

Аналитический расчет параметров зародышей петель критических размеров в металлах при электронном облучении

В. М. Лазоренко, В. И. Товтин

Представлена методика расчета параметров зародышей дислокационных петель критических размеров в чистом алюминии и его ненасыщенных твердых растворах Al – 0,064 ат. % Mg, Al – 0,02 ат. % Zn, и Al – 0,03 ат. % Sc при облучении их электронами с энергией 1 МэВ в высоковольтном электронном микроскопе JEM-1000 при комнатной температуре. Исследовано влияние легирующих элементов Mg, Zn и Sc на параметры зародышей дислокационных петель критических размеров в сплавах. Установлено, что легирующие элементы увеличивают плотность петель в сплавах по сравнению с исходным алюминием, уменьшают термодинамический потенциал Гиббса образования петель, снижают число атомов в петлях, способствуют росту фактора Зельдовича, сокращают эффективную ширину активационного барьера, повышают скорость стационарного зарождения петель, то есть влияют на все параметры зародышей петель критических размеров.

Ключевые слова: сплавы алюминия, параметры зародышей, дислокационные петли, электронное облучение, плотность петель, потенциал Гиббса, фактор Зельдовича.

Введение

Экспериментальные исследования зародышей дислокационных петель в металлических материалах часто ограничивается расчетом числа точечных дефектов в петлях критических размеров [1–3]. Такие петли с равной вероятностью могут как расти, так и распадаться и поэтому число точечных дефектов в петлях критического размера не характеризует минимальный размер устойчивого зародыша, он является только одним из параметров петель критического размера [4–6]. Практически отсутствуют экспериментальные данные о влиянии легирующих элементов их концентраций и температуры на другие параметры критических зародышей петель в металлических материалах. В связи с этим остаются нерешенными многие вопросы, касающиеся процессов зарождения дислокационных петель.

Цель данной работы — исследование параметров зародышей петель критических размеров в Al — 99,999 % и его ненасыщенных твердых растворах Al–0,064 ат. % Mg, Al–0,02 ат. % Zn и Al–0,03 ат. % Sc [7] при облучении их электронами с энергией

1 МэВ в высоковольтном электронном микроскопе JEM-1000 при комнатной температуре. Энергия смещения атомов Al из узлов решетки при электронном облучении составляет 166 кэВ [8].

Методика исследования

Предварительно диски из фольги исследуемых сплавов толщиной 0,2 мм и диаметром 3,0 мм отжигали на воздухе при температуре 550 °С в течение 2 ч и утоняли электрохимическим методом. Исследуемые образцы облучали электронами в двухлучевых динамических условиях, а наблюдение и регистрацию петель проводили в юстированном темном поле в слабых пучках, так как они дают наилучшее разрешение и контраст [9, 10]. Толщину исследуемых фольг выбирали в пределах $(4 \pm 1) \cdot 10^2$ нм, ее определяли по толщинным контурам при горизонтальном положении образца и динамических условиях дифракции [11]. Для облучения выбирали большие однородные участки, содержащие небольшое количество линейных дислокаций, по которым проводили фокусировку изображений. Так

как в процессе получения изображения идет облучение, то после проведения всех операций и получения юстированного темнопольного изображения в слабом пучке совершали переход на новое необлученное место с теми же условиями дифракции, увеличивали интенсивность облучения и включали секундомер для отсчета времени облучения и при этом постоянно контролировали фокусировку изображения. Наблюдение и регистрацию изображений проводили при увеличении на экране и на негативах $40 \cdot 10^3$, а увеличение на обрабатываемых позитивных отпечатках составляло $2 \cdot 10^5$. Минимальный размер наблюдаемых объектов составлял ≈ 2 нм

Было установлено, что при всех условиях облучения во всех сплавах в интервале от нескольких десятков до нескольких сотен секунд никакие дефекты не образовывались. После истечения этого времени почти мгновенно по всему полю зрения на темном фоне вспыхивали ярко светящиеся точки практически одинакового размера. Отмечалось время появления этих точек. Точки быстро увеличивались в размерах и превращались в дислокационные петли. Практически одновременно с появлением изображения петель проводили их съемку, и в дальнейшем

фиксируемали изменения по мере роста петель. Было установлено, что плотность петель начиная с момента их появления и до конца облучения оставалась практически постоянной. Тип петель определяли по методу 2-1\2-D TEM [12]. Было установлено, что все образованные петли междуузельного типа. Петли расположены в плоскостях типа $\{111\}$, вектор Бюргерса петль $1/3\langle 111 \rangle$, это петли Франка.

На рис. 1 приведены изображения дислокационных петель в Al и исследуемых сплавах.

При каждой дозе облучения измеряли порядка двухсот диаметров петель. В измерениях учитывали, находится ли изображение петли внутри её истинных размеров или вне. При расчете плотности петель также учитывали долю невидимых петель. Концентрацию междуузельных атомов в петлях в относительных долях для каждой дозы рассчитывали по формуле:

$$C = \frac{\pi \bar{d}^2 |\vec{b}| \rho}{4}, \quad (1)$$

где \bar{d}^2 — средний квадрат диаметра петель, $|\vec{b}|$ — модуль вектора Бюргерса петль, $|\vec{b}| = 0,2338$ нм, ρ — плотность петель.

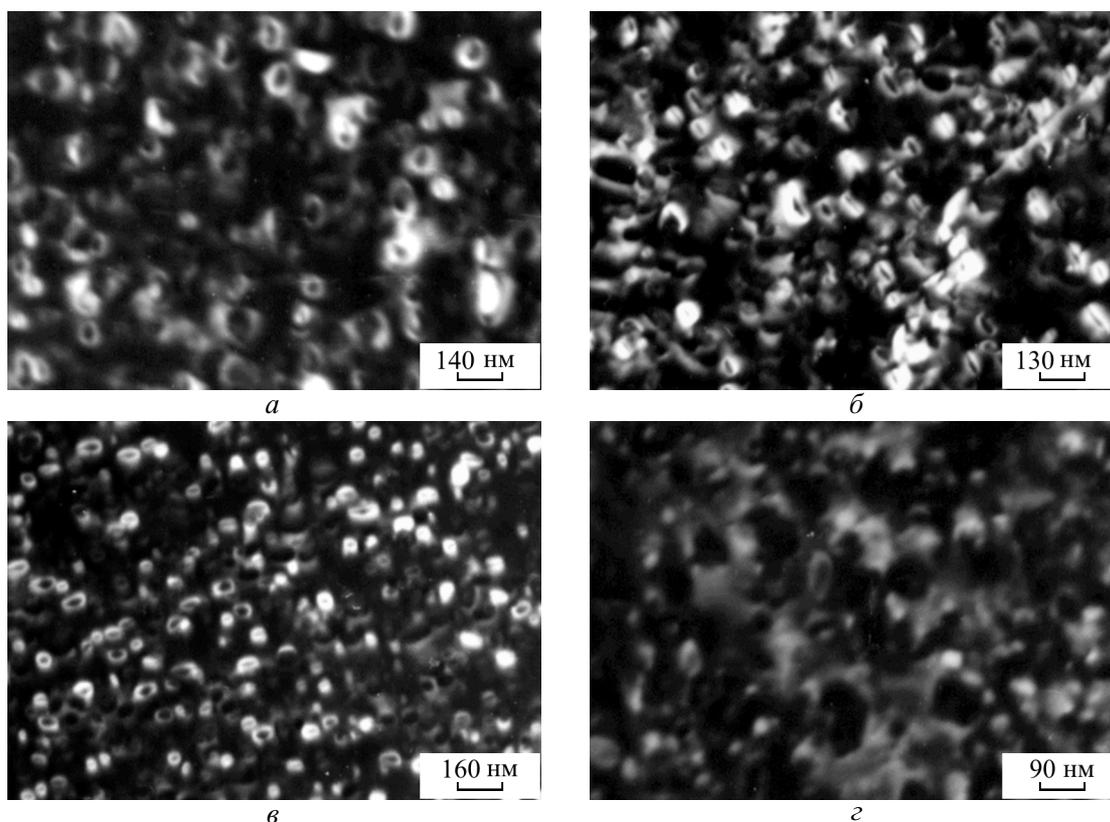


Рис. 1. Изображения дислокационных междуузельных петель в Al (99,999 %) (а) и его сплавах: б — Al — 0,064 ат. % Mg, в — Al — 0,03 ат. % Sc, г — Al — 0,02 ат. % Zn, облученных электронами с энергией 1 МэВ в высоковольтном электронном микроскопе при комнатной температуре с интенсивностью $I = 6,15 \cdot 10^{18}$ см⁻²с⁻¹.

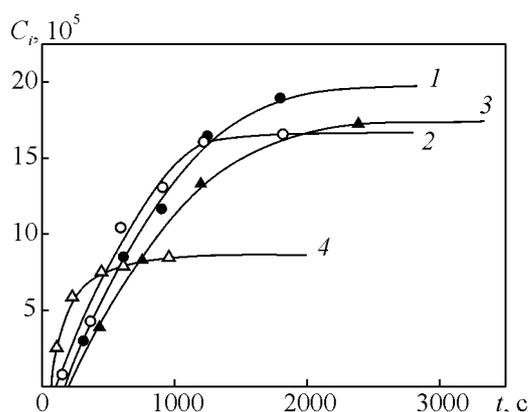


Рис. 2. Результаты расчета изменения концентрации междоузельных атомов (C_i) в петлях, в Al (99,999 %) (1) и его сплавах: 2 – Al – 0,064 ат. % Mg, 3 – Al – 0,03 ат. % Sc, 4 – Al – 0,02 ат. % Zn, облученных электронами с энергией 1 МэВ в высоковольтном электронном микроскопе при комнатной температуре с интенсивностью $I = 6,15 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$, в зависимости от времени облучения t (с).

На рис. 2 приведены результаты расчета изменения концентрации междоузельных атомов в петлях, в Al и сплавах Al – 0,064 ат. % Mg, Al – 0,02 ат. % Zn, и Al – 0,03 ат. % Sc в относительных долях при облучении электронами с энергией 1 МэВ в высоковольтном микроскопе с интенсивностью $I = 6,15 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$ при комнатной температуре в зависимости от времени облучения. Увеличение температуры образцов в процессе облучения не превышало 10 °С.

Видно, что во всех сплавах имеется инкубационное время τ , которое равно времени зарождения дислокационных петель закритического размера [4 – 6]. При больших временах облучения концентрация междоузельных атомов в петлях стремится к насыщению. Обработка экспериментальных данных показала, что при комнатной температуре концентрация междоузельных атомов в относительных долях в зависимости от времени облучения может быть представлена в виде [13]:

$$C = athb(t - \tau), \quad (2)$$

где параметр a равен концентрации междоузельных атомов в петлях на насыщении, а параметр b характеризует скорость их роста.

Образование петель приводит к увеличению свободной энергии в кристаллической решетке. Вероятность этого процесса пропорциональна $\exp(-\Delta G/kT)$, где ΔG — свободная энергия термодинамического потенциала Гиббса, k — постоянная Больцмана, T — температура в градусах Кельвина [6, 14]. В кристаллической решетке содержащей N_0 узлов

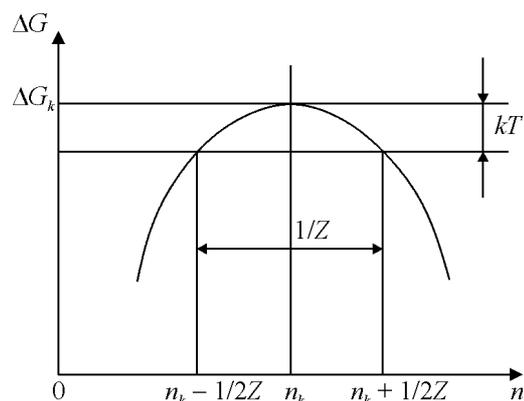


Рис. 3. Зависимость изменения термодинамического потенциала Гиббса (ΔG) от числа точечных дефектов в скоплениях (n) вблизи критического зародыша (n_k).

в единице объема, плотность петель критического размера ρ_k равна [4]:

$$\rho_k = N_0 \exp\left(-\frac{\Delta G_k}{kT}\right), \quad (3)$$

где ΔG_k — термодинамический потенциал зародыша петли критического размера. Термодинамический потенциал Гиббса ΔG в окрестности петель критического размера может быть представлен в виде ряда Тейлора до второй производной [6, 14]:

$$\Delta G_n = \frac{\Delta G_k^0}{0!} + \frac{\Delta G_k^1}{1!}(n - n_k) + \frac{\Delta G_k^2}{2!}(n - n_k)^2, \quad (4)$$

где n — число атомов в петле, в интервале от докритического размера к закритическому, а n_k — число атомов в петле критического размера.

Первая производная термодинамического потенциала равна нулю в максимуме при $n = n_k$, вторая производная отрицательна.

На рис. 3 представлена зависимость термодинамического потенциала Гиббса ΔG_n от числа точечных дефектов n в петлях вблизи их критического размера.

Согласно [4, 6, 14, 17] на рис. 3 прямая, проведенная параллельно оси абсцисс на kT ниже максимального значения пересекает параболу в двух точках. Левая точка — $n_k - 1/2Z$ соответствует зародышам петель докритического размера, а правая — зародышам закритического размера $n_k + 1/2Z$, Z — фактор Зельдовича, $1/Z$ — эффективная ширина активационного барьера для перехода зародыша от докритического размера к закритическому. Как видно из формулы (4) и рис. 3, в силу параболической зависимости ΔG от n при $n = n_k$ вероятности распада

и роста зародышей критического размера равны 0,5. Вероятность распада зародышей за критического размера равна нулю. Предполагается, что вероятность распада зародышей при переходе их от критического размера к за критическому зависит только от их термодинамического потенциала и имеет такую же параболическую зависимость. Можно рассчитать долю распавшихся петель критического размера ρ_k при переходе их к за критическому размеру.

В качестве аргумента естественно взять междоузельные атомы, присоединяемые критическим зародышем в процессе его роста и перехода в за критическое состояние. В этом случае вероятность распада петель при переходе их от критического размера к за критическому а может быть представлена в виде:

$$\alpha = \frac{1}{2}(1 - 4Z^2x^2), \quad (5)$$

где $0 \leq x \leq 1/2Z$, а за нулевую точку отсчета принято число междоузельных атомов в петле критического размера. Среднее значение $\bar{\alpha}$ по теореме о среднем [15] равно:

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{2} \cdot 2Z \int_0^{1/2Z} (1 - 4Z^2x^2) dx. \quad (6)$$

Как легко видно, $\bar{\alpha} = 1/3$. Так максимальное значение термодинамического потенциала ΔG_k при переходе петель из критического размера в за критический преодолевает 1/2 зародышей критического размера, то 1/3 от 1/2 составляет $(1/3)(1/2) = 1/6$ от общего числа критических зародышей. Всего же распадается 2/3 зародышей критического размера при переходе их к за критическому размеру. Таким образом, плотность петель критического размера равна:

$$\rho_k = 2\rho, \quad (7)$$

где ρ — плотность петель за критического размера, которая как уже отмечалось, остается постоянной в течение всего времени облучения. Из формулы (3) получаем выражение для прямого расчета термодинамического потенциала зародышей критического размера:

$$\Delta G_k = kT \ln \left(\frac{N_0}{3\rho} \right). \quad (8)$$

Термодинамический потенциал Гиббса ΔG_k связан с фактором Зельдовича Z и числом точечных дефектов в зародыше критического размера n_k соотношением [6, 14]:

$$Z = \frac{\left(\frac{\Delta G_k}{3\pi kT} \right)^{1/2}}{n_k}. \quad (9)$$

Время зарождения скоплений за критического размера τ определяется выражением [4]:

$$\tau = (2\beta_k Z^2)^{-1}, \quad (10)$$

где β_k — скорость поглощения точечных дефектов зародышем критического размера. Стационарная скорость зарождения скоплений критического размера I_k [4]:

$$I_k = Z\beta_k\rho_k. \quad (11)$$

Параметры Z и β_k могут быть рассчитаны из кинетики роста концентрации междоузельных атомов в петлях в процессе облучения. Из уравнения (2) имеем:

$$\left. \frac{dC}{dt} \right|_{(t-\tau)=0} = ab. \quad (12)$$

Это скорость роста концентрации междоузельных атомов в петлях, в относительных долях, в момент окончания зарождения и начала роста петель за критического размера. Она определяется по тангенсу угла наклона касательной к кривой роста концентрации междоузельных атомов в петлях со временем облучения в момент времени $t = \tau$ или по методу наименьших квадратов. С другой стороны, скорость поглощения междоузельных атомов всеми петлями за критического размера с плотностью ρ в относительных долях равна $\beta\rho/N_0$, где β — скорость поглощения междоузельных атомов одной петлей за критического размера. Таким образом:

$$ab = \frac{\beta\rho}{N_0}. \quad (13)$$

Из уравнения (13) следует:

$$\beta = \frac{abN_0}{\rho}. \quad (14)$$

В работе [16] было показано, что эффективность захвата междоузельных атомов петлями междоузельного типа пропорциональна числу атомов в петлях. В соответствии с этим

$$\frac{\beta_k}{n_k} = \frac{\beta}{n_k + \frac{1}{2Z}}. \quad (15)$$

Преобразуя это уравнение к виду:

$$\beta_k = \frac{\beta n_k}{n_k + \frac{1}{2Z}}, \quad (16)$$

и разделив числитель и знаменатель в правой части уравнения (16) на n_k получим:

$$\beta_k = \frac{\beta}{1 + \frac{1}{2n_k Z}} \quad (17)$$

Подставляя выражение $n_k Z$ из (9) и проведя преобразования, получим:

$$\beta_k = \frac{\beta}{1 + \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi k T}{\Delta G_k} \right)^{1/2}} \quad (18)$$

или

$$\beta_k = \frac{abN_0}{\rho} \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi k T}{\Delta G_k} \right)^{1/2}} \quad (19)$$

Зная время τ из эксперимента и вычислив β_k по формуле (19) находим фактор Зельдовича Z и его обратную величину:

$$Z = (2\beta_k \tau)^{-1/2} \quad (20)$$

Из формулы (9) определяем число атомов в петле критического размера n_k :

$$n_k = \frac{\left(\frac{\Delta G_k}{3\pi k T} \right)^{1/2}}{Z} \quad (21)$$

Теперь известны все параметры для нахождения стационарной скорости зарождения петель критического размера I_k по формуле (11).

Диаметр петли критического размера вычисляется по формуле:

$$d_k = \left(\frac{4n_k}{\pi |\vec{b}| N_0} \right)^{1/2} \quad (22)$$

где $|\vec{b}|$ — модуль вектора Бюргерса петли Франка в алюминии.

Результаты и их обсуждение

В табл. 1 приведены параметры петель критических размеров в Al (99,999 %) и его сплавах Al – 0,064 ат. % Mg, Al – 0,02 ат. % Zn и Al – 0,03 ат. % Sc, образующихся при облучении их электронами с энергией 1 МэВ в высоковольтном микроскопе с интенсивностью $I = 6,15 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ при комнатной температуре. Параметр β_k/n_k характеризует скорость поглощения междоузельных атомов на один атом

Таблица

Параметры петель критических размеров в Al (99,999 %) и его сплавах Al – 0,064 ат. % Mg, Al – 0,02 ат. % Zn и Al – 0,03 ат. % Sc, образующихся при облучении их электронами с энергией 1 МэВ в высоковольтном микроскопе с интенсивностью $I = 6,15 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$ при комнатной температуре

Параметры	Сплав, ат. %			
	Al (99,9 %)	Al – 0,064 Mg	Al – 0,02 Zn	Al – 0,03 Sc
τ , с	145	113	35	190
τ' , с	1,94	2,52	1,09	4,41
$\rho_k \cdot 10^{15}$, см^{-3}	2,0	4,5	4,5	6,3
$a \cdot 10^{-4}$	2,03	1,72	0,83	1,80
$b \cdot 10^{-4}$, с^{-1}	10,1	12,8	43,5	9,2
ΔG_k , эВ	0,446	0,427	0,427	0,418
β , с^{-1}	18,72	8,85	14,51	4,75
β_k , с^{-1}	13,67	6,43	10,5	3,43
β_k/n_k	0,161	0,129	0,292	0,073
$Z \cdot 10^{-2}$	1,59	2,60	3,68	2,77
$1/Z$	63	38	27	36
n_k	85	50	36	47
$I_k \cdot 10^{14}$, $\text{см}^{-3} \text{ с}^{-1}$	4,3	7,5	17,4	6,0
d_k , нм	3,24	2,12	1,80	2,06

τ — время зарождения скоплений за критического размера; τ' — это время перехода критического размера петли в за критический; ρ_k — плотность петель критического размера; a — концентрация междоузельных атомов в петлях на насыщении; b — скорость роста междоузельных петель; ΔG_k — термодинамический потенциал зародышей петель критического размера; β — скорость поглощения междоузельных атомов одной петлей за критического размера; β_k — скорость поглощения точечных дефектов зародышем критического размера; β_k/n_k — параметр, характеризующий скорость поглощения междоузельных атомов на один атом петли критического размера; Z — фактор Зельдовича; $1/Z$ — эффективная ширина активационного барьера, обратная величина фактора Зельдовича; n_k — число атомов в петле критического размера; I_k — скорость зарождения петель критического размера, d_k — диаметр петли критического размера.

петли критического размера. Параметр τ' — это время перехода критического размера петли в за критический со средней скоростью $\frac{\beta_k + \beta}{2}$:

$$\tau' = \frac{1}{\frac{2Z}{\beta_k + \beta}} = [Z(\beta_k + \beta)]^{-1} \quad (23)$$

Из табл. 1 видно, что легирующие элементы влияют на все параметры зародышей петель критических размеров. Они увеличивают плотность петель ρ_k в сплавах по сравнению с исходным алюминием, уменьшают термодинамический потенциал Гиббса ΔG_k образования петель критического размера, снижают число атомов n_k в петлях критического

размера, способствуют росту фактора Зельдовича Z и сокращают эффективную ширину активационного барьера $1/Z$ для перехода петель докритического размера в закритический. Они повышают скорость стационарного зарождения петель критического размера β_k . Этот процесс максимален в сплаве алюминия с цинком. Легирование алюминия приводит к уменьшению максимальной концентрации междоузельных атомов a в петлях вследствие возрастанию рекомбинации точечных дефектов. В сплавах алюминия с магнием и скандием скорость поглощения междоузельных атомов на один атом петли критического размера уменьшается по сравнению с алюминием. Это связано с тем, что междоузельные атомы алюминия в гантельной конфигурации образуют комплексы с атомами растворенных элементов, скорость миграции которых меньше скорости миграции междоузельных атомов алюминия.

В сплаве алюминия с цинком скорость поглощения междоузельных атомов на один атом петли критического размера β_k больше, чем в алюминии и других сплавах, что может быть вызвано более высокой подвижностью атомов алюминия в комплексе с атомами цинка. Максимальная концентрация междоузельных атомов a в петлях в этом сплаве значительно меньше, чем в алюминии и других сплавах. Это может быть обусловлено, как выравниванием диффузионных потоков комплексов междоузельных атомов с атомами цинка на петли-стоки, так и увеличением скорости рекомбинации точечных дефектов. И то и другое является следствием образования подвижных комплексов атомов цинка с вакансиями.

Параметр τ' — это время перехода петли критического размера в закритический. Оно длится не более нескольких секунд в зависимости от типа легирующих элементов. Время от начала облучения до образования петель закритического размера τ значительно больше. Длительный период времени τ обусловлен тем, что образование и рост петель закритического размера приводит к увеличению термодинамического потенциала Гиббса зародышей петель и является энергетически невыгодным процессом для них. Происходит же он вследствие флуктуации концентрации точечных дефектов, вводимых в кристаллическую решетку в процессе облучения. Этот процесс носит вероятностный характер и чем больше дефектов в скоплениях, тем меньше вероятность их возникновения и тем больше время от начала облучения до образования петель критического размера. Время перехода петель от критического размера до закритического τ' составляет небольшую долю от времени τ . Таким образом, длительность времени τ обусловлена в основном

процессами флуктуационного зарождения и роста петель до критического размера.

Выводы

Представлена методика аналитического расчета параметров петель критических размеров, образующихся в металлах при облучении их электронами в высоковольтном микроскопе.

Получены формулы для расчета плотности петель критического размера и скоростей поглощения междоузельных атомов петлями закритического и критического размера.

Исследовано влияние легирующих элементов Mg, Zn и Sc на параметры зародышей петель критических размеров в алюминии. Установлено, что легирующие элементы увеличивают плотность петель в сплавах по сравнению с исходным алюминием, уменьшают термодинамический потенциал Гиббса образования петель критического размера, снижают число атомов в петлях критического размера, способствуют увеличению фактора Зельдовича и сокращению эффективной ширины активационного барьера для перехода петель докритического размера в закритический и в сильно разбавленных сплавах, повышают скорость стационарного зарождения петель критического размера.

Литература

1. Sato A., Suzuki M., Mori T. Further analysis on the stress-assisted nucleation of interstitial loops in on electron-irradiated Fe – 18 Cr – 14 Ni alloy. *Journal of Nuclear Materials*, 1991, v. 184, pp. 144 – 145.
2. Erhart P., Schilling W. Investigation of interstitials in electron-irradiated aluminum by diffuse-X-ray scattering experiments. *Physical Review B*, 1973, vol. 8, no. 6, pp. 2604 – 2621.
3. Kapinos V.G., Bacon D.J. A new model of vacancy loop nucleation in irradiated metals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 1995, v. B102, pp. 156 – 159.
4. Russell K.C., Powell R.W. Dislocation loop Nucleation in Irradiated metals. *Acta Metallurgica*, 1973, vol. 21, pp. 187 – 193.
5. Powell R.W., Russell K.C. Computer evaluation of nucleation of voids in irradiated metals. *Radiation Effects*, 1972, vol. 12, pp. 127 – 131.
6. Kashchiev D. *Nucleation: Basic Theory with Applications*. Butterworth, Washington. DC/Heinemann, Oxford, 2001, 551 p.
7. Мондольфо Л.Ф. Структура и свойства алюминиевых сплавов. Пер. с англ. Под ред. Ф.И. Квасова, Г.Б. Строганова, И.Н. Фридляндера. М.: Металлургия, 1979, 640 с.

8. Makin M. J. The Orientation dependence of defect cluster formation in copper during electron irradiation. Atomic Collision Phenomena in Solids. D.W. Palmer et al. North-Holland Publ. Comp. Amsterdam-London 1970, pp. 205 – 216.
9. Утевский Л.М. Дифракционная электронная микроскопия в материаловедении. М.: Металлургия, 1973, 584 с.
10. Томас Г., Гориндж М.Дж. Просвечивающая электронная микроскопия материалов. Пер. с англ. Под ред. Б.К.Вайнштейна. М.: Наука, 1983, 320 с.
11. Хирш П., Хови А, Николсон Р, Пэшли Д, Уэлан М. Электронная микроскопия тонких кристаллов. Пер.с англ. Под ред. Л.М. Утевского. М.: Мир, 1968, 574 с.
12. Mitchell J.B. and Bell W.L. Characterization of Point-Defect Clusters by 2-1/2-D TEM. Acta Metallurgica, 1976, vol. 24, no. 2, pp. 147 – 152.
13. Лазоренко В.М., Платов Ю.М., Симаков С.В. Зарождение и рост дислокационных петель междоузельного типа в разбавленных сплавах на основе алюминия. Физика металлов и материаловедения, 1984, т. 58, вып. 5, с. 943 – 949.
14. Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. Часть 1: Термодинамика и общая кинетическая теория. Пер. с англ. Под ред. А.Л. Ройтбурда. М.: Мир, 1978, 807 с.
15. Бронштейн И.Н., К.А. Семендяев. Справочник по математике для инженеров и учащихся ВТУЗОВ. Под ред. Г. Гроше и В. Циглера. Пер. с нем. М.: Наука, 1980, 976 с.
16. Лазоренко В.М., Платов Ю.М., Плетнев М.Н. Исследование распределения междоузельных петель дислокаций по размерам в металлах, облученных в высоковольтном электронном микроскопе. Физика металлов и материаловедения, 1980, т. 50, вып. 1, с. 164 – 174.
17. Baron P., Alexis T., Arup C. Rate constants from the reaction path Hamiltonian. II. Nonseparable semiclassical transition state theory. Journal of Chemical Physics, 2004, vol. 121, no. 10, p. 4461 – 4466.
5. Powell R.W., Russell K.C. Computer evaluation of nucleation of voids in irradiated metals. Radiation Effects, 1972, vol. 12, pp. 127 – 131.
6. Kashchiev D. Nucleation: Basic theory with applications. Butterworth, Wachington, DC/Heinemann, Oxford, 2001, 551 p.
7. Mondolfo L.F. Aluminum Alloys: Structure and Properties. Butterworths, 1976, 971 p.
8. Makin M.J. The orientation dependence of defect cluster formation in copper during electron irradiation. Atomic collision phenomena in solids. Ed. D.W. Palmer et al. North-Holland Publ. Comp. Amsterdam-London, 1970, pp. 205 – 216.
9. Utevskiy L.M. *Difrakcionnaya elektronnaya mikroskopiya v materialovedenii* [Diffraction electron microscopy in material science]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1973, 584 p.
10. Tomas G., Gorindj M.Dj. *Prosvetshivaushaya elektronnaya mikroskopiya materialov* [Transmission electron microscopy of materials]. Moscow, Nauka Publ., 1983, 320 p.
11. Hirsh P., Hovi A., Nicolson R., Peshli D., Uelan M. *Elektronnaya mikroskopiya tonkikh kristallov* [Electron microscopy of thin crystals], in Russ. Moscow, Mir Publ., 1968, 574 p.
12. Mitchell J.B., Bell W.L. Characterization of point-defect clusters by 2-1/2-D TEM. Acta Metallurgica, 1976, vol. 24, no. 2, pp. 147 – 152.
13. Lazorenko V. M., Platov Yu. M., Simakov S.V. Zarozhdeniye i rost dislokatsionnykh petel mezhdouzelnogo tipa v razbavlennykh splavakh na osnove alyuminiya [Nucleation and growth of interstitial dislocation loops in dilute aluminum alloys]. *Fizika metallov i metallovedeniye — The Physics of Metals and Metallography*, 1984, vol. 58, iss. 5, pp. 943 – 949.
14. Christian J.W. The theory of transformations in metals and alloys. Part 1. Pergamon, an imprint of Elsevier Science, 2002, 1113 p.
15. Bronshteyn I.N., Semendyaev K.A. Spravochnik po matematike dlya ingenerov i uchacshihnya VTUZOV [Handbook in mathematics for engineers and students]. Moscow, Nauka Publ., 1980, 976 p.
16. Lazorenko V. M., Platov Yu. M., Pletnev M.N. Issledovanie raspredeleniya mejdouzelnykh petel dislokaziy po razmeram v metallah, obluchennykh v visokovoltnom elektronnom mikroskope [Study of dislocation loops distribution by size in metals irradiated in HVEM]. *Fizika metallov i metallovedeniye — The Physics of Metals and Metallography*, 1980, vol. 50, iss. 1, pp. 164 – 174.
17. Baron P., Alexis T., Arup C. Rate constants from the reaction path Hamiltonian. II. Nonseparable semiclassical transition state theory. Journal of Chemical Physics, 2004, vol. 121, no. 10, pp. 4461 – 4466.

References

1. Sato A., Suzuki M., Mori T. Further analysis on the stress-assisted nucleation of interstitial loops in on electron-irradiated Fe – 18 Cr – 14 Ni alloy. Journal of Nuclear Materials, 1991, vol. 184, pp. 144 – 145.
2. Erhart P., Schilling W. Investigation of interstitials in electron-irradiated aluminum by diffuse-X-ray scattering experiments. Physical Review B, 1973. vol. 8, no. 6, pp. 2604 – 2621.
3. Kapinos V.G, Bacon D.J. A new model of vacancy loop nucleation in irradiated metals. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 1995, vol. B102, pp. 156 – 159.
4. Russell K.C., Powell R.W. Dislocation loop nucleation in irradiated metals. Acta Metallurgica, 1973, vol. 21, pp. 187 – 193.

Статья поступила в редакцию 16.06.2016 г.

Лазоренко Валентин Михайлович — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН (117334, Москва, Ленинский пр. 49), скончался в 2016 г.

Товтин Василий Иванович — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН (117334, Москва, Ленинский пр. 49), кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, специалист в области радиационного материаловедения. E-mail: tovtinv@list.ru.

Calculation of parameters of dislocation loops nuclei critical size in metals under irradiation

V. M. Lazorenko, V. I. Tovtin

The presented method of calculation of parameters of the nuclei of the dislocation loops the critical size in pure aluminum and its unsaturated solid solutions Al – 0.064 at.% Mg, Al – 0.02 at. % Zn, and Al – 0.03 at. % Sc under irradiation by electrons with energy 1 MeV high-voltage electron microscope JEM-1000 at room temperature. The influence of the alloying elements Mg, Zn and Sc on the parameters of the nuclei of the dislocation loops the critical size in alloys. It is established that the alloying elements affect all parameters of the germ of the loops of critical size. They increase the density of loops in alloys compared to the original aluminium, reduce the thermodynamic potential of Gibbs loops, reduce the number of atoms in loops, increase the Zeldovich factor, reduce the effective width of the activation barrier, increase the rate of stationary nucleation of loops.

Key words: alloys of aluminium, options bubbles, dislocation loops, electron irradiation, the density of the loops, the potential Gibbs, factor Zeldovich.

Lazorenko Valentin — A.A. Baikov Institute of metallurgy and materials science of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, senior research, PhD, authority in the field of radiation material science (died in 2016).

Tovtin Vasily — A.A. Baikov Institute of metallurgy and materials science of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia, senior research, PhD, authority in the field of radiation material science. E-mail: tovtinv@list.ru.