

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ

Кваліфікаційна наукова праця
на правах рукопису

Баштова Анна Іванівна

УДК 530.182, 531.3

ДИСЕРТАЦІЯ

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОСТОРОВОЇ ОРГАНІЗАЦІЇ ТОЧКОВИХ
ДЕФЕКТІВ В ОПРОМІНЮВАНИХ СИСТЕМАХ

01.04.02 — теоретична фізика

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико - математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

А.І.Баштова

Науковий керівник Харченко Дмитро Олегович доктор фізико-математичних наук, професор

Суми – 2018

АНОТАЦІЯ

Баштова А.І. Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах. — Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. — Інститут прикладної фізики НАН України, м.Суми, 2018.

Дисертацію присвячено розвиненню теоретичних положень щодо вивчення процесів структуроутворення ансамблю точкових дефектів у кристалічних системах, що зазнають сталої дії опромінення, аналізу процесів формування скучень дефектів і пор та впливу точкових і лінійних дефектів на процеси перерозподілу композиційного складу опромінюваних бінарних сплавів.

У рамках розвиненого формалізму теорії швидкісних реакцій показано, що за умови врахування процесів генерації дефектів пружнім полем самих дефектів у такій системі можливими стають бістабільні стаціонарні стани. Проаналізовано стійкість системи дефектів до однорідних та неоднорідних збурень в околі стаціонарних однорідних станів. Отримано і проаналізовано фазові діаграми стійкості. Визначено характер впливу полів деформацій, викликаних виникненням дефектів на умови реалізації бістабільних станів. Проаналізовано типи структур дефектів та знайдено умови їх реалізації при різних швидкостях дефектоутворення та температур опромінення. Розвинуто детерміністичну модель, узагальнено урахуванням флюктуаційних внесків, зокрема шуму швидкості пошкоджень відповідно до флюктуаційно-дисипаційної теореми. Установлено умови проходження процесів структуроутворення точкових дефектів внаслідок дії опромінення і виникнення деформаційних нестійкостей при врахуванні стохастичної генерації дефектів. Виявлено динамічні режими росту кластерів вакансійного типу та дислокаційних петель у чистих металах на прикладі нікелю. Установлено, що флюктуації швидкості набору дози прискорюють процес просторової організації дефектів як при опроміненні у реакторних умовах, так і на прискорювачах та уповільнюють динаміку росту міжузлових петель. При застосуванні наближення середнього поля визначено залежність пересичення точкових дефектів від температури опромінення та швидкості пошкоджень.

У рамках використання методів числового моделювання показано, що характерний розмір вакансійних кластерів складає величину декількох нанометрів, залежно від швидкості пошкоджень та температури опромінення.

Виявлено умови та особливості проходження процесів відбору структур при опроміненні тонких металевих плівок за наявності нестійкостей класу Маллінса-Секеркі, де взаємозв'язок поля температури приповерхневого шару та концентрації точкових дефектів приводить до біфуркації Хопфа з проходженням процесу відбору структур. Отримано фазову діаграму проходження процесів відбору структур у площині температура – швидкість пошкоджень. Установлено, що флюктуації швидкості пошкоджень приводять до обмеження області значень швидкості пошкоджень та температури за яких реалізується відбір структур. Унаслідок взаємозв'язку полів концентрації та температури показано неоднорідність локальних температурних збурень, що успадковують структуру вакансійних скupчень. Показано, що морфологія та розмір спостережуваних структур (від 30 до 300 нм), залежить від швидкості утворення дефектів і температури зразка, завдяки зворотному зв'язку між локальною температурою і локальною концентрацією дефектів. Проведено статистичний аналіз розподілу вакансій у кластерах. Показано, що середній розмір островців та їх кількість змінюються осциляторно внаслідок проходження процесів відбору структур.

Проведено аналіз стохастичної моделі динаміки точкових дефектів із залежними від часу інтенсивностями стоків визначеними через радіус пори, де генерація дефектів є стохастичною величиною. Вивчено вплив стоків пори та генерації стохастичного точкового дефекту на динаміку роста розміру пори. Установлено, що флюктуації швидкості набору дози збільшують критичний радіус пори за рахунок підвищення ефективної температури системи, що приводить до збільшення рухливості дефектів та додаткової емісії вакансій з пор. Показано, що у випадку домінуючого внеску дислокацій, як стоків точкових дефектів, розмір пор еволюціонує відповідно до динаміки Ліфшиця-Аллена-Кана з показником росту $1/2$; у випадку домінування пор як стоків динаміка розміру пор підкорюється теорії Ліфшиця-Сльозова-Вагнера з показником росту $1/3$. Проведено аналіз універсального роста розмірів пор у автомодельному

режимі у наближенні великого шуму. З аналіза універсальності процесу росту пор у цьому наближенні виявлено, що скейлінгові показники універсальності росту стають залежними від швидкості набору дози.

Розглянуто процеси перерозподілу нерівноважних вакансій при спінодальному розпаді опромінюваного бінарного твердого розчину у рамках узагальнення теорії Кана-Хільярда з використанням підходу Даркена та швидкісної теорії з урахуванням деформаційних нестійкостей, обумовлених взаємодією дефектів. Досліджено кінетику розпаду та структуроутворення, статистичні розподіли полів концентрації розчину та концентрації вакансій за різних швидкостей набору дози опромінення. Показано, що при малих дозах опромінення відбуваються звичайні процеси розпаду, які уповільнюються при незначному збільшенні швидкості набору дози (збільшенні кількості нерівноважних вакансій), а при великих швидкостях — вакансії здатні формувати просторові структури та змінювати морфологію ламелей, нерівноважний розподіл вакансій приводить до уповільнення процесів спінодального розпаду відповідно до зворотного ефекту Кіркендала. Виявлено, що у процесах спінодального розпаду нерівноважні вакансії здебільшого концентруються у ламелях (“м’якої”) фази з більшим коефіцієнтом самодифузії атомів; за підвищених швидкостях пошкоджені взаємодія у пересиченому розчині вакансій приводить до формування вакансійних скучень. Показано, що формування кластерів вакансій супроводжується відбором структур.

Розвинено модель фазового розшарування за дислокаційно-підтримуваним механізмом при врахуванні структурного безладу та атермічного атомного перемішування (балістична дифузія), викликаних опроміненням. Проведено аналіз динаміки та впливу стохастичного перемішування атомів на процеси поділу фаз за наявності рухомих дислокацій невідповідності. Вивчається вплив просторових кореляцій флюктуацій балістичного потоку перемішування на процеси поділу фаз. Приймаючи до уваги відмінність у часових масштабах поля композиції та густини дислокацій (густини вектору Бюргерса), спочатку розглядається найпростіший випадок однієї повільної моди, коли динамікою густини вектору Бюргерса можна знехтувати. Із проведеного середньопольового

аналізу встановлюється, що внаслідок просторових кореляцій флуктуацій балістичного потоку перемішування в системі реалізується реверсивна картина фазового розшарування в фіксованому інтервалі інтенсивності цих флуктуацій. Із результатів числового моделювання поведінки системи за співвимірних часових масштабів випливає, що зростання ефективності дислокаційного механізму поділу фаз уповільнює динаміку росту розмірів доменів, збагачених атомами різного сорту, що супроводжується зменшенням показника росту від значення $1/3$ до $1/6$ з доменами меншого розміру. Виявлено, що регулярна компонента балістичного потоку сприяє однорідному розподілу дислокацій по системі, збільшуючи міжфазну границю. Натомість його скорельзована флуктуаційна компонента сприяє локалізації дислокацій в межах поділу, зменшуючи їх ширину.

Ключові слова: точкові дефекти, дислокації, пори, опромінення, структуроутворення, фазове розшарування.

Список публікацій здобувача за темою дисертації

Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати

1. Харченко Д.О. Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах/ Д.О.Харченко, В.О.Харченко, **А.І.Баштова** // Укр.фіз.журн. – 2013.– Т.58.– В.10.– С.994-1009.
2. Kharchenko Vasyl O. Modeling self-organization of nano-size vacancy clusters in stochastic systems subjected to irradiation/ Vasyl O.Kharchenko, Dmitrii O. Kharchenko, **Anna I.Bashtova** // Radiation Effects & Defects in Solids.– 2014.– V.169.– N 5.– P.418-436.
3. Kharchenko D.O. A study of phase separation processes in presence of dislocations in binary systems subjected to irradiation/ D.O. Kharchenko, O.M. Schokotova, **A.I.Bashtova**, I.O.Lysenko // Cond.Mat.Phys.– 2015.– V.18.– P.23003.
4. Kharchenko D.O. A study of void size growth in nonequilibrium stochastic systems of point defects / D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko, **A.I.Bashtova** // Eur.Phys.J.B.– 2016.– V.89.– P.123.
5. Харченко Д.О.Самоорганізація вакансійного ансамблю при спінодальному розпаді бінарних систем, підданих сталій дії радіаційного опромінення/

Д.О.Харченко, В.О.Харченко, **А.І.Баштова** // Укр.фіз.журн.– 2016.– Т.61.– В.3.– С.276-288.

6. Kharchenko Dmitrii O. Patterning and pattern selection in a surface layer: Feedback between point defects population and surface layer temperature variations/ Dmitrii O. Kharchenko, Vasyl O. Kharchenko, **Anna I. Bashtova**, Irina O. Lysenko // Physica A.– 2016.– V.463.– P.152-162.

7. Харченко В.О. Мульти масштабне моделювання самоорганізації нерівноважних точкових дефектів в опромінюваному α -цирконії / В.О. Харченко, І.О. Лисенко, О.М. Щокотова, **А.І. Баштова**, Д.О. Харченко та інші // Успехи физ. мет. – 2017.– Т.4.– С.294-400.

8. **Баштова А.І.** Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах / **А.І.Баштова** // Наукові доповіді призерів II туру Всеукраїнського конкурсу студентських наукових робіт з фізики.– Суми, 2013.– С.4.

9. **Баштова А.І.** Просторова організація дефектів вакансійного типу при сталій дії опромінення / **А.І.Баштова**, Д.О.Харченко, В.О.Харченко // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА-2014”, (Львів, 15-17 травня 2013 р.).– Львів, 2013.– С.Е1.

10. **Баштова А.І.** Фазове розшарування з дислокаційним механізмом в бінарних системах підданих опроміненню / **А.І. Баштова**, Д.О. Харченко, В.О. Харченко // Збірник тез школи-семінару “Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах”, (Суми, 21-22 жовтня 2014 р.).– Суми, 2014.– С.26.

11. **Баштова А.І.** Моделювання самоорганізації нанорозмірних вакансійних кластерів в стохастичних системах підданих опроміненню / **А.І.Баштова**, Д.О.Харченка, В.О.Харченка // Збірник тез 14-тої Всеукраїнської школи-семінара та Конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 4-6 червня 2014 р.).– Львів, 2014.– С.Д15.

12. **Bashtova A.I.** A study external noise-induced effects in processes of voids growth / **A.I.Bashtova**, D.O.Kharchenko , V.O.Kharchenko // Abstract book of

International research and practice conference: “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO - 2016), (Lviv, 24-17 August 2016).– Lviv, 2016.– P.303.

13. Kharchenko D.O. Pattern selection in a surface layer of irradiated foils: effect of the surface layer temperature variations / D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko **A.I.Bashtova**, I.O.Lysenko // Abstract book of International research and practice conference: “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO - 2016), (Lviv, 24-17 August 2016).– Lviv, 2016.– P.326.

14. **Баштова А.І.** Роль нерівноважних дефектів у процесі поділу фаз в опромінюваних системах / **А.І.Баштової**, Д.О.Харченка, В.О.Харченка // Збірник тез 17-тої Всеукраїнської школи-семінара та Конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 8-9 червня 2017 р.).– Львів, 2017.– С.Д4.

ЗМІСТ

ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1. НЕРІВНОВАЖНІ ПРОЦЕСИ В МАТЕРІАЛАХ ПІД ДІЄЮ ОПРОМІНЕННЯ ТА МЕТОДИ ЇХ ОПИСУ	11
1.1. Радіаційно-стимульовані ефекти в опромінюваних матеріалах	11
1.1.1. Процеси структуроутворення дефектів в опромінюваних матеріалах	12
1.1.2. Динаміка росту дислокаційних петель та пор у пересиченому ансамблі точкових дефектів.	16
1.1.3. Фазове розшарування бінарних систем підданних опроміненню	19
1.2. Методи моделювання радіаційних ефектів та еволюції дефектів в опромінених матеріалах	22
1.2.1. Мультимасштабний підхід числового моделювання	22
1.2.2. Мікроскопічні методи числового моделювання.	24
1.2.3. Мезоскопічні методи числового моделювання.	26
1.3. Висновки до розділу 1	30
РОЗДІЛ 2. ФОРМУВАННЯ НАНОРОЗМІРНИХ СТРУКТУР ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ ПІД ДІЄЮ ОПРОМІНЕННЯ	32
2.1. Кластеризація дефектів вакансійного типу при сталій дії опромінення	32
2.1.1. Динамічна модель системи точкових дефектів	33
2.1.2. Вплив зовнішніх флюктуацій на процеси формування вакансійних кластерів.	41
2.2. Вплив дислокаційних петель на кластеризацію вакансій	45
2.2.1. Стохастична модель динаміки дефектів та стоків.	45
2.2.2. Структуроутворення дефектів за реакторних умов опромінення.	46
2.2.3. Структуроутворення дефектів при опроміненні на прискорювачах.	50

2.3. Висновки до розділу 2	54
----------------------------	----

РОЗДІЛ 3. СТРУКТУРОУТВОРЕННЯ ТА ПРОЦЕСИ ВІДБОРУ В ОПРО- МІНЮВАНИХ ТОНКИХ ПЛІВКАХ

3.1. Самоорганізація нерівноважних точкових дефектів у тонких плівках	56
3.1.1. Стохастична модель формування вакансійних кластерів у при- поверхневих шарах тонких плівок.	56
3.1.2. Вплив зовнішнього шуму на процеси відбору структур.	60
3.2. Особливості проходження відбору структур та їх статистичний аналіз	62
3.2.1. Динаміка структурування та відбору.	63
3.2.2. Статистичні властивості утворюваних структур.	66
3.3. Висновки до розділу 3	69

РОЗДІЛ 4. ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ТА РОСТУ ПОР У СТО- ХАСТИЧНІЙ СИСТЕМІ ДЕФЕКТІВ

4.1. Ріст розміру пор в нерівноважних стохастичних системах точкових де- фектів	70
4.1.1. Стохастична модель росту пор.	70
4.1.2. Вплив зовнішнього шуму на динаміку росту пор в однорідній системі.	72
4.2. Універсальність закону росту пор	75
4.2.1. Аналіз скейлінгових характеристик процеса росту пор.	75
4.2.2. Числове моделювання універсальної динаміки.	79
4.3. Ріст пор в розподіленій системі дефектів з деформаційною нестійкістю	81
4.3.1. Дифузійні потоки точкових дефектів та аналіз стійкості.	82
4.3.2. Моделювання росту пор в розподіленій системі.	84
4.4. Висновки до розділу 4	87

РОЗДІЛ 5. МОДЕЛЮВАННЯ РОЗШАРУВАННЯ БІНАРНИХ ТВЕР- ДИХ РОЗЧИНІВ ПРИ РАДІАЦІЙНОМУ ОПРОМІНЕННІ

5.1.	Розпад бінарного розчину за вакансійним механізмом дифузії	88
5.1.1.	Модель розпаду бінарної системи з нерівноважними вакансіями.	89
5.1.2.	Лінійний аналіз процесів відбору структур.	93
5.1.3.	Числове моделювання самоорганізації вакансійної підсистеми.	98
5.2.	Розпад бінарної системи за дислокаційно підтримуваним механізмом	103
5.2.1.	Модель бінарного сплаву з дислокаціями невідповідності. . . .	104
5.2.2.	Фазове розшарування за несумірних часових масштабах густини дислокацій і композиції.	108
5.2.3.	Фазове розшарування при сумірних часових масштабах. . . .	117
5.2.4.	Моделювання випадіння фаз за дислокаційним механізмом. . .	120
5.3.	Висновки до розділу 5	127
	ОСНОВНІ ВИСНОВКИ	129
	СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	131
	ДОДАТОК А	153

ВСТУП

Актуальність роботи. Істотні прориви у розвитку радіаційних технологій пов'язані із вивченням радіаційних явищ та ефектів у матеріалах, що використовуються як конструкційні для проектування ядерних та термоядерних реакторів. Ці нерівноважні явища є наслідком взаємодії високоенергетичних частинок з твердим тілом, що приводить до утворення нерівноважних дефектів та спричинених ними змін структурно-фазового складу і, як наслідок, фізичних і механічних властивостей (розпухання, радіаційний ріст, окрихчення, зміщення тощо). Фізика радіаційно-стимульованих процесів є підґрунтям сучасних технологічних розробок при проектуванні та виборі сплавів для потреб атомної енергетики.

З'ясування фізичних змін в опромінюваних твердотільних системах безпосередньо пов'язано з формуванням структурного безладу внаслідок проходження каскадних зміщень атомів кристалів. Тому актуальними на сьогодні є дослідження, спрямовані на вивчення еволюції дефектної структури опромінюваних матеріалів та ефектів, індукованих перерозподілом нерівноважних дефектів кристалічної будови. Подана робота спрямована на вивчення особливостей перерозподілу, дифузії та кластеризації точкових дефектів, утворення дислокаційних петель, вакансійних пор, руху дислокацій та, відповідно, проходження процесів сегрегації (фазового розшарування) в опромінюваних кристалічних системах. У дослідженнях особливостей кластеризації точкових дефектів, що проводяться у цій роботі, враховано основні механізми взаємодії дефектів між собою та стоками, а також ураховано вплив деформаційних полів на характер структуроутворення в системі дефектів. Про актуальність дисертаційних досліджень також свідчить розвинення існуючих теоретичних положень та підходів щодо подання та моделювання радіаційно-стимульованих процесів розпаду твердих розчинів та структуроутворення з атермічним атомовим перемішуванням, індукованим проходженням каскадів за наявності флюктуацій швидкості радіаційних пошкоджень та потоку атермічного перемішування. Інформація, одержана в таких дослідженнях, може бути використана для з'ясування радіаційно-стимульованих змін властивостей опромінюваних твердотільних си-

stem та пояснення експериментальних даних щодо утворення кластерів дефектів, проходження сегрегації, з'ясування стійкості фаз, радіаційного росту та пороутворення.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Роботу виконано в Інституті прикладної фізики НАН України відповідно до цільової програми Відділення ядерної фізики та енергетики НАН України “Розвиток перспективних напрямів фундаментальних досліджень в ядерній, радіаційній фізиці та ядерної енергетиці” проект “Дослідження самоорганізації ансамблю дефектів при еволюції мікроструктури кристалічних систем, підданих дії опромінюючих потоків” (номер державної реєстрації 0116U005851, строк виконання 2017-2021 р.), проект “Багатомасштабне моделювання процесів мікроструктурних перетворень у матеріалах, підданих радіаційному опроміненню” (номер державної реєстрації 0111U010614, строк виконання 2012-2016 р.), проект “Моделювання процесів дефектоутворення при деформації кристалічних систем, підданих дії опромінення” (номер державної реєстрації 0115U004688, строк виконання 2015 р.), проект “Мульти масштабне моделювання динаміки радіаційних дефектів і формування вакансійних кластерів в чистому цирконії” (номер державної реєстрації 0115U005810, строк виконання 2016 р.); проект “Багаторівневе моделювання самоорганізації точкових дефектів в конструкційних матеріалах при сталій дії опромінення” (номер державної реєстрації 0117U003561, строк виконання 2017 р.).

Мета і завдання дослідження. Метою дисертаційної роботи є розвинення послідовного опису процесів кластеризації дефектів, утворення дислокаційних петель, пор та проходження фазового розшарування при перерозподілі точкових і лінійних дефектів за сталої дії опромінення. Для досягнення мети у роботі необхідно було вирішити такі завдання:

- установити характер впливу пружних деформацій в околі дефектів на процеси формування вакансійних кластерів та росту густини дислокаційних петель в режимах опромінення в реакторі на прискорювачах;
- з'ясувати особливості перебігу процесів структуроутворення вакансій за наявності флюктуацій швидкості пошкоджень;

- установити вплив деформаційних нестійкостей на процеси стохастичного пороутворення за різної інтенсивності стоків точкових дефектів;
- виявити умови проходження процесів відбору структур при кластеризації вакансій, зміни морфології кластерів у приповерхневих шарах опромінюваних тонких плівок за наявності флюктуацій швидкості набору дози;
- з'ясувати умови структуризації вакансій в опромінюваних бінарних сплавах, що зазнають фазового розшарування за вакансійним механізмом з деформаційними нестійкостями;
- для бінарних опромінюваних систем описати виділення фаз із стохастичним потоком атермічного атомового переміщування за наявності дислокацій невідповідності .

Об'єктом дослідження є процеси кластеризації, перерозподілу та просторової організації точкових і лінійних дефектів у твердотільних системах, підданих сталій дії опромінюючих потоків високоенергетичних частинок.

Предметом дослідження є генеровані каскадними зміщеннями ансамблі дефектів у нерівноважних одно- та двокомпонентних кристалічних системах, що зазнають опромінення високоенергетичними частинками.

Методами дослідження. У дисертаційному дослідженні були використані: теорія швидкісних реакцій, теорія динамічних систем, теорія стохастичних систем, теорія середнього поля Вейса, теорія фазових переходів Ландау, теорія фазового розшарування Кана-Хільярда, теорія пороутворення Ліфшиця-Сльозова-Вагнера, теорія Даркена, методи аналізу стійкості, методи числового моделювання розподілених систем, методи статистичного і кореляційного аналізу даних.

Наукова новизна отриманих результатів полягає у тому, що вперше:

- показано, що процеси самоорганізації в системі точкових дефектів з виникненням компактних кластерів, дислокаційних петель та пор пов'язані з локальними деформаційними нестійкостями, генерованими самими дефектами, їхньою просторовою взаємодією, флюктуаціями джерел внутрішньої динаміки та швидкості радіаційних пошкоджень;

- у рамках використання стохастичного підходу для дослідження процесів формування дефектних структур вакансійного типу виявлено, що флюктуації швидкості набору дози прискорюють просторовий перерозподіл дефектів у скупчення з характерним розміром від 30 нм до 100 нм;
- установлено, що флюктуації швидкості набору дози збільшують критичний радіус вакансійних пор, зі збільшенням інтенсивності стоків точкових дефектів відбувається уповільнення процесу росту пор з переходом від сценарію Алена-Кана до режиму Ліфшиця-Сльозова-Вагнера (зі спаданням показника росту середнього розміру пори з часом від значення $1/2$ до $1/3$);
- з'ясовано, що при кластеризації вакансій у приповерхневих шарах тонких плівок процеси відбору структур відбуваються внаслідок взаємозв'язку між концентрацією дефектів і локальними змінами температури приповерхневого шару, при зростанні швидкості пошкоджень відбувається зміна морфології вакансійних кластерів;
- виявлено, що при збільшенні швидкості набору дози опромінення радіаційно-стимульоване випадіння фаз у бінарному твердому розчині за вакансійним механізмом трансформується у процес формування структур вакансій, перерозподіл вакансій приводить до уповільнення спінодального розпаду відповідно до зворотного ефекту Кіркендала;
- показано, що конкуренція регулярної та скорельованої стохастичної складових атермічного потоку атомового переміщування спричиняє реверсивне проходження поділу фаз за дислокаційно-підтримуваним механізмом зі скупченням дислокацій в околі меж поділу, динаміка росту виділень фаз уповільнюється при зростанні ефективності дислокаційного механізму.

Практичне значення результатів. Отримані у роботі результати можуть бути використані для пояснення процесів формування кластерів дефектів та виникнення дислокаційних петель і пор у конструкційних матеріалах, що зазнають сталої дії опромінення в режимах опромінення в реакторах та на прискорювачах у широкому інтервалі температур та швидкостей пошкоджень. Вони можуть бути застосовані для пояснення радіаційно-стимульованих процесів

сегрегації за вакансійним та дислокаційним механізмами у дво- та багатокомпонентних сплавах та оцінювання значень величин, що характеризують розпушання та радіаційний ріст існуючих та нових матеріалів, що експлуатуються в умовах радіаційного опромінення. Розвинуті підходи можуть бути корисними для моделювання і прогнозування стійкості матеріалів при виборі сплавів для конструкційних елементів реакторів нового покоління.

Особистий внесок здобувача полягає у проведенні самостійного пошуку та аналізу експериментальних та теоретичних даних щодо досліджуваних систем та описуваних у дисертації радіаційних ефектів. Підґрунтя цієї роботи складають результати досліджень, отримані як безпосередньо автором, так і у співпраці з науковим керівником. Постановка задач, мети роботи, вибір теоретичних та числових методів і підходів, а також обговорення отриманих результатів проводились сумісно з керівником.

Здобувач брав повноцінну участь впродовж усього процесу дослідження у всіх опублікованих роботах, зокрема: при аналітичному аналізі, розробці обчислювальних кодів, числовому моделюванні, інтерпретації результатів дослідження та підготовки статей і тез.

У роботах [1, 2] автор брав участь у одержанні основних диференціальних рівнянь, проведенні аналізу стійкості лінеаризованої системи та аналітичних розрахунках фазових діаграм, статистичному аналізу даних моделювання. У роботі [4] автором проведено розрахунки в теорії середнього поля, проведено аналіз стійкості, взято участь у розробленні числового алгоритму, проведено моделювання та проведено статистичний аналіз отриманих даних. У роботі [5] дисертанту належать результати з моделювання структуроутворення, розрахунку поведінки структурного фактора, проведення аналізу еволюції функцій розподілу. У роботах [3, 6] автор виконав аналітичне та числове дослідження систем, провів розрахунки пов'язані з обробкою даних числового моделювання. У роботі [7] автор дисертації взяв участь у дослідженні динаміки системи з однорідним розподілом точкових дефектів і просторово розподіленої системи за різних режимів опромінення. Тези доповідей [8–14] підготовлено здовувачем особисто.

Апробація результатів дисертації. Основні наукові результати дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на таких міжнародних конференціях та семінарах: Всеукраїнський конкурс студентських робіт; Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики "ЕВРИКА-2013"(Львів, 2013); 14-та, 17-та Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 2014, 2017 pp.); Школа-семінар "Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах"(Суми, 2014); International research and practice conference "Nanotechnology and nanomaterials"NANO - 2016 (Lviv, 2016).

Публікації. Основні результати дисертаційної роботи опубліковано у 14 роботах [1–14], серед яких:

7 статей у провідних фахових виданнях, які індексуються наукометричними базами Scopus та Web of Science [1–7]; 7 тез доповідей на міжнародних конференціях.

Структура та зміст роботи. Робота складається зі вступу, оглядової частини, чотирьох оригінальних розділів, основних висновків та списку літератури з 211 найменувань. Дисертацію викладено на 155 сторінках машинописного тексту із 48 рисунками та однією таблицею.

У розділі 1 описано експериментальні дані досліджуваних радіаційних ефектів та теоретичні методи їх опису. Зроблено висновки стосовно необхідності виконання подальших досліджень у цьому напрямку. У першому змістовному розділі (розділ 2) проводиться аналіз процесів кластеризації вакансій на прикладі чистого нікелю в режимах опромінення в реакторах та на прискорювачах. Розділ 3 присвячено опису особливостей реалізації процесів відбору структур вакансійного типу при опроміненні тонких металевих плівок. У розділі 4 подаються результати моделювання росту пор за умови флюктуацій швидкості радіаційних пошкоджень. У розділі 5 увага приділяється опису процесів виділень фаз в опромінюваних бінарних твердих розчинах за вакансійним та дислокаційно-підтримуваним механізмами. Останній розділ містить висновки щодо результатів дисертаційного дослідження.

РОЗДІЛ 1

НЕРІВНОВАЖНІ ПРОЦЕСИ В МАТЕРІАЛАХ ПІД ДІЄЮ ОПРОМІНЕННЯ ТА МЕТОДИ ЇХ ОПИСУ

Дослідження радіаційних ефектів бере свій початок з моменту створення ядерної енергетики і залишається актуальним на сьогодення, оскільки ядерні реактори набувають все більшого застосування у людській діяльності. Вивчення основних та вторинних механізмів, що впливають на проходження фізичних процесів у конструкційних матеріалах, є першостепенною задачею сучасної фізики конденсованого стану. У зв'язку з давньою історією експериментального і теоретичного дослідження радіаційних ефектів та великою кількістю публікацій у цьому напрямку, ми наведемо ілюстрацію та опис тих радіаційних ефектів, які розглядаються у дисертаційному дослідженні з висвітленням основних методів їх вивчення та аналізу.

1.1. Радіаційно-стимульовані ефекти в опромінюваних матеріалах

Відомо, що опромінювані метали та сплави є типовим прикладом істотно нерівноважних дисипативних систем, у яких проявляються процеси самоорганізації дефектної структури [15], наслідком чого є низка радіаційно-стимульованих ефектів, зокрема: радіаційно-стимульована дифузія, кластеризація точкових дефектів з формуванням дислокаційних петель, вакансійних та газонаповнених пор, утворення граток пор, які успадковують структуру кристалічної матриці, аморфізація твердого розчину, кристалізація аморфних фаз, радіаційно-індукована сегрегація за вакансійним та дислокаційним механізмами, рафінування та гетерогування, нестійкість фаз, композиційне структуроформування, радіаційно-стимульоване фазове розшарування та фазові перетворення, зміна роду фазового переходу, формування поверхневих нанорозмірних структур різної морфології при іонному розщоршенні тощо [16]. Наслідком проходження цих фізичних процесів є зміна фазового складу сплавів та відповідно погірше-

ння фізико-механічних властивостей конструкційних елементів реакторів та, загалом, систем, що постійно експлуатуються в умовах опромінення високоенергетичними частинками (нейtronами, електронами, іонами) та лазерними імпульсами високої інтенсивності. Серед таких макроскопічних ефектів можна виділити: блістеринг та флекінг, радіаційний ріст, розпухання, окрихчення, змінення тощо [16–23].

1.1.1. Процеси структуроутворення дефектів в опромінюваних матеріалах.

Вплив високоенергетичних частинок та, загалом, опромінення на тверді тіла приводить до зміни їх структурно-фазового стану. У випадку металевих сплавів, еластичні зіткнення речовини (атоми мішенні) з високоенергетичними частинками є основною взаємодією, що веде до утворення структурних дефектів та атомового перемішування. Під час такого зіткнення частина кінетичної енергії налітаючої частинки E_T віддається атому мішенні (первинно вибитому атому). Коли E_T перевищує порогову E_d ($E_d \simeq 25$ еВ для металів), атом зміщується зі свого вихідного положення і утворює вакансійно-міжузельну пару (пару Френкеля). Із літературних даних (див., наприклад, [16]) відомо, що у випадку малих енергій налітаючих частинок (таких, що не набагато перевищують енергію первинно вибитого атому, наприклад, для нікелю $E_d \sim 30$ еВ) утворюються ізольовані пари Френкеля (стійкі чи нестійкі). Такі дефекти можуть потім мігрувати і рекомбінувати чи аніглювати на стоках дефектів (дислокації, дислокаційні петлі, пори, поверхні та граници зерен). При сталій дії опромінення матеріал перенасичується точковими дефектами, що сприяє збільшенню атомної рухливості. Деякі атоми при зміщенні зі своїх положень можуть займати нові положення у кристалічній ґратниці, що призводить до вимушено-го переміщення атомів. Це спричиняє хімічне змішування та хімічне розупорядкування сплавів. За великих значень енергій налітаючих частинок (наприклад, $\gtrsim 2E_d$) формуються каскади зміщень. Проходження каскаду (тривалістю $10^{-13} \div 10^{-12}$ сек) призводить до формування ядер збагачених вакансіями та периферії збагаченої міжузловими атомами. Мінімальна енергія іонів нікелю, для ініціювання процесу дефектоутворення у тому ж нікелі не перевищує

60 еВ, для α -частинок вона складає 250 еВ, для нейтронів — 860 еВ, тоді як для електронів — 800 КеВ. З експериментальних спостережень встановлено, що формування організованої структури дефектів (кластерів) потребує їх виробництва у каскадах. Серед них можна виділити формування скупчень вакансій (ді-, три- та тетра-вакансій) [24], окремих пор та їх решіток [25, 26], утворення преципітатів, стінок дефектів [27], упорядкування вакансійних петель [28, 29]. Здебільшого такі процеси спостерігаються при іонному та нейтронному опроміненні [30]. Просторові структури дефектів було знайдено, також, при лазерному опроміненні з імпульсами інтенсивностей $I \sim 10^7 \div 10^8 \text{ Вт}/\text{см}^2$, коли за рахунок ударної хвилі дефекти утворюються в об'ємі твердого тіла, по якому пройшов фронт [31, 32]. Слід зазначити, що при помірних інтенсивностях ($I \sim 10^4 \div 10^7 \text{ Вт}/\text{см}^2$) за відсутності ударної хвилі основну роль відіграє тепловий механізм генерування дефектів і густота нерівноважних точкових дефектів може перевищувати рівноважну на декілька порядків.

Більшість дефектів, утворюваних завдяки зовнішньому впливу, є термодинамічно нестійкими і тому їх однорідний розподіл стає нестійким також, що приводить до їх просторової організації — ефективного зменшення ентропії системи внаслідок самоорганізації, викликаної зовнішніми чинниками: температурою, тиском, опроміненням. Структуроутворення з просторовими структурами нанометрового розміру можна спостерігати на поверхні опромінених матеріалів, наприклад, при іонно-променевому розорошенні [33–37], при конденсації з газової фази [38, 39] і молекулярно-променевої епітаксії [40]. Теоретичні та експериментальні дослідження таких дисипативних структур широко обговорюються у літературі [41–46]. Чисельні дослідження формування кластерів дефектів дозволяють виявити умови утворення різних видів структур внаслідок самоорганізації ансамблю дефектів [47, 48].

Швидкість дефектоутворення, що характеризує умови опромінювання визначається числом зміщених атомів в каскаді, спектральною густиною потоку частинок та перетином дефектоутворення. Як відомо для опромінення у реакторах порядок цієї величини 10^{-6} з.н.а/с (зміщені на атом за секунду), для прискорювачів маємо оцінку 10^{-3} з.н.а/с. Очевидно, що при опроміненні ла-

зерними імпульсами вона буде істотно менша за реакторну. Конструкційні матеріали водно-водяних реакторів (ВВЕР) за час експлуатації набирають дозу опроміненні до декількох з.н.а., реактори на швидких нейтронах до десятків з.н.а., реактори нового покоління мають витримувати дози до сотні з.н.а.

Часова шкала проходження відповідних первинних процесів у кристалічних системах є такою: процес утворення первинно-вибитого атома $\sim 10^{-16}$ с, проходження каскаду $\sim 10^{-13}$ с, стадія релаксації (відпалу) проходить у інтервалі $10^{-8} \div 10^{-7}$ с. Просторові масштаби, на яких відбувається організація дефектів також суттєво різняться. Тут окрім дифузійної довжини слід враховувати нано-метрові діапазони взаємодії дефектів, та особливості формування нанокластерів вакансій. Експериментально [49] було показано, що при опроміненні протонами з енергією 3МеВ при низьких дозах ($\simeq 0.01$ з.н.а) розподіл тетраедричних дефектів пакування у чистих *Ni* та *Cu* є однорідним, а при вищих значеннях дози ($\simeq 0.1$ з.н.а) спостерігалася флюктуації кластерів точкових дефектів. При дозах до 0.65 з.н.а вони змінювалися вираженими періодично розташованими кластерами. Крім того, як було показано у роботах [50] вакансійні кластери у вигляді тетраедричних дефектів пакування можуть бути сформовані після каскадних зіткнень при низьких температурах, коли вакансії не роблять їх рух термічно активним. Формування тетраедричних дефектів пакування експериментально спостерігалося навіть при електронному опроміненню фольги [51–53]. Було показано, що вакансійні кластери при опроміненні металів електронами з'являються за умов локального збагачення вакансіями у результаті поведінки міжвузлів. У експериментальних дослідженнях вакансійні кластери мають лінійний розмір порядка декількох нанометрів (у інтервалі 2-7 нм залежно від умов опромінення та використаного матеріала мішені) з кількістю 7-20 вакансій в кластерах [53]. Типова картина формування малих кластерів дефектів (“black dots”) у нержавіючій сталі 0Х16Н15М3Б та чистому нікелі подано на рис.1.1. Установлено, що кількість кластерів “black dots” у нержавіючих стаях складає величину 1% від усіх дефектів, тоді як для *Ni* та *Cu* концентрація вакансійних тетраедрів від 25% до 50% [18]. Analogічні ефекти спостерігалася для *Mo*, *Al*, *Nb*, *Ta*, *W* та стопів *Ti – Zr – Mo* з періодичним

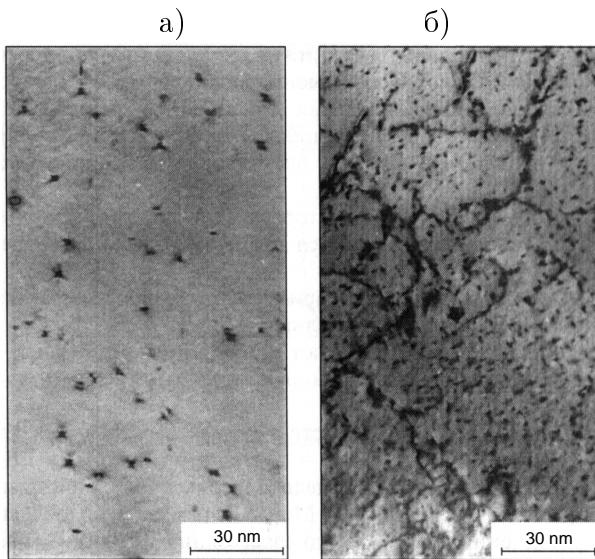


Рис. 1.1. Мікроструктура хромо-нікелевої сталі 0Х16Н15М3Б (а) та чистого нікелю (б) опромінених іонами Ni при кімнатних температурах та дозах: (а) 40 з.н.а, (б) 20 з.н.а. Рисунок взятий з роботи [18]

розташуванням $200 \div 800\text{\AA}$ пор розміром $20 \div 100\text{\AA}$.

Детальні дослідження упорядкування дефектної структури при опроміненіх іонами Ni та Cu показали формування розвинutoї структури, що складається зі стінок дефектів [54]. Формування стінок з кластерів дефектів у моно- та полікристалічних Ni та Cu спостерігалося при середніх температурах та значних дозах опромінення. Було встановлено сильну анізотропію в розташуванні тетраедрів (дефектів пакування) та вакансійних кластерів у стінках вздовж площин $\{100\}$ ГЦК кристалів, що приводило до виникнення лабіrintоподібної структури з періодом 60нм між стінками, що мали товщину в половину їх періоду розташування [55]. При цьому між стінками виникали бездефектні області.

Зазвичай, при дослідженні динаміки дефектів, температура опромінюваного зразка розглядається як постійна величина, через високу теплопровідність (наприклад, для металів). Однак, це характерно лише для зразків великого розміру і для температури всередині матеріалу. Тоді як, для тонких плівок (товщиною $\sim 0.5\text{мкм}$) у середовищі з постійною температурою T_0 , унаслідок нагріву, утворення дефектів та їх анагіляції (діапазон іонізації частинок є меншим за товщину зразка), - відбуваються процеси локальних змін температури зразка T . Локальне зростання температури зразка є результатом його відпалу. При цьому енергія дефектів переходить нагрів, що і приводить до збільшен-

ня температури. У результаті, кількість дефектів зменшується зі зростанням теплопередачі. Далі, зразок охолоняє, теплопередача уповілюється і накопичуються нові дефекти. Повторення описаного процесу приводять до самоосциляцій температури зразка і концентрації його дефектів. Реалізація таких самоосциляцій у рівноважних системах описана у роботах [56, 57]. Існує низка експериментально спостережуваних результатів присвячених самоорганізації точкових дефектів у твердих тілах з просторово-часовими осциляціями концентрації точкових дефектів (див., наприклад, роботи [58, 59]). Серед них, варто відзначити, наприклад, осциляції розмірів пор у зразках нікелю під опроміненням [60]; осциляції температури кристалів CH_4 , описані у роботі [59]; періодичні коливання мікротвердості у Nimonic 90 з γ -преципітатами при зростанні дози опромінення [61]; періодичні коливання електричного опору опромінених міді та алюмінію [62–64].

1.1.2. Динаміка росту дислокаційних петель та пор у пересиченому ансамблі точкових дефектів.

Наслідком кластеризації точкових дефектів є утворення дислокаційних петель вакансійного та міжвузлового типів з кластерів вакансій та міжвузлів, відповідно. Процес утворення, полягає у тому, що кластери поглинають поодинокі дефекти, перетворюються у дефекти пакування і при перевищенні критичної кількості дефектів у них (критичного радіусу кластеру) кластер стає нейстійким і перетворюється у петлю. Ці петлі у процесі росту можуть об'єднуватися. Дислокаційні петлі характеризуються власним преференсом у поглинанні дефектів, що спадає з ростом радіусу петлі. Макроскопічним проявом росту петель є радіаційний ріст, коли кристал подовжується у напрямках x та y , а стискається у напрямку z , що спостерігається в сплавах на основі цирконію без зміни об'єму кристалу [65–67].

Слід зазначити, що процес зародження та росту дислокаційних петель здебільшого спостерігається за невисоких температур (300 – 770 K) при швидкостях пошкоджень, що відповідають як реакторним умовам, так і при опроміненні на прискорювачах при дозах від 10^{-2} – 10^{-1} з.н.а. в ОЦК металах та

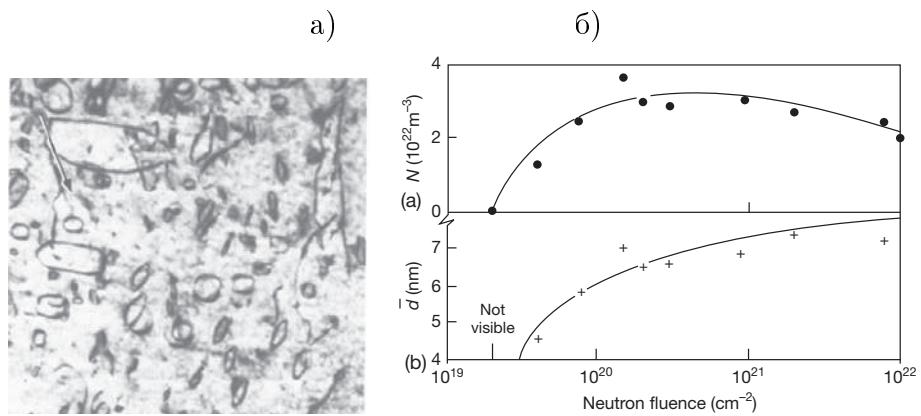


Рис. 1.2. (а) Дислокаційні петлі у сплаві Zircaloy-2 при дозі ≈ 1.1 з.н.а. та темпатурі опроміненні 700 K (б) Залежність густини числа та діаметру петель у сплаві Zircaloy-2 при 573 K від флюенсу. Рисунок (а) взятий з роботи [69], рисунок (б) – з роботи [70]

сплавах. У цирконієвих сплавах, що здебільшого мають ГЩП структуру з напорозмірними виділеннями β -фази ніобію виникають вакансійні та/або міжвузлові петлі $\langle a \rangle$ -типу на малих дозах ($10^{-2} - 10^{-1}$ з.н.а.), петлі $\langle c \rangle$ -типу є суто вакансійними і реалізуються при дозах від ≈ 3 з.н.а. [68]. Густина числа петель зростає до значень 10^{13} см^{-3} , а їх розмір зростає від 2 нм до 100 нм при збільшенні дози [69, 70]. Типова картина формування петель у сплаві Zircaloy-2 зображена на рис. 1.2а, залежність від дози густини числа петель та їхнього розміру наведено на рис. 1.2б. Як видно з рис. 1.2б при збільшенні дози маємо перехід у насичення густини кількості петель, при поступовому рості лінійного розміру петель. Такий сценарій спостерігається для більшості сплавів на основі заліза та цирконію.

Методологія процеса росту дислокаційних петель ґрунтуються на застосуванні методів молекулярної динаміки, коли вивчається взаємодія точкових дефектів з сформованими петлями і теорії швидкісних реакцій. Застосування останньої враховує виникнення петель безпосередньо з кластерів, поглинання петлями вакансій та міжвузлів, враховується швидкості надходження дефектів до петель, з виключенням дефектів, що знаходяться у рівновазі з петлями, а також внесок границь зерен та дислокаційної сітки у процеси адсорбції точкових дефектів [71]. Це надає можливість оцінити виникнення напружень по вісям кристалічної системи та описати експериментальні дані щодо радіаційного росту кристалів [65–67].

Особливості формування пор в металах та їх еволюція сильно залежить від опромінюваної мішенні та виду опромінення (нейтронами, електронами, іонами), температури опромінення, від пересичення вакансіями об'єма матеріалу та стоків точкових дефектів. Формування пори як і дислокаційної петлі є наслідком кластеризації вакансій у опромінених матеріалах. Цей процес супроводжується адсорбцією дислокаціями міжвузлів швидше ніж вакансій, а також стабілізацією зародків вакансійних кластерів атомами газу (гелію) при проходжені трансмутаційних реакцій. Оскільки міжвузля зникають з системи раніше ніж вакансії, тому залишкові вакансії можуть утворювати кластери та формувати зародки пор. Пересичення вакансіями призводить до формування пор відповідно до класичної картини утворення пор в загартованих металах [72]. Експериментальні спостереження щодо формування пор у α -Zr обговорювалися в роботах [73–76]. Було установлено, що пори у α -Zr та його сплавах можуть бути сформовані при нейтронному опроміненні якщо було уведено додатковий гелій у мішень. Також відомо, що пори з'являлися в опромінюваних сплавах Zr-1%Nb, Zr-2,5%Nb (див. [77, 78]), Zircaloy-2 та Zircaloy-4 [79, 80], ZIRLO [81].

Характерною рисою пороутворення є проходження процесів самоорганізації з утворенням ґраток пор, що успадковують структуру матеріалу. Загалом формування ґраток пор пов'язується зі зменшенням внутрішніх напружень, що виникають при утворенні пор. Типова картина формування ґраток пор при електронному опроміненні CaF_2 наведено на рис.1.3а. У металах решітки пор спостерігалися як при електронному опроміненні з енергіями до 2МeВ так і при іононому опроміненні [43, 68, 82] (див. рис.1.3). Макроскопічним наслідком пороутворення у матеріалах є їх розпухання — збільшення об'єму кристалу та зміна механічних властивостей (окрихчення та руйнування конструкцій).

Розглядаючи розпухання, враховуються два окремих процеси: (1) нуклеація пори; (2) ріст пори. Використовуючи теорію нуклеацій [83, 84], отримуються швидкість нуклеації пор, функція розподілу пор, стаціонарний потік нуклеацій. Використовуючи швидкісну теорію [43, 71, 85, 86] для вивчення росту пор, знаходиться середня густина точкових дефектів в опроміненому зразку, утворення дефектів та їх анігіляція/рекомбінація, втрата дефектів на мікроструктур-

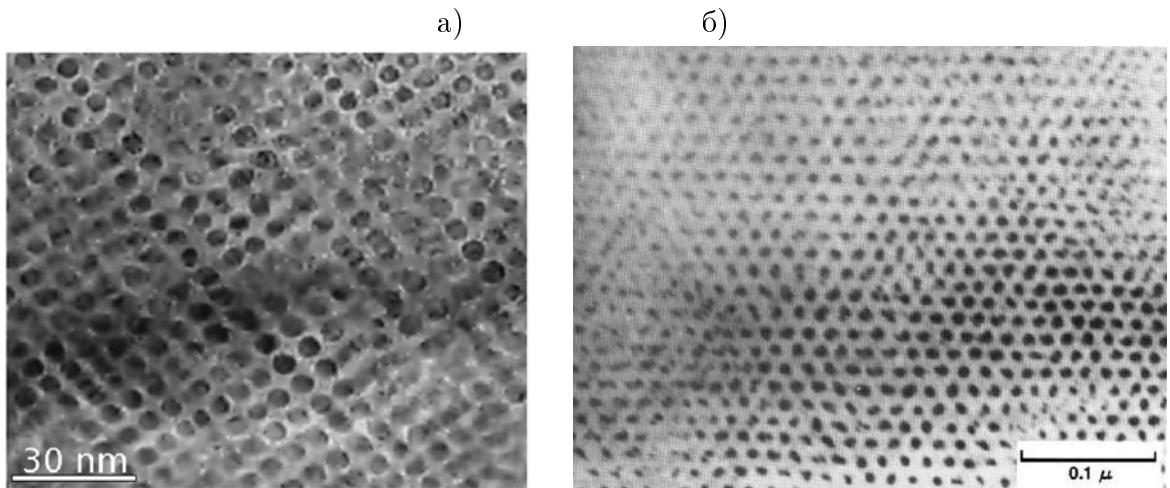


Рис. 1.3. Гратка пор у опроміненному електронами CaF_2 (а) та у опроміненому іонами Ni^+ з енергією 2МeВ кристалу Mo при дозі 100з.н.а. при температурі 1140 K Рисунок (а) взятий з роботи [82], рисунок (б) – з роботи [43]

них стоках (дислокаціях, порах). Загалом, швидкість росту пори, що описує розпухання, визначається різницею між абсорбцією вакансій та міжвузлів на поверхні пори [87, 88]. На сьогодні теорія розпухання пор є добре розвинutoю. Наприклад, її було розвинено шляхом введення в розгляд теорії фазового поля для опису формування пор та їх росту (див. роботи [89, 90]). У більшості випадків розпухання описується в межах однорідної системи точкових дефектів. При цьому, стохастичними ефектами структурного безладу, що виникли в результаті опромінення зазвичай нехтують в цих підходах.

1.1.3. Фазове розшарування бінарних систем підданних опроміненню.

У останні десятиліття численні експериментальні дані показують, що сплави піддані опроміненню зазнають фазові переходи, процеси фазового розшарування, формування структур з упорядкуванням точкових дефектів у об'ємі та на поверхні [91–96]. Перші дослідження процесів упорядкування-розупорядкування у опромінених сплавах обговорювались у роботі [97].

Виникнення точкових дефектів, що на декілька порядків перевищують їх рівноважну концентрацію приводить до посилення рухливості атомів сплаву, спричиняючи радіаційно-індуковані процеси сегрегації, розшарування та композиційного структурування, де визначальним стає зворотній ефект Кіркендала. За останні роки виявилося, що опис процесів розпаду бінарних си-

стем (сплавів) за вакансійним механізмом описується з урахуванням теорії Даркена [98]. При цьому, припущення Даркена про наявність лише рівноважних вакансій може бути узагальнено на випадок опромінення з урахуванням швидкісної теорії. Вплив нерівноважних вакансій на процеси поділу фаз вивчався у роботах [99–103], де показано, що наближення Даркена є справедливим, якщо дифузійна довжина істотно перевищує довжину вільного пробігу вакансій. Було встановлено, що у реальних сплавах, що зазнають спінодального розпаду, дифузійна довжина (період ламеллярної структури на початковій стадії розпаду $\sim 10^{-8}$ м) істотно менше за довжину вільного пробігу вакансій ($\sim (10^{-7} \div 10^{-6})$ м). Тому при описі процесу випадіння фаз має враховуватися внесок нерівноважних вакансій при їх розподілі між ламелями, викликаний відмінністю власних коефіцієнтів дифузії атомів компонент сплаву. Важливо, що при опроміненні у системі завжди будуть виникати нерівноважні вакансії внаслідок генерування структурного безладу (радіаційних пошкоджень), які безпосереднім чином враховуються за допомогою швидкісної теорії. У роботах [1, 2, 47, 48, 104] де було показано, що при пересиченні вакансіями відбувається їх організація у стійкі просторові структури. Дослідження уповільнення процесу розпаду нерівноважними вакансіями в неопромінюваних системах проводилося у роботі [103] на початковій стадії розпаду. Однак, картина спінодального розпаду та самоорганізації вакансійної підсистеми при сталій дії опромінення не була описана.

Експериментальні спостереження спінодального розпаду бінарних сплавів ($Ni - Cu$, $Fe - Ni$), підданих опроміненню показали, що електронне опромінення може збільшити рухливість атомів сплаву у результаті фазового розпаду при таких температурах, коли дифузія у звичайних умовах замала для забезпечення даного ефекту (див. приклад роботи [105, 106]). Такі ж результати були отримані для сплавів $Au - Ni$, $Cu - Ni$, $Fe - Mo$ з різними композиціями [107–109]. Для $Au - 20, 30, 70, 80\%Ni$ сплавів, що піддаються опроміненню електронами енергіями вище 1МeВ, були знайдені найбільші значення температури когерентної спінодалі та побудована фазова діаграма 1.4а. Установлено, що фазове розшарування в опромінених системах може проходити при темпе-

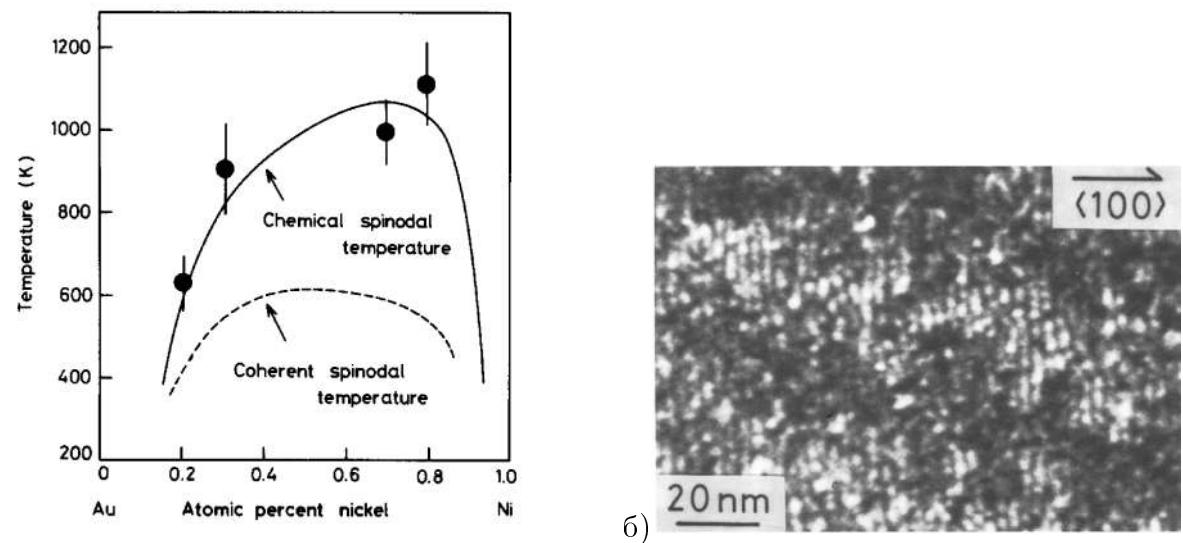


Рис. 1.4. а) фазова діаграма $Au - Ni$ для температур хімічної та когерентної спінодалі та значення насичення температур спінодалі при електронному опроміненні; б) мікрофотографія опроміненого сплаву $Ni - Au$. Рисунки взяті з роботи [109]

ратурах вище за когерентну спінодаль. Даний ефект може бути описаний генерацією точкових дефектів зі збільшенням їхньої рухливості у дислокаціях у такий спосіб, що дислокації невідповідності рухаються з композиційного поля під час еволюції системи, зменшуючи напруження гратниці. Для отримання типової картини розподілу дефектів у структурі була використана електронна мікроскопія. Опромінювався сплав $Au - 30\%Ni$ електронами (1-МеВ) при кімнатній температурі після того, як його модульована структура була індукована опроміненням при 690К, тобто вище температури когерентної спінодалі без опромінення. Мікрофотографія представлена на рис.1.4б, тут темнопольні області відповідають малим міжузловими петлям.

Відповідна модель динаміки поля густини дислокацій у поєднанні з композиційним полем була запропонована у роботах [110–112]. У даних роботах виявлено, що фазове розшарування можливе вище когерентної спінодалі, що обумовлене рухом дислокацій. Фаза розпаду і структуроутворення яка підтримується динамікою дислокаційного поля поєднаною з композиційним полем в бінарних системах під сталою дією опроміненням вивчалася у роботі [113]. У ній вплив опромінення був розглянутий з урахуванням додаткового вкладу у повну вільну енергію у залежності від моделі запропонованої в [114–117]. У даній моделі опромінення описується шляхом введення балістичного потоку, що

призводить до атермального перемішування атомів при утворенні структурного безладу. У роботі [113] показано, що стабільні структури, які характеризуються амплітудою не залежною від часу і довжини хвилі, які виникли у зв'язку з дислокаціями невідповідності, здатні зменшити когерентні напруги, що виникають через невідповідність розміру атомів. У запропонованій авторами моделі вивчається детерміністичний випадок де опромінення збільшує повну вільну енергію системи. Проблема, пов'язана з описом ефектів, викликаних флюктуаціями концентрації точкових дефектів і локальними флюктуаціями температури, що спостерігаються у каскадах, не вирішена для систем з рухомими дислокаціями.

1.2. Методи моделювання радіаційних ефектів та еволюції дефектів в опромінених матеріалах

1.2.1. Мульти масштабний підхід числового моделювання.

Одним з перспективних підходів до дослідження радіаційних пошкоджень в опромінюваних матеріалах є багатомасштабне моделювання. Такий підхід дозволяє вивчати процеси формування дефектів, їх динаміку, кластеризацію та зміну фізичних та механічних властивостей, обумовлених реорганізацією дефектної структури на різних масштабах часу та довжини при сумісному розгляді поведінки системи на всіх рівнях опису з відповідною самоузгодженою передачею даних між рівнями опису. Серед методів, що використовуються у багатомасштабному моделюванні, можна виділити: розрахунки з перших принципів (*ab-initio*), моделювання методами молекулярної динаміки, моделювання методами фазового поля кристалу, моделювання просторової динаміки концентрацій точкових дефектів в рамках теорії швидкісних реакцій, моделювання Монте-Карло та розрахунки, засновані на методах статистичної механіки. Підхід багатомасштабного моделювання дозволяє передбачати та досліджувати поведінку вже експлуатуючихся структурних матеріалів. Його може бути використано задля розроблення нових матеріалів, експлуатованих у екстремальних умовах.

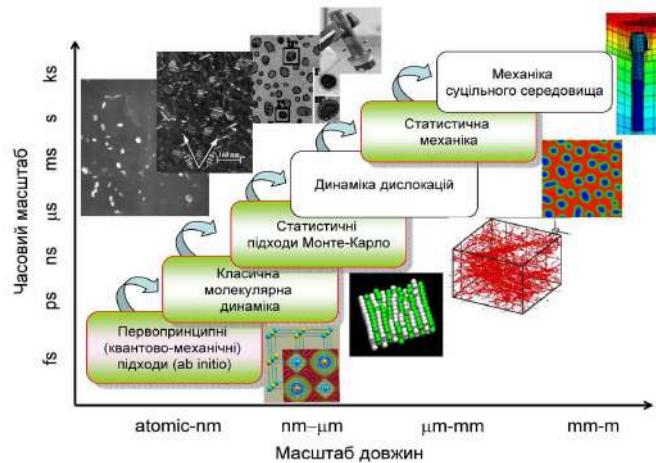


Рис. 1.5. Загальна схема мультимасштабного моделювання поведінки високотемпературних матеріалів.

мальних нерівноважних умовах. Схему багатомасштабного моделювання подано на рис. 1.5. Реалізація такої багатомасштабної процедури моделювання є досить амбітною проблемою, яка потребує величезної бази даних параметрів структурних елементів, розробки відповідних обчислювальних кодів, що використовують результати обчислень на попередніх ієрархічних рівнях опису, та великих обчислювальних ресурсів. Розглядаючи деякі вузькі задачі, пов'язані з вивченням особливих аспектів вищезгаданих явищ, в більшості випадків можна використати комбінацію декількох підходів цієї схеми. Так, наприклад, формування та динаміки дефектів можуть бути вивчені шляхом об'єднання принаймні декількох методів, а саме *ab-initio* обчислення та молекулярну динаміку [48,118], чи молекулярну динаміку та підходи Монте-Карло. Деякі гіbridні методи, такі як метод фазового поля кристала [119–121] можуть бути використані для опису формування структурного безладу, руху точкових та лінійних дефектів (дислокацій), а також петворень на мікро- та мезоскопічних масштабах [122–124]. Комбінація теорії фазового поля та теорії пружності, як показано в роботах [125–128], дозволяє досліджувати зміну пружних напружень при формуванні дефектів в сплавах [129]. Самоузгоджені підходи, що поєднують теорію фазового поля та динаміки дислокаций [130–132] були застосовані для вивчення впливу рухливих дислокаций на процеси фазового розшарування. Комбінація кінетики Монте-Карло та континуальних підходів, дозволяє вивчити формування просторово-часових структур на поверхні опромінених

зразків. Це дає результати, що добре узгоджуються з експериментальними даними при спостереженні картини структурування на поверхні опромінюваного зразка [35, 133, 134].

1.2.2. Мікрокопічні методи числового моделювання.

В рамках підходу моделювання з перших принципів проводяться розрахунки структурних, електронних та енергетичних характеристик матеріалів з використанням теорії функціоналу густини [135, 136], апроксимації узагальненого градієнту [137] та методу лінеаризованих приєднаних пласких хвиль [138]. Сутність методу полягає у розв'язанні стаціонарного рівняння Шредінгера при врахуванні теореми Кона-Шема, що дозволяє описати поведінку не хвильовими функціями, а електронними густинами [139, 140]. Цей метод дозволяє отримати енергетичні та структурні властивості досліджуваних систем, з'ясувати особливості утворення кластерів дефектів, та дослідити стійкість виділень нових фаз, вплив легуючих елементів та модулі пружності тощо. До недоліків даного підходу слід віднести обмеженість системи за розміром та низькими температурами.

В рамках моделювання процесів методами молекулярної динаміки, опис руху частинок здійснюється за допомогою основного рівняння руху класичної механіки $m_i d^2 \mathbf{r}_i / dt^2 = \mathbf{F}_i^{(ext)} - \partial U_i / \partial \mathbf{r}_i$, де $\mathbf{F}_i^{(ext)}$ — вектор рівнодійної усіх зовнішніх сил, які діють на i -й атом; \mathbf{r}_i — радіус-вектор i -го атома; m_i — маса i -го атома; U_i — потенціальна енергія i -го атома. При моделюванні методами молекулярної динаміки основною проблемою є вибір або побудова потенціалу міжатомової взаємодії. Останнім часом в задачах моделювання кристалічних металів для побудови потенціалу взаємодії доволі часто використовується модель зануреного атому (Embedded Atom Model—EAM) [141]. Потенціал, що одержується в рамках такого методу заснований на експериментальних даних та/або даних розрахунків з перших принципів. Згідно з цим методом повна потенціальна енергія i -го атому визначається наступним чином: $U_i = F_\alpha \left(\sum_{j \neq i} \rho(\mathbf{r}_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_\alpha \beta \mathbf{r}_{ij}$, де \mathbf{r}_{ij} — вектор, що з'єднує i -й та j -й атоми; $\phi_\alpha \beta \mathbf{r}_{ij}$ функція парного потенціалу; $\rho(\mathbf{r}_{ij})$ — внесок до густини заряду

електронів від j -го атома у місці розташування i -го атома; F_α — функція “занурення”, яка представляє енергію, необхідну для поміщення i -го атома в електронну хмару. Метод молекулярної динаміки широко використовується для моделювання каскадних зміщень атомів та взаємодії дефектів між собою. Недоліком методу є невеликий часовий інтервал, що складає 10^{-8} с. Він кількісно описує дефекти та їх конфігурації у стані первинного пошкодження.

Методи кінетичного Монте-Карло є ідеальним інструментом для вивчення довготривалої еволюції мікроструктури бінарного сплаву на атомному рівні. Він дає можливість з великою ефективністю імітувати такий сплав протягом тривалого фізичного часу, на відміну від молекулярної динаміки, при цьому зберігаючи більшість інформації про тимчасові та атомні кореляції, на відміну від методу фазового поля кристалу. Цей метод повністю виключає поняття траєкторій руху частинок і точно враховує стохастичність процесів. У загальній математичній інтерпретації, припускається, що ймовірність знаходження системи в стані σ в момент часу t це $P(\sigma, t)$ та $W(\sigma, \sigma')$ це швидкість мікроскопічних переходів за одиницю часу від конфігурації σ до σ' . Рівняння еволюції для P є основним рівнянням і має вигляд:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \sum_{\sigma'} P(\sigma - \sigma') W(\sigma - \sigma', \sigma) - \sum_{\sigma'} P(\sigma) W(\sigma, \sigma - \sigma'), \quad (1.1)$$

Кінетичні методи Монте-Карло базуються на результатах молекулярної динаміки на вищому ієрархічному рівні. Ефект швидких динамічних подій враховується за допомогою стохастичних швидкостей переходів для повільних подій. Кожній події i присвоюється швидкість: $v_i = v_{0i} e^{-E_i/k_B T}$, де v_{0i} — частотний префактор, як правило порядок коливальної частоти 10^{13} с⁻¹ для поверхневих процесів, E_i — бар'єр вільної енергії для процесу, а T — температура. Деталі базового механізму кінетичних процесів втрачаються, але уникається явне обчислення атомних траєкторій. До недоліку методу можна віднести необхідність використання мікроскопічних характеристик, які отримуються за допомогою підходів *ab-initio* та молекулярної динаміки.

1.2.3. Мезоскопічні методи числового моделювання.

Особливе місце в мульти масштабному моделюванні відводиться швидкісній теорії, коли концентрації точкових дефектів та їх стоків розглядаються як основні змінні. Вона широко використовується для вивчення розпухання матеріалів при різних нерівноважних умовах, зокрема, при опроміненні. Розглядаючи просторово-часову систему точкових дефектів, можна описати структурування дефектів (формування кластерів дефектів), що мають нанорозмірний діапазон [16, 30, 47, 48], динаміки стоків дислокацій [142], статистику границь зерен [104], та ріст радіусу пор [85, 86, 143–146]. В рамках підходів, заснованих на теорії реакційних швидкостей вдається описати еволюцію концентрації точкових дефектів (вакансій і міжузлових атомів) та відповідних петель. Щі рівняння об'єднуються в клас моделей реакційно-дифузійних систем для дослідження еволюції різних типів дефектів, які беруть участь у формуванні мікроструктури. В рамках цього підходу враховуються основні елементи динаміки дефектів, а саме, генерація точкових дефектів концентрацій c_i , c_v , їх рекомбінація та міграція на стоки густинами ρ_i , ρ_v , ρ_c . Використовуючи цю теорію швидкісних реакцій, можна вивчати нестійкості, що викликані деформаціями, обумовленими взаємодією точкових дефектів [31]. У такому разі дифузійний потік дефектів задається не лише їх вільною дифузією, але й потенціалом взаємодії за рахунок пружних полів, викликаних самими дефектами. Як показано раніше [31], взаємодія дефектів відбувається за рахунок деформації гратниці матриці. При цьому деформаційний потенціал $U_{i,v}$ пов'язаний з пружиною деформацією середовища визначимо як $U_{i,v} = -\kappa\Omega^{-1}\varpi_{i,v}e$, де $e \equiv \nabla \cdot \mathbf{u}$ пружна деформація континууму, \mathbf{u} вектор зміщення, κ об'ємний модуль пружності, $\varpi_{i,v}$ параметр дилатації, еквівалентний атомному об'єму Ω . Дефекти в кристалі призводять до деформації середовища, яку можна визначити з рівняння рівноваги: $\rho\partial_{tt}^2u_i = \nabla_k\sigma_{ik}$, $\sigma_{ik} = \partial\mathcal{F}_{ec}/\partial u_{ik}$ де тензор напружень σ_{ik} знаходиться через вільну енергію пружного континууму $\mathcal{F}_{ec} = \frac{\kappa}{2}u_{ll} + \mu_0(u_{ik} - \frac{\delta_{ik}}{2}u_{ll})^2 + \kappa(\varpi_v c_v + \varpi_i c_i)u_{ll}$. Тут μ_0 модуль зсуву, u_{ik} тензор деформації. У адіабатичному наближенні вектор зміщення \mathbf{u} задовольняє співвідношенню $\nabla \cdot \mathbf{u} = \varpi_{i,v}c_{i,v}$ [31]. Тому для потенціалу деформації маємо $U_{i,v} = -\kappa\Omega^{-1}\varpi_{i,v}^2c_{i,v}$. Це приводить до виникнення

деформаційних нестійкостей, відповідальних за проходження структуроутворення дефектів при перевищенні критичного пересичення.

Оскільки кожний новий каскад атомових зміщень генерує нову дефектну структуру, що опромінюється, загалом, кількість дефектів у такому новому середовищі змінюється, що приводить до припущення про стохастичність процесу генерування дефектів, тобто швидкість пошкоджень стає випадковою величиною. Цей ефект може бути включений в розгляд шляхом введення стохастичного внеску ζ до генерацію точкових дефектів в каскадах. У теорії швидкісних реакцій розглядається математичні моделі для вектору станів $\mathbf{x} = \{c_i, c_v, \rho_i, \rho_v, \rho_c, \dots\}$, що описуються загальним рівнянням Ланжевена вигляду: $\partial_t \mathbf{x} = f(\mathbf{x}, t, \nabla) + g(\mathbf{x}, t, \nabla)\zeta$, де $f(\mathbf{x}, t, \nabla)$ описує детерміновані механізми поведінки дефектів та їх дифузію ($\nabla \equiv \partial/\partial \mathbf{r}$), $g(\mathbf{x}, t, \nabla)\zeta$ — подає стохастичну компоненту еволюції вектору станів. Оскільки динаміка системи є стохастичною, то такий узагальнений підхід відповідає моделюванню Монте-Карло, при цьому його перевагою є можливість опису системи на довжинах до декількох мікрометрів і часовому масштабі, що істотно перевищує дифузійний.

Моделі такого класу застосовуються для вивчення процесів сегрегації, структурування та поділу фаз а опромінюваних кристалічних системах, та загалом при дослідженні мікроструктурних перетворень, що ґрунтуються на теорії Кана-Хільярда, Алена-Кана та підходів Даркена. У таких підходах розглядається збережна динаміка композиційного поля $c(\mathbf{r}, t)$, що описується рівнянням неперервності $\partial_t c = -\nabla \cdot \mathbf{J}$, де дифузійний потік $\mathbf{J} = -M\nabla\delta\mathcal{F}/\delta c$, задається функціоналом вільної енергії \mathcal{F} , який може залежати не тільки від композиційного поля, але й від концентрації точкових дефектів та/або від густини дислокацій, локальних деформацій, параметрів порядку (фазового поля) тощо; M — рухливість. Рівняння для композиції за необхідності доповнюються рівняннями динаміки концентрації дефектів, що складають вектор \mathbf{x} .

У польових моделях, що ґрунтуються на теорії Кана-Хільярда [147] вплив опромінення представляється у вигляді збільшення повної вільної енергії \mathcal{F} внаслідок балістичного переміщування атомів, викликаного проходженням каскадів [114]. Такі моделі ґрунтуються на введенні в рівняння еволюції кон-

центрації розчину складової просторової взаємодії, що відповідає за процеси балістичного атомового перемішування в умовах опромінення. Це надало можливість увести у розгляд адитивний зовнішній шум, що імітує стохастичне балістичне перемішування [117]. Слід зазначити, що такий підхід не враховує належним чином флюктуації розчину при стохастичному русі дефектів в каскадах. Оскільки ці флюктуації відбуваються в корельованому середовищі (кристалах), то слід розглядати їх відповідні просторові кореляції. Інша модель балістичного перемішування розглядалася в роботах [41, 148, 149]. В них було показано, що стохастичне балістичне перемішування має стохастичну природу, обумовлену випадковим рухом вибитих атомів на певну відстань. Відповідно до цього підходу, балістичне перемішування може бути описано введенням балістичного дифузійного потоку $\mathbf{J}_b = -D_b^0 \nabla c$ з флюктуаційним балістичним дифузійним коефіцієнтом $D_b^0 \rightarrow D_b + \zeta(\mathbf{r}, t)$ (обумовленим флюктуаціями концентрації дефектів та локальних температурних флюктуацій), де ζ – випадкова функція опису ялуктуацій. В роботі [150] було показано, що такий підхід приводить до мультиплікативного шуму, де просторово корельовані зовнішні флюктуації пов'язані з корельованим середовищем, яке сприяє потоку розчину протилежного звичайному дифузійному потоку. Фазовий розпад бінарної системи при вищенаведених припущеннях було вивчено в роботах [151, 152], процес структуроутворення в однокомпонентних кристалічних системах піддані опроміненню в роботах [122, 123]. В роботах [123, 152] було враховано різні часові масштаби для термічного дифузійного потоку та балістичного потоку, відповідно до формалізму нелокальних збурень [153, 154].

У попередніх дослідженнях мікроструктурних перетворень в опромінених твердих тілах було показано, що флюктуації швидкості генерації дефектів в нелінійних системах можуть змінити не тільки динаміку концентрацій точкових дефектів, а й привести до мікроструктурних перетворень, що не реалізуються при детерміністичних умовах (наприклад, реверсивні фазові переходи) [2, 48, 122, 123, 129, 151, 152]. Флюктуації швидкості набору дози, що викликані налітанням частинок (нейтронів, іонів), що мають розподіл за енергіями, призводять до виникнення різної кількості дефектів при проходженні каскадів

(стохастичне формування структурного безладу). Тому, введення відповідних зовнішніх флюктуацій (шуму) в модель динаміки точкових дефектів та результати аналізу можуть дати краще пояснення процесів росту пор та еволюції мікроструктури, в цілому.

Властивості стохастичного утворення дефектів в опромінених матеріалах і стохастичного формування дефектів пакування тетраедрів (вакансійні кластери) були розглянуті в роботі [155]. Стохастичне характер дифузії точкових дефектів у процесі атомового переміщування внаслідок дії опромінення був запропонований у роботі [150], де передбачалося, що відповідне стохастичне атермічне переміщування атомів, вперше уведене в роботах [41, 45], може бути описане як просторово-корельований випадковий процес, що дає приводить до виникнення ефективний потік протилежний термічно-стимульованому. Ця ідея була використана при вивчені процесів упорядкування, структурування і фазового поділу у опромінених матеріалах [122–124, 151]. В такому випадку відповідні флюктуації викликані зовнішнім впливом (флюктуації довжин стрибків вибитих атомів, розкид частинок частинок в опромінюваному потоці тощо), розглядаються як зовнішній шум. З іншого боку, системи з процесами народження-смерть чи “хімічні реакції” (продуктування дефектів та їх анігіляція), що є дисипативними за своєю природою, містять внутрішнє джерело флюктуацій, що спричиняє їх дисипативну динаміку відповідно до флюктуаційно-дисипативної теореми [156, 157]. Ці джерела, відомі, як внутрішні шуми визначаються інтенсивністю пропорційній тепловій бані. Важливим є той факт, що внутрішні шуми в розподілених системах можуть спричиняти ентропійно-керовані фазові переходи, коли на ранніх стадіях еволюції шум приводить до стабільності неупорядкованого стану, а на великих часових інтервалах (у стаціонарному випадку) переводити систему до іншого макроскопічного стану (фазу, для розподілених систем), що не спостерігається за детерміністичних умов [158–164]. Його вплив на розташування вакансійного ансамблю було теоретично вивчено в роботах [47, 48], в них було показано, що залежно від властивостей внутрішнього шуму морфологія структур вакансій може змінюватися.

1.3. Висновки до розділу 1

Процеси еволюції дефектної структури є визначальними у мікроструктурних перетвореннях, індукованих опроміненням металів та сплавів і впливають на зміну їх фізичних та механічних властивостей. Знання про поведінку такого статистичного ансамблю дефектів дозволяють дослідити та виявити механізми мікроструктурних перетворень в опромінюваних матеріалах. Вони є корисними задля прогнозування поведінки як чистих матеріалів, так і сплавів. Із проведеного літературного огляду випливає, що незважаючи на досягнення у цьому напрямку є певне коли відкритих проблем, що потребують вирішення, зокрема:

- з теоретичної точки зору не достатньо вивчено характер кластеризації точкових дефектів з деформаційними нестійкостями у режимах опромінення у реакторах та на прискорювачах, не з'ясовано вплив флюктуацій різної природи на процеси структуроутворення точкових дефектів та росту дислокаційних петель;
- не проведено детального теоретичного опису процесів формування кластерів дефектів на початкових стадіях (малих дозах), де можливими стають процеси відбору структур внаслідок нелінійного зв'язку температури та концентрації дефектів та при виникненні деформаційних нестійкостей при пересиченні дефектів;
- не проведено відповідних досліджень впливу флюктуацій швидкості пошкоджень на динаміку росту розмірів пор та не досліджено вплив швидкості пошкодження на універсальність процесу росту пор;
- узагальнення та розвинення підходів Кана-Хільярда з урахуванням кінетики точкових дефектів, що продукуються в каскадах, та їх перерозподіл з утворенням дисипативних структур надасть можливість описати кінетику спінодального розпаду та самоорганізації вакансійної підсистеми при сталій дії опромінення;

- задача, пов'язана з описом ефектів, викликаних флюктуаціями концентрації точкових дефектів і локальними флюктуаціями температури, що спостерігаються в каскадах, не вирішена для систем з рухомими дислокаціями.

Це дисертаційне дослідження спрямовано на вирішення задач у поставленому переліку відрітих питань.

РОЗДІЛ 2

ФОРМУВАННЯ НАНОРОЗМІРНИХ СТРУКТУР ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ ПІД ДІЄЮ ОПРОМІНЕННЯ

У даному розділі на основі розвиненої швидкісної теорії, яка враховує процеси взаємодії точкових дефектів, проводиться дослідження процесів формування скупчень дефектів вакансійного типу у припущення про швидкоплинність процесів руху міжвузлів та їх вихід на стоки. У підрозділі 2.1 показано, що за умови врахування процесів генерації дефектів пружнім полем самих дефектів в такій системі можливими стають бістабільні стаціонарні стани. Проаналізовано типи структур дефектів та знайдено умови їх реалізації при варіюванні швидкості дефектоутворення та температури опромінення. Розвинута детерміністична модель узагальнюється урахуванням флюктуацій швидкості пошкоджень відповідно до флюктуаційно-дисипаційної теореми. Швидкість дефектоутворення варіюватиметься від значень, що відповідають лазерному опроміненню до значень опромінення на прискорювачах. Проводиться дослідження впливу стоків на динаміку структуризації вакансій у кластери та аналізується динаміка стоків. Особливості впливу петель вакансійного та дислокаційного типів на характер структуризації вакансійного ансамблю досліжується у підрозділі 2.2. Проводиться вивчення формування упорядкованого стану з утворенням кластерів вакансій методами теорії середнього поля за наявності флюктуацій швидкості набору дози.

2.1. Кластеризація дефектів вакансійного типу при сталій дії опромінення

У даному підрозділі представлено узагальнений статистичний підхід опису процесів організації точкових дефектів вакансійного типу у кластери на прикладі нікелю в рамках швидкісної теорії, що враховує генерацію дефектів пружними полями та взаємодією дефектів. Формулюється загальна модель динаміки дефектів. Проводиться дослідження умов виникнення структур дефектів у

робочих режимах опромінення в реакторах та характеру зміни мікроструктури при варіюванні температури та швидкості набору дози при сталій інтенсивності стоків.

2.1.1. Динамічна модель системи точкових дефектів.

У рамках використання підходів швидкісної теорії динаміки радіаційно-продуковані дефектів, до яких будемо відносити лише точкові (вакансії та міжвузлові атоми), описується рівняннями виду [16]:

$$\begin{aligned}\partial_t c_i &= K(1 - \varepsilon_i) - D_i S_i c_i - \alpha_r c_i c_v, \\ \partial_t c_v &= K(1 - \varepsilon_v) - D_v S_v (c_v - c_{0v}) - \alpha_r c_i c_v.\end{aligned}\quad (2.1)$$

Тут c_v та c_i — концентрації вакансій та міжвузлів відповідно; $c_{0v} = e^{-E_v^f/T}$ — рівноважна концентрація вакансій, визначена через енергію формування вакансії E_v^f та температуру T , виміряну в енергетичних одиницях; K — швидкість набору дози; $\varepsilon_{v,i}$ — інтенсивності колапсу каскаду при формування петель міжвузлового та вакансійного типів, відповідно; $D_{v,i} = D_{v,i}^0 e^{-E_{v,i}^m/T}$ — коефіцієнти дифузії вакансій та міжвузлів, енергією міграції дефекту $E_{v,i}^m$. Інтенсивності стоків двох типів точкових дефектів $S_{v,i}$ визначаються густинами дислокаційної сітки ρ_N , та густинами вакансійних та міжвузлових петель $\rho_{v,i}$ та інших стоків з преференсом $Z_{\{\cdot,\cdot\}}$ — перевагою взаємодії міжвузлових атомів по відношенню до вакансій. У загальному вигляді для стоків маємо: $S_{v,i} = Z_{\{v,i\}N} \rho_N + Z_{\{v,i\}V} \rho_v + Z_{\{v,i\}I} \rho_i$, де $Z_{vN} = Z_{vI} = Z_{vV} = 1$, $Z_{iN} = 1 + B$, $Z_{iI} \simeq Z_{iV} \simeq 1 + B'$, $B' \geq B$, $B \simeq 0.1$. Рекомбінація точкових дефектів задається коефіцієнтом $\alpha_r = 4\pi r_0(D_i + D_v)/\Omega$, де r_0 — радіус взаємодії дефектів, Ω — атомний об'єм. У даному розділі під стоками розуміються лише дислокаційні петлі, густини яких задаються рівняннями виду [30, 165]:

$$\begin{aligned}\partial_t \rho_i &= \frac{2\pi N}{b} (\varepsilon_i K + D_i Z_{iI} c_i - D_v Z_{vI} (c_v - c_{0v})) \\ \partial_t \rho_v &= \frac{1}{b r_v^0} (\varepsilon_v K - \rho_v [D_i Z_{iV} c_i - D_v Z_{vV} (c_v - c_{0v})]).\end{aligned}\quad (2.2)$$

Де \vec{b} — вектор Бюргерса з модулем $b \equiv |\vec{b}|$, r_v^0 — це початковий радіус вакансійних петель, N — густина.

При переході до знерозмірених змінних скористаємося визначеннями $S_{v,i} = Z_{\{v,i\}N}\rho_N(1 + \rho_v^* + \rho_i^*)$, $\rho_{v,i}^* \equiv \rho_{v,i}/\rho_N$, де для часової змінної маємо $t' \equiv t\lambda_v$, $\lambda_v \equiv D_v Z_{vN} \rho_N$, перемасштабована концентрація дефектів $x_{i,v} = \gamma c_{i,v}$ задається $\gamma \equiv \alpha_r/\lambda_v$, $P \equiv \gamma K/\lambda_v$ — перенормована швидкість набору дози. Використовуючи позначення $\mu \equiv (1 + \rho_v^* + \rho_i^*)$, $Z_{iN}/Z_{vN} = 1 + B$ та приймаючи, що коефіцієнти дифузії вакансій та міжвузлів різняться на декілька порядків, можна ввести параметр малості $D_v/D_i \equiv \epsilon \ll 1$ для опису різниці часових інтервалів еволюції двох типів дефектів. В адіабатичному наближенні можемо вилучити концентрацію міжвузлів, приймаючи $\epsilon \partial_t x_i \simeq 0$. Отримуємо вираз для концентрації міжвузлів $x_i = P(1 - \varepsilon_i)/[(1 + B)\mu/\epsilon + x_v]$. У такому випадку ми приходимо до системи з трьох рівнянь: одне для еволюції вакансій $x \equiv x_v$ та два інших для густин петель; далі ми опустимо штрихи.

Слід зазначити, що утворення дефектів носить термофлуктуаційний характер і його ймовірність зростає з підвищеннем температури (інтенсивності опромінення) або густиною дефектів [31]. Як було показано в роботі [32] останнє пов'язано зі зміною висоти активаційного бар'єру утворення дефекту за рахунок пружної деформації середовища, обумовленої самими дефектами. У такому разі для врахування такого ефекту до рівняння еволюції для x слід додати складову, що описує генерацію дефектів за цим механізмом. Вона має вигляд $G \exp(-E/T)$, де $G = p\omega_D \gamma / \lambda_v$ — частотний фактор, визначений через дебайську частоту ω_D та ймовірність реалізації цього процесу $p \sim 10^{-6}$, $E = E_m^f + E_v^m - E^e(\bar{r})$ — енергія активації, що зменшується за рахунок поля деформації $E^e(\bar{r})$, що утворюється самими дефектами. Припускаючи зв'язок між середньою відстанню між дефектами та концентрацією у вигляді $\bar{r} = x^{-1/3}$ та слідуючи роботі [32], цей доданок має вигляд $G \exp(\varepsilon x/(1+x^2))$, де $\varepsilon \equiv 2ZE_0^e/T$ задається характерною енергією поля деформацій E_0^e та координаційним числом Z . Незважаючи на той факт, що такий внесок у динаміку дефектів суттєвий при лазерному опроміненні (при малих швидкостях набору дози), а при опроміненні частинками він є малим внаслідок каскадного механізму формування дефектів, у подальшому розгляді, без втрати загальності, ми залишаємо його.

З фізичної точки зору, вакансії є рухливими, тому враховуємо їх потік. Загалом, він складається із фіківської компоненти $-L_d^2 \nabla x$ з дифузійною довжиною $L_d^2 \equiv D_v/\lambda_v$ та компоненти, яка описує взаємодію дефектів. У випадку стаціонарного потоку маємо

$$\mathbf{J} = -L_d^2 \nabla x + \mathbf{v}x. \quad (2.3)$$

Тут друга складова описує рух дефектів зі швидкістю $\mathbf{v} = (L_d^2/T)\mathbf{F}$ під дією сили $\mathbf{F} = -\nabla U$, викликаної взаємодією дефектів. Потік \mathbf{J} можна переписати у канонічній формі $\mathbf{J} = -L_d^2 M(x) \nabla \mu(x)$, де $M(x) = x$ — рухливість, $\mu(x) = \delta \mathcal{F}/\delta x$ відіграє роль хімічного потенціалу. Тоді, відповідний функціонал вільної енергії набирає вигляду

$$\mathcal{F} = \int d\mathbf{r} f(x(\mathbf{r})) - \frac{1}{2T} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' x(\mathbf{r}) \tilde{u}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') x(\mathbf{r}') \quad (2.4)$$

з густину вільної енергії, що описує вільний газ частинок $f(x) = x(\ln x - 1)$, друга складова характеризує парні взаємодії у наближенні самоузгодженості [47, 166, 167]. Для потенціалу пружного поля можемо записати

$$U = - \int \tilde{u}(r, r') x(r') dr', \quad (2.5)$$

де $-\tilde{u}(r)$ — притягуючий потенціал для двох частинок (дефектів), розділених відстанню r . Він вибирається у симетричній формі в околі дефекту: $\int \tilde{u}(r) r^{2n+1} dr = 0$. Якщо поле $x(r)$ не змінюється суттєво на відстані взаємодії дефектів $r_0 \simeq \Omega^{1/3}$, то можна скористатися розвиненням в ряд до другого незникаючого члена, тобто

$$\frac{1}{T} \int d\mathbf{r}' \tilde{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') x(\mathbf{r}') \simeq \varepsilon(x + r_0^2 \nabla^2 x). \quad (2.6)$$

Перший член в (2.6) приводить до стандартного співвідношення між потенціалом пружного поля $U = - \int d\mathbf{r}' \tilde{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') x(\mathbf{r}')$ та x в рамках стандартної теорії пружності. Дійсно, потенціал U пов'язаний з вектором зміщень \mathbf{u} у вигляді $U = -\kappa \varpi \nabla \cdot \mathbf{u}$, де $\nabla \cdot \mathbf{u} \propto \varpi x$, κ — об'ємний модуль, ϖ — параметр дилатації [31]. У такому вигляді для ефективного потоку маємо $\mathbf{J} \propto -(1 - \varpi^2 \kappa x/T) \nabla x$. Друга складова у розвинені (2.6) характеризує мікроскопічні процеси взаємодії дефектів на відстані радіусу кореляції (взаємодії) r_0 . У нормальних умовах цей доданок може бути опущений за малістю внеску у порівнянні з дифузійним. Якщо підставити (2.6) у визначення повного потоку (2.3), то можна

бачити, що навіть при врахуванні першого доданку в (2.6) дифузійний потік буде задаватися залежним від поля концентрації коефіцієнтом $(1 - \varepsilon x)$, тобто $\mathbf{J} \propto -(1 - \varepsilon x)\nabla x$, який може змінювати знак залежно від x . Це призводить до розбіжності, яка означає, що однорідний розподіл вакансій, починаючи від критичної швидкості їх формування, пов'язаної з температурою, густину стоків та дилатацією об'єму, стає нестійким. Поява такого направленого потоку приводить до пересичення вакансій та формуванню структур дефектів, як-то пор, тощо. З математичної точки зору така розбіжність не може бути скомпенсована нелінійностями у рівнянні еволюції [47, 166, 167]. Запобігти такій розбіжності можна лише за допомогою врахування другої (взаємодіючої) складової у розвинені (2.6). Таким чином, ця складова має залишатися у розгляді. Як буде видно нижче, саме вона характеризуватиме розмір структур дефектів.

Таким чином, із врахуванням всіх вище зазначених механізмів, приходимо до системи динамічних рівнянь у наступному вигляді

$$\begin{aligned} \partial_t x = & P(1 - \varepsilon_v) - (1 + \rho_i + \rho_v)(x - x_0) \\ & - \frac{P\epsilon(1 - \varepsilon_i)x}{A(1 + \rho_i + \rho_v) + \epsilon x} + Ge^{\frac{\varepsilon x}{1+x^2}} - \nabla \cdot \mathbf{J}; \\ \tau_i \partial_t \rho_i = & \varepsilon_i P + \frac{\tilde{A}AP(1 - \varepsilon_i)}{A(1 + \rho_i + \rho_v) + \epsilon x} - (x - x_0); \\ \tau_v \partial_t \rho_v = & \varepsilon_v P - \rho_v \left(\frac{\tilde{A}AP(1 - \varepsilon_i)}{A(1 + \rho_i + \rho_v) + \epsilon x} - (x - x_0) \right), \end{aligned} \quad (2.7)$$

де перенормований потік дефектів

$$\mathbf{J} \equiv - [\nabla x - \varepsilon x \nabla(x + \ell^2 \nabla^2 x)]. \quad (2.8)$$

Тут враховано перемасштабування просторової змінної $\mathbf{r}' = \mathbf{r}/L_d$ та введено знерозмірену характеру довжину $\ell^2 = \eta_v/L_d^2$ з часовими масштабами: $\tau_i \equiv br_v^0 \rho_N \gamma$, $\tau_v \equiv b\alpha_r \rho_N / 2\pi N D_v$; $\Delta B = B - B'$, $A \equiv 1 + B$, $\tilde{A} \equiv 1 + \Delta B$.

Для подальшого дослідження скористаємося набором даних щодо чистого нікелю [30], наведеними у таб.1. Дифузійна довжина має порядок $L_d \simeq 10^{-6} \div 10^{-7}$ м, тоді як знерозмірений параметр $\ell \ll 1$. Швидкість набору дози для реакторів складає $K \simeq 10^{-6}$ з.н.а./с, для прискорювачів — $K \simeq 10^{-3}$ з.н.а./с; при

Параметр	Значення	Розмірність
E_v^f	1.8	eB
E_v^m	1.04	eB
E_i^m	0.3	eB
E_0^e	$0.01 \div 0.2$	eB
D_v	$6 \cdot 10^{-5} e^{-E_v^m/T}$	$\text{м}^2/\text{с}$
D_i	$10^{-7} e^{-E_i^m/T}$	$\text{м}^2/\text{с}$
c_{0v}	$e^{-E_v^f/T}$	—
ω_D	$1.11 \cdot 10^{13}$	с^{-1}
r_0	$1.5 \cdot 10^{-9}$	м
$\varepsilon_v, \varepsilon_i$	0.1, 0.01	—
ρ_N	$10^{12} \div 10^{15}$	м^{-2}
Ω	$1.206 \cdot 10^{-29}$	м^3

Табл. 1. Основні матеріальні параметри для нікелю

лазерному опроміненні швидкість набору дози є на декілька порядків меншою за реакторну та залежить від потужності лазерних імпульсів.

Розглянемо спочатку однорідну систему у стаціонарному випадку, $t \rightarrow \infty$. У такому разі стаціонарні стани x_s однорідної системи задаються розв'язками рівняння $\partial_t x = 0$. Відповідні залежності при фіксованій температурі подано на рис.2.1а при різних значеннях ймовірності p генерації вакансій полем пружних напружень. Як видно з рис.2.1а за відсутності впливу пружного поля ($p = 0$) концентрація вакансій монотонно збільшується від рівноважного значення c_{0v} і зростає на декілька порядків. У випадку ненульового значення величини p на залежності $c_v(K)$ спостерігається гістерезисний характер, який означає появу бімодальності при реалізації стаціонарних станів. Така особливість проявляється на малих малих швидкостях дефектоутворення, характерних для лазерного опромінення. Вона може проявлятися при додаткових механічних навантаженнях, що підвищують рівень енергії E_0^e . При малих та великих дозах маємо співпадіння стаціонарних залежностей з випадком $p = 0$. Очевидно, що з фізичної точки зору маємо таку картину: починаючи з рівноважної концентрації $c_{0v} = c_v(K = 0, T)$ зростання дози опромінення приводить до утворення нерівноважних вакансій, які при досягненні певної кількості, що відповідає K_b ,

приводять до формування пружного поля, що здатне прискорити швидкість їх утворення. Саме тут відбувається різке збільшення кількості вакансій, яке характеризується стрибком їх концентрації. З подальшим зростанням дози опромінення пружні поля не здатні сильно впливати на процеси генерації дефектів у порівнянні з каскадами, які набирають більшої ефективності при зростаючій швидкості набору дози. Тому, на великих дозах відповідна залежність концентрації вакансій прямує до реперної, що задається умовою відсутності впливу пружного поля на процес генерації вакансій.

Із наведеного випливає, що в інтервалі значень $K \in [K_{b1}, K_{b2}]$ система знаходиться у бістабільному режимі. Бінодалі, якім належать значення K_{b1} та K_{b2} при заданій температурі утворюють фазову діаграму в площині незалежних параметрів швидкість пошкоджень — температура, яка отримується за умови сумісного розв'язку двох рівнянь:

$$R(x_s; K, T) = 0, \quad \left. \frac{\partial R(x; K, T)}{\partial x} \right|_{x=x_s} = 0. \quad (2.9)$$

$$P - \mu x - \frac{Px\epsilon}{A\mu + \epsilon x} + Ge^{\frac{\epsilon x}{1+x^2}} = 0. \quad (2.10)$$

Відповідний результат подано на рис.2.1б, з якого видно, що в області II , що обмежена бінодалями, реалізується бістабільний режим. Області I відповідають унімодальним стаціонарним станам з низькою (при малих K) та високою (великі K) концентрацією дефектів. Слід зазначити, що збільшення ймовірності p навіть на один порядок суттєво розширює область бімодальності на низькі температури, понижуючи критичне значення для K . Така картина характерна для опромінення лазерними імпульсами, коли вплив пружного поля є суттєвим. Якщо порівняти діаграми при варіюванні енергії E_0^e , що фактично відповідає збільшенню механічного навантаження на систему, то маємо аналогічну картину розширення інтервалу температур області бістабільності та зменшення критичного значення дози, при якій такий режим стає можливим завдяки зменшенню потенціального бар'єру формування дефектів при ефективному зростанні енергії пружного поля.

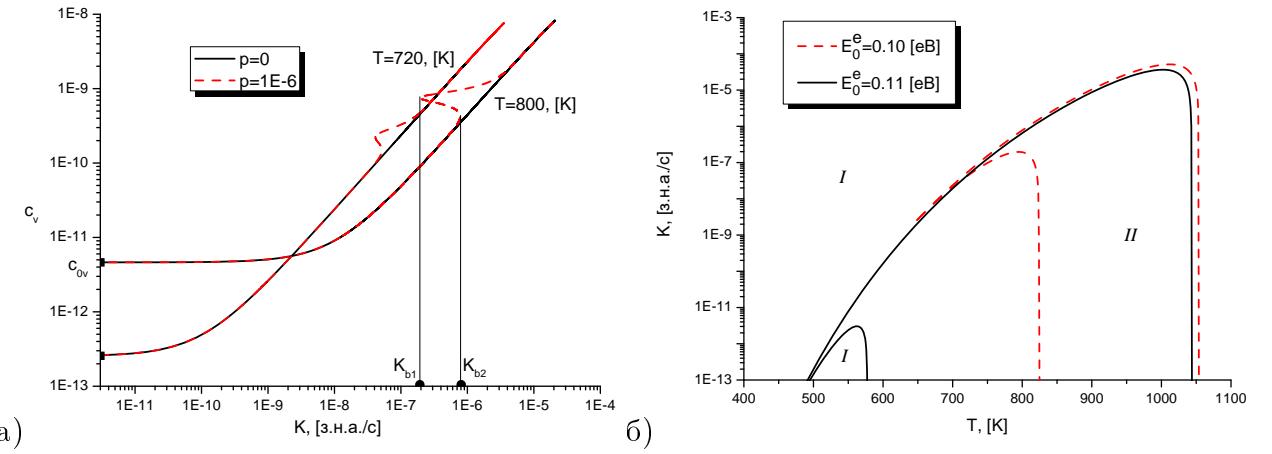


Рис. 2.1. (а) Стационарні залежності концентрації вакансій при різних значеннях температури та ймовірності p при $E_0^e = 0.1$ еВ. (б) Фазова діаграма існування бімодального режиму при $p = 10^{-6}$ та різних значеннях енергії E_0^e . Решту параметрів подано у табл.1, густини дислокаційної сітки — $\rho_N = 10^{14} \text{ м}^{-2}$

Проаналізуємо стійкість стационарних станів до малих збурень, розглядаючи неоднорідну систему. Мале відхилення $\delta x = x - x_s$ від однорідного стационарного стану x_s задовольняє рівнянню

$$\partial_t \delta x = (\Lambda(x_s) + \omega(k; x_s)) \delta x, \quad (2.11)$$

де стійкість однорідного стану відносно однорідних збурень задається показником

$$\Lambda(x_s) = -\mu - \frac{P(1 - \varepsilon_i)\epsilon \mu (1 + B)}{(\mu + \mu B + x_s \epsilon)^2} + G \frac{\varepsilon(1 - x_s^2)}{(1 + x_s^2)^2} \exp\left(\frac{\varepsilon x_s}{1 + x_s^2}\right), \quad (2.12)$$

а стійкість відносно неоднорідних збурень характеризується дисперсійним співвідношенням

$$\omega(k; x_s) = -k^2[1 - \varepsilon x_s(1 - \ell^2 k^2)]. \quad (2.13)$$

Звідси випливає, що нестійкі моди з $\omega(k) > 0$ задаються хвильовими числами $0 < k < k_c$, де критичне значення

$$k_c = \sqrt{\frac{\varepsilon x_s - 1}{\varepsilon x_s \ell^2}} \quad (2.14)$$

визначається за умови $\omega(k) = 0$. У найпростішому випадку $\ell \rightarrow 0$ у області фазової діаграми I всі стани з $x_s > 1/\varepsilon$ є нестійкими по відношенню до неоднорідних збурень з $k_c \rightarrow \infty$, тоді як стани з концентраціями $x_s < 1/\varepsilon$ — стійкі. У

шуканому випадку з $\ell \neq 0$ стани системи з $x_s > 1/\varepsilon$ стають нестійкими, причому відповідні значення хвильових чисел лежать в інтервалі $0 < k < k_c$. У області бімодальності однорідні стани системи завжди є нестійкими по відношенню до неоднорідних збурень. Хвильове число k_0 , що задає найбільш нестійку моду отримується як розв'язок рівняння $d\omega(k)/dk = 0$ та має значення $k_0 = k_c/\sqrt{2}$.

Результати розрахунку залежностей критичного хвильового числа подано на рис.2.2а. З нього видно, що у стандартному випадку $p = 0$ критичне хвильове число зростає від нульового значення ($k^* = 0$) при підвищенні швидкості набору дози від певного критичного значення K_c . Це означає, що при переході через цей поріг в системі виникають просторові структури відстань між якими (період) є нескінченим. З подальшим набором дози виникають нові структури, відстань між якими зменшується і на великих дозах період їх розташування зводиться до ($\sim 10^{-8}$ м). У випадку $p \neq 0$ внаслідок гістерезисної поведінки стаціонарної концентрації маємо картину, коли перша нестійка мода з'являється з ненульовим хвильовим числом $k^* = k_c$ при $K > K_{b1}$. Причому, виникнення просторових структур в бімодальній області фазової діаграми на рис.2.1б відбувається в околі стаціонарного значення c_v , що відповідає метастабільному станові з великою концентрацією; в околі станів з низькою концентрацією вакансій просторових структур дефектів не утворюється. При підвищених температурах (в області бімодальності) втрата стійкості однорідного стану системи дефектів відбувається при більших значеннях хвильового числа та при більших швидкостях пошкоджень. Критичні значення температури та дози які обмежують області існування просторових структур дефектів при $p \neq 0$ подано на рис.2.2б у вигляді пунктирних ліній. Критичні значення K_c та температури для випадку $p = 0$ показано суцільною лінією. В області вище пунктирних ліній (та у відповідних клювах) реалізуються процеси структуроутворення. Для випадку $p = 0$ структури реалізуються вище тонкої лінії.

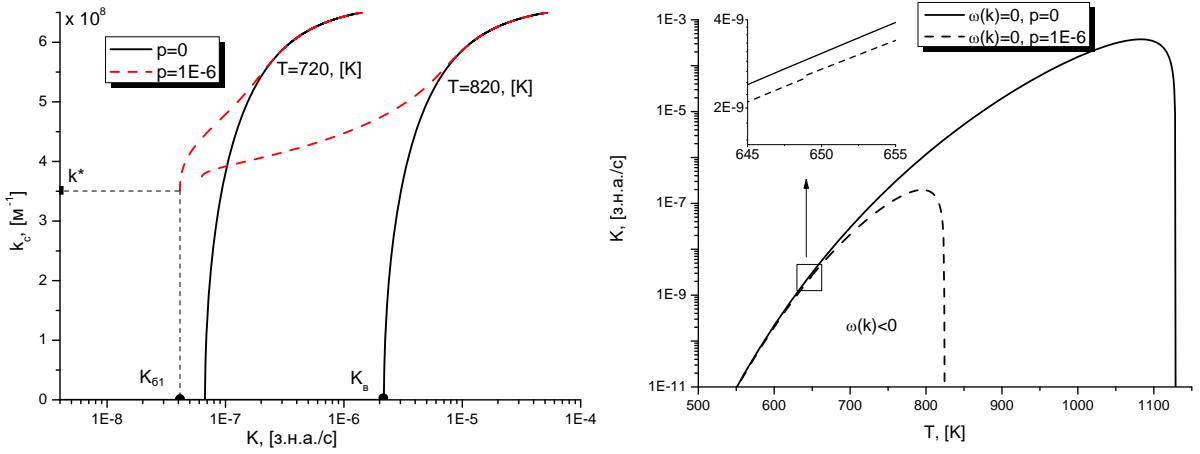


Рис. 2.2. (а) Залежність критичного хвильового числа від швидкості набору дози при різних значеннях p та T . (б) Діаграма стійкості в лінійному наближенні

2.1.2. Вплив зовнішніх флюктуацій на процеси формування вакансійних кластерів.

У реальних умовах опромінення швидкість набору дози є величиною стохастичною, оскільки залежить від кількості вибитих атомів та теплових флюктуацій. Таким чином перенормовану швидкість пошкоджень можна розглядати як таку, що має стохастичну природу [168, 169], поклавши $P \rightarrow P(t) = P + \zeta(\mathbf{r}, t)$ де $\zeta(\mathbf{r}, t)$ представляє відповідні флюктуації, з властивостями $\langle \zeta \rangle = 0$ та $\langle \zeta(\mathbf{r}, t)\zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\sigma^2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$. Тут σ^2 — інтенсивність шуму пропорційна P , що означає, що джерела флюктуацій виникають лише при включені опромінення. У такому випадку цей член включається до динаміки системи (2.7), що розглядається в сенсі Стратоновича. Таким чином, рівняння еволюції концентрації вакансій із зовнішнім шумом набирає вигляду:

$$\partial_t x = R_x(x) - \nabla \cdot \mathbf{J} + g_x(x)\zeta(\mathbf{r}, t), \quad (2.15)$$

де

$$\begin{aligned} R_x(x) &= P(1 - \varepsilon_v) - \mu(x - x_0) - \frac{P\epsilon(1 - \varepsilon_i)x}{A\mu + \epsilon x} + Ge^{\frac{\varepsilon x}{1+x^2}}, \\ g_x^2(x) &= (1 - \varepsilon_v)^2 + \left(\frac{\epsilon(1 - \varepsilon_i)x}{A\mu + \epsilon x} \right)^2. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Розглянемо стійкість стаціонарних однорідних станів x_s як рішення рівняння $R_x(x) = 0$. Враховуючи динаміку усереднених флюктуацій $\langle \delta x \rangle = \langle x \rangle - x_s$ в

Фур'є просторі ми отримуємо

$$\frac{d\langle \delta x \rangle}{dt} = (\Lambda + \omega(k)) \langle \delta x \rangle, \quad (2.17)$$

де показник стійкості

$$\begin{aligned} \Lambda = & -\mu - \frac{P(1-\varepsilon_i)\epsilon\mu A}{[A\mu+x_s\epsilon]^2} + G \frac{\varepsilon(1-x_s^2)}{(1+x_s^2)^2} \exp\left(\frac{\varepsilon x_s}{1+x_s^2}\right) \\ & + \frac{\sigma^2\epsilon^2(1-\varepsilon_i)^2}{[A\mu+\epsilon x_s]^2} \left(1 - \frac{\epsilon x_s}{A\mu+\epsilon x_s} \left[4 - \frac{3\epsilon x_s}{A\mu+\epsilon x_s}\right]\right). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Тут останній доданок є внеском дрейфу Стратоновича та веде до дестабілізації однорідного стану. Дія шуму приводить до збільшення показника Λ . Дисперсійне співвідношення, яке характеризує стійкість відносно неоднорідних збурень має вигляд

$$\omega(k) = -k^2[1 - \varepsilon x_s(1 - \ell^2 k^2)]. \quad (2.19)$$

Звідси випливає, що нестабільні моди з $\omega(k) > 0$ характеризуються хвильовими числами $0 < k < k_c$, де критичне значення

$$k_c = \sqrt{\frac{\varepsilon x_s - 1}{\varepsilon x_s \ell^2}}. \quad (2.20)$$

Залежності $\omega(k)$ при різних значеннях μ показані на рис.2.3 (верхня панель). Збільшення густини стоків призводить до зниження значення x_s та стабілізації рівномірного розподілу дефектів, як було показано раніше в роботі [165]: в досліджуваній системі максимальне значення $\omega(k)$ зменшується в результаті зсуву k_c в бік малих значень (див. рис.2.3 (нижня панель)). Таким чином, зі збільшенням густини стоків кількість нестійких мод зменшується і період утворення структур, який характеризується найбільш нестійкою модою k_0 зростає.

Далі розглянемо поведінку системи в стаціонарному випадку, вважаючи $\ell \lll 1$. Це дозволяє використати наближення середнього поля і отримати $\nabla^2 x \rightarrow (x - \eta)$ та $(\nabla x)^2 \rightarrow (x - \eta)^2$, де $\eta \equiv \langle x \rangle$ —середнє поле (в системах, що проходять фазові переходи порядок-безлад, грає роль параметру порядку) описує ефекти упорядкування [170]. Усерединення здійснюється відповідно до функції розподілу $\mathcal{P}_s(t \rightarrow \infty; x, \eta) = \mathcal{P}_s(x, \eta)$, що є розв'язком рівняння

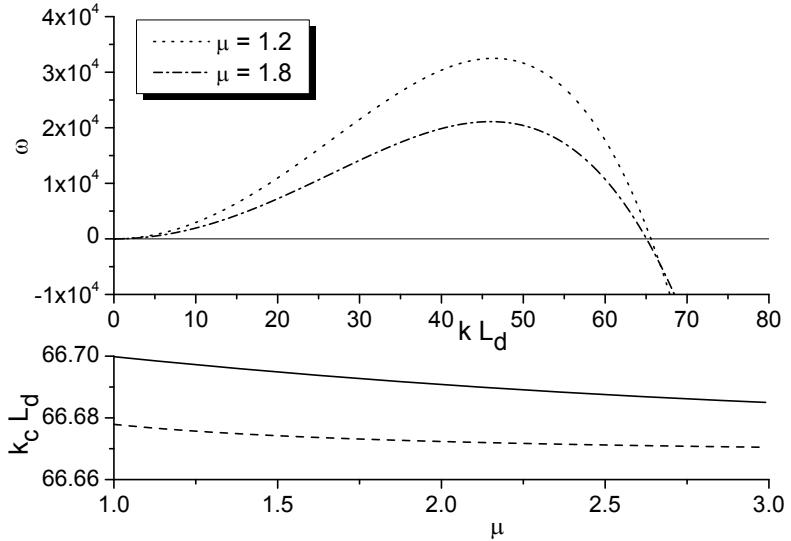


Рис. 2.3. Закон дисперсії при різних значеннях густини стоків за реакторних умов (вгорі) та залежність критичного хвильового числа від густини стоків (внизу) в умовах прискорювачів (сущільна лінія) та за реакторних умов (штрихова лінія)

Фоккера-Планка [171]:

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(R_x(x) + (1 - \varepsilon x)(x - \eta) - \varepsilon(x - \eta)^2 \right) \mathcal{P} + \sigma^2 \frac{\partial}{\partial x} g_x(x) \frac{\partial}{\partial x} g_x(x) \mathcal{P}. \quad (2.21)$$

Їого стаціонарне рішення

$$\mathcal{P}_s(x; \eta) = \frac{1}{\mathcal{N}(\eta)} \exp \left(\frac{1}{\sigma^2} \int_0^x \frac{R_x(y) - (1 - \varepsilon y)(y - \eta) + \varepsilon(y - \eta)^2 - \sigma^2 g_x(y) g'_x(y)}{g_x^2(y)} dy \right) \quad (2.22)$$

визначає середнє поле самоузгодженням способом

$$\eta = \int_0^\infty x \mathcal{P}_s(x; \eta) dx; \quad (2.23)$$

де стала $\mathcal{N}(\eta)$ задає умову нормування $\int_0^\infty \mathcal{P}_s(x; \eta) dx = 1$.

Розв'язання рівняння самоузгодження (2.23) показано на рис.2.4а. З нього видно, що значення середнього поля падає з ростом температури, що означає втрату просторового порядку. Порівнюючи відповідні криві для різних дозах опромінення, випливає, що упорядкування стає більшим при великих значеннях K , внаслідок утворення нових взаємодіючих дефектів. Вплив зовнішнього шуму принципово не змінюється на залежностях $\eta(K, T)$. Тут маємо незначне зменшення середнього поля при температурному режимі, що відповідає

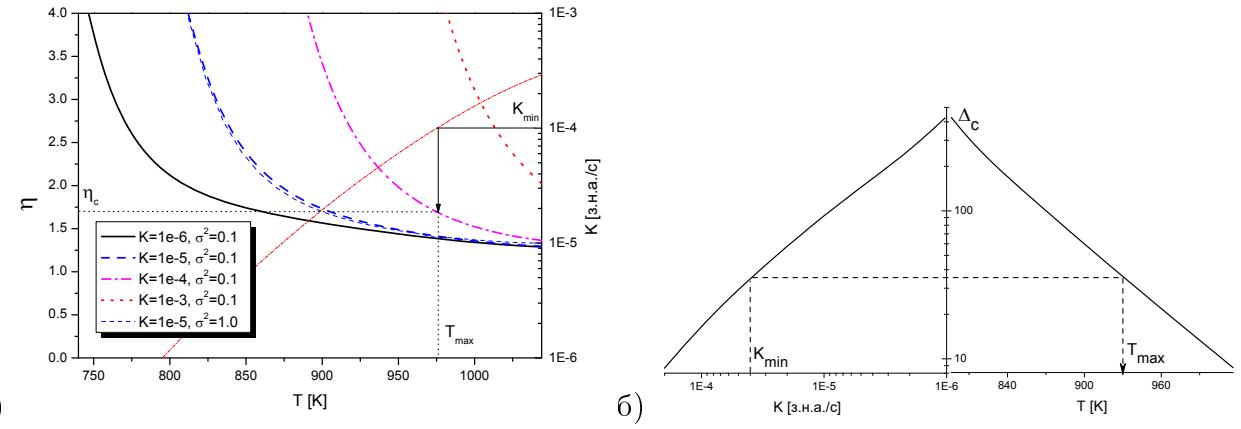


Рис. 2.4. (а) Залежність середнього поля від температури при різних швидкостях набору дози та інтенсивності зовнішнього шуму (процедура визначення критичного значення η_c показано стрілками за допомогою діаграми стійкості в площині (T, K)). (б) Залежність критичного пересичення від $\Delta_c \equiv \Delta_c(K, T) = (\eta_c(K, T) - x_0(T))/x_0(T)$ при $\sigma^2 = 0.1$

реакторному, як приклад, і невелике збільшення параметра порядку η при підвищених температурах.

Використовуючи результати середньопольового аналізу, можна знайти критичне значення η , яке визначає пересичення точкових дефектів та вище якого реалізується просторова модуляція. Оскільки η є мірою населеності точкових дефектів $\eta \equiv \langle x \rangle$, то можемо знайти пересичення стандартним способом $\Delta \equiv (\eta - x_0)/x_0$, де $\Delta = \Delta(K, T)$, x_0 — рівноважна концентрація населеності вакансій. З фазової діаграми лінійної стійкості (слідуючи за стрілкою на рис.2.4а), вибравши значення для K можна знайти критичне значення температури T_{max} , яке обмежує область нестійкості ($T < T_{max}$), тоді як K_{min} — мінімальна доза опромінення ($K > K_{min}$), що обмежує область нестійкості. Критичне значення $\eta_c = \eta(K_{min}, T_{max})$ задає критичне пересичення $\Delta_c(K, T)$ зображене на рис.2.4б. Звідси випливає, що Δ_c зменшується з ростом як K так і T , що означає проходження процесів упорядковання/структуроутворення при меншому критичному пересиченні при зростанні K чи T . З фізичної точки зору, причина такого ефекту полягає в утворенні великої кількості дефектів при опроміненні та їх генерація за термо-активаційним механізмом з деформаційними нестійкостями.

2.2. Вплив дислокаційних петель на кластеризацію вакансій

У цьому підрозділі розглядається динаміка точкових дефектів, зокрема вакансій, при врахування динаміки стоків. Дослідження проводиться в типових режимах опромінення в реакторах та на прискорювачах. Проводиться статистичний аналіз утворюваних вакансійних скучень.

2.2.1. Стохастична модель динаміки дефектів та стоків.

За умови стохастичності швидкості пошкоджень приходимо до трикомпонентної стохастичної моделі, для якої приймаємо $\rho_{i,v} = \rho_{i,v}(t)$ та задаємо $\mu = \mu(t)$. Таким чином, замість детермінованої системи (2.7) маємо систему стохастичних диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned}\partial_t x &= R_x(x; \rho_i, \rho_v) - \nabla \cdot \mathbf{J} + g_x(x; \rho_i, \rho_v)\zeta(\mathbf{r}, t); \\ \tau_i \partial_t \rho_i &= R_i(\rho_i; x, \rho_v) + g_i(\rho_i; x, \rho_v)\zeta(\mathbf{r}, t); \\ \tau_v \partial_t \rho_v &= R_v(\rho_v; x, \rho_i) + g_v(\rho_v; x, \rho_i)\zeta(\mathbf{r}, t).\end{aligned}\quad (2.24)$$

Тут R_x та g_x задаються рівнянням (2.16). Для детермінованих компонент R_i , R_v та амплітуди шуму g_i , g_v маємо:

$$\begin{aligned}R_i &\equiv \varepsilon_i P + \frac{\tilde{A}AP(1 - \varepsilon_i)}{A(1 + \rho_i + \rho_v) + \epsilon x} - (x - x_0), \\ R_v &\equiv \varepsilon_v P - \rho_v \left(\frac{\tilde{A}AP(1 - \varepsilon_i)}{A(1 + \rho_i + \rho_v) + \epsilon x} - (x - x_0) \right), \\ g_i^2 &\equiv \varepsilon_i^2 + \left(\frac{\tilde{A}A(1 - \varepsilon_i)}{A(1 + \rho_i + \rho_v) + \epsilon x} \right)^2, \quad g_v^2 \equiv \varepsilon_v^2 + \left(\frac{\tilde{A}A(1 - \varepsilon_i)\rho_v}{A(1 + \rho_i + \rho_v) + \epsilon x} \right)^2.\end{aligned}\quad (2.25)$$

Для вивчення процесів структуроутворення проведемо числовий аналіз системи на двовимірній квадратній решітці $N \times N$ де $N = 128$ з періодичними граничними умовами та розміром комірки $\Delta l = 1.0$. Для чисельного інтегрування був використаний метод Мільштайна [170]. Крок за часом покладемо $\Delta t = 2.5 \times 10^{-4}$. У якості початкових умов вибираємо рівноважне значення концентрації вакансій без петель, тобто, $\langle c(\mathbf{r}, 0) \rangle = c_{v0}$, з малою дисперсією

$\langle (\delta c(\mathbf{r}, 0))^2 \rangle = 10^{-1} c_{v0}$; $\langle \rho_i(\mathbf{r}, 0) \rangle = \langle \rho_v(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$. Розглянемо два режими опромінення, що відповідають реакторним умовам та умовам на прискорювачах. Для стабілізації алгоритму обчислення в схемі моделі ми беремо $\ell = 0.25$. Оцінка цього параметра для чистого Ni дає $\ell_{Ni} = 0.015$. Таким чином в чисельному аналізі ми будемо використовувати параметр нормування $\chi \equiv \ell_{Ni}/\ell = 0.06$, оцінюючи лінійний розмір кластерів дефектів $\langle d_0 \rangle$ та характерну довжину їх просторового розподілу L_0 .

У рамках представлення систему диференціальних рівнянь на регулярній 2-розмірній решітці рівняння в частинних похідних зводиться до системи диференціальних рівнянь для кожного k -того елемента решітки [172]. У водячи вектор стану $\mathbf{x} = \{x, \rho_i, \rho_v\}$, детермінований вектор сил $\mathbf{R} = \{R_x, R_i, R_v\}$ та вектор амплітуд шуму $\mathbf{g} = \{g_x, g_i, g_v\}$, для k -того елемента решітки маємо формальний запис рівняння еволюції на решітці:

$$\frac{d\mathbf{x}_k}{dt} = \mathbf{R}_k - \nabla_{kj}^L \mathbf{J}_j + \mathbf{g}_k \zeta_k(t), \quad (2.26)$$

де $k = 1, \dots, N^2$; вводяться ліво- і правосторонні оператори, які мають вигляд:

$$\begin{aligned} \nabla_{ij}^L &= \frac{1}{\Delta l} (\delta_{i,j} - \delta_{i-1,j}), & \nabla_{ij}^R &= \frac{1}{\Delta l} (\delta_{i+1,j} - \delta_{i,j}), \\ \nabla_{ij}^L &= -\nabla_{ji}^R, & \nabla_{ij}^L \nabla_{jl}^R &= \Delta_{il} = \frac{1}{\Delta l^2} (\delta_{i,l+1} - 2\delta_{i,l} + \delta_{i,l-1}). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Дифузійний потік дефектів у дискретному просторі $\mathbf{J} = \{J_x, 0, 0\}$ має вигляд:

$$\mathbf{J}_{x,k} \equiv - [\nabla_{kj}^R x_j - \varepsilon x_k \nabla_{jm}^R (x_m + \ell^2 \Delta_{mn}^2 x_n)]; \quad (2.28)$$

а дискретне джерело шуму є таким:

$$\langle \xi_i(t) \xi_j(t) \rangle = 2\Delta l^{-2} \sigma^2 \delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (2.29)$$

2.2.2. Структуроутворення дефектів за реакторних умов опромінення.

Розглянемо випадок опромінення системи в реакторних умовах, поклавши $T = 773K$ та $K = 10^{-6}$ з.н.а./с. Типові картини еволюції системи при опроміненні за таких умов наведено на рис.2.5, тут зображене розподіл перенормованого поля концентрації вакансій $x(\mathbf{r}, t)$. Видно, що на ранніх стадіях еволюції системи, починаючи з гаусівського розподілу вакансій в околі рівноважного

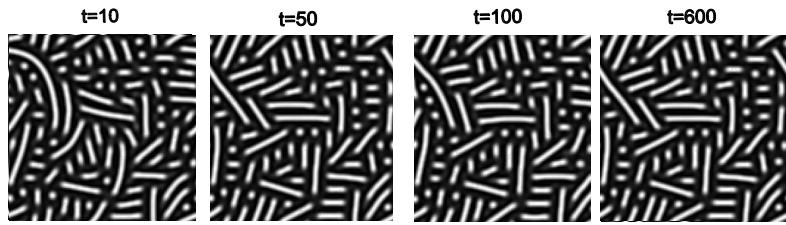


Рис. 2.5. Еволюція перенормованих полів вакансій при опроміненні в реакторних умовах ($T = 773\text{K}$, $K = 10^{-6}$ з.н.а./с)

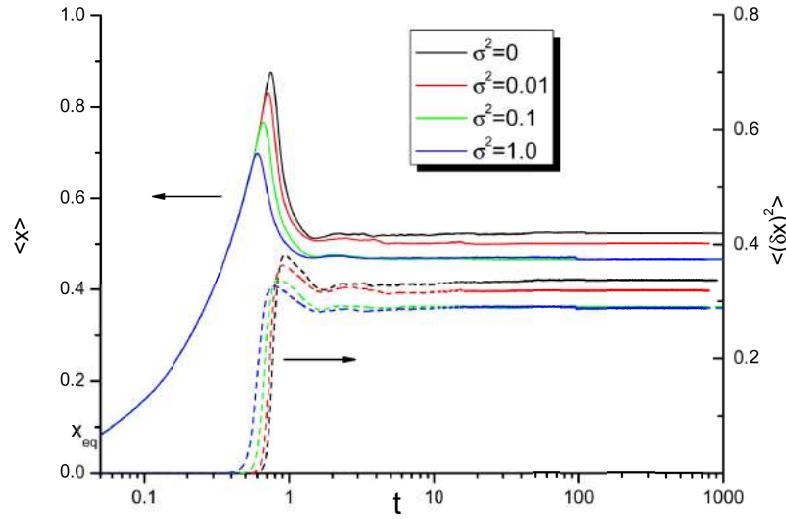


Рис. 2.6. Динаміка середньої концентрації $\langle x \rangle$ та середньо-квадратичного відхилення $\langle (\delta x)^2 \rangle$ при різних значеннях інтенсивності шуму σ^2 в реакторних умовах

значення, відбувається перерозподіл дефектів з утворенням як сферичних, так і протяжних скупчень, які слабо змінюються зі збільшенням часу зі збільшення дози опромінення Kt .

Для аналізу процесів самоорганізації вакансійних кластерів досліджено динаміку середньо-квадратичного відхилення $\langle (\delta x)^2 \rangle$, що у процесах структуроутворення відіграє роль ефективного параметра порядку, яким вимірюється порушення симетрії початкового гаусівського розподілу поля [122,167,170]. Враховуючи його динаміку разом з динамікою середньої концентрації $\langle x \rangle$, можемо побачити, що на початкових стадіях еволюції системи кількість точкових дефектів зростає до максимального значення (див рис.2.6). Тут параметр порядку $\langle (\delta x)^2 \rangle$ зростає, що означає формування просторового порядку в системі, що супроводжується виділенням фази збагаченої вакансіями. При цьому кількість вільних вакансій зменшується внаслідок їх міграції на стоки. Поява слабких осциляцій в даному випадку відповідає за процеси, при яких мігруючі вакансії

можуть бути поглинені кластерами та, випущені з них, абсорбуються стоками. Зі збільшенням дози опромінення величина $\langle x \rangle$ набуває стаціонарного значення, а нові вакансії, що виникають при каскадах уходять на стоки. Порівнюючи залежності на рис.2.6 при різних значеннях інтенсивності швидкості набору дози видно, що шум прискорює формування просторового порядку через нестабільність описану дрейфом Стратоновича, як було показано в попередньому підрозділі. Також це призводить до зменшення середньої концентрації вакансій та параметра порядку. Останнє означає, що при великих значеннях інтенсивності шуму реалізується інший тип просторових модуляцій. Порівнюючи результати для розподілу поля вакансій при різних інтенсивностях шуму видно, що флюктуації приводять до організації вакансій у структури з переважно сферичними кластерами (див. рис.2.7а). З отриманих гістограм розподілу вакансійних кластерів за розмірами $P(s)$ видно, що у детерміністичному випадку даний розподіл характеризується наявністю трьох добре виражених піків, які відповідають сферичним кластерам з розмірами $s < \langle s \rangle$ та протяжним структурам, що мають розміри $s \simeq \langle s \rangle$ та $s > \langle s \rangle$. При підвищених значеннях інтенсивності флюктуацій швидкості набору дози дія шуму пригнічує процес формування протяжних вакансійних кластерів і розподіл структур вакансій за розмірами характеризується одним добре вираженим піком в околі $s < \langle s \rangle$; і густота розподілу має підвищені значення, крім того, збільшення інтенсивності шуму приводить до зсуву положення основного піку функції розподілу в бік $s/\langle s \rangle = 1$.

Для визначення впливу шуму на зміну періоду вакансійних структур досліджено сферично-усереднений структурний фактор для поля концентрації вакансій $S(k, t) = N^{-2} \sum_{k < |\mathbf{k}| < k + \Delta k} S(\mathbf{k}, t)$, де $S(\mathbf{k}, t) = \langle \delta x_{-\mathbf{k}} \delta x_{\mathbf{k}} \rangle$, $\delta x = x - \langle x \rangle$, $x_{\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} x(\mathbf{r}, t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Відповідні залежності при фіксованій дозі опромінення представлені на рис.2.7б. Видно, що у детерміністичному випадку пік функції $S(k)$ є розмитим внаслідок формування як сферичних, так і протяжних структур. Зі збільшенням інтенсивності шуму кількість протяжних структур зменшується і, як наслідок, пік структурного фактору стає більш чітко вираженим і його величина збільшується. При цьому період структур, що ви-

значається положенням піку структурного фактору, зменшується зі збільшенням інтенсивності шуму, внаслідок формування великої кількості сферичних кластерів вакансій. Крім того, площа під кривою $S(k)$ зменшується зі збільшенням інтенсивності шуму, що добре узгоджується із стаціонарними значеннями параметра порядку $\langle(\delta x)^2\rangle$. З отриманих даних з урахуванням того, що дифузійна довжина має порядок $L_d \propto \rho_N^{-1/2} \sim 10^{-7}$ м приходимо до оцінки періоду L_0 вакансійних кластерів, що приймає приймає значення в інтервалі $L_0 \sim (4.8 \div 4.5)\chi L_d$. Оцінка для середнього розміру вакансійних кластерів (діаметру сферичних структур) $\langle d_0 \rangle$ дає $\langle d_0 \rangle \simeq \chi L_d \sim 6$ нм. Використовуючи отримані дані можна встановити вид розподілу густини заселеності вакансійних кластерів $f(x)$, що зображені на рис.2.7в для детерміністичного та стохастично-го випадків. Видно, що більшість кластерів характеризуються концентрацією вакансій, меншою за середнє значення $\langle x \rangle$. Крім того, існує добре виражений пік функції розподілу в околі великих концентрацій вакансій $x > \langle x \rangle$. Зовнішні флюктуації приводять до збільшення концентрації вакансій в кластерах та до зсуву двох основних піків функції розподілу $f(x)$ в бік великих концентрацій вакансій x . Розмитий пік в околі $x = 0$ відповідає стану, коли вакансії не організовані в кластери, а розподілені всередині кристалічної матриці. З фізичної точки зору така ситуація реалізується внаслідок протікання дифузійних процесів, які при опроміненні в реакторних умовах, завдяки невеликим значенням швидкості набору дози, відіграють визначну роль.

Далі розглянемо поведінку густин стоків $\langle \rho_i \rangle$ та $\langle \rho_v \rangle$, представлену на рис. 2.8. Видно, що ці величини постійно зростають зі збільшенням дози опромінення. Це означає, що міжвузлові та вакансійні петлі з часом ростуть, притягуючи вакансії через позитивний зворотній зв'язок з полем вакансій. Врахування флюктуацій швидкості набору дози приводить до зменшення середньої концентрації міжвузлових та вакансійних петель. Із отриманих залежностей випливає, що зовнішній шум істотно впливає лише на густину міжвузлових петель $\langle \rho_i \rangle$. Загалом середні $\langle \rho_i \rangle$, $\langle \rho_v \rangle$ зростають з часом за лінійним законом при підвищених дозах, $\langle \rho_i(t) \rangle, \langle \rho_v(t) \rangle \sim t$. Така динаміка густини вакансійних петель $\langle \rho_v \rangle$ також реалізується і при малих дозах. Таким чином флюктуації швидкості набору до-

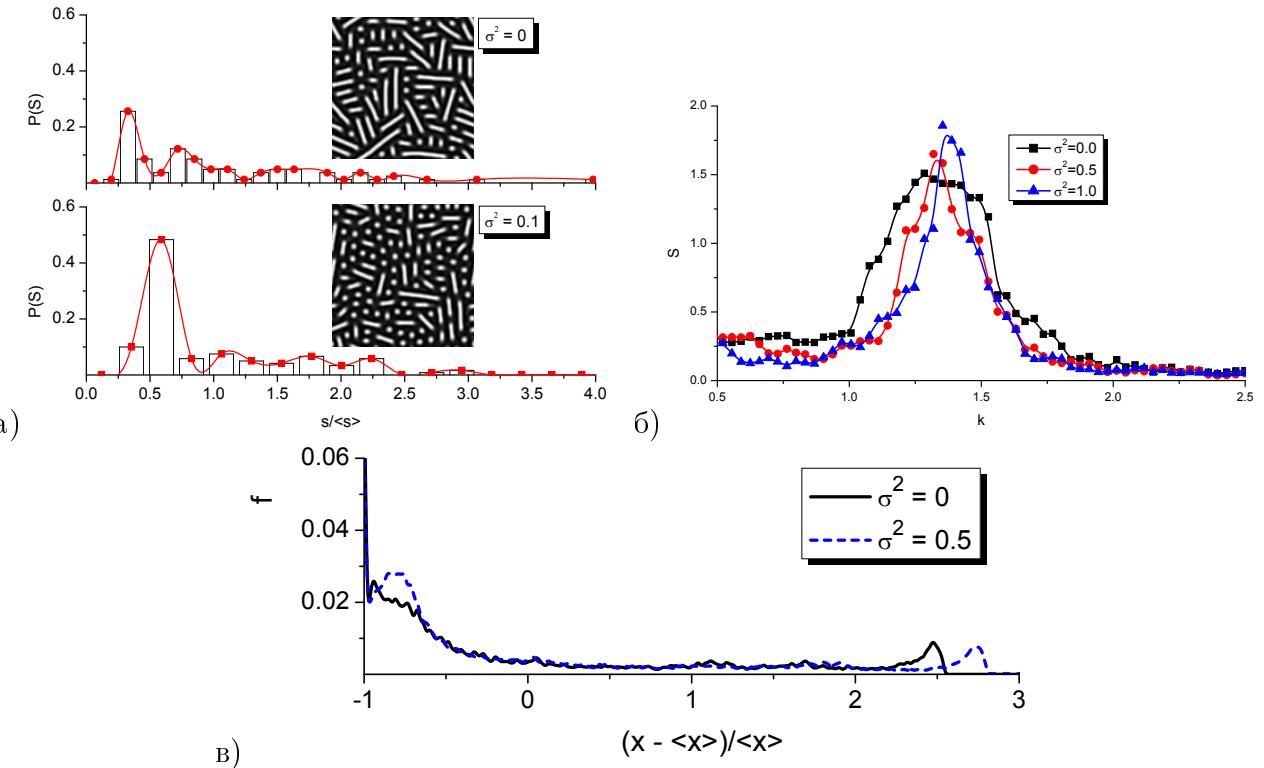


Рис. 2.7. (а) Залежності стаціонарної функції густини розподілу вакансійних кластерів за розмірами S для детерміністичного ($\sigma^2 = 0$) та стохастичного ($\sigma^2 = 0.5$) випадків. (б) Залежності сферично усередненого структурного фактору для поля концентрації вакансій при різних значеннях інтенсивності шуму при $t = 800$. (в) Функції густини розподілу вакансійних структур за концентрацією вакансій у детерміністичному та стохастичному випадках. Інші параметри: $T = 773K$, $K = 10^{-6}$ з.н.а./с.

зи приводять до уповільнення динаміки густини міжузлових петель $\langle \rho_i \rangle$ на початкових стадіях еволюції системи.

2.2.3. Структуроутворення дефектів при опроміненні на прискорювачах.

Розглядаючи процеси структуроутворення дефектів при опроміненні на прискорювачах було вибрано характерний температурний режим $T = 900K$ зі швидкістю набору дози $K = 10^{-3}$ з.н.а./с. Відповідне моделювання, через великі значення K має крок за часом $\Delta t = 15 \times 10^{-5}$.

Залежність середнього значення концентрації вакансій та дисперсії показано на рис.2.9а. Порівнюючи динаміку усередненої концентрації вакансій в умовах опромінення в реакторі та на прискорювачі, можна стверджувати у другому випадку перебудова дефектів відбувається істотно швидше (пор. рис.2.6 та рис.2.9а). Окрім того, число дефектів збільшується на порядок при опроміненні

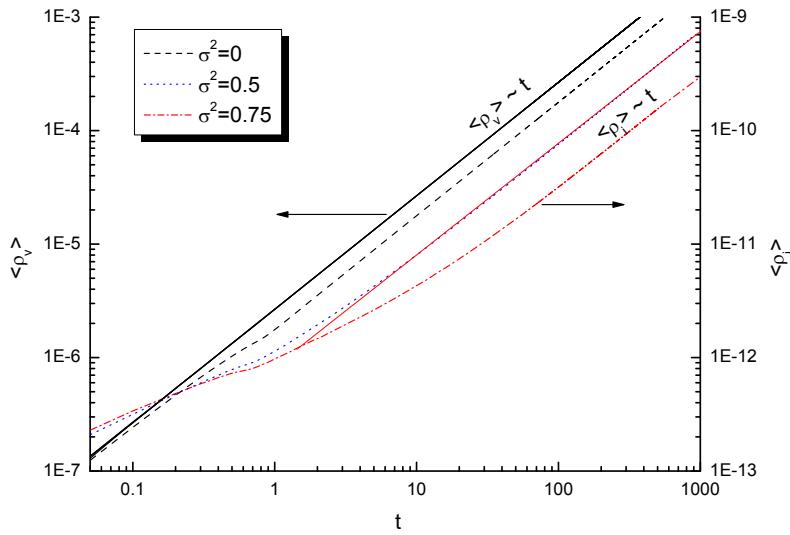


Рис. 2.8. Динаміка середньої густини стоків $\langle \rho_i \rangle$ та $\langle \rho_v \rangle$ при різних значеннях інтенсивності флюктуацій швидкості набору дози в реакторних умовах.

на прискорювачах. При цьому дисперсія $\langle (\delta x)^2 \rangle$ збільшується на два порядки по відношенню до відповідних величин дисперсії концентрації вакансій в реакторних умовах. Це означає істотну різницю в кількості дефектів в різних просторових областях опроміненого зразка. За великих швидкостей набору дози дефекти вакансійного типу організуються у кластери сферичної форми без утворення протяжних структур дефектів (див. рис.2.9б). За таких умов вплив шуму стає протилежним до попередньо розглянутого випадку: тут внаслідок комбінаційного ефекту генерації дефектів та впливу стохастичного джерела кількість дефектів зростає, при цьому стохастичні складові приводять до формування сферичних вакансійних кластерів, які характеризуються практично однаковими розмірами. Порівнюючи розподілі вакансійних кластерів за розмірами s у детерміністичному та стохастичному випадках, випливає, що зовнішні флюктуації приводять до міграції вакансій поміж кластерів. У такому разі величина s досягає середнього значення $\langle s \rangle$ (див. верхню панель на рис.2.10). Дія шуму істотно не впливає на густину вакансійних кластерів n/N^2 , кількість кластерів n зростає поступово з підвищенням інтенсивності шуму σ^2 .

Досліджуючи динаміку сферично усередненого структурного фактору поля концентрації вакансій, зображеного на рис.2.10б, було отримано, що зовнішній шум приводить до зсуву положення піку структурного фактору в бік більшій хвильових чисел. Останнє свідчить про зменшення періоду розташування

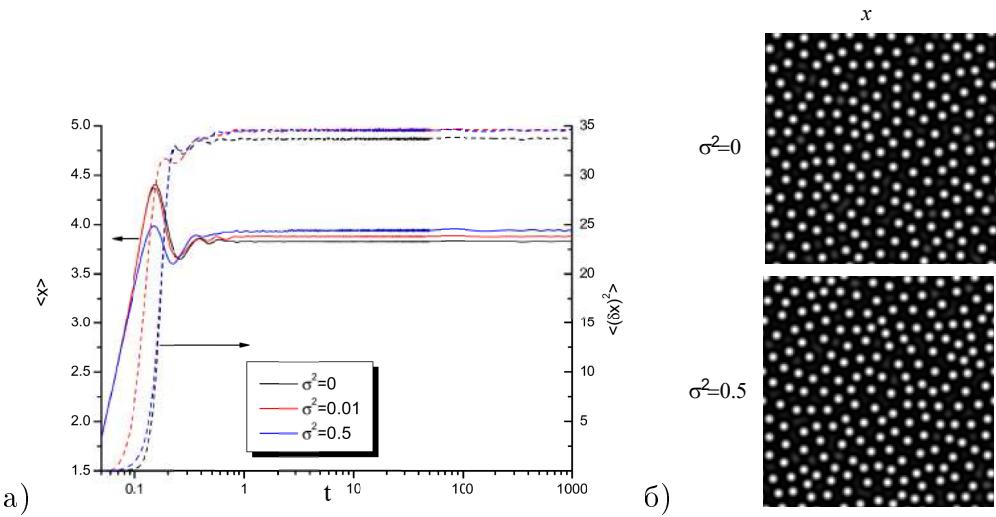


Рис. 2.9. (а) Динаміка усередненої концентрації вакансій та відповідної дисперсії за різних значень інтенсивності зовнішнього шуму при опроміненні на прискорювачах. (б) Типові знімки розподілу полів концентрації вакансій та полів стоків при різних інтенсивностях шуму при $t = 700$

вакансійних кластерів у стохастичних умовах. Окрім того при зростанні рівня флюктуацій площа під кривою $S(k)$ збільшується, що говорить про вищі значення для параметра порядку у структурній організації вакансій, який зводиться до дисперсії $\langle (\delta x)^2 \rangle$. Аналіз даних для періоду вакансійних кластерів L_0 приводить до характерної оцінки цієї величини $L_0 \sim (4.5 \div 4.2)\chi L_d$, де нижня границя відповідає великим інтенсивностям шуму. Інакше кажучи період розташування вакансійних кластерів при опроміненні на прискорювачах має зменшуватись до $6.25 \div 6.6\%$ у порівнянні з відповідними розмірами при опроміненні в реакторах за тих самих стохастичних умов. Для відповідного розміру вакансійного кластеру $\langle d_0 \rangle$ маємо таку оцінку: $\langle d_0 \rangle \simeq 1.25\chi L_d \simeq 7.5$ нм. Функція розподілу заселеності вакансійних кластерів $f(x)$ показана на рис.2.10в для детерміністичного та стохастичного випадків. З нього видно, що протилежно до попередньо розглянутого випадку тут більшість кластерів характеризується підвищеним значенням концентрації вакансій $x > \langle x \rangle$. Принципово важливо, що у даному випадку зовнішні флюктуації діють протилежно до попередньо розглянутого випадку опромінення в реакторних умовах. Дійсно, внаслідок формування здебільшого сферичних кластерів стохастичний внесок зменшує концентрацію вакансій в кластерах, зміщуючи основні піки $f(x)$ до малих x . Слід зазначити, що максимальне значення функції розподілу $f(x)$ у

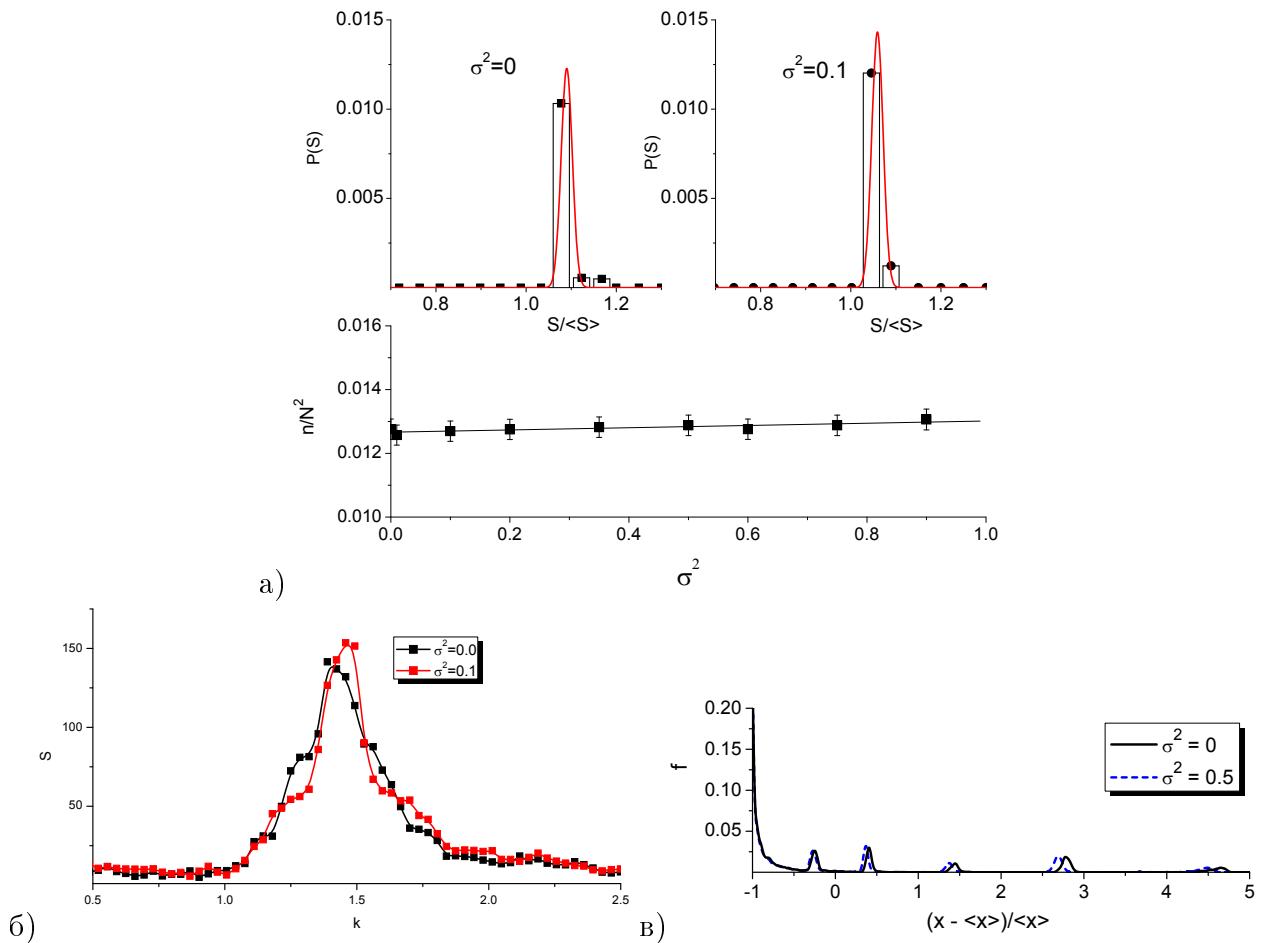


Рис. 2.10. (а) Стационарні розподіли вакансійних кластерів за розмірами (при $\sigma^2 = 0$ та $\sigma^2 = 0.5$) та густина вакансійних кластерів залежно від інтенсивності шуму σ^2 . (б) Структурний фактор для поля концентрації вакансій у детерміністичному ($\sigma^2 = 0.0$) та стохастичному випадках ($\sigma^2 = 0.1$). (в) Функції розподілу зайнятості вакансійних кластерів у детерміністичному та стохастичному випадках

точці $x = 0$ стає істотно більшим (на порядок) у порівнянні із таким же значенням для також функції розподілу при опроміненні в реакторних умовах. Це означає, що в умовах опроміненні на прискорювачах відбувається швидка перебудова вакансій у просторі з формуванням компактних скучень вакансій у такий спосіб, що в матриці матеріалу вільних вакансій практично не спостерігається. У такому разі дифузійні процеси стають істотно пригніченими, а всі вакансії переважно знаходяться у кластерах.

Досліджуючи динаміку стоків вакансій (див. часові залежності на рис.2.11) встановлено, що при опроміненні на прискорювачах реалізується лінійний ріст для $\langle \rho_v(t) \rangle, \langle \rho_i(t) \rangle \propto t$ навіть при малих часових інтервалах еволюції системи. У даному випадку відсутня повільна динаміка стоків, характерна для дифузій-

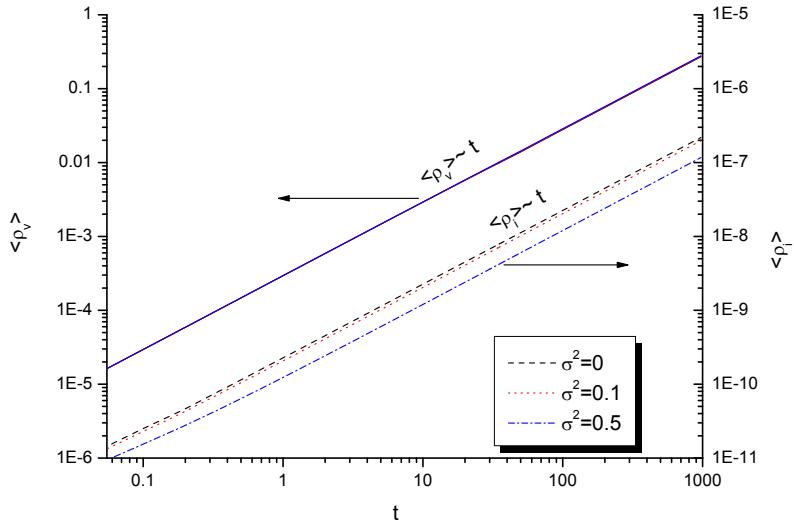


Рис. 2.11. Динаміка стоків при різних значеннях інтенсивності шуму σ^2 при $T = 900K$ та $K = 10^{-3}$ з.н.а./с.

них процесів. Зовнішні флюктуації приводять до зменшення значення густини стоків. При великих швидкостях набору дози K густина стоків стає на три порядки більшою за відповідні значення при опроміненні в реакторних умовах.

2.3. Висновки до розділу 2

Проведено застосування узагальненої швидкісної моделі для дослідження процесів формування вакансійних кластерів для чистого нікелю, що опромінюється в реакторних умовах та на прискорювачах.

1. У рамках використання стохастичного підходу показано, що просторова організація кластерів вакансій залежить від умов опромінення. Це пов'язано з тим, що при опроміненні в реакторних умовах при низьких швидкостях набору дози визначну роль в процесах самоорганізації вакансійних кластерів відіграють дифузійні процеси, тоді як при великих швидкостях набору дози, що відповідають умовам опромінення на прискорювачах, ці процеси є пригніченими.

2. Установлено, що флюктуації швидкості набору дози прискорюють процес просторової організації дефектів як при опроміненні в реакторних умовах, так і на прискорювачах та уповільнюють динаміку росту міжузлових петель.

3. З'ясовано, що період розташування вакансійних кластерів зменшується зростом інтенсивності шуму. Крім того при опроміненні за підвищених температур та високої швидкості генерації дефектів (опромінення на прискорювачах) період вакансійних кластерів зменшується на 6.5% у порівнянні із реакторними умовами. Лінійний розмір вакансійних кластерів, що формуються при опроміненні на прискорювачах є меншим на 20%, у порівнянні з опроміненням в реакторах.

Отримані результати добре узгоджуються з відомими експериментальними дослідженнями [49, 52, 53, 173] та теоретичними розрахунками [30, 31, 165]. Отримані у даному розділі результати опубліковано у працях [1–3, 7–9, 11].

РОЗДІЛ 3

СТРУКТУРОУТВОРЕННЯ ТА ПРОЦЕСИ ВІДБОРУ В ОПРОМІНЮВАНИХ ТОНКИХ ПЛІВКАХ

Даний розділ присвячено дослідженню процесів відбору структур вакансійного типу у опромінюваних металевих плівках за наявності нестійкостей Грінфельда [174] (які належать до класу нестійкостей Маллінса-Секеркі [175]), де чітко виражені коливання температури на поверхні, і порівняння з відповідними процесами всередині матеріалу. У даному дослідженні розглядаються два пов'язаних між собою поля, а саме, концентрації точкових дефектів та локальної температури приповерхневого шару. У підрозділі 3.1 наводиться модель класу подібних систем та встановлюються умови проходження процесів відбору структур. Числове моделювання та відповідний аналіз утворюваних структур проводиться у підрозділі 3.2.

3.1. Самоорганізація нерівноважних точкових дефектів у тонких плівках

3.1.1. Стохастична модель формування вакансійних кластерів у приповерхневих шарах тонких плівок.

Розглянемо клас моделей динаміки точкових дефектів в металевих плівках, коли концентрація дефектів є величиною динамічно пов'язаною з температурою приповерхневого шару. Загалом, при дослідженні процесів у об'ємі матеріалу, внаслідок високої тепlopровідності металів. Для тонких плівок (товщиною $\sim 0.5\mu\text{m}$) у середовищі з постійною температурою T_0 , внаслідок нагрівання, утворення дефектів та їх анігіляції (діапазон іонізації частинок є меншим за товщину зразка), відбуваються процеси локальних змін температури зразка T . Локальне зростання температури зразка є результатом його відпалу. При цьому енергія дефектів переходить нагрів, що і приводить до збільшення температури. У результаті, кількість дефектів зменшується зі зростанням теплопередачі.

Далі зразок охолоняє, теплопередача уповільнюється і накопичуються нові дефекти. Повторення описаного процесу приводить до осциляцій температури зразка і концентрації його дефектів за сценарієм біфуркації Хопфа. У рамках даного дослідження розглядається двовимірна задача, коли концентрації дефектів та локальна температура поверхні залежить лише від $\mathbf{r} = \{x, y, z\}$, при цьому ($z = 0$). Кінетичні рівняння для концентрацій дефектів є такими:

$$\begin{aligned}\partial_t c_v &= K - \beta_v(c_v - c_v^0) - \alpha_r c_i c_v - \nabla \cdot \mathbf{J}_v, \\ \partial_t c_i &= K - \beta_i c_i - \alpha_r c_i c_v - \nabla \cdot \mathbf{J}_i,\end{aligned}\quad (3.1)$$

де K , як і раніше, швидкість утворення дефектів; $\beta_{i,v} = \rho_N D_{i,v}$ обернений час життя дефектів типу i/v визначений лише через густину дислокацій ρ_N . Оскільки $D_i/D_v \gg 1$, то швидкою змінною c_i можна знехтувати, приймаючи $\partial_t c_i \simeq 0$. Беручи до уваги рівноважний розподіл міжузлових атомів, можна стверджувати про несуттєвий вклад потоку \mathbf{J}_i . У такому випадку для концентрації міжузлових атомів отримаємо $c_i \simeq K\beta_i^{-1}(1 + \alpha_r c_v / \beta_i)^{-1}$. Таким чином, замість системи з трьох рівнянь, отримаємо рівняння еволюції для концентрації вакансій у вигляді:

$$\partial_t c_v = \frac{K}{1 + \frac{\alpha_r}{\beta_i} c_v} - \beta_v(c_v - c_v^0) - \nabla \cdot \mathbf{J}_v. \quad (3.2)$$

Для спрощення опису дифузійного потоку будемо розглядати ізотропні системи, для яких характерна кубічна симетрія ґратки (ГЦК або ОЦК метали). Таким чином, всі просторові оператори будуть ізотропними. Для дослідження металів з ГЦУ-симетрією потрібно враховувати анізотропію пружнього континууму і враховувати анізотропне представлення для просторових операторів [176, 177].

Дифузійний для потік мобільних вакансій для ізотропної системи можна представити наступним чином:

$$\mathbf{J}_v = -D_v \nabla c_v + c_v \mathbf{v}, \quad (3.3)$$

де перша складова описує вільну дифузію дефектів, друга відповідає за вплив сили $\mathbf{f} = -\nabla(U/T)$, яка включає швидкість $\mathbf{v} = D_v \mathbf{f}$ (відношення Ейнштейна); тут U - потенціал взаємодії між дефектами, T - температура вимірювана

в енергетичних одиницях. Додадкова сила, яка виникає внаслідок деформації еластичного континууму і впливає на дефект має вигляд:

$$-\nabla U = \theta_d \nabla \vartheta|_{z=0}, \quad U = -\theta_d \vartheta, \quad (3.4)$$

де $\vartheta(\mathbf{r}) = \nabla \cdot \mathbf{u}$, $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ - вектор зсуву матералу у шарі, $\theta_d \equiv \Omega \kappa$ – потенціал деформації, κ – об'ємний модуль. Як було показано у попередніх дослідженнях (див., наприклад, [178]), деформація поверхневого шару нелокально залежить від концентрації дефектів на поверхні наступним чином:

$$\vartheta(z=0) = \frac{\nu \theta_d}{\rho c_{||}^2} \mathcal{L} c_v, \quad \mathcal{L} = (1 + l_{||}^2 \Delta); \quad (3.5)$$

тут $\nu \in [0, 1/2]$ – коефіцієнт Пуассона ($\nu \simeq 0.3$ для металів); ρ – густина; $\sigma_{||}$ – ізотропні напруження на насиченій дефектами поверхні висоти h ; $c_{||}^2 = \sigma_{||}/\rho$, $l_{||} = h/2\sqrt{3}$.

Отже, для рушійної сили отримаємо

$$\mathbf{f} = \frac{\nu \theta_d^2}{\sigma_{||}} \frac{1}{T} \left(\nabla \mathcal{L} c_v - \mathcal{L} c_v \frac{\nabla T}{T} \right). \quad (3.6)$$

Загальний дифузійний потік дефектів приймає вигляд

$$\mathbf{J}_v = -D_v \nabla c_v + \frac{\nu \theta_d^2}{\sigma_{||}} \frac{c_v D_v}{T} \left(\nabla \mathcal{L} c_v - \mathcal{L} c_v \frac{\nabla T}{T} \right). \quad (3.7)$$

Підставляючи рівняння (3.7) у рівняння (3.2), отримаємо рівняння еволюції для концентрації дефектів у вигляді

$$\partial_t c_v = \frac{K}{1 + \frac{\alpha}{\beta_i} c_v} - \beta_v (c_v - c_v^0) + \nabla \cdot \left[D_v \nabla c_v - \frac{\nu \theta_d^2}{\sigma_{||}} \frac{c_v D_v}{T} \left(\nabla \mathcal{L} c_v - \mathcal{L} c_v \frac{\nabla T}{T} \right) \right]. \quad (3.8)$$

У даній моделі взаємодія дефектів визначається пружніми вигинами зразка пов'язаними з вкладом пружньої енергії. Можливе використання даної моделі для дослідження утворення вакансійних кластерів у об'ємі, якщо припустити, що температура є постійною величиною, а взаємодія дефектів визначається полем пружності, індукованим дефектами [1, 2, 47, 179]. У роботі [104] показано, що модель даного типу можна використати для вивчення сегрегації вакансій на границях зерен при аномальному зростанню їх розміру.

У відповідності до описаних вище механізмів зміни температури, рівняння еволюції для температури зразка можна представити наступним чином:

$$C\rho\partial_t T = \chi\Delta T - \frac{\gamma_0}{h}(T - T_0) + \zeta_0 E_f K + E_f [\beta_v(c_v - c_v^0) + \alpha_r c_i c_v], \quad (3.9)$$

де C — питома теплоємність, χ — тепlopровідність, γ_0 — коефіцієнт теплопередачі, T_0 — температура середовища; $\zeta_0 \gg 1$ — відношення енергії опромінення, яка використовується на нагрівання, до енергії опромінення, яка використовується на формування дефектів; E_f — енергія формування дефектів. Припустимо, що підкладка, на якій розміщено досліджуваний шар не піддається опроміненню або його вплив незначний, і ним можна знехтувати. Дане припущення вірне лише тоді, коли товщина плівки менша за глибину іонізації (низька інтенсивність лазерних імпульсів або мала енергія бомбардуючих частинок). Перші дві компоненти у правій частині рівняння (3.9) описують передачу тепла, за законом Фур'є $C\rho\partial_t T = \chi\Delta T$. Перший доданок у рівнянні відповідає за розподіл тепла вздовж граничних компонент (x and y), тоді як другий визначає дисипацію нагріву вздовж осі z , тобто зверху до низу зразка товщини h , третій відповідає нагріву зразка опроміненням, остання складова визначає викид енергії, коли дефект захоплює дислокація або через рекомбінацію з міжузлям.

Використовуючи співвідношення $D_i/D_v \gg 1$ можна прийняти $\mu \equiv \alpha_r/\beta_i$ як вимірювану, незалежну від температури величину, і ввести $x \equiv \mu c_v$, $x_0 \equiv \mu c_v^0$. Тоді, вимірюючи час у одиницях часу життя вакансії $\tau_d \equiv (\rho_N D_v^0)^{-1}$, а просторові координати у одиницях $L_d \equiv (\rho_d)^{-1/2}$, можна ввести знерозмірені величини $t' \equiv t/\tau_d$, $\mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}/L_d$, $\ell \equiv l_{||}/L_d$, $\epsilon \equiv \nu\theta_d^2/\mu\sigma_{||}T_0$, $\Theta \equiv T/T_0$, $P \equiv \mu K\tau_d$, $\eta \equiv C\rho h/\tau_d\gamma_0$, $\varkappa \equiv \chi h/L_d^2\gamma_0$, $\varpi \equiv E_f h/T_0\mu\tau_d\gamma_0$, $\varepsilon \equiv E_v/T_0$. Загалом, для проведення статистичного аналізу, припускаємо, що дефекти виникають стохастично, внаслідок флюктуацій швидкості генерації дефектів, що дозволяє покласти $P \rightarrow P(t) = P + \zeta(t)$, де $\zeta(t)$ — білий гаусів шум з властивостями $\langle \zeta(t) \rangle = 0$, $\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2P\sigma^2\delta(t-t')$, при цьому флюктуації присутні лише при $P \neq 0$; σ^2 — інтенсивність шуму. Перенормоване значення інтенсивності шуму σ^2 не повинно перевищувати детерміністичну величину P .

Таким чином, загальну систему з двох основних рівнянь отримаємо у вигля-

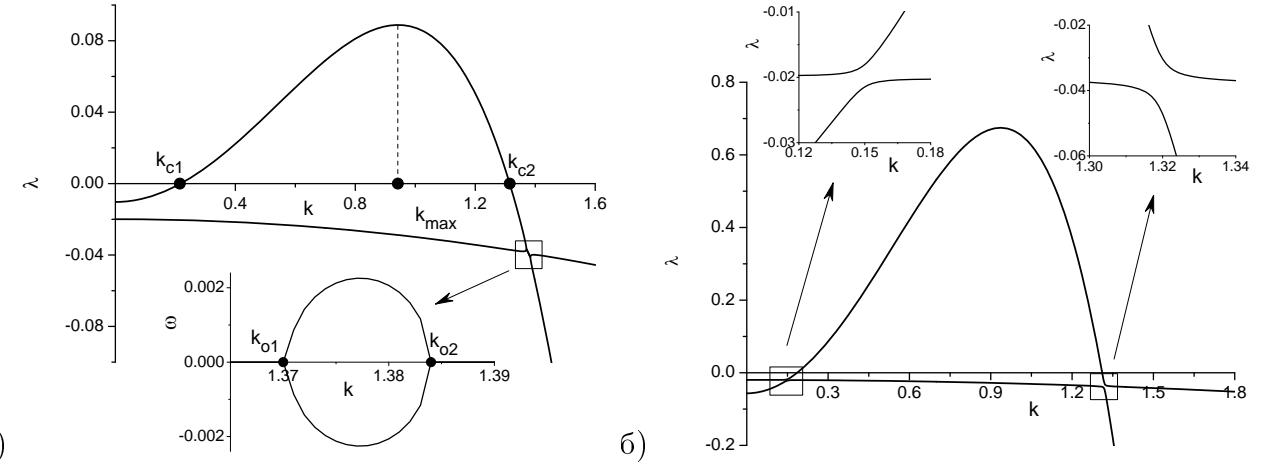


Рис. 3.1. Залежності для дійсної і уявної частин експоненти стійкості $\Lambda(k)$ при: а) $K = 3 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с, $T_0 = 500K$, $\sigma^2 = 0$; б) $K = 6 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с, $T_0 = 700K$, $\sigma^2 = 5$

ді:

$$\begin{aligned} \partial_t x &= \frac{P}{1+x} - \phi(\Theta)(x - x_0) + \nabla \cdot \phi(\Theta) \left[\nabla x - \frac{\epsilon x}{\Theta} \left(\nabla \mathcal{L}x - \mathcal{L}x \frac{\nabla \Theta}{\Theta} \right) \right] + g_x(x)\zeta(t); \\ \eta \partial_t \Theta &= \kappa \Delta \Theta - (\Theta - 1) + \varpi \left[P \left(\zeta_0 + \frac{x}{1+x} \right) + \phi(\Theta)(x - x_0) \right] + g_\Theta(x)\zeta(t), \end{aligned} \quad (3.10)$$

де $\mathcal{L} \equiv (1 + \ell^2 \nabla^2)$, $\phi(\Theta) \equiv e^{-\varepsilon/\Theta}$, $g_x(x) = 1/(1+x)$, $g_\Theta(x) = \sqrt{\varpi} (\zeta_0 + x g_x(x))$.

Далі будемо використовувати інтерпритацію Стратоновича для стохастичної динаміки [180].

3.1.2. Вплив зовнішнього шуму на процеси відбору структур.

Нехтуючи просторовими залежностями для x і Θ , розглянемо однорідну систему. Стационарна однорідна детерміністична концентрація дефектів під опроміненням $x_s = \frac{1}{2}[x_0 - 1 + \sqrt{(1+x_0)^2 + 4P/\phi(\Theta_s)}]$ може бути визначена через стационарне значення температури поверхні $\Theta_s = 1 + \varpi P(1 + \zeta_0)$. Далі, врахуємо невеликі збурення $\langle \delta x \rangle = x_s - \langle x \rangle$, $\langle \delta \Theta \rangle = \Theta_s - \langle \Theta \rangle$, де усереднення проведено по шуму ξ . У відповідності до лінійного аналізу на стійкість, отримаємо $\langle \delta x \rangle \propto e^{\Lambda(k)t}$, $\langle \delta \Theta \rangle \propto e^{\Lambda(k)t}$, де $\Lambda(k) = \lambda(k) + i\omega(k)$. Тут дійсна частина змінної $\Lambda(k)$ відповідає за стійкість стану (x_s, Θ_s) , тоді як уявна частина $\Im \Lambda(k) = \omega(k)$ зазвичай задає частоту осциляцій. Було проаналізовано власні значення $\Lambda(k)$ відповідної матриці Якобі, для лінеаризованої системи (3.10).

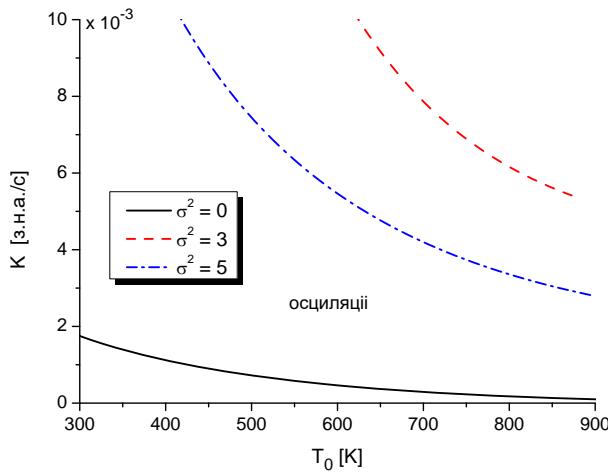


Рис. 3.2. Фазова діаграма для лінійного аналізу на стійкість. Область осциляторної динаміки розташована між суцільною та пунктирною кривими при $\sigma^2 = 5$ ($\sigma^2 = 3$)

Відповідні залежності показано на рис.3.1. З метою максимального наближення до реальної системи, були використані типові значення для параметрів [57]: $K \sim 10^{-3}$ з.н.а./с, $T_0 \in [300, 900]$ К, $L_d \simeq 10^{-7}$ м, $\tau_d \simeq 10^{-6}$ с, $E_f = 1.6$ еВ, $\eta = 100$, $\varkappa = 1$, $\ell = 0.7$, $\zeta = 7$, $\varpi = 0.1$, $\mu \simeq 10^8$. З одержаних результатів випливає, що одне з значень $\Re\Lambda(k)$ завжди приймає від'ємні значення, тоді як інше - завжди додатне у інтервалі значень для хвильових чисел $k \in (k_{c1}, k_{c2})$; воно досягає свого максимуму при $k = k_{max}$, де $k_{c1} < k_{max} < k_{c2}$. Поява уявної частини $\Lambda(k)$ можлива лише коли умова $\lambda(k) < 0$ справджується. Вона існує лише у певному інтервалі значень $k \in (k_{o1}, k_{o2})$, де $k_{o1} > k_{c2}$. Отже, згасаюча осциляторна динаміка буде виникати лише при певних параметрах системи. Така динаміка супроводжується процесами відбору структур, де система обирає найбільш нестійку моду з хвильовим числом k_{max} . З рис.3.1а можна побачити, що у області осциляторної динаміки уявна складова $\pm\omega(k)$ виникає за умови, коли обидва дійсних власних значення $\Lambda(k)$ вироджуються. За межами даної області існують лише два дійсних значення величини $\Lambda(k)$: одна з них завжди від'ємна, а інша може змінювати свій знак (див. рис.3.1б).

Із проведеного аналізу на стійкість отримано фазову діаграму в площині (швидкість пошкоджень-температура теплової бані) зображену на рис.3.2, де область осциляції, що відповідає відбору структур задається умовою $\omega(k) \neq 0$. Із отриманої діаграми бачимо, що у детерміністичному випадку ($\sigma^2 = 0$) область осциляції обмежена суцільною лінією і знаходить вище ніж. У сто-

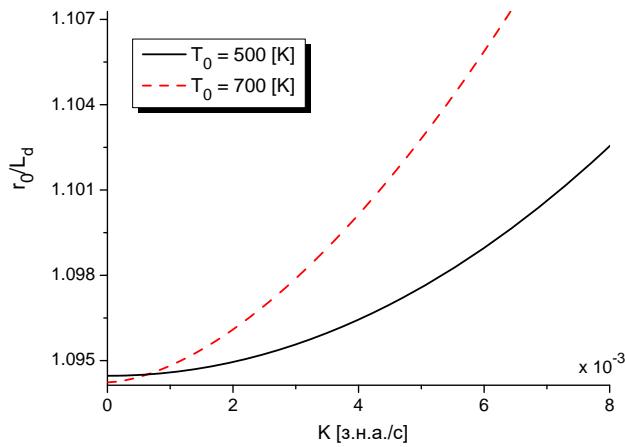


Рис. 3.3. Зміна періоду структур, отримана при різних T_0 ; $\sigma^2 = 0$

хастичному випадку $\sigma^2 \neq 0$ флуктуації не впливають на положення суцільної кривої. Однак, шум звужує область існування осциляцій внаслідок обмеження відповідних максимальних значень для швидкості пошкоджень і температури T_0 . Отже, у стохастичній системі ($\sigma^2 \neq 0$) осциляції виникають у обмеженому інтервалі значень K і T_0 . Для кращої ілюстрації впливу зовнішніх флуктуацій на звуження області осциляторної динаміки були обрані великі значення для інтенсивності шуму σ^2 .

Відповідно до отриманих залежностей власних значень матриці Якобі отримано значення для періоду структур $r_0 = 2\pi/k_{max}$, що визначається найбільш нестійкоюmodoю з хвильовим числом k_{max} (див. рис.3.3). Як бачимо, зі збільшенням величини K , період структур теж зростає. На даному рисунку не показано, але шум суттєво не впливає на значення величини r_0 . Опромінення мішені при підвищених температурах середовища T_0 може приводити до формування структур з більшим періодом.

3.2. Особливості проходження відбору структур та їх статистичний аналіз

Для проведення кількісного аналізу, чисельно розв'яжемо систему (3.10) на квадратній гратці розміру $N \times N$ з розміром комірки $\Delta l = 0.5$, $N = 128$, $L \simeq 9.2L_d$; крок по часу — $\Delta t = 0.00015$; з періодичними граничними умовами. Початкові умови обрано такими: $\langle x(\mathbf{r}, t) \rangle = x_0$, $\langle \Theta(\mathbf{r}, t) \rangle = 1$

з $\langle(\delta\Theta)^2\rangle = \langle(\delta x)^2\rangle = 0.01$. Для моделювання будемо використовувати метод Хойна для розподілених систем [170]. Приведемо систему у дискретний вигляд стандартним чином, уводячи вектор станів $\mathbf{x} = \{x, \Theta\}$, вектор сил $\mathbf{f} = \{f_x(x, \Theta; \nabla), f_\Theta(x, \Theta; \nabla)\}$ що складається з детерміністичних компонент $f_x(x, \Theta; \nabla), f_\Theta(x, \Theta; \nabla)$ еволюції відповідних полів та вектору амплітуд шумів $\mathbf{g} = \{g_x, g_\Theta\}$. У такому разі маємо представлення системи рівнянь (3.10) у дискретному просторі є таким:

$$\frac{d\mathbf{x}_k}{dt} = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}; \nabla_{kj}) + \mathbf{g}_k \zeta_k(t), \quad (3.11)$$

де $k = 1, \dots, N^2$; ∇_{kj} визначено співвідношеннями (2.27).

Як показав лінійний аналіз на стійкість, для реальних фізичних систем інтенсивність шуму σ^2 є малою величиною. Тому вклад шуму не впливає на динаміку системи і основні статистичні властивості, а лише дозволяє провести статистичний аналіз. Тому, для моделювання структуроутворення точкових дефектів приймемо $\sigma^2 = 0$. Для дослідження осциляторної динаміки, візьмемо значення ступеня пошкоджень і температури з області осциляторної динаміки (див. рис.3.2). Це дозволяє провести паралель між отриманими чисельними результатами та добре відомими експериментальними даними, для перегрупування точкових дефектів у плівках опромінюваних електронами та/або іонами з використанням прискорювачів.

3.2.1. Динаміка структурування та відбору.

Типові структури для поля концентрації дефектів і поля температури мішенні зображені на рис.3.4а,б при $K = 3 \times 10^{-3}$ з.н.а./с і $K = 5 \times 10^{-3}$ з.н.а./с відповідно. Такі значення швидкостей пошкоджень відповідають опроміненню іонами. Добре видно, що протягом еволюції системи спостерігається утворення вакансійних структур з нерівномірним розподілом поля температури. Локальна температура вища у місцях скупчення вакансійних кластерів. Порівнюючи структури при різних рівнях пошкодження бачимо, що морфологія структур суттєво залежить від швидкості пошкоджень K . При менших значеннях K формуються структури типу точок, де вакансії збираються у сферичні кластери і утворюють пори на поверхні мішенні. Збільшення ступеня пошкоджень

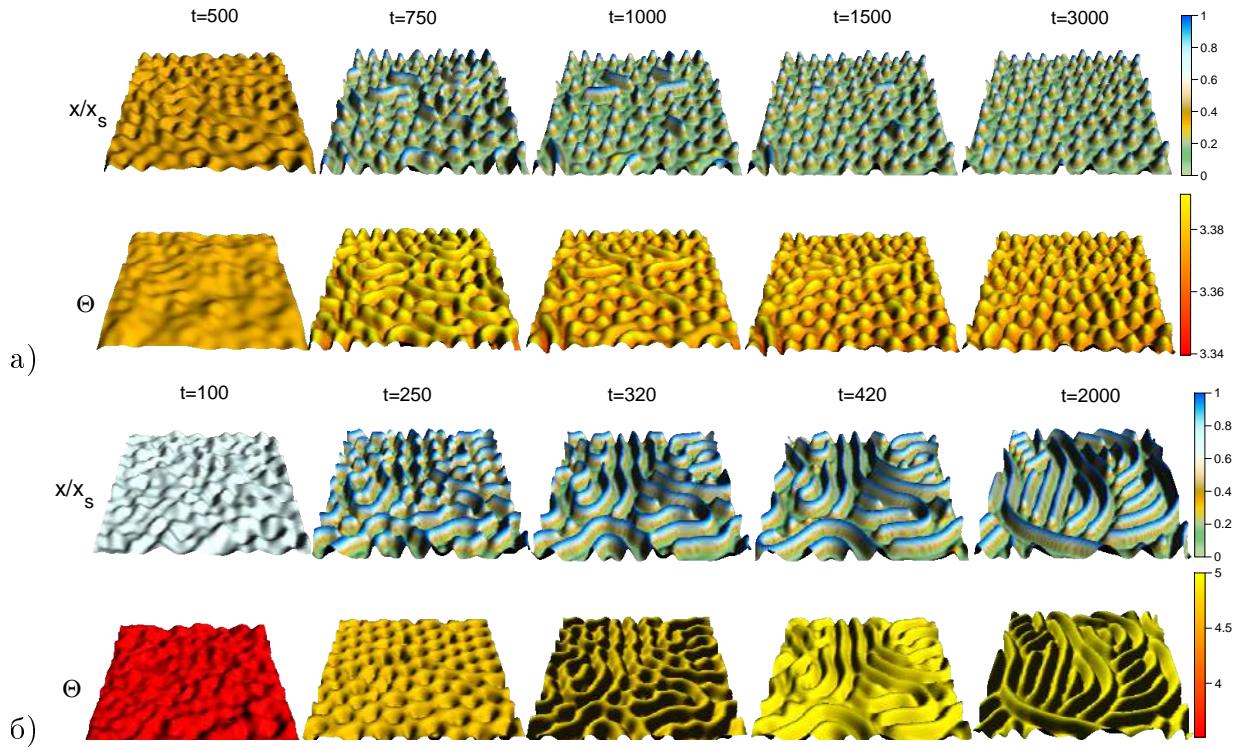


Рис. 3.4. Знімки поля концентрації вакансій (верхні знімки) і поля температури (нижні знімки) при $T_0 = 500K$, $\sigma^2 = 0$: а) $K = 3 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с; б) $K = 5 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с

приводить до утворення нерівноважних вакансій, здатних утворювати видовжені кластери, що переходять у брижі.

Проаналізуємо більш детально динаміку системи, розглянувши еволюцію середньої концентрації дефектів $\langle x \rangle$ і середньої температури $\langle \Theta \rangle$, зображені на рис.4.7а. Як бачимо, на ранніх стадіях утворюється велика кількість вакансій, про що свідчить зростання динаміки середньої концентрації вакансій $\langle x(t) \rangle$. Спадання $\langle x \rangle$ свідчить про формування просторових структур. У околі стаціонарного стану отримуємо згасаючі осциляції для $\langle x \rangle$ і $\langle \Theta \rangle$. Отримані результати добре узгоджуються з лінійним аналізом на стійкість, проведеним раніше. Така осциляторна поведінка супроводжується процесами відбору структур. При цьому одночасно формуються сферичні та видовжені структури. Під час опромінення система “обирає” для себе один тип структур. Оскільки, зміни температури тісно пов’язані з поведінкою локальної концентрації вакансій, то на даному етапі можливі осциляції температури. Розглядаючи динаміку відповідних дисперсій $\langle (\delta x)^2 \rangle$, $\langle (\delta \Theta)^2 \rangle$, які виступають у якості параметрів порядку при процесах структуроутворення, можна більш детально проаналізувати вла-

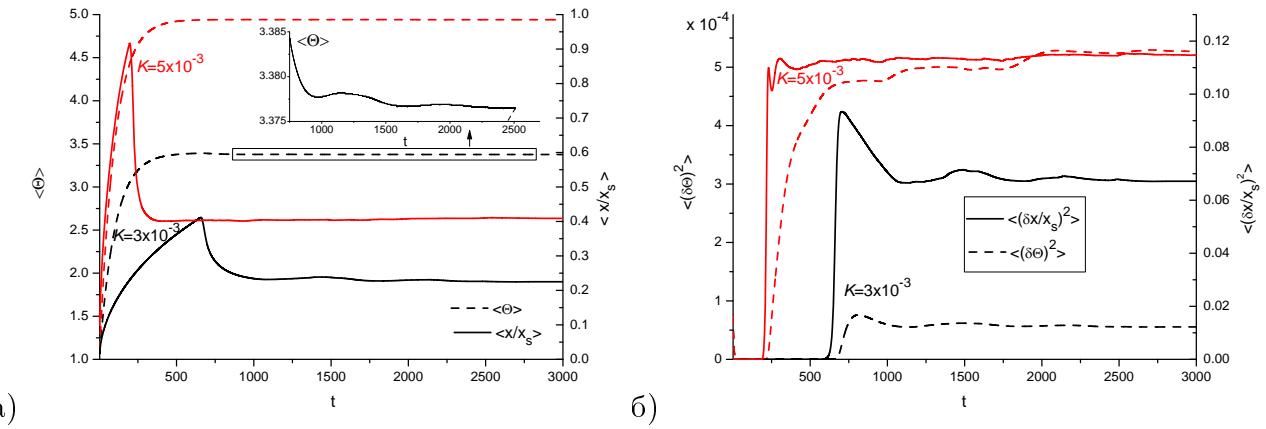


Рис. 3.5. Еволюція середньої температури зразка та обезрозділеної концентрації дефектів (а); часові залежності для дисперсії $\langle (\delta\Theta)^2 \rangle$ і $\langle (\delta x/x_s)^2 \rangle$ (б) при $K = 3 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с і $K = 5 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с; $T_0 = 500K$, $\sigma^2 = 0$

стивості утворення структур (див. рис.4.7б). На початкових стадіях параметр порядку приймає нульові значення. Варто зазначити, що обидва параметри порядку починають зростати, коли перевищується критичне перенасичення концентрації вакансій. В околі стаціонарного стану ці параметри порядку починають осцилювати. При цьому великий період осциляцій відповідає меншій їх частоті $\omega = \Im \Lambda$, отриманій в рамках лінійного аналізу на стійкість. Порівнюючи $\langle (\delta x)^2 \rangle$ і $\langle (\delta\Theta)^2 \rangle$ при різних значеннях швидкості формування дефектів, бачимо, що параметри порядку приймають більші значення при більшій швидкості пошкодження. Тобто, кількість дефектів збільшується зі зростанням K , вони об'єднуються в кластери і займають велику площину, лише невелика кількість дефектів (зазвичай, рівноважні вакансії) залишається в матриці. При цьому зростають дисперсія концентрації дефектів і дисперсія температури.

Для кращої наглядності існування просторових осциляцій, супроводжуваних процесами відбору структур, розглянемо структурний фактор, як Фур'є перетворення двохточкової кореляційної функції. Далі будемо використовувати сферично усереднений структурний фактор $S_x(k, t)$. Його поведінка у певний визначений момент часу при різних значеннях ступеня пошкодження зображена на рис.3.6. При малому значенні хвильового числа k існує добре виражений основний пік, який визначає період просторових структур, а слабкі осциляції при більших значеннях k (див. вставки на рис.3.6) — є ознакою того, що система обирає між структурами з різними довжинами (сферичні і несферичні). З

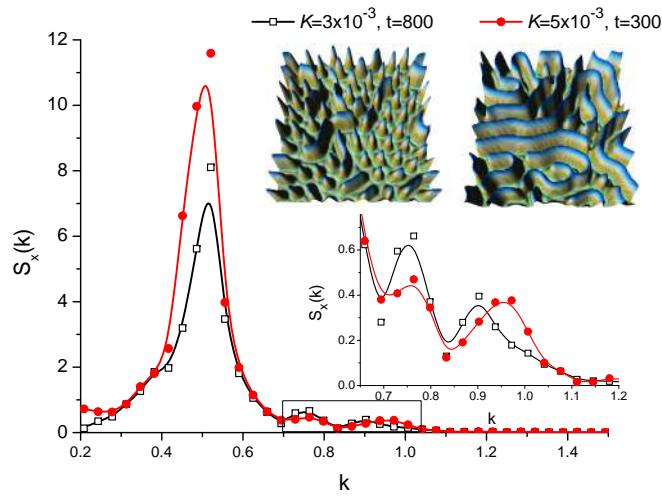


Рис. 3.6. Структурний фактор $S_x(k)$, що ілюструє процеси відбору структур. Криві отримані при $\sigma^2 = 0$, $T_0 = 500K$ і $K = 3 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с, $t = 800$ (залежність з пустими квадратами), $K = 5 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с, $t = 300$ (залежність з кружками). Відповідні конфігурації для концентрації вакансій зображені вище

часом дані осциляції затухають і залишається лише один основний пік. Тобто, в системі обрано структури з певною просторовою довжиною. У верхній частині рис.3.6 зображені типові знімки поля концентрації дефектів при різних значеннях ступеня пошкоджень. З отриманих результатів випливає, що процеси відбору структур тісно пов'язані з динамікою температури зразка, яка, в свою чергу, залежить від концентрації дефектів. У попередніх дослідженнях показано, що ці процеси у системах з постійною температурою пов'язані з кінцевою швидкістю розповсюдження атомних збурень, при цьому дифузійних потік залежить від часу [123, 152, 181, 182]. Описані осциляції середньої концентрації вакансій і температури для даної системи раніше були досліджені у однорідній границі [57]. Експериментальні результати для осциляцій питомого опору, пов'язаного з концентрацією вакансій у зразках міді під опроміненням електронами описано у роботі [63].

3.2.2. Статистичні властивості утворюваних структур.

Далі розглянемо густини ймовірностей для концентрації вакансій та поля температури. На рис.3.7 зображені відповідні густини ймовірностей у різні моменти часу, починаючи з моменту початку структуроутворення. З рис.3.7а добре видно, що на етапі формування структур умовна функція розподілу вакан-

сій $f(x|\Theta)$ має гаусовий вигляд з малою дисперсією, тоді як розподіл температури відповідає квазі-дельта-функції (з дуже вузьким інтервалом для дисперсії поля температури). Протягом еволюції системи отримаємо гаусовий розподіл для полів вакансій і температури: висота відповідних густин ймовірностей знижується одночасно зі збільшенням дисперсії обох полів (див. рис.3.7б). Далі відбувається перерозподіл вакансій між просторовими структурами, внаслідок чого більшість вакансій стає частиною кластерів. Це пояснює існування додаткових піків у функції $f(x|\Theta)$ (див. рис.3.7в). Одночасно з цим, розподіл поля температури стає бімодальним, що означає наявність двох станів (назвемо їх “фазами”), які характеризуються двома різними значеннями температури. Перший з станів визначає вакансійні острівці з підвищеною температурою (“нова фаза”), а другий відповідає так званій “матричній фазі” з меншою температурою. На великих часових інтервалах (квазістационарний режим) у системі спостерігаються добре структуровані острівці вакансій (див. піки у $f(x|\Theta)$ на рис.3.7г, що свідчать про ймовірність утворення різних кластерів вакансій). Тим часом розподіл поля температури $f(\Theta|x)$ поступово стає унімодальним.

Перейдемо до вивчення середнього радіусу вакансійних острівців $\langle R(t) \rangle$ і їх кількості $N(t)$, зображених на рис.3.8а. З динаміки $\langle R(t) \rangle$ і $N(t)$ легко бачити, що структуроутворення починається з утворення невеликої кількості вакансійних кластерів великої довжини. Початкові кластери мають видовжений вигляд. Протягом еволюції, ці структури розпадаються на менші: деякі з них розчинаються, формуються нові кластери по причині взаємодії у перенасиченому вакансіями ансамблі. Зі зростанням дози опромінення більшість кластерів стають однаковими і характеризуються постійним середнім радіусом на великих часових інтервалах. Даний стационарний середній радіус є меншим за дифузійну довжину $L_d \simeq (\rho_d)^{-1/2}$ з $\rho_N \simeq 10^{14} \div 10^{12} \text{ м}^{-2}$. Це дозволяє визначити типовий розмір вакансійних кластерів $\langle R \rangle \simeq 0.3L_d \simeq 30 \div 300 \text{ нм}$; відповідна відстань між ними знаходиться в околі дифузійної довжини. Динаміка $\langle R \rangle$, супроводжувана зростанням кількості острівців, розвивається у напрямку досягнення відповідного стационарного стану. Аналізуючи більш детально залежності $\langle R(t) \rangle$ і $N(t)$, бачимо осциляційний характер поведінки для середнього

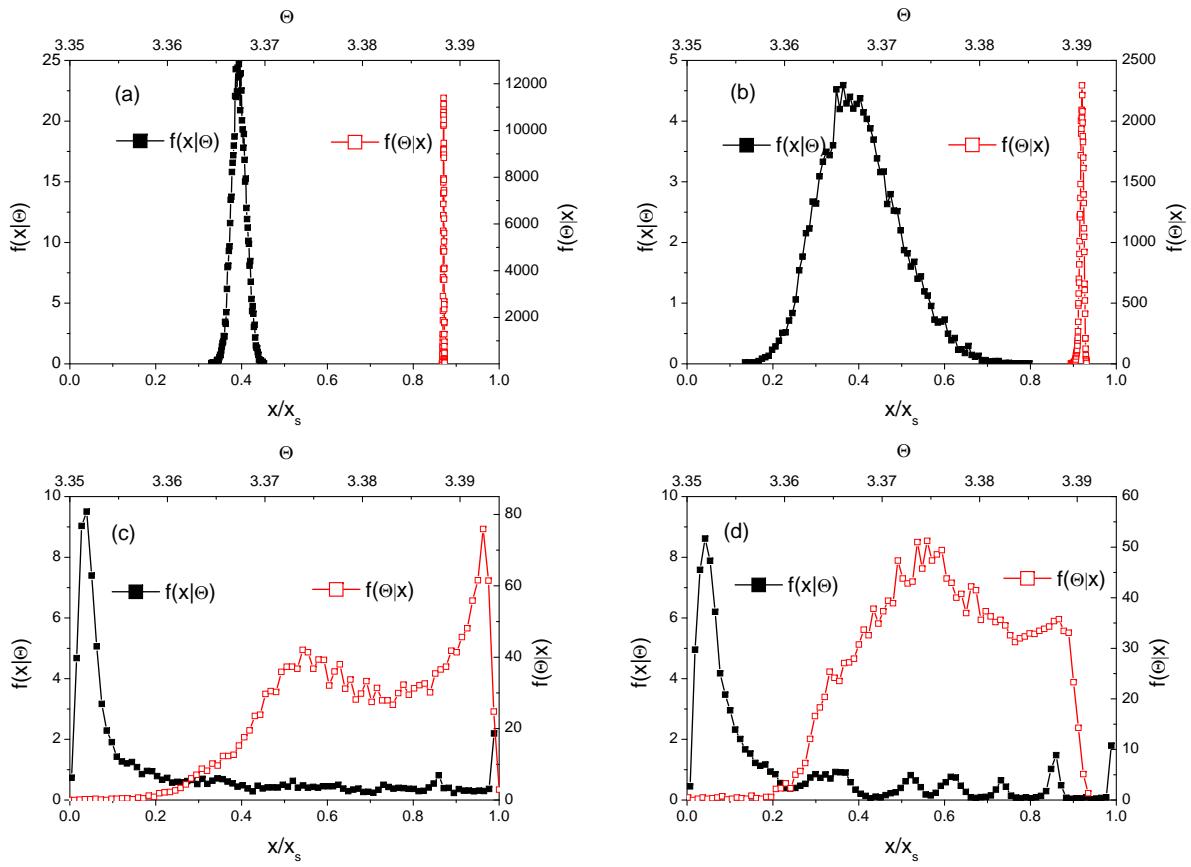


Рис. 3.7. Еволюція густин ймовірностей $f(x|\Theta)$ і $f(\Theta|x)$ при $K = 3 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с і $T_0 = 500K$, $\sigma^2 = 0$. Графіки а–г побудовано у моменти часу $t = 600, 640, 800, 1760$

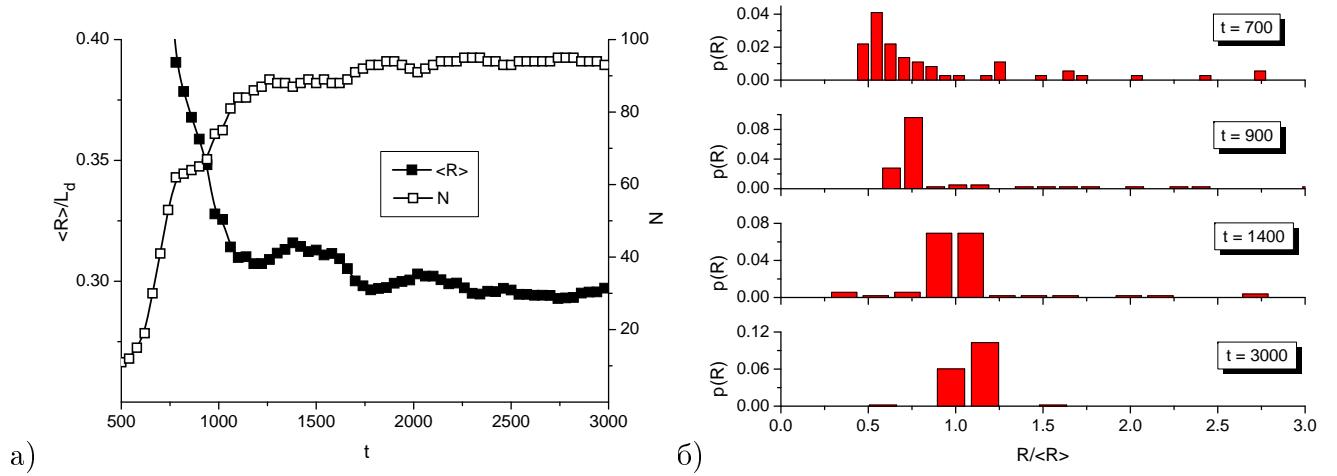


Рис. 3.8. Еволюція середнього радіуса $\langle R \rangle$ сферичних вакансійних кластерів (заповнені квадратики) і відповідної кількості кластерів (порожні квадратики) (графік (а)), і еволюція функції розподілу розмірів вакансійних кластерів $p(R)$ (графік (б)) при $K = 3 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с і $T_0 = 500K$, $\sigma^2 = 0$

радіусу і кількості островців. Більше того, тут присутні протифазні осциляції: зростання N відповідає зменшенню радіуса островців, і навпаки. Гістограми функції розподілу розмірів кластерів вакансій $p(R)$ зображені на рис.3.8б у

різні моменти часу. Як бачимо, на етапі структуроутворення виникає багато кластерів різних лінійних розмірів (див. верхню гістограму на рис.3.8б). У процесі опромінення, внаслідок проходження процесу відбору структур багато з них будуть середнього радіусу $\langle R \rangle$: на відповідних гістограмах присутні лише дві, розташовані поряд з середнім радіусом, колонки (див. нижні гістограми на рис.3.8б). Отримана осциляторна поведінка вакансійних кластерів якісно повторює добре відомий експериментальні спостереження осциляцій вакансійних кластерів у зразках нікелю під опроміненням його ж іонами [60].

3.3. Висновки до розділу 3

Показано, що процеси відбору структур відбуваються внаслідок взаємодії між концентрацією дефектів і температурою приповерхневого шару.

1. Установлено, що флюктуації швидкості пошкоджень приводять до обмеження області значень швидкості пошкоджень та температури за яких реалізується відбір структур.

2. Морфологія утворюваних структур залежить від температури середовища та швидкості пошкоджень: при низькій швидкості формування дефектів на поверхні утворюються сферичні вакансійні острівці, при її зростанні формуються видовжені структури (типу брижі).

3. Установлено, що середній розмір вакансійних острівців змінюється в інтервалі від 30 до 300 нм, у залежності від швидкості формування дефектів. Середній розмір острівців змінюється осциляторно внаслідок проходження процесів відбору структур.

Результати цього розділу добре узгоджуються з відомими існуючими теоретичними і експериментальними даними [16, 57, 60, 63, 183–185]. Отримані у розділі результати опубліковано у праці [6].

РОЗДІЛ 4

ОСОБЛИВОСТІ ФОРМУВАННЯ ТА РОСТУ ПОР У СТОХАСТИЧНІЙ СИСТЕМІ ДЕФЕКТІВ

У цьому розділі досліджується динаміка росту розміру пор в рамках швидкісної теорії з включенням стохастичних ефектів в утворення дефектів, а також проводиться вивчення впливу зовнішнього шуму на процеси росту пор. Проводиться аналіз для однорідної моделі та досліджується процес росту пор у розподіленій системі дефектів з деформаційними нестійкостями. У підрозділі 4.1 проводиться опис впливу зовнішніх флюктуацій на критичний радіус та робиться оцінка кросоверу динамічних режимів за наявності додаткових стоків точкових дефектів. У наступному підрозділі 4.2 досліджується універсальна динаміка росту та проводиться числове моделювання. Моделювання процесу росту пор у розподіленій системі дефектів проводиться у підрозділі 4.3 .

4.1. Ріст розміру пор в нерівноважних стохастичних системах точкових дефектів

4.1.1. Стохастична модель росту пор.

Для описання моделі динаміки нерівноважних точкових дефектів (вакансії та міжвузля в кристалічній решітці) використаємо стандартну швидкісну теорію, яка була описана в підрозділі 2.1.1. Рівняння еволюції системи дефектів з концентраціями вакансій c_v та міжвузлів c_i , що продукуються опроміненням, мають вигляд (4.1). Під впливом опромінення точкові дефекти здатні акумулюватися у пори, які зростають у ході еволюції системи та призводять до розпухання.

Скориставшись стандартним підходом швидкісної теорії та теорії росту пор [43, 71, 72, 85, 86], де пори утворюються відповідно до потоку точкових дефектів концентраціями c_v та c_i до пор, динамічне рівняння радіуса пори отримується з визначення швидкості розпухання, як зміни об'єму опромінюваного матеріалу

з часом у вигляді: $\frac{d}{dt} \frac{\Delta V}{V} \equiv \dot{\mathcal{S}}$, де ΔV — зміна об'єму внаслідок утворення пор, V — вихідний об'єм системи. При фіксованій густині пор N маємо $\dot{\mathcal{S}} = 4\pi N R^2 \dot{R}$. Швидкість розпухання відповідає зміні об'єму за рахунок абсорбції вакансій $4\pi D_v R N c_v$, зміні об'єму за рахунок абсорбції міжузлів $-4\pi D_i R N c_i$ та зміні об'єму за рахунок теплової емісії вакансій з пор $-4\pi D_v R N (c_v^e(R) - c_v^e(\infty))$. $c_v^e(R) = c_{v0} e^{R_s/R}$ — рівноважна концентрація вакансій в околі пор радіусом R , $c_{v0} = e^{-E_v^f/T}$ — рівноважна концентрація вакансій, E_v^f — енергія формування вакансій, $R_s \equiv 2\gamma\Omega/T$, γ — поверхнева енергія пор, $c_v^e(\infty) = c_{v0}$ визначає концентрацію вакансій поблизу плоскої поверхні. Таким чином, динаміка точкових дефектів може впливати на характер росту пор в пересиченому ансамблі дефектів. Отже, стоками точкових дефектів у даному підході будуть не лише дислокаційна сітка та міжузлові та вакансійні петлі, але й пори. Далі будемо вважати, що ефекти кластеризації безпосередньо включені у розгляд і покладено $\varepsilon_i = \varepsilon_v$. Тому використовуємо позначення $K' \equiv K(1 - \varepsilon_i)$, далі штрих опущено.

Для врахування цього ефекту розглянемо еволюцію нерівноважного ансамблю точкових дефектів з урахуванням їх абсорбції порами та емісією з них. Відповідна динамічна модель набирає вигляду:

$$\begin{aligned} \partial_t c_v &= K - D_v(S_v^\rho + S^R)c_v - \alpha_r c_i c_v - \nabla \cdot \mathbf{J}_v, \\ \partial_t c_i &= K - D_i(S_i^\rho + S^R)c_i - \alpha_r c_i c_v - \nabla \cdot \mathbf{J}_i, \\ \partial_t R &= \frac{1}{R} [D_v(c_v - (c_v(R) - c_v^e(\infty))) - D_i c_i]. \end{aligned} \quad (4.1)$$

тут інтенсивність стоків точкових дефектів позначимо S^R та $S_{i,v}$, які були визначені в розділі 2, $S^R = 4\pi N R$ визначається через густину пор N та їх радіус R . У досліджуваному випадку приймається, що кількість дислокаційних петель слабко змінюється з часом в порівнянні з динамікою середнього радіуса пор. У загальному вигляді для стоків маємо $S_i \approx S_v \approx \text{const}$. Далі, вводячи дифузійну довжину $L_d = \sqrt{D_v \tau_v}$, $\tau_v = 1/\beta_v$ — час життя вакансій, масштабний коефіцієнт $\mu \equiv \alpha_r \tau_v$, перенормовану інтенсивність стоків $\theta \equiv 4\pi \Omega^{1/3} N / S_v$, можемо використати $x \equiv \mu c_v$ та $y \equiv \mu c_i$ як перенормовані концентрації точкових дефектів, що еволюціонують в безрозмірному часі $t' \equiv t/\tau_v$ та просторі $\mathbf{r}' = \mathbf{r}/L_d$ з швидкістю радіаційних пошкоджень $P \equiv K \tau_v \mu$. Таким чином маємо знerezмірену

систему основних рівнянь:

$$\begin{cases} \partial_t x = P - (1 + \theta R)x - xy - \nabla \mathbf{J}_v; \\ \partial_t y = P - \epsilon(1 + \theta R)y - xy - \epsilon \nabla \mathbf{J}_i; \\ \nu \partial_t R = \frac{1}{R} (x - (x(R) - x_0) - \kappa \epsilon y), \end{cases} \quad (4.2)$$

де радіус пор R вимірюється в одиницях постійної ґратниці $a \approx \Omega^{1/3}$. Тут введені наступні параметри: $\epsilon \equiv \tau_v/\tau_i \gg 1$, $\kappa \equiv S_v/S_i < 1$, $\nu \equiv S_v^\rho \mu/a^2$, $x_0 = \mu c_{v0}$. Припускаючи стохастичну природу швидкості генерації дефектів ($P \rightarrow P(t) = P + \zeta(t)$, де $\zeta(t)$ – білий шум інтенсивністю σ^2 з властивостями описаними в попередньому розділі), приходимо до стохастичної моделі досліджуваної системи.

4.1.2. Вплив зовнішнього шуму на динаміку росту пор в однорідній системі.

Порівнюючи різні часові масштаби у моделі (4.2), можна виявити, що радіус пор R є найповільнішою модою. Розглядаючи систему в однорідному випадку та виключаючи адіабатичні швидкі моди y та x , можемо знайти критичний радіус пор R_c при якому $\partial_t R = 0$. Рахуючи $\partial_t y \simeq \partial_t x = 0$ та зберігаючи лише найбільш істотний внесок, ми отримуємо $x \simeq P/(1 + \theta R)$ та $y \simeq \epsilon^{-1} P/(1 + \theta R)$. Підставляючи отримані вирази для x та y в рівняння для R , отримуємо рівняння Ланжевена виду

$$\nu \partial_t R = \frac{1}{R} \left(\frac{P(1 - \kappa)}{1 + \theta R} - x_0 (e^{R_s/R} - 1) \right) + g(R) \zeta(t), \quad (4.3)$$

де $g(R) = \sqrt{1 - \kappa} (R(1 + \theta R))^{-1}$ визначає амплітуду шуму, що задовольняє флюктуаційно-дисипативній теоремі. Оскільки ми маємо справу з стохастичною системою, то відповідний аналіз повинен бути зроблений з урахуванням динамічних величин усереднених по шуму $\zeta(t)$. Розглянемо стохастичну динаміку за Стратоновичем [180], для середнього розміра пори маємо

$$\nu \partial_t \langle R \rangle = \left\langle \frac{1}{R} \left(\frac{P(1 - \kappa)}{1 + \theta R} - x_0 (e^{R_s/R} - 1) \right) \right\rangle - \sigma^2 P(1 - \kappa) \left\langle \frac{1 + 2\theta R}{R^3 (1 + \theta R)^3} \right\rangle, \quad (4.4)$$

де останній член відноситься до, так званого, індукованого шумом дрейфу. Для оцінки впливу шуму на динаміку системи використовуватимемо макроскопічне наближення, що дозволяє покласти $\langle A(\cdot) \rangle \simeq A(\langle \cdot \rangle)$, $\forall A$.

Дослідимо вплив шуму на критичний радіус пор. Для цього задамо $\partial_t \langle R \rangle = 0$ та розглянемо рішення відповідного стаціонарного рівняння для R_c :

$$P = \frac{x_0}{1 - \kappa} \frac{(e^{R_s/R_c} - 1)(1 + \theta R_c) - 1}{1 - \sigma^2 \frac{1+2\theta R_c}{R_c^2(1+\theta R_c)^2}}. \quad (4.5)$$

Розв'язок цього рівняння може бути знайдено аналітично припускаючи таке: (i) дислокації є домінуючими стоками точкових дефектів ($\theta = 0$); (ii) пори є додатковими стоками точкових дефектів ($\theta \neq 0$). В першому випадку ми припускаємо, що вакансії можуть емітувати з початково сформованих пор. За детерміністичних умов приходимо до добре формули $R_c = R_s/\ln(2 + (1 - \kappa)P/x_0)$. З неї випливає, що зі збільшенням швидкості генерації дефектів критичний розмір пор зменшується. Дійсно, при великій густині дислокацій більшість дефектів релаксують рухаючись до дислокацій, поглинаючись ними. У стохастичному випадку ($\sigma^2 \neq 0$) розв'язок може бути отримане у межах $R_s/R, \theta \ll 1$ (високо-температурний режим), де використовується розвинення $x(R) \simeq x_0(1 + R_s/R)$. У такому випадку приходимо до виразу:

$$R_c = \frac{R_s}{2(1 + \frac{1-\kappa}{x_0}P)} \times \left[1 + \left\{ 1 + \sigma^2 \frac{4(1 - \kappa)P}{x_0 R_s^2} \left(1 + \frac{1 - \kappa}{x_0} P \right) \right\}^{1/2} \right]. \quad (4.6)$$

Отриманий розв'язок показує, що флюктуаційна компонента у швидкості набору дози діє протилежно до її регулярної частини. Дія шуму стимулює зростання R_c .

У випадку великих густин пор можемо переписати рівняння (4.5) в вигляді $P(1 - \kappa)/x_0 \approx (e^{R_s/R_c} - 1)(1 + \theta R)$, яке є справедливим для детермінованого та стохастичного випадків. Підставляючи сюди співвідношення $x \simeq P/(1 + \theta R)$ та вводячи вакансійне перенасичення $\Delta_x \equiv x/x_0$ маємо вираз $R_c = R_s/(1 - \kappa)\Delta_x$, що справедливий для теорії росту пор Ліфшиця-Сльозова-Вагнера [186–188].

У загальному випадку, рівняння (4.5) може бути вирішено чисельно. Для оцінки R_c використовуємо типові параметри для ОЦК-металів: $E_v^m = 0.8\text{eB}$, $E_v^f = 1.\text{eB}$, $D_v^0 = 2.5 \cdot 10^2 \text{nm}^2/\text{нс}$, $\rho_d \simeq 5 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$, $\gamma = 1.1 \cdot 10^{-3} \text{ eB/nm}^2$.

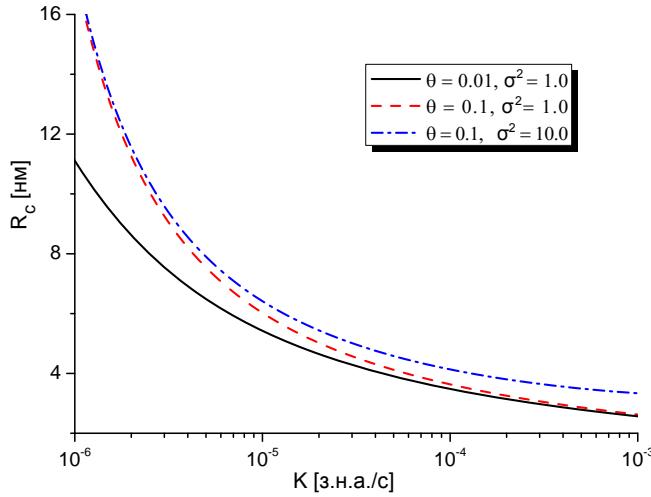


Рис. 4.1. Залежність критичного радіусу пор від швидкості набору дози при різних θ та σ^2

Кількість первинно сформованих пор $N \simeq 10^{15}$ пор/см³, для інтенсивності стоків ми приймаємо $S_v = 6.3 \cdot 10^{10}$ см⁻² та $S_i = 6.7 \cdot 10^{10}$ см⁻². Стандартні умови для опромінення в реакторах: $K = 10^{-6}$ з.н.а./с та $T = 773K$.

Відповідні залежності критичних розмірів пор від швидкості набору дози показано на рис.4.1 при різних інтенсивностях стоків пор θ та інтенсивності зовнішнього шуму σ^2 . Тут видно, що критичний радіус пор R_c зменшується з ростом швидкості набору дози. Крім того, критичний розмір пор зростає зі збільшенням інтенсивності стоків. Такий же ефект спостерігається з ростом інтенсивності шуму. Важливо, що інтенсивність стоків відіграє головну роль в процесі росту пор при малій швидкості генерації дефектів K , що відповідає опроміненню в реакторах. При великій швидкості набору дози K (наприклад, опромінення в прискорювачах), наявність стоків не впливає на малі значення критичного радіуса пор. Це означає, що при опроміненні в реакторних умовах, пори розміром $R > R_c$ будуть більшими ніж пори, що виникають при опроміненні в умовах прискорювачів. Також добре спостерігається вплив шуму при підвищених значеннях швидкості набору дози.

Дослідимо різницю в розпуханні для двох випадків: дислокації відіграють головну роль в якості стоків точкових дефектів та пори грають домінуючу роль як стоки. Припускаємо, що дислокації відіграють головну роль у розпуханні, знехтуємо емісією вакансій з пор та вкладами, що пов'язані з абсорбцією вакансій порами в рівнянні (4.2). Беручи до уваги тільки нерівноважні вакансії, за-

рахунок адіабатичного вилучення швидких мод, можемо використати скорочену модель. Виражаючи x та y з перших двох рівнянь наведеної системи (4.2) та вставляючи їх у рівняння для R , приходимо до наступного рівняння для радіуса пор в детерміністичному випадку $\nu\partial_t R^2 = 2P(1-\kappa)$. Воно має розв'язок в вигляді $R(t) = [2P\nu^{-1}(1-\kappa)(t-t_0)]^{1/2}$, що відповідає закону Ліфшиця-Алена-Кана [189, 190]. Таким чином для розпухання $\Delta V/V = N4\pi R^3/3$ отримуємо асимптоту $\Delta V \propto (Pt)^{3/2}$.

Далі розглянемо випадок, коли пори служать додатковими стоками для дефектів. В такій моделі зберігаємо члени, що містять перенормоване число пор θ , але знехтуємо емісією вакансійних пор в системі (4.2). Виключаючи швидкі моди та припускаючи велику кількість пор отримуємо $\nu\theta R^2\partial_t R = (1-\kappa)P$. Розв'язок цього рівняння має вигляд: $R(t) = (3(\nu\theta)^{-1}(1-\kappa)P(t-t_0))^{1/3}$, що відповідає теорії Ліфшиця-Сльозова-Вагнера [186–188]. Таким чином для розпухання маємо $\Delta V/V \propto Pt$. Порівнюючи дві асимптоти для розпухання, можна побачити, що додаткові стоки вакансій затримують ріст пор та набухання відповідно.

4.2. Універсальність закону росту пор

4.2.1. Аналіз скейлінгових характеристик процеса росту пор.

Відповідний аналіз може бути проведений в рамках стандартної квазі-стаціонарної границі для однорідної системи, де допускається емісія вакансій з пор. Тут потрібно відзначити, що за рахунок виключення з розгляду швидких мод та використання наближеного виразу $x(R) \simeq x_0(1 + R_s/R)$ при $\epsilon^{-1}x \ll 1$, ми приходимо до стандартного результату теорії Ліфшиця-Сльозова-Вагнера, де динаміка розміру пор описується рівнянням $\nu(x_0R_s)^{-1}RdR/dt = (1/R_c - 1/R)$. Тут критичний радіус пор $R_c = R_s/(1-\kappa)\Delta_x$ залежить від швидкості генерації дефектів P через перенасичення вакансіями Δ_x . У стандартній теорії Ліфшиця-Сльозова-Вагнера число нерівноважних вакансій обмежене. У досліджуваній системі вакансії продукуються сталою дією опромінення. Таким чином, закон

збереження маси може відрізнятися від визначення його в класичній теорії.

Для проведення статистичного опису, введемо наступні обмеження для функції розподілу розміру пор $\rho(R, t)$:

- початковий розподіл зародків пор $\rho(R, 0) = N_0 \rho_0(R)$ (N_0 це початково сформована кількість зародків) та його умови нормування $\int_0^\infty \rho_0(R) dR = 1$;
- умова, що дає часову залежність кількості зародків є такою: $N(t) \equiv \int \rho(R, t) dR$;
- $(4\pi/3) \int dR R^3 \rho(R, t) = q(t)$ — повний об'єм всіх пор;
- закон збереження має вигляд: $\Delta_x(t) + q(t) = Qt^\alpha$, де Q ефективність зайняття вакансій, $\alpha \geq 0$ показник росту, що описує конкуренцію між процесами пересичення вакансій та ростом пор.

Густина ймовірності $\rho(R, t)$ задовільняє рівняння неперервності $\partial_t \rho(R, t) = -\partial_R(\dot{R}\rho(R, t))$.

У автомодельному режимі для часових залежностей припускаємо $R(t) = ya(t)$, $\rho(R, t) = [a(t)]^\gamma \phi(y)$, де масштабна функція $a(t) \propto t^H$ визначається за показником Гольдера $H \in [0, 1]$ [191]. Тоді для числа пор отримуємо $N(t) \propto [a(t)]^{1+\gamma} \propto t^{H(1+\gamma)}$, де $R_c(t) \propto [\Delta(t)]^{-1}$. Звідси слідує, що в самоподібному режимі еволюції системи величина $R(t)$ поводить себе таким же чином як $R_c(t)$, тобто, $R(t) \sim R_c(t) \propto t^H$. Можемо оцінити асимптотику для середнього розміра пор $\langle R(t) \rangle = \overline{R(t)}/N(t)$, де $\overline{R(t)} = \int R \rho(R, t) dR \propto t^{H(\gamma+2)}$. Використовуючи масштабування $N(t) \propto t^{H(1+\gamma)}$, отримуємо універсальний закон $\langle R(t) \rangle \propto t^{1/3}$.

Приймаючи $\dot{R} = [a(t)]^{-2} \varpi(y)$ та вставляючи його в рівняння неперервності для $\rho(R, t)$ (див. обмеження (2)) приходимо до двох рівнянь: перше для часової залежності $a(t)$ в вигляді $\gamma\phi - y\phi' = (\varpi\phi)',$ друге для величини y в вигляді $\gamma\phi - y\phi' = (\varpi\phi)',$ де штрих означає похідну по y . З першого рівняння отримуємо $a(t) = (3\nu|t-t_0|)^{1/3}$, де відповідно до визначення $a(t) \propto t^H$ маємо $H = 1/3$; розв'язок другого рівняння дає нам функцію $\phi(y) = \phi(0) \exp\left(\int_y \frac{\varpi'-\gamma}{\varpi+y} dy\right)$, де $\phi(0)$ визначає кількість первинно сформованих зародків N_0 , відповідно до обмеження (1).

Для визначення інтервалу значень показників γ та α приймаємо до розгляду, що відповідно до теорії Ліфшиця-Сльозова-Вагнера та механізму визрівання

Оствальда, кількість пор $N(t)$ повинна зменшуватися з часом. Отже, відповідно до обмеження (2) для показника γ отримуємо $\gamma < -1$. Використовуючи закон збереження (4) з повним об'ємом пор $q(t) \propto t^{(4+\gamma)/3}$, отримуємо інтервал значень для показника α : $0 \leq \alpha < (4 + \gamma)/3$. Таким чином показник γ приймає значення $-4 < \gamma < -1$.

Для ілюстрації впливу швидкості набору дози на динаміку системи, достатньо використати лише основний внесок в співвідношені між R_c та P . В такому випадку можемо використати наближення $R_c^{-1} \simeq R_s^{-1}(1 + \beta)$, де введений керуючий параметр $\beta \equiv (1 - \kappa)P/x_0$. В випадку коли $\beta = 0$ (відсутній вплив опромінення) приходимо до стандартної картини, де $R_c(\beta = 0) \equiv R_{c0}$. Перенормувавши знерозмірений радіус пори $u \equiv R/R_{c0}$ можна записати відповідне динамічне рівняння в вигляді $du/d\tau = v(u)$ у логарифмічному часі τ Ліфшиця-Сльозова [157], де $v(u) \equiv (1 + \beta)u^{-1} - u^{-2} - \chi u$. Для описання флюктуацій швидкості набору дози припускаємо наступне: $\beta \rightarrow \beta(\tau) = \beta + \xi(\tau)$, де $\langle \xi(\tau) \rangle = 0$, $\langle \xi(\tau)\xi(\tau') \rangle = 2\beta\Sigma\delta(\tau - \tau')$. Отже, стохастична динаміка розміру пор визначається рівнянням Ланжевена.

$$\frac{du}{d\tau} = v(u) + g(u)\xi(\tau), \quad g(u) = u^{-1}. \quad (4.7)$$

Керуючий параметр β впливає на значення χ . Дійсно, оскільки $v(u)$ має єдиний максимум $v(u^*) = 0$ при $u^* = \sqrt{(1 + \beta)/3\chi}$, то можемо знайти перенормоване стаціонарне значення для $\chi(\beta)$: $\chi(\beta; \tau \rightarrow \infty) \equiv \chi^* = 4(1 + \beta)^3/27$ [157]; далі покладемо $\chi \equiv \chi^*$ та використаємо його стаціонарне значення $4(1 + \beta)^3/27$.

Для знаходження функції розподілу пор за розмірами будемо мати справу з рівнянням неперервності для густини ймовірності $P(\tau, u) = \langle \varrho(u, \tau) \rangle_\xi$, де проведено усереднення за шумом. Густина ймовірності $\varrho(u, \tau)$ задовольняє рівняння неперервності в наступному вигляді: $\partial_\tau \varrho = -\partial_u([v + g\xi(\tau)]\varrho)$. Усереднюючи рівняння за шумом ξ , отримуємо рівняння Фоккера-Планка для функції густини ймовірності $P(\tau, u)$ [171]:

$$\partial_\tau P(\tau, u) = -\partial_u (v + \beta\Sigma g(\partial_u g) - \beta\Sigma\partial_u g^2) P(\tau, u). \quad (4.8)$$

Відповідні розв'язки можуть бути знайдені в вигляді $P(\tau, u) = \psi(\tau)\phi(u)$. Використовуючи стандартний підхід теорії Ліфшиця-Сльозова-Вагнера та при-

ймаючи $\psi(\tau) = \psi(0)e^{-\lambda\tau}$ отримуємо два рівняння: одне для часової залежності $d\psi(\tau)/d\tau = -\lambda\psi(\tau)$ та інше для $\phi = \phi(u)$ в вигляді

$$\lambda\phi = [(v + \beta\Sigma gg')\phi - \beta\Sigma(g^2\phi)']', \quad (4.9)$$

де штрих означає похідну по u . Відповідний розв'язок повинен бути нормалізований ($\int \phi du = 1$) та повинен задовольняти наступним двом критеріям:

$$\phi(u=0) = 0, \quad \phi(u \rightarrow \infty) = 0. \quad (4.10)$$

В детерміністичному випадку ($\Sigma = 0$), приходимо до узагальненого результату (в пор. [157]) з $P(u, \tau) = e^{-\lambda\tau}\phi(u)$, де

$$\phi(u) = -\frac{N_0 e^{\lambda\tilde{\tau}(u)}}{v(u)}, \quad \tilde{\tau}(u) = \int_0^u \frac{du}{v(u)}. \quad (4.11)$$

Враховуючи стохастичний випадок, використовуємо наближення великого шуму, де $1/\Sigma$ малий параметр. Далі відповідна функція розподілу подається в квазі-гіббсовій формі $\phi(u) \propto e^{-W(u)/\Sigma}$. Підставляючи це в рівняння (4.9) отримуємо наближене рівняння в вигляді

$$\lambda \approx [v - \beta\Sigma gg' + g^2 W']'. \quad (4.12)$$

Воно має наступний розв'язок

$$W(u) = \int^u \frac{\lambda u - v(u)}{g^2(u)} du + \beta\Sigma \ln g(u). \quad (4.13)$$

Використовуючи потенціал $W(u)$ розподіл $\phi(u)$, що задовільняє критеріям (4.10) набирає вигляду:

$$\phi(u) \approx Z_0 u^2 \exp\left(-\frac{1}{\beta\Sigma} \left[u - \frac{1+\beta}{2}u^2 + \frac{\lambda + \tilde{\chi}}{4}u^4\right]\right), \quad (4.14)$$

де Z_0 стала нормування. Отже для густини ймовірності маємо

$$P(u, \tau) = e^{-\lambda\tau}\phi(u). \quad (4.15)$$

Використовуючи співвідношення $P(u, \tau)du = \rho(R, t)dR$, кількість пор можна визначити як $N(\tau) = \int P(\tau, u)du = const \cdot e^{-\lambda\tau}$. Відповідно до співвідношення між τ та t , отримуємо: $N(t) \propto t^{-\lambda/\chi}$. Порівнюючи його з вище наведеною асимптою $N(t) \propto t^{H(1+\gamma)}$ отримуємо співвідношення

$$|\gamma| = 1 + 3\lambda/\chi, \quad 1 < |\gamma| < 4. \quad (4.16)$$

Це ж співвідношення можна знайти з урахуванням асимптоти для $q(\tau)$ та порівнюючи його з $q(t) \propto t^{(4+\gamma)/3}$. Показник λ приймає значення в інтервалі $0 < \lambda < \chi$. Відповідно до визначення показника росту $0 \leq \alpha < (4 + \gamma)/3$, знаходимо $0 \leq \alpha < 1 - \lambda/\chi$. Підставляючи сюди максимальне значення для λ , отримуємо

$$0 \leq \alpha < 1. \quad (4.17)$$

Звідси слідує, що оскільки величина χ є функцією перенормованої швидкості набору дози β , то всі динамічні показники залежать від швидкості набору дози.

Для перевірки часової залежності середнього розміру пор $\langle u \rangle$ використовуємо визначення $\langle u \rangle = \int u P(u, \tau) du / N(\tau)$. Це дає $\langle u \rangle = const$, що приводить до висновку: усереднений розмір пори еволюціонує як $R_c(t)$, що добре узгоджується з теорією Ліфшиця-Сльозова-Вагнера. Дослідивши часові асимптоти можна зробити висновок, що скелінговий закон для розпухання в детерміністичному та стохастичному випадку має наступний вигляд $\Delta V/V \propto t$.

4.2.2. Числове моделювання універсальної динаміки.

Проведемо числове дослідження поведінки системи за різних наборах дози та при різних значеннях інтенсивності шуму. Для цього нами проведено числове розвязання рівняння Ланжевена (4.7) за допомогою метода Хойна з часовим кроком $\Delta t = 0.001$. Усереднення проводилось за 10^4 реалізації. Відповідні часові залежності величин $\langle u(\tau) \rangle$ та $\langle (\delta u(\tau))^2 \rangle$ отриманих з числового розв'язку рівняння Ланжевена показано на рис.4.2. Видно, що в процесі еволюції системи середнє та дисперсія перенормованого радіуса пори досягають стаціонарних значень. Виникнення такого стаціонарного режиму означає реалізацію універсальної динаміки системи, де середній розмір пори $\langle R(t) \rangle$ еволюціонує відповідно до критичного розміру $\langle R_c(t) \rangle$. Для ілюстрації універсальної поведінки системи, обчислювались відповідні густини ймовірності в різні моменти часу. Результати представлені на рис.4.3 з якого видно, що розподіл $P(u/\langle u \rangle; \tau)$ залишається незмінним в різних часових масштабах. Він добре апроксимується аналітичною формулою (4.14) (див. суцільну лінію на рис.4.3). Вплив керуючого параметру β та інтенсивності шуму на стаціонарні значення $\langle u \rangle$ та $\langle (\delta u)^2 \rangle$

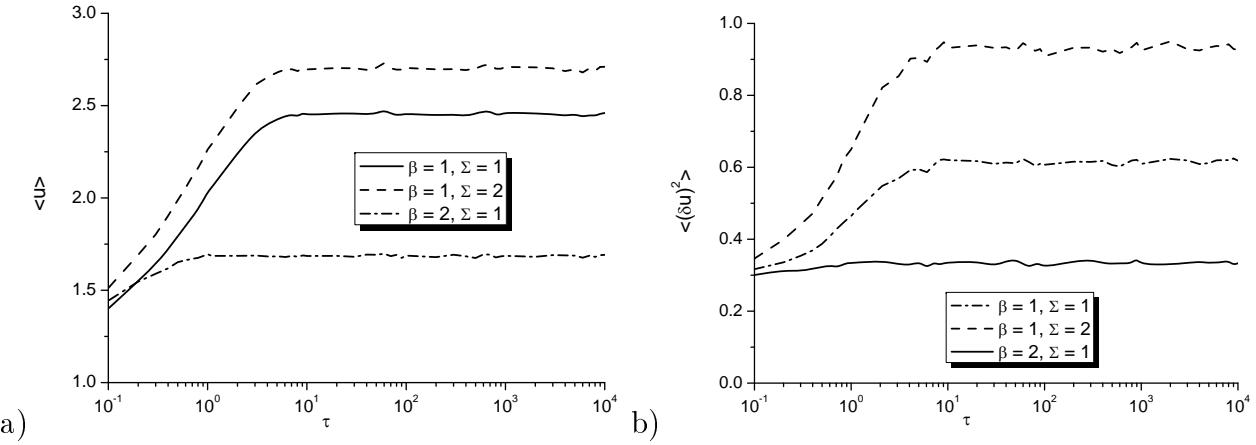


Рис. 4.2. Динаміка середнього радіусу пор $\langle u(\tau) \rangle$ (а) та дисперсії $\langle (\delta u)^2 \rangle$ (б) при різних β та Σ

показано на рис.4.4. З результатів показаних на рис.4.4а, слідує, що середнє та дисперсія u поводять себе немонотонно зі збільшенням β : при малих β ці величини зростають, в той час як при підвищених β маємо спадаючу поведінку $\langle u \rangle$ та $\langle (\delta u)^2 \rangle$. Немонотонна поведінка цих статистичних моментів сильно залежить від конкуренції стохастичної та детерміністичної динаміки. Дійсно, приймаючи великі значення інтенсивності шуму Σ при малих β , шум діє стандартним чином, збільшуючи дисперсію u . Вона ефективно пов'язана з ростом усередненої за ансамблем величини $\langle u \rangle$ при малих β . За рахунок збільшення перенормованої швидкості набору дози β , середній радіус пори зменшується. Цей ефект добре відповідає поведінці критичного радіуса пори R_c описаній в рівняннях (4.5, 4.6): вплив опромінення зменшує R_c . Оскільки $\langle R \rangle$ поводиться аналогічно до R_c , вплив опромінення сприяє формуванню пор з малим лінійним розміром. З рис.4.4б, бачимо, що з ростом Σ зростають значення $\langle u \rangle$ та $\langle (\delta u)^2 \rangle$. Флуктуації підвищеної інтенсивності призводять до реалізації різних значень величини u , а, отже, усереднений розмір пор приймає більші значення в порівнянні з випадком малої інтенсивності шуму. Цей ефект відповідає поведінці R_c знайденої в (4.5, 4.6): зі збільшенням інтенсивності шуму зростають значення R_c та $\langle R \rangle$.

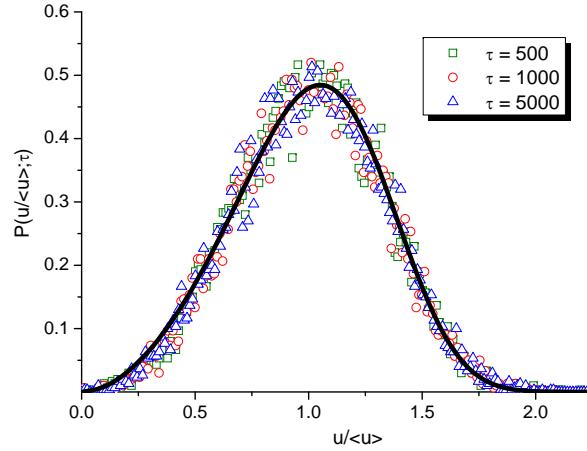


Рис. 4.3. Універсальна поведінка функції густини ймовірності $P(u/\langle u \rangle, \tau)$ при $\beta = 1$, $\Sigma = 1$

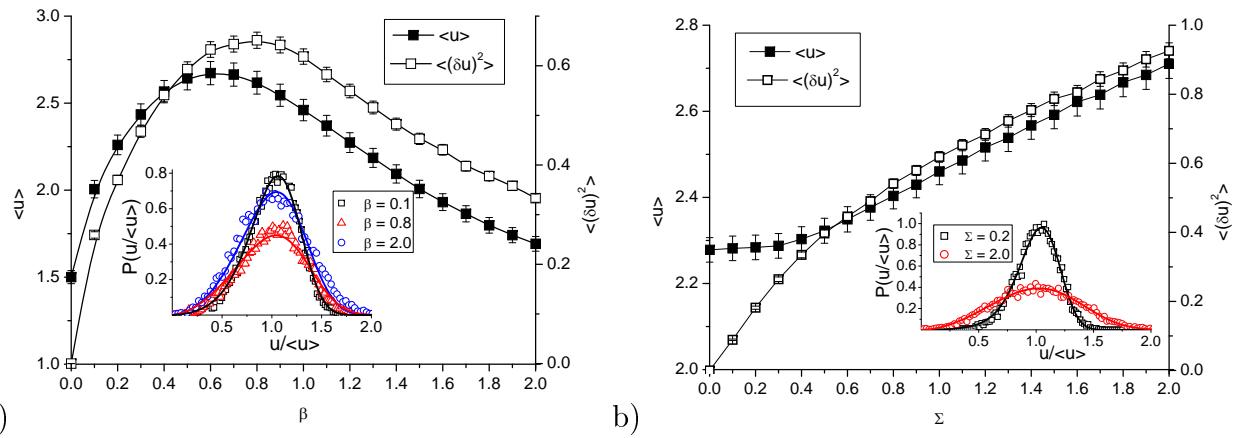


Рис. 4.4. Залежності стаціонарних значень середнього та дисперсії від керуючого параметру β при $\Sigma = 1$ (а) та Σ при $\beta = 1$ (б)

4.3. Рист пор в розподіленій системі дефектів з деформаційною нестійкістю

У цьому підрозділі ми розглянемо формування просторової нестабільності в системі точкових дефектів, що виникає при пружній деформації решітки. Для ілюстрації просторового упорядкування нерівноважних вакансій у вакансійно-збагачених доменах та росту розміра пори, ми використовуємо чисельне моделювання.

4.3.1. Дифузійні потоки точкових дефектів та аналіз стійкості.

Для отримання дифузійних потоків дефектів двох сортів скористаємося визначенням вільної енергії системи дефектів [89, 90]:

$$\mathcal{F}_d = \int d\mathbf{r} [E_v^f c_v + E_i^f c_i + T((c_v \ln c_v + c_i \ln c_i) + (1 - c_v - c_i) \ln(1 - c_v - c_i))], \quad (4.18)$$

де $E_{i,v}^f$ позначає енергію формування дефекту. Потоки дефектів задаються стандартним чином: $\mathbf{J}_{i,v} = \mathbf{J}_{i,v}^0 + c_{i,v} \mathbf{v}_{i,v}$, де $\mathbf{J}_{i,v}^0 = L_{i,v} X_{i,v}$ вільні дифузійні потоки, $L_{i,v}$ — кінетичні коефіцієнти Онсагера, $X_{i,v} = -\nabla(\mu_{i,v}/T)$ позначає термодинамічну силу дифузії, що виражається через хімічні потенціали дефектів $\mu_{i,v} = \delta\mathcal{F}_d/\delta c_{i,v}$; $\mathbf{v}_{i,v} = D_{i,v} \mathbf{F}_{i,v}/T$ визначає швидкість дрейфу дефектів під дією сили $\mathbf{F}_{i,v} = -\nabla U_{i,v}$ пов'язане з взаємодією дефектів з неоднорідним полем деформації. Розглянемо невзаємодіючу систему. Обчисливши хімічні потенціали дефектів $\mu_{i,v}$ та підставляючи їх в компоненти потоку вільної дифузії $\mathbf{J}_{i,v}^0 = -D_{i,v} \nabla c_{i,v}$, і порівнюючи отримані вирази з законом Фіка для вільної дифузії ($\mathbf{J}_{i,v}^0 = -D_{i,v} \nabla c_{i,v}$), можемо знайти відповідні кінетичні коефіцієнти: $L_v = D_v c_v (1 - c_i - c_v)/(1 - c_i)$, $L_i = D_i c_v (1 - c_i - c_v)/(1 - c_v)$. Введемо градієнту складову $\eta_{i,v} |\nabla c_{i,v}|^2 / 2$ у вираз для вільної енергії (4.18), де $\eta_{i,v}$ характеризує енергетичні витрати, пов'язані зі створенням неоднорідності. Враховуючи вищепередоване для повних дифузійних потоків маємо

$$\mathbf{J}_{i,v} = -D_{i,v} (1 + c_{i,v} \nabla U_{i,v}/T) \nabla c_{i,v} + D_{i,v} \eta_{i,v} \nabla^3 c_{i,v}. \quad (4.19)$$

Взаємодія дефектів відбувається за рахунок деформації гратниці матриці. При цьому деформаційний потенціал $U_{i,v}$ пов'язаний з пружною деформацією середовища визначимо як $U_{i,v} = -\kappa \Omega^{-1} \varpi_{i,v} e$, де $e \equiv \nabla \cdot \mathbf{u}$ пружна деформація континуму, \mathbf{u} — вектор зміщення, κ — об'ємний модуль пружності, $|\varpi_{i,v}|$ — дилатаційний параметр. Як було показано раніше [31] для потенціалу деформації маємо $U_{i,v} = -\kappa \Omega^{-1} \varpi_{i,v}^2 c_{i,v}$, де для параметра взаємодії маємо $\varepsilon = \kappa \Omega^{-1} \varpi_{i,v}^2 / T$. В такому випадку потік дефектів набуває вигляду

$$\mathbf{J}_{i,v} = -D_{i,v} [(1 - \varepsilon c_{i,v}) \nabla c_{i,v} - \eta_{i,v} \nabla^3 c_{i,v}]. \quad (4.20)$$

Звідси випливає, що останній член, що відповідає за пружний внесок може привести до просторової нестабільності, що в свою чергу призводить до формування просторової структури вакансій в матриці. Це добре видно при розгляді найпростішого випадку, коли припускаємо, що концентрація міжвузлів менша на декілька порядків порівняно з концентрацією вакансій. Таким чином, можна виключити з розгляду міжвузля. В такому випадку фіксуючи радіус пор R замість двох рівнянь системи (4.1) отримуємо рівняння для c_v , де дифузій потік $\mathbf{J}_v = -D_v(\mathcal{D}_{ef}(c_v)\nabla c_v - \eta_v \nabla^3 c_v)$, $\mathcal{D}_{ef}(c_v) = 1 - \varepsilon c_v$. З огляду на динаміку відхилень $\delta c_v = c_v - c_{vs}$ від стаціонарного однорідного стану $c_{vs} = c_{vs}(KR)$, на коротких часових масштабах, де $\delta c_v \propto e^{\lambda(k)t}$ характеризуються нестабільністю показника $\lambda(k)$, що залежить від хвильового числа k , можемо знайти $\lambda(k) = -D_v(S_v + S^R) - D_v k^2 (\mathcal{D}_{ef}(c_{vs}) + \eta_v k^2)$. Бачимо, що $\lambda(k=0) < 0$, тобто система стійка до однорідних збурень. Просторова нестабільність характеризується $\lambda(k) > 0$, що реалізується при підвищених $c_{vs}(K)$, де внесок пружної енергії $-\varepsilon c_v$ призводить до $\mathcal{D}_{ef}(c_{vs}) < 0$. Показник стабільності $\lambda(k)$ набуває позитивних значень всередині фіксованого інтервалу для хвильових чисел k . Це означає, що система стає нестійкою при неоднорідних збуреннях і реалізується просторові структури вакансій в матриці.Період просторових структур вакансій в матриці $d_0 = 2\pi/k_{max}$ визначає положення максимального значення $\lambda_{max} = \lambda(k = k_{max})$. Принципово важливо, що ці вакансії не належать стокам пор. Кількість вакансій в порі можна охарактеризувати лише середнім радіусом пустот R . Як правило, для числа вакансій, N_v , що належать порі безрозмірного радіусу R справедливим є вираз $N_v = 4\pi R^3/3$.

Розглянемо стійкість однорідного стану (x_s, y_s) системи (4.2) з перенормованими потоками поданими в рівнянні (4.20). Покладемо $R \equiv R_c = const$. Для малих флюктуацій $\delta x = \langle x \rangle - x_s$ та $\delta y = \langle y \rangle - y_s$ в лінійному режимі можна записати $\delta x \propto e^{\lambda(k)t}$, $\delta y \propto e^{\lambda(k)t}$ і обчислити власні значення (eigenvalues) $\lambda_{1,2}(k)$. При дослідженні стійкості відповідної матриці Якобі можна побачити, що $\lambda_{1,2}(k)$ завжди приймає дійсні значення. Перше з них (скажімо λ_1) завжди негативний, а другий набуває позитивних значень хвильових чисел в інтервалі $k \in [k_1, k_2]$ при певному виборі параметрів системи, що означає просторову

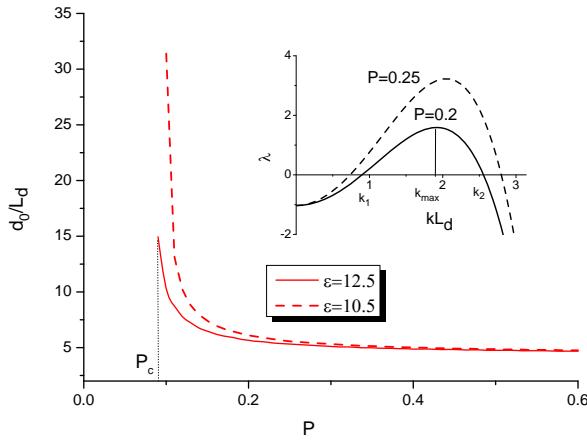


Рис. 4.5. Залежності періоду вакансійних комплексів при різних ε при $\epsilon = 1000$, $R = 30$, $\theta = 0.001$. Залежності $\lambda(k)$ представлена у вставці при $\varepsilon = 12.5$, $\epsilon = 1000$, $R = 30$, $\theta = 0.001$

нестабільність полів x and y . Всередині цього інтервалу $\lambda_2(k)$ має максимум при $k = k_{max}$, що відповідає найбільш нестійкій моді та періоду просторових структур $d_0 = 2\pi/k_{max}$. Зі збільшенням швидкості набору дози число мод відповідальних за просторові модуляції збільшується. Залежності періоду просторових структур від d_0 від швидкості набору дози P показано на рис.4.5; поведінка $\lambda_2(k)$ показана на вставці. Як можемо побачити, період просторових структур приймає значення декількох дифузійних довжин L_d . Крім того, формування матриці вакансійного комплексу можливе тільки вище порогового значення P_c . Це означає, що при малій швидкості набору дози система залишається стійкою до неоднорідних збурень. З отриманих результатів виявлено, що висока швидкість генерації дефектів призводить до зменшення періоду d_0 , що, в свою чергу, зменшує розмір доменів збагачених вакансіями; збільшення енергії деформації призводить до росту d_0 .

4.3.2. Моделювання росту пор в розподіленій системі.

У числовому моделюванні всі розрахунки проведені на решітці з квадратною симетрією лінійного розміру $L = 128\Delta l$ з періодичними граничними умовами і розміром комірки $\Delta l = 0.5$; крок за часом $\Delta t = 0.00025$. Початкові умови вибиралися такими: $\langle x(0, \mathbf{r}) \rangle = 0.01$, $\langle y(0, \mathbf{r}) \rangle = 0.001$, $R(0)/R_s = 1.5$ з $\langle (\delta x(0, \mathbf{r}))^2 \rangle = 0.01$, $\langle (\delta y(0, \mathbf{r}))^2 \rangle = 0.001$. При моделюванні було використано

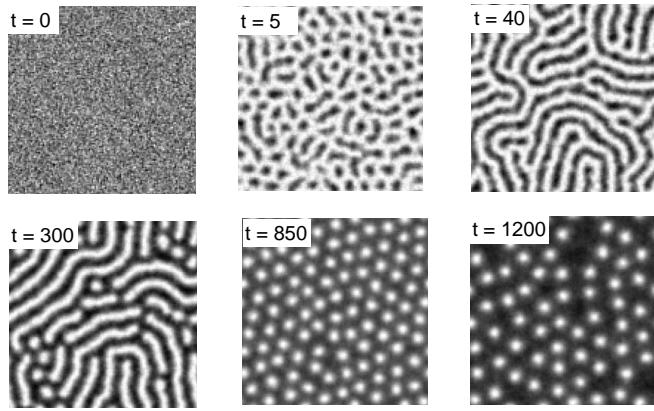


Рис. 4.6. Типова еволюція концентрації вакансій (білий колір) при $\theta = 0.1$, $P = 0.25$, $\epsilon = 1000$, $R/R_s = 1.2$, $\theta = 0.01$, $\varepsilon = 12.5$

метод Хойна [170] для інтегрування системи рівнянь (4.2). Було визначено вектор станів $\mathbf{x} = \{x, y, R\}$, вектор детерміністичної сили $\mathbf{f} = \{f_x, f_y, f_R\}$ з відповідними регулярними компонентами f_x , f_y та f_R для трьох компонент вектору \mathbf{x} , вектор дифузійного потоку $\mathbf{J} = \{J_v, 0, 0\}$ та амплітуди шумів $\mathbf{g} = \{1, 1, 0\}$. Відповідне дискретне подання системи (4.2) стає таким:

$$\frac{d\mathbf{x}_k}{dt} = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}) - \nabla_{kj} \mathbf{J}_j + \mathbf{g}_k \zeta_k(t), \quad (4.21)$$

де $k = 1, \dots, N^2$; ∇_{kj} визначено співвідношеннями (2.27).

Типові картини еволюції поля концентрації вакансій показано на рис.4.6. Можемо спостерігати, що різні стадії перегрупування вакансій в матричній фазі супроводжуються змінами морфології доменів, збагачених вакансіями. Оскільки ми не розглядаємо пори як реальні об'єктами простору, то працюємо лише з концентрацією вакансій всередині кристалічної матриці. Для опису спостережуваного процесу самоорганізації зручно використовувати часові залежності для концентрації вакансій $\langle x \rangle$ та відповідної дисперсії $\langle (\delta x)^2 \rangle$. Дисперсія, як правило, грає роль параметра порядку при формуванні структури. Типові зміни середньої концентрації вакансій та дисперсії представлені на рис.5.6а. Починаючи з початкового розподілу Гаусса для полів x та y на ранніх стадіях, відбувається генерація вакансій в результаті впливу опромінення. В процесі еволюції системи, число вакансій зростає і перевищує деяке критичне значення, що відповідає за просторову нестабільність. Величина $\langle x \rangle$ зростає, досягаючи свого максимального значення. Відповідна дисперсія досягає першого максимуму,

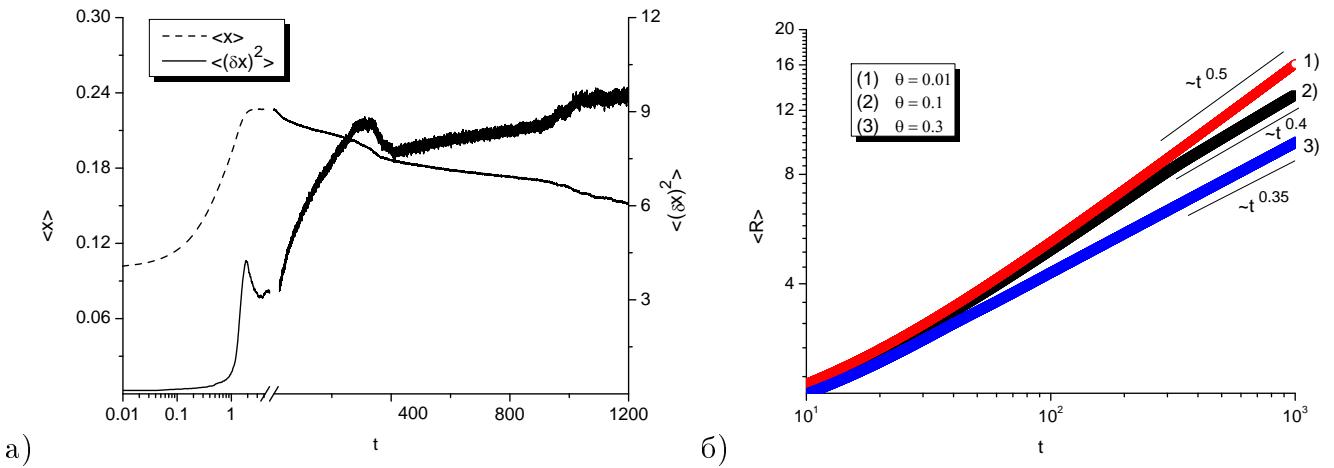


Рис. 4.7. Часові залежності усередненої концентрації вакансій та їх дисперсії (а) та усереднений радіус пор (б) при $P = 0.25$, $\epsilon = 1000$, $R/R_s = 1.2$, $\theta = 0.01$, $\varepsilon = 12.5$

що означає агломерацію вакансій (див. знімок при $t = 5$ на рис. 4.6). На цьому етапі розмір пор починають рости, а з фазової матриці зникає деяка кількість вакансій. Це призводить до формування гратки структури з сильно взаємодіючими вакансіями, тоді як вільні та мало взаємодіючі вакансії рухаються до пор (див. знімок при $t = 40$ на рис. 4.6). Таким чином, середня концентрація вакансій зменшується. В цей же час, зростає дисперсія, що означає морфологічні зміни доменах збагачених вакансіями, а саме, поділ структур на невеликі сферичні домени (див. знімки при $t = 300$ на рис. 4.6). Цей етап супроводжується швидким зменшенням середньої концентрації вакансій. Тут дисперсія досягає другого піку. В кінці маємо картину стохастично-розподілених в матриці збагачених вакансіями доменів. Їх упорядкування добре відповідає росту $\langle(\delta x)^2\rangle$ до свого стаціонарного значення. Під час процесу упорядкування, мігруючі вакансії абсорбується зростаючими порами; величина $\langle x \rangle$ повільно зменшується. Відповідна упорядкована конфігурація на даному етапі представлена знімком при $t = 850$ на рис. 4.6. Радіус пор стає все більшим, ефективність стоків пор зростає. На цьому етапі пори абсорбуєть вакансії з вакансійно-збагачених областей; їх число зменшується (див. знімок при $t = 1200$). Відповідно до динаміки середнього розміру пори $\langle R \rangle$ показаної на рис. 4.7б при різних інтенсивностях стоків пор, можемо побачити, що радіус пустот поводить себе алгебраїчним чином $\langle R \rangle \propto t^H$, де показник росту H залежить від інтенсивності стоків пори θ . При великому внеску дислокацій, як стоків точкових дефектів ($\theta \rightarrow 0$),

отримуємо результати, що відповідають теоретичній залежності з $H = 1/2$ (закон Ліфшиця-Аллена-Кана). Зі зростанням внеску пор, що характеризується великим значенням θ , показник росту H зменшується і досягає значення $H = 1/3$. Це пов'язано з теорією Ліфшиця-Сльозова-Вагнера, що було показано в підрозділі 4.2. Дія шуму приводить до збільшення значення R , оскільки збільшується R_c , що було показано у підрозділі 4.1.2. Такі ж результати маємо з аналізу проведеного в підрозділі 4.2.

4.4. Висновки до розділу 4

Досліджено стохастичну модель динаміку точкових дефектів з залежними від часу інтенсивностями стоків, визначеними через радіус пори, де генерація дефектів є стохастичною величиною. Вивчено вплив стоків пори та генерації стохастичного точкового дефекту на динаміку росту розміру пори.

1. Флуктуації швидкості набору дози збільшують критичний радіус пори за рахунок підвищення ефективної температури системи, що приводить до збільшення рухливості дефектів та додаткової емісії вакансій з пор.

2. Показано, що в випадку домінуючого внеску дислокацій, як стоків точкових дефектів, розмір пор еволюціонує відповідно до динаміки Ліфшиця-Аллена-Кана з показником росту $1/2$; у випадку домінування пор як стоків, динаміка розміру пор підкоряється теорії Ліфшиця-Сльозова-Вагнера з показником росту $1/3$.

3. Виявлено, що основні скейлінгові показники універсальності росту залежать від швидкості набору дози у наближенні великого шуму.

Отримані у даному розділі результати відповідають теоретичним та експериментальним даним [43, 68, 72–74, 80–82] та узагальнюють їх; результати розділу опубліковано у працях [3, 7, 12].

РОЗДІЛ 5

МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПАДУ БІНАРНИХ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ ПРИ РАДІАЦІЙНОМУ ОПРОМІНЕННІ

Розділ присвячено дослідженню нерівноважних процесів фазового розшарування у твердих бінарних розчинах, індукованих дією опромінення. У підрозділі 5.1 розглянуто процеси перерозподілу нерівноважних вакансій при спінодальному розпаді бінарного твердого розчину, що знаходиться при сталій дії опромінення в рамках узагальнення теорії Кана-Хільярда та підходу Даркена, де враховується деформаційні нестійкості обумовлені взаємодією дефектів, яка враховує формування структурного безладу внаслідок опромінення. Досліджено кінетику розпаду та структуроутворення, статистичні розподіли полів концентрації розчину та концентрації вакансій за різних швидкостей набору дози опромінення. В підрозділі 5.2 розвинено модель фазового розшарування за дислокаційно-підтримуваним механізмом при врахуванні структурного безладу та атермічного атомного перемішування (балістична дифузія), викликаних опроміненням.

5.1. Розпад бінарного розчину за вакансійним механізмом дифузії

Дослідження у цьому підрозділі спрямоване на розвинення підходів Кана-Хільярда з урахуванням кінетики точкових дефектів, що продукуються в каскадах, та їх перерозподіл з утворенням дисипативних структур. Тут проводиться узагальнення цієї теорії уведенням “квазі-хімічних” реакцій дефектів та припущенням про взаємодію вакансій в полях пружних напружень, викликаних самими дефектами. Буде показано, що при малих дозах опромінення відбуваються звичайні процеси розпаду, які уповільнюються при незначному збільшенні швидкості набору дози (збільшенні кількості нерівноважних вакансій), а при великих швидкостях — вакансії здатні формувати просторові структури та змінювати морфологію ламелей.

5.1.1. Модель розпаду бінарної системи з нерівноважними вакансіями.

Розглянемо бінарну кристалічну систему, де c_A та c_B — концентрації атомів сорту A та B ($c_A + c_B = 1$). Для побудови моделі системи будемо виходити із визначення відповідних дифузійних потоків кожної з компонент твердого розчину:

$$\mathbf{j}_{\{A,B\}} = -L_{\{A,B\}} \nabla \mu_{\{A,B\}}, \quad (5.1)$$

де $\mu_{\{A,B\}}$ пов'язується із відповідним хімічним потенціалом атомів певного сорту, $L_{\{A,B\}} = c_{\{A,B\}} D_{\{A,B\}}^*/T$ — кінетичний коефіцієнт, $D_{\{A,B\}}^*$ — власний коефіцієнт дифузії атомів певного сорту; T — температура в енергетичних одиницях. Основне припущення полягає у істотній різниці у власних коефіцієнтах дифузії атомів двох сортів, тобто $D_A^* \neq D_B^*$. Згідно співвідношенню Гіббса-Дюгема ($c_A d\mu_A + c_B d\mu_B = 0$) для хімічних потенціалів μ_A та μ_B дифузійні потоки можуть бути записані у вигляді:

$$\mathbf{j}_A = c_B L_A \nabla(\mu_B - \mu_A), \quad \mathbf{j}_B = -c_A L_B \nabla(\mu_B - \mu_A). \quad (5.2)$$

При врахуванні перерозподілу вакансій концентрацією c_v для потоків можемо записати

$$\mathbf{j}_A = c_B L_A \nabla \tilde{\mu} + (c_A D_A^*/c_v) \nabla c_v, \quad \mathbf{j}_B = -c_A L_B \nabla \tilde{\mu} + (c_B D_B^*/c_v) \nabla c_v, \quad (5.3)$$

де $\tilde{\mu}$ є узагальненим хімічним потенціалом, який враховує нелокальні взаємодії в неоднорідних сплавах. Густина вільної енергії f задається відповідно до теорії регулярного твердого розчину Брегга-Вільямса:

$$f_{BW} = Z w_0 c_A c_B / 2 + T(c_A \ln c_A + c_B \ln c_B), \quad (5.4)$$

де Z — координаційне число; енергія упорядкування $w_0 \equiv 2V_{A,B} - V_{A,A} - V_{B,B}$ подається через енергії взаємодії $V_{A,A}$, $V_{B,B}$ та $V_{A,B}$. Тоді для узагальненого хімічного потенціалу маємо: $\tilde{\mu} = \partial f / \partial c - \beta_0 \nabla^2 c_B$. Стала β_0 при квадраті градієнта концентрації задає квадрат радіусу взаємодії (ширини міжфазної границі), записаний через фур'є-образ енергії міжатомної взаємодії $v(k)$ згідно з виразом Кривоглаза-Клаппа-Мосса: $\beta_0(r_0) = \frac{1}{2} \frac{dv(k)}{dk^2}$, де r_0 радіус взаємодії пов'язаний з шириною міжфазної границі. Тут враховано неоднорідність сплаву за умови, що концентрація компонентів повільно змінюються на масштабі параметра

гратниці a , тобто, $c_B(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \simeq c_B(\mathbf{r}) + \mathbf{a} \cdot \nabla c_B(\mathbf{r})$. Це дозволяє увести градієнтну частину вільної енергії у вигляді $\beta_0(\nabla c_B)^2/2$.

Дифузійний потік вакансій визначається умовою збереження $\mathbf{j}_A + \mathbf{j}_B + \mathbf{j}_v = 0$. Це дозволяє записати

$$\mathbf{j}_v = (c_A L_B - c_B L_A) \nabla \tilde{\mu} - c_v^{-1} (c_A D_A + c_B D_B) \nabla c_v. \quad (5.5)$$

Різниця в коефіціентах самодифузії атомів, внаслідок ефекту Кіркендала, приводить до руху гратниці зі швидкістю, яка визначається потоком вакансій \mathbf{j}_v . Тому, далі переходимо до лабораторної системи відліку, переписавши потік атомів у вигляді:

$$\mathbf{J}_B = \mathbf{j}_B + c_B \mathbf{j}_v. \quad (5.6)$$

Підставляючи вирази для потоків \mathbf{j}_B та \mathbf{j}_v , приходимо до відомих виразів [99, 103]:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_B &= -\frac{c_A c_B (c_A D_B^* + c_B D_A^*)}{T} \nabla \tilde{\mu} + \frac{c_A c_B (D_B^* - D_A^*)}{c_v} \nabla c_v, \\ \mathbf{j}_v &= \frac{c_A c_B (D_B^* - D_A^*)}{T} \nabla \tilde{\mu} - \mathcal{D}_v \nabla c_v, \\ \mathcal{D}_v &\equiv \frac{c_A D_A^* + c_B D_B^*}{c_v}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Тут уведено позначення \mathcal{D}_v для коефіцієнту дифузії вакансій, який залежить від концентрації вакансій та концентрацій компонент твердого розчину. Перехресні члени у (5.7) описують обмінний вплив на перерозподіл компонента розчину та вакансій, відповідно. У нормальних умовах динаміка полів c_B та c_v є збереженою і задається рівняннями неперервності:

$$\partial_t c_B = -\nabla \cdot \mathbf{J}_B, \quad \partial_t c_v = -\nabla \cdot \mathbf{j}_v. \quad (5.8)$$

При цьому, загалом, припускається, що концентрація вакансій є швидкою модою у порівнянні з концентрацією розчину.

Розглядаючи бінарну систему в умовах радіаційного опромінення, слід прийняти до уваги ефекти, пов'язані з генерацією точкових дефектів у каскадах, їх релаксацією на стоках та анігіляцією. Ці ефекти враховуються у вигляді “квазіхімічних реакцій” в динаміці дефектів. При цьому, атомні частки c_A та c_B ма-

ють зберігатися¹. Відповідні рівняння динаміки точкових дефектів узагальнюються уведенням у розгляд реакційних складових, відповідних за джерела, стоки дефектів та їх анігіляцію. Отже, окрім вакансій, які при пересиченні можуть взаємодіяти, утворюючи кластери, до моделі мають бути включені міжузлові атоми двох сортів з концентраціями c_i^A та c_i^B . Таким чином, при врахуванні зазначених вище процесів із використанням швидкісної теорії еволюція повної системи буде задаватися такою системою рівнянь [30, 41, 43, 45, 46, 165]:

$$\begin{aligned}\partial_t c_i^A &= K c_A - \mathcal{D}_i \rho_N c_i^A - \alpha_r (c_v - c_{0v}) c_i^A - \nabla \cdot \mathbf{J}_i^A, \\ \partial_t c_i^B &= K c_B - \mathcal{D}_i \rho_N c_i^B - \alpha_r (c_v - c_{0v}) c_i^B - \nabla \cdot \mathbf{J}_i^B, \\ \partial_t c_v &= K - \mathcal{D}_v \rho_N (c_v - c_{0v}) - \alpha_r (c_v - c_{0v}) (c_i^A + c_i^B) - \nabla \cdot \mathbf{J}_v, \\ \partial_t c_B &= -\nabla \cdot \mathbf{J}_B.\end{aligned}\tag{5.9}$$

У рівняннях еволюції дефектів, як і раніше, перші доданки характеризують генерацію дефектів зі швидкістю радіаційних пошкоджень K ; другі доданки описують вихід дефектів на стоки (дислокації густиною ρ_N , що “розмазані” по системі) з коефіцієнтами дифузії $\mathcal{D}_i = \epsilon \mathcal{D}_v$, де $\epsilon \gg 1$; треті описують рекомбінацію дефектів. У останньому рівнянні опущено складові, що відповідають за реакції локального зменшення концентрації речовини при формуванні міжузлового атома, витоку атома зі стоку та будовування міжузлового атома у власне положення в ґратниці при взаємодії з вакансією. Уважається, що ці ефекти відбуваються на відстанях істотно менших за розмір просторової комірки, в якій перераховується концентрація речовини, а самі процеси є швидкоплинними у порівнянні з дифузійними. Тому, ними можна нехтувати. Останні доданки в (5.9) характеризують відповідні дифузійні потоки. При цьому, оскільки коефіцієнти дифузії міжузлів та вакансій істотно різняться, то, без втрати загальності, можна вважати, що міжузлові атоми розподілені однорідно. Це дозволяє опустити останні доданки в рівняннях для c_i^A та c_i^B . У рівнянні для концентрації вакансій уведено повний дифузійний потік, що враховує \mathbf{j}_v та потік взаємодіючих вакансій \mathbf{j}_v^{int} при виникненні пружних полів в околі самих

¹При врахуванні генерування вакансій опроміненням закон збереження $c_A + c_B + c_v = const$, справедливий для рівноважного випадку, порушується, оскільки $\int d\mathbf{r} c_v(\mathbf{r}, t) \neq const$. Тобто динаміка вакансій є незбереженою.

вакансій. Така взаємодія описується загально відомим зв'язком пружних полів та концентрацією їх носіїв, відповідний потенціал взаємодії був описаний в 2.

Для подальшого аналізу доцільно перейти до знерозмірених величин, поклавши $c \equiv c_B$, $\varepsilon \equiv Zw_0/T$, $\beta \equiv \beta_0/T$, $\tilde{D} \equiv D_A^*/D_B^*$, $t' \equiv tD_B^*\rho_N$, $P \equiv K/D_B^*\rho_N$. Просторові координати визначатимуться як $\mathbf{r}' \equiv \mathbf{r}/L_d$, де $L_d \equiv 1/\sqrt{\rho}$ – дифузійна довжина, $\ell \equiv r_0/L_d$. Тоді, уводячи масштабний параметр $\gamma \equiv 4\pi r_0/\Omega\rho_N$, визначимо швидкі змінні $x_i^{A,B} \equiv \gamma c_i^{A,B}$, які можуть бути адіабатично вилучені з розгляду за умови $\partial_{t'}x_i^{A,B} \simeq 0$. Отже, уводячи $x_v \equiv \gamma c_v$, приходимо до виразів

$$\begin{aligned} x_i^A &\simeq \frac{P(1-c)}{\epsilon[\tilde{D} + c(1-\tilde{D})]} \frac{x_v}{1+x_v-x_v^0}, \\ x_i^B &\simeq \frac{P_c}{\epsilon[\tilde{D} + c(1-\tilde{D})]} \frac{x_v}{1+x_v-x_v^0}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Підставляючи отримані вирази (5.10) у рівняння еволюції вакансій системи (5.9), та опускаючи штрихи при часовій змінній, отримуємо систему рівнянь:

$$\begin{aligned} \gamma^{-1}\partial_t x_v &= \frac{P}{1+x_v-x_v^0} - [\tilde{D} + c(1-\tilde{D})] \frac{x_v - x_v^0}{x_v} - \\ &- \nabla \cdot \left\{ (1-\tilde{D})c(1-c) \left[-\varepsilon \nabla c + \frac{\nabla c}{c(1-c)} - \beta \nabla^3 c \right] - \right. \\ &\left. - \frac{\tilde{D} + c(1-\tilde{D})}{x_v} \nabla x_v + \theta x_v \nabla(x_v + \ell^2 \nabla^2 x_v) \right\}, \\ \partial_t c &= \nabla \cdot \left\{ \left(1 - c(1-\tilde{D}) \right) c(1-c) \times \right. \\ &\times \left. \left[-\varepsilon \nabla c + \frac{\nabla c}{c(1-c)} - \beta \nabla^3 c \right] - \frac{(1-\tilde{D})c(1-c)}{x_v} \nabla x_v \right\}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Дослідження проводились при: $r_0 \sim 10^{-9}$ м, $\Omega \sim 10^{-29}$ м³ та $\rho_N \simeq 10^{14}$ м⁻², $\ell \sim 10^{-2}$, $\gamma \sim 10^7$. Отже концентрація вакансій x_v може розглядатися як швидка змінна у порівнянні з концентрацією c . Оцінка знерозміrenoї швидкості набору дози P при $K \simeq 10^{-6}$ з.н.а/с, потоці нейтронів $\sim 10^{15}$ см²/с, енергії нейтронів $\simeq 0.5$ МeВ та перетину дефектоутворення $3 \cdot 10^{-24}$ см² для металічних мішеней (з енергією первинно вибитого атому $\simeq (22 \div 25)$ еВ) при фіксованій температурі ~ 770 К дає $P \sim (0.01 \div 10)$. Основною задачею подальшого дослідження є опис картини самоорганізації вакансійного ансамблю при спінодальному розпаді бінарного твердого розчину за різних швидкостей набору дози опромінення

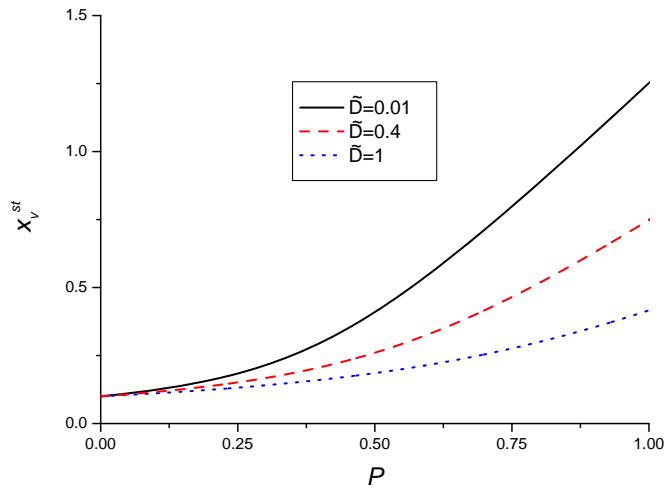


Рис. 5.1. Залежність стаціонарних значень концентрації вакансій від P при різних співвідношеннях між власними коефіцієнтами дифузії $\tilde{D} = D_A^*/D_B^*$ при $c_0 = 1/2$

P.

5.1.2. Лінійний аналіз процесів відбору структур.

Розглянемо стійкість стаціонарних станів. Для цього слід зауважити, що величина c є збереженою, тому її стаціонарне значення відповідає початковому, вибраному в інтервалі $c_0 \in (0, 1)$. Стaціонарне значення знерозміреної концентрації вакансій x_v^{st} визначається з розв'язку рівняння $\partial_t x_v = 0$:

$$x_v^{st} = x_v^0 - \frac{1}{2} + \frac{P}{2\mathcal{D}(c)} + \frac{1}{2} \left(1 + \frac{P}{\mathcal{D}(c)} \left[\frac{P}{\mathcal{D}(c)} - 2(1 - 2x_v^0) \right] \right)^{1/2}, \quad (5.12)$$

де уведено позначення $\mathcal{D}(c) \equiv \tilde{D} + c(1 - \tilde{D})$.

Зміна стаціонарної концентрації вакансій при опроміненні систем з різним співвідношенням між D_A^* та D_B^* показано на рис.5.16. З нього випливає, що в системах з меншою різницею у коефіцієнтах самодифузії кількість нерівноважних вакансій стає меншою, оскільки, згідно ефекту Кіркендала, потік вакансій до фази з більшим коефіцієнтом дифузії буде зменшуватися при вирівнюванні коефіцієнтів самодифузії.

Далі розглянемо стійкість стаціонарного стану (c_0, x_v^{st}) припускаючи малі відхилення $\delta c = c_0 + e^{\lambda(k)t+i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, $\delta x_v = x_v^{st} + e^{\lambda(k)t+i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Лінеаризуючи систему рівнянь (5.11) в околі (c_0, x_v^{st}) , можна отримати власні значення $\lambda(k)$ відповідної матриці стійкості Якобі, як розв'язки квадратного рівняння. Один з них є

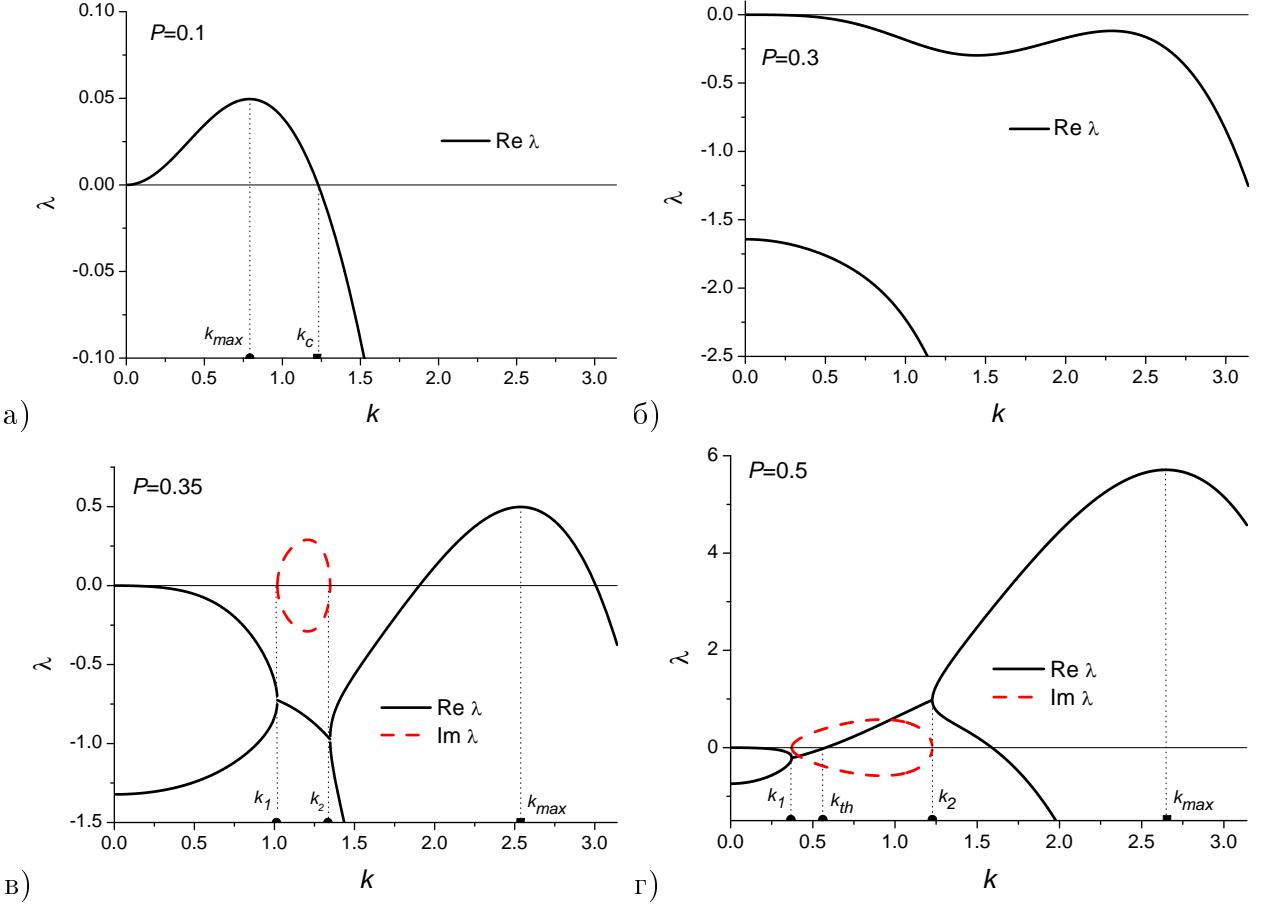


Рис. 5.2. Залежності власних значень матриці Якобі від хвильового числа в околі стаціонарного стану ($c_0 = 0.5, x_v = x_v^{st}$) при (а) $P = 0.1$, (б) $P = 0.3$, (в) $P = 0.35$, (г) $P = 0.5$. Решта параметрів: $x_v^0 = 0.1, \tilde{D} = 0.1, \beta = 1.0, \ell = 0.25, \varepsilon = 6, \theta = 10$

завжди негативним, тоді як інший може набувати позитивних значень залежно від швидкості P . Окрім того, можливими стають комплексні корені такого квадратного рівняння. Наявність комплексного кореня говорить про осциляційну поведінку полів концентрації розчину, вакансій та відповідних структурних факторів, як Фур'є-образів двоточкових кореляційних функцій: $\langle \delta c(\mathbf{r}, t) \delta c(\mathbf{r}', t) \rangle$, $\langle \delta x_v(\mathbf{r}, t) \delta x_v(\mathbf{r}', t) \rangle$. Така осциляційна поведінка свідчить про проходження процесів відбору структур, коли серед структур різного розміру система вибирає єдину, що відповідає найбільш нестійкій моді з хвильовим числом k_{max} . При цьому $\lambda(k_{max})$ є максимальним позитивним власним значенням матриці стійкості.

Розглянемо детальніше вплив швидкості дефектоутворення на проходження процесів відбору структур, досліджуючи власні значення матриці Якобі. Залежності $\lambda(k)$ при різних P наведено на рис.5.2. При $P = 0.1$ (див.рис.5.2а) маємо

один дійсний позитивний корінь $\lambda(k)$ в інтервалі $0 < k < k_c$, де k_c — критичне хвильове число, що обмежує нестійкі моди. Таким чином, на малих швидкостях дефектоутворення відбувається звичайний процес фазового розшарування, який спостерігається при розпаді неопроміненої системи. Із подальшим збільшенням швидкості дефектоутворення внаслідок генерування структурного безладу кількість нестійких мод істотно зменшується: висота піку позитивного власного значення $\lambda(k_{max})$ спадає, а його положення, яке відповідає $k = k_{max}$, зміщується до $k = 0$. Останнє свідчить про реалізацію лише довгих хвильових структур. При $P = 0.3$ (див. рис.5.2б) всі власні значення матриці стійкості є від'ємними. Це говорить про те, що нерівноважні вакансії за таких швидкостей істотно стримують процес розпаду внаслідок зворотного ефекту Кіркендала. Подальше зростання P приводить до виникнення позитивних значень $\lambda(k)$ в обмеженому інтервалі ненульових значень хвильового числа (див. рис.5.2в при $P = 0.35$). При цьому два дійсні негативні власні значення матриці Якобі вироджуються і в певному інтервалі $k_1 < k < k_2$ виникають два комплексно спряжених власних значення. Таким чином, при збільшенні дози, внаслідок пересичення взаємодіючими вакансіями, відбувається структуроутворення, яке супроводжується процесами відбору структур (наявністю $\Im\lambda(k) \neq 0$). Оскільки при цьому $\Re\lambda(k) < 0$, то відповідні процеси є згасаючими і з плином часу реалізується лише одна нестійка мода з хвильовим числом, що відповідає максимуму $\lambda(k)$. При подальшому збільшенні швидкості дефектоутворення (див. рис.5.2г при $P = 0.5$) процеси відбору структур можуть ставати незгасаючими на малих часових інтервалах. Останнє характеризується $\Im\lambda(k) \neq 0$ при $\Re\lambda(k) > 0$ у вузькому інтервалі хвильових чисел $k_{th} < k < k_2$, де k_{th} — визначає поріг виникнення нестійких осцилюючих мод. Очевидно, що з часом будуть реалізуватися лише структури з періодом, який відповідає максимальному значенню $\lambda(k_{max})$. Зазначимо, що процеси відбору структур в неопромінюваних системах істотно пов'язані із кінцевою швидкістю передачі збурень, зокрема із кінцевим часом релаксації дифузійного потоку (див. [123,154,182,192]). У нашому випадку процеси відбору структур пов'язуються із динамікою вакансійної підсистеми внаслідок дії радіаційного опромінення.

Розглянемо далі характер зміни хвильового числа k_{max} при збільшенні P за різних значень основних параметрів системи (див. рис.5.3). Загальний вигляд отриманих залежностей свідчить про таке: при зростанні P в системі реалізується фазове розшарування із утворенням довгохвильових структур (ламелей) (k_{max} прямує до нуля); при підвищених швидкостях набору дози спостерігається різке (стрибкоподібне) зростання k_{max} , що означає формування просторових кластерів з обмеженою характерною довжиною — структуроутворення. Зменшення k_{max} при зростанні P від нуля свідчить про те, що внаслідок генерування структурного безладу при опроміненні відбувається розмиття міжфазних границь, а кількість вакансій є недостатньою для структуроутворення, оскільки не досягнуто відповідного пересичення вакансій. Цей ефект обговорювався у попередніх дослідженнях фазового розшарування в опромінюваних системах (див. [122, 151, 152, 192]). При пересиченні вакансіями (за великих P) в системі відбувається самоорганізація ансамблю дефектів, що супроводжується формуванням структур взаємодіючих дефектів. Процеси формування структур дефектів в однокомпонентних системах, підданих опроміненню вивчалися в роботах [1, 2, 47, 48], де було показано вплив умов опромінення на характер утворюваних структур вакансій. Аналогічна зміна режимів поведінки опроміненої системи з фазового розшарування до структуроутворення при зростанні швидкості набору дози опромінення обговорювалася раніше при моделювання бінарної системи методами фазового поля та кінетичним Монте-Карло (див. [113, 115, 193]). Важливо, що при цьому існує певний інтервал для параметрів системи, зокрема ε та θ , коли зростання швидкості набору дози опромінення не супроводжується виникненням нестійких мод на малих часових інтервалах. У такому разі система стає однорідною ($k_{max} = 0$): фази, зображені на атоми сорту A та B не виділяються внаслідок генерування та перемішування вакансій по всій системі. Порівнюючи суцільну та штрихову криві на рис.5.3 можна бачити, що при зростанні швидкості набору дози до $P = P_0$ в системі ще можливими є процеси розшарування з утворенням довгохвильових ламелей. При цьому очевидно, що вакансії будуть зосереджуватися переважно у “м’якій” фазі (із більшим коефіцієнтом самодифузії атомів, $D_B^* \gg D_A^*$). Із подальшим

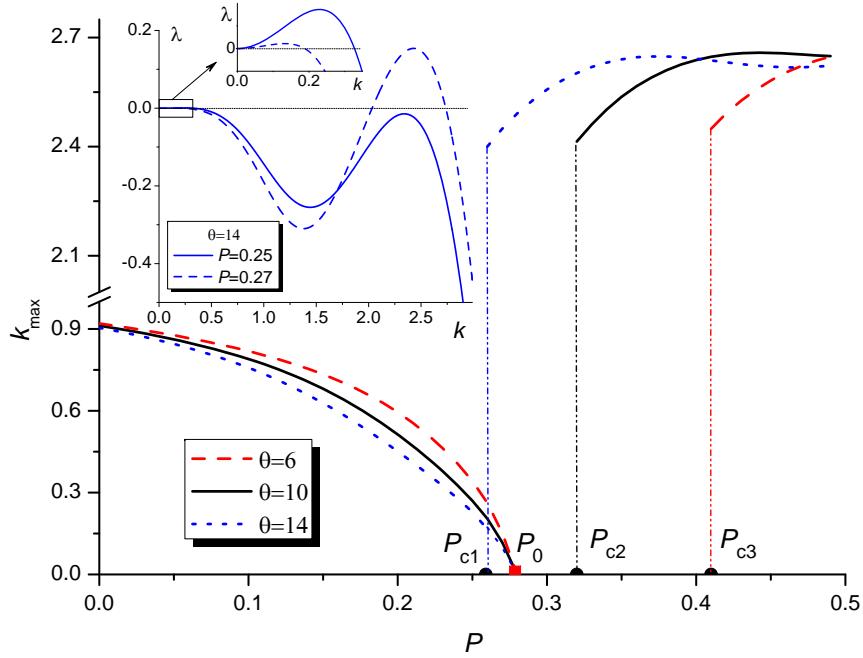


Рис. 5.3. Залежність k_{max} від P при різних значеннях ε та θ . Інші параметри є такими: $c_0 = 0.5$, $\varepsilon = 6$, $x_v^0 = 0.1$, $\tilde{D} = 0.1$, $\beta = 1.0$, $\ell = 0.25$

зростанням P , залежно від співвідношення параметрів взаємодії ε та θ , реалізується однорідний стан до певного критичного значення $P_{c\{2,3\}}$, оскільки тут $\lambda < 0$, а тому система є стійкою до просторових збурень, що дозволяє покласти $k_{max} = 0$. При цьому збільшення параметру взаємодії θ приводить до звуження інтервалу реалізації гомогенного розподілу концентрації вакансій та розчину. При великих співвідношеннях між θ та ε виникає зміна режимів розшарування та структуроутворення без реалізації гомогенних станів (пунктирна крива на рис.5.3). Тут поріг структуроутворення P_{c1} виникає істотно раніше порогу фазового розшарування P_0 . В інтервалі $P_{c1} < P < P_0$ величина λ має два піки: перший (на малих k) відповідає за розшарування; другий (на великих k) — за структуроутворення (див. вставку на рис.5.3). Однак, оскільки найбільш нестійка мода k_{max} відповідає найбільшому максимальному значенню λ , то очевидно, при підході до P_{c1} процеси розшарування будуть різко змінюватися процесами структуроутворення. Згідно з отриманими результатами відповідний перерозподіл вакансій істотно пов'язаний із ефектом Кіркендала.

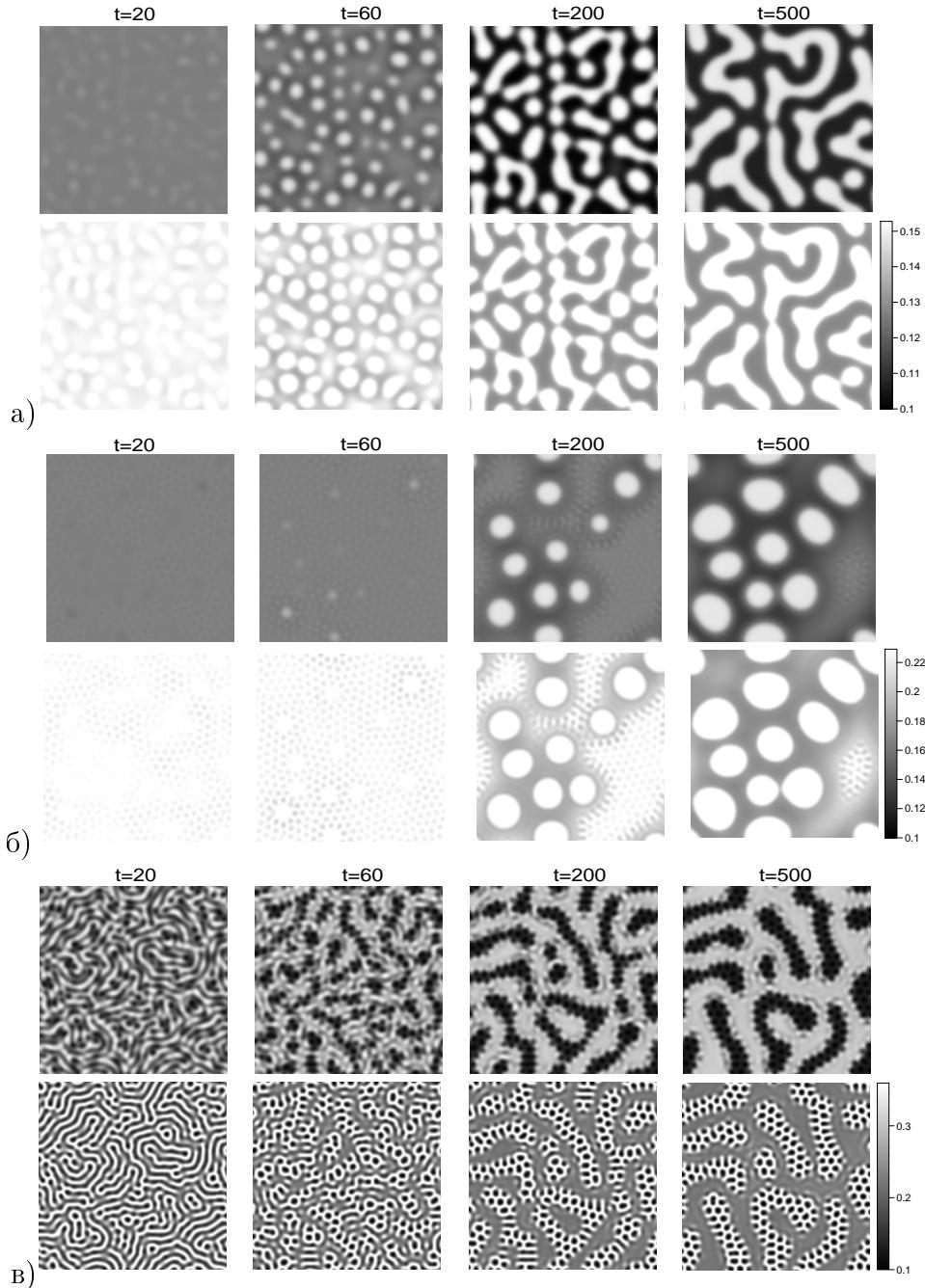


Рис. 5.4. Динаміка полів концентрації розчину та вакансій при $\tilde{D} = 0.1$ та різних P : а) $P = 0.2$; б) $P = 0.35$; в) $P = 0.5$

5.1.3. Числове моделювання самоорганізації вакансійної підсистеми.

У подальших дослідженнях будемо чисельно розв'язувати систему рівнянь (5.11) у знерозміреному часі. Числове розв'язання системи диференціальних рівнянь (5.11) проводилося на квадратній гратниці $L \times L$ з лінійною довжиною $L = N\Delta l$, де $N = 256$ — кількість комірок з характерною довжиною $\Delta l = 0.25$ (просторовий крок). Початкові умови вибиралися такими: $\langle c(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0.5$, $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle \equiv x_0 = 0.1$. Границні умови вибиралися періодичними. Різниця у

характерних часових масштабах еволюції концентрації розчину та концентрації вакансій фіксувалася значенням $\gamma = 10^3$. Моделювання проводилося при $\tilde{D} = 0.1$, $\varepsilon = 6$, $\beta = 1$, $\theta = 10$, $\ell = 0.25$ з часовим кроком інтегрування $\Delta t = 0.00015$. Моделювання у дискретному просторі виконувалось уведенням вектору станів $\mathbf{x} = \{x_v, c\}$ з векторами детерміністичних сил $\mathbf{R} = \{R_v, 0\}$ з компонентами, перша з яких визначає генерацію, рекомбінацію та анігіляцію вакансій, вектором відповідних дифузійних потоків $\mathbf{J} = \{J_v, J_c\}$, динаміка якого описувалася формальним рівнянням вигляду

$$\frac{d\mathbf{x}_k}{dt} = \mathbf{R}_k(\mathbf{x}) - \nabla_{kj}\mathbf{J}_j, \quad (5.13)$$

де $k = 1, \dots, N^2$; ∇_{kj} визначено співвідношеннями (2.27).

Типова картина еволюції системи при різних швидкостях дефектоутворення P подана на рис.5.4 (верхній рядок відповідає полю концентрації розчину, нижній — концентрації нерівноважних вакансій). З рис.5.4а видно, що при малих швидкостях набору дози в системі відбувається звичайний процес поділу фаз, де, внаслідок ефекту Кіркендала, вакансії переважно мігрують в область фази з більшим коефіцієнтом дифузії ($D_B^* \gg D_A^*$). При цьому морфологія вакансійних утворень повторює морфологію ламелей фаз, що випадають. При зростанні P (див. рис.5.4б) в системі на малих часових інтервалах спостерігається слабко виражені процеси структуроутворення, тоді як на великих часових інтервалах виділяються домени різних фаз з вакансіями у фазі з більшим коефіцієнтом самодифузії атомів відповідного сорту. При підвищенні швидкості P (див. рис.5.4в) відбувається формування вакансійних структур і відповідний перерозподіл атомів розчину. Впродовж еволюції при пересиченні нерівноважними вакансіями на великому часі формуються вакансійні кластери у фазі з меншим коефіцієнтом самодифузії атомів (у “твірдій” фазі) та на границях поділу. Така картина пояснюється тим, що інтенсивність релаксації нерівноважних вакансій є більшою у фазі з більшим коефіцієнтом самодифузії атомів (“м'яка” фаза). Вакансії у “твірдій” фазі є менш рухливими, що приводить до їх самоорганізації у кластери внаслідок пересичення та взаємодії у цій фазі, тоді як у “м'якій” фазі накопичені нерівноважні вакансії аніглюють та виходять на стоки із більшою інтенсивністю. Цей ефект відповідає отриманій залежності

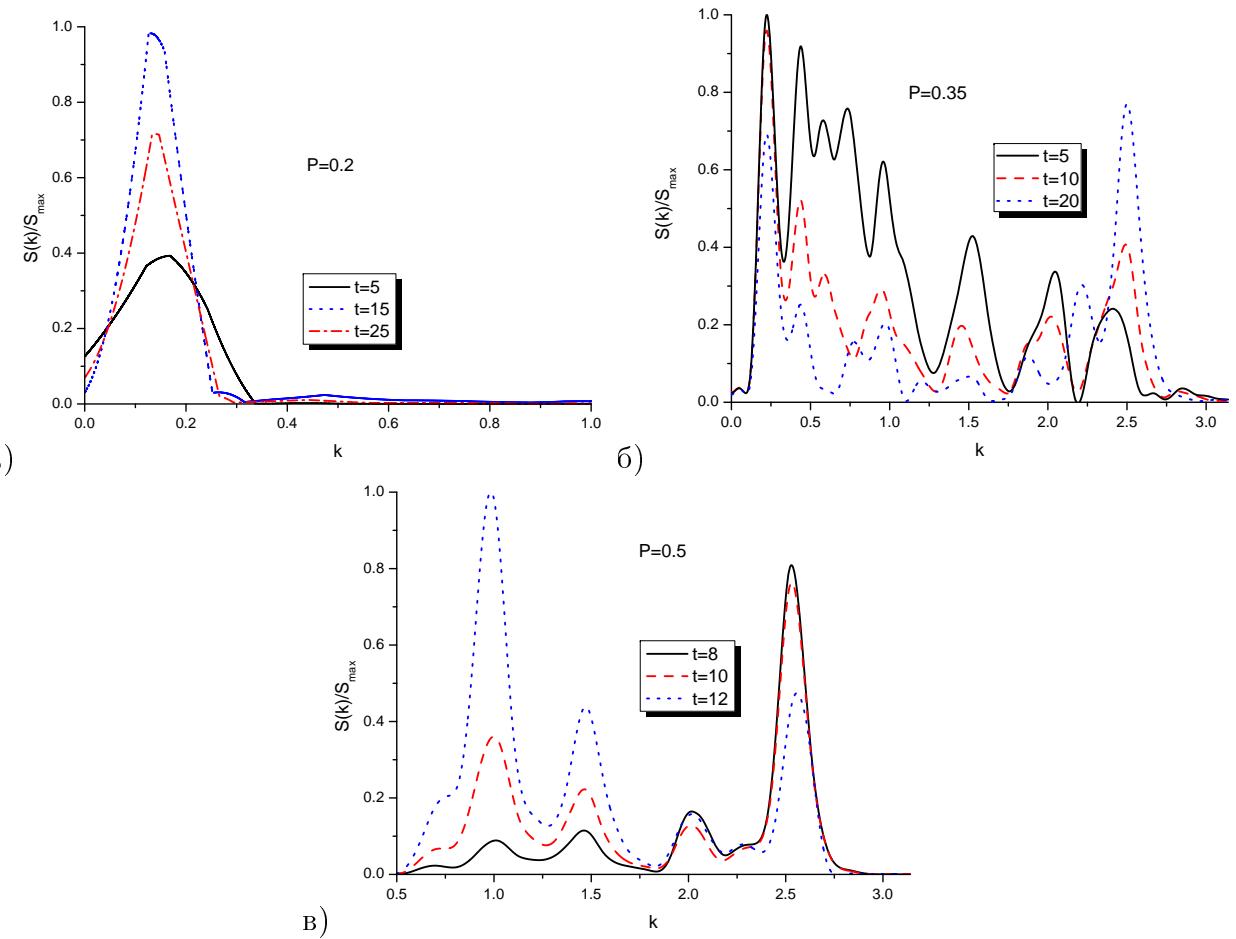


Рис. 5.5. Динаміка структурного фактору при різних P (початкові стадії): а) $P = 0.2$; б) $P = 0.35$; в) $P = 0.5$

стационарної концентрації нерівноважних вакансій від композиції розчину (див. рис.5.1а). Слід відзначити, що процеси структуроутворення відбуваються лише при підвищених швидкостях P , що відповідає лінійному аналізу стійкості.

Відповідно до отриманих числових даних можна проаналізувати процеси відбору структур на малих часових інтервалах, досліджуючи сферично - усереднений структурний фактор $S(k, t)$, визначений через фур'є-образ двочасіткової кореляційної функції концентрації $\langle \delta c(\mathbf{r}, t)\delta c(\mathbf{r}', t') \rangle$ (див розд.2). Динаміку останнього за різних значень P подано на рис.5.5. Як випливає з рис.5.5а при малих P в системі спостерігається процес фазового розшарування: тут положення піку структурного фактору прямує з часом до $k = 0$, а його висота зростає, при цьому в системі формуються домени фаз за спінодальним механізмом. Картина поведінки $S(k, t)$ за підвищених P принципово різиться із попереднім випадком. Так на рис.5.5б видно наявність декількох піків стру-

ктурного фактору на різних часових зразках. При цьому висота піків на великих хвильових числах зростає, тоді як на малих падає з плином часу. Така осциляційна поведінка свідчить про проходження процесів відбору структур. Впродовж подальшої еволюції супутні піки, які відповідають розмірам структур, що відбираються, будуть зникати і залишиться лише один пік, характерний для найбільш нестійкої моди. Аналогічний ефект зміни висоти піків спостерігається на рис.5.5в, що відповідає $P = 0.5$, але тут із часом зростає висота піку на малих k . Різниця між цими двома випадками ($P = 0.35, P = 0.5$) пояснюється тим, що при $P = 0.5$ спостерігається наростання осциляцій на малих хвильових числах, що було показано на рис.5.2 при $P = 0.5$, де $\Im\lambda \neq 0, \Re\lambda > 0$. З подальшим плином часу залишиться лише один пік, що відповідає хвильовому числу k_{max} .

Розглянемо динаміку упорядкування, досліджуючи: $\langle x_v(t) \rangle, J_v(t) = \langle (\delta x_v(\mathbf{r}, t))^2 \rangle, J_c = \langle (\delta c(\mathbf{r}, t))^2 \rangle$. Перша величина є середнім значенням концентрації вакансій по системі (середнє значення концентрації компонент розчину залишається незмінним при моделюванні, відповідно до закону збереження маси). Останні дві величини відіграють роль параметрів порядку при структуроутворенні та фазовому розшаруванні. Вони задають дисперсію в розподілі відповідних полів. Очевидно, що зростання такої дисперсії говорить про виділення скupчень (структур, фаз) із початково гомогенної (розупорядкованої) системи. Відповідні часові залежності показано на рис.5.6а,б,в.

Із отриманих залежностей $\langle x_v(t) \rangle$ (див.рис.5.6а) випливає, що виходячи із рівноважної концентрації вакансій, спочатку спостерігається зростання (накопичення вакансій), потім вихід на стоки (швидке спадання) та уповільнений перехід до стаціонарного режиму (перерозподіл з виходом в область “м’якої фази” та/або формуванням структур). Залежно від значення P час існування метастабільної фази (до виходу вакансій на стоки) змінюється: при великих швидкостях P кількість вакансій швидко зростає і миттєво відбувається їх перерозподіл; при малих P цей процес уповільнюється. Характер упорядкування вакансій можна прослідкувати на часових залежностях J_v . Тут при малих P (суцільна та штрихова криві на рис.5.6б) маємо спочатку спадання параметра

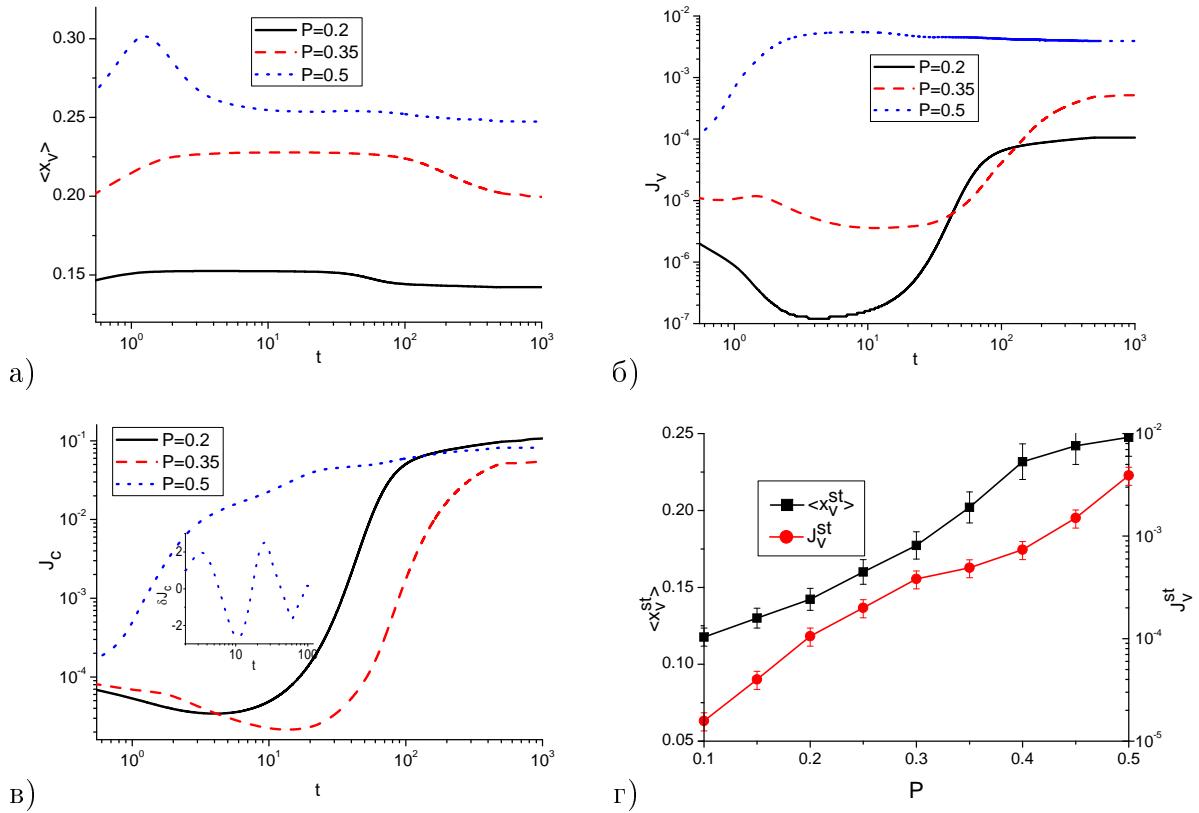


Рис. 5.6. Часові залежності: середньої концентрації вакансій $\langle x_v \rangle$ (а), параметрів порядку J_v , J_c (панелі (б) та (в)). Стационарні значення $\langle x_v^{st} \rangle$ та J_v^{st} від P (г)

порядку, що пояснюється однорідним розподілом вакансій по системі. Подальше зростання J_v свідчить про перерозподіл вакансій з їх сегрегацією у “м’якій” фазі. Збільшення P приводить до зростання значень параметра порядку J_v . При $P = 0.5$ спостерігається принципово інша динаміка J_v (див. пунктирну лінію на рис.5.6б). Тут режим спадання реалізується істотно раніше і проходить набагато швидше за попередні випадки (на рисунку не показано). При цьому параметр порядку стрімко зростає на декілька порядків і переходить до стационарного режиму. Отже, при великих P маємо істотно прискорений процес упорядкування з формуванням структур з нерівноважних вакансій. Слід зазначити, що при збільшенні P відбувається немонотонний характер росту параметра порядку J_v . Така немонотонність пояснюється осциляційною поведінкою. Дійсно, як випливає з аналізу стійкості у лінійному наближенні та динаміки структурного фактору на початкових стадіях, осциляційна поведінка має бути властивою для J_v та J_c . Оскільки J_v є величиною малою, то для ілюстрації відповідних осциляцій достатньо буде розглянути поведінку параметру

тра порядку J_c , зображену на рис.5.6в. Тут, як і очікувалося, маємо зростання J_c , що свідчить про випадіння фаз. Впродовж часу ці фази мають поділити всю систему на дві еквівалентні, тому величина J_c на великих часах буде логарифмічно повільно зростати. Процес відбору структур та відповідні осциляції можна побачити на стадіях росту та огрублення, якщо від залежності J_c (при $P = 0.5$) відняти тренд. Тоді отримуємо величину δJ_c , динаміка якої явно ілюструє осциляційні процеси відбору (див. вставку на рис.5.6в). Вплив швидкості дефектоутворення на стаціонарні значення середньої концентрації вакансій та відповідного параметра порядку подано на рис.5.6г. Видно, що зростання P підвищує $\langle x_v^{st} \rangle$ та на декілька порядків збільшує параметр порядку J_v^{st} . Необхідно відзначити той факт, що при зростанні швидкості P процес спінодального розпаду істотно уповільнюється (пор. криві $J_c(t)$ при $P = 0.2, P = 0.35$). При цьому у випадку $P = 0.3$ в системі взагалі не виникають просторової нестійкості. Таке демпфування пов'язується, перш за все, із зворотнім ефектом Кіркендала, коли нерівноважні вакансії уповільнюють процеси поділу фаз [194]. При подальшому зростанні P відбувається пересичення нерівноважними вакансіями, що приводить до їх взаємодії з утворенням структур. При великих швидкостях ($P = 0.5$) параметр порядку J_c стрімко зростає, що є індикатором швидкоплинних процесів структуроутворення.

5.2. Розпад бінарної системи за дислокаційно підтримуваним механізмом

У даному підрозділі проводимо дослідження статистичних особливостей впливу стохастичного перемішування атомів, викликаного дією опромінення при формуванні структурного безладу, на процеси поділу фаз за наявності рухомих дислокацій невідповідності. У нашому підході ми враховуємо стохастичну компоненту балістичного потоку відповідно до формалізму роботи [150]. Подібні стохастичні моделі були застосовані для пояснення радіаційно-стимульованого процесу фазового розшарування [122,151,152] та структуроутворення [123]. Відповідний стохастичний внесок характеризує локальні флюктуації композиційно-

го поля внаслідок стохастичності концентрації точкових дефектів та температури. У нашому дослідженні розглядаються просторові кореляції флюктуацій потоку перемішування та вивчається їх вплив на процеси поділу фаз. Приймаючи до уваги відмінність у часових масштабах поля композиції та густини дислокаций (густини вектору Бюргерса), спочатку розглядається найпростіший випадок однієї повільної моди, коли динамікою густини вектору Бюргерса можна знехтувати. Це дозволяє провести дослідження поділу фаз за допомогою теорії середнього поля та оцінити внесок інтенсивності зв'язку поля густини дислокаций та композиційного поля в процеси поділу фаз. Динаміка пов'язаних полів вивчається за допомогою числового моделювання, де проводиться аналіз статистичних характеристик розшарування та встановлюється закон росту розмірів доменів фаз.

5.2.1. Модель бінарного сплаву з дислокаціями невідповідності.

Твердий бінарний розчин $A - B$, як і раніше, будемо описувати у рамках теорії Брегга-Вільямса з густиною вільної енергії (5.4), який розвинемо в ряд в околі критичної концентрації $\bar{c} = 1/2$ та уведемо градієнтну складову вільної енергії. У такому разі функціонал вільної енергії розчину має вигляд розвинення Гінзбурга-Ландау [156]:

$$\mathcal{F}_0 = \int dV \left(-\frac{A}{2}c^2 + \frac{B}{4}c^4 + \frac{\beta_0}{2}(\nabla c)^2 \right), \quad (5.14)$$

де $A = (T/[\bar{c}(1 - \bar{c})] - Zw_o)$, $B = (Zw_o - 1/(1 - \bar{c})^3 + 1/\bar{c}^3)/3$; величина c мірою відхилення від критичної концентрації, тобто, $c \equiv (c_A - \bar{c})$. Відповідно до стандартного визначення при $A > 0$ маємо температуру в межах області нестійкості, тоді як $A < 0$ відповідає температурі вище хімічної спінодалі.

Додатковий внесок у вільну енергію \mathcal{F}_0 задається пружною енергією, що виникає внаслідок невідповідності гратниці двох фаз [113]

$$\mathcal{F}_e = \frac{\nu^2 E}{2} \int dV c^2. \quad (5.15)$$

Тут E це модуль Юнга, параметр ν пов'язаний зі зміною сталої гратниці по відношенню до композиції (закон Вегарда), тобто, $a = a_0(1 + \nu c)$ [195, 196]. Пружний внесок зміщує когерентну спінодаль на величину $\nu^2 E$.

Беручи до уваги допомогу дислокаційно підтримуваний механізм поділу фаз, можемо ввести взаємодії виду дислокація-дислокація у вигляді [113]

$$\mathcal{F}_d = \int dV \left[\frac{C}{2} |b|^2 + \frac{1}{2E} (\nabla^2 \varpi)^2 \right]. \quad (5.16)$$

Тут стала C пов'язується з енергією дислокаційного ядра, функція Ейрі ϖ задовільняє рівняння $\nabla^4 \varpi = E(\nabla_x b_x - \nabla_y b_y)$, де b_x та b_y компоненти неперервного поля густини дислокацій у двовимірній задачі (густина компонентів вектору Бюргерса $\mathbf{b} = \{b_x, b_y\}$). Ця складова задає нелокальну пружну взаємодію між дислокаціями.

Відповідно до [113] враховуємо зв'язок композиційного поля c з полем напруження дислокацій, внесок якого до вільної енергії має вигляд

$$\mathcal{F}_c = \nu \int dV c \nabla^2 \varpi. \quad (5.17)$$

Така модель була використана для вивчення в двовимірній системі, розглянутої нижче, процесів топлення [197–199], дислокаційного структуроутворення [200], фазового розшарування в бінарних тонких плівках [201].

Об'єднавши всі вищерозглянуті внески в повну вільну енергію даної системи, отримуємо

$$\mathcal{F}_{tot} = \mathcal{F}_0 + \mathcal{F}_e + \mathcal{F}_d + \mathcal{F}_c. \quad (5.18)$$

Таким чином, динаміка консервативних полів c , b_x та b_y описується наступним набором рівнянь

$$\partial_t c = M \nabla^2 \frac{\delta \mathcal{F}_{tot}}{\delta c}; \quad (5.19)$$

$$\partial_t b_x = (M_g \nabla_x^2 + M_c \nabla_y^2) \frac{\delta \mathcal{F}_{tot}}{\delta b_x}; \quad (5.20)$$

$$\partial_t b_y = (M_c \nabla_x^2 + M_g \nabla_y^2) \frac{\delta \mathcal{F}_{tot}}{\delta b_y}. \quad (5.21)$$

Тут M – це рухливість одного з сорту атомів розчину, M_g та M_c позначають рухливості ковзання та переповзання, відповідно. Такий набір рівнянь належить класу моделей зі збереженою динамікою відповідно до класифікації, запропонованій у роботі [202].

У даному підрозділі нами використовується модель стохастичного балістичного потоку відповідно до підходу запропонованого в роботах [41, 123, 149–152,

203]. Приймається, що атомове перемішування, що індукується балістичними стрибками вибитих атомів відбувається на відстань $b \equiv \langle R \rangle = \int w(R)RdR$, де R довжина стрибка розподілена відповідно до відомої густини ймовірності $w(R)$. Такі балістичні стрибки розглядаються як атермічний дифузійний процес з коефіцієнтом балістичної дифузії D_b^0 . Відповідним балістичним потоком буде $\mathbf{J}_b = -D_b^0 \nabla c$. Відповідно до робіт приймається, що така дифузія відбувається у флюктуаційному середовищі [41, 150]. Дійсно процеси зіткнень енергетичних частинок з атомами приводять до локальних флюктуацій температури та числа точкових дефектів (пар Френкеля). Це дозволяє ввести в розгляд флюктуації балістичного потока, приймаючи $D_b^0 \rightarrow D_b^0(\mathbf{r}, t) = D_b + \zeta(\mathbf{r}, t)$, де $\zeta(\mathbf{r}, t)$ – стохастичне джерело. Отже, величина \mathbf{J}_b має як регулярну (детерміністичну) так і стохастичну складові, тобто $\mathbf{J}_b = \mathbf{J}_b^{det} + \mathbf{J}_b^{stoch}$. Регулярна компонента \mathbf{J}_b^{det} характеризується величиною $D_b = \varphi \sigma_r b^2$, де $\varphi \sigma_r$ – частота атомових стрибків, φ потік опромінення, σ_r перетин дефектоутворення. Відповідна стохастична складова \mathbf{J}_b^{stoch} пов'язується з флюктуаціями довжин атомових стрибків і характеризується їх дисперсією $\sigma^2 \equiv \langle (\delta R)^2 \rangle$. Таким чином, для повного балістичного потоку можна записати

$$\mathbf{J}_b = -(D_b + \zeta(\mathbf{r}, t)) \nabla c. \quad (5.22)$$

Тут припускається, що реалізації $\zeta(\mathbf{r}, t)$ є незалежними у часі, але корелювані у просторі. Статистичні властивості зовнішнього шуму ζ є такими:

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\sigma^2 D_b C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (5.23)$$

де $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\sqrt{2\pi} r_c)^{-2} \exp(-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 / 2r_c^2)$; σ^2 являє собою дисперсію величини D_b^0 та представляє інтенсивність зовнішнього шуму, r_c – радіус кореляції. Варто враховувати, що зовнішні флюктуації можливі лише при впливові ненульового потоку опромінення. Тому в кореляторі зовнішнього шуму міститься величина D_b , що математично відповідає реалізації флюктуаційно-дисипаційної теореми. В такому разі права частина рівняння (5.19) може бути записана як сума термічно-підтримуваного дифузійного потоку $\mathbf{J} = -M \nabla \delta F[c] / \delta c$ та балістичного потоку (5.22).

У подальшому, ми діємо на рівняння (5.20) оператором ∇_y та на рівняння (5.21)

∇_x . Додаючи ці рівняння, ми отримуємо одне для поля густини $\phi \equiv \nabla^4\varpi$. Оскільки величина ϕ визначається через градієнти густини компонент вектора Бюргерса b_x та b_y , то, досліджуючи ϕ , можна встановити зміну пружної енергії при сегрегації дислокацій на міжфазних границях.

У загальному випадку припускаємо, що рухливість є концентраційно-залежною величиною $M = M_0\tilde{M}(c)$. Далі перейдемо до знерозмірених величин: $\alpha = \sqrt{E/A}\nu$, $\mathbf{r}' = \sqrt{A/\beta_0}\mathbf{r}$, $t' = (M_0A^2/\beta_0)t$, $c' = \sqrt{B/A}c$, $\varpi' = \sqrt{B/E\beta_0^2}\varpi$, $D'_b = D_b/M_0A$, $\mathbf{b}' = \sqrt{EBr_0^2/A^3}\mathbf{b}$, $M'_{c,g} = M_{c,g}\beta_0E/MA^2$, $M_c = M_g = m$, $e = AC/E\beta_0$, $\tilde{M}(c') = 1 - c'^2$. Опускаючи штрихи, приходимо до системи з двох рівнянь у вигляді

$$\begin{aligned}\partial_t c &= \nabla \cdot M(c) [\partial_{\psi\psi}^2 \Psi(c) \nabla c - \nabla^3 c] + \alpha\phi + \nabla \cdot \zeta(\mathbf{r}, t) \nabla c + \nabla \cdot \sqrt{M(c)} \vec{\xi}(\mathbf{r}, t); \\ \partial_t \phi &= -m(\phi + \alpha\nabla^2\psi - e\nabla^2\phi),\end{aligned}\tag{5.24}$$

де

$$\partial_{cc}^2 \Psi(c) = \partial_{cc}^2 f + \frac{D_b}{M(c)}, \quad f(c) = -\frac{1-\alpha^2}{2}c^2 + \frac{c^4}{4}.\tag{5.25}$$

Останній доданок у рівнянні для c є внутрішнім мультиплікативним шумом із властивостями: $\langle \vec{\xi} \rangle = 0$ та $\langle \vec{\xi}(\mathbf{r}, t) \vec{\xi}(\mathbf{r}, t') \rangle = 2\theta\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'; t-t')$, де θ — інтенсивність, яка пропорційна температурі теплової бані.

Слід зазначити, що часові масштаби еволюції композиційного поля та поля густини дислокаций, що описується величиною $m \propto M(c, g)/M_0$ можуть різнятися. Так при $m = 0$ маемо систему з нерухомими дислокаціями, тоді як граничний випадок $m \rightarrow \infty$ відповідає системі з екстремально рухливими дислокаціями. Це означає, що величина $m \in [0, \infty)$ залежить від властивостей досліджуваного матеріалу та, загалом, може бути розглянутий як вільний параметр моделі. Детальний опис систем, що характеризується різним набором значень m було проведено раніше [204]. Далі відповідно до роботи [204] розглянемо два випадки систем з рухомими дислокаціями, припускаючи $m \gg 1$ та $m \geq 1$. У найпростішому випадку екстремально рухливих дислокаций, швидка мода, що відповідає густині дислокаций може бути адіабатично вилучена, відповідно до принципу підпорядкування, поведінка системи описуватиметься повільною модою, що зводиться до концентрації розчину. У загальному випад-

ку $m \geq 1$ поведінка системи визначається двома співвимірними масштабами поля густини дислокацій та композиційного поля.

5.2.2. Фазове розшарування за несумірних часових масштабах густини дислокацій і композиції.

Розглянемо найпростіший випадок $m \gg 1$ коли рухомі дислокації миттєво підстроюються до еволюції композиційного поля. Поклавши $m^{-1}\partial_t\phi \simeq 0$, можемо адіабатично вилучити швидку моду ϕ . Скориставшись Фур'є перетворенням з Фур'є-компонентами ϕ_k та c_k , з другого рівняння системи (5.24) отримуємо співвідношення $\phi_k \simeq \frac{\alpha k^2}{1-ek^2}c_k$. При $ek^2 \ll 1$ ми можемо розкласти знаменник в ряд до першого порядку і отримати наближений вираз $\phi_k \simeq \alpha k^2(1-ek^2)c_k$, який дозволяє записати $\phi \simeq -\alpha\nabla^2(1-e\nabla^2)c$. Підставляючи цей вираз в перше рівняння системи (5.24) маємо рівняння для повільної моди у вигляді

$$\partial_t c = \nabla \cdot M(c) \nabla \tilde{\mu}(c) + \nabla \cdot \left[\zeta(\mathbf{r}, t) \nabla c + \sqrt{M(c)} \vec{\xi}(\mathbf{r}, t) \right]. \quad (5.26)$$

де для зручності введено позначення $\nabla \tilde{\mu}(c) \equiv \nabla \mu_{ef}(c) - \frac{\alpha^2}{M(c)} \nabla(1-e\nabla^2)$; $\mu_{ef}(c)$ відіграє роль ефективного хімічного потенціалу ($\nabla \mu_{ef} = \partial_{cc}^2 \Psi(c) \nabla c - \nabla^3 c$). Отримане рівняння є основним для подальшого дослідження. З нього випливає, що композиційне поле має збережну динаміку, так що $\int c(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = c_0$.

У статистичному аналізі досліджується тільки лінійні величини. Шляхом усереднення рівняння (5.26) отримуємо корелятор шуму, який може бути обчислений з використанням теореми Новікова [205]. Корелятор термічного потоку (внутрішнього) шуму записується як $\nabla \cdot \langle \sqrt{M} \xi \rangle = -(\theta/2) \nabla \cdot \langle \nabla \partial_c M \rangle$ [151, 160, 170, 206]. Розрахунки для корелятора зовнішнього шума дають [150, 170]: $\langle \zeta \nabla c \rangle = \sigma^2 (C(\mathbf{0}) \nabla^3 \langle c \rangle + C''(\mathbf{0}) \nabla \langle c \rangle)$, де ми повинні зазначити, що $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ набуває максимального значення при $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, звідки випливає $\nabla C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = 0$; $\nabla^2 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \equiv C''(\mathbf{0}) < 0$. Таким чином після усереднення отримуємо

$$\partial_t \langle c \rangle = \nabla \cdot \langle M(c) \nabla \tilde{\mu}(c) \rangle - \frac{\theta}{2} \nabla \cdot \langle \nabla \partial_c M \rangle + \sigma^2 (C''(\mathbf{0}) \nabla^2 \langle c \rangle + C(\mathbf{0}) \nabla^4 \langle c \rangle). \quad (5.27)$$

Вивчимо стійкість однорідного стану $c = 0$. Представимо систему на регулярній 2-роздільній решітці. В рамках стандартного формалізму операцій у

дискретному просторі, система може бути розділена на N^2 комірок з лінійним розміром $L = \Delta l N$. Тоді рівняння в частинних похідних (5.26) зводиться до системи диференційних рівнянь для i -того елемента решітки [170]:

$$\frac{dc_i}{dt} = \nabla_{ij}^L M_j \nabla_{jl}^R \tilde{\mu}_l + \nabla_{ij}^L \sqrt{M_j} \xi_j(t) + \nabla_{ij}^L \nabla_{jk}^R c_k \zeta_k(t), \quad (5.28)$$

де $i = 1, \dots, N^2$; вводяться ліво- і правосторонні оператори визначено в (2.27). Дискретне джерело зовнішнього шуму визначаються як

$$\langle \zeta_i(t) \zeta_j(t) \rangle = 2D_b \sigma^2 C_{|i-j|} \delta(t - t'), \quad (5.29)$$

де $C_{|i-j|}$ дискретне представлення просторової кореляційної функції $C(\mathbf{r})$, де границею нульової кореляційної довжини стає $\delta_{ij}/(\Delta l)^2$. Для двовимірної задачі розглянутої нижче, величина $C_{|i-j|}$ може бути обчислена як дискретна форма Фур'є перетворення $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ записана в вигляді [170]:

$$C(k) = \exp \left(-\frac{r_c^2}{2} [\sin(k_x/2)^2 + \sin(k_y/2)^2] \right). \quad (5.30)$$

При вивчені стійкості стану $c_i(t) = 0$, ми беремо до розгляду тільки лінійні складові рівняння (5.28). В такому випадку динамічне рівняння для двоточкової кореляційної функції приймає вигляд

$$\begin{aligned} \frac{d\langle c_i c_j \rangle}{dt} &= \Delta_{ik} [(D_b - 1 + \alpha^2) \langle c_j c_k \rangle - (1 - \alpha^2 e) \Delta_{kl} \langle c_l c_j \rangle + \langle c_j c_k \zeta_k \rangle] + \langle c_i \nabla_{jk}^L \xi_k \rangle - \\ &2 \langle x_i \nabla_{jk}^L x_k \xi_k \rangle + \Delta_{jk} [(D_b - 1 + \alpha^2) \langle x_i x_k \rangle - (1 - \alpha^2 e) \Delta_{kl} \langle x_l x_i \rangle + \langle c_i c_k \zeta_k \rangle] + \\ &\langle c_j \nabla_{ik}^L \xi_k \rangle - 2 \langle c_j \nabla_{ik}^L c_k \xi_k \rangle, \end{aligned} \quad (5.31)$$

де сума береться по повторюваним індексам. Використовуючи теорема Новікова можемо порахувати корелятори:

$$\begin{aligned} \langle c_i \nabla_{jk}^L \xi_k \rangle &= -\frac{\theta}{(\Delta l)^2} \Delta_{ij}, \\ \langle c_i \nabla_{jk}^L c_k \xi_k \rangle &= -\frac{\theta}{2(\Delta l)^2} (\Delta_{jk} \langle c_k c_j \rangle + \Delta_{ik} \langle c_k c_j \rangle) \\ \langle c_j c_k \zeta_k \rangle &= D_b \sigma^2 (\Delta_{kl} C_{|k-l|} \langle c_l c_j \rangle + \Delta_{jl} C_{|k-l|} \langle c_l c_k \rangle). \end{aligned} \quad (5.32)$$

Представляючи структурний фактор $S(\mathbf{k}, t) \equiv \langle c_{\mathbf{k}}(t) c_{-\mathbf{k}}(t) \rangle$ в дискретному просторі $S_{\nu}(t) = (N \Delta l)^{-2} \langle c_{\nu}(t) x_{-\nu}(t) \rangle$ і $c_{\nu}(t) = (\Delta l)^2 \sum_m e^{-i \mathbf{r}_m \mathbf{k}_{\nu}} c_m(t)$ та

$c_m(t) = (N\Delta l)^{-2} \sum_{\nu} e^{i\mathbf{r}_m \mathbf{k}_{\nu}} c_{\nu}(t)$, знаходимо $dS_{\nu}/dt = (\Delta l/N)^2 e^{i\mathbf{k}_{\nu}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_m)} d\langle c_m c_j \rangle / dt$.

Після деяких обчислень в безперервній та термодинамічній границі, ми приходимо до динамічного рівняння для структурного фактору у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{dS(k, t)}{dt} &= -2k^2 \omega(k) S(k, t) + 2\theta k^2 \\ &- \frac{2k^2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} S(q, t) + \frac{2k^2 D_b \sigma^2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} C(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) S(\mathbf{q}, t), \end{aligned} \quad (5.33)$$

з дисперсійним співвідношенням

$$\omega(k) = \epsilon_{ef} + \beta_{ef} k^2. \quad (5.34)$$

Тут ϵ_{ef} – ефективний керуючий параметр, який грає роль ефективної температури, β_{ef} – параметр неоднорідності, визначені за формулами

$$\epsilon_{ef} = \alpha^2 - 1 + \theta + D_b(1 + \sigma^2 C''(0)), \quad \beta_{ef} = 1 - \alpha^2 e - D_b \sigma^2 C(0). \quad (5.35)$$

Звідси слідує, що балістична дифузія (регулярна компонента балістичного потоку) збільшує ефективну температуру системи, тоді як кореляційні ефекти, що регулюються умовою $C''(0) < 0$, зменшують її значення. У цей час балістична дифузія здатна зменшувати ширину міжфазної границі. Цей ефект пояснюється останнім членом у визначенні β_{ef} .

З рівняння (5.34) можемо знайти критичне значення хвильового числа, що обмежує область нестіких мод

$$k_c = \sqrt{\frac{1 - \alpha^2 - \theta - D_b(1 + \sigma^2 C''(0))}{1 - \alpha^2 e - D_b \sigma^2 C(0)}}. \quad (5.36)$$

Найбільш нестійка мода описується хвильовим числом $k_m = k_c/\sqrt{2}$. Для обраного набору параметрів системи при $\alpha < 1$ маємо спадаочу залежність $k_c(\alpha)$, де α вимірює зв'язок між композиційним полем та полем густини дислокацій. При малих α дислокацийний механізм приводить до зменшення критичного хвильового числа, що обмежує нестійкі моди. Натомість зростання величини α приводить до довгохвильових модуляцій композиційного поля. При цьому, просторові кореляції зовнішнього шуму ζ збільшують критичне значення хвильового числа внаслідок $C''(0) < 0$.

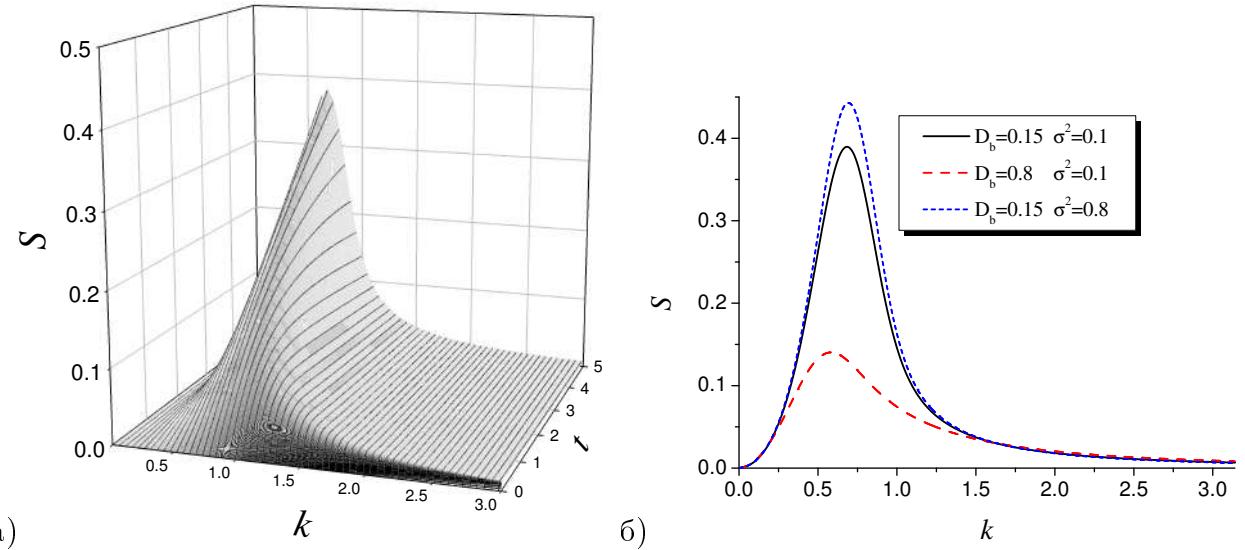


Рис. 5.7. Поведінка структурного фактору: а) динаміка $S(k, t)$ при $D_b = 0.15, \sigma^2 = 0.1$; б) залежність $S(k)$ при фіксованому часовому інтервалі ($t = 10$) та інших параметрів системи: $\alpha = 0.5, \theta = 0.1, e = 0.2, r_c = 1$

Типова динаміка структурного фактору $S(k, t)$ показана на рис.5.7а, де k_m відповідає положенню піка на залежності $S(k)$ (див.рис.5.7б). З рис.5.7а видно, що в ході еволюції системи пік $S(k, t)$ рухається в бік малих хвильових чисел $k = 0$ та висота піка збільшується. Таким чином відповідна просторова нестабільність сприяє процесам утворення доменів розшарованих фаз, збагачених атомами сорту A чи B . Вплив параметрів системи на поведінку $S(k)$ показано на рис.5.7б. Тут бачимо, що збільшення коефіцієнту балістичного перемішування D_b сприяє формуванню структурного безладу, що характеризується реалізацією довгохвильових збурень та малим максимальним значенням структурного фактора. Стохастичний внесок потоку балістичного перемішування діє протилежно, стимулюючи процеси упорядкування. При підвищенні інтенсивності зовнішнього шуму σ^2 , відповідні просторові структури характеризуються меншими розмірами доменів, збагачених атомами одного сорту. Цей ефект обумовлений просторовими кореляціями зовнішніх флюктуацій. Проведений лінійний аналіз на стійкість стійкості є справедливим лише на короткому часовому масштабі. На великих часах ($t \rightarrow \infty$) можемо використовувати наближення середнього поля, що базується на аналізі рівнянь Фоккера-Планка для густини ймовірності реалізації композиційного поля.

Для аналітичного вивчення статистичних особливостей протікання фазово-

го розшарування при $t \rightarrow \infty$ необхідно проаналізувати стаціонарну густину ймовірності $\mathcal{P}_s([c])$. Це дозволяє описати поведінку системи в рамках теорії середнього поля для систем зі збереженою динамікою [151, 152, 159, 160, 207, 208], у рамках якої розглядається перехід до дискретного простору розмірності d та використовується наближення середнього поля Вейса $\eta \equiv \langle c \rangle$ за правилом $\Delta c \rightarrow 2d(\eta - x)$. У такому разі стаціонарне безпотокове рівняння Фоккера-Планка має вигляд [151, 152, 159, 160, 207, 208]:

$$-hP_s = \left(M \left[-\partial_c f - \frac{\alpha^2 + D_b}{M} c + \left(1 - \frac{\alpha^2 e}{M} \right) (\eta - c) \right] - \frac{\theta}{2} \partial_c M + 2dD_b\sigma^2 c \left[C_1 \eta \frac{\partial}{\partial c} - C_0 \frac{\partial}{\partial c} c \right] \right) P_s, \quad (5.37)$$

де P_s – це стаціонарна функція розподілу, h – стала інтегрування; константи C_0 та C_1 задаються значеннями дискретного представлення $C_{|i-j|}$ просторової кореляційної функції зовнішнього шуму $C(\mathbf{r})$ [159, 207, 208]. Значення середнього поля η та константи інтегрування h знаходяться самоузгодженим чином. Для цього скористаємося розв'язком рівняння (5.37)

$$P_s(x, \eta, h) = N \exp \left(\int^x dx' \frac{\Omega(c', \eta, h)}{\Xi(x'; \eta)} \right), \quad (5.38)$$

де

$$\begin{aligned} \Omega(c, \eta, h) &= -M\partial_c f - (\alpha^2 + D_b)c + (M - \alpha^2 e)(\eta - c) - \frac{\theta}{2} \partial_c M - 2dD_b\sigma^2 C_0 c + \\ h\Xi(c; \eta) &= \theta M + 2dD_b\sigma^2 c(C_0 c - C_1 \eta); \end{aligned} \quad (5.39)$$

нормувальна константа, яка є функцією середнього поля η та константи h :

$$N \equiv N(\eta, h) = \left[\int_{-1}^1 dc \exp \left(\int^c dc' \frac{\Omega(c', \eta, h)}{\Xi(c'; \eta)} \right) \right]^{-1}, \quad (5.40)$$

Для визначення невідомих величин h та η нагадаємо, що підхід середнього поля є локальним та відображає P_s поля в даному місці решітки як функцію величини h та середнього поля η в околі даної комірки.

Для визначення точок переходу та критичних точок при фазовому розшаруванні, скористаємося підходом, запропонованим в роботах [207–209]. Відповідно до нього у детерміністичному випадку з $D_b = 0$, маємо модель $\partial_t c =$

$\nabla \cdot M \nabla \delta \mathcal{F} / \delta c$, де береться до уваги обмеження $c_0 = \int_V d\mathbf{r} c(\mathbf{r}, t)$, c_0 фіксується початковими умовами. Для такої системи точки переходу $\Theta_T(c_0)$: при $\Theta > \Theta_T(c_0)$ однорідний стан c_0 є стійким; при $\Theta < \Theta_T(c_0)$ система поділяється на дві фази з об'ємними долями c_1 та c_2 , які задовольняють умові $\langle c \rangle = c_0$. Перехід з гомогенного стану до двофазного є критичним тільки для $c_0 = 0$, тобто $\Theta_T(0) = \Theta_c$ визначає критичну точку. Відповідні стаціонарні розв'язки отримуються з рівняння $\nabla M \nabla \delta \mathcal{F} / \delta c = 0$. За умов відсутності потоків маємо обмежений розв'язок $\delta \mathcal{F} / \delta c = h$, де h – це ефективне стало поле системи (в рівноважних системах h – хімічний потенціал). У випадку гомогенної системи, величина h не залежить від початкових умов c_0 . Вище точки переходу стійкий стан не є повністю однорідним, тут система поділяється на дві об'ємні фази зі значеннями c_1 та c_2 . Доля фаз u в системі може бути знайдена правилом важеля $u x_1 + (1 - u) x_2 = c_0$. У випадку симетричної форми функціоналу вільної енергії (при $h = 0$) реалізуються дві фази з композиційним складом $c_1 = -c_2$ [207]. Отже, якщо поле h стає тривіальним, тоді може бути знайдена точка переходу.

За допомогою такої процедури можна виявити, що в гомогенному випадку середнє поле скрізь однакове та дорівнює початковому значенню, тобто $\eta = c_0$. Отже при розв'язанні рівняння самоузгодження

$$\eta = \int_{-1}^1 c P_s(c, \eta, h) dc \quad (5.41)$$

при фіксованому значенні середнього поля отримуємо постійне ефективне поле h . Нижче порога Θ_T система розпадається на дві еквівалентних фази з $\langle c_1 \rangle = -\langle c_2 \rangle$, де h має бути однаковим для цих двох фаз та дорівнювати нулю. Отже, нижче порогового значення тільки $\langle x \rangle$ повинні бути визначені як розв'язки рівняння самоузгодження з $P_s(c, \eta, 0)$.

В даному випадку розглянемо ефект фазового розшарування індуковане впливом опромінення. Таким чином, ми знайдемо перехід і критичні точки тільки для параметрів, що мають відношення до опромінення, а саме D_b та σ^2 при фіксованому c_0 . Відповідні залежності ефективного поля h від D_b та інтенсивності зовнішнього шуму показані на рис.5.8. Як видно з рис.5.8а поле h приймає ненульові значення вище точки переходу D_{bT} . Згідно визначеню h

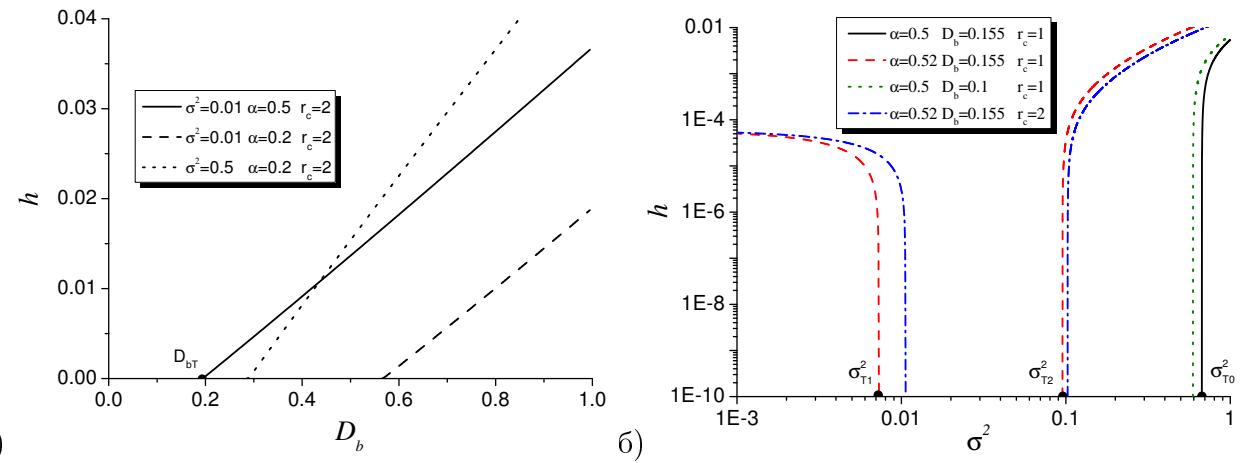


Рис. 5.8. Залежності поля h від D_b та σ^2 (панелі (а) та (б), відповідно) при $c_0 = 0.05$ та різних значеннях параметрів системи

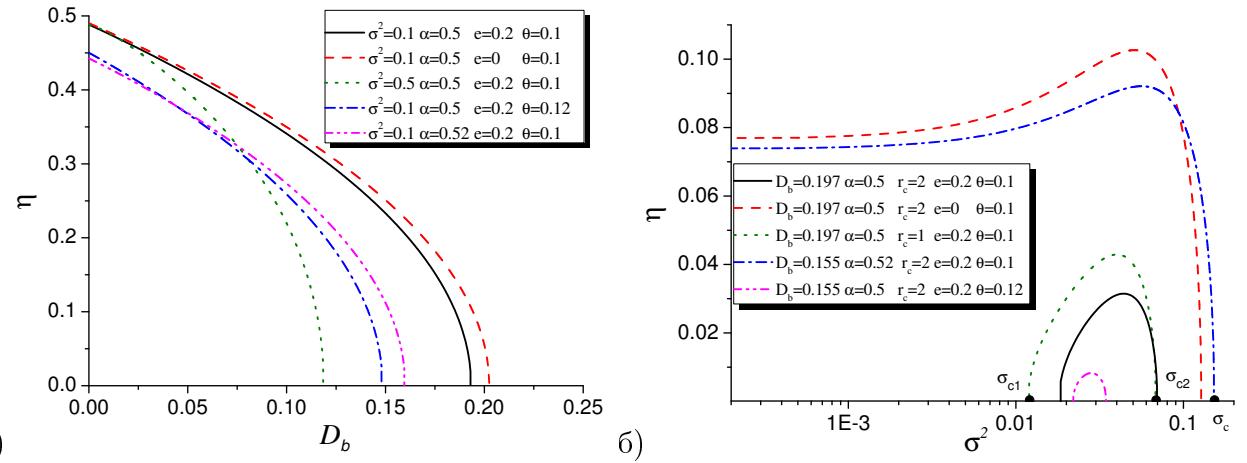


Рис. 5.9. Зміна середнього поля η від коефіцієнта балістичної дифузії D_b та інтенсивності шуму σ^2 (панелі (а) та (б), відповідно).

можна стверджувати, що при фіксованому c_0 відбувається фазове розшарування всередині області параметрів, де $h = 0$. З залежностей $h(D_b)$ слідує, що упорядкований стан з початковою концентрацією x_0 можна знайти лише до значення D_{bT} . Видно, що при підвищених інтенсивностях дислокаційного механізму (зростання α), значення D_{bT} зменшується. Із залежності $h(\sigma^2)$ (див. рис. 5.8б), випливає, що процеси поділу фаз (виникнення упорядкованого стану) можуть бути реалізовані всередині інтервалу інтенсивності шуму ($\sigma_{T1}^2, \sigma_{T2}^2$) при підвищених значеннях α .

Дослідимо поведінку параметру порядку η при зміні параметрів системи. Розв'язуючи рівняння самоузгодження при $h = 0$. Залежності середнього поля від коефіцієнту балістичного перемішування та інтенсивності зовнішнього шу-

му представлений на рис.5.9. Як видно з рис.5.9а, зі збільшенням коефіцієнта D_b зменшується значення середнього поля та поводить себе критично в околі показника $D_b = D_{bc}$, де система поділяється на дві еквівалентні фази $\langle c_1 \rangle = -\langle c_2 \rangle$. Можемо зробити висновок, що опромінення призводить до гомогенізації композиційного поля, як говорилося раніше в роботі [114]. При фіксованих параметрах системи, можна побачити, що при більших значеннях інтенсивності шуму фази розкладаються при менших значеннях D_b . Збільшення інтенсивності внутрішніх флуктуацій θ пригнічує фазове розшарування при великих D_b . Такий же ефект спостерігається при збільшенні параметра зв'язку між густинами дислокацій та композиційним полем. Такий же результат отриманий з аналізу детермінованої системи, коли вплив пружного поля змінює положення критичної точки. Більш цікава ситуація спостерігається при варіюванні інтенсивності зовнішнього шуму (див рис.5.9б). Тут бачимо, що дія зовнішнього шуму з великою інтенсивністю приводить до появи неупорядкованих станів ($\eta = 0$) при $\sigma^2 > \sigma_c^2$. Іншими словами, флуктуації великої інтенсивності приводять до статистичного безладу. При спеціальному виборі параметрів системи пов'язаних з властивостями балістичного потоку, спостерігається реверсивна поведінка середнього поля η , фазове розшарування відбувається в інтервалі $\sigma^2 \in [\sigma_{c1}^2, \sigma_{c2}^2]$. Це явище обумовлене конкуренцією регулярної і стохастичної (корельованої) частини балістичного потоку. Дійсно, тут при $\sigma^2 < \sigma_{c1}^2$ більший внесок дає регулярна компонента D_b , що призводить до гомогенізації бінарного сплаву. Всередині інтервалу $\sigma^2 \in [\sigma_{c1}^2, \sigma_{c2}^2]$ домінують кореляційні ефекти, що призводить до зменшення ефективної температури системи. При подальшому збільшенні σ^2 , зовнішні флуктуації руйнують впорядкований стан. Таким чином, ми приходимо до висновку, що кореляційний балістичний потік здатний індукувати процеси фазового розшарування в початкових гомогенних сплавах, а дислокаційний механізм підтримує реверсивність. З метою дослідження характеру реверсивного фазового розшарування було обчислено фазову діаграму, подану на рис.5.10. З нього видно, що реверсивна поділ фаз реалізується у вузькому інтервалі для σ^2 при великих D_b . При малих значеннях D_b маємо стандартний сценарій фазового розшарування, де флуктуації пригнічують процеси

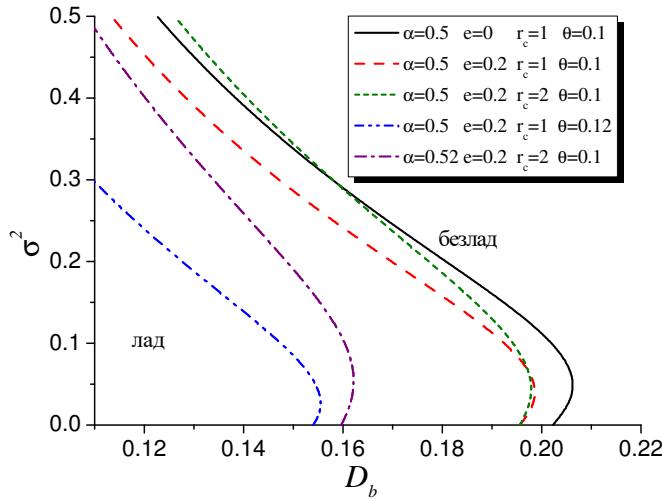


Рис. 5.10. Фазова діаграма середнього поля при різних наборах параметрів системи

упорядкування. Порівнюючи різні криві на рис.5.10 можемо побачити, що при збільшенні інтенсивності внутрішніх флюктуацій θ , область (значення D_b та σ^2) реалізації упорядкованого стану $\eta \neq 0$ стискається. Порівнюючи криві, які мають різний радіус кореляції флюктуацій r_c , бачимо, що область реверсивного упорядкування збільшується. До того ж, при великих r_c розмір області фазового розшарування росте при малих D_b . Зростання величини α , загалом, звужує область упорядкування, однак, розширює інтервал інтенсивності зовнішнього шуму з реверсивним характером виникнення фаз.

Отже, відповідно до результатів отриманих з теорії середнього поля, можна стверджувати, що процеси фазового розшарування можуть контролюватися не тільки основними параметрами системи, що пов'язаними з температурою та пружними властивостями сплаву, але й статистичними властивостями радіаційного опромінення, а саме регулярним та стохастичним внеском балістичного потоку. Крім того, кореляційний стохастичний внесок цього потоку здатен індукувати реверсивне фазове розшарування.

Дослідимо поведінку системи у наближенні сильного зв'язку. Тут приймається $x = \eta$, що дає стаціонарний розподіл у вигляді $P_s(c, \eta) = \delta(c - \eta)$ [151, 152, 159, 160, 207, 208]. Щоб отримати рівняння для ефективного поля h ми інтегруємо рівняння(5.37) та отримуємо

$$h = M(\eta) \left[\partial_\eta f(\eta) + \frac{D_b}{M(\eta)} \eta \right] - \frac{\theta}{2} \partial_\eta M(\eta) - 2dD_b\sigma^2(C_0 - C_1)\eta. \quad (5.42)$$

При $h = 0$ маємо розв'язки для двох об'ємних фаз.

$$\eta_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{4 - 2\alpha^2 - 2\sqrt{\alpha^4 + 4(D_b + \theta) - 8dD_b\sigma^2(C_0 - C_1)}}. \quad (5.43)$$

Відповідна лінія переходу може бути отримана безпосередньо з рівняння (5.43) при $\eta = x_0$, де c_0 – це початкове значення для композиційного поля. Критичні значення параметрів системи можуть бути отримані з умови $\eta = 0$. Зазначимо, що параметри балістичного потоку призводять до перенормування ефективної температури: Θ відраховує критичне $\Theta_c = 1$. Відповідно до визначення густини вільної енергії $f(c)$ для неопромінених систем величина Θ зводиться до α^2 . У опромінених системах Θ зводиться до $\alpha^2 + D_b + \theta - 2dD_b\sigma^2(C_0 - C_1)$. Звідси слідує, що регулярна компонента балістичного потоку збільшує ефективну температуру таким же чином, як і внутрішній шум (характеризується інтенсивністю θ). З іншого боку зовнішні флюктуації, що характеризують стохастичну компоненту балістичного потоку, зменшують цю температуру внаслідок просторових кореляцій. Беручи до уваги поведінку середнього поля залежно від значень параметрів D_b , θ та α можемо побачити, що $|\eta_{\pm}|$ зменшується зростом цих параметрів. Зовнішній шум здатний розширювати інтервал для D_b , де середнє поле набирає ненульових значень.

Відомо, що результати середньопольового аналізу носять якісний характер, але вони дають можливість пошуку нетривіальних ефектів в поведінці системи. Ці результати будуть підтвердженні числовим моделюванням у наступному підрозділі.

5.2.3. Фазове розшарування при сумірних часових масштабах.

Розглядаючи систему з двома полями s та ϕ , припускаючи $m \geq 1$, коли в системі присутні мобільні дислокації час руху яких співвимірний з часом еволюції композиційного поля. Проведемо аналізу на стійкість такої системи. Для цього перейдемо до аналізу поведінки середніх величин, усереднюючи систему

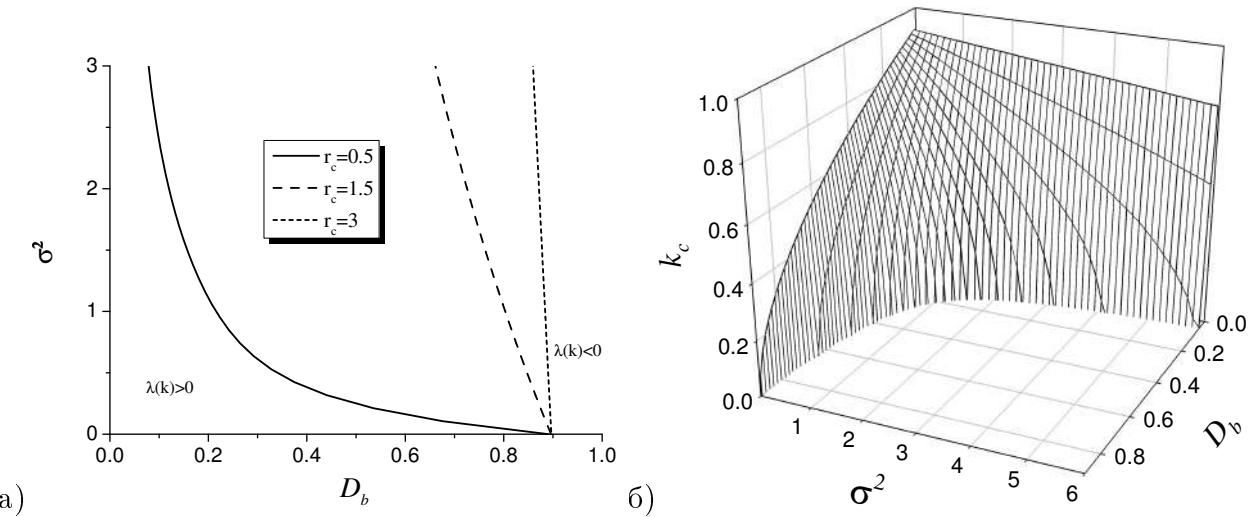


Рис. 5.11. Діаграма стійкості (а) та залежність критичного хвильового числа від D_b і σ^2 (б) при $m = 1$, $\alpha = 0.5$, $r_c = 0.5$

(5.24) по шумам. У результаті приходимо до системи рівнянь у вигляді

$$\begin{aligned} \partial_t \langle c \rangle &= \nabla \cdot \langle M \nabla \mu_{ef} \rangle - \frac{\theta}{2} \nabla \cdot \langle \nabla \partial_c M \rangle + \alpha \langle \phi \rangle + \sigma^2 (C''(\mathbf{0}) \nabla^2 \langle c \rangle + C(\mathbf{0}) \nabla^4 \langle c \rangle); \\ m^{-1} \partial_t \langle \phi \rangle &= -\langle \phi \rangle - \alpha \nabla^2 \langle c \rangle + e \nabla^2 \langle \phi \rangle. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Далі розглянемо стійкість стану ($c = 0, \phi = 0$), використовуючи аналіз Ляпунова для флюктуацій полів c та ϕ . Ліанеризуємо головні рівняння в Фур'є просторі, що дає

$$\begin{pmatrix} \frac{d\langle c \rangle}{dt} \\ \frac{d\langle \phi \rangle}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k^2 w(k) & \alpha \\ m \alpha k^2 & -m(1 + e k^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle c \rangle \\ \langle \phi \rangle \end{pmatrix}, \quad (5.45)$$

де

$$w(k) = \alpha^2 - 1 + \theta + D_b(1 + \sigma^2 C''(0)) + (1 - D_b \sigma^2 C(0)) k^2. \quad (5.46)$$

відповідні показники стійкості приймають вигляд

$$2\lambda = (k^2 w(k) - m[1 + e k^2]) \pm \sqrt{(k^2 w(k) + m[1 + e k^2])^2 + 4m(1 + k^2 w(k) + [e + \alpha^2] k^2)}. \quad (5.47)$$

Згідно аналізу показників стійкості (5.47), можемо знайти критичні значення для D_b та σ^2 , які визначають області реалізації нестабільних мод. Відповідна діаграма стійкості представлена на рис. 5.11а. Видно, що просторова нестабільність, яка характеризується $\lambda(k) > 0$ можлива лише всередині інтервалу

коєфіцієнта балістичної дифузії. В той же час, зростання D_b звужує інтервал значень для σ^2 , де $\lambda(k) > 0$. З діаграми стійкості можна бачити, що при малих D_b зовнішній шум здатний підтримувати просторову нестабільність навіть при великих інтенсивностях флуктуацій. Збільшення радіусу кореляції флуктуацій r_c розширює область нестабільності. Тому, сильнокорелюючі між собою зовнішні флуктуації здатні індукувати просторову нестабільність на малих часових масштабах. На рис.5.11б показано критичне хвильове число, що обмежує кількість нестійких мод, яке зменшується з D_b та σ^2 . Таким чином, при великих інтенсивностях балістичного переміщування та інтенсивності зовнішніх флуктуацій, довгохвильові просторові нестійкості повинні з'явитися по всій системі. Розглянемо поведінку структурного фактору $S(k, t)$. Для отримання динамічного рівняння для $S(k, t)$ в околі точки $(c = 0, \phi = 0)$ використовуємо підхід описаний вище, розглядаючи систему з двох рівнянь (5.24). Таким чином, переходячи до дискретного простору та домножуючи кожне рівняння системи (5.24) на c отримуємо наступну систему з двох рівнянь

$$\begin{aligned} \frac{dS(k, t)}{dt} = & -2k^2 w(k) S(k, t) + \alpha G(k, t) + 2\theta k^2 - \frac{2k^2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} S(q, t) + \\ & \frac{2k^2 D_b \sigma^2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} C(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) S(\mathbf{q}, t), \\ \frac{dG(k, t)}{dt} = & -2m[(1 + ek^2)G(k, t) - \alpha k^2 S(k, t)], \end{aligned} \quad (5.48)$$

де $G(k, t) \equiv \langle c_{\mathbf{k}}(t)\phi_{-\mathbf{k}}(t) \rangle = \langle c_{-\mathbf{k}}(t)\phi_{\mathbf{k}}(t) \rangle$, та $w(k)$ наведено у виразі (5.46). Динаміки структурного фактору показані на рис.5.12а та на рис.5.7. Спостерігаємо аналогічну динаміку $S(k, t)$. Порівнюючи графіки $S(k, t)$ при $m \gg 1$ та $m \geq 1$ можемо побачити, що у випадку слабкорухомих дислокаций ($m \geq 1$) пік структурного фактору збільшується в порівнянні з екстремально рухомих дислокаций ($m \gg 1$). Таким чином, у випадку слабко рухливих дислокаций ламелі фаз менше містять домішкових атомів іншого сорту. З отриманих залежностей показаних на рис.5.12б слідує, що при збільшенні регулярної компоненти балістичного потоку істотно зменшується структурний фактор і зміщається положення піку в бік малих хвильових чисел. Це означає, що збільшення D_b призводить до утворення структурного безладу і збільшує розмір типових доменів розшарованих фаз. Дія зовнішнього шуму протилежна. Таким чином,

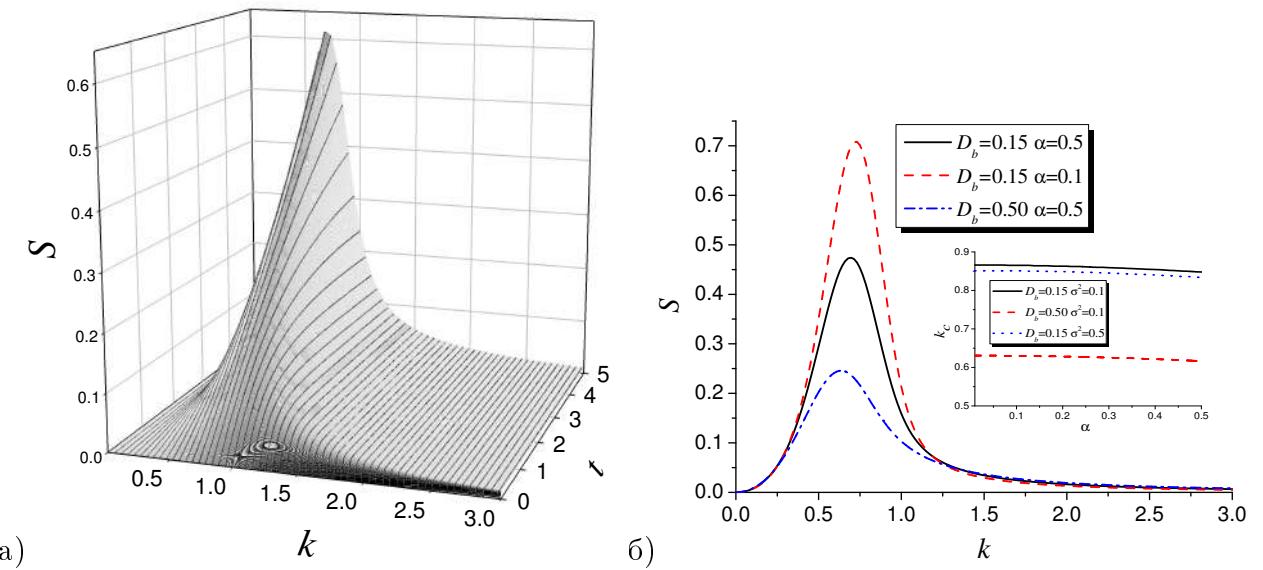


Рис. 5.12. Поведінка структурного фактору: а) динаміка $S(k, t)$ при $D_b = 0.15$; б) залежність $S(k)$ при $t = 10$ та різного набору параметрів системи. Інші параметри: $\theta = 0.1$, $\alpha = 0.5$, $e = 0.2$, $r_c = 1.0$, $m = 1.0$

слід очікувати, що типічні розміри доменів розшарованих фаз зменшуються при зростанні σ^2 . За результатами аналізу середнього поля цей ефект дії шуму можна пояснити просторовими кореляціями зовнішніх флюктуацій обговорюваними раніше [151]. Ураховуючи вплив релаксації на поле густини дислокацій, можна побачити, що з підвищенням α число нестійких мод зменшується (див. вставку рис. 5.12б). У той час висота структурного піку зменшується на коротких часових масштабах. Таким чином, сегрегація за дислокаційним механізмом може уповільнювати процеси поділу фаз. Нижче буде показано, що цей ефект можна спостерігати на динаміці середнього розміру доменів виділених фаз.

5.2.4. Моделювання випадіння фаз за дислокаційним механізмом.

Для кількісного опису поведінки системи проведемо числове моделювання системи (5.24). При симуляційній процедурі був використаний метод Хойна [170]. Система досліджувалась на квадратній решітці з лінійним розміром $L = 128\Delta l$ з періодичними граничними умовами та розміром комірок $\Delta l = 0.5$; з часовим кроком $\Delta t = 0.005$. В якості початкових умов беремо наступні параметри системи: $\langle c(\mathbf{0}, 0) \rangle = \langle \phi(\mathbf{0}, 0) \rangle = 0$, $\langle (\delta c(\mathbf{0}, 0))^2 \rangle = \langle (\delta \phi(\mathbf{0}, 0))^2 \rangle = 0.01$. Отримані результати статистично не залежать від різних реалізацій двох типів

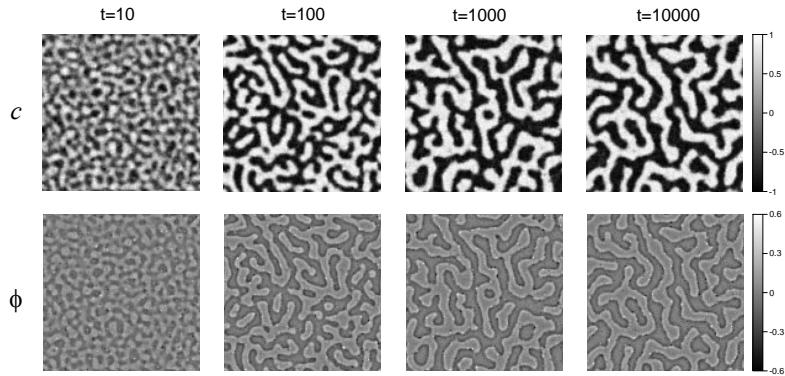


Рис. 5.13. Типова еволюція композиційного поля c (верхня панель) та дислокаційного поля (нижня панель) при $D_b = 0.15$, $\sigma^2 = 0.5$, $\theta = 0.1$, $\alpha = 0.5$, $e = 0.2$, $r_c = 1.0$, $m = 1$

шумів. При моделюванні у дискретному просторі розглядалася динаміка вектору станів $\mathbf{x} = \{c, \phi\}$ з векторами детерміністичних сил $\mathbf{f} = \{f_c, f_\phi\}$ з компонентами, що задають зв'язок двох полів, вектором дифузійних потоків $\mathbf{J} = \{J_c, J_\phi\}$ з відповідними компонентами, де J_c має дві стохастичні складові (внутрішнього та зовнішнього шумів), що описувалася формальним рівнянням вигляду

$$\frac{d\mathbf{x}_k}{dt} = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}) - \nabla_{kj}\mathbf{J}_j, \quad (5.49)$$

де $k = 1, \dots, N^2$; ∇_{kj} визначено співвідношеннями (2.27).

Типова еволюція композиційного поля c та поля густини дислокацій ϕ показана на рис.5.13. Тут області з високими значеннями представлені білим кольором, а чорні кольори позначають нижчі значення. Можемо побачити, що поле густини дислокацій приймає підвищені значення в околі міжфазних границь; всередині фаз, при $c \simeq 1$ та $c \simeq -1$, поле приймає значення близькі до нуля. Відповідні осциляції поля c біля поверхні поділу показують, що енергія напруження зменшується за рахунок невідповідності атомних розмірів [113]. Тому дислокації невідповідності сегрегуються на границях. На рис.5.14 ми побудували осциляційну структуру дислокаційного поля ϕ , що відповідає розподілу поля концентрацій. Видно, що поблизу границь відбувається зміна знаку ϕ від $\phi < 0$ до $\phi > 0$, всередині фаз маємо $\phi \simeq 0$.

Для проведення кількісного аналізу фазового розшарування дослідимо залежності дисперсій полів c та ϕ , які визначаються як $J_c \equiv \langle (\delta c)^2 \rangle$ та $J_\phi \equiv \langle (\delta \phi)^2 \rangle$, де $\delta c = c - \langle c \rangle$, $\delta \phi = \phi - \langle \phi \rangle$. В $\langle c \rangle = \langle \phi \rangle = 0$ ці величини зводяться до другого статистичного моменту та грають роль ефективних параметрів порядку в про-

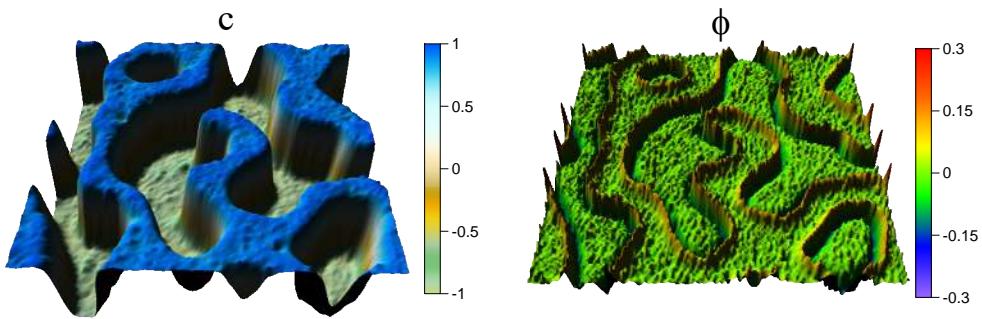


Рис. 5.14. Зображення поля концентрації та дислокаційного поля при $t = 10000$, ілюструюче осциляційну поведінку дислокаційного поля поблизу границь двох фаз $c = 1$ та $c = -1$. Інші параметри: $D_b = 0.15$, $\sigma^2 = 0.1$, $\theta = 0.01$, $\alpha = 0.5$, $e = 0.2$, $r_c = 1.0$, $m = 10$

цесах розшарування (через закони збереження для c та ϕ). Величина $J_c(t)$ пропорційна площі під структурним фактором $S_k(t)$, тобто, $J_c(t) = \sum_k S_k(t)$. В такому випадку ріст в J_c (та ріст J_ϕ) відповідає за зростання структурної функції і, відповідно, фазового розшарування. Обидва моменти J_c та J_ϕ ростуть в бік ненульових стаціонарних величин. Відповідні значення $J_{\{c,\phi\}}^{st} = J_{\{c,\phi\}}(t \rightarrow \infty)$ можуть бути використані для знаходження двох фаз, розділених протягом тривалого часу еволюції системи. У стандартній моделі фазового розшарування (без поля густини дислокацій ϕ), можна використовувати лише J_c для контролювання формування двох розділених фаз. У нашому випадку динаміка фазового розшарування може бути описана за допомогою додаткового параметру порядку J_ϕ , який показує сегрегацію дислокацій з протилежними знаками безпосередньо біля поверхні поділу. Можна очікувати, що при великих значеннях J_c та J_ϕ отримуємо дві явновиражені фази з великими дисперсіями композиційного поля c з великою кількістю дислокацій в околі міжфазної границі. При маліх J_c та J_ϕ маємо змішаний стан, де не спостерігається великих відхилень в композиційному полі. З іншого боку, це значить, що дислокації розподілені всередині фаз, збагачених атомами одного сорту, що відповідає малим значенням дисперсії поля ϕ .

На рис.5.15 побудовані залежності параметрів порядку при різних значеннях інтенсивності зовнішнього шуму при інших фіксованих параметрах системи. Бачимо, що зі збільшенням σ^2 значення параметрів J_c та J_ϕ зменшуються. При $\sigma^2 = 0$ (див. суцільну лінію на рис.5.15) параметр порядку J_c монотон-

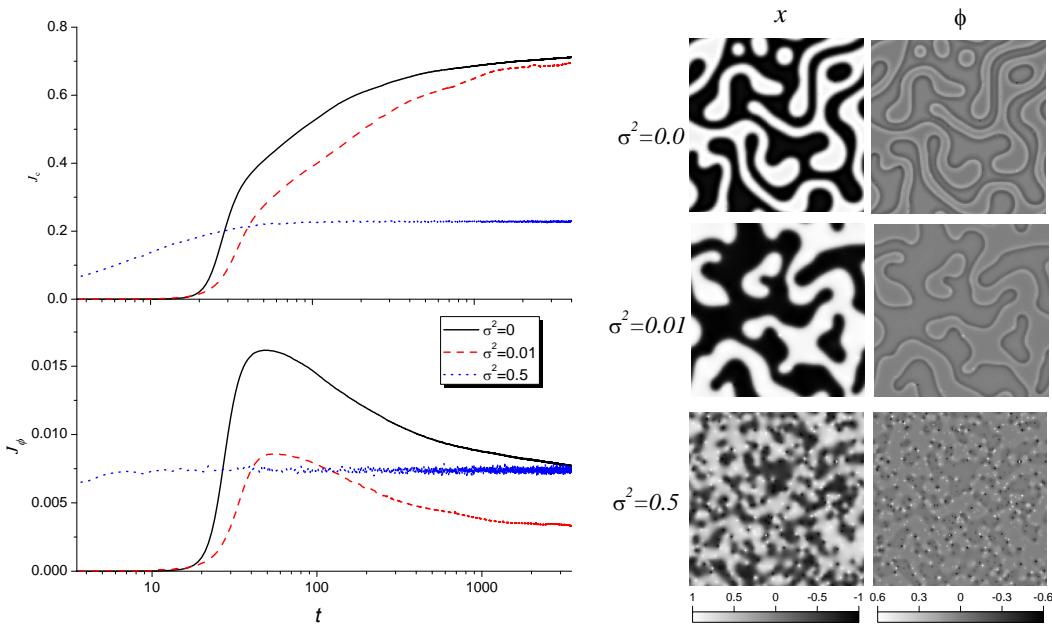


Рис. 5.15. Динаміка параметрів порядку J_c та J_ϕ при різних значеннях інтенсивності зовнішнього шуму σ^2 та відповідні картини поля концентрації та дислокаційного поля при $t = 4000$. Інші параметри: $D_b = 0.15$, $\theta = 0.01$, $\alpha = 0.5$, $e = 0.2$, $r_c = 2.0$, $m = 10$

но росте до виходу на стаціонарний режим, що означає збільшення площі під відповідною структурним фактором та формування явно розшарованих фаз, збагачених атомами сорту A і B (див. праву панель розподілу композиційного поля c). Параметр порядку J_ϕ спочатку зростає, що означає формування фаз по всій системі зі збільшенням густини дислокацій в околі границі поділу. На наступному етапі спостерігаємо згасання величини J_ϕ , що відповідає агломерації доменів, які належать одній фазі, в результаті анігіляції дислокацій з протилежними знаками. На пізній стадії густина дислокацій прямує до свого стаціонарного стану разом з J_c . При малих інтенсивностях σ^2 (див. пунктирні криві на рис. 5.15) спостерігається така ж динаміка J_c та J_ϕ , які приймають менші значення. Тут зовнішній шум підтримує формування упорядкованого стану. Цей ефект обумовлений кореляційними властивостями зовнішнього шуму, що приводить до зменшення ефективної температури системи. Детермінована частина балістичного потоку діє протилежно до його стохастичному внеску. При високих інтенсивностях шуму (в областях неупорядкованої фази, відповідно до аналізу середнього поля), шум продукує неупорядкований стан, де параметр порядку J_c швидше досягає меншого стаціонарного значення, ніж в упорядкованому стані (див. пунктирні криві на рис. 5.15). Формування неупорядкованого

стану супроводжується досягненням величини J_ϕ свого стаціонарного значення та коливанням в околі нього. Це означає, що немає фази збагаченої атомами сорту A чи B з добре визначеною границею поділу, тут можливе накопичення дислокацій (див. праву панель на рис.5.15). В цьому випадку спостерігається вища густина дислокацій, ніж в попередніх випадках. Тут флюктуаційні ефекти стають більші ніж кореляційні ефекти, що призводить до неупорядкованого стану.

Розглянемо докладніше вплив поля густини дислокацій на динаміку фазового розпаду. Еволюція обох параметрів порядку J_c та J_ϕ при різних значеннях постійної зв'язку α наведені на рис.5.16а. Тут видно, що обидва параметри збільшуються при підвищенні значення α (параметр порядку J_ϕ має відповідний пік при переході до режиму огрубіння). Поведінка стаціонарного значення параметру порядку $J_c^{st} = J_c(t \rightarrow \infty)$ показано на вставці в верхній панелі рис.5.16а). Він швидко зростає при малих значеннях α та повільно при великих. Отримані результати показують, що існує сильний зв'язок між композиційним полем та полем густини дислокацій, який сприяє більш сильній організації двох фаз за рахунок перерозподілу дислокацій по всій системі і їх руху до межі поділу. Таким чином еволюція дислокаційного поля підтримує фазове розшарування та сприяє процесу упорядкування. Порівнямо динаміку середнього розміру домену при різних α . З літературних даних (див. наприклад роботу [210, 211]) відомо, що дислокаційний механізм може змінювати значення показника H , який задає закон росту лінійного розміру доменів $\langle R \rangle \propto t^H$. В стандартній теорії фазового розшарування за вакансійним механізмом відповідно до підходу Ліфшиця-Сльозова маємо $H = 1/3$. Це ж значення для H спостерігається коли фазове розшарування підтримується вакансійним механізмом. Якщо дислокаційний механізм фазового розпаду відіграє головну роль, тоді динамічний показник зменшується $H \simeq 1/6$ [211]. У нашому випадку ми можемо контролювати силу дислокаційного механізму варіючи параметром α . Згідно отриманих нами результатів показаних на рис.5.16б можемо побачити, що при $\alpha \rightarrow 0$ динамічний показник приймає значення 0.33, як передбачає теорія Ліфшиця-Сльозова. Цей результат був отриманий для системи підданої

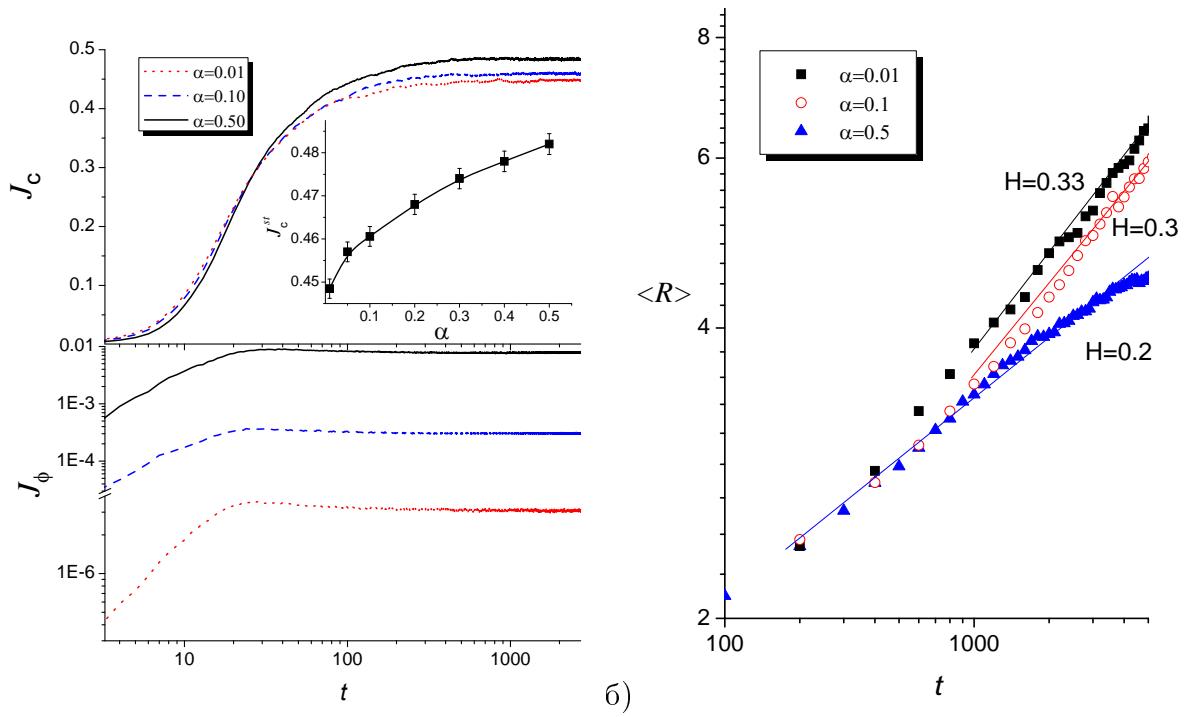


Рис. 5.16. (а) Динаміка параметрів порядку J_c та J_ϕ при різних α , $D_b = 0.12$, $\sigma^2 = 0.01$. (б) Еволюція середнього розміру доменів при різних α та $D_b = 0.1$, $\sigma^2 = 0.5$. Інші параметри: $\theta = 0.01$, $e = 0.2$, $r_c = 2.0$, $m = 10$

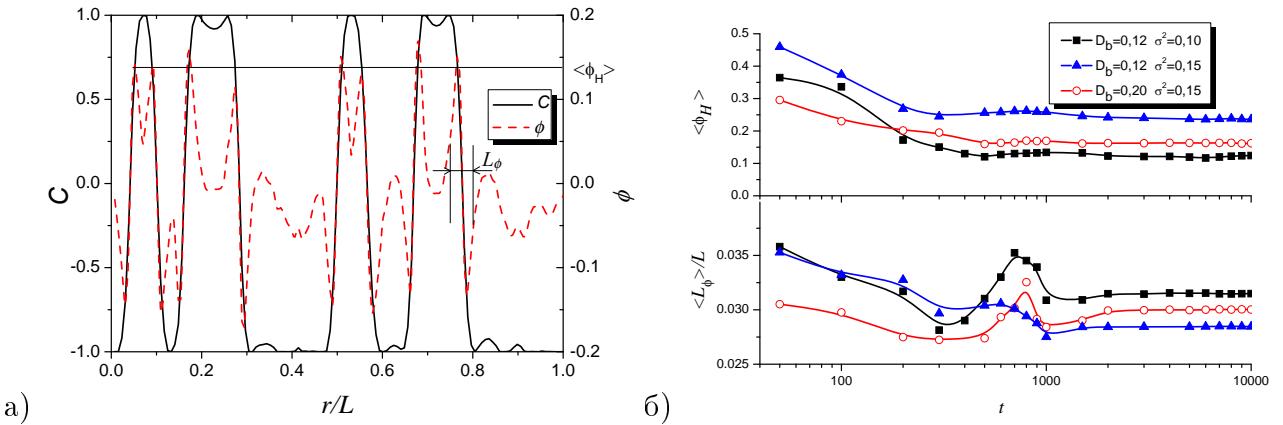


Рис. 5.17. Еволюція середнього максимуму поля густини дислокацій $\langle \phi_H \rangle$ та когерентна довжина $\langle L_\phi \rangle$ при різних значеннях D_b та σ^2 . Інші параметри: $\alpha = 0.5$, $e = 0.2$, $r_c = 1$, $m = 1$, $\theta = 0.1$

стохастичному балістичному потоку з іншою формою рухливості [151]. Було показано, що збільшення інтенсивності зовнішнього шуму σ^2 приводить до процесу розупорядкування без росту доменів. Порівнюючи криві $\alpha = 0.1$ та $\alpha = 0.5$, можемо побачити, що сила дислокаційного механізму зростає, а динаміка розмірів доменів уповільнюється. В нашому випадку при $\alpha = 0.5$ маємо менше значення динамічного показника порівняно з теорією Ліфшиця-Сльозова.

І нарешті, розглянемо динаміку середньої густини дислокацій $\langle \phi_H \rangle$ в околі границі поділу та когерентної ширини міжфазного шару L_ϕ , який рахується за середнім $\langle \phi_H \rangle$, де ця густина зменшується до нульового значення всередині розшарованих фаз. Проілюстрований метод розрахунку $\langle \phi_H \rangle$ та L_ϕ показаний на рис.5.17а. Тут суцільні і пунктирні лінії позначають одномірні профілі композиційного поля та поля густини дислокаций, відповідно. Динаміка $\langle \phi_H \rangle$ та L_ϕ показана на рис.5.17б. Порівнюючи дані пов'язані з різним набором D_b та σ^2 , можна виявити, що густини дислокаций досягають стаціонарного значення в процесі розшарування. З огляду на динаміку $\langle \phi_H \rangle$ при різних значеннях інтенсивності зовнішнього шуму, можемо спостерігати, що збільшення σ^2 приводить до підвищення значень густини дислокаций. Отже, зовнішній шум здатний індукувати поділ фаз, що супроводжується сегрегацією дислокаций на міжфазних границях. З іншого боку при підвищенні величини D_b , $\langle \phi_H \rangle$ приймає менші значення, що означає формування структурного безладу, коли дислокації розподілені по всій системі. В такому випадку немає добре організованих структур, що імітують утворення структури розшарованих фаз. Визначено, що в ході еволюції системи величина L_ϕ досягає максимуму на стадії росту доменів. Тут режим коалесценції (коли великі домени поглинають дрібніші) супроводжується збільшенням ширини границі поділу. Зменшення L_ϕ відповідає режиму огрубіння. На великих часових масштабах досягається стаціонарне значення. Порівнюючи відповідні стаціонарні значення при різних D_b (криві із трикутників і кружків) бачимо, що регулярна компонента балістичного потоку продукує безлад, що супроводжується збільшенням ширини міжфазної границі, де можуть розташовуватись дислокациї. Порівнюючи криві з різними σ^2 , можна побачити, що шум здатний зменшувати ширину міжфазної границі, і у зв'язку з кореляційними ефектами зовнішніх флюктуацій, дислокації локалізуються в вузьких областях з підвищеними значеннями поля густини дислокаций (див. криву з трикутниками в верхній панелі на рис.5.17б). Слід зазначити, що вказаний вище ефект можливий в області формування упорядкованої фази, розрахованого за допомогою аналізу середнього поля. Таким чином, вищезазначена конструктивна роль зовнішніх флюктуацій обумовлена їх просторовими кореляціями.

5.3. Висновки до розділу 5

Вивчено процеси поділу фаз за вакансійним та дислокаційно підтримуваним механізмом сегрегації в рамках узагальнення підходу Кана-Хільярда при врахуванні дефектів, що генеруються опроміненням та їх просторового перерозподілу.

1. Виявлено, що при зростанні дози опромінення процес спінодального розпаду пригнічується залишковими нерівноважними вакансіями і трансформується у процес формування структур вакансій, а нерівноважний розподіл вакансій приводить до уповільнення процесів спінодального розпаду відповідно до зворотного ефекту Кіркендала.

2. Встановлено, що при процесах спінодального розпаду нерівноважні вакансії здебільшого концентруються у ламелях (“м’якої”) фази з більшим коефіцієнтом самодифузії атомів ніж в іншій; у процесах структуроутворення взаємодія пересиченого розчину вакансій приводить до формування вакансійних скupчень у ламелях “м’якої” фази та на границях поділу із розмиттям вакансій в ламелях іншої фази.

3. При дослідженні сегрегації за дислокаційним механізмом, встановлено, що просторово склерельовані флюктуації потоку атермічного переміщування індукують проходження реверсивних процесів фазового розшарування з сегрегацією ядер дислокацій в околі поділу меж фаз.

4. Зростання ефективності дислокаційного механізму поділу фаз уповільнює динаміку росту розмірів доменів, збагачених атомами різного сорту, що супроводжується зменшенням показника росту від значення $1/3$ до $1/6$ з доменами меншого розміру, що відповідає експериментальним даним.

5. Регулярна компонента балістичного потоку сприяє однорідному розподілу дислокацій по системі, збільшуючи міжфазну границю. Натомість його склерельована флюктуаційна компонента сприяє локалізації дислокацій в межах поділу, зменшуючи їх ширину.

Результати цього розділу узгоджуються з даними експериментальних та теоретичних досліджень, виконаних у цьому напрямку та узагальнють їх [91–96,

210, 211]. Отримані у даному розділі результати опубліковано у працях [4, 5, 7, 10, 11, 14].

ОСНОВНІ ВИСНОВКИ

У роботі проведено аналіз процесів формування та еволюції дефектної структури при опроміненні одно- та двокомпонентних кристалічних систем при виникненні локальних деформацій ґратниці та за наявності флюктуаційних компонент швидкості пошкоджень і атермічного атомового переміщування атомів. Набула подальшого розвитку теорія нерівноважних процесів структуроутворення та фазових переходів. Розвинуті підходи ґрунтуються на положеннях теорії швидкісних реакцій, стохастичної динаміки, теорії середнього поля та сегрегації. Основні результати роботи є такими.

1. Проведено узагальнення динамічного підходу еволюції точкових дефектів та їх стоків із урахуванням процесів генерування дефектів полями деформації та взаємодією дефектів за наявності флюктуацій швидкості радіаційних пошкоджень. Установлено, що виникнення локальних деформаційних нестійкостей в обмеженому інтервалі температур та швидкості генерації дефектів приводить до формування бістабільних станів та утворення вакансійних комплексів у вигляді кластерів та пор з характерними розмірами від 6 до 30 нм.

2. Установлено, що флюктуації швидкості пошкоджень прискорюють процеси структуроутворення незалежно від умов опромінення. Виявлено, що при зниженні температури та підвищенні швидкості пошкоджень відбувається зміна морфології вакансійних структур, флюктуації швидкості набору дози пригнічують ріст густин петель при опроміненні за реакторних умов.

3. При дослідженні динаміки пороутворення виявлено, що флюктуації швидкості набору дози збільшують критичний радіус пори внаслідок ефективного зростання температури системи дефектів. У випадку домінуючого внеску дислокацій розмір пори еволюціонує відповідно до динаміки Ліфшиця-Аллена-Кана з показником росту $1/2$; у випадку, коли пори є основними стоками, ріст розміру пори описується за сценарієм Ліфшиця-Сльозова-Вагнера з динамічним показником $1/3$.

4. Установлено, що внаслідок взаємозв'язку між локальними змінами концентрації точкових дефектів та температурою у приповерхневих шарах опромінюваних іонами металевих тонких плівок проходять процеси відбору стру-

ктур з утворенням вакансійних кластерів. Флуктуації швидкості радіаційних пошкоджень приводять до зменшення критичних значень швидкості генерування дефектів та температури мішені, за яких можливе проходження відбору структур.

5. При дослідженні процесів поділу фаз в опромінюваних бінарних сплавах з несумірними коефіцієнтами самодифузії в рамках узагальненої моделі Кана-Хіллярда, яка враховує формування структурного безладу, виявлено, що зі збільшенням швидкості дефектоутворення процеси спінодального розпаду замінюються процесами формування просторових вакансійних структур. З'ясовано, що формування кластерів вакансій за цим механізмом супроводжується відбором структур.

6. При вивченні динаміки росту видіlenь фаз в опромінюваних бінарних сплавах із дислокаціями невідповідності та атермічним потоком атомового перемішування показано, що дислокаційний механізм уповільнює процес росту доменів нової фази. Просторові кореляції флуктуацій балістичного потоку стимулюють сегрегацію ядер дислокацій в околі міжфазних границь, ефективно зменшуючи ширину міжфазного шару.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Харченко Д.О. Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах / Д.О.Харченко, В.О.Харченко, А.І.Баштова // Укр.фіз.журн. – 2013.– Т.58.– В.10.– С.994-1009.
2. Kharchenko Vasyl O. Modeling self-organization of nano-size vacancy clusters in stochastic systems subjected to irradiation / Vasyl O.Kharchenko, Dmitrii O.Kharchenko, Anna I.Bashtova // Radiation Effects & Defects in Solids.– 2014.– V.169.– N 5.– P.418-436.
3. Kharchenko D.O. A study of void size growth in nonequilibrium stochastic systems of point defects / D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko, A.I.Bashtova // Eur.Phys.J.B.– 2016.– V.89.– P.123.
4. Kharchenko D.O. A study of phase separation processes in presence of dislocations in binary systems subjected to irradiation / D.O.Kharchenko, O.M.Schokotova, A.I.Bashtova, I.O.Lysenko // Cond.Mat.Phys.– 2015.– V.18.– P.23003.
5. Харченко Д.О.Самоорганізація вакансійного ансамблю при спінодальному розпаді бінарних систем, підданих сталій дії радіаційного опромінення / Д.О.Харченко, В.О.Харченко, А.І.Баштова // Укр.фіз.журн.– 2016.– Т.61.– В.3.– С.276-288.
6. Kharchenko Dmitrii O. Patterning and pattern selection in a surface layer: Feedback between point defects population and surface layer temperature variations / Dmitrii O. Kharchenko, Vasyl O. Kharchenko, Anna I. Bashtova, Irina O. Lysenko // Physica A.– 2016.– V.463.– P.152-162.
7. Харченко В. О. Мультишабльне моделювання самоорганізації нерівноважних точкових дефектів в опромінюваному α -цирконії / В.О. Харченко, І.О. Лисенко, О.М. Щокотова, А.І. Баштова, Д.О. Харченко та інші // Успехи физ. мет. – 2017.– Т.4.– С.294-400.

8. Баштова А.І. Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах / А.І.Баштова // Наукові доповіді призерів ІІ туру Всеукраїнського конкурсу студентських наукових робіт з фізики.– Суми, 2013.– С.4.
9. Баштова А. Просторова організація дефектів вакансійного типу при стадії дії опромінення / А.Баштова, Д.Харченко, В.Харченко // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА-2014”, (Львів, 15-17 травня 2013 р.).– Львів, 2013.– С.Е1.
10. Баштова А.І. Фазове розшарування з дислокаційним механізмом в бінарних системах підданих опроміненню / А.І.Баштова, Д.О.Харченко, В.О.Харченко // Збірник тез школи-семінару “Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах”,(Суми,21-22 жовтня 2014 р.).– Суми, 2014.– С.26.
11. Баштова А.І. Моделювання самоорганізації нанорозмірних вакансійних кластерів в стохастичних системах підданих опроміненню / А.І.Баштової, Д.О.Харченка, В.О.Харченка // Збірник тез 14-тої Всеукраїнської школи-семінара та Конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 4-6 червня 2014 р.).– Львів,2014.– С.Д15.
12. Bashtova A.I. A study external noise-induced effects in processes of voids growth / A.I.Bashtova, Kharchenko D.O., Kharchenko V.O. // Abstract book of International research and practice conference: “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO - 2016), (Lviv, 24-17 August 2016).– Lviv,2016.– P.303.
13. Kharchenko D.O. Pattern selection in a surface layer of irradiated foils: effect of the surface layer temperature variations / D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko, A.I.Bashtova, I.O.Lysenko // Abstract book of International research and practice conference: “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO - 2016), (Lviv, 24-17 August 2016).– Lviv,2016.– P.326.

14. Баштова А.І. Роль нерівноважних дефектів у процесі поділу фаз в опромінюваних системах / А.І.Баштової, Д.О.Харченка, В.О.Харченка // Збірник тез 17-тої Всеукраїнської школи-семінара та Конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 8-9 червня 2017 р.).– Львів,2017.– С.Д4.
15. Николис Дж. Самоорганизация в неравновесных системах/ Дж.Николис, И.Пригожин. – М. : Мир, 1979. – 512 с.
16. Was Garry S. Fundamentals of Radiation material Science/ Garry S. Was.– Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2007.–827 p.
17. Углов В.В. Радиационные эффекты в твердых телах/ В.В.Углов.– Минск: БГУ, 2007.– 167 с.
18. Воеводин В.Н., Неклюдов И.М. Эволюция структурнофазового состояния радиационная стойкость конструкционных материалов / В.Н.Воеводин, И.М.Неклюдов.– Київ: Наукова думка, 2006.– 376 с.
19. Byun T.S. Irradiation hardening behavior of polycrystalline metals after low temperature irradiation / T.S.Byun, K.Farrell // J.Nucl.Mater.– 2004.– V.326.– P.86-96.
20. Dubinko V.I. Irradiation hardening of reactor pressure vessel steels due to the dislocation loop evolution / V.I.Dubinko, S.A.Kotrechko, V.F.Klepikov // Radiat.Eff.Def.Solids.– 2009.– V.164.– N10.– P.647-655.
21. Chaouadi R. Copper precipitate hardening of irradiated RPV materials and implications on the superposition law and re-irradiation kinetics / R.Chaouadi, R.Gerard // J.Nucl.Mater.– 2005.– V.345.– P.65-74.
22. Ossetsky Yu.N. Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals / Yu.N.Ossetsky, D.J.Bacon, A.Serra, B.N.Singh, and S.I.Golubov // J.Nucl.Mater.– 2000.– V.276.– P.65-77.

23. Gavini V. Vacancy clustering and prismatic dislocation loop formation in aluminum / V.Gavini, K.Batthacharya, M.Ortiz // Phys.Rev.B.-2007.-V.76.-P.180101.
24. Evans J.H. Observations of a Regular Void Array in High Purity Molybdenum irradiated with 2 MeV Nitrogen Ions / J.H.Evans // Nature.- 1971.- V.229.- P.403-404.
25. Sass S.L. Diffraction from void and bubble arrays in irradiated Molybdenum/ S.L.Sass , B.L.Eyre //Phil.Mag.- 1973.- V.27.- P.1447-1453.
26. Johnson P.B. Harwell report AERE R-10874/ P.B.Johnson, D.J.Mazey, J.H.Evans // Rad.Effects.-1983.-V.78.-P.147-156.
27. Mazey D.J. Bubble lattice formation in titanium injected with krypton ions/ D.J.Mazey, J.E.Evans // J.Nucl.Mat.-1986.- V.138.-P.16-18.
28. Jostobns A. Structural damage and its annealing response in neutron irradiated magnesium/ A.Jostobns , K.Farrel // Rad.Effects.-1972.-V.15.-P.217-225.
29. Steigler J.O. Alignment of dislocation loops in irradiated metals/ J.O.Steigler , K.Farrel // Scr.Metall.-1974.-V.8.-P.651-655.
30. Walgraef D. Spatio-Temporal Pattrn Formation/ D.Walgraef.- New York, Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1996.-306 p.
31. Мирзоев Ф.Х. Лазерное управление процессами в твердом теле/ Ф.Х. Мирзоев , В.Я. Панченко, Л.А.Шелепин //УФН.- 1996. – Т.166. – Вип.1.– С.3-32.
32. Мирзоев Ф.Х. Распространение фронта волны генерации дефектов в твердом теле при лазерном воздействии/ Ф.Х. Мирзоев, Л.А.Шелепин // Письма в ЖТФ.- 1996.-Т.22.-Вип.13.-С.28-32.
33. Cuerno R. Dynamic Scaling of Ion-Sputtered Surfaces / R.Cuerno, A.-L.Barabasi // Phys.Rev.Lett.-1995.- V.74.-P.4746.

34. Makeev M.A. Effect of surface morphology on the sputtering yields. I. Ion sputtering from self-affine surfaces / M.A.Makeev, A.-L.Barabasi // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.–2004.– V.222.–P.316-334.
35. Kharchenko Dmitrii O. Stochastic effects at ripple formation processes in anisotropic systems with multiplicative noise/ Dmitrii O. Kharchenko, Vasyl O. Kharchenko, Irina O. Lysenko, Sergei V.Kokhan // Phys.Rev.E..–2010.–V.82.– P.061108(13).
36. Kharchenko V.O. Morphology change of the silicon surface induced by Ar+ ion beam sputtering / V.O. Kharchenko, D.O. Kharchenko // Cond.Mat.Phys.– 2011.– V.14.– N2.–P.23602.
37. Lysenko I.O. Stationary surface structures formation during ion beam sputtering / I.O.Lysenko, V.O.Kharchenko, S.V.Kokhan, A.V.Dvornichenko // Metallofiz.Noveishie Tekhnol.–2013.– V.35.– N6.–P.763.
38. Kharchenko Vasyl O. Properties of nano-islands formation in nonequilibrium reaction–diffusion systems with memory effects / Vasyl O.Kharchenko, Dmitrii O.Kharchenko, Sergei V.Kokhan et al // Physica Scripta.– 2012.–V.86.– P.055401(10).
39. Kharchenko V.O. Nanosize pattern formation in overdamped stochastic reaction-diffusion systems with interacting adsorbate / V.O. Kharchenko, D.O. Kharchenko // Phys.Rev.E.–2012.–V.86.–P.041143.
40. Kharchenko Dmitrii O. A study of pyramidal islands formation in epitaxy within the generalized phase-field model / Dmitrii O.Kharchenko, Vasyl O.Kharchenko, Tetyana Zhylenko, Alina V.Dvornichenko // European Physical Journal B.– 2013.– V.86.– P.175.
41. Martin G. Phase stability under irradiation: Ballistic effects /G.Martin // Phys.Rev.B.– 1984.– V. 30.– P.1424.
42. Mazey D.J. Bubble lattice formation in titanium injected with krypton ions / D.J.Mazey, J.E.Evans // J.Nucl.Mat.–1986.–V.138.–P.16-18.

43. Ghoniem N.M. Evolution dynamics of 3D periodic microstructures in irradiated materials/ N.M.Ghoniem, D.Walgaef // Modeling Simul.Mat.Sci.Eng.-1993.- V.1.-N 5.-P.569-590.
44. Maksimov L.A. Kinetic equation for vacancion pores. Pore lattice as a dissipative structure stable under irradiation conditions / L.A.Maksimov, A.I.Ryazanov // Sov.Phys.JETP.-1980.- V.52.-P.1170.
45. Abromeit C. Dynamical phase changes induced by point defect fluxes under irradiation/ C.Abromeit, G.Martin // J.Nucl.Mater.-1999.- V.271-272.- P.251-255.
46. Selischev P.A. Self-organization phenomena in impure irradiated crystals/ P.A.Selischev, V.I.Sugakov // Rad.Effects.-1995.- V.133.-P.237-245.
47. Kharchenko Vasyl O. Noise-induced pattern formation in system of point defects subjected to irradiation/ Vasyl O.Kharchenko, Dmitrii O.Kharchenko // Eur.Phys.Jour.B.-2012.-V.85.-P.383-394.
48. Kharchenko Vasyl O. Properties of spatial organization of V-type defects in irradiated materials: 3D-modeling/ Vasyl O.Kharchenko, Dmitrii O.Kharchenko // Cond.Mat.Phys.-2013.-V.16.-N 3.-P.33001(1-12).
49. Jager W. Dislocation patterning under irradiation/ W.Jager, P.Ehrhart, W.Shchilling; edited by G.Marten and I.P.Kubin.- Switzerland, Transtech addr Aedermannsorff: Nonlinear Phenomena in Material Science, 1988.- 279 p.
50. Kiritani M. Recoil energy spectrum analysis and impact effect of cascade and subcascade in 14 MeV D-T fusion neutron irradiated fcc metals / M.Kiritani, T.Yoshiie, S.Kojima, Y.Sato // Radiat.Eff.Def.Solids.-1990.-V.113.-P.75-96.
51. Kiritani M. Dynamic studies of defect mobility using high voltage electron microscopy / M.Kiritani, H.Takata // J.Nucl.Mater.- 1978.- V.69.- P.277-309.
52. Kiritanim M. Similarity and difference between fcc, bcc and hcp metals from the view point of point defect cluster formation/ M.Kiritanim //J.Nucl.Mater.- 2000.-V.276.- P.41-49.

53. Satoh Y. Formation of stacking-fault tetrahedra in aluminum irradiated with high-energy particles at low-temperatures / Y.Satoh, T.Yoshiie, H.Mori, M.Kiritani // Phys.Rev.B.-2004.- V.69.- P.094108.
54. Jaeger W. Dislocation Patterning under Irradiation / W. Jaeger, P. Ehrhart and W. Schilling // Solid State Phenom.- 1988.- V.3-4.- P.279-294.
55. Jaeger W. Defect ordering in metals under irradiation / W. Jaeger, H. Trinkaus // J. Nucl. Mater.- 1993.- V.205.- P.394-410.
56. Selischev P.A. Auto-oscillation processes in impure crystals under irradiation / P.A.Selischev, V.I.Sugakov; edited by R.E.Stoller, Arvind S.Kumar, David S.Gelles.- ASTM, Philadelphia: Effects of Radiation on Materials, 1992.- P.594-599.
57. Selischev P.A. Self-organization phenomena in impure irradiated crystals / P.A.Selischev, V.I.Sugakov // Rad.Eff. and Def. in Solids.-1995.- V.133.- P.237-245.
58. Krishan K. Void ordering in metals during irradiation / K.Krishan // Philosophical Magazine A.- 1981.- V.45.- P.401-417.
59. Carpenter J.M. Thermally activated release of stored chemical energy in cryogenic media /J.M.Carpenter // Nature.- 1987.- V.36.- P.358-360.
60. Steele J.K. The disappearance of voids during 180 keV Ni+ bombardment of nickel / J.K.Steele, D.I.Potter // J.Nucl.Mat.- 1995.- V.218.- P.95-107.
61. Varatharajan K. Microhardness-microstructure study of aged Nimonic 90 irradiated with helium / K.Varatharajan, R.V.Nandedkhar; edited by R.E.Stoller.- Philadelphia: Effects of Radiation on Materials, 1989.- P.263-270.
62. Farnum E.H. Search for radiation - induced electrical degradation in alumina during spallation - neutron irradiation / E.H.Farnum, F.W.Jr.Clinard, W.F.Sommer, J.C.Kennedy III and T.Shikama // J.Nucl.Mat.- 1994.- V.212-215.- P.1128-1132.

63. Schule W. Radiation-enhanced diffusion due to intersttials and dynamic crowdions / W.Schule // J.Nucl.Mat.– 1996.– V.233-237.– P.964-968.
64. Sen P. Dissipative structure formation in could-rolled Fe and Ni during heavy ion irradiation / P.Sen, G.Agarwal, U.Tiwari // Phys.Rev.Lett.– 1998.– V.80.– P.1128-1132.
65. Golubov Stanislav I. Breakthrough in Understanding Radiation Growth of Zirconium / Golubov Stanislav I., Barashev Alexander V., Stoller Roger E., and Singh Bachu N. // Zirconium in the Nuclear Industry: 17th International Symposium.– 2015.– ASTM STP 1543.– P.729-758.
66. Barashev A.V. Theoretical investigation of microstructure evolution and deformation of zirconium under neutron irradiation / A.V. Barashev, S.I. Golubov, R.E. Stoller // J.Nucl.Mat.–2015.– V.461.– P.85-94.
67. Christien F. Cluster Dynamics modelling of irradiation growth of zirconium single crystals / F. Christien, A. Barbu // J.Nucl.Mat.–2009.– V.393.– P.153-161.
68. F. Onimus and J. L. Bechade, Radiation Effects in Zirconium Alloys, In: Comprehensive nuclear materials (Ed. by Rudy J. M. Konings, Elsevier, Amsterdam, 2012)
69. Griffiths M. A review of microstructure evolution in zirconium alloys during irradiation / M.Griffiths // J. Nucl. Mater.– 1988.– V.159.– P.190–218.
70. Northwood D.O. Irradiation damage in zirconium and its alloys / D.O.Northwood // Atomic Energy Rev.– 1977.– V.15.– P.547–610.
71. Golubov S.I. Radiation Damage Theory / S.I.Golubov, A.V.Barashev and R.E.Stoller; edited by R.J.M.Konings.– Amsterdam, Elsevier: Comprehensive Nuclear Materials, 2012.– V.1.– P.357-391.
72. Черемской П.Г. Поры в твердом теле / П.Г.Черемской, В.В.Слезов, В.И.Бетехин.– М: Энергоатомиздат, 1990.– 376 с.

73. Carpenter G.J.C. Void formation in zirconium under irradiation in the high-voltage electron microscope / G.J.C. Carpenter // Radiation Eff.- 1973.-V.19.- P.189-190.
74. Faulkner D. Void swelling in Zirconium / D.Faulkner, C.H.Woo // J.Nucl.Mater.- 1980.- V.90.- P.307-316.
75. Griffiths M. HVEM study of the effects of alloying elements and impurities on radiation damage in Zr-alloys / M.Griffiths, D.Gilbon, C.Regnard, C.Lemaignan // J.Nucl. Mater.- 1993.- V.205.- P.273-283.
76. Griffiths M. Study of point-defect mobilities in zirconium during electron-irradiation in a high-voltage electron-microscope / M.Griffiths, R.C.Styles, C.H.Woo, F.Phillipp, W.Frank // J. Nucl. Mater.- 1994.- V.208.- P.324-334.
77. Shebalov P.V. Alloy Cladding Tube Properties and Their Interrelation with Alloy Structure-Phase Condition and Impurity Content / P.V.Shebalov, M.M.Peregud, A.V.Nikulina, Y.K.Bibliashvili, A.F.Lositski, N.V.Kuz'menko, V.I.Belov, A.E.Novoselov; edited by G.P.Sabol and G.D.Moan // Zirconium in the Nuclear Industry: Twelfth International Symposium.- 2000.- ASTM STP 1354.- P.545-559.
78. Gilbon D. Irradiation Creep and Growth Behavior, and Microstructural Evolution of Advanced Zr-Base Alloys / D.Gilbon, A.Soniak, S.Doriot, J.-P.Mardon; edited by G.P.Sabol and G.D.Moan // Zirconium in the Nuclear Industry: Twelfth International Symposium.- 2000.- ASTM STP 1354.- P.51-73.
79. Motta A.T. Synchrotron Radiation Study of Second Phase Particles and Alloying Elements in Zircaloy-4 / A.T.Motta, K.T.Erwin, O.Delaire, R.C.Birtcher, Y.Chu, J.Maser, D.C.Mancini, B.Lai; edited by G.D.Moan and P.Rulding // Zirconium in the Nuclear Industry: Thirteenth International Symposium.- 2002.- ASTM STP 1423.- P.59-79.
80. Goll W. The Behavior of Intermetallic Precipitates in Highly Irradiated BWR LTP Cladding / W.Goll, I.Ray; edited by G.D.Moan and P.Rulding // Zi-

- rconium in the Nuclear Industry: Thirteenth International Symposium.– 2002.– ASTM STP 1423.– P.80-95.
81. Bajaj R. The Influence of In-Situ Clad Straining on the Corrosion of Zircaloy in a PWR Water Environment / R.Bajaj, B.F.Kammenzind, D.M.Farkas; edited by G.D.Moan and P.Rulding // Zirconium in the Nuclear Industry: Thirteenth International Symposium.– 2002.– ASTM STP 1423.– P.400-426
 82. Kuzovkov V.N. Void superlattice formation in electron irradiated CaF₂: Theoretical analysis / V.N. Kuzovkov, E.A. Kotomin, P. Merzlyakov, G. Zvejnieks, K.D. Li, T.H. Ding, L.M. Wang // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.– 2010.– V.268.– P.3055–3058.
 83. Russell K.C. Nucleation of voids in irradiated metals/ K.C.Russell// Acta Metall.–1971io– V.19.–P.753-758.
 84. Mayer R.M. Nucleation and growth of voids by radiation: I. Formulation of the problem/ R.M.Mayer, L.M.Brown// J. Nucl.Mater.–1980.– V.95.–P.46-57.
 85. Brailsford A.D. The rate theory of swelling due to void growth in irradiated metals/ A.D.Brailsford, R.Bullough// J.Nucl.Mater.–1972.–V.44.–P.121-135.
 86. Wiedersich H. On the theory of void formation during irradiation/ H.Wiedersich// Rad.Eff.& Def. in Sol.–1972.– V.12.–P.111-125.
 87. Brailsford A.D. Point defect sink strengths and void-swelling/ A.D.Brailsford, R.Bullough, M.R.Hynes// J.Nucl.Mater.–1976.– V.60.– P.246-256.
 88. Brailsford A.D. The Theory of Sink Strengths/ A.D.Brailsford, R.Bullough// Phil.Trans.R.Soc.Lond.Ser.A.–1981.– V.302.–P.87-137.
 89. Rokkam S. Phase field modeling of void nucleation and growth in irradiated metals/ Srujan Rokkam, Anter El-Azab, Paul Millett, Dieter Wolf// Modelling Simul.Mater.Sci.Eng.–2009.–V.17.–N 6.–P.064002.
 90. Hu S.Y. Phase-field simulation of void migration in a temperature gradient/S.Y. Hu, C.H. Henager// Acta Mater.–2010.– V.58.–P.3230-3237.

91. Schulson E.M. The ordering and disordering of solid solutions under irradiation / E.M.Schulson // JNM. – 1979. – V.83. – P.239.
92. Russel K.C. Phase Stability Under Irradiation / K.C.Russel// Progress in Material Science. – 1984. – V.28(3-4). – P.229-434.
93. Bernas H. Ordering Intermetallic Alloys by Ion Irradiation: A Way to Tailor Magnetic Media / H. Bernas, J. P. Attane, K. H. Heinig, D. Halley, D. Ravelosona, A. Marty, P. Auric, C.Chappert, and Y. Samson // Phys.Rev.Lett. – 2003. – V.91. – P.077203.
94. Wei L. Antistructure and Point Defect Response in the Recovery of Ion-Irradiated Cu₃Au / L. Wei, Y. S. Lee, R. S. Averback, and C. P. Flynn // Phys.Rev.Lett.–2000.–V.84.–P.6046.
95. Lee Y. S. Thermal and radiation-enhanced diffusion in Cu₃Au / Y. S. Lee, C. P. Flynn, and R. S. Averback // Phys.Rev.B.–1999.–V.60.–P.881.
96. Johnson R.A. Physics of Radiation Effects in Crystals / R.A.Johnson, A.N.Orlov. – Amsterdam: Elsevier Science Publishers B.V., 1986. – 736 p.
97. Siegel S. Effect of Neutron Bombardment on Order in the Alloy Cu₃Au/ S. Siegel // Phys.Rev. – 1949. – V.75. – P.1823.
98. Darken L.S. Diffusion, mobility and their interrelation through free energy in binary metallic systems / L.S.Darken // Trans. AIME.– 1948.– V.175.– P.184-201.
99. Gusak A.M. Nonequilibrium Vacancies in Nanosystems / A.M.Gusak, S.V.Kornienko, G.V.Lutsenko // Defect and Diffusion Forum.– 2007.–V.264.– P.109-116.
100. Назаров А.В. Кинетическая теория взаимной диффузии в бинарной системе / А.В.Назаров, К.П.Гуров // ФММ.– 1974.– Т.37.– Вып.3.– С.496-503.
101. Гуров К.П. Описание взаимной диффузии в сплавах с произвольной мощностью стоков вакансий / К.П.Гуров, А.М.Гусак // ФММ.– 1985.– Т.59.– Вып.6.– С.1062-1066.

102. Gusak A.M. Diffusion-controlled solid state reactions in alloys, thinfilms and nanosystems / A.M.Gusak, T.V.Zaporozhets, Yu.O.Lyashenko, S.V.Kornienko, M.O.Pasichnyy and A.S.Shirinyan.– Berlin: Wiley-VCH, 2010.– 475 p.
103. Тютюнник Н.В. Роль нерівноважних вакансій у процесі спінодального розпаду/ Н.В.Тютюнник, А.М.Гусак // Укр.Фіз.Журн.–2012.– Т.57.–В.6.– С.629-636.
104. Kharchenko V. Abnormal grain growth in nonequilibrium systems: Effects of point defect patterning/ V.Kharchenko, D.Kharchenko // Phys.Rev.E.– 2014.– V.89.– P.042133.
105. Wagner W. Short-range clustering and long-range periodic decomposition of an electron irradiated Ni-Cu alloy / W.Wagner, R.Poerschke, H.Wollemburger // J.Phys.F.–1982.–V.12.– P.405-424.
106. Garner F.A. Spinodal-like decomposition of Fe-35Ni and Fe-Cr-35Ni alloys during irradiation or thermal aging / F.A.Garner, J.M.McCerthy, K.C.Russell, J.J.Hoyt // J.Nucl.Mater.–1993.–V.205.– P.411-425.
107. Nakai K. Irradiation-induced spinodal decomposition in alloys / K.Nakai, C.Kinoshita// J.Nucl.Mater.–1989.– V.169.– P.116-125.
108. Nakai K. Irradiation-induced spinodal decomposition and its process in Fe-MO alloys / K.Nakai, C.Kinoshita, N.Nishimura // J.Nucl.Mater.–1991.–V.179-181.– P.1046-1049.
109. Asai Y. Inducement process and mechanism of spinodal decomposition in electron-irradiated Au-Ni alloys / Y.Asai, Y.Isobe, K.Nakai, C.Kinoshita, K.Shinohara // J.Nucl.Mater.– 1991.– V.179-181.– P.1050-1052.
110. Haataja M. Dislocations and morphological instabilities: Continuum modeling of misfitting heteroepitaxial films / M.Haataja, J.Muller, A.D.Rutenberg, M.Grant // Phys.Rev.B.– 2002.– V.65.–P.165414.
111. Haataja M. Influence of mobile dislocations on phase separation in binary alloys / M.Haataja, F.Leonard // Phys.Rev.B.– 2004.–V.69.–P.081201.

112. Haataja M. Scaling of domain size during spinodal decomposition: Dislocation discreteness and mobility effects / M.Haataja, J.Mahon, N.Provatas, F.Leonard // Appl.Phys.Lett.–2005.–V.87.–P.251901.
113. Hoyt J.J. Continuum model of irradiation-induced spinodal decomposition in the presence of dislocations/ J.J.Hoyt, M.Haataja// Phys.Rev.E.–2011.–V.83.– P.174106.
114. Enrique R. Phase stability under irradiation in alloys with a positive heat of mixing: Effective thermodynamics description / R.Enrique, P.Bellon// Phys.Rev.B. –1999. – V.60. – P. 14649.
115. Enrique R. Compositional Patterning in Systems Driven by Competing Dynamics Of Different Length Scale / R.Enrique, P.Bellon // Phys.Rev.Lett.– 2000.–V.84.–P.2885–2888..
116. Liu Ji-wen Patterning and ordering in driven alloys with coupled conserved and nonconserved order parameters / Ji-wen Liu, P.Bellon // Phys.Rev.B.–2002.– V.66.– P.020303(R).
117. Enrique R. Nonequilibrium fluctuations, effective temperature, and effective interactions driven by irradiation of alloys /R.Enrique, P.Bellon// Phys.Rev.B. – 2004. – V.70. – P.224106.
118. Kharchenko V.O. Electronic Properties of the Zirconium Crystal with Vacancies and Dynamics of Vacancies: ab-initio Calculations and Molecular Dynamics/ V.O.Kharchenko, S.V.Kokhan // J.Nano-Electron.Phys.–2015.– V.7.–N 2.– P.012014.
119. Elder K.R. Modeling Elasticity in Crystal Growth/ K.R.Elder, M.Katakowski, M.Haataja, M.Grant // Phys.Rev.Lett.– 2002.– V.88.–P. 245701.
120. Jaatinen A. Thermodynamics of bcc metals in phase-field-crystal models/ A.Jaatinen, C.V. Achim, K.R.Elder, T. Ala-Nissila // Phys.Rev.E.–2009.– V.80.–P. 031602.

121. Berry J. Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions/ J.Berry, M.Garnt, K.R.Elder // Phys.Rev.E.– 2006.–V.73.–P.031609.
122. Kharchenko D. Noise induced patterning in periodic systems with conserved dynamics / D.Kharchenko, I.Lysenko, V.Kharchenko//Physica A. – 2010. – V.389. – P. 3356-3367.
123. Kharchenko D.O. Pattern selection processes and noise induced pattern-forming transitions in periodic systems with transient dynamics/ D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, I.O. Lysenko// Cent.Eur.J.Phys. – 2011. – V.9.– N 3. – P.698-709.
124. Харченко Д.О. Моделювання зміни мікроструктури опромінюваних систем методом фазового поля кристала/ Д.О.Харченко, В.О.Харченко, С.В.Кохан, І.О.Лисенко// Укр.Фіз.Журн.–2012.– B.57.– N 10.–C.1069-1082.
125. Onuki A. Phase Transition Dynamics/ A.Onuki.– Cambridge: Cambridge University Press, 2002.– 710 p.
126. Minami A. Dislocation formation in two-phase alloys/ A.Minami, A.Onuki// Phys.Rev.B.–2004.– V.70.–P.184114.
127. Onuki A. Plastic flow in two-dimensional solids/ A.Onuki // Phys.Rev.E.– 2003.–V.68.-P.061502.
128. Minami A. Dislocation formation and plastic flow in binary alloys in three dimensions/ A.Minami, A.Onuki // Phys.Rev.B.–2005.– V.72.–P.100101.
129. Kharchenko Dmitrii O. Modeling microstructure evolution of binary systems subjected to irradiation and mechanical loading/ Dmitrii O.Kharchenko, Olga M.Shchokotova, Irina O.Lysenko, Vasyl O.Kharchenko// Rad.Eff.Def.Sol.–2015.–V.170.–N 7-8.–P.584-600.
130. Haataja M. Dislocations and morphological instabilities: Continuum modeling of misfitting heteroepitaxial films/ M.Haataja, J.Muller, A.D.Rutenberg, M.Grant // Phys.Rev.B.–2002.–V.65.–P.165414.

131. Haataja M. Influence of mobile dislocations on phase separation in binary alloys / M.Haataja, F.Leonard // Phys.Rev.B.-2004.-V.69.-P.081201.
132. Haataja M. Scaling of domain size during spinodal decomposition: Dislocation discreteness and mobility effects/ M.Haataja, J.Mahon, N.Provatas, F.Leonard // Appl.Phys.Lett.-2005.- V.87.-P.251901.
133. Kharchenko V.O. Morphology change of the silicon surface induced by Ar+ ion beam sputtering/ Kharchenko V.O., D.O. Kharchenko // Cond.Mat.Phys.-2011.- V.14.- N 2.-P.23602.
134. Kharchenko V.O. Modeling of ion-beam induced nano-size surface patterns in anisotropic systems/ V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko, I.O.Lysenko; edited by J.N. Govil.-USA,Houston: Studium Press LLC, 2012.- p. 367.- (Nanotechnology, Synthesis and Characterization; Vol.2).
135. Becke A. D. Density-Functional Thermochemistry. III. The Role of Exact Exchange / A. D. Becke // J. Chem. Phys.-1993.-V.98.- P.5648.
136. Burke K. Thime-Dependent Density Functional Theory: Past, Present, and Future / K. Burke, J. Werschnik, and E. K. U. Gross // J. Chem. Phys.-2005.- V.123.- P.062206.
137. Langreth D.C. Beyond the Local-Density Approximation in Calculations of Ground-State Electronic Properties / D.C. Langreth, M. J. Mehl // Phys. Rev. B.- 1983.- V.28.- P.1809.
138. Andersen O.K. Linear Methods in Band Theory / O.K. Andersen // Phys. Rev. B.- 1975.- V.12.- P.3060.
139. Kohn W. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects / W. Kohn, L. J. Sham // Phys. Rev.- 1965.- V.140.- P. A1133.
140. Hohenberg P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Phys. Rev.- 1964.- V.136.- P.B864.

141. Murray S. D. Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals / S. D. Murray, M. I. Baskes // Phys. Rev. B.– 1984.– V.29.– P.4436453.
142. Walgraef D. Theory and numerical simulations of defect ordering in irradiated materials/ D. Walgraef, J. Lauzeral, N.M. Ghoniem // Phys. Rev. B.– 1996.– V.53.– P.14782.
143. Perryman L.J. A description of the migration and growth of cavities/ L.J. Perryman, P.J. Goodhew // Acta Metall.– 1988.– V.36,–P. 2685-2692.
144. Tikare V. Simulation of Grain Growth and Pore Migration in a Thermal Gradient/ V. Tikare, E.A. Holm // J. Am. Ceram. Soc.– 1998.– V.81.– P.480-484.
145. Li Y. Phase-field modeling of void migration and growth kinetics in materials under irradiation and temperature field/ Yulan Li, Shenyang Hu, Xin Sun, et. al // J. Nucl. Mater.– 2010.– V.407.– P.119-125.
146. El-Azab1 A. Diffuse interface modeling of void growth in irradiated materials. Mathematical, thermodynamic and atomistic perspectives/ Anter El-Azab1, Karim Ahmed, Srujan Rokkam, et. al // COSSMS.– 2014.– V.18.– P.90-98.
147. Cahn J.W. Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy / J.W. Cahn, J.E. Hillard // J. Chem. Phys. – 1958. – V.28. – P.258-267.
148. Vaks V.G. On the theory of open systems: statistical thermodynamics and decomposition type phase transitions for the model of an alloy under irradiation / V.G. Vaks, V.V. Kamyshenko // Phys. Lett. A.– 1993.– V.177.– P.269-274.
149. Abromeit C. Dynamical phase changes induced by point defect fluxes under irradiation/ C. Abromeit, G. Martin // Jour. of Nucl. Mater.– 1999.– V.271-272.– P.251-255.
150. Dubinko V. I. Diffusion in fluctuating medium / V.I. Dubinko, A.V. Turkin A.A., V.V. Yanovsky // Rad. Eff. & Def. in Solids. – 1990. – V. 112.– N 4. – P.233-243.

151. Kharchenko D.O. Phase separation in binary systems with competing internal and external multiplicative noises/ D.O.Kharchenko, I.O. Lysenko , Kokhan S.V.//Eur.Phys.J.B.–2010.–V.76.–P.37-48.
152. Харченко Д.О. Середньопольовий підхід до нерівноважних фазових переходів у системах із внутрішнім та зовнішнім мультиплікативними шумами / Д.О.Харченко, І.О.Лисенко, В.О.Харченко // Укр.Фіз.Журн. – 2010. – Т.55.– N 11.–С.1226-1239.
153. Lecoq N. Evolution of the structure factor in a hyperbolic model of spinodal decomposition / N.Lecoq, H.Zapolsky, P.Galenko // Eur.Phys.J.ST. – 2009. – V.177. – P.165-175.
154. Galenko P.K. Stochastic generalization for a hyperbolic model of spinodal decomposition /P.K.Galenko, D.O. Kharchenko, I.O. Lysenko // Physica A. – 2010. – V.389.–P.3443-3455.
155. Лазерное управление процессами в твердом теле / Ф.Х. Мирзоев , В.Я. Панченко, Л.А. Шелепин // УФН.–1996.–В.166.–С.3-32.
156. Ландау Л.Д. Статистическая физика. Часть 1 / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц.– Москва: Наука, 1976.– Т.5.– 584 с.
157. Лифшиц Е.М. Физическая кинетика / Е.М. Лифшиц, Л.П.Питаевский.– Москва: Наука, 1979.– Т.10.– 528 с.
158. Wood K. Comprehensive study of pattern formation in relaxational systems/ K.Wood, J.Buceta, K.Lindenberg// Phys.Rev.E. – 2006. – V.73. – P.022101.
159. Ibanes M. Noise-Induced Scenario for Inverted Phase Diagrams /M.Ibanes, J.Garcia-Ojalvo, R.Toral, J.M.Sancho// Phys.Rev.Lett. – 2001. – V.87. – P.020601.
160. Kharchenko D.O. Phase separation in binary systems with internal multiplicative noise / D.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko // Physica A. – 2008. – V.387. – P.5342-5354.

161. Entropy-driven phase transitions with influence of the field-dependent diffusion coefficient/ V.O.Kharchenko // Physica A.–2009.–V.388.–P.268-276.
162. Kharchenko D.O. Phase transitions induced by thermal fluctuations/ D.O.Kharchenko, A.V.Dvornichenko // Eur.Phys.J.B.–2008.–V.61.–P.95-103.
163. Mangioni S.E. Nano-pattern stabilization by multiplicative noise/ S.E.Mangioni //Physica A.–2010.–V.389.–P.1799-1811.
164. Buceta J., Linderberg K. Comprehensive study of phase transitions in relaxational systems with field-dependent coefficients//Phys.Rev.E.–2004.–V.69.–P.011102.
165. Walgraef D. Theory and Numerical Simulations of Defect Ordering in Irradiated Materials/ D.Walgraef, J.Lauzeral, N.M.Ghoniem // Phys,Rev.B.–1996.–V.53.– N 22. – P.14782-14794.
166. Batogkh D. Nucleation kinetics and global coupling in reaction-diffusion systems/D.Batogkh, M.Hildebrant, F.Krischer, A.Mikhailov // Phys.Rep.–1997.–V.288.–P.435-456.
167. Kharchenko D.O. Noise induced patterning in reaction-diffusion systems with non-Fickian diffusion/ D.O.Kharchenko, S.V.Kokhan, A.V.Dvornichenko // Physica D.–2009.–V.238.–P.2251-2260.
168. Kiritani M. Microstructure evolution during irradiation/ M.Kiritani // J.Nucl.Mater.– 1994.–V.216.–P.220-264.
169. Kiritani M. Story of stacking fault tetrahedra/ M.Kiritani // Mat.Chem.Phys.– 1997.–V.50.– P.133-138.
170. Garcia-Ojalvo J. Noise in Spatially Extended Systems / J. Garcia-Ojalvo, J. M. Sancho.– New York: Springer-Verlag, 1999. – P.53-113.
171. Risken H. The Fokker-Planck equation / H. Risken. – Berlin: Springer Verlag, 1984. – 472 p.

172. Korn Granoni A. Mathematical Handbook for Scientists and Engineers / Granoni A.Korn, Theresa M.Korn.- New York: Dover Publications, Inc., Mineola, 2000.- 1152 p.
173. Maziasz P.J. Formation and stability of radiation-induced phases in neutron-irradiated austenitic and ferritic steels/ P.J.Maziasz // J.Nucl.Mater.-1989.- V.169.- P.95-115.
174. Kuznetsov P.V. Grinfeld instability as a mechanism of the formation of self-similar structures on aluminum single-crystal foils under cyclic tension / P.V.Kuznetsov, Yu.I.Tyurin, I.P.Chernov, T.I.Sigfusson // Physics of Solid State.-2012.- V.54.- P.2429-2436.
175. Mullins W.W. Stability of a Planar Interface During Solidification of a Dilute Binary Alloy / W.W.Mullins, R.F.Sekerka // J.Appl.Phys.- 1964.-V.35.- P.444-451.
176. Perez Rodolfo Ariel. Diffusion in α -Ti and Zr / Rodolfo Ariel Perez, Hideo Nakajima and Fanny Dyment // Materials Transactions.- 2003.- V.44.- P.2-13.
177. Ruiza Diego Hernan. Self-Diffusion in the Hexagonal Structure of Zirconium and Hafnium. Computer Simulation Studies / Diego Hernan Ruiza, Luis Maria Gribaudob, Ana Maria Montic // Materials Research.-2005.- V.8.- P.431-434.
178. Emel'yanov V.I. The Kuramoto-Sivashinsky equation for the defect-deformation instability of a surface-stressed nanolayer / V.I.Emel'yanov // Laser Physics.- 2009.- V.19.- P.538-544.
179. Kharchenko V.O. Properties of spatial arrangement of V-type defects in irradiated materials: 3D-modelling / V.O.Kharchenko, D.O.Kharchenko // Cond.Mat.Phys.- 2013.- V.16.- P.33001(12).
180. Gardiner C.W. Handbook of Stochastic Methods / C.W.Gardiner.- Berlin, Heidelberg, New-York, Tokyo: Springer-Verlag, 1985.- 410 p.

181. Galenko P.K. Stochastic generalization for a hyperbolic model of spinodal decomposition / P.K.Galenko, Dmirtii Kharchenko, Irina Lysenko // Physica A.– 2010.– V.389.– P.3443-3455.
182. Kharchenko D. Fluctuation effects on pattern selection in the hyperbolic model of phase decomposition. In: Stochastic Differential Equations/ D.Kharchenko, I.Lysenko, P.K.Galenko; ed. by Nikolaos Halidias.– Nova Science Publishers, 2011.– P.97-127.
183. Krishan K. Invited review article ordering of voids and gas bubbles in radiation environments / K.Krishan // Rad.Effects.– 1983.– V.66.– P.121-155.
184. Abromeit C. Microstructural self-organization in irradiated systems / C.Abromeit // Int.J.Modern Phys.B.– 1989).– V.3.– P.1301-1342.
185. Cahn Robert W. Physical Metallurgy / Robert W.Cahn, Peter Haasen.– Amsterdam, Lausanne, New York, Oxford, Shannon, Tokyo: Elsevier Science B.V., 1996.– 1004 p.
186. Lifshitz I.M. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions/ I.M.Lifshitz, V.V.Slyozov// J.Phys.Chem.Solids. – 1961. – V.19. – P.35.
187. Wagner C. Theory of precipitate change by redissolution/ C.Wagner, Z. Electrochem// Angew. Phys. Chem.–1961.– V.65.– 581-591.
188. Слезов В.В. Диффузионный распад твердых растворов/ В.В. Слезов, В.В. Сагалович// УФН.–1987.– B.30.–C.23-45.
189. Allen S.M. Ground State Structures in Ordered Binary Alloys with Second Neighbor Interactions/ S.M.Allen, J.W.Cahn// Acta Met.–1972.– V.20.–P.423-433.
190. Allen S.M. A correction to the ground state of FCC binary ordered alloys with first and second neighbor pairwise interactions/ S.M.Allen, J. W. Cahn// Scripta Met.–1973.– V.7.–P. 1261-1264.

191. Hurst H.E. The Long-Term Storage Capacity of Reservoirs / H.E.Hurst // Transactions of the American Society of Civil Engineers.– 1951.– V.116.– P.770-799.
192. Харченко Д.О. Моделювання мікроструктурних перетворень у системах, підданих радіаційному впливу /Д.О.Харченко, І.О.Лисенко, В.О.Харченко// Успехи фізики металлов.– 2012.–Т.13.–N 2.– C.101-187.
193. Enrique R.A. Compositional patterning in immiscible alloys driven by irradiation / R.A.Enrique, P.Bellon // Phys.Rev.E. – 2001. – V.63. – P.134111(12).
194. Marwick A.D. Segregation in irradiated alloys: The inverse Kirkendall effect and the effect of constitution on void swelling/ A.D.Marwick // J.Phys.F.– 1978.– V.8.–N 9.– P.1849.
195. Cahn J.W. On Spinodal Decomposition /J.W.Cahn// Acta Metall. – 1961. – V.9. – P.795-801.
196. Hoyt J.J. Phase Transitions/ J.J. Hoyt.– Hamilton: McMaster Innovation Press, 2010.– P.199–208.
197. Nelson D.R. Study of melting in two dimensions/ D.R.Nelson// Phys.Rev.B.– 1978.– V.18.–P.2318.
198. Nelson D.R. Dislocation-mediated melting in two dimensions/ D.R.Nelson, B.I.Halperin// Phys.Rev.B.–1979.– V.19.–P.2457.
199. Bako B. Cellular dislocation patterning during plastic deformation/ B.Bako, W.Hoeffelner// Phys.Rev.B.–2007.– V.76.–P.214108.
200. Gromma I. Dislocation Patterning: From Micro- to Mesoscale Description/ I.Gromma, B.Bako// Phys.Rev.lett.–V.84.–P.1487.
201. Enomoto Y. Effects of misfit dislocation array on phase separation during codeposition of binary thin films/ Y.Enomoto, S.Iwata// Surf.Coat.Technol.– 2003.– V.169-170.–P.233-236.

202. Hohenberg P.C. Theory of dynamic critical phenomena / P.C.Hohenberg, B.I.Halperin// Rev.Mod.Phys. – 1977. – V.49.– N 3. – P.435-479.
203. Matsumara S. Formation of precipitates in an ordering alloy and their dissolution under irradiation / S.Matsumara, Y.Tanaka, S.Müller, C.Abromeit // Jour. of Nuc. Mater.– 1996.– V.239.– P.42-49.
204. Haataja M., Leonard F. Alloy destabilization by dislocations/ M.Haataja, F.Leonard // Appl. Phys. Lett.–2005.–V.86.– P.181909.
205. Новиков Е.А. Функционалы метод случайной силы в теории турбулентности / Е.А. Новиков // ЖЕТФ. – 1965. – Т.20. – С.1290-1295.
206. Харченко Д.О. Середньопольовий підхід до нерівноважних фазових переходів у системах із внутрішнім та зовнішнім мультиплікативними шумами / Д.О.Харченко, А.В.Дворниченко, І.О.Лисенко // Укр.Фіз.Журн. – 2008. – Т.53.– N 9.–С.917-930.
207. Ibanes M. Noise-induced phase separation: mean field results / M.Ibanes, J.Garcia-Ojalvo, R.Toral, J.M.Sancho // Phys.Rev.E. – 1999. – V.60. – P.3597.
208. Garcia-Ojalvo J. Phase separation driven by external fluctuations / J.Garcia-Ojalvo, A.M.Lacasta, J.M.Sancho, R.Toral // Europhys. Lett. – 1998. – V.42. – P. 125-137.
209. Gunton J.D. in Phase Transitions and Critical Phenomena, edt. by C.Domb and J.L.Lebowitz / J.D.Gunton, M.San Miguel, P.S.Sahni. – New York: Academic Press, 1983. – Vol.8.
210. Vengrenovich R.D. Ostwald Ripening in Heterostructures with Quantum Dots under Dislocation-surface Diffusion/ R.D.Vengrenovich, A.V.Moskalyuk, S.V.Yarema// Ukr.J.Phys.–2006.–V.51.– N 3.–P.305-310.
211. Венгренович Р.Д. Оствальдовское созревание в условиях смешанного типа диффузии/ Р.Д. Венгренович, А.В. Москалюк, С.В. Ярема// Физ. твердого тела.–2007.– V.49.– N 1.– P.13-18.
- .

ДОДАТОК А

Список опублікованих праць за темою дисертації

1.Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати

1. Харченко Д.О. Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах/ Д.О.Харченко, В.О.Харченко, **А.І.Баштова** // Укр.фіз.журн. – 2013.– Т.58.– В.10.– С.994-1009.
2. Kharchenko Vasyl O. Modeling self-organization of nano-size vacancy clusters in stochastic systems subjected to irradiation/ Vasyl O.Kharchenko, Dmitrii O. Kharchenko, **Anna I.Bashtova** // Radiation Effects & Defects in Solids.– 2014.– V.169.– N 5.– P.418-436.
3. Kharchenko D.O. A study of phase separation processes in presence of dislocations in binary systems subjected to irradiation/ D.O. Kharchenko, O.M. Schokotova, **A.I.Bashtova**, I.O.Lysenko // Cond.Mat.Phys.– 2015.– V.18.– P.23003.
4. Kharchenko D.O. A study of void size growth in nonequilibrium stochastic systems of point defects / D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko, **A.I.Bashtova** // Eur.Phys.J.B.– 2016.– V.89.– P.123.
5. Харченко Д.О.Самоорганізація вакансійного ансамблю при спінодальному розпаді бінарних систем, підданих сталій дії радіаційного опромінення/ Д.О.Харченко, В.О.Харченко, **А.І.Баштова** // Укр.фіз.журн.– 2016.– Т.61.– В.3.– С.276-288.
6. Kharchenko Dmitrii O. Patterning and pattern selection in a surface layer: Feedback between point defects population and surface layer temperature variations/ Dmitrii O. Kharchenko, Vasyl O. Kharchenko, **Anna I. Bashtova**, Irina O. Lysenko // Physica A.– 2016.– V.463.– P.152-162.
7. Харченко В.О. Мульти масштабне моделювання самоорганізації нерівноважних точкових дефектів в опромінюваному α -цирконії / В.О. Харченко, І.О. Лисенко, О.М. Щокотова, **А.І. Баштова**, Д.О. Харченко та інші // Успехи физ. мет. – 2017.– Т.4.– С.294-400.

2. Наукові праці апробаційного характеру

8. **Баштова А.І.** Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах / **А.І.Баштова** // Наукові доповіді призерів ІІ туру Всеукраїнського конкурсу студентських наукових робіт з фізики.– Суми, 2013.– С.4.
9. **Баштова А.І.** Просторова організація дефектів вакансійного типу при сталій дії опромінення / **А.І.Баштова**, Д.О.Харченко, В.О.Харченко // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА-2014”, (Львів, 15-17 травня 2013 р.).– Львів, 2013.– С.Е1.
10. **Баштова А.І.** Фазове розшарування з дислокаційним механізмом в бінарних системах підданих опроміненню / **А.І. Баштова**, Д.О. Харченко, В.О. Харченко // Збірник тез школи-семінару “Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах”,(Суми,21-22 жовтня 2014 р.).– Суми, 2014.– С.26.
11. **Баштова А.І.** Моделювання самоорганізації нанорозмірних вакансійних кластерів в стохастичних системах підданих опроміненню / **А.І.Баштова**, Д.О.Харченка, В.О.Харченка // Збірник тез 14-тої Всеукраїнської школи-семінара та Конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 4-6 червня 2014 р.).– Львів, 2014.– С.Д15.
12. **Bashtova A.I.** A study external noise-induced effects in processes of voids growth / **A.I.Bashtova**, D.O.Kharchenko , V.O.Kharchenko // Abstract book of International research and practice conference: “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO - 2016), (Lviv, 24-17 August 2016).– Lviv, 2016.– P.303.
13. Kharchenko D.O. Pattern selection in a surface layer of irradiated foils: effect of the surface layer temperature variations / D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko **A.I.Bashtova**, I.O.Lysenko // Abstract book of International research and practice conference: “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO - 2016), (Lviv, 24-17 August 2016).– Lviv, 2016.– P.326.
14. **Баштова А.І.** Роль нерівноважних дефектів у процесі поділу фаз в

опромінюваних системах / **А.І.Баштової**, Д.О.Харченка, В.О.Харченка // Збірник тез 17-тої Всеукраїнської школи-семінара та Конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 8-9 червня 2017 р.). – Львів, 2017. – С.Д4.