شکل به عوامل اولیه‌ی بالقوه در IASCC دارد.



شکل ۱۵-۳۷. اثر مقدار کروم مرزدانه‌ای روی IGSCC برای فولادهای زنگ نزن سری ۳۰۰ پرتودهی شده [۴].



شکل ۱۵-۳۸. حذف جدایش القایی تابشی، ریزساختار نابجایی که به وسیله‌ی طول خط حلقه اندازه‌گیری شده و سختی با بازپخت که برای آهن به وسیله‌ی $(Dt)^{1/2}$ اندازه‌گیری شده، برای محاسبه‌ی بازپخت در زمان‌ها و دماهای مختلف [۴].

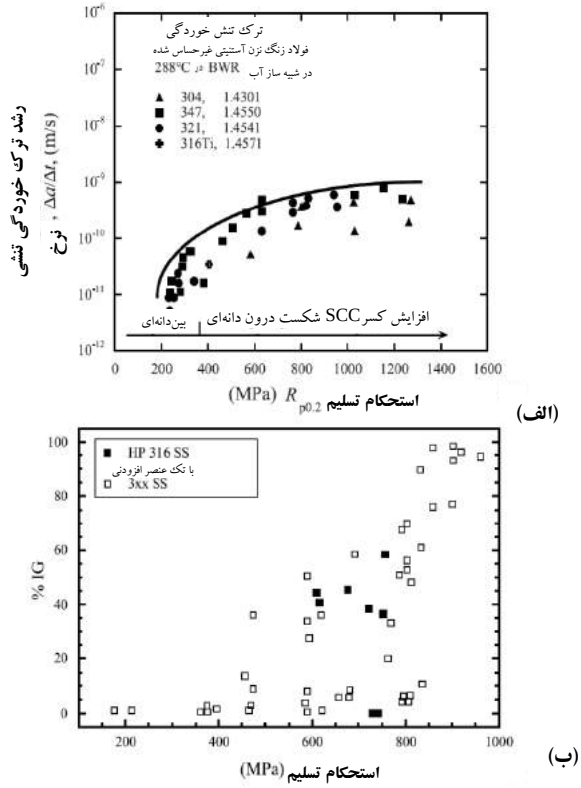
۱۵-۴-۲ سخت‌گردانی تابشی

مشاهده شده است که IGSCC با سختی مرتبط است زیرا نرخ رشد ترک با کار سرد در فولادهای زنگ نزن آستنیتی سری ۳۰۰ آزمایش شده در آب دما بالا، افزایش می‌یابد (شکل ۱۵-۳۹ الف). نظر به آن‌که IGSCC با درصد ترک خوردگی بین دانه‌ای در آزمون‌های نرخ کشیدگی ثابت اندازه‌گیری می‌شود، این پدیده همان‌طوری که در شکل ۱۵-۳۹ ب نشان داده شده است با سخت‌گردانی ناشی از پرتودهی نیز مرتبط است.

بنابراین همان‌طوری که قبلاً نیز اشاره شد، اثرات دیگری نیز در طول پرتودهی رخ می‌دهند که تنها انتساب افزایش ترک‌گذاری به سخت‌گردانی را دشوار می‌سازد. هاش[1] و همکارانش [۴۱] یک‌سری از آزمایشات را روی فولاد زنگ نزن انجام دادند که نشان داد که در غیاب تهی‌سازی قابل توجه کروم مرزدانه‌ای، سخت‌گردانی ناشی از پرتودهی منجر به IGSCC بیش‌تری نسبت به سخت‌گردانی

1. Hash

ناشی از کار سرد می‌شود. این نتیجه پیشنهاد کرد سختی به تنهایی منجر به IASCC نمی‌شود و دیگر اثرات مرتبط با سختی ممکن است که فعال و تأثیرگذار باشند. به نظر می‌رسد که آن عامل حالت تغییر شکل باشد.

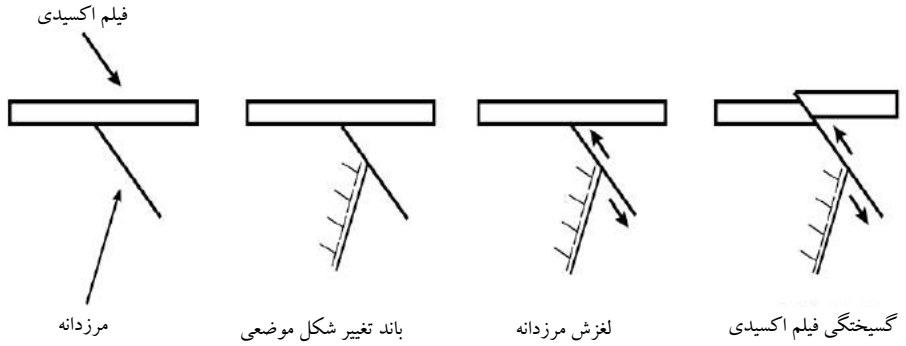


شکل ۱۵-۳۹. تأثیر استحکام تسلیم روی IGSCC. (الف) نرخ‌های رشد ترک برای فولاد زنگ نزن ۳۱۶L و ۳۴۷ در آب به صورت تابعی از استحکام تسلیم ناشی از کار سرد [۴۰]. (ب) IGSCC% در آزمون‌های SSRT روی فولادهای زنگ نزن سری ۳۰۰ که به وسیله‌ی پرتودهی، سخت‌گردانی شده‌اند [۴].

۱۵-۴-۳ حالت تغییر شکل

همان‌طوری که در فصل ۱۲ بحث شد، فلزات پرتودهی شده مشخصه‌ی تغییر شکل موضعی را به واسطه‌ی تمرکز کرنش در کانال‌های نابجایی نشان می‌دهند. کرنش در این کانال‌ها می‌تواند به فراتر از ۱۰۰٪ افزایش یابد، و از آن‌جایی که این عقیده وجود دارد که کانال‌ها در مرزهای دانه آغاز می‌شوند،

آن‌ها هم‌چنین باید در مرزدانه‌ها نیز خاتمه یابند. بدین لحاظ برای جلوگیری از شکست مکانیکی، مقدار قابل توجهی از کرنش موضعی در کانال‌ها باید به وسیله‌ی مرزدانه تطبیق داده شود. این انطباق می‌تواند با چندین سازوکار دربرگیرنده‌ی انتقال لغزش در طول مرز، لغزش متقاطع در ناحیه‌ی مرزدانه، و واکنش نابجایی‌ها در کانال‌ها با نابجایی‌های مرزدانه‌ای برای تولید نابجایی برآیند در صفحه‌ی مرزدانه رخ دهد که در صورت متحرک بودن نابجایی‌های برآیند می‌تواند منجر به لغزش مرزدانه‌ای شود. لغزش مرزدانه فیلم اکسیدی بالای آن را گسیخته خواهد کرد و فلز لایه‌ی زیرین را در معرض محلول قرار می‌دهد و منجر به انحلال و اکسیداسیون مجدد می‌شود. چرخه‌های تکراری لغزش، گسیختگی، انحلال و غیرفعال شدن مجدد می‌تواند منجر به گسترش ترک مرزدانه‌ای به وسیله‌ی فرایند اکسیداسیون لغزشی شود همان‌طوری که در شکل ۱۵–۴۰ نشان داده شده است. علاوه بر لغزش مرزدانه، ترک‌های لبه‌ای ناشی از سپرگذاری نابجایی‌ها در مرزدانه‌ها نیز می‌تواند اکسید را پاره کرده و IGSCC را به صورت مشابهی افزایش دهد. این سازوکار نقش انرژی نقص در چیده شدن در IGSCC بحث شده در قسمت ۱۵–۱–۵ را تقویت می‌کند که در آن آلیاژهایی با انرژی نقص در چیده شدن پایین لغزش مسطحی را متحمل می‌شوند که منجر به سپرگذاری نابجایی‌های مرزدانه‌ای، مشابه اما نه به شدت کانال‌های نابجایی، می‌شود. در نتیجه، هم‌چنان که جریان افزایش می‌یابد، تغییر شکل موضعی بسیار شدید شده و ترک‌گذاری بین‌دانه‌ای با شدت دنبال می‌شود.



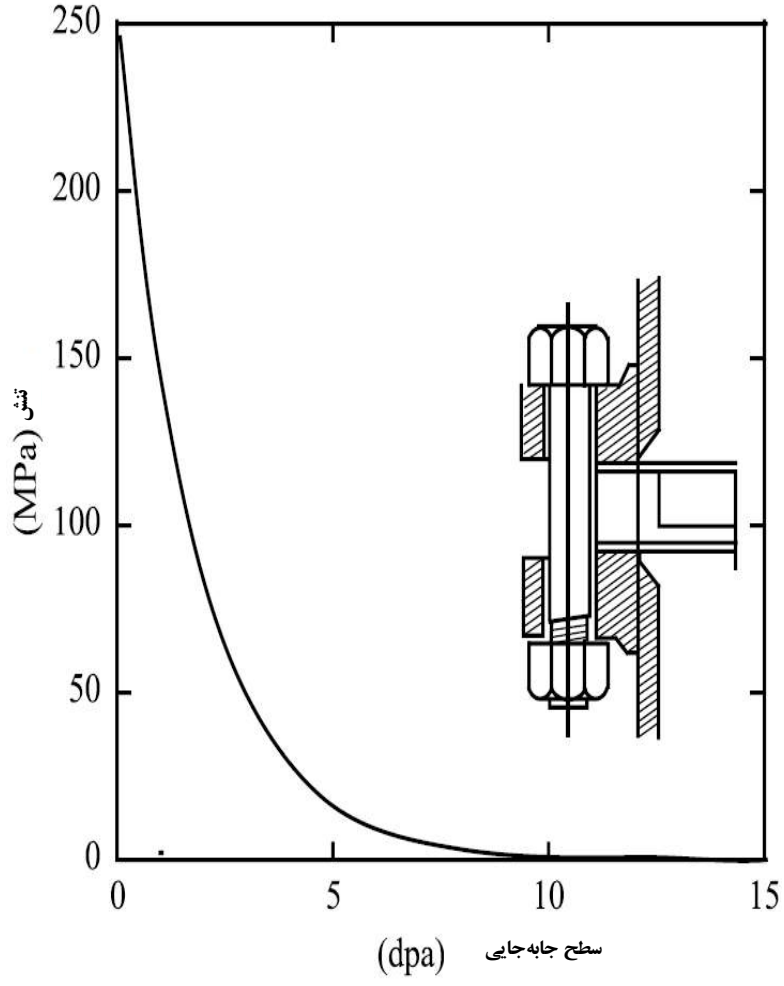
شکل ۱۵–۴۰. شمایی از فرایندی که به وسیله‌ی آن کانال‌های نابجایی می‌توانند لغزش را به مرزدانه انتقال دهند و منجر به پارگی فیلم اکسیدی در مرزدانه و ایجاد IGSCC شوند.

۱۵-۴-۴ اکسیداسیون داخلی انتخابی

سازوکار نهایی که پتانسیلی را برای ایجاد ترک بین‌دانه‌ای دارد، اکسیداسیون داخلی انتخابی است که بر پایه‌ی انتقال سریع اکسیژن در طول مرزدانه‌ها و سپس اکسید شدن و تردی فلز جلوی سر ترک است که منجر به افزایش ترک‌گذاری در طول مرزدانه‌ها می‌شود [۴۲]. اکسیداسیون داخلی در آلیاژهای پایه‌ی نیکل در دماهای بالای ^{o}C ۶۰۰ مشاهده شده است [۴۳-۴۵]؛ اما این انتظار وجود ندارد که این فرایند در آهن یا آلیاژهای پایه‌ی نیکلی در دماهای هسته رآکتور آب سبک رخ دهد. به هرجهت، ترکیب مسیرهای نفوذ دایره‌ای کوتاه (مرزدانه‌ها) و افزایش نفوذ در اثر پرتودهی منجر به افزایش احتمال رخداد این سازوکار در محدوده‌ی دماهای پایین می‌شود. مشاهده‌ی اکسیژن نفوذ کننده‌ی جلوی سر ترک فعال در قطعات هسته فولاد زنگ نزن تأییدی برای وجود این سازوکار است [۴۶].

۱۵-۴-۵ خزش القایی تابشی

در مقابل چهار اثر قبلی پرتودهی روی ترک خوردگی تنشی، پرتودهی خزشی را القا می‌کند که تنش‌های پسماند را آزاد کرده و در نتیجه به صورت مؤثری نیرو محرکه برای ترک خوردگی تنشی را حذف می‌کند. همان‌طوری که در فصل ۱۱ نشان داده شد، رهایش تنش وابسته به مقدار پرتوگیری است. شکل ۱۵-۴۱ کاهش در تنش روی پیچ را به صورت تابعی از شار نوترون نشان می‌دهد. لازم به ذکر است که رهایش، رفتار تقریباً نمایی را با مقدار پرتوگیری نوترون دنبال می‌کند به گونه‌ای که تنش بعد از فقط dpa ۲ به حدود نصف مقدار اولیه‌اش کاهش می‌یابد. رهایش تنش به وسیله‌ی خزش القایی تابشی فرایندی بسیار مهم برای آزاد کردن تنش در پیچ‌های سپر رآکتورهای آب تحت فشار است، در صورتی که تورم در صفحات رخ دهد تنش‌های اضافه‌ای را متحمل می‌شوند.



شکل ۱۵-۴۱. خزش القایی تابشی که می‌تواند منجر به آزادسازی تنش در پیچ شود که در اصل گشتاور پیچشی ۲۵۰ MPa را متحمل شده و سپس در معرض شار نوترون قرار می‌گیرد [۴۷].

نام‌گذاری اصطلاحات

a : فعالیت واکنش دهنده‌ها/ محصولات

$\dot{a}$: نرخ رشد ترک

$\mathrm{d}a/\mathrm{d}n$: رشد ترک در هر دوره

$\mathrm{d}a/\mathrm{d}t$: نرخ رشد ترک

c : طول ترک

i_{corr}: جریان خوردگی

$i_{0,\mathrm{a,c}}$: جریان تبادل، آندی، کاتدی

E : پتانسیل الکترود تعادلی

E^0: پتانسیل الکترود تعادلی استاندارد

E_{corr}: پتانسیل خوردگی

F : ثابت فارادی، ۹۶۵۰۰ کولن/ بار

G : راندمان محصولات پرتوکافت

ΔG : تغییر انرژی آزاد برای واکنش

K : شدت تنش

ΔK : محدوده‌ی شدت تنش

K_{Ic}: چقرمگی شکست مد I

K_{th} یا K_{SCC}: شدت تنش آستانه برای ترک خوردگی تنشی

m : ضریب غیرفعال شدن مجدد

M : جرم اتمی

n : انتقال بار در واکنش اکسیداسیون/ احیا

Q_{f}: بار منتقل شده در طول واکنش

R : ثابت گازی

$t_{\mathrm{init,prop,fail}}$: زمان : آغاز ترک، گسترش ترک، پارگی

t_0: ضریب غیرفعال شدن مجدد

$\overline{\upsilon}_{\mathrm{T}}$: سرعت میانگین ترک

β : ضریب تقارن در عبارت موجود برای جریان خوردگی

ε_{f}: کرنش شکست

$\dot{\varepsilon}_{\mathrm{ct}}$: نرخ کرنش سر ترک

γ : انرژی سطحی

η : اضافه ولتاژ

ρ : دانسیته

σ_{f}: تنش شکست

σ_{th} یا σ_{SCC}: تنش آستانه برای ترک خوردگی تنشی

مخففها

AGR : رآکتور گازی پیشرفته

BWR : رآکتور آب جوشان

CT : تنش فشاری

CERT : تست نرخ کشیدگی ثابت

DCB : تیر دوطرف آزاد

EFPY : سالهای پرتوگیری مؤثر در توان کامل

EMF : نیروی الکتروموتوری

HWC : شیمی آب هیدروژنی

IASCC : ترک‌گذاری خوردگی تنشی با کمک پرتودهی

IGSCC : ترک‌گذاری خوردگی تنشی بین دانه‌ای

LET : انتقال انرژی خطی

LWR : رآکتور آب سبک

NWC : شیمی آب معمولی

PWR : رآکتور آب تحت فشار

RH : سخت‌گردانی تابشی

RIS : جدایش القایی تابشی

SCC : ترک‌گذاری خوردگی تنشی

SFE : انرژی نقص در چیده شدن

SGHWR : رآکتور آب سنگین تولید کننده‌ی بخار

SSRT : تست نرخ کرنش آرام

STP : دما و فشار استاندارد

TGSCC : ترک‌گذاری خوردگی تنشی درون دانه‌ای

مسایل

۱۵-۱ مزیت‌ها و ضررهای نسبی آزمون‌های کششی بار ثابت، خمیدگی ثابت و نرخ کشیدگی ثابت را برای تعیین موارد زیر مورد بحث قرار دهید:

الف) حساسیت نسبی آلیاژهای مختلف در برابر ترک‌گذاری خوردگی تنشی،

ب) حساسیت آلیاژ در برابر ترک‌گذاری خوردگی تنشی در برخی از محیط‌ها،

ج) وابستگی تنش و کرنش به ترک‌گذاری خوردگی تنشی.

۱۵-۲ الف) حداقل پهنای نمونه مورد نیاز برای آزمایش مکانیکی شکست معتبر فولاد با استحکام تسلیم ۷۰۰ MPa و چقرمگی شکست ۱۷۰ $\mathrm{MPa}\sqrt{\mathrm{m}}$ را محاسبه کنید.

ب) آیا اندازه‌گیری چقرمگی شکست این آلیاژ عملی است؟

ج) اگر محیط خورنده، تردی هیدروژنی با K_{Ihic} برابر با ۲۳ $\mathrm{MPa}\sqrt{\mathrm{m}}$ را ممکن سازد، حداقل پهنای نمونه چه‌قدر است؟

۱۵-۳ نرخ رشد ترک آلیاژ را در سراسر محدوده‌ی $۱۰ \le K \le ۶۰\ \mathrm{MPa}\sqrt{\mathrm{m}}$، برای نرخ کرنش سر ترک تعیین شده به صورت BK^4 را رسم کنید که B برابر با $۲ \times ۱۰^{-۲۲}\ \mathrm{MPa^{-1/4}m^{-1/8}}$ است و نیز برای مقادیر ۱٫۰ و ۰٫۵، $m = ۰٫۱$ ، $A = ۱۰\ \mathrm{m/s}$ است.

۱۵-۴ فولاد کم آلیاژ را در تماس با فولاد زنگ نزن در نظر بگیرید و تفاوت‌های پتانسیلی را تحت دما و فشار استاندارد تعیین کنید.

الف) کدام یک خورده می‌شود؟

ب) چنین وضعیتی به علت اثرات پرتودهی، به صورت موضعی در کجا رخ می‌دهد؟

۱۵-۵ برای آلیاژهای توصیف شده در مسئله‌ی ۱۵-۴، توضیح دهید که چگونه پرتودهی می‌تواند پتانسیل خوردگی سیستم را تغییر دهد؟

۱۵-۶ راه‌های ممکنی که به وسیله‌ی آن‌ها پرتودهی می‌تواند منجر به آغاز IASCC شود، چه راه‌هایی هستند؟

مراجع

1. Andresen PL, Ford FP, Murphy SM, JM Perks (1990) In: Proceedings of the 4th International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors. NACE International, Houston, TX, pp 1–83 to 1–121.
2. Scott P (1994) J Nucl Mater 211:101–122.
3. Bruemmer SM (2002) In: Proceedings of the 10th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors. NACE International, Houston, TX.
4. Was GS (2004) In: Proceedings of the 11th International Conference on Environmental Degradation ofMaterials in Nuclear Power Systems:Water Reactors. American Nuclear Society, La Grange Park, IL, pp 965–985
5. Was GS, Busby JT, Andresen PL (2006) Effect of irradiation on stress corrosion cracking and corrosion in light water reactors: corrosion in the nuclear industry. In: Corrosion: Environments and Industries, ASMHandbook, vol 13c. ASMInternational, Metals Park, OH, pp 386–414.
6. Bruemmer SM, Simonen EP, Scott PM, Andresen PL,Was GS, Nelson JL (1999) J Nucl Mater 274:299–314.
7. Ford FP, Andresen PL (1994) Corrosion in nuclear systems: environmentally assisted cracking in light water reactors. In: Marcus P, Oudar J (eds) Corrosion Mechanisms. Dekker, New York, pp 501–546.
8. Ford FP, Andresen PL (1988) In: Theus GJ, Weeks JR (eds) Proceedings of the 3rd International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors. The Metallurgical Society of AIME, Warrendale, PA, p 789.
9. Andresen PL, Ford FP (1988) Mat Sci Eng vol A 1103:167.
10. Jones RH (1987) Stress Corrosion Cracking in ASM Handbook, vol 13, 9th edn. ASM International, Metals Park, OH, p 145.
11. Jones DA (1992) Principles and Prevention of Corrosion. Macmillan, New York.
12. Copson HR (1959) In: Rhodin TN (ed) Physical Metallurgy of Stress Corrosion Fracture. Interscience, New York, p 247.
13. Staehle RW (1977) In: Staehle RW (ed) Stress Corrosion and Hydrogen Embrittlement of Iron Base Alloys, NACE-5. NACE, Houston, TX, p 193.
14. Pourbaix M (1974) Atlas of Electrochemical Equilibria in Aqueous Solutions. NACE, Houston, TX.
15. Staehle RW, Gorman JA (2002) In: Proceedings of the 10th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems:Water Reactors. NACE International, Houston, TX, bonus paper.
16. Was GS, Rajan VB (1987) Metal Trans A 18A:1313–1323.

17. Sung JK, Koch J, Angeliu T, Was GS (1992) Metal Trans A 23A:2887–2804.
18. Ford FP, Andresen PL, Solomon HD, Gordon GM, Ranganath S, Weinstein D, Pathania R (1990) In: Proceedings of the 4th International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors. NACE, Houston, TX, pp 4–26 to 4–51.
19. Wagner C (1959) Z Electrochem 63:772–782.
20. Andresen PL (1992) In: Jones RH (ed) Stress Corrosion Cracking: Materials Performance and Evaluation. ASM, Materials Park, OH, pp 181–210.
21. Andresen PL, Young LM (1995) In: Proceedings of the 7th International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems:Water Reactors. NACE International, Houston, TX, pp 579–596.
22. Lin CC (1986) Proceedings of the 2nd International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors. American Nuclear Society, La Grange Park, IL, pp 160–172.
23. Burns WG, Moore PB (1976) Rad Eff 30:233.
24. Cohen P (1969) Water Coolant Technology of Power Reactors. Gordon and Breach Science, New York.
25. British Nuclear Energy Society (1989) Proceedings of the Conference on Water Chemistry of Nuclear Reactor Systems 5, Bournemouth, UK, 23–27 October 1989, British Nuclear Energy Society, London.
26. Taylor DF (1990) Paper 90501, Corrosion/90, Las Vegas. NACE, Houston, TX.
27. Head RA, Indig ME, Andresen PL (1989) Measurement of In-core and Recirculation System Responses to Hydrogen Water Chemistry at NineMile Point Unit 1 BWR, EPRI Contract RP2680-5, Final Report. EPRI, Palo Alto, CA.
28. Gordon BM (1985) Hydrogen Water Chemistry for BWR, Task 27, Materials and Environmental Monitoring with in the Duane Arnold BWR, Contract RP1930-1, Project Manager, JL Nelson. EPRI, Palo Alto, CA.
29. Andresen PL, Ford FP (1995) In: Proceedings of the 7th International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors. NACE, Houston, TX, pp 893–908.
30. Jacobs AJ, Hale DA, Siegler M (1986) Unpublished Data. GE Nuclear Energy, San Jose, CA, January 1986.
31. Ljungberg LG (1991) Communication, ABB Atom, Vasteras, Sweden, March 1991.
32. Ford FP, Taylor DF, Andresen DL, Ballinger RG (1987) Environmentally Controlled Cracking of Stainless and Low Alloy Steels in LWR Environments, NP-5064M (RP2006-6). EPRI, Palo Alto, CA.

33. Angeliu TM, Andresen PL, Sutliff JA, Horn RM (1999) In: Proceedings of the 9th International Symposium on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems. The Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale, PA, p 311.
34. Scott PM (1994) J Nucl Mat 211:101.
35. Scott PM, Meunier M-C, Deydier D, Silvestre S, Trenty A (2000) In: Kane RD (ed) ASTMSTP 1401, Environmentally Assisted Cracking: Predictive Methods for Risk Assessment and Evaluation of Materials, Equipment and Structures. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, pp 210–223.
36. Chopra OK, Gruber EE, Shack WJ (2003) Fracture Toughness and Crack Growth Rates of Irradiated Austenitic Steels. US Nuclear Regulatory Commission, NUREG/CR-6826, 2003, p 37.
37. Bulloch JH (1989) Res Mechanica 26:95–172.
38. Cullen WH, Watson, HE, Taylor RE, Loss FJ (1981) J Nucl Mater 96:261–268.
39. Bruemmer SM, Was GS (1994) J Nucl Mater 216:348–363.
40. Speidel MO, Magdowski R (1999) In Ford FP, Bruemmer SM, Was GS (eds) Proceedings of the 9th International Conference in Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors, the Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale, PA, p 325.
41. Hash MC,Wang LM, Busby JT,Was GS (2004) In: Grossbeck ML, Allen TR, Lott RG, Kumar AS (eds) Effects of Radiation on Materials the 21st International Symposium, ASTM STP. American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, pp 92–104.
42. Scott PM (2002) In: Ford FP, Bruemmer SM, Was GS (eds) Proceedings of the 9th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems: Water Reactors. The Minerals, Metals and Materials Society, Warrendale, PA, pp 3–14.
43. Bricknell RH, Woodford DA (1982) Acta Metal 30:257–264.
44. Iacocca RG, Woodford DA (1988) Metal Trans A 19A:2305–2313.
45. Woodford DA, Bricknell RH (1983) Treatise on Materials Science and Technology, vol 25. Academic, New York.
46. Thomas LE, Gertsman VY, Bruemmer SM (2002) In: Nelson L, Was GS, King P (eds) Proceedings of the 10th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Systems: Water Reactors. NACE International, Houston, TX, p 117.
47. Grossbeck ML, Mansur LK (1991) J Nucl Mater 179–181:130–134.