

УДК 548.4, 517.958, 532.72

*За допомогою чисельних методів отримано залежність полів зсуву від співвідношення геометричних розмірів ядра кластера порушень. В якості аналітичної бази для розрахункових операцій використовували уявлення полів зсуву в інтегральній формі із застосуванням рівнянь теорії пружності. Досліджувалась зміна зсуву пружних полів легованих монокристалів кубічної структури (W, Au), які містять протяжні дефекти. Отримані області розмірів ядер дефектів, коли дефектна зона не змінна*

*Ключові слова: сховище відпрацьованого ядерного палива, пружні хвилі, поля зміщення, інтегральні рівняння, функція Гріна*

*При помощи численных методов получена зависимость полей смещения от соотношения геометрических размеров ядра кластера нарушений. В качестве аналитической базы для расчетных операций использовали представление полей смещения в интегральной форме с применением уравнений теории упругости. Исследовалось изменение смещения упругих полей легированных монокристаллов кубической структуры (W, Au) содержащих протяженные дефекты. Получены области размеров ядер нарушений, при которых они остаются стабильными и устойчивыми*

*Ключевые слова: хранилище отработанного ядерного топлива, упругие волны, поля смещения, интегральные уравнения, функция Грина*

# ІЗМЕНЕНИЕ УПРУГИХ ПОЛЕЙ МОНО- КРИСТАЛЛОВ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СТРУКТУРЫ ЯДРА НАРУШЕНИЯ

**Е. М. Прохоренко**

Кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник  
Институт электрофизики и радиационных  
технологий НАН Украины  
ул. Гуданова, 13, г. Харьков, 61002  
E-mail: fort-58@mail.ru

## 1. Введение

Одной из важнейших задач ядерной энергетики является вопрос переработки и хранения отработанного ядерного топлива (ОЯТ). В процессе решения данной задачи была проделана громадная работа, получены значительные результаты, найдены ответы на ряд практических вопросов. Однако, в целом проблема далека от завершения. В настоящее время выделяется два основных направления работ: а) хранение и переработка ОЯТ; б) утилизация и захоронение отходов ядерной промышленности и энергетики. Мы не будем останавливаться на всех деталях, обратим внимание на то, что и ОЯТ и отходы являются источниками различных видов ионизирующего излучения, т.е. они представляют высокую опасность для окружающей среды и здоровья человека. Это еще раз подчеркивает важность проблемы переработки, хранения ОЯТ и отходов. При хранении энерговыделяющих ядерных сборок используются как "мокрые", так и "сухие" хранилища. Захоронение отходов производится в ядерных "могильниках", "хвостохранилищах" и т.п. Одним из способов утилизации есть помещение высокоактивных отходов в гранитные выработки, соляные шахты. Однако, под действием интенсивного излучения происходит нарушение структуры окружающих отходы пород, стенок хранилищ, что может повлечь нарушение целостности и вынос активного вещества за пределы хранилища. Следовательно, необходимо знать, как изменяются основные свойства, структура различных материалов под воздействием излучения.

Решение данной задачи возможно осуществить посредством имитации условий работы. Для этих целей применяются различные источники ионизирующего излучения, ускорители заряженных частиц. В частности, для нужд радиационной физики, эффективны ускорители ионов. Попадание в кристалл ионов приводит к нарушению структуры материала мишени, созданию дефектов. Полученные дефекты могут иметь различную конфигурацию (точечную, протяженную). Посредством подбора параметров легирования (энергия, плотность потока, вид ионов и т. д.), осуществляется контроль создания дефектов. При помощи ядерно-физических методов, в частности метода обратного рассеяния, возможно, исследовать особенности созданных нарушений.

## 2. Цель работы

Целью работы – при помощи интегральных уравнений для упругих волн в анизотропной среде теоретически описать как геометрию каналов и искажений вокруг нарушенной области в монокристалле, так и определить размеры кластера по известной структуре искажений.

## 3. Интегральные уравнения упругих полей

Возникновение дефектов в кристаллах, при их облучении пучками ионов, сопровождается изменением

структуры облучаемого материала на месте дефекта и полей упругих напряжений в окружающей области. Поля смещения описываются при помощи дифференциальных уравнений. Однако, в настоящее время многие краевые задачи решаются, применяя уравнения в интегральной форме, которые эквивалентны дифференциальным уравнениям. Была применена предложенная в [1] методика получения интегральных уравнений для описания полей смещения. Данная методика базировалась на теории интегральных уравнений, предназначенных для решения задач распространения электромагнитных волн в волноводах и их рассеяния на неоднородностях различной конфигурации [2]. Задача решения интегрального уравнения формулируется как задача с нелокальными граничными условиями и позволяет найти внутренние поля упругих напряжений в неоднородности, которая рассеивает внешние поля через невозмущенное (первоначальное поле) падающей волны [3 – 5].

При распространении в бесконечной, упругой, анизотропной среде, свойства которой характеризуются модулем упругости  $\lambda_{iklm}$ , упругие волны описываются волновым уравнением в дифференциальной форме:

$$\frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} - \lambda_{iklm} \frac{\partial^2 u_m}{\partial x_k \partial x_l} = 0. \quad (1)$$

В данной среде находится неоднородность, в нашем случае созданная при помощи воздействия на материал ионами. Модуль упругости неоднородности ( $\lambda_{iklm}^1$ ) отличается от модуля упругости среды. Нахождение полей смещения сводится к решению задачи рассеивания падающей волны  $u_i^{(0)}$  на неоднородности и определения порожденных волн как внутри неоднородности  $u_i^{(e)}$  (внутреннее рассеянное поле), так и снаружи  $u_i^{(e)}$  (внешнее рассеянное поле). Функции  $u_i^{(e)}$  и  $u_i^{(e)}$  являются комбинацией собственных функций уравнения (1). Уравнение (1) имеет бесконечное число решений. Для выделения точного решения применим граничное условие – условие равновесия на поверхности нарушенной области:

$$\sigma_{ik} n_k + \rho q_i = p_i, \quad (2)$$

где  $q_i$  – плотность внешних объемных сил;  $p_i$  – есть  $i$  компонента внешней поверхностной силы, действующая на единицу поверхности неоднородности;  $n_k$  – внешняя нормаль поверхности;  $\sigma_{ik} = \lambda_{iklm} (\frac{\partial u_l}{\partial x_m} + \frac{\partial u_m}{\partial x_l})$  – элемент тензора упругих напряжений. Применяя данное граничное условие, из множества решений уравнения (1) выберем единственное.

Для нахождения полей смещения необходимо решить интегральное уравнение в виде:

$$u_i(\vec{r}, t) = u_i^{(0)}(\vec{r}, t) + \hat{A} \int_v G_{ik}(\vec{r}, \vec{r}') u_k(\vec{r}', t) d\vec{r}'. \quad (3)$$

Интегральное уравнение (3) эквивалентно дифференциальному уравнению (1). Величина  $u_i(\vec{r}, t)$  имеет вид  $u_i(\vec{r}, t) = u_i^{(0)} + u_i^{(e)}$ , когда  $\vec{r} \in v$ , и  $u_i(\vec{r}, t) = u_i^{(e)}$  когда  $\vec{r} \in v$ .  $\hat{A}$  – оператор. Функция  $G_{ik}(\vec{r}, \vec{r}')$  – функция Грина уравнения (3) для безграничной среды,  $v$  – объем

нарушенной области. Из интегрального уравнения (3) можем найти поле смещения упругих сил как для точек внутри неоднородности, так и для точек снаружи. Для точек внутри неоднородности ( $\vec{r} \in v$ ) определяем внутреннее поле смещений упругих сил ( $u_i^{(i)}$ ), через поле смещений в падающей невозмущенной волне  $u_i^{(0)}$ . Для точек снаружи неоднородности полное поле упругих напряжений находится через известное внутреннее поле  $u_i^{(i)}$ . Под полным внешним полем подразумевается суперпозиция поля падающей упругой волны ( $u_i^{(0)}$ ) и поля отраженной волны ( $u_i^{(i)}$ ). Задача применения интегральных уравнений, аналогичных (3), достаточно широка. Они используются в электродинамике для решения задач рассеяния электромагнитных волн на различных типах неоднородностей [2], для изучения изменения структуры твердых тел [6, 7]. Аналогичные математические методы успешно применялись в диффузионных задачах [8].

Проведя вычисления в статическом случае, найдем выражение, которое определяет поле смещения атомов монокристалла через размеры и геометрическую форму ядра нарушенной зоны:

$$u_i(\vec{r}) = u_i^{(0)}(\vec{r}) - (\lambda_{iklm}^1 - \lambda_{iklm}) \times \times \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_l} \int_v G_{mj}^{st}(\vec{r} - \vec{r}') u_j^{(i)}(\vec{r}') d\vec{r}', \quad (4)$$

где  $V$  – объем сердцевины нарушенной области,  $u_j^{(i)}(\vec{r})$  – поле смещения в области нарушения,  $u_j^{(0)}(\vec{r})$  – перво-начальное поле смещения,  $G_{mj}^{st}(\vec{r} - \vec{r}')$  – тензор Грина для статического случая [9],  $\lambda_{iklm}^1$  – тензор модулей упругости внутри неоднородности. Функция Грина для статического случая представляется в виде [9]:

$$G_{mj}^{st}(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(8\pi)^2} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \int_0^{2\pi} \frac{\Delta_{mj}(\vec{e})}{\Delta(\vec{e})} d\phi_e, \quad (5)$$

где  $\Delta(\vec{e})$  и  $\Delta_{mj}(\vec{e})$  – однородные функции компонент вектора  $\vec{e}$ .

Воздействие иона на монокристалл, вызывает появление внутри кристалла зоны изотропной структурой (зона плавления, зона дефекта), с отличной от окружающего пространства структурой. Появление особой области сопровождается нарушением структуры самого кристалла и изменением его свойств вокруг дефекта. Модель дефекта в кристалле представлена на рис. 1.

Считаем, что дефект имеет форму эллипсоида с полуосями  $a, b, c$  ( $a=b$ ). Вокруг данного изотропного эллипсоида образуется область с измененными характеристиками. Размер и форма нарушенной зоны зависит от размеров и формы самой сердцевины кластера дефекта и от упругих свойств самого монокристалла. Изменение структуры кристалла имеет конечные размеры и распространяется на конкретное расстояние. За пределами этой области можем говорить о ненарушенной структуре монокристалла. Из уравнения (4) найдем изменение смещения упругих полей, вблизи сердцевины кластера нарушений, которое имеет вид:

$$\Delta u_i(\vec{r}) = u_i^{(0)}(\vec{r}) - u_i(\vec{r}) = (\lambda_{iklm}^1 - \lambda_{iklm}) \times \times \frac{\partial^2}{\partial x_k \partial x_l} \int_v G_{mj}^{st}(\vec{r} - \vec{r}') u_j^{(i)}(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (6)$$

Приравняв  $\Delta u_i(\vec{r})=0$ , из уравнения (6) можно найти размеры нарушенной области ( $\Delta b$ ,  $\Delta c$ ). Условие  $\Delta u_i(\vec{r})=0$  соответствует следующему физическому смыслу: поле смещений  $u_i(\vec{r})$  во внешней точке  $\vec{r}$ , при наличии нарушенной зоны, равно полю падающей волны  $u_i^{(0)}(\vec{r})$  в той же точке. Следовательно поле упругих напряжений не чувствует воздействия дефекта. Поверхность, в которой выполняется равенство этих волн, есть границей изменения монокристалла под воздействием ядра кластера нарушений. Для упрощения задачи рассматриваем монокристаллы, которые часто исследовались в экспериментах.

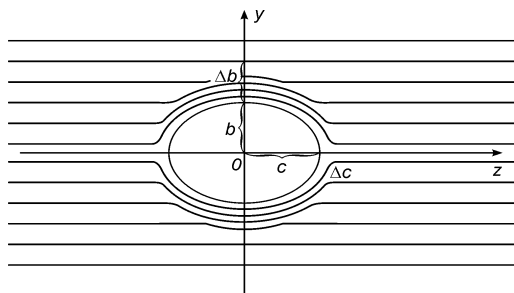


Рис. 1. Геометрия каналов и полей смещения в кристалле, содержащем протяженный дефект

#### 4. Смещения упругих полей кристаллов кубической структуры

Рассмотрим монокристалл кубической структуры. В собственной кристаллографической системе координат, тензор модулей упругости представляется в виде [10]:

$$\lambda_{iklm} = \alpha \delta_{ik} \delta_{lm} + \beta (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}) + M \sum_{p=1}^3 \delta_{ip} \delta_{kp} \delta_{lp} \delta_{mp} \quad (7)$$

Предполагаем, что в области ядра кластера нарушений (зона переплава) кубического поликристалла, распределение кристаллов по ориентациям, является изотропным и макроскопические модули упругости выражаются в виде [10]:

$$\lambda_{iklm} = \left[ \alpha + \frac{2}{375} \frac{M^2(3\alpha+8\beta)}{\beta(\alpha+2\beta)} \right] \delta_{ik} \delta_{lm} + \left[ \beta - \frac{1}{125} \frac{M^2(3\alpha+8\beta)}{\beta(\alpha+2\beta)} \right] \times (\delta_{il} \delta_{mk} + \delta_{im} \delta_{kl}) \quad (8)$$

Выражения (7) и (8) подставляем в уравнение (6). При его решении функция Грина  $G_{mj}^{st}(\vec{r}-\vec{r}')$  допускает применение основных свойств объемного потенциала эллипсоида [11], для точек снаружи ядра кластера нарушений. Данное условие позволяет свести уравнение (6) к алгебраическим уравнениям в переменных  $x^2+y^2$  и  $z^2$ .

Для решения уравнения (6) сделаем предположение, что в эллипсоидальной неоднородности полуоси ядра кластера нарушения соотносятся следующим образом:  $c \geq a = b$ .

Рассмотрим случай оси  $\langle 010 \rangle$ . Посредством численного счета построили зависимость полей смещения и размеров нарушенных областей от соотношения размеров эллипсоида. График расчета приведен на рис. 2.

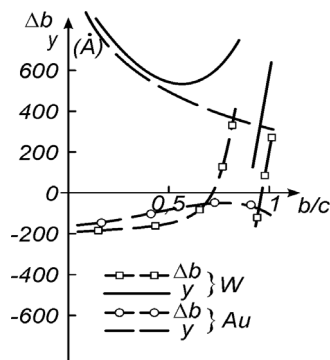


Рис. 2. Зависимость полей смещений и размера сердцевин ядра нарушения от параметра  $b/c$  по оси  $\langle 010 \rangle$ , для кристаллов кубической структуры (W, Au)

Расчет проводили для вольфрама и золота, которые имеют кубическую структуру. Из графика, приведенного на рис. 2, видим, что имеется четкая зависимость между соотношением геометрических размеров ядра кластера нарушений и линейными размерами ядра. Для вольфрама это точки  $b/c=1; 0.95; 0.75$ . В них ядро сохраняет свои первичные размеры. Также наблюдаем, фиксированное соответствие между размерами и полями смещений. Во всех остальных точках происходит резкое изменение размеров ядра в зависимости от соотношения  $b/c$ . Существует область, между 0.75 и 0.95, где нет решений уравнения (6). Т. е. в ней или не могут создаваться дефекты или они неустойчивы, ввиду упругих сил самого кристалла. Для области  $b < 0.75$  при образовании центрального ядра кластера нарушений возникают поля смещений направленные внутрь этого ядра. Т.е. создаются такие усилия, которые стремятся уменьшить размеры ядра, что может приводить к его исчезновению. Это все относится к монокристаллу вольфрама. Для случая с Au во всем интервале отношения размеров  $b/c$  наблюдается создание неоднородностей с возникновением упругих сил направленных внутрь, а ядра кластеров нарушений будут уменьшаться и стремиться к исчезновению. Следовательно, дефекты в монокристаллах золота, вызванные легированием заряженными ионами, являются нестабильными и стремящимися к самоликвидации. Т. е. структура Au слабо подвержена изменению под действием заряженных частиц. Применительно к вопросу хранения ОЯТ и радиоактивных отходов использование добавок золота является целесообразным. Все приведенные рассуждения относятся к оси  $\langle 010 \rangle$ .

Аналогичным образом вычислим изменение полей смещения в зависимости от соотношения  $b/c$  для оси  $\langle 001 \rangle$ . График расчетов представлен на рис. 3.

При построении графика (рис. 3) решение уравнения (6) было во всех точках оси. Рассматривая график зависимости полей смещений от  $b/c$  (отношение размеров сердцевин кластера нарушений), для монокристаллов W, Au по оси  $\langle 001 \rangle$ , видим, что образование центров нарушенных областей сопровождается появлением полей смещений направленных внутрь ядра. Т. е. по оси  $\langle 001 \rangle$ , для всех значений параметра  $b/c$

поля смещений будут стремиться к уменьшению ядра кластера нарушений.

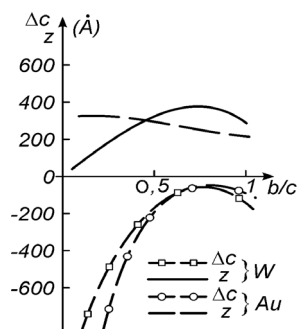


Рис. 3. Зависимость полей смещений и размера сердцевинны ядра нарушения от параметра  $b/c$  по оси  $\langle 001 \rangle$ , для кристаллов кубической структуры (W, Au)

## 5. Выводы

Для нахождения рассеяния упругих полей, на протяженных неоднородностях в анизотропных средах, разработана методика применения интегральных уравнений. Рассмотрены вопросы изменения структуры монокристаллов, легированных заряженными частицами. Численными методами получена зависимость полей смещения от соотношения геометрических размеров ядра нарушенной зоны. Для собственных осей  $\langle 010 \rangle$  и  $\langle 001 \rangle$  кубических монокристаллов вольфрама и золота, построены графики этих величин. Показано, что при определенных значениях параметра  $b/c$ , поля напряжений создают усилия, приводящие к уменьшению ядра кластера нарушений и возможному его исчезновению.

## Литература

1. Прохоренко, Е. М. Вывод интегральных уравнений, описывающих рассеяние упругих волн в анизотропной среде. [Текст] / Е. М. Прохоренко. // Восточно-европейский журнал передовых технологий. – 2012. – №2/10(56). – С. 52-55.
2. Хижняк, Н. А. Интегральные уравнения макроскопической электродинамики. [Текст] / Н. А. Хижняк. – Київ: Наукова думка, 1986. – 280с.
3. Mahan, D. Gerald. Many Particle Physics [Текст] / Gerald D. Mahan. – N.Y.: Plenum Publishers, 2000. – 784 p.
4. Wu, S. Y. General Recursive Relation for the Calculation of the Local Green's Function. [Текст] / S. Y. Wu, J. A. Cocks, C. S. Jayanthi. // Physical Review B. – 1994. – №49. – P.7957
5. Тихонов, А. Н. Уравнения математической физики. [Текст] / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский – М.: Наука, 1972. – 735с.
6. Doniach, S. Green's Functions for Solid State Physicists. [Текст] / S. Doniach, E. H. Sondheimer. – N. Y: Imperial College Press, 2004. – 312 p.
7. Phillips, P. Advanced Solid State Physics. [Текст] / P. Phillips. – Cambridge: University Press, 2012. – 402 p.
8. Чапля, Є. Я. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. [Текст] / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. – Київ: Наукова думка, 2009. – 303с.
9. Лифшиц, И. М. Построение тензора Грина для основного уравнения теории упругости в случае неограниченной упруго-анизотропной среды. [Текст] / И. М. Лифшиц, Л. Н. Розенцвейг. // ЖЭТФ. – 1947. – №17.– Т.9. – С. 783-791.
10. Лифшиц, И. М. К теории упругих свойств поликристаллов. [Текст] / И. М. Лифшиц, Л. Н. Розенцвейг. // ЖЭТФ. – 1946. – №16.– Т.10. – С. 967-980.
11. Муратов, Р. З. Потенциалы эллипсоида. [Текст] / Р. З. Муратов. – М.: Атомиздат, 1976. – 286 с.