

PACS numbers: 05.65.+b, 61.50.Lt, 61.72.Bb, 61.72.jd, 61.72.Qq, 61.80.Az, 82.40.Ck

**Фізична кінетика еволюції наномасштабної дисипативної
структури вакансійної підсистеми в ГЦК-кристалах в умовах
флюктуацій швидкості генерації точкових дефектів
під опроміненням: стохастичний модель**

В. А. Татаренко, П. О. Селищев*, О. В. Олійник, Й. Б. Парк**

*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Акад. Вернадського, 36,
03680, МСП, Київ-142, Україна*

**University of Pretoria,
Department of Physics,
Private Bag X20,
0028 Hatfield, South Africa*

***Department of Materials Science and Metallurgical Engineering,
Nano Materials Research Centre, Sunchon National University,
315 Maegok,
Sunchon, Jeonnam 540-742, Korea*

Розглянуто кінетичний модель впливу зовнішнього шуму, зокрема, флюктуацій швидкості генерації точкових дефектів і неоднорідности густини опроміненого ГЦК-кристалу на утворення дисипативної модульованої структури в просторовому розподілі вакансій. Швидкість генерації точкових дефектів типу вакансій по вузлах і густина їхніх стоків типу дислокацій уважалися як незалежними випадковими стаціонарними однорідними полями, так і з певними параметрами кореляцій флюктуацій — просторової та часової. Такі стохастичні поля можуть спричиняти просторовий перерозподіл вакансій, який призводить до стаціонарного однорідного чи то стохастичного поля їхньої густини. За її середнім значенням і кореляційними функціями зазначених флюктуацій встановлено умови, за яких в результаті взаємодії між флюктуаціями густини вакансій це однорідне випадкове поле стає нестійким по відношенню до стохастичного поля з просторово-періодичним середнім розподілом густини вакансій. На прикладі ГЦК-нікелю чисельно передбачено та проаналізовано температурні залежності просторових періодів дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми у ГЦК-кристалі для зазначених випадків із врахуванням сумарної («електрохімічної» + «деформаційної») взаємодії між вакансіями. Цей геометричний параметер такої структури визначається також кінетичними характеристиками перерозподілу вакансій.

Рассмотрена кинетическая модель влияния внешнего шума, в частности, флюктуаций скорости генерации точечных дефектов и неоднородности плотности облучённого ГЦК-кристалла на образование диссипативной модулированной структуры в пространственном распределении вакансий. Скорость генерации точечных дефектов типа вакансий на узлах и плотность их стоков типа дислокаций считались как независимыми случайными стационарными однородными полями, так и с определёнными параметрами корреляций флюктуаций — пространственной и временной. Такие стохастические поля могут обусловить пространственное перераспределение вакансий, которое приводит к однородному стационарному или же стохастическому полю их плотности. По его среднему значению и корреляционным функциям указанных флюктуаций установлены условия, при которых в результате взаимодействия между флюктуациями плотности вакансий это однородное случайное поле становится неустойчивым в отношении стохастического поля с пространственно-периодическим средним распределением плотности вакансий. На примере ГЦК-никеля численно предсказаны и проанализированы температурные зависимости пространственных периодов диссипативной модулированной структуры вакансионной подсистемы в ГЦК-кристалле для указанных случаев с учётом суммарного («электрохимического» + «деформационного») взаимодействия между вакансиями. Этот геометрический параметр такой структуры определяется также кинетическими характеристиками перераспределения вакансий.

A kinetic model for the influence of external noise, such as fluctuations of the point defects' generation rate and inhomogeneity of irradiated f.c.c. crystal, on the formation of dissipative modulated structure in a spatial distribution of vacancies is considered. The generation rate of vacancy-type point defects all over the sites and a density of their dislocation-type sinks are modelled as independent random uniform stationary fields and with certain defined parameters of fluctuation correlations—spatial and temporal ones. Such stochastic fields can induce a spatial redistribution of vacancies that can lead to their density stationary uniform field or stochastic one. By the average value and correlation functions of these fluctuations, the conditions for interacting fluctuations of the vacancy density, under which this homogeneous random field becomes unstable in relation to the stochastic field with a spatially periodic mean distribution of vacancies' density, are determined. For instance with f.c.c. nickel as a model, the temperature dependences of spatial periods of the dissipative modulated structure of vacancies' subsystem in f.c.c. crystal in mentioned cases are numerically forecasted and analysed, taking into account the total ('electrochemical' + 'strain-induced') interaction between vacancies. Such a geometrical parameter for a dissipative modulated structure is also determined by the kinetic characteristics of vacancies' redistribution.

Ключові слова: вакансії, «деформаційна» взаємодія, «електрохімічна» взаємодія, когезійна енергія, дисипативна структура, модульована структура, флюктуації, нанопори.

(Отримано 13 вересня 2012 р.)

1. ВСТУП

Головними причинами стохастичності густини радіаційних дефектів є такі зовнішні, як, наприклад, флюктуації швидкості їх генерації, та й внутрішні типу випадкового розподілу різноманітних недосконалостей кристалічної ґратниці, що стають стоками для точкових дефектів. Внаслідок того флюктуації густини радіаційних точкових дефектів є істотно нерівноважними. На відміну від термічно активованих рівноважних, їхній внесок не зникає обернено пропорційно розмірам системи і може сягати значних величин [1]. Роль зазначених випадкових збурень стає важливою для систем із нелінійними зворотніми зв'язками між складовими елементами і для процесів, що мають пороговий характер і точки розгалуження [2, 3].

В даній роботі теоретично досліджуються умови утворення просторово-періодичного розподілу густини радіаційних точкових дефектів, які постають внаслідок їх нелінійної взаємодії в системі з флюктувальними параметрами [2, 3]. Для того, щоб охарактеризувати ймовірнісну природу розподілу густини точкових дефектів, її розглядають як стохастичне поле значень, а для опису використовують стохастичне(і) диференціальне(і) рівняння [2–5]. Якщо швидкість генерації дефектів і густина їхніх стоків моделюються відповідними випадковими однорідними й стаціонарними полями, то випадковий розподіл точкових дефектів також може бути однорідним і стаціонарним [2, 3]. Однак, за певних умов опромінення, розподіл стає нестабільним внаслідок взаємодії флюктуацій густини дефектів, і утворюється стохастичне поле значень густини з періодичною зміною у просторі її середнього значення [2, 3, 5].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Нехай у ГЦК-кристалі через зовнішнє опромінення випадковим чином утворюються вакансії та власні міжвузловинні атоми [2–5]. Швидкість генерації таких точкових дефектів $K(\mathbf{r}, t)$ вважатимемо випадковою функцією координат вузлів \mathbf{r} і часу t ; її середня (за відповідним Гіббсовим ансамблем) величина $\langle K(\mathbf{r}, t) \rangle = K_0$ і дисперсія є сталими, що припускаються відомими. Кореляційні функції такого поля швидкостей генерації дефектів $\langle K(\mathbf{r}, t)K(\mathbf{r}', t') \rangle = C_K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$ та їхні Фур'є-образи, — спектральні густини, — $G(\mathbf{k}, t)$ також вважаються заданими [2, 3].

Точкові дефекти мігрують і вбираються стоками (наприклад, дислокаціями чи то дислокаційними петлями). Однак, внаслідок того, що коефіцієнт дифузії власних міжвузловинних атомів набагато порядків перевищує коефіцієнт дифузії вакансій (v), міжвузловинні атоми значно швидше вбираються стоками. В результаті концентрація міжвузловинних атомів є значно меншою за концен-

трацію вакансій, і їх розділяє значно більша середня віддаль, аніж середня віддаль між вакансіями; сумарний внесок їхньої взаємодії між собою та з вакансіями у термодинаміку системи значно слабкіший за внесок взаємодії між усіма вакансіями [2–4]. Тому, нехтуючи анігіляцією вакансій і міжвузловинних атомів, будемо розглядати тільки еволюцію розподілу густини $n(\mathbf{r}, t)$ «повільних» вакансій, яка описується наступним рівнянням [2, 3]:

$$\frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = K(\mathbf{r}, t) - \beta(\mathbf{r})n(\mathbf{r}, t) - (\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)) \quad (1)$$

($\nabla_{\mathbf{r}} \equiv \partial/\partial \mathbf{r}$ — Гамільтонів диференціальний оператор); $\beta(\mathbf{r}) = z_d \rho_d(\mathbf{r}) D_v$ — випадкове поле, яке описує ймовірність вбирання вакансій дислокаційними стоками густиною $\rho_d(\mathbf{r})$ і з коефіцієнтом z_d , що характеризує ефективність кінетично-силового взаємочину вакансій із тими дислокаційними стоками [2, 3]; $D_v(T)$ — коефіцієнт дифузії вакансій; $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -D_v \{ \nabla_{\mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) - n(\mathbf{r}, t) \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) / (k_B T) \}$ — густина потоку вакансій [2–6]; $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = -\nabla_{\mathbf{r}} \int W^{vv}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}'$ — сила, яка діє на вакансію, що знаходиться в точці \mathbf{r} , з боку усіх інших вакансій з точок $\{\mathbf{r}'\}$ через їхнє ефективне самоузгоджене внутрішньокристалічне поле [2–6]; $W^{vv}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ — енергія взаємодії пари вакансій у точках \mathbf{r} і \mathbf{r}' ; T — температура опроміненого кристалу-цілі, k_B — Больцманова константа.

Рівняння (1) розв'язуватимемо за циклічності крайових умов (Борна–Кармана) [2, 3]. (В цьому випадку характеристики стохастичного поля густини точкових дефектів визначаються тривіально.)

Припускаємо, що термоконцентраційний взаємозв'язок є слабким; це обумовлено розглядом випадку, коли теплообміном забезпечено ізотермічність ($dT/dt \rightarrow 0$), та нехтуванням рекомбінацією міжвузловинних атомів з вакансіями при еволюції розподілу їх.

Розділяючи детерміністичні та флюктуаційні частини функцій n , K , β в (1), матимемо [2, 3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{n}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= K_0 - \beta_0 \bar{n}(\mathbf{r}, t) - \langle \tilde{\beta}(\mathbf{r}) \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \rangle + D_v \Delta \bar{n}(\mathbf{r}, t) + \\ &+ \frac{D_v}{k_B T} \left(\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int \bar{n}(\mathbf{r}, t) \bar{n}(\mathbf{r}', t) \nabla_{\mathbf{r}} W^{vv}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) + \\ &+ \frac{D_v}{k_B T} \left(\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int \langle \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \tilde{n}(\mathbf{r}', t) \rangle \nabla_{\mathbf{r}} W^{vv}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{n}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \tilde{K}(\mathbf{r}, t) - \beta_0 \tilde{n}(\mathbf{r}, t) - \tilde{\beta}(\mathbf{r}) \bar{n}(\mathbf{r}, t) + D_v \Delta \tilde{n}(\mathbf{r}, t) + \\ &+ \frac{D_v}{k_B T} \left(\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \int \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \bar{n}(\mathbf{r}', t) \nabla_{\mathbf{r}} W^{vv}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{D_v}{k_B T} \left(\nabla_r \cdot \int \bar{n}(\mathbf{r}, t) \tilde{n}(\mathbf{r}', t) \nabla_r W^{vv}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) + \langle \tilde{\beta}(\mathbf{r}) \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \rangle - \tilde{\beta}(\mathbf{r}) \tilde{n}(\mathbf{r}, t) + \\
 & + \frac{D_v}{k_B T} \left(\nabla_r \cdot \int \{ \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \tilde{n}(\mathbf{r}', t) - \langle \tilde{n}(\mathbf{r}, t) \tilde{n}(\mathbf{r}', t) \rangle \} \nabla_r W^{vv}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right); \quad (3)
 \end{aligned}$$

де $\Delta \equiv (\nabla_r \cdot \nabla_r)$ — Ляпласів оператор, $\bar{n}(\mathbf{r}, t) = \langle n(\mathbf{r}, t) \rangle$, $K_0 = \langle K(\mathbf{r}, t) \rangle$, $\beta_0 = \langle \beta(\mathbf{r}) \rangle$, $\tilde{n}(\mathbf{r}, t) = n(\mathbf{r}, t) - \bar{n}(\mathbf{r}, t)$, $\tilde{K}(\mathbf{r}, t) = K(\mathbf{r}, t) - K_0$, $\tilde{\beta}(\mathbf{r}) = \beta(\mathbf{r}) - \beta_0$.

3. ОДНОРІДНЕ СТАЦІОНАРНЕ ВИПАДКОВЕ ПОЛЕ ГУСТИНИ ДЕФЕКТІВ

Серед розв'язків рівнянь (1) або системи рівнянь (2), (3) може існувати розв'язок, який є випадковим однорідним стаціонарним полем — $n_0(\mathbf{r}, t)$. Для нього середня густина вакансій $\langle n_0(\mathbf{r}, t) \rangle = \bar{n}_0$ є постійною в просторі та в часі, а кореляційна функція густини дефектів залежить лише від різниці аргументів [2, 3]. Тоді для середнього значення n_0 матимемо [2, 3]:

$$K_0 - \beta_0 n_0 - \langle \tilde{\beta}(\mathbf{r}) \tilde{n}_0(\mathbf{r}, t) \rangle = 0. \quad (4)$$

Нехтуючи флюктуаціями добутку випадкових функцій, розв'язуємо (3) та будуємо кореляційні функції [2]:

$$\langle \tilde{\beta}(\mathbf{r}) \tilde{n}_0(\mathbf{r}, t) \rangle = \bar{n}_0 \int \frac{G_\beta(\mathbf{k})}{\lambda(\mathbf{k}; \bar{n}_0)} d\mathbf{k}, \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
 \langle \tilde{n}_0(\mathbf{r}, t_1) \tilde{n}_0(\mathbf{r}', t_2) \rangle & = \bar{n}_0^2 \int \frac{G_\beta(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} d\mathbf{k}}{\lambda^2(\mathbf{k}; \bar{n}_0)} + \\
 & + \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \lambda(\mathbf{k})(t_1 - t_2)} \int_{-\infty}^{t_1 - t_2} d\tau_1 e^{-2\lambda(\mathbf{k})\tau_1} \int_{-\infty}^{\tau_1} d\tau_2 G(\mathbf{k}, \tau_2) e^{-\lambda(\mathbf{k})\tau_2}, \quad (6)
 \end{aligned}$$

де під $\int d\mathbf{k}\{\dots\}$ розуміється інтегрування по оберненому простору, а

$$\lambda(\mathbf{k}) \equiv \lambda(\mathbf{k}; \bar{n}_0) = - \left[k^2 D_v \left\{ 1 + \frac{\bar{n}_0 \tilde{W}^{vv}(\mathbf{k})}{k_B T} \right\} + \beta_0 \right],$$

$$\tilde{W}^{vv}(\mathbf{k}) = \int W^{vv}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Рівняння (4), (5) складають замкнену систему для $n_0(\mathbf{r}, t)$ і разом із (6) описують випадкове однорідне стаціонарне поле густини вакансій у наближенні, що частково враховує й кореляції [2, 3].

4. НЕСТІЙКІСТЬ ОДНОРІДНОГО РОЗПОДІЛУ ВАКАНСІЙ ЗА НАЯВНОСТІ ФЛЮКТУАЦІЙ ШВИДКОСТІ ГЕНЕРАЦІЇ ДЕФЕКТІВ І НЕОДНОРІДНОСТІ ОПРОМІНЕНОГО ГЦК-КРИСТАЛУ

Для визначення умов стійкості стаціонарного однорідного випадкового поля густини вакансій розглянемо еволюцію малого збурення її ймовірнісного розподілу, за якого спотворенням середнього значення є $\delta\bar{n}(\mathbf{r}, t) \propto \exp\{\lambda_f t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}\}$ з декрементом згасання $\lambda_f = \lambda_f(\mathbf{k})$, а флюктуаційним збуренням неоднорідної частини — $\delta\tilde{n}(\mathbf{r}, t)$ [2, 3]. Внаслідок анізотропії ГЦК-кристалу Фур'є-компонента $\tilde{W}^{vv}(\mathbf{k})$ енергій взаємодії сягає мінімального значення для певного кристалографічного напрямку. Тому зі зміною параметрів, наприклад, температури опромінюваного зразка, нестійкою стає, насамперед, одна з мод із хвильовим вектором $\mathbf{k} = \mathbf{k}_c$, який має отой самий напрямок. Серед інших факторів це уможливорює у аналізі стійкості обмежитися одновимірними збуреннями, спрямувавши вісь $0x$ вздовж \mathbf{k}_c . Підставляючи $\bar{n}(x, t) = \bar{n}_0 + \delta\bar{n}(x, t)$ в (2), а $\tilde{n}(x, t) = \tilde{n}_0 + \delta\tilde{n}(x, t)$ — в (3), одержуємо рівняння еволюції малих збурень середнього значення та флюктуацій однорідного випадкового розподілу точкових дефектів [2, 3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta\bar{n}(x, t)}{\partial t} = & -\beta_0 \delta\bar{n}(x, t) - \langle \tilde{\beta}(x) \delta\tilde{n}(x, t) \rangle + D_v \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta\bar{n}(x, t) + \\ & + \frac{D_v \bar{n}_0}{k_B T} \int \delta\bar{n}(x', t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} W^{vv}(x - x') dx' + \\ & + \frac{D_v}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \int \left\{ \langle \tilde{n}_0(x, t) \delta\tilde{n}(x', t) \rangle + \langle \delta\tilde{n}(x, t) \tilde{n}_0(x', t) \rangle \right\} \frac{\partial}{\partial x} W^{vv}(x - x') dx', \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta\tilde{n}(x, t)}{\partial t} = & -\beta_0 \delta\bar{n}(x, t) + D_v \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta\tilde{n}(x, t) + \\ & + \frac{D_v \tilde{n}_0}{k_B T} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int \delta\tilde{n}(x', t) W^{vv}(x - x') dx' - \tilde{\beta}(x) \delta\bar{n}(x, t) + \\ & + \frac{D_v}{k_B T} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \tilde{n}_0(x, t) \int \delta\bar{n}(x', t) \frac{\partial W^{vv}(x - x')}{\partial x} dx' + \right. \\ & \left. + \delta\bar{n}(x, t) \int \tilde{n}_0(x', t) \frac{\partial W^{vv}(x - x')}{\partial x} dx' \right\}. \quad (8) \end{aligned}$$

Система рівнянь (7), (8) має змінні коефіцієнти та не є замкненою, оскільки до неї входять величини $\langle \tilde{\beta}(x) \delta\tilde{n}(x, t) \rangle$, $\langle \tilde{n}_0(x, t) \delta\tilde{n}(x', t) \rangle$. Але, оскільки в (8) змінні коефіцієнти є лише при $\delta\bar{n}(x, t)$, то, розг-

лядаючи відповідні доданки як неоднорідність, знаходимо $\delta\tilde{n}(x, t)$, яке тепер є функціоналом $\delta\bar{n}(x, t)$. Тоді підставляємо його в (7) і, виконуючи усереднення, для декременту згасання одержуємо:

$$\lambda_f(\mathbf{k}) = \lambda(\mathbf{k}) + \int d\mathbf{k}' \frac{G_\beta(\mathbf{k}')}{\lambda_f(\mathbf{k}) - \lambda(\mathbf{k} - \mathbf{k}')} \left[-\frac{\bar{n}_0 D_v S_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{k_B T \lambda(\mathbf{k}')} - 1 \right] \left[-\frac{\bar{n}_0 D_v S_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}')}{k_B T \lambda(\mathbf{k}')} - 1 \right] + S, \quad (9)$$

де

$$S = \frac{D_v^2}{(k_B T)^2} \int_{-\infty}^0 d\tau_1 \int_{-\infty}^0 d\tau_2 \int_{-\infty}^0 d\tau_3 \int d\mathbf{k} S_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') S_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \times \\ \times G(\mathbf{k}', \tau_1 - \tau_2 - \tau_3) \exp\{-\lambda(\mathbf{k}')(\tau_1 + \tau_2) + [\lambda_f(\mathbf{k}) - \lambda(\mathbf{k} - \mathbf{k}')] \tau_3\}, \\ S_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = (\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \{\mathbf{k} \tilde{W}^{vv}(\mathbf{k}) - \mathbf{k}' \tilde{W}^{vv}(\mathbf{k}')\}, \\ S_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = (\mathbf{k} \cdot \{\mathbf{k}' \tilde{W}^{vv}(\mathbf{k}') - (\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \tilde{W}^{vv}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\}).$$

Для одержання виразу (9) припускалася статистична незалежність $\bar{K}(\mathbf{r}, t)$, $\beta(\mathbf{r})$, тобто їх взаємна кореляційна функція та відповідна спектральна густина припускалися рівними нулям.

Декремент згасання λ_f є функцією \mathbf{k} . Якщо енергія теплового руху вакансій значно перевищує енергію силової взаємодії їх сукупності, то декремент згасання $\lambda_f < 0$ для будь-якої моди [2–5]. Зі зниженням температури для деякого $\mathbf{k} = \mathbf{k}_c$ декремент згасання проходить через нуль і стає вже позитивним: розвивається нестійкість по відношенню до переходу до ймовірнісного розподілу густини вакансій із середнім, період просторової зміни якого дорівнює $2\pi/|\mathbf{k}_c|$ [2].

5. НЕСТІЙКІСТЬ ОДНОРІДНОГО РОЗПОДІЛУ ВАКАНСІЙ ЗА ВІДСУТНОСТІ ФЛЮКТУАЦІЙ ШВИДКОСТІ ҐЕНЕРАЦІЇ ДЕФЕКТІВ ТА НЕОДНОРІДНОСТІ ОПРОМІНЕНОГО ҐЦК-КРИСТАЛУ (ДЕТЕРМІНІСТИЧНИЙ МОДЕЛЬ)

У випадку відсутності зовнішніх флюктуацій швидкості генерації точкових дефектів та флюктуацій неоднорідності опроміненого ҐЦК-кристалу рівняння (1) має наступний вигляд [3–6]:

$$\frac{\partial \bar{n}}{\partial t} = K_0 - \beta_0 \bar{n} - (\nabla_r \cdot \mathbf{j}). \quad (10)$$

Одним із стаціонарних розв'язків рівняння (10) є наступний однорідний розв'язок: $\bar{n} = \bar{n}_0 = n_{st} \equiv K_0 / \beta_0 = K_0 \tau$. Зі зниженням тем-

ператури опроміненого зразка густина вакансій зростає, роль взаємодії збільшується, а однорідний стан стає нестійким [3–6]. Це призводить до його розпаду і утворення неоднорідної структури в розподілі густини вакансій. Для дослідження стійкості однорідного розв'язку розглянемо еволюцію його малого збурення:

$$\delta \bar{n}(\mathbf{r}, t) \propto \exp(\lambda t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (11)$$

Лінеаризацією (10) за $\delta \bar{n}(\mathbf{r}, t)$ одержуємо дисперсійне рівняння [3–6]:

$$\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n) = -D_v k^2 \{1 + \alpha_n \tilde{U}(\mathbf{k})\} - \tau^{-1}; \quad (12)$$

за означенням маємо: $\tilde{U}(\mathbf{k}) = \tilde{W}^{vv}(\mathbf{k}) / \tilde{W}_{0n}^{vv}$, $\tilde{W}^{vv}(\mathbf{k}) = \int W^{vv}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$, $\tilde{W}_{0n}^{vv} = \lim_{k \rightarrow 0} |\tilde{W}^{vv}(k\mathbf{n})|$, $\alpha_n = n_{st} \tilde{W}_{0n}^{vv} / (k_B T)$ [3–6].

Параметер помпування α_n є пропорційний концентрації взаємодійних вакансій і визначається зовнішнім джерелом дефектів (K_0) та температурою (T) [3–6]. За малої густини вакансій та/або високих температур (коли $\alpha_n \rightarrow 0$) дійсно $\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n \rightarrow 0) \cong -D_v k^2 - \tau^{-1} < 0$. Повертаючись до виразу (11) для малого просторово-часового збурення однорідного й стаціонарного розподілу густини вакансій, можна побачити, що, коли $\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n \rightarrow 0) < 0$, концентраційні неоднорідності з часом «розсмоктуватимуться», оскільки $\delta n(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$, і однорідний стан залишатиметься стійким [3–6].

Для деяких напрямків \mathbf{k} може бути $\tilde{U}(\mathbf{k}) < 0$, і з перевищенням (позитивним) параметром α_n порогового значення α_{nKP} для деякого певного хвильового вектора $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{KP}$ (що знаходитиметься на порозі нестабільності) величина $\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n)$ ставатиме позитивною [3–6]. З виразу (11) видно, що в умовах, коли хоча б $\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n \geq \alpha_{nKP} > 0) > 0$, концентраційні неоднорідності збільшуватимуться з часом: збурення розподілу густини вакансій зростатимуть за експоненціальним законом. Отже, однорідний стан ставатиме нестійким; відповідно, розвиватиметься модульована структура в розподілі вакансій, насамперед, з періодом $d = 2\pi/k_{KP}$, де \mathbf{k}_{KP} відповідатиме (біфуркаційній) точці виникнення нового (додаткового до однорідного) розв'язку кінетичного рівняння (10) у вигляді неоднорідної концентраційної хвилі [3–6]. Найменше значення параметра помпування $\alpha_n = \alpha_{nKP}$, при якому вже виконується рівність $\lambda(\mathbf{k}_{KP}, \alpha_{nKP})$ нулевій, тобто рівняння

$$D_v k_{KP}^2 \{1 + \alpha_{nKP} \tilde{U}(\mathbf{k}_{KP})\} + \tau^{-1} = 0, \quad (13)$$

відповідає точці біфуркації, якщо останнє має ненульовий розв'язок саме при $\mathbf{k}_{KP} \equiv k_{KP} \mathbf{n}$, а k_{KP} знаходиться з умови [3–6]

$$[\partial \lambda(\mathbf{k}, \alpha_{nKP}) / \partial \mathbf{k}]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_{KP}} = \mathbf{0}. \quad (14)$$

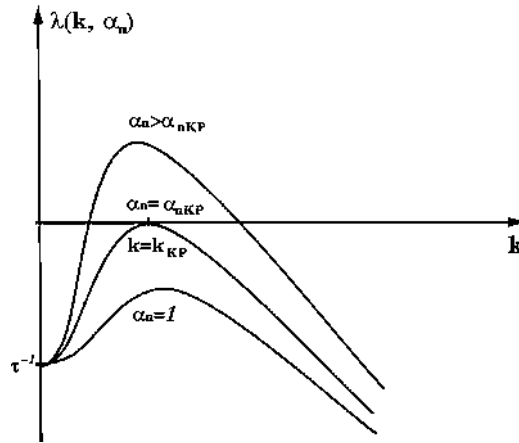


Рис. 1. Схематична ілюстрація появи нестійкості однорідного розподілу вакансій [4].

Властивості парної функції $\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n)$ детально досліджено в [3, 4]. Якщо $\alpha_n < 1$, коли $\tilde{U}(\mathbf{k}) < 0$, то $\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n) < 0$, тобто вона є монотонно спадною від’ємною функцією. При $\alpha_n = 1$ в точці $\mathbf{k} = \pm \mathbf{k}_m$ з’являється екстремум. \mathbf{k}_m з ростом α_n монотонно збільшується, а значення $\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n)$ збільшується та сягає нуля, насамперед, при $\alpha_n = \alpha_{нКР}$ і $\mathbf{k} = \pm \mathbf{k}_m = \pm \mathbf{k}_{КР}$. При $\alpha_n > \alpha_{нКР}$ в околі точок $\mathbf{k} = \pm \mathbf{k}_{КР}$ значення функції $\lambda(\mathbf{k}, \alpha_n)$ стають позитивними (рис. 1).

Таким чином, в процесі опромінення швидше за всіх будуть зростати амплітуди тих концентраційних хвиль, хвильові вектори яких утворюють промені зірки хвильового вектора $\mathbf{k}_{КР}$, а параметер помпування є не меншим за $\alpha_{нКР}$ [6]. Всі інші, більш повільні концентраційні хвилі, аніж хвиля з хвильовими векторами-променями зірки $\{\mathbf{k}_{КР}\}$, матимуть позитивний «декремент згасання» λ лише у випадку, коли $\alpha_n > \alpha_{нКР}$ [6].

З рівнянь (13) і (14) за умови наближень, яких описано нижче (п. 6), порогове значення $\alpha_{нКР}$ параметра помпування, яке визначається середньою концентрацією взаємодійних вакансій, і критичне значення величини $k_{КР}$ хвильового вектора уздовж фіксованого напрямку \mathbf{n} біля $\mathbf{k} \cong \mathbf{0}$ для кубічного кристалу дорівнюють, відповідно:

$$\alpha_{нКР} \cong -\frac{\tilde{W}_{0n}^{vv}}{\tilde{w}_n^{vv}} + \frac{2\tilde{B}^{vv}(\mathbf{n})\tilde{W}_{0n}^{vv}}{[\tilde{w}_n^{vv}]^2 D_v \tau} + \frac{2\tilde{W}_{0n}^{vv} \sqrt{\tilde{B}^{vv}(\mathbf{n})\{\tilde{B}^{vv}(\mathbf{n}) - \tilde{w}_n^{vv} D_v \tau\}}}{[\tilde{w}_n^{vv}]^2 D_v \tau}$$

чи то (якщо $\rho_{0d} = \langle \rho_d(\mathbf{r}) \rangle$)

$$\alpha_{нКР} \cong -\frac{\tilde{W}_{0n}^{vv}}{\tilde{w}_n^{vv}} + \frac{2z_d \rho_{0d} \tilde{B}^{vv}(\mathbf{n}) \tilde{W}_{0n}^{vv}}{[\tilde{w}_n^{vv}]^2} + \frac{2\tilde{W}_{0n}^{vv} \sqrt{z_d \rho_{0d} \tilde{B}^{vv}(\mathbf{n}) \{z_d \rho_{0d} \tilde{B}^{vv}(\mathbf{n}) - \tilde{w}_n^{vv}\}}}{[\tilde{w}_n^{vv}]^2},$$

$$k_{\text{КР}}(\mathbf{n}, \alpha_{\text{нКР}}) = \sqrt{\frac{-\tilde{W}_{0\mathbf{n}}^{vv} - \alpha_{\text{нКР}} \tilde{w}_{\mathbf{n}}^{vv}}{2\alpha_{\text{нКР}} \tilde{B}^{vv}(\mathbf{n})}},$$

де $\tilde{w}_{\mathbf{n}}^{vv} = \tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{0}) + \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n}) + Q^{vv}$ та $\tilde{B}^{vv}(\mathbf{n}) = \gamma_0^{vv} + \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})$ — коефіцієнти розвинення у наближеному виразі $\tilde{W}^{vv}(\mathbf{k}) \cong \tilde{w}_{\mathbf{n}}^{vv} + \tilde{B}^{vv}(\mathbf{n})k^2 + \dots$ [6] (див. п. 6). Оскільки Фур'є-компоненти енергій «деформаційної» й «електрохімічної» v - v -взаємодій мають негативні граничні значення при $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ саме з напрямку [100] (або [010] чи [001]) усередині першої Бріллюєнової зони (BZ) для ГЦК-ґратниці (див. п. 6), порогове значення $\alpha_{[100]\text{КР}}$ параметра помпування та критичне значення величини $k_{\text{КР}}$ хвильового вектора $\mathbf{k}_{\text{КР}}$ уздовж напрямку [100] (або [010] чи [001]) біля $\mathbf{k} \cong \mathbf{0}$ дорівнюють [3–6], відповідно:

$$\alpha_{[100]\text{КР}} \cong 1 + \frac{2\tilde{B}^{vv}([100])}{\tilde{W}_{0[100]}^{vv} D_v \tau} + \frac{2\sqrt{\tilde{B}^{vv}([100])\{\tilde{B}^{vv}([100]) + \tilde{W}_{0[100]}^{vv} D_v \tau\}}}{\tilde{W}_{0[100]}^{vv} D_v \tau}$$

чи то

$$\alpha_{[100]\text{КР}} \cong 1 + \frac{2z_d \rho_{0d} \tilde{B}^{vv}([100])}{\tilde{W}_{0[100]}^{vv}} + \frac{2\sqrt{z_d \rho_{0d} \tilde{B}^{vv}([100])\{z_d \rho_{0d} \tilde{B}^{vv}([100]) + \tilde{W}_{0[100]}^{vv}\}}}{\tilde{W}_{0[100]}^{vv}},$$

$$k_{\text{КР}}([100], \alpha_{[100]\text{КР}}) \cong \sqrt{\frac{(\alpha_{[100]\text{КР}} - 1)\tilde{W}_{0[100]}^{vv}}{2\alpha_{[100]\text{КР}} \tilde{B}^{vv}([100])}}.$$

За оцінками саме перший (одиничний) член у виразі для $\alpha_{[100]\text{КР}}$ є найбільшим за величиною доданком і дає головний внесок у порогове значення $\alpha_{[100]\text{КР}}$ [2–6]. Таким чином, оскільки $\tilde{B}^{vv}([100]) \geq 0$ (див. п. 6), дисипативні модульовані структури вакансійної підсистеми в

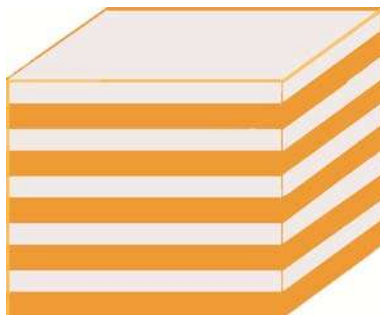


Рис. 2. Схематичне зображення одновимірної модульованої структури вакансійної підсистеми; світлим («сірим») кольором позначено гребені концентраційної хвилі атомів металевого ГЦК-кристалу, темнішим («жовто-гарячим») — гребені концентраційної хвилі вакансійної підсистеми.

ГЦК-кристалі виникатимуть, якщо $\alpha_{100\text{КР}} > 1$, а періоди дисипативних модульованих структур вакансійної підсистеми залежатимуть від параметрів кінетики перерозподілу: коефіцієнта дифузії вакансій і скінченного часу життя нестабільних вакансій або ж коефіцієнта z_d , який характеризує ефективність кінетично-силового взаємочину таких вакансій з дислокаційними стоками [3–5, 7, 8].

У ГЦК-кристалі (посеред дислокаційних стоків) можуть виникати концентраційні вакансійні хвилі зазначеного типу у еквівалентних напрямках [100], [010] або [001], зокрема, одночасно у вигляді тривимірної суперпозиції взаємно проникних двох або трьох хвиль:

$$\bar{n}(\mathbf{r}, t) = \bar{n}_0 + \delta\bar{n}_1^{[001]}(z, t), \quad (15a)$$

$$\bar{n}(\mathbf{r}, t) = \bar{n}_0 + \delta\bar{n}_2^{[010]}(y, t) + \delta\bar{n}_2^{[001]}(z, t), \quad (15б)$$

$$\bar{n}(\mathbf{r}, t) = \bar{n}_0 + \delta\bar{n}_3^{[100]}(x, t) + \delta\bar{n}_3^{[010]}(y, t) + \delta\bar{n}_3^{[001]}(z, t), \quad (15в)$$

де x, y, z , — компоненти вектора \mathbf{r} в напрямках осей [100], [010], [001] відповідно. Кожна з неоднорідних функцій, які складають праві частини (15а), (15б), (15в), описує одновимірну модуляцію вакансійної підсистеми в напрямку одного із ребер куба [9].

На рисунках 2, 3 схематично зображено одно-, дво- та тривимірну модульовані структури вакансійної підсистеми.

В разі збігу гребенів одночасно трьох взаємно проникних та синфазно модульованих концентраційних вакансійних хвиль створюються умови для «зародкування» нанопор по охоплених гребенями вузлах. Виникнення такої тривимірної суперпозиції концентраційних вакансійних хвиль у напрямках [100], [010] і [001] одночасно (із синфазним перетином їхніх гребенів) можна зіставити з механізмом утворення надгратниці нанопор у ГЦК-кристалі, що опромінюється.

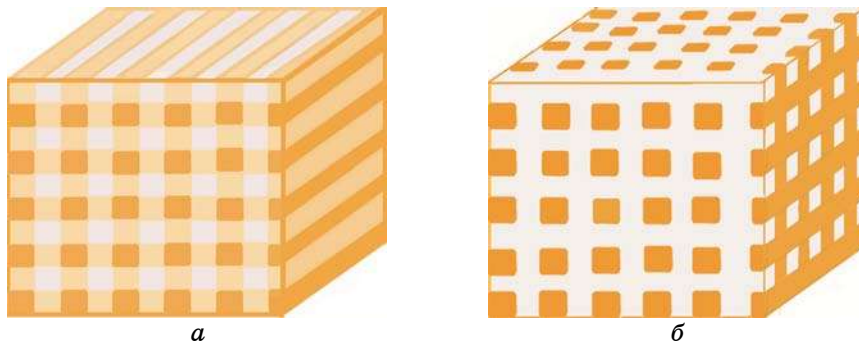


Рис. 3. Схематичні зображення дво- та тривимірної модульованої структури вакансійної підсистеми; темнішим («жовтогарячим») кольором позначено перетини гребенів концентраційних хвиль вакансійної підсистеми.

6. ЕНЕРГЕТИЧНІ ПАРАМЕТРИ ВЗАЄМОДІЙ ВАКАНСІЙ

Коли віддаль між вакансіями у кубічному кристалі набагато перевищує параметер a_0 його ґратниці, енергії ефективно парної взаємодії між ними $\tilde{W}^{vv}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ в основному визначаються тими Фур'є-компонентами $\tilde{W}^{vv}(\mathbf{k})$, яких можна наблизити Тейлоровим рядом за степенями k^2 [6] (через наявність центрів інверсії $\tilde{W}^{vv}(-\mathbf{k}) = \tilde{W}^{vv}(\mathbf{k})$):

$$\tilde{W}^{vv}(\mathbf{k}) \approx \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}) + \tilde{\phi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k}) \cong \tilde{w}_n^{vv} + \tilde{B}^{vv}(\mathbf{n})k^2 + \dots, \quad (16)$$

де $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$ — \mathbf{k} -та Фур'є-компонента енергій (непрямої) «деформаційної» взаємодії між вакансіями, яку навіть у скінченній малій області поблизу $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ можна представити апроксимувальним виразом [9–12]:

$$\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}) \cong \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n}) + \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})k^2 + \mathcal{Q}^{vv}.$$

Відома формула для першого доданку тут праворуч ґрунтується на довгохвильовій границі (тобто континуальному наближенні) [9, 10]:

$$\mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n}) \cong -\frac{9K^2\nu_0(L^v)^2(1 + 2\xi\tilde{\chi}(\mathbf{n}) + 3\xi^2\tilde{\gamma}(\mathbf{n}))}{D(\mathbf{n})},$$

а другий доданок є першою поправкою до неї [10, 11]; третій доданок

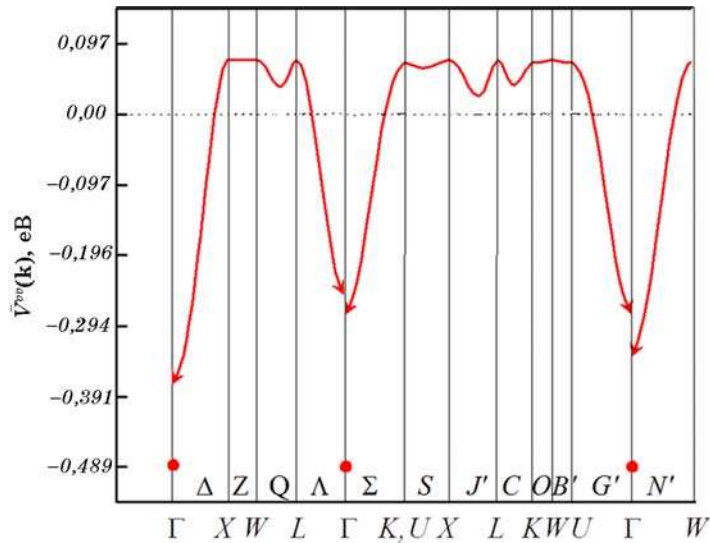


Рис. 4. Дисперсія залежності Фур'є-компоненти енергії «деформаційної» $v-v$ -взаємодії в кристалі ГЦК-Ni в основних високосиметрійних напрямках оберненого простору, зокрема, у високосиметрійних точках Γ , X , W , L , $K(U)$ його першої BZ; ● — $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{0})$ при $T = 300 \text{ K}$.

— калібрувальний параметер, який виключає ефект непрямої «самодії» (тобто враховує відсутність «пружної» взаємодії вакансії із самою собою) [9, 12, 13]. В останньому виразі $\nu_0 = a_0^3 / 4$ — об'єм примітивної елементарної комірки ГЦК-кристалу, L^v — коефіцієнт концентраційного стиснення (або ж розширення) його ґратниці через наявність вакансій; $K = (C_{11} + 2C_{12})/3$ — модуль всебічного стиску, $\xi = (C_{11} - C_{12} - 2C_{44})/C_{44}$ — параметер анізотропії пружності, C_{11} , C_{12} , C_{44} — модулі пружності [12, 14]; $\tilde{X}(\mathbf{n}) = n_x^2 n_y^2 + n_y^2 n_z^2 + n_z^2 n_x^2$, $\tilde{Y}(\mathbf{n}) = n_x^2 n_y^2 n_z^2$, $\tilde{D}(\mathbf{n}) = C_{11} + \xi(C_{11} + C_{12})\tilde{X}(\mathbf{n}) + \xi^2(C_{11} + 2C_{12} + C_{44})\tilde{Y}(\mathbf{n})$ [9–12]. (Формулу для коефіцієнта $B^{vv}(\mathbf{n})$ див. в [11].)

На рисунку 4 представлено розрахунок дисперсійних кривих для Фур'є-компоненти $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$ енергій «деформаційної» $v-v$ -взаємодії уздовж усіх високосиметрійних напрямків в оберненому просторі за даними про модулі пружності [14], фононні частоти [15] й енергію когезії [16] для ГЦК-Ni (із значенням $L^v = -0,073$, якого було оцінено в роботі [17] за експериментальними даними). Для реалістичних значень C_{11} , C_{12} , C_{44} і ξ Фур'є-компонента $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$ має найменше граничне значення при $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ з напрямку [100] (або [010] чи [001]) всередині першої BZ (рис. 5) для ГЦК-ґратниці:

$$\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}_{\parallel X\Gamma} \rightarrow \mathbf{0}) \cong -\frac{9K^2\nu_0(L^v)^2}{C_{11}} + B^{vv}(\mathbf{n}_{\parallel X\Gamma})k^2 + Q^{vv};$$

$B^{vv}(\mathbf{n}_{\parallel X\Gamma}) \cong \frac{9K^2 a_0^4 (L^v)^2 M \omega_{LX}^2}{256 C_{11}^2}$ [11], ω_{LX} — температурозалежна (як і a_0 , C_{11} , C_{12} , C_{44}) частота поздовжньо поляризованого фонона у точці високої симетрії X(100) на поверхні BZ [15], M — маса атома ГЦК-

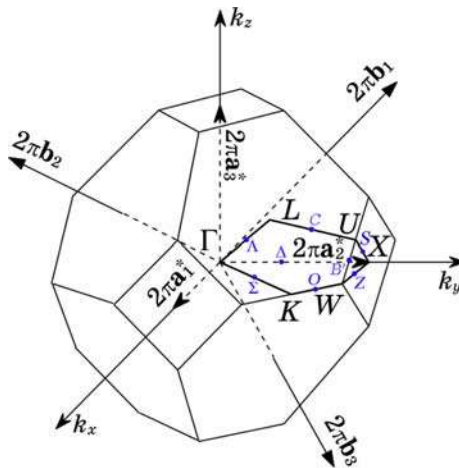


Рис. 5. Перша BZ оберненого простору для ГЦК-ґратниці.

кристалу.

Зазначимо, що в (квази)гармонічному наближенні методи статистики ґратниці Мацубари–Канзакі–Кривоглаза величина Q^{vv} за Хачатуряном визначається наступним виразом [9, 12]:

$$Q^{vv} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{s=1}^3 \frac{\left| \left(\mathbf{e}_s^*(\mathbf{k}) \cdot \tilde{\mathbf{F}}^v(\mathbf{k}) \right) \right|^2}{M \omega_s^2(\mathbf{k})}, \quad (17)$$

де $\tilde{\mathbf{F}}^v(\mathbf{k})$ — Фур’є-компонента вектора фіктивної сили (Канзакі) $\mathbf{F}^v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, яка діє на атом кристалу в деякому вузлі \mathbf{r} з боку вакансії з радіус-вектором \mathbf{r}' . У виразі (17) враховано внески від усіх акустичних ($s = 1, 2, 3$) мод власних коливань (з частотами $\omega_s(\mathbf{k})$) і векторами поляризації $\mathbf{e}_s(\mathbf{k})$ ГЦК-кристалу, який складається з N вузлів та атомів (масою M кожний) у переважній більшості з них. Символи \dots^* і (\dots) означають комплексне спряження та скалярний добуток векторів відповідно. Величини $\mathbf{F}^v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ можуть бути розраховані в рамках того або іншого моделю [9], зокрема, на підставі експериментальних даних про C_{11}, C_{12} , а також L^v .

За (грубим) розрахунком величини Q^{vv} , виконаним у довгохвильовому наближенні [9, 12], її виражено аналітично тільки через макроскопічні характеристики (модулі пружності і коефіцієнт концентраційної ділятації). У роботі [12] нехтували просторовою дисперсією коливань кристалу (власне нелінійностями в залежностях $\omega_s(\mathbf{k})$) і Фур’є-компонент сил міжатомової взаємодії $\tilde{\mathbf{F}}^v(\mathbf{k})$, тобто екстраполювали на всю першу BZ асимптотичні залежності [9, 12] $\omega_s(\mathbf{k}) \approx u_s(\mathbf{n})|\mathbf{k}|$ та $\tilde{F}_i^v(\mathbf{k}) \approx -i v_0 \sigma_{ij}^v k_j$, які є слухними тільки за малих $|\mathbf{k}|$ (тобто при $ka_0 \ll 1$). Тут $u_s(\mathbf{n})$ — швидкість звуку в s -й акустичній гілці у напрямку вектора \mathbf{k} , а компоненти симетричного тензора силових диполів визначаються формулою [9, 12]

$$\sigma_{ij}^v \equiv v_0^{-1} \sum_{\mathbf{r}} F_i^v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \{r_j - r_j'\},$$

і для ГЦК-кристалу пов’язані з $L_{ij}^v = L^v \delta_{ij}$ ($i, j = x, y, z$; δ_{ij} — Кронекерів символ) співвідношенням:

$$\sigma_{ij}^v = (C_{11} + 2C_{12})L_{ij}^v.$$

Тоді, у термінах наступних позначень [9, 12]:

$$\Omega_{xx}(\mathbf{n}) = \frac{C_{11} - (C_{11} - C_{44})n_x^2 + \xi(C_{11} + C_{12})n_y^2 n_z^2}{C_{44} \mathcal{D}(\mathbf{n})},$$

$$\Omega_{xy}(\mathbf{n}) = - \frac{(C_{12} + C_{44})(1 + \xi n_z^2)n_y^2 n_x^2}{C_{44} \mathcal{D}(\mathbf{n})}$$

(а інші компоненти тензора $\{\Omega_{ij}\}$ визначаються циклічною перестановкою індексів x, y, z),

$$Q^{vv} \approx \frac{v_0}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_i \sigma_{ij}^v \Omega_{jl}(\mathbf{n}) \sigma_{lm}^v n_m \xrightarrow{N \gg 1} \frac{v_0^2}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} d^3 k n_i \sigma_{ij}^v \Omega_{jl}(\mathbf{n}) \sigma_{lm}^v n_m$$

і власне для ГЦК-кристалу

$$Q^{vv} \cong \frac{\sigma^2 v_0^2}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} \frac{(1 + 2\xi \tilde{X}(\mathbf{n}) + 3\xi^2 \tilde{Y}(\mathbf{n}))}{D(\mathbf{n})} d^3 k. \quad (18)$$

Інтегрування в (18) можна виконати двома способами [12].

Перша метода полягає в заміні першої BZ рівновеликим шаром і апроксимації підінтегрального виразу лінійним за $\tilde{X}(\mathbf{n})$ й $\tilde{Y}(\mathbf{n})$ поліномом у довільному напрямку $\mathbf{n} = (n_x; n_y; n_z)$ оберненого простору ГЦК-ґратниці за тих умов, щоб його значення збігалися зі значеннями відповідного підінтегрального виразу у певних напрямках високі симетрії: $\mathbf{n} = (1; 0; 0)$, $\mathbf{n} = (1/\sqrt{2}; 1/\sqrt{2}; 0)$, $\mathbf{n} = (1/\sqrt{3}; 1/\sqrt{3}; 1/\sqrt{3})$ [12]. Тоді для наближеного виразу (18) матимемо апроксимацію [12]:

$$Q^{vv} \cong 9K^2 v_0 (L^v)^2 (\zeta_1 + \zeta_2/5 + \zeta_3/105),$$

$$\zeta_1 = \frac{1}{C_{11}}, \quad \zeta_2 = \frac{C_{44} \xi}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})},$$

$$\zeta_3 = \frac{18C_{44}^2 \xi^2}{C_{11}(C_{11} + C_{12} + 2C_{44})(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})}.$$

Друга метода інтегрування (підсумовування) у виразі (17) ґрунтується на методі підсумовування по так званих спеціальних точках «головного» значення у першій BZ [12, 13]. За цією методою, що не підмінює (спотворюючи) BZ ,

$$\frac{v_0}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} \tilde{f}(\mathbf{k}) d^3 k \cong \sum_{\mu=1}^{\aleph} \gamma_{\mu} \tilde{f}(\mathbf{k}_{\mu})$$

для гладкої періодичної функції $\tilde{f}(\mathbf{k})$ хвильового вектору \mathbf{k} (з періодами $2\pi\mathbf{b}$, де \mathbf{b} — будь-який вектор оберненої ґратниці). Тут \mathbf{k}_{μ} — спеціальна точка «головного» значення (з ваговим множником γ_{μ}) в

BZ ($\mu = 1, \dots, \aleph$); $\sum_{\mu=1}^{\aleph} \gamma_{\mu} = 1$. (Деякі набори таких точок наведено в [18,

19].) У роботі [12] використовували одну точку «головного» значення, що відповідає так званій точці Балдереші [19] у BZ для ГЦК-ґратниці:

$$Q^{vv} \cong \frac{9K^2 v_0 (L^v)^2 (1 + 2\xi \tilde{X}(\mathbf{n}_B) + 3\xi^2 \tilde{Y}(\mathbf{n}_B))}{D(\mathbf{n}_B)},$$

де $\mathbf{n}_B = \mathbf{k}_B / |\mathbf{k}_B|$, $\mathbf{k}_B \approx (2\pi/a_0)(0,6223; 0,2953; 0)$ [19] (зазвичай вона забезпечує результат інтегрування з похибкою, що не перевищує декількох відсотків).

У формулі (16) $\tilde{\Phi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k})$ — Фур'є-компонента енергій (прямої) «електрохімічної» $v-v$ -взаємодії. Дисперсійні криві для

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k}) \cong & 4\varphi^{vv}(r_I) \left[\cos\left(\frac{a_0}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{a_0}{2}k_y\right) + \cos\left(\frac{a_0}{2}k_y\right)\cos\left(\frac{a_0}{2}k_z\right) + \right. \\ & \left. + \cos\left(\frac{a_0}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{a_0}{2}k_z\right) \right] + 2\varphi^{vv}(r_{II}) \left[\cos(a_0k_x) + \cos(a_0k_y) + \cos(a_0k_z) \right] + \\ & + 8\varphi^{vv}(r_{III}) \left[\cos\left(\frac{a_0}{2}k_x\right)\cos\left(\frac{a_0}{2}k_y\right)\cos(a_0k_z) + \cos\left(\frac{a_0}{2}k_y\right)\cos\left(\frac{a_0}{2}k_z\right)\cos(a_0k_x) + \right. \\ & \left. + \cos\left(\frac{a_0}{2}k_z\right)\cos\left(\frac{a_0}{2}k_x\right)\cos(a_0k_y) \right] + 4\varphi^{vv}(r_{IV}) \left[\cos(a_0k_x)\cos(a_0k_y) + \right. \\ & \left. + \cos(a_0k_y)\cos(a_0k_z) + \cos(a_0k_x)\cos(a_0k_z) \right] + 4\varphi^{vv}(r_V) \times \\ & \times \left[\cos(a_0(k_x + k_y))\cos\left(\frac{a_0}{2}(k_x - k_y)\right) + \cos(a_0(k_x + k_z))\cos\left(\frac{a_0}{2}(k_x - k_z)\right) + \right. \\ & \left. + \cos(a_0(k_y + k_z))\cos\left(\frac{a_0}{2}(k_y - k_z)\right) + \cos(a_0(k_x - k_z))\cos\left(\frac{a_0}{2}(k_x + k_z)\right) + \right. \\ & \left. + \cos(a_0(k_x - k_y))\cos\left(\frac{a_0}{2}(k_x + k_y)\right) + \cos(a_0(k_y - k_z))\cos\left(\frac{a_0}{2}(k_y + k_z)\right) \right] + \\ & + 8\varphi^{vv}(r_{VI}) \cos(a_0k_x)\cos(a_0k_y)\cos(a_0k_z) + \dots \end{aligned}$$

уздовж усіх високосиметрійних напрямків всередині першої BZ представлено на рис. 6; $\varphi^{vv}(r_I), \varphi^{vv}(r_{II}), \dots, \varphi^{vv}(r_{VI}), \dots$ — значення енергій ефективно ізотропної «електрохімічної» $v-v$ -взаємодії в справжніх першій, другій, ..., шостій, ... вузлових координаційних сферах.

В підході, розробленому авторами [20–25] для прямої (в основному когезійної за природою) «електрохімічної» взаємодії вакансій у кубічному кристалі (для якого взагалі-то й $\tilde{\Phi}_{\text{el.chem}}^{vv}(-\mathbf{k}) = \tilde{\Phi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k})$), у довгохвильовому наближенні [9, 26] в околі $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ маємо наступне розвинення в Тейлорів ряд за степенями k^2 [26]:

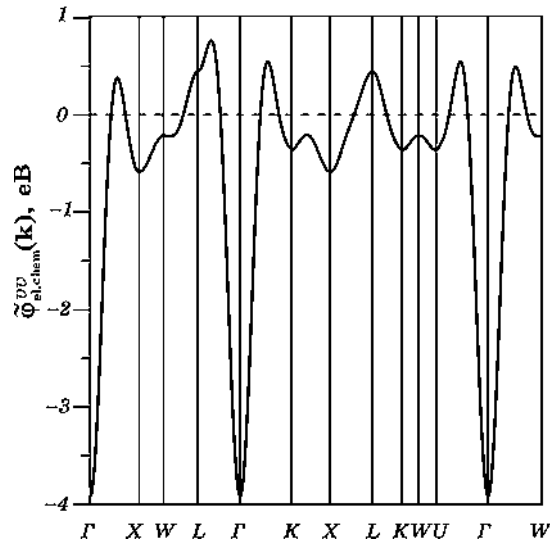


Рис. 6. Дисперсійні криві для Фур'є-компоненти енергій «електрохімічної» взаємодії вакансій уздовж усіх високосиметрійних напрямків у оберненому просторі, яких побудовано з використанням Маклінового потенціалу [16] для кристалу ГЦК-Ni (тобто за енергії когезії у $-4,45$ еВ/атом [27, 28]) при $T = 300$ К з врахуванням лише шістьох координаційних сфер по вузлах.

$$\tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k}) \cong \tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{0}) + \gamma_0^{vv} k^2 + \dots,$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{0}) &= \sum_{\mathbf{r} \in \{r_I, r_{II}, \dots\}} \varphi_{\text{el.chem}}^{vv}(|\mathbf{r}|) \approx \\ &\approx 12\varphi^{vv}(r_I) + 6\varphi^{vv}(r_{II}) + 24\varphi^{vv}(r_{III}) + 12\varphi^{vv}(r_{IV}) + 24\varphi^{vv}(r_V) + 8\varphi^{vv}(r_{VI}) + \dots, \\ \gamma_0^{vv} &= -\frac{1}{6} \sum_{\mathbf{r} \in \{r_I, r_{II}, \dots\}} |\mathbf{r}|^2 \varphi_{\text{el.chem}}^{vv}(|\mathbf{r}|) \approx \\ &\approx -a_0^2 \{\varphi^{vv}(r_I) + \varphi^{vv}(r_{II}) + 6\varphi^{vv}(r_{III}) + 4\varphi^{vv}(r_{IV}) + 10\varphi^{vv}(r_V) + 4\varphi^{vv}(r_{VI}) + \dots\}. \end{aligned}$$

На рисунку 7 зображено залежність центральносиметричного потенціалу $\varphi_{\text{el.chem}}^{vv}(|\mathbf{r}|)$ такої «електрохімічної» взаємодії $v-v$ у ГЦК-кристалі від зведеної міжвакансійної віддалі r/a із врахуванням взаємодії у справжніх 28-х координаційних сферах по вузлах.

Для вузлів ГЦК-ґратниці помічено просту залежність між номером координаційної сфери та її радіусом у формі [29–32]:

$$R_n = r_I(N_{(n)})^{1/2} = a(2N_{(n)})^{1/2}/2,$$

яка, на жаль, порушується (через специфічне «зняття кристалог-

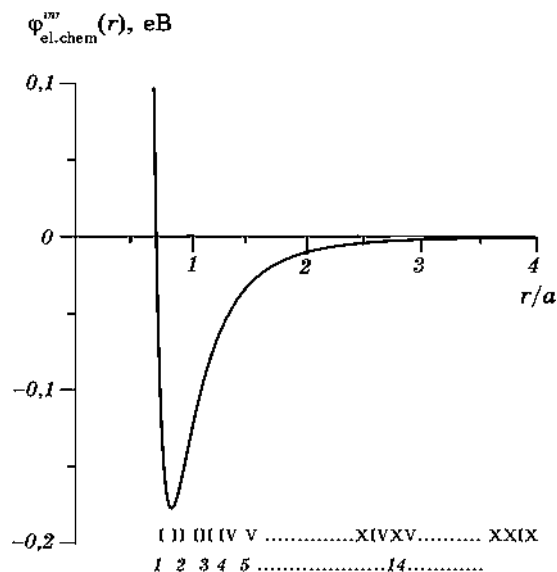


Рис. 7. Залежність енергії «електрохімічної» $v-v$ -взаємодії у кристалі ГЦК-Ni (за Макліновим потенціалом [16]) з енергією когезії у $-4,45$ еВ/атом [27, 28]) від зведеної віддалі $r(300\text{ K})/a(300\text{ K})$ між вакансіями у вузлах.

рафічного вирождення») на XIV-й, XXX-й, ... сферах. Дійсно, для тривимірної ГЦК-ґратниці номер справжньої координаційної сфери та її радіус визначаються сукупністю Міллерових індексів («координат») $\{h_n k_n l_n\}$:

$$2N_{(n)} = h_n^2 + k_n^2 + l_n^2, \quad 2R_n/a = \sqrt{h_n^2 + k_n^2 + l_n^2},$$

і зрозуміло, що номери XIV, XXX, ... не складаються з трійки квадратів цілих чисел $\{h_n k_n l_n\}$. Такі номери відповідають, згідно з [30–32], так званим «нульовим» координаційним сферам, тобто сферам, на яких вузли ГЦК-ґратниці не розташовуються (їхні координаційні числа є нульовими).

Видно, що модулі енергій «електрохімічної» $v-v$ -взаємодії зменшуються зі збільшенням віддалі r_n (монотонно для $n \geq II$; рис. 7). Саме достатньо різким спаданням абсолютних величин $|\phi_{el.chem}^{vv}(\mathbf{r})|$ зі збільшенням віддалі між вакантними вузлами (тобто «короткосяжним» характером «електрохімічної» взаємодії $v-v$) забезпечується аналітичність функції $\tilde{\phi}_{el.chem}^{vv}(\mathbf{k})$ в околі $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ (рис. 6), тоді як енергія (непрямої) «деформаційної» (чи то пружної за природою) $v-v$ -взаємодії має істотно далекосяжніший (та й анізотропний і «квазиосцилівний») характер [11, 26], що спричиняє неаналітичність (розрив першого роду) функції $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k})$ в точці $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ (див., зокрема, [13]):

$$\lim_{\mathbf{k} \rightarrow 0} \tilde{V}^{vv}(\mathbf{k}) \neq \tilde{V}^{vv}(\mathbf{0}).$$

Але, незважаючи на далекосяжність «деформаційної» взаємодії між вакансіями, абсолютні значення її енергій є значно меншими, аніж модулі енергій «електрохімічної» взаємодії [6, 11, 26] вакансій на невеликих відстанях, і тому найістотнішим внеском в енергію міжвакансійної взаємодії в ГЦК-Ni є енергія саме їхньої «електрохімічної» взаємодії.

Однак, слід зазначити, що в околі $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ Фур'є-компонента енергій (прямої) «електрохімічної» $v-v$ -взаємодії не залежить від напрямку \mathbf{n} , і тому розрахунки дисперсійних кривих Фур'є-компонент енергій «деформаційної» $v-v$ -взаємодії є також важливим, оскільки з їх аналізу (за рис. 4) можна дізнатися, саме в якому напрямку можуть утворитися концентраційні вакансійні хвилі.

На рисунку 8 представлено температурні залежності Фур'є-компонент $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}, T)$ енергій «деформаційної» $v-v$ -взаємодії з різних напрямків \mathbf{n} : зі збільшенням температури абсолютні значення Фур'є-компонент енергій «деформаційної» $v-v$ -взаємодії зростають.

Через те, що Маклінів потенціал $\phi^{\text{NiNi}}(r) = -A_{\text{NiNi}}r^{-4} + B_{\text{NiNi}}r^{-8}$ для $T > 0$ К (але в термінах параметра a_0 ГЦК-ґратниці кристалу ніклю

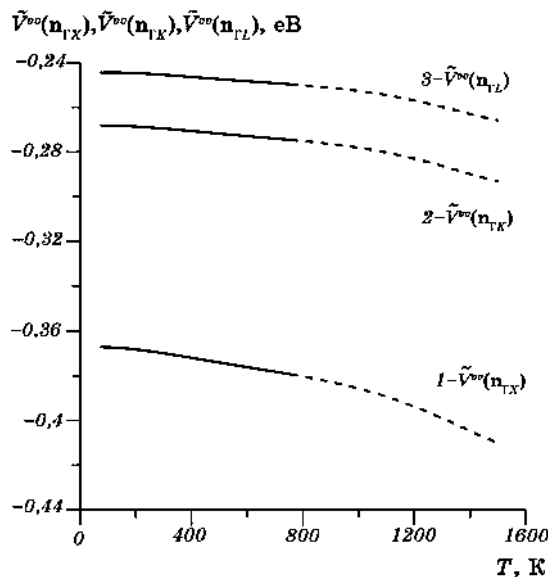


Рис. 8. Температурні залежності Фур'є-компонент енергій «деформаційної» $v-v$ -взаємодії $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0})$ з різних основних напрямків симетрії в оберненому просторі: 1 — $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{n}_{GX})$, 2 — $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{n}_{GK})$, 3 — $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{n}_{GL})$. (Пунктиром позначено залежності $\tilde{V}^{vv}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}, T)$, яких одержано екстраполяцією кривих, побудованих на основі відомих експериментальних даних про модулі пружності [14] та коефіцієнт термічного розширення [33, 34] ГЦК-Ni.)

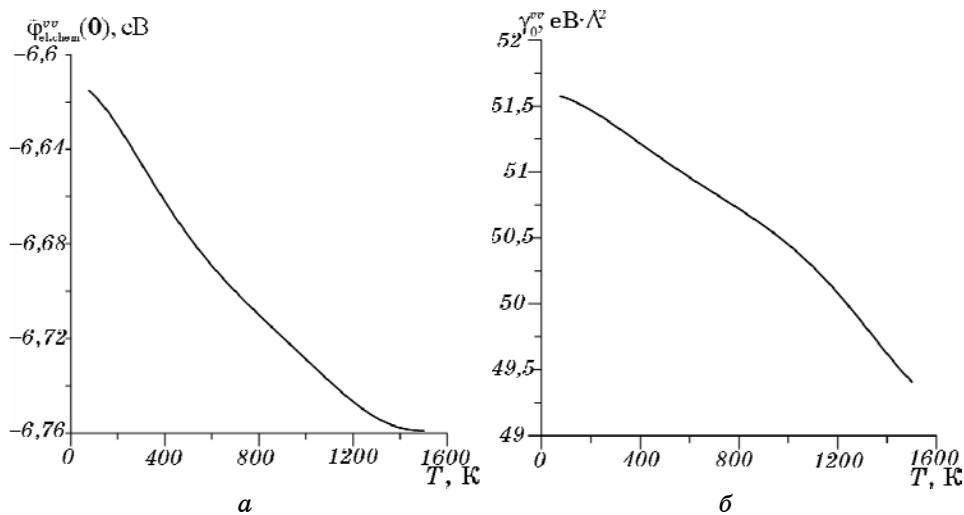


Рис. 9. Температурні залежності (з урахуванням ν - ν -взаємодії у справжніх 28-х координаційних сферах): (а) Фур'є-компоненти енергій (прямої) «електрохімічної» взаємодії вакансій $\tilde{\Phi}_{el.chem}^{vv}(\mathbf{0})$, (б) коефіцієнта просторової дисперсії Фур'є-компоненти енергій «електрохімічної» ν - ν -взаємодії γ_0^{vv} .

при $T = 0$ К, енергії його когезії ϵ_0 і ґратницевих сум $S_4 \approx 25,338$, $S_8 \approx 12,80193$ [16], за якими $A_{NiNi} = -\epsilon^0 a_0^4 S_4^{-1}$, $B_{NiNi} = -\epsilon^0 a_0^8 S_8^{-1}/8$) [9, 16, 25] все ж таки простягається значно за межі першої вузлової координаційної сфери (з радіусом $r_1 = a/\sqrt{2}$) (рис. 7), стається істотне переладнання відповідної залежності $\tilde{\Phi}_{el.chem}^{vv}(\mathbf{k}) \approx \tilde{\Phi}^{NiNi}(\mathbf{k})$, що робить її (хоча б локально) екстремальною не лише в точках високої симетрії на поверхні, але й усередині першої BZ (рис. 6). Гіпотетично таке відповідає урізноманітненню довгохвильових (модульованих) структур у просторовому розподілі вакансійної підсистеми, які могли б утворитися в ГЦК-кристалі за сприятливих умов. На рисунку 9 представлено температурні залежності Фур'є-компоненти енергій «електрохімічної» ν - ν -взаємодії $\tilde{\Phi}_{el.chem}^{vv}(\mathbf{0})$ при $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ та коефіцієнта просторової дисперсії γ_0^{vv} відповідно.

7. ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИСИПАТИВНИХ МОДУЛЬОВАНИХ СТРУКТУР ВАКАНСІЙНОЇ ПІДСИСТЕМИ ЗА ВІДСУТНОСТІ ФЛЮКТУАЦІЙ ШВИДКОСТІ ГЕНЕРАЦІЇ ДЕФЕКТІВ І НЕОДНОРІДНОСТІ ОПРОМІНЕНОГО ГЦК-КРИСТАЛУ

В даній роботі оцінки виконувалися, насамперед, за наступних значень параметрів для кристалу ГЦК-Ni з вакансіями та їхніми (дислокаційними) стоками: $z_d = 1$, $\rho_{od} \approx 5 \cdot 10^{-8} \text{ \AA}^{-2}$ [8, 35, 36] і, відповідно, наприклад, при 1500 К $\tau \approx 1,33 \cdot 10^{-4}$ с; енергію активації міграції та

передекспоненційний множник у Арреніусовій формулі для коефіцієнта дифузії вакансій D_v покладали рівними 1,3 еВ і $3,5 \cdot 10^{15} \text{ \AA}^2/\text{с}$ [8, 35] відповідно. Експериментальні дані стосовно модулів пружності ГЦК-Ni $C_{11}(T)$, $C_{12}(T)$, $C_{44}(T)$ та умотивована оцінка коефіцієнта концентраційної ділятації L^v через вакансії бралися з праць [14] і [17] відповідно. $\tilde{\phi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{0})$, γ_0^{vv} оцінювалися з використанням зазначеного міжатомового потенціалу для ГЦК-Ni [16].

Прогнозовану температурну залежність періоду дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми, яка мала б виникати першою в якості неоднорідного розв'язку (15) рівняння (10), представлено на рис. 10.

У виразах для критичного значення хвильового вектора концентраційної вакансійної хвилі і відповідного періоду дисипативної модульованої структури підсистеми вакансій у ГЦК-Ni основний внесок у визначальному енергетичному параметрі $\tilde{W}_{0n}^{vv} = \lim_{k \rightarrow 0} |\tilde{W}^{vv}(k\mathbf{n})|$ має енергія «електрохімічної» взаємодії $v-v$; тому саме вона визначатиме й температурну залежність зазначеного періоду. Але слід зазначити, що температурна залежність періоду дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми визначається не тільки і не стільки температурною залежністю $\tilde{\phi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{0})$, скільки коефіцієнтом γ_0^{vv} просторової дисперсії $\tilde{\phi}_{\text{el.chem}}^{vv}(\mathbf{k})$.

Енергія «електрохімічної» $v-v$ -взаємодії має немонотонний характер (рис. 7) як функція зведеної віддалі r_n/a_0 між вакансіями на ву-

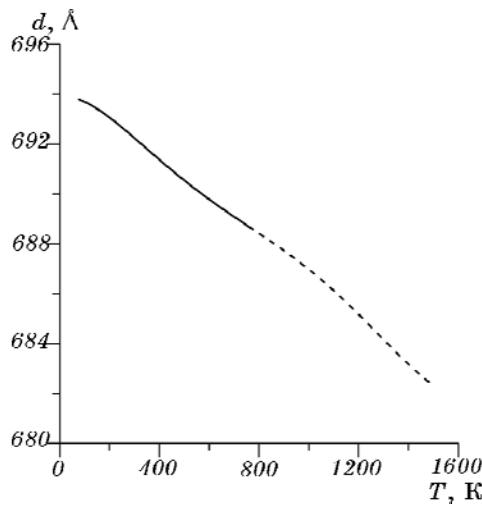


Рис. 10. Температурна залежність періоду дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми в ГЦК-Ni з фіксованою густиною дислокацій $\rho_{\text{od}} \cong 5 \cdot 10^{-8} \text{ \AA}^{-2}$ [36]. (Щодо пунктиру див. пояснення до рис. 8.)

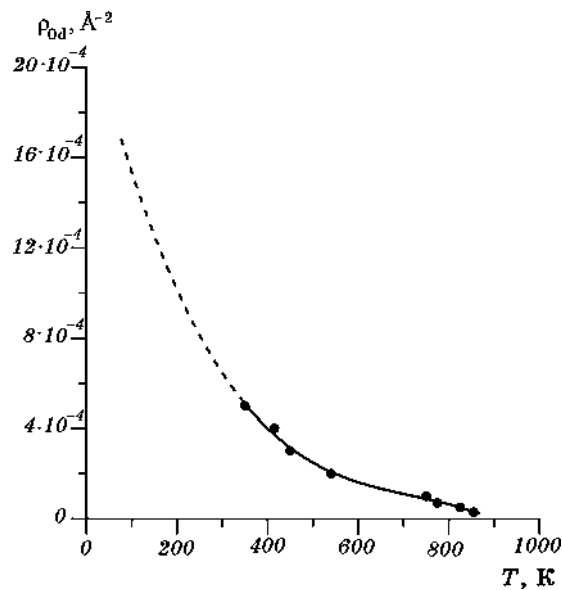


Рис. 11. Залежність густини дислокацій $\rho_{0d}(T)$ від температури відпалу для порошкового полікристалу Ni, який був одержаний в результаті помелу кульовим млином [37]. (Пунктиром на рисунку відмічено залежність, яку одержано екстраполяцією кривої $\rho_{0d}(T)$, що побудовано на основі наявних експериментальних даних про густину дислокацій.)

злах ГЦК-Ni. Через зростання абсолютного значення енергії «електрохімічної» $v-v$ -взаємодії саме на першій координаційній сфері з підвищенням температури, що не компенсується у величині $\bar{W}_{0[100]}^{vv}$ спаданням модулів таких енергій на наступних сферах, період дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми може трохи зменшуватися (на $< 2\%$) з підвищенням температури (рис. 10) в умовах сталості густини дислокацій (утворення дисипативних модульованих структур вакансійної підсистеми полегшується).

Період (в тому числі й наномасштабний) дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми залежить від густини дислокацій. З ростом температури густина дислокацій зменшується [37–40]. Експериментальні дані (за різних умов оброблення) щодо таких залежностей та їх апроксимацій представлено на рис. 11–13:

$$\rho_{0d} \cong \rho_{350\text{ K}} + \rho_1(T - 350\text{ K}) + \rho_2(T - 350\text{ K})^2 + \rho_3(T - 350\text{ K})^3, \quad (19)$$

де $\rho_{350\text{ K}} \cong 5 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}^{-2}$, $\rho_1 \cong -2,44 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$, $\rho_2 \cong 5,43 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{K}^{-2}$, $\rho_3 \cong -4,89 \cdot 10^{-12} \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{K}^{-3}$ (рис. 11);

$$\rho_{0d} \cong \rho_{20\text{ K}} + \rho_1(T - 20\text{ K}), \quad (20)$$

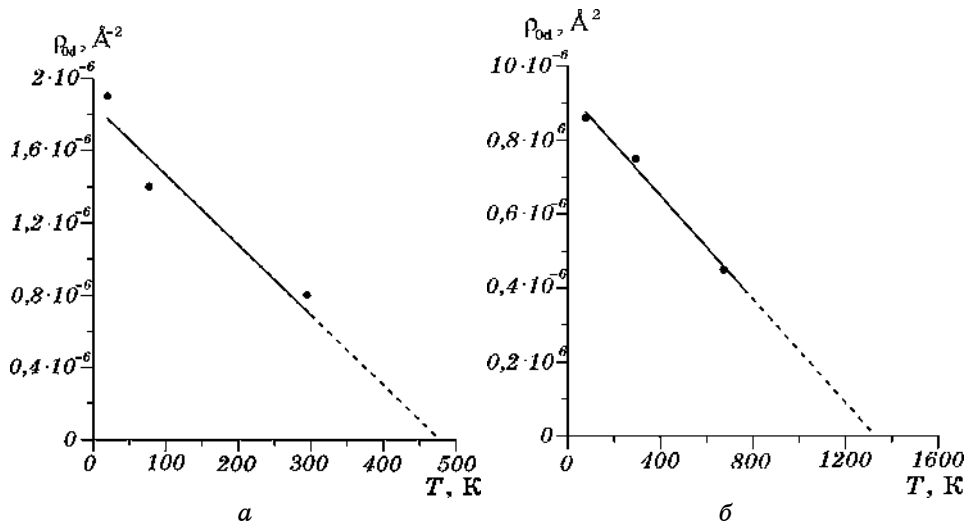


Рис. 12. Температурна залежність густини дислокацій $\rho_{od}(T)$ для ГЦК-монокристалу нікелю: (а) якого було попередньо відпалено при $T = 823$ К впродовж 6 годин, а потім деформовано прокаткою зі ступенем обтиснення у 6% паралельно площині (110) в напрямку $[1\bar{1}2]$ [38]; (б) при мінімальних ступенях деформації шляхом стиснення [39] з орієнтацією вісі стиску $[001]$. (Щодо пунктиру див. пояснення до рис. 11.)

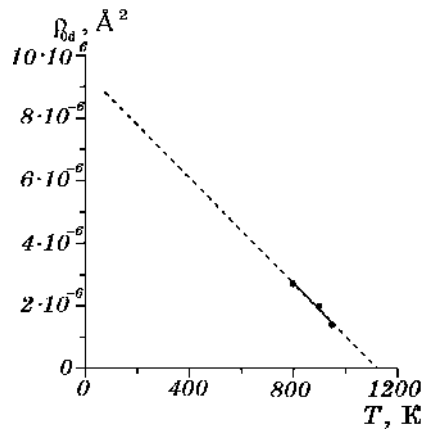


Рис. 13. Залежність густини дислокацій $\rho_{od}(T)$ від температури для нікелю у випадку опромінення високоенергетичними йонами Ni^+ [41]. (Щодо пунктиру див. пояснення до рис. 11.)

де $\rho_{20\text{ К}} \cong 1,77 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$, $\rho_1 \cong -3,88 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$ (рис. 12, а);

$$\rho_{od} \cong \rho_{77\text{ К}} + \rho_1(T - 77\text{ К}), \quad (21)$$

де $\rho_{77\text{ К}} \cong 0,87 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$, $\rho_1 \cong -6,995 \cdot 10^{-10} \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$ (рис. 12, б);

$$\rho_{0d} \cong \rho_{798\text{ К}} + \rho_1(T - 798 \text{ К}), \quad (22)$$

де $\rho_{798\text{ К}} \cong 2,73 \cdot 10^{-6} \text{ \AA}^{-2}$, $\rho_1 \cong -8,43 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$ (рис. 13).

Значення густини дислокацій при мінімальних ступенях стиску є нижчими для монокристалу, якого деформовано за високих температур (рис. 12, б) [39]. Згідно з припущенням авторів [39, 40], зі зростанням температури збільшується рухливість дислокацій і частота елементарних актів руху дислокацій. В результаті цього віддаль, на яку можуть переміщатися дислокації, збільшується, і зростає швидкість анігіляції дислокацій як величина, що пропорційна частоті їх зустрічей [39]. Це й призводить до того, що процеси анігіляції помітно посилюються, а густина дислокацій зменшується [39].

Врахування такої температурної залежності густини дислокацій спричинює істотну перебудову зміни (наномасштабного) періоду дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми з температурою (рис. 14–16).

Так, зменшення густини дислокацій $\rho_{0d}(T)$ з підвищенням температури перешкоджає утворенню (просторово впорядкованої) дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми, що проявляється у збільшенні періоду модуляції (рис. 14–16), тобто ентропійному «розмоктуванні» порядку. І, навпаки, при збільшенні гус-

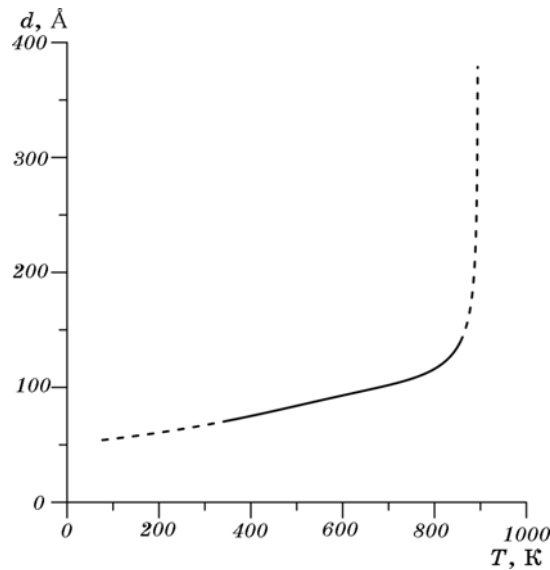


Рис. 14. Температурна залежність періоду дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми з апроксимацією густини дислокацій $\rho_{0d}(T)$ за виразом (19). (Щодо пунктиру див. пояснення до рис. 11.)

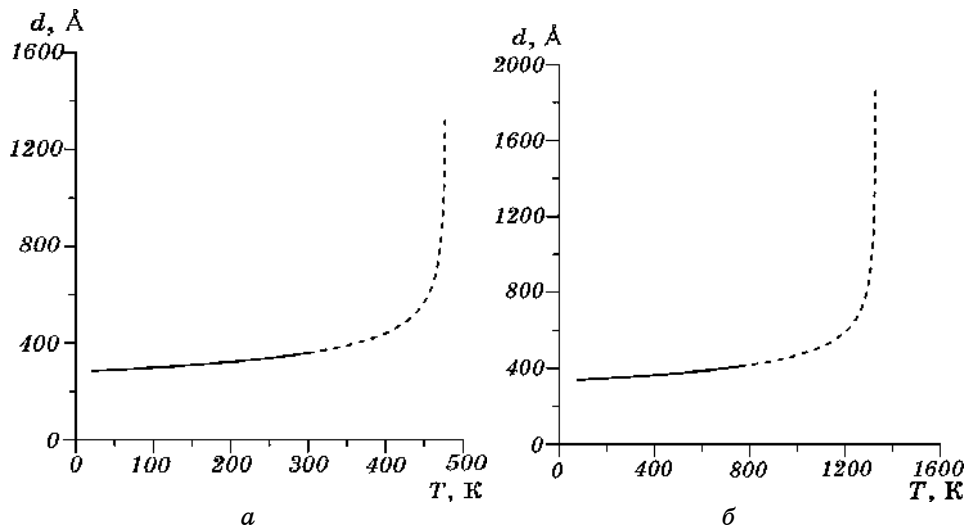


Рис. 15. Температурна залежність періоду дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми з апроксимацією густини дислокацій $\rho_{od}(T)$ за виразами (20) (а) і (21) (б). (Щодо пунктиру див. пояснення до рис. 11.)

тини дислокацій від 10^{-6} \AA^{-2} до 10^{-4} \AA^{-2} (наномасштабний) період дисипативної модульованої структури підсистеми вакансій зменшується від 10^3 \AA до 10^2 \AA (рис. 14–16).

Період дисипативної модульованої структури вакансійної підси-

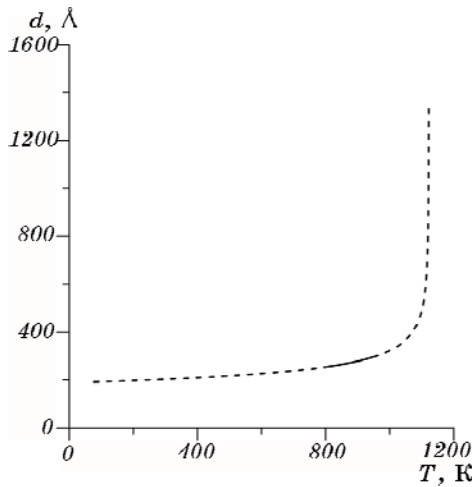


Рис. 16. Температурна залежність періоду дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми з апроксимацією густини дислокацій $\rho_{od}(T)$ за виразом (22). (Щодо пунктиру див. пояснення до рис. 11.)

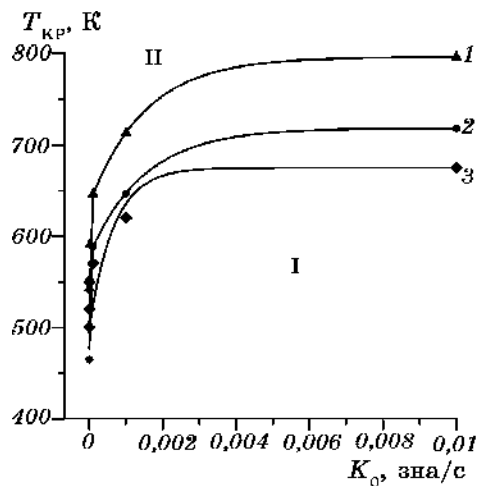


Рис. 17. Области (не)стійкості однорідного розподілу вакансій у ГЦК-кристалі по відношенню до неоднорідних збурень в координатах швидкості дефектоутворення (K_0) та критичної температури ($T_{кр}$): I — область нестійкості, II — стійкості. В даній роботі розділову криву 1 обраховано з коефіцієнтом дифузії вакансій $D_v = 3,5 \cdot 10^{13} \exp\{-1,3 \text{ eV}/(k_B T)\} [\text{Å}^2/\text{с}]$ [35] за густиною дислокацій $\rho_{од} \cong 5 \cdot 10^{-8} \text{ Å}^{-2}$, 2 — з апроксимацією (21) для густини дислокацій; розділову криву 3 наведено за даними роботи [42] для порівняння.

стеми також залежить від швидкості генерації дефектів K_0 .

Зі збільшенням швидкості генерації дефектів типу вакансій температурна область існування (скінченного) періоду $d(T)$ розширюється. Дисипативна модульована структура підсистеми вакансій стає можливою при $T < T_{кр} = 360\text{--}820 \text{ К}$ в залежності від швидкості генерації дефектів ($K_0 = 10^{-8}\text{--}10^{-2} \text{ зна/с}$), значень коефіцієнта дифузії вакансій, а також густини дислокацій (рис. 17, 18).

На рисунках 17, 18 зазначено область нестійкості однорідного розподілу вакансій у координатах критичної температури та інтенсивності опромінення ($\propto K_0$). Відповідну координатну площину розділено на дві частини кривою: в області I однорідний розподіл нестійкий, а в області II — стійкий. При інтенсивностях та температурах опромінення, які відповідають області I, в кристалі може утворюватися періодичний розподіл густини вакансійної підсистеми.

Із врахуванням спадної температурної залежності густини дислокацій область стабільності дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми трохи розширюється (рис. 18). Зменшення ж рухливості вакансій сприяє зміщенню області стабільності такої структури в координатах критичної температури ($T_{кр}$) та швидкості дефектоутворення (K_0) в сторону вищих температур (рис. 18).

Зазначимо, що криві на рис. 17, 18 визначають лише порядок величин порогових значень $K_0(T_{кр})$ утворення нестійкості. Значення

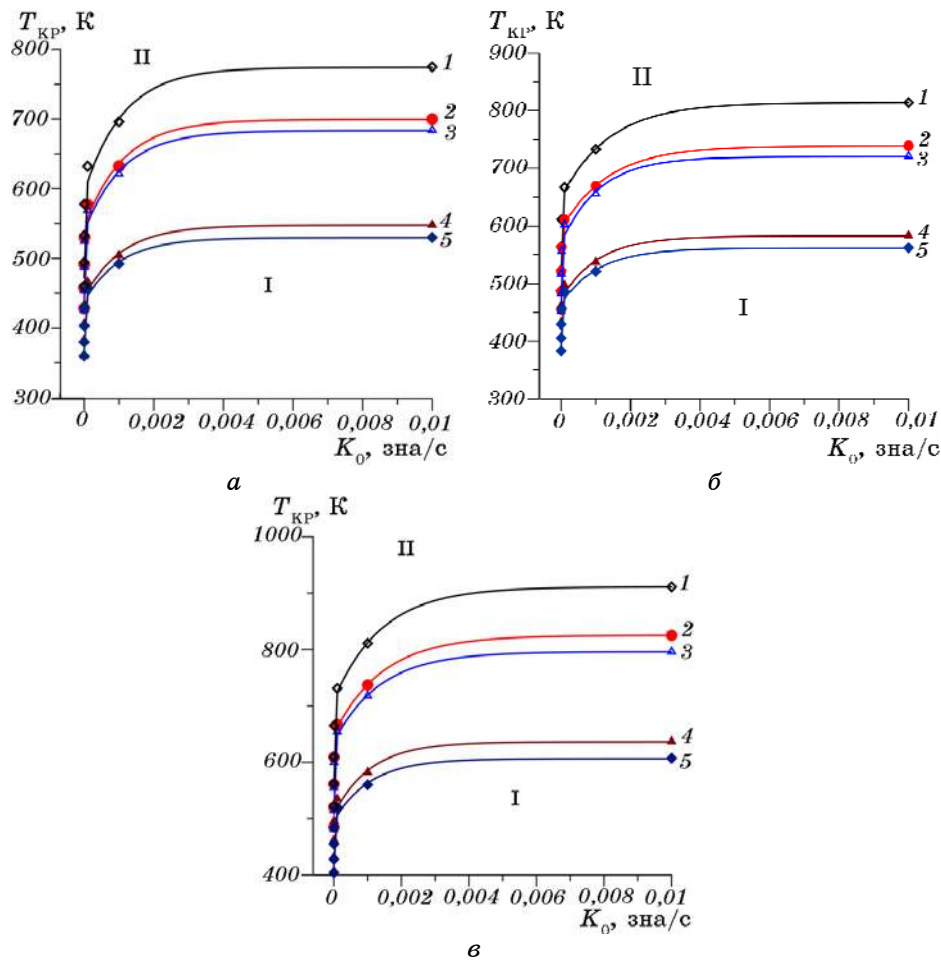


Рис. 18. Области (не)стійкості однорідного розподілу вакансій у ГЦК-кристалі по відношенню до неоднорідних збурень залежно від швидкості генерації точкових дефектів опроміненням та критичної температури: I — область нестійкості, II — область стійкості. Розділові криві обраховано за різними коефіцієнтами дифузії вакансій: (а) $D_v = 6 \cdot 10^{15} \exp\{-1,3 \text{ eV}/(k_B T)\}$ [$\text{\AA}^2/\text{с}$] [43], (б) $D_v = 9,2 \cdot 10^{15} \exp\{-1,4 \text{ eV}/(k_B T)\}$ [$\text{\AA}^2/\text{с}$] [44], (в) $D_v = 1 \cdot 10^{15} \times \exp\{-1,4 \text{ eV}/(k_B T)\}$ [$\text{\AA}^2/\text{с}$] [45] для випадків, коли (1) густина дислокацій $\rho_{od} \cong 5 \cdot 10^{-8} \text{\AA}^{-2}$ [36], (2) густину дислокацій апроксимовано за виразом (21), (3) густина дислокацій $\rho_{od} \cong 0,75 \cdot 10^{-6} \text{\AA}^{-2}$ [39], (4) густину дислокацій апроксимовано за виразом (19) або (5) густина дислокацій $\rho_{od} \cong 5 \cdot 10^{-4} \text{\AA}^{-2}$ [37].

критичної температури визначити складно через відсутність надійних даних про дифузійні параметри; так, є розкид до $\cong 4,3 \cdot 10^{15} \text{\AA}^2/\text{с}$ у передекспоненційному множнику коефіцієнта дифузії вакансій, а також до $\cong 0,1 \text{ eV}$ — у енергії активації їхньої міграції [35, 43–45].

Також зазначимо, що у застосованому моделі розглянуто ізотермічні умови самоорганізації дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми в ГЦК-кристалі, що опромінюється. Одержані в його рамках кількісні результати можуть бути задовільними не завжди, оскільки не враховано вплив зовнішніх флюктуацій, а саме, флюктуацій швидкості генерації точкових дефектів, які завжди присутні в реальних умовах опромінення. Але, незважаючи на це, даний модель пристойно описує явище на якісному рівні.

У випадку з нанорозмірними порами можна припустити, що енергія взаємодії їх визначається лише їхньою «пружньою» взаємодією в межах теорії пружності суцільного середовища зі сторонніми когерентними включеннями [9, 10]. У межах такого наближення розглядатимемо нанопори як скінченні сферичні мікродфекти («дірки») у пружньому континуумі з використанням результатів довгохвильової апроксимації у методі статички ґратниці, тобто з $k \cong 2\pi/d_p \ll \ll 2\pi/a_0$ [9, 10]: $\tilde{w}_n^{vv} \Rightarrow \tilde{w}_n \cong \mathcal{A}^{vv}(\mathbf{n}) + \mathcal{Q}^{vv}$, $\tilde{B}^{vv}(\mathbf{n}) \Rightarrow \tilde{B}(\mathbf{n}) \cong \mathcal{B}^{vv}(\mathbf{n})$. На рисунку 19 представлено відповідну температурну залежність періоду d_p надґратниці в розподілі нанопор, яка виникає першою в якості неоднорідності розв'язку кінетичного рівняння їх перерозподілу (зокрема, у вигляді тривимірної суперпозиції [9] взаємно проникаючих і синфазно модульованих концентраційних вакансійних хвиль у напрямках [100], [010] і [001]; рис. 3 у п. 5). Період надґратниці в розподілі нанорозмірних пор дещо збільшується з температурою (рис. 19), що побічно підтверджується висновками робіт [48–50].

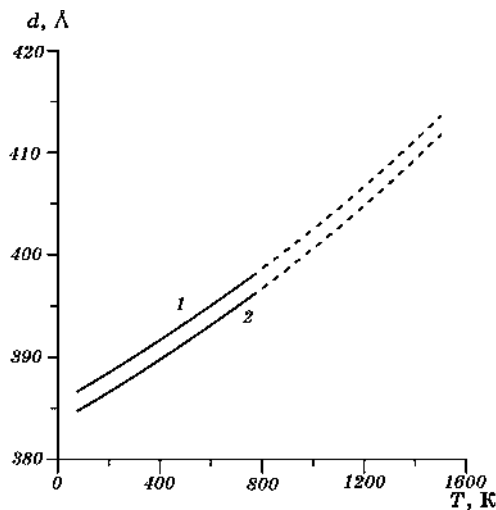


Рис. 19. Залежність періоду надґратниці в розподілі нанопор від температури для різних експериментальних оцінок коефіцієнта L^p концентраційної ділятатції ґратниці ГЦК-Ni через наявність пор: 1 — $L^p \cong 0,0146$ [46], 2 — $L^p \cong 0,0154$ [47] (якщо $\rho_{od} \cong 5 \cdot 10^{-8} \text{ \AA}^{-2}$ [36]). (Щодо пунктиру див. рис. 8.)

8. ДИСИПАТИВНІ МОДУЛЬОВАНІ СТРУКТУРИ ВАКАНСІЙНОЇ ПІДСИСТЕМИ ЗА НАЯВНОСТІ ФЛЮКТУАЦІЙ ШВИДКОСТІ ҐЕНЕРАЦІЇ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ

Одержані співвідношення для визначення n_0 (4), (5), критичних значень параметрів (9) і періоду структури, що виникає, є нелінійними та залежать від інтегральних властивостей потенціалу взаємодії вакансій і відповідних спектральних густин [2]. Впливи флюктуацій швидкості ґенерації дефектів і неоднорідності опроміненого кристалу в рамках зроблених наближень є незалежними; визначувані ними поправки входять у (5) та (9) як доданки [2].

Середнє значення густини дефектів, на відміну від декременту згасання, залежить лише від флюктуацій густини стоків (через $G_B(\mathbf{k})$), а не від флюктуацій швидкості ґенерації дефектів: її кореляційних функцій або спектральних густин.

У випадку відсутності випадкової неоднорідності розподілу стоків для вакансій вираз для середньої густини останніх формально співпадає з виразом, який одержано у детерміністичному наближенні, якщо всі величини замінити їх середніми [2]: $\bar{n}_0 = K_0/\beta_0$.

Врахування стаціонарних зовнішніх флюктуацій і нелінійної взаємодії вакансій призводить до якісно нових результатів: зникнення або, навпаки, виникнення безлічі можливих однорідних випадкових полів густини вакансій з різними першими та другими моментами, кожне з яких може реалізуватися [2].

Коли зовнішні флюктуації стають дуже малими, (4), (5) та (9) перетворюються у співвідношення, яких одержано з використанням детерміністичного моделю (п. 5) [2, 6]. Оскільки впливи $\tilde{K}(\mathbf{r}, t)$ та $\tilde{\beta}(\mathbf{r}, t)$ є адитивними (роль останніх проаналізовано в [51], а статистичні характеристики випадкового стаціонарного розподілу точкових дефектів одержано в [52]), розглянемо умови виникнення періодичного розподілу густини вакансій при їх стохастичному утворенні [2]. Щоб одержати кількісні результати необхідно задати конкретний вигляд спектральної густини; зокрема, для Гавсового часового спектру з $\ln\{G(\mathbf{k}, 0)/G(\mathbf{k}, t)\} \propto t^2$ завжди знайдеться нестійка мода, а однорідне стаціонарне випадкове поле густини вакансій не реалізується [2]. Також обмежимося випадком, коли флюктуації швидкості ґенерації дефектів у часі й у просторі є статистично незалежними і настільки малими, що період виникаючої структури в розподілі густини вакансій близький до детерміністичного і набагато більший за радіус їх кореляції r_{corr} , а час кореляції τ_{corr} набагато менший за всі характерні часи задачі (зокрема, за час релаксації). Тоді для додання в (9), яку обумовлено флюктуаціями, одержуємо [2]:

$$S \approx \frac{D_v^2}{2(k_B T)^2} \int d\mathbf{k}' \frac{G(\mathbf{k}') S_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}') S_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tau_{\text{corr}}}{\lambda(\mathbf{k}') \{\lambda(\mathbf{k}') + \lambda(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\}}. \quad (23)$$

Тут і надалі радіус кореляції флюктуацій і час їхньої кореляції представлятимемо за означенням наступним чином [53, 54]:

$$r_{\text{corr}} = \frac{\int \langle K(\mathbf{r}, t) K(\mathbf{r} + \Delta\mathbf{r}, t) \rangle d(\Delta\mathbf{r})}{\langle K^2(\mathbf{r}, t) \rangle}, \quad \tau_{\text{corr}} = \frac{\int \langle K(\mathbf{r}, t) K(\mathbf{r}, t + \Delta t) \rangle d(\Delta t)}{\langle K^2(\mathbf{r}, t) \rangle}.$$

$r_{\text{corr}} < 10^4 - 10^6 \text{ \AA}$ (< порядку розміру каскаду зміщень, тобто максимальної віддалі, на якій каскади можуть перетинатися і вже можна ввести і детерміністичну, і флюктуаційну складові густини утворених дефектів), а $\tau_{\text{corr}} \leq 10^2 - 10^4 \text{ пс}$ (\leq порядку часу розвитку каскадів) [53].

При стохастичному описі не вдається звести залежності (зокрема, S) від параметрів \bar{n}_0 , \tilde{W}_{0n}^{vv} разом з T до одного $\alpha_n = \bar{n}_0 \tilde{W}_{0n}^{vv} / (k_B T)$. Шукатимемо умови розвитку нестійкості, змінюючи K_0 (декремент згасання λ_f залежить від K_0 лише через α_n), а температуру та коефіцієнт варіації швидкості утворення зміщень $\sqrt{\langle \tilde{K}^2 \rangle} / K_0$ вважатимемо фіксованими [2].

Оскільки підінтегральна функція в (23), що спадає з ростом k , як k^2 , є локалізованою на відрізку $[-|\mathbf{k}_m|, |\mathbf{k}_m|]$ ($|\mathbf{k}_m| \leq |\mathbf{k}_{\text{KP}}|$), декремент згасання λ_f дорівнюватиме 0 при $\alpha_n \leq \alpha_{n\text{KP}}$, оскільки чисельник у підінтегральному виразі в (23) є додатним в інтервалі $(-|\mathbf{k}_{\text{KP}}|, |\mathbf{k}_{\text{KP}}|)$ ($\mathbf{k}_{\text{KP}} \equiv k_{\text{KP}} \mathbf{n}$) і $S > 0$ [2]. В чисельнику підінтегральної функції (23) обмежимося першим членом розвинення, а в $\lambda(\mathbf{k})$ — другим, оскільки саме ним визначається точка мінімуму \mathbf{k}_m . Переходячи в (23) від інтегрування до підсумовування та враховуючи, що $G(\mathbf{0}, \mathbf{0}) = \langle \tilde{K}^2 \rangle r_{\text{corr}} \tau_{\text{corr}}$, підставляємо (23) в (9); утримуючи члени одного порядку малости, знаходимо із врахуванням кореляцій флюктуацій [2]:

$$\alpha_{[100]\text{KP}} \Rightarrow \alpha_{[100]c} \equiv \frac{K_{0c} \tilde{W}_{0[100]}^{vv}(T)}{\beta_0(T) k_B T} \equiv \alpha_{[100]\text{KP}} - \frac{1}{2} \sqrt{b(T) (\rho_{0d}(T))^{5/4} (\Psi(T))^{-1/4}},$$

$$k_{\text{KP}} \Rightarrow k_c \equiv k_{\text{KP}}(T) \sqrt{1 - \frac{1}{4} \sqrt{b(T) (\rho_{0d}(T))^{1/4} (\Psi(T))^{-5/4}}},$$

$$b(T) = r_{\text{corr}} \tau_{\text{corr}} D(T) \frac{\langle \tilde{K}^2 \rangle}{K_0^2}, \quad \Psi(T) = \frac{\tilde{B}^{vv}([100])}{\tilde{W}_{0[100]}^{vv}}.$$

Таким чином, зміни періоду дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми, які виникають через включення флюктуацій швидкості генерації дефектів, також визначаються кінетичними характеристиками (окрім параметрів опромінення).

Відповідні температурні залежності періоду модульованої структури вакансійної підсистеми з врахуванням впливу зовнішніх

флюктуацій швидкості генерації точкових дефектів, які характеризуються радіусом кореляції r_{corr} і часом кореляції τ_{corr} , а також температурної залежності густини дислокацій $\rho_{\text{od}}(T)$ представлено на рис. 20–22. (Пунктиром на рис. 20–22 відзначено прогнозовані залежності $d(T)$, яких одержано екстраполяцією кривих, побудованих на основі відповідних експериментальних даних про модулі пружності [14], коефіцієнт термічного розширення [33, 34] та густину дислокацій [37–39, 41], за межі областей їх визначення.)

При високих температурах наявність флюктуацій спричинює руйнування дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми, що проявляється у збільшенні періоду з температурою (власне через ентропійний чинник порядок розсмоктується). Зі зниженням температури флюктуації швидкості генерації дефектів зменшуються, і в умовах опромінення дисипативна модульована структура підсистеми вакансій вже має бути (саме завдяки йому). А завдяки надшвидкому охолодженню матеріялу вона може бути зафіксованою навіть після припинення опромінення [8].

Таким чином, наявність зовнішніх флюктуацій швидкості генерації точкових дефектів типу вакансій призводить до звуження об-

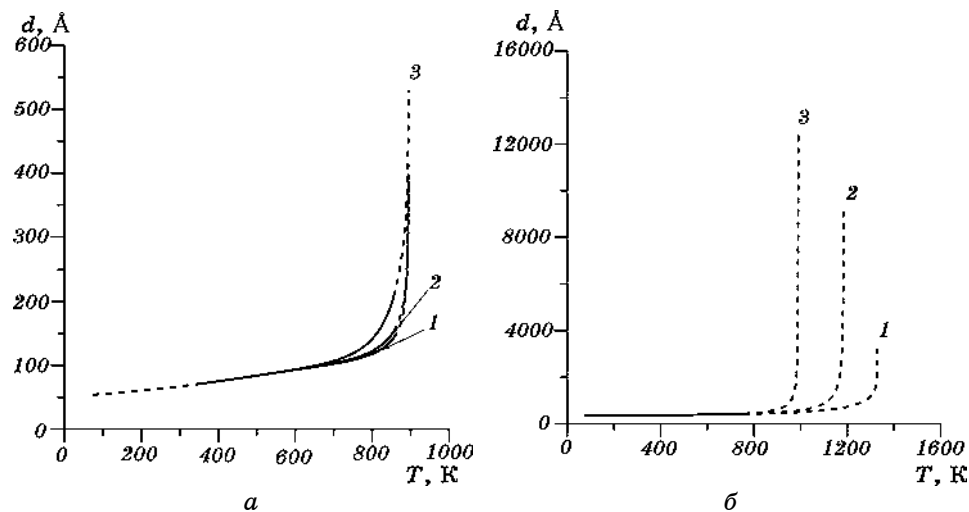


Рис. 20. Температурна залежність періоду дисипативної модульованої структури підсистеми вакансій із коефіцієнтом вакансійної дифузії $D_v = 3,5 \cdot 10^{15} \exp\{-1,3 \text{ eV}/(k_B T)\}$ [$\text{\AA}^2/\text{с}$] [35] і густиною дислокаційних стоків $\rho_{\text{od}}(T)$ за різних апроксимацій, — (а) (19) чи (б) (21), — при флюктуаціях швидкості генерації точкових дефектів за фіксованих значень часу кореляції $\tau_{\text{corr}} = 10^4$ пс і коефіцієнта варіації флюктуацій $\sqrt{\langle \tilde{K}^2 \rangle} / K_0 = 1$, але із різними значеннями радіуса їхньої кореляції r_{corr} : 1 — 10 \AA , 2 — 10^2 \AA , 3 — 10^3 \AA . (Щодо пунктиру див. також пояснення до рис. 11.)

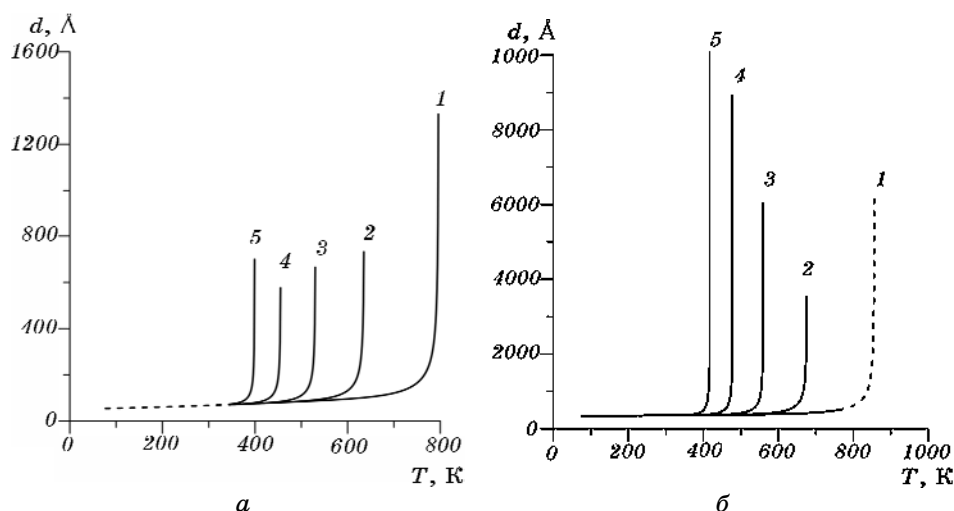


Рис. 21. Температурна залежність періоду дисипативної модульованої структури підсистеми вакансій із коефіцієнтом вакансійної дифузії $D_v = 3,5 \cdot 10^{15} \exp\{-1,3 \text{ eV}/(k_B T)\}$ [$\text{\AA}^2/\text{с}$] [35] і густиною дислокаційних стоків $\rho_{\text{од}}(T)$ за різних апроксимацій, — (а) (19) чи (б) (21), — при флюктуаціях швидкості генерації точкових дефектів із фіксованими значеннями їхніх радіуса кореляції $r_{\text{корр}} = 10^2 \text{ \AA}$ і часу кореляції $\tau_{\text{корр}} = 10^4 \text{ пс}$, але для різних значень коефіцієнта варіації флюктуацій $\sqrt{\langle \tilde{K}^2 \rangle}/K_0$: 1 — 10, 2 — 10^2 , 3 — 10^3 , 4 — 10^4 , 5 — 10^5 . (Щодо пунктиру див. також пояснення до рис. 11.)

ласти стабільності дисипативної структури в розподілі густини вакансійної підсистеми (рис. 20–22).

9. ВИСНОВКИ

В даній роботі проведено аналогію між утворенням надгратниці нанопор з утворенням просторово-впорядкованого розміщення точкових дефектів, насамперед, вакансій. Вперше таку аналогію зазначив Чанг [55, 56], використовуючи атомістичний розгляд. На його думку, вакансії — це квазічастинки, які пружньо взаємодіють між собою, шикуючись під опроміненням у надгратницю вакансій. Тобто взаємодія між вакансіями, як між квазічастинками, є подібною до взаємодії між атомами, що також стверджувалося ще в роботах [20–25]. Їм властива така ж сама кінетика, що і атомам. Це уможливило утворення надгратниці вакансій.

В даній роботі продемонстровано механізм виникнення дисипативних модульованих структур вакансійної підсистеми в ГЦК-кристалі, що опромінюється, який явно ґрунтується на відкритості та

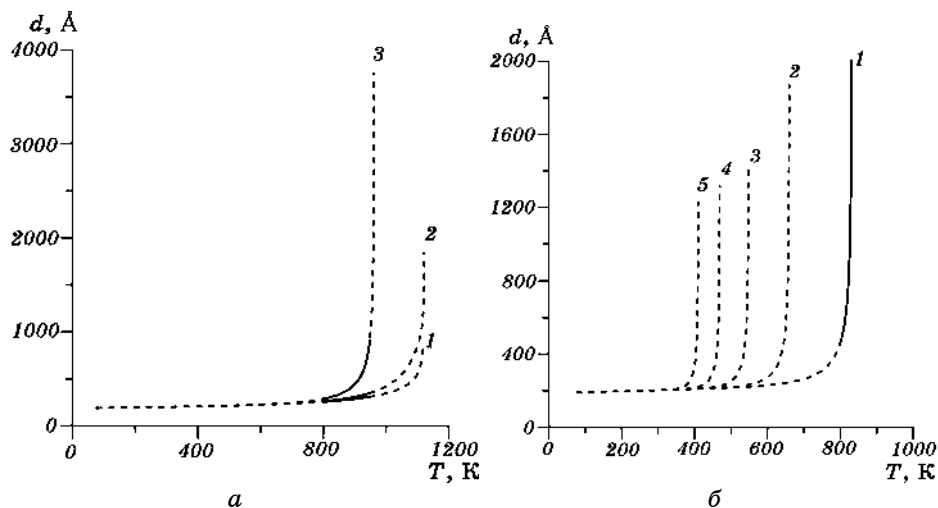


Рис. 22. Температурна залежність періоду дисипативної модульованої структури підсистеми вакансій із коефіцієнтом вакансійної дифузії $D_v = 3,5 \cdot 10^{15} \exp\{-1,3 \text{ eV}/(k_B T)\} [\text{Å}^2/\text{с}]$ [35] та апроксимацією (22) для густини дислокацій $\rho_{\text{od}}(T)$ при флюктуаціях швидкості генерації точкових дефектів: (а) за фіксованих значень їхніх коефіцієнта варіації $\sqrt{\langle \tilde{K}^2 \rangle} / K_0 = 1$ і часу кореляції $\tau_{\text{corr}} = 10^4$ пс, але із різними значеннями радіуса кореляції r_{corr} (1 — 10 Å , 2 — 10^2 Å , 3 — 10^3 Å); (б) при фіксованих значеннях $r_{\text{corr}} = 10^2 \text{ Å}$ та $\tau_{\text{corr}} = 10^4$ пс, але за різних значень коефіцієнта варіації флюктуацій $\sqrt{\langle \tilde{K}^2 \rangle} / K_0$: 1 — 10, 2 — 10^2 , 3 — 10^3 , 4 — 10^4 , 5 — 10^5 . (Щодо пунктиру див. також пояснення до рис. 11.)

нерівноважності такої системи в цілому, а також на нелінійності характеру зв'язків вакансій з оточенням, причім, на відміну від робіт Чанга [55, 56], застосовано (послідовне з методичної точки зору) спільне врахування внесків (непрямої) далекосяжної «деформаційної» взаємодії (зокрема, на далеких віддалях, «пружньої» за характером) і («прямої») порівняно короткосяжної «електрохімічної» взаємодії (в основному когезійної природи на близьких віддалях) у взаємодію згенерованих вакансій.

Теоретичне оцінювання параметрів взаємодії та кінетичних параметрів перерозподілу вакансій і на такому підґрунті дослідження механізмів самоорганізації модульованих структур їхньої підсистеми є потрібним для з'ясування шляхів регулювання властивостей наявних матеріалів і способів одержання нових з поліпшеною функціональністю.

Утворення надґратниць вакансій є внутрішньою властивістю деяких кристалічних матеріалів. Дослідження такої властивості є

важливим для уможливлення застосувань в якості реакторних тих чи інших матеріалів, оскільки матеріал, який має достатньо виражену схильність до утворення надгратниць вакансій, як очікується, може чинити опір розпуханню. Нікель має істотне технологічне значення, тому що його використовують в багатьох стопах як основи реакторних матеріалів. Для того, щоб краще зрозуміти поведінку дефектів, зокрема, вакансій у явищі утворення дисипативних модульованих структур їхньої підсистеми, в ніклевих стопах, в роботі виконано розрахунки його для чистого ГЦК-Ni.

На прикладі ГЦК-Ni чисельно розраховано дисперсійну криву Фур'є-компонент енергій «електрохімічної» (когезійної за природою) взаємодії вакансій у ГЦК-кристалі з урахуванням істотних рис такої їхньої «прямої» взаємодії (зокрема, ізотропії та притягального характеру). З'ясовано, що немалі значення її енергій (у порівнянні з енергіями «деформаційної» взаємодії між вакансіями) хоча б на віддальх радіусів декількох перших координаційних сфер забезпечують домінування саме цього енергетичного внеску у Фур'є-компоненти сумарної міжвакансійної взаємодії, принаймні, в околі центру Бріллюєнгової зони оберненого простору для ГЦК-гратниці.

Розглянуто випадок ізотермічних умов самоорганізації передвісника утворення надгратниці нанопор — модульованої структури у розподілі згенерованих опроміненням вакансій через нестійкість їхнього однорідного розподілу в результаті, насамперед, взаємодії між ними всередині ГЦК-кристалу, що опромінюється.

В рамках детерміністичного моделю оцінено температурні залежності періодів дисипативних модульованих структур в розподілі вакансій і нанопор.

Чисельно підтверджено, що навіть за відсутності флюктуацій неоднорідності дефектної будови ГЦК-кристалу, що опромінюється, та флюктуацій швидкості генерації в ньому вакансій нестійкість однорідного розподілу їх визначається низкою параметрів. Насамперед, це — коефіцієнт дифузії вакансій (а значить, і енергія активації їхньої міграції), характерний час виходу вакансій на стокки, що вбирають їх, фактор ефективності вбиральної дії на вакансії з боку (дислокаційних) стоків, а також Фур'є-компоненти енергій «деформаційної» («пружної») і «електрохімічної» взаємодій між вакансіями, що відповідають околу центру першої Бріллюєнгової зони оберненого простору ГЦК-гратниці. За наявності зазначених флюктуацій критерій нестійкості однорідного розподілу вакансій в умовах підтримуваного опромінення характеризується ще й параметрами кореляції: радіусом кореляції флюктуацій швидкості генерації вакансій, часом кореляції флюктуацій швидкості генерації вакансій, коефіцієнтом варіації швидкості утворення вакансій.

За відсутності (зовнішніх) флюктуацій ненульової швидкості генерації радіаційних точкових дефектів типу вакансій (та й (внут-

рішних) флюктуацій неоднорідности у розміщенні їхніх стоків (дислокацій) період дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми (в тому числі й наномасштабний) трохи зменшується з підвищенням температури в умовах сталості густини дислокацій, що визначається, насамперед, «електрохімічними» взаємодіями вакансій (оскільки взаємодія між вакансіями визначається не тільки (і не стільки) «пружним» внеском, а, насамперед, їхніми «електрохімічними» взаємодіями).

З'ясовано, що період d стаціонарної дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми істотно залежить від густини стоків вакансій. Урахування (емпіричної) температурної залежності густини дислокацій як стоків для вакансій у ГЦК-кристалі виявило розширення температурного інтервалу стаціонарного існування модульованої структури (із скінченням наномасштабним періодом). Чисельно показано, що саме зменшення густини дислокацій з підвищенням температури призводить до збільшення періоду $d(T)$ дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми (в тому числі й наномасштабного); це зумовлено ентропійним чинником і «електрохімічними» взаємодіями вакансій.

Уперше враховано вплив залежностей густини (наприклад, дислокаційних) стоків вакансій і енергетичних параметрів міжвакансійних взаємодій у ГЦК-кристалі від його температури T на інші (окрім періоду) характеристики модульованих структур вакансійної підсистеми, зокрема, на критичну температуру виникнення їх. При цьому виявлено, що врахуванням температурної залежності, насамперед, густини стоків вакансій оцінка критичної температури виникнення дисипативних структур підвищується.

Проілюстровано, що параметрична залежність періоду d (в тому числі й наномасштабного) стаціонарних дисипативних модульованих структур підсистеми вакансій від швидкості генерації їх є нелінійною, чому може відповідати як погіршення, так і поліпшення функціональних властивостей відповідного матеріалу (залежно від інтенсивності опромінення). З підвищенням швидкості генерації вакансій у ГЦК-кристалі температурний інтервал стійкості їхніх модульованих структур (із скінченням наномасштабним періодом $d(T)$) розширюється.

Підтверджено, що період d стаціонарних дисипативних модульованих структур вакансійної підсистеми параметрично залежить від коефіцієнта дифузії вакансій у ГЦК-кристалі, причому нелінійним чином. Зменшення рухливості вакансій сприяє зміщенню області стабільности дисипативної модульованої структури вакансійної підсистеми в бік вищих температур.

Кількісно підтверджено, що, на відміну від періоду модульованої структури, яка виникає у закритій вакансійній підсистемі ГЦК-кристалу за спинодальним механізмом релаксації [26], період ста-

ціонарної дисипативної модульованої структури відкритої нерівноважної підсистеми вакансій у ГЦК-кристалі, що опромінюється, істотно визначається їхніми кінетичними параметрами (коефіцієнтом дифузії, характерним часом життя до вбирання стоками, коефіцієнтом, що характеризує ефективність вбирального взаємочину вакансій із стоками (дислокаціями), а також характеристиками опромінення (насамперед, його інтенсивністю, а значить, швидкістю генерації ним точкових дефектів типу вакансій).

Період надгратниці в розподілі нанопор підвищується з температурою, що визначається, на відміну від модульованої структури вакансійної підсистеми, лише «пружною» взаємодією в рамках теорії пружності суцільного середовища із когерентними включеннями.

Чисельно досліджено нелінійну залежність періоду $d(T)$ стаціонарних дисипативних модульованих структур вакансійної підсистеми від параметрів кореляції зовнішніх флюктуацій: радіуса кореляції просторових флюктуацій швидкості генерації вакансій, часу кореляції просторових флюктуацій швидкості генерації вакансій, коефіцієнта варіації швидкості утворення вакансій. Уперше кількісно проілюстровано, що зі збільшенням радіуса кореляції просторових флюктуацій швидкості утворення вакансій та/або коефіцієнта варіації швидкості генерації вакансій температурний інтервал стаціонарного існування дисипативних модульованих структур (із скінченим наномасштабним періодом $d(T)$) у розподілі густини вакансійної підсистеми в ГЦК-кристалі звужується.

Для порівняння чисельно підтверджено та проілюстровано гіпотезу про можливість утворення надгратниці (скінченного періоду) із «пружною» взаємодійних нанопор услід «зародженню» їх в околах тих вузлів ГЦК-кристалу (що опромінюється), у яких густина вакансій (які групуються) є підвищеною, у певному інтервалі температур.

ПОДЯКИ

Насамкінець, автори щиро дякують к.ф.-м.н. С. М. Бокочу та проф. Д. О. Харченку за дискусію стосовно температурних залежностей періодів модульованих структур ізольованих і відкритих систем.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. W. Horsthemke and R. Lefever, *Noise-Induced Transitions: Theory and Applications in Physics, Chemistry, and Biology* (Berlin–Heidelberg: Springer–Verlag: 2006).
2. П. О. Селищев, *Металлофиз. новейшие технол.*, **21**, № 9: 11 (1999).
3. П. А. Селищев, *Самоорганизация в радиационной физике* (Київ: Аспект-

- Полиграф: 2004).
4. В. И. Сугаков, *О сверхрешетках плотности дефектов в облучаемых кристаллах* (Киев: 1984) (Препринт/АН УССР. Институт теоретической физики. ИТФ-84-70).
 5. В. Й. Сугаков, *Основи синергетики* (Київ: Обереги: 2001).
 6. О. В. Олійник, П. О. Селищев, В. А. Татаренко, Й. Б. Парк, *Металлофиз. новейшие технол.*, **34**, № 9: 1231 (2012).
 7. P. A. Selishchev and V. I. Sugakov, *Radiat. Eff. and Defects in Solids*, **133**, No. 3: 237 (1995).
 8. В. И. Сугаков, П. А. Селищев, *Физ. твердого тела*, **28**, № 10: 2921 (1986).
 9. A. G. Khachaturyan, *Theory of Structural Transformations in Solids* (Mineola, NY: Dover Publications Inc.: 2008).
 10. А. А. Кацнельсон, А. И. Олемской, *Микроскопическая теория неоднородных структур* (Москва: Изд. МГУ: 1987).
 11. О. В. Олійник, В. А. Татаренко, С. М. Бокоч, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 10: 1383 (2011); *ibidem*, **34**, № 1: 137 (2012).
 12. В. А. Татаренко, К. Л. Цинман, *Физика реальных кристаллов: Сб. науч. тр.* (Ред. В. Г. Барьяхтар) (Киев: Наукова думка: 1992), с. 244.
 13. В. А. Татаренко, К. Л. Цинман, *Металлофизика*, **14**, № 10: 14 (1992).
 14. И. Н. Францевич, Ф. Ф. Воронов, С. А. Бакута, *Упругие постоянные и упругие модули металлов и неметаллов: Справочник* (Киев: Наукова думка: 1982).
 15. Л. Г. Климович, С. В. Семеновская, Я. С. Уманский, М. Я. Фишкис, *Физ. мет. металловед.*, **25**, № 6: 1029 (1968).
 16. E. S. Machlin, *Acta Metall.*, **22**, No. 1: 95 (1974).
 17. O. Bender and P. Ehrhart, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **13**, No. 5: 911 (1983).
 18. D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B*, **8**, No. 12: 5747 (1973).
 19. A. Baldereschi, *Phys. Rev. B*, **7**, No. 12: 5212 (1976).
 20. V. G. Weizer and L. A. Girifalco, *Phys. Rev.*, **120**, No. 3: 837 (1960).
 21. R. Yamamoto and M. Doyama, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **3**, No. 8: 1524 (1973).
 22. W. A. Harrison, *Pseudopotentials in the Theory of Metals* (New York: W. A. Benjamin Inc.: 1966).
 23. W. A. Harrison, *Solid State Theory* (New York: McGraw-Hill: 1970).
 24. J. W. Flocken and J. R. Hardy, *Phys. Rev.*, **177**, No. 3: 1054 (1969).
 25. M. S. Blanter and A. G. Khachaturyan, *Metall. Trans.*, **9A**, No. 6: 753 (1978).
 26. O. V. Oliinyk and V. A. Tatarsenko, *Журнал нано- та електронної фізики*, **4**, № 1: 01001-1 (2012).
 27. L. Brewer, *High-Strength Materials* (Ed. V. F. Zackay) (New York: Wiley: 1965), ch. 2, p. 12.
 28. L. Brewer, *The Cohesive Energies of the Elements: Report LBL-3720* (Berkeley, CA: Lawrence Berkeley Laboratory: 1977).
 29. В. А. Полухин, М. А. Спиридонов, Л. А. Жукова, *Структура и атомная динамика в конденсированных металлах: Учебное электронное текстовое издание* (Екатеринбург: ГОУ ВПО УГТУ–УПИ: 2009).
 30. М. Д. Старостенков, *Кристаллография*, **37**, № 3: 717 (1992).
 31. М. Д. Старостенков, *Метод расчета заполнения координационных сфер в кристаллах с ГЦК-решеткой* (Деп. в ВИНТИ 31.03.86 № 2968-2-B86). 26 с.
 32. И. В. Лощина, М. Д. Старостенков, *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, **3**, № 3: 94 (2006).

33. T. G. Kollie, *Phys. Rev. B*, **16**, No. 11: 4872 (1977).
34. G. K. White, *Proc. Phys. Soc. London*, **86**, No. 2: 159 (1965).
35. Ю. В. Конобеев, *ВАНТ. Сер. Физика радиац. поврежд. и радиац. матер.*, № 1(29)–2(30): 172 (1984).
36. Т. П. Диденко, П. А. Селищев, *Металлофиз. новейшие технол.*, **34**, № 10: 1347 (2012).
37. Y. Zhao, T. D. Shen, and J. Zhang, *Nanoscale Res. Lett.*, **2**, No. 10: 476 (2007).
38. И. А. Гиндин, Я. Д. Стародубов, В. К. Аксенов, *Укр. физ. журн.*, **19**, № 11: 1834 (1974).
39. В. А. Старенченко, Д. В. Лычагин, Р. В. Шаехов, Э. В. Козлов, *Изв. высших учебн. завед. Физика*, **1**, № 7: 71 (1999).
40. И. И. Новиков, *Теория термической обработки металлов* (Москва: Металлургия: 1978).
41. F. A. Smidt, Jr., and L. A. Beach, *Cooperative Radiation Effects Simulation Program Annual Progress Report for the period 1 September 1978–31 August 1979: Report NRL-4379* (Washington, D.C.: Naval Research Laboratory: 1980).
42. В. В. Михайловский, К. С. Рассел, В. И. Сугаков, *Физ. твердого тела*, **42**, № 3: 471 (2000).
43. N. M. Ghoniem, D. Walgraef, and S. J. Zinkle, *J. of Computer-Aided Materials Design*, No. 8: 1 (2002).
44. H. E. Schaefer, *Positron Annihilation* (Eds. P. G. Coleman, S. C. Sharma, and L. M. Diana) (Amsterdam: North-Holland Pub. Co: 1982), p. 369.
45. J. A. Sprague, J. E. Westmoreland, F. A. Smidt, Jr., and P. R. Malmberg, *J. Nucl. Mater.*, **54**, No. 2: 286 (1974).
46. G. L. Kulcinski, J. L. Brimhall, and H. E. Kissinger, *J. Nucl. Mater.*, **40**, No. 2: 166 (1971).
47. А. В. Козлов, Е. Н. Щербаков, О. И. Асипцов, Л. А. Скрыбин, И. А. Портных, *Физика и химия обработки материалов*, № 1: 9 (2006).
48. Ю. В. Конобеев, *Физ. твердого тела*, **20**, № 5: 1560 (1978).
49. D. J. Mazey, S. Francis, and J. A. Hudson, *J. Nucl. Mater.*, **47**, No. 2: 137 (1973).
50. В. А. Loomis, S. B. Gerber, and A. Taylor, *J. Nucl. Mater.*, **68**, No. 1: 19 (1977).
51. П. А. Селищев, *Металлы*, **1**, № 3: 99 (1998).
52. П. А. Селищев, *Физ. мет. металловед.*, **87**, № 2: 10 (1999).
53. П. О. Селищев, Д. В. Щур, *Вісник Київського університету. Сер. фізико-математичних наук*, **1**, № 2: 505 (1999).
54. И. А. Квасников, *Термодинамика и статистическая физика. Теория неравновесных систем* (Москва: Изд. МГУ: 1987).
55. R. Chang, *Scr. Metall.*, **10**, No. 9: 861 (1976).
56. R. Chang, *Scr. Metall.*, **10**, No. 7: 611 (1976).