

Д.О. ХАРЧЕНКО, В.О. ХАРЧЕНКО, А.І. БАШТОВА

Інститут прикладної фізики НАН України

(Вул. Петропавлівська, 58, Суми 40000; e-mail: dikh@ipfcentr.sumy.ua)

## САМООРГАНІЗАЦІЯ ВАКАНСІЙНОГО АНСАМБЛЮ ПРИ СПІНОДАЛЬНОМУ РОЗПАДІ БІНАРНИХ СИСТЕМ, ПІДДАНИХ СТАЛІЙ ДІЇ РАДІАЦІЙНОГО ОПРОМІНЕННЯ

УДК 539.75

*Розглянуто процеси перерозподілу нерівноважних вакансій при спінодальному розпаді бінарного твердого розчину, що знаходиться при сталій дії опромінення, в рамках узагальненої моделі Кана-Хіллєрда, яка враховує формування структурного безладу внаслідок опромінення. Виявлено, що зі збільшенням швидкості дефектоутворення процеси спінодального розпаду замінюються процесами формування просторових вакансійних структур. Встановлено, що формування кластерів вакансій супроводжується відбором структур. Досліджено кінетику розпаду та структуроутворення, статистичні розподіли полів концентрації розчину та концентрації вакансій за різних швидкостей набору дози опромінення.*

*Ключові слова:* модель Кана-Хіллєрда, спінодальний розпад бінарних систем.

### 1. Вступ

При розгляді процесів мікроструктурних перетворень у сплавах, підданих радіаційному опроміненню, важливим постає питання про поведінку ансамблю дефектів, зокрема точкових. Експериментальні та теоретичні дослідження перебудови вакансій та міжвузлів показують, що за певних доз опромінення ці дефекти здатні самоорганізуватися у так звані просторові структури. Серед них можна виділити скупчення вакансій (ді-, три- та тетра-вакансій) [1], окремі пори та їх ґратки [2, 3]. Окрім того, можливими стають випадіння преципітатів, формування стінок дефектів [4], упорядкування вакансійних петель [5, 6], тощо. Більшість дефектів, утворюваних завдяки зовнішньому впливові, є термодинамічно нестійкими і тому їх однорідний розподіл стає також нестійким, що приводить до їх самоорганізації з виникненням дисипативних структур. Оскільки рухливість між-

вузлів значно перевищує рухливість вакансій, то міжвузлові атоми швидко виходять на стоки і кількість відповідних кластерів значно менша за кількість вакансійних. При цьому, формування великої кількості вакансійних структур приводить до погіршення механічних властивостей матеріалів, наприклад, до розпухання та окрихчення опромінюваних сплавів. У зв'язку з цим важливою постає актуальна задача вивчення динаміки вакансійної підсистеми як у однокомпонентних кристалічних системах, так і у багатокомпонентних (сталях).

Експериментально та теоретично (числовим моделюванням) було встановлено, що динаміка ансамблю дефектів та властивості утворюваних структур дефектів різняться залежно від умов опромінення (швидкості набору дози та температури) [7, 8]. Це, передусім, пояснюється зменшенням внеску дифузійної компоненти при розподілі дефектів у системах, що опромінюються на прискорювачах у порівнянні з реакторними умовами опромінення [9, 10]. Здебільшого у теоретичних дослідженнях процеси генерування дефектів у ка-

© Д.О. ХАРЧЕНКО, В.О. ХАРЧЕНКО,  
А.І. БАШТОВА, 2016

276

ISSN 0372-400X. Укр. фіз. журн. 2016. Т. 61, № 3

скадах, їх відпал та формування кластерів моделюється методами молекулярної динаміки. Динаміка дефектів та їх перерозподіл на дифузійних часових інтервалах можуть бути досліджені методами фазового поля кристала (див., наприклад, [11, 12]). З іншого боку, на мезоскопічному рівні ефекти генерування, виходу на стоки, взаємодії та дифузії дефектів можуть бути досліджені в рамках швидкісної теорії “квазіхімічних реакцій” [8, 13–17]. У рамках такого підходу, де досліджуваний ансамбль дефектів описується рівняннями реакційно-дифузійного типу для концентрації точкових дефектів, вдається встановити особливості зміни типу структур дефектів [18], дослідити динамічні та статистичні властивості їх перерозподілу залежно від умов опромінення [9, 10], виявити вплив флуктуаційних складових на процеси структуроутворення [19]. Окрім того, даний підхід у поєднанні з теорією нуклеації, відповідно до робіт [20–22], використовувався для пояснення аномальної динаміки росту зерен в опромінованих системах при виході вакансій на їх межі [23].

Застосування такого підходу при дослідженні бінарних сплавів дозволяє проаналізувати ефекти самоорганізації дефектної структури у процесах випадіння фаз при спінодальному розпаді в рамках теорії Кана–Хільярда [24] з урахуванням схеми Даркена [25]. 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 в роботах [26–30], де показано, що наближення Даркена є справедливим, якщо дифузійна довжина істотно перевищує довжину вільного пробігу вакансій. Було встановлено, що в реальних сплавах, що зазнають спінодального розпаду, дифузійна довжина (період ламелярної структури на початковій стадії розпаду  $\sim 10^{-8}$  м) істотно менша за довжину вільного пробігу вакансій ( $\sim 10^{-7}$ – $10^{-6}$  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 в системі завжди будуть виникати нерівноважні вакансії внаслідок генерування структурного безладу (радіаційних пошкоджень), які безпосереднім чином враховуються за допомогою швидкісної теорії.

Задача дослідження перерозподілу вакансій, коли в системі набирається певна доза пошкоджень при опроміненні, залишається вельми актуальною на сьогоднішній день. Її розв’язання для однокомпонентних систем обговорювалося в роботах [9, 10, 18, 19, 23], де було показано, що при пересиченні вакансіями відбувається їх організація у стійкі просторові структури. Дослідження уповільнення процесу розпаду нерівноважними вакансіями в неопромінованих системах проводилося у роботі [30] на початковій стадії розпаду. Однак, картина спінодального розпаду та самоорганізації вакансійної підсистеми при сталій дії опромінення не була описана. Тому, дана робота спрямована на розв’язання підходів Кана–Хільярда з урахуванням кінетики точкових дефектів, що продукуються в каскадах, та їх перерозподіл з утворенням дисипативних структур. У нашому дослідженні проводиться узагальнення теорії Кана–Хільярда введенням “квазіхімічних” реакцій дефектів та припущенням про взаємодію вакансій у полях пружних напружень, що викликані самими дефектами. Нами 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. При цьому буде виявлено, що у такій системі при зростанні швидкості набору дози опромінення можливими стають процеси відбору структур. Нами буде проаналізовано дані числового моделювання з встановленням відмінностей у перерозподілі вакансій із зростанням швидкості набору дози.

За структурою робота є такою. У розділі 2 подається модель досліджуваної системи та обговорюються основні припущення. У третьому розділі аналізуються стаціонарні стани та їх стійкість, де встановлюються умови реалізації процесів відбору структур. Результати числового моделювання обговорюються у розділі 4. Висновки зібрано у останньому розділі роботи.

## 2. Основні рівняння

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 пото-

ків кожної з компонент твердого розчину:  $\mathbf{j}_{\{A,B\}} = -L_{\{A,B\}} \nabla \mu_{\{A,B\}}$ , 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 з співвідношенням Гібса–Дюгема ( $c_A d\mu_A + c_B d\mu_B = 0$ ) для хімічних потенціалів  $\mu_A$  та  $\mu_B$  дифузійні потоки можуть бути записані у вигляді:  $\mathbf{j}_A = c_B L_A \nabla (\mu_B - \mu_A)$ ,  $\mathbf{j}_B = -c_A L_B \nabla (\mu_B - \mu_A)$ . При врахуванні перерозподілу вакансій з концентрацією  $c_v$  для потоків можемо записати  $\mathbf{j}_A = c_B L_A \nabla \tilde{\mu} + (c_A D_A^* / c_v) \nabla c_v$ ,  $\mathbf{j}_B = -c_A L_B \nabla \tilde{\mu} + (c_B D_B^* / c_v) \nabla c_v$ , де  $\tilde{\mu} = \partial f / \partial c - \beta_0 \nabla^2 c_B$  є узагальненим хімічним потенціалом, який враховує нелокальні взаємодії в неоднорідних сплавах. Тут густина вільної енергії  $f$  задається відповідно до теорії регулярного твердого розчину Брега–Вільямса. У такому наближенні маємо стандартний вираз  $f = Zw_0 c_A c_B / 2 + T(c_A \ln c_A + c_B \ln c_B)$ , 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  $V_{A,B}$ . Стала  $\beta_0$  при квадраті градієнта концентрації задає квадрат радіуса взаємодії (ширина міжфазної межі), записаний через фур'є-образ енергії міжатомної взаємодії  $v(k)$  згідно з виразом Кривоглаза–Клапша–Мосса:  $\beta_0 = \frac{1}{2} \frac{dv(k)}{dk^2}$ . Дифузійний потік вакансій визначається умовою збереження  $\mathbf{j}_A + \mathbf{j}_B + \mathbf{j}_v = 0$ . Це дозволяє записати  $\mathbf{j}_v = (c_A L_B - c_B L_A) \nabla \tilde{\mu} - c_v^{-1} (c_A D_A^* + c_B D_B^*) \nabla c_v$ . Різниця в коефіцієнтах самодифузії атомів, внаслідок ефекту Кіркендала, приводить до руху ґратки зі швидкістю, яка визначається потоком вакансій  $\mathbf{j}_v$ . Тому, далі переходимо до лабораторної системи відліку, переписавши потік атомів у вигляді:  $\mathbf{J}_B = \mathbf{j}_B + c_B \mathbf{j}_v$ . Підставляючи вирази для потоків  $\mathbf{j}_B$  та  $\mathbf{j}_v$ , приходимо до відомих виразів [26, 30]:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_B &= -\frac{c_A c_B (c_A D_B^* + c_B D_A^*)}{T} \nabla \tilde{\mu} + \\ &+ \frac{c_A c_B (D_B^* - D_A^*)}{c_v} \nabla c_v, \\ \mathbf{j}_v &= \frac{c_A c_B (D_B^* - D_A^*)}{T} \nabla \tilde{\mu} - D_v \nabla c_v, \\ D_v &\equiv \frac{c_A D_A^* + c_B D_B^*}{c_v}. \end{aligned} \quad (1)$$

Тут уведено позначення  $D_v$  для коефіцієнта дифузії вакансій, який залежить від концентрації вакансій та концентрації компонент твердого розчину. Перехресні члени у (1) 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:  $\partial_t c_B = -\nabla \cdot \mathbf{J}_B$ ,  $\partial_t c_v = -\nabla \cdot \mathbf{j}_v$ . 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  $c_B$  мають зберігатися<sup>1</sup>. 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 міжвузлові атоми двох сортів з концентраціями  $c_i^A$  та  $c_i^B$ . Таким чином, при врахуванні зазначених вище процесів із використанням швидкісної теорії [8, 13–17] еволюція повної системи буде задаватися такою системою рівнянь:

$$\begin{aligned} \partial_t c_i^A &= K c_A - D_i \rho c_i^A - \alpha (c_v - c_v^0) c_i^A - \nabla \cdot \mathbf{J}_i^A, \\ \partial_t c_i^B &= K c_B - D_i \rho c_i^B - \alpha (c_v - c_v^0) c_i^B - \nabla \cdot \mathbf{J}_i^B, \\ \partial_t c_v &= K - D_v \rho (c_v - c_v^0) - \\ &- \alpha (c_v - c_v^0) (c_i^A + c_i^B) - \nabla \cdot \mathbf{J}_v, \\ \partial_t c_B &= -\nabla \cdot \mathbf{J}_B. \end{aligned} \quad (2)$$

У рівняннях еволюції дефектів перші доданки характеризують генерацію дефектів зі швидкістю радіаційних пошкоджень  $K$ , виміряної в одиницях зміщення на атом за секунду (displacement per atom per second, dpa/s); другі доданки описують вихід дефектів на стоки (дислокації густиною  $\rho$ ,

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

що “розмазані” по системі) з коефіцієнтами дифузії  $D_i = \epsilon D_v$ , де  $\epsilon \gg 1$  враховує різницю в коефіцієнтах дифузії вакансій та міжвузлів. Анігіляція міжвузлів та вакансій задається коефіцієнтом рекомбінації  $\alpha = 4\pi r_0(D_i + D_v)/\Omega$ , де  $r_0$  – радіус взаємодії,  $\Omega$  – атомний об’єм (при  $\epsilon \gg 1$  можна вважати  $\alpha \simeq 4\pi r_0 D_i/\Omega$ ). Величина  $c_v^0$  задає рівноважну концентрацію вакансій. В останньому рівнянні опущено складові, що відповідають за реакції локального зменшення концентрації речовини при формуванні міжвузлового атома, витоку атома зі стоку та вбудовування міжвузлового атома у власне положення в ґратці при взаємодії з вакансією. Вважається, 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 (2) характеризують відповідні дифузійні потоки. При цьому, оскільки коефіцієнти дифузії міжвузлів та вакансій істотно різняться, то, без втрати загальності, можна вважати, що міжвузлові 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  $\mathbf{j}_v^{\text{int}}$  при виникненні пружних полів в околі самих вакансій. Така взаємодія описується загально відомим зв’язком пружних полів та концентрацією їх носіїв, де відповідний потенціал взаємодії має вигляд  $U = -\kappa \varpi \nabla \cdot \mathbf{u}$ . Тут для вектора зміщень  $\mathbf{u}$  виконується співвідношення  $\nabla \cdot \mathbf{u} \propto \varpi c_v$ , де  $\kappa$  – пружна стала,  $\varpi$  – ділататійний параметр [20, 31, 32]. Таким чином, виникає додатковий внесок до потоку вакансій  $\mathbf{j}_v^{\text{int}} \equiv \mathbf{v} c_v$ , де швидкість плинину  $\mathbf{v} = -(D_B^*/T)\nabla U$ . У подальшому для потенціалу взаємодії прийемо умову самоузгодженості [18, 33–35]  $U = -\int \tilde{u}(r, r') c_v(r') dr'$ , де  $-\tilde{u}(r)$  – притягуючий потенціал із властивостями  $\int \tilde{u}(r) r^{2n+1} dr = 0$ . Припускаючи, що  $c_v(r)$  змінюється повільно на відстані  $r_0 \simeq \Omega^{1/3}$ , можна скористатися розвиненням

$$\frac{1}{T} \int d\mathbf{r}' \tilde{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') c_v(\mathbf{r}') \simeq \theta (c_v + r_0^2 \nabla^2 c_v), \quad (3)$$

де  $\theta = T^{-1} \int u(r) dr$  – параметр взаємодії вакансій. Другий доданок у (3) відповідає за мікроскопічні процеси взаємодії вакансій на відстані радіу-

са взаємодії  $r_0$ . У нормальних умовах цей доданок є істотно малим у порівнянні з дифузійним, але він має бути залишеним, оскільки запобігає розбіжності наближення при пересиченні вакансіями [9, 10, 18, 19, 34].

Для подальшого аналізу доцільно перейти до знерозмірених величин, поклавши  $c \equiv c_B$ ,  $\epsilon \equiv Zw_0/T$ ,  $\beta \equiv \beta_0/T$ ,  $\tilde{D} \equiv D_A^*/D_B^*$ ,  $t' \equiv tD_B^*\rho$ ,  $P \equiv K/D_B^*\rho$ . 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  $\gamma \equiv 4\pi r_0/\Omega\rho$ , 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

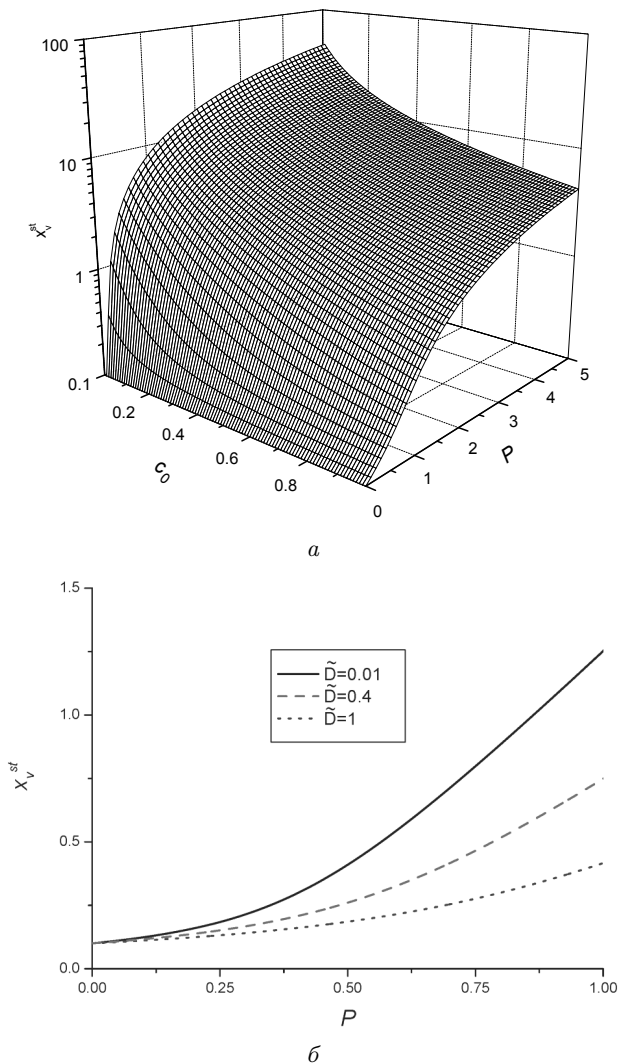
$$\begin{aligned} x_i^A &\simeq \frac{P(1-c)}{\epsilon[\tilde{D} + c(1-\tilde{D})]} \frac{x_v}{1+x_v-x_v^0}, \\ x_i^B &\simeq \frac{Pc}{\epsilon[\tilde{D} + c(1-\tilde{D})]} \frac{x_v}{1+x_v-x_v^0}. \end{aligned} \quad (4)$$

Підставляючи отримані вирази (4) у рівняння еволюції вакансій системи (2), та опускаючи штрих при часовій змінній, отримуємо систему рівнянь:

$$\begin{aligned} \gamma^{-1} \partial_t x_v &= \frac{P}{1+x_v-x_v^0} - [\tilde{D} + c(1-\tilde{D})] \frac{x_v - x_v^0}{x_v} - \\ &- \nabla \cdot \left\{ (1-\tilde{D})c(1-c) \left[ -\epsilon \nabla c + \frac{\nabla c}{c(1-c)} - \beta \nabla^3 c \right] - \right. \\ &- \left. \frac{\tilde{D} + c(1-\tilde{D})}{x_v} \nabla x_v + \theta x_v \nabla (x_v + \ell^2 \nabla^2 x_v) \right\}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \partial_t c &= \nabla \cdot \left\{ (1-c(1-\tilde{D})) c(1-c) \times \right. \\ &\times \left[ -\epsilon \nabla c + \frac{\nabla c}{c(1-c)} - \beta \nabla^3 c \right] - \frac{(1-\tilde{D})c(1-c)}{x_v} \nabla x_v \left. \right\}. \end{aligned}$$

Відповідно до визначень  $\Omega = 4\pi a^3/3$ ,  $r_0 \simeq b/2$ , де  $a$  та  $b$  є параметром ґратки та модулем вектора Бюргерса, при порядках величин  $r_0 \sim 10^{-9}$  м,  $\Omega \sim 10^{-29}$  м<sup>3</sup> та  $\rho \simeq 10^{14}$  м<sup>-2</sup>, отримуємо  $L_D \simeq 10^{-7}$  м,  $\ell \sim 10^{-2}$ ,  $\gamma \sim 10^7$ . Отже концентрація вакансій  $x_v$  може розглядатися як швидка змінна у порівнянні з концентрацією розчину  $c$ . Оцінка знерозміреної швидкості набору дози  $P$  при  $K \simeq 10^{-6}$  фра/с, потоці нейтронів  $\sim 10^{15}$  (см<sup>2</sup>·с)<sup>-1</sup>, енергії нейтронів  $\simeq 0,5$  МеВ та перетину дефектоутворення  $3 \cdot 10^{-24}$  см<sup>2</sup> для металічних мішеней (з енергією первинно вибитого атома  $\simeq 22-25$  еВ)



**Рис. 1.** Залежність стаціонарних значень концентрації вакансій: від  $P$  та  $c_0$  при  $\tilde{D} = 0,1$  (а); від  $P$  при різних співвідношеннях між власними коефіцієнтами дифузії  $\tilde{D} = D_A^*/D_B^*$  при  $c_0 = 1/2$  (б)

при фіксованій температурі  $\sim 770$  К дає  $P \sim (0,01-10)$ . Основною задачею подальшого дослідження є опис картини самоорганізації вакансійного ансамблю при спінодальному розпаді бінарного твердого розчину за різних швидкостей набору дози опромінення  $P$ .

### 3. Аналіз стійкості лінеаризованої системи

Розглянемо стійкість стаціонарних станів. Для цього слід зауважити, що величина  $c$  є збереженою, тому її стаціонарне значення відповідає початко-

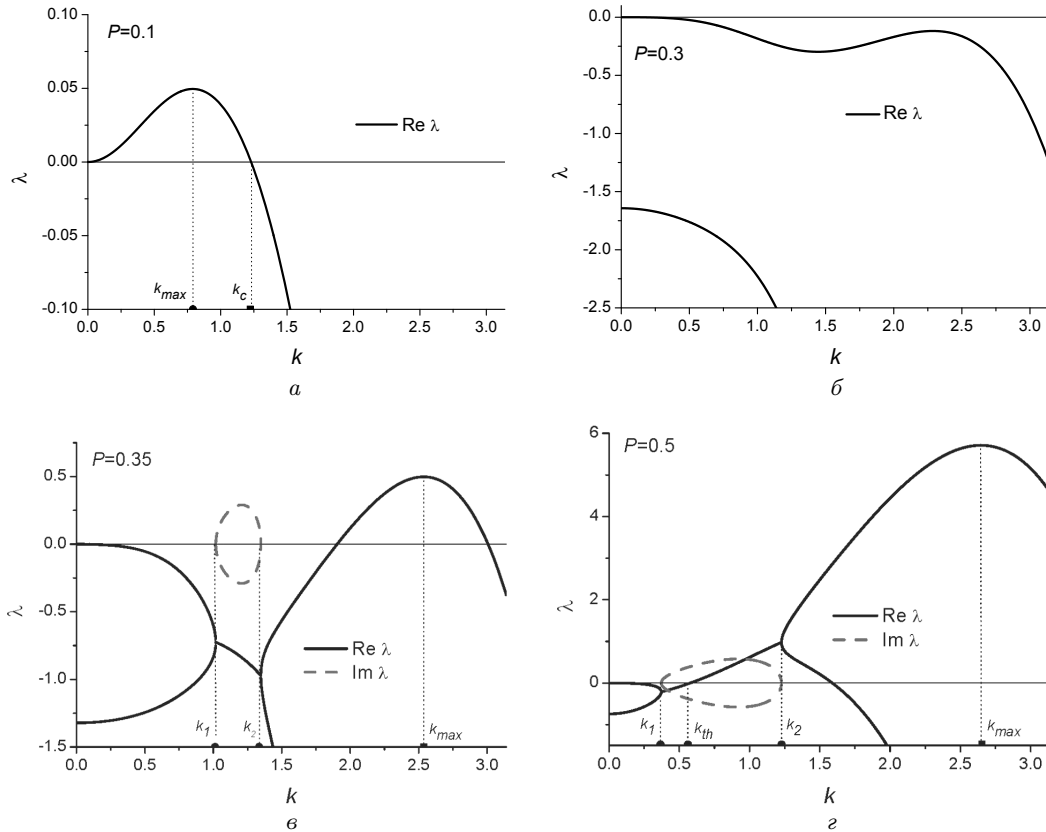
вому, вибраному в інтервалі  $c_0 \in (0, 1)$ . Стаціонарне значення знерозміреної концентрації вакансій  $x_v^{st}$  визначається з розв'язку рівняння  $\partial_t x_v = 0$ :

$$x_v^{st} = x_v^0 - \frac{1}{2} + \frac{P}{2D(c)} + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{P}{D(c)} \left[ \frac{P}{D(c)} - 2(1 - 2x_v^0) \right] \right)^{1/2}, \quad (6)$$

де уведено позначення  $D(c) \equiv \tilde{D} + c(1 - \tilde{D})$ . Залежність стаціонарного значення концентрації вакансій від  $P$  при різних значеннях концентрації компонента  $B$  показано на рис. 1, а.

Видно, що, починаючи з рівноважного значення  $x_v^0$ , величина  $x_v^{st}$  зростає на декілька порядків при збільшенні швидкості набору дози. При цьому спостерігається спадання стаціонарного значення концентрації вакансій для систем з підвищеним вмістом фази з атомами сорту  $B$ . Це пояснюється тим, що інтенсивність релаксації нерівноважних вакансій у фазі  $B$  є істотно більшою, ніж у фазі  $A$  внаслідок різниці коефіцієнтів дифузії. Зміна стаціонарної концентрації вакансій при опроміненні систем з різним співвідношенням між  $D_A^*$  та  $D_B^*$  показана на рис. 1, б. З нього випливає, що в системах з меншою різницею у коефіцієнтах самодифузії кількість нерівноважних вакансій стає меншою, оскільки, згідно з ефектом 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  $\delta c = c_0 + e^{\lambda(k)t + ikr}$ ,  $\delta x_v = x_v^{st} + e^{\lambda(k)t + ikr}$ . Лінеаризуючи систему рівнянь (5) в околі  $(c_0, x_v^{st})$ , можна отримати власні значення  $\lambda(k)$  відповідної матриці Якобі, як розв'язки квадратного рівняння. Один з них є 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

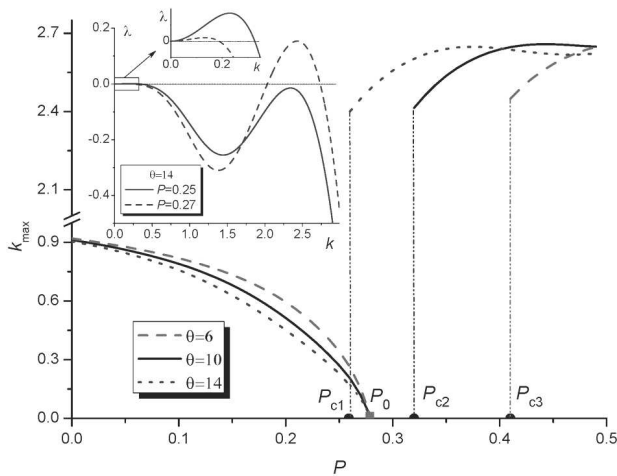


**Рис. 2.** Залежності власних значень матриці Якобі від хвильового числа в околі стаціонарного стану ( $c_0 = 0,5, x_v = x_v^{st}$ ) при  $P = 0,1$  (а),  $P = 0,3$  (б),  $P = 0,35$  (в),  $P = 0,5$  (г). Решта параметрів:  $x_v^0 = 0,1, \bar{D} = 0,1, \beta = 1,0, \ell = 0,25, \varepsilon = 6, \theta = 10$

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. 3. При  $P = 0,1$  (див. рис. 3, а) 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, при 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 піка позитивного власного значення  $\lambda(k_{\max})$  спадає, а його положення, яке відпо-

відає  $k = k_{\max}$ , зміщується до  $k = 0$ . Останнє свідчить про реалізацію лише довгохвильових структур. При  $P = 0,3$  (див. рис. 3, б) 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. 3, в 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 (наявностію  $\Im\lambda(k) \neq 0$ ). Оскільки при цьому  $\Re\lambda(k) < 0$ , то відповідні процеси є згасаючими і з



**Рис. 3.** Залежність  $k_{\max}$  від  $P$  при різних значеннях  $\varepsilon$  та  $\theta$ . Інші параметри є такими:  $c_0 = 0,5$ ,  $\varepsilon = 6$ ,  $x_v^0 = 0,1$ ,  $\bar{D} = 0,1$ ,  $\beta = 1,0$ ,  $\ell = 0,25$

плином часу реалізується лише одна нестійка мода з хвильовим числом, що відповідає максимуму  $\lambda(k)$ . За подальшого збільшення швидкості дефектоутворення (див. рис. 3,  $\varepsilon$  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. [11, 36–38]). У нашому випадку процеси відбору структур пов’язуються із радіаційним опроміненням за великих значень швидкостей набору дози.

Розглянемо далі характер зміни хвильового числа  $k_{\max}$  при збільшенні  $P$  за різних значень основних параметрів системи (див. рис. 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 (стрибоподібне) зростання  $k_{\max}$ , що означає формування просторових кластерів з обмеженою характерною довжиною – структуроутворен-

ня. Зменшення  $k_{\max}$  при зростанні  $P$  від нуля свідчить про те, що внаслідок генерування структурного безладу при опроміненні відбувається розмиття міжфазних меж, 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. [38–41]). 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 [9, 10, 18, 19], 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 моделюванні бінарної системи методами фазового поля та кінетичним Монте-Карло (див. [42–44]). Важливо, що при цьому існує певний інтервал для параметрів системи, зокрема  $\varepsilon$  та  $\theta$ , 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, збагачені на атоми сорту  $A$  та  $B$ , не виділяються внаслідок генерування та перемішування вакансій по всій системі. Порівнюючи суцільну та штрихову криві на рис. 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 (з більшим коефіцієнтом самодифузії атомів,  $D_B^* \gg D_A^*$ ). Із подальшим зростанням  $P$ , залежно від співвідношення параметрів взаємодії  $\varepsilon$  та  $\theta$ , 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 параметра взаємодії  $\theta$  приводить до звуження інтервалу реалізації гомогенного розподілу концентрації вакансій та розчину. При великих співвідношеннях між  $\theta$  та  $\varepsilon$  виникає зміна режимів розшарування та структуроутворення без реалізації гомогенних станів (пунктирна крива на рис. 3). Тут по-

ріг структуроутворення  $P_{c1}$  виникає істотно раніше порога фазового розшарування  $P_0$ . В інтервалі  $P_{c1} < P < P_0$  величина  $\lambda$  має два піки: перший (на малих  $k$ ) відповідає за розшарування; другий (на великих  $k$ ) — за структуроутворення (див. вставку на рис. 3). Однак, оскільки найбільш нестійка мода  $k_{\max}$  відповідає найбільшому максимальному значенню  $\lambda$ , 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.

#### 4. Числове моделювання

У подальших дослідженнях будемо чисельно розв'язувати систему рівнянь (5) у знерозміреному часі. Числове розв'язання системи диференціальних рівнянь (5) проводилося на квадратній ґратці  $L \times L$  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:  $\langle c(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0,5$ ,  $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle \equiv x_0 = 0,1$ . Межові 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  $\Delta t = 0,00015$ .

Типова картина еволюції системи при різних швидкостях дефектоутворення  $P$  подана на рис. 4 (верхній рядок відповідає полю концентрації розчину, нижній — концентрації нерівноважних вакансій). З рис. 4, а 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. 4, б) в системі на малих часових інтервалах спостерігається слабо 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 підвищеній швидкості  $P$  (див. рис. 4, в) 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 “твердій” фазі) та на межах поділу. Така картина пояснюється тим, що інтенсивність релаксації нерівноважних вакансій є більшою у фазі з більшим коефіцієнтом самодифузії атомів (“м'яка” фаза). Вакансії у “твердій” 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 анігілюють та виходять на стоки із більшою інтенсивністю. Цей ефект відповідає отриманій залежності стаціонарної концентрації нерівноважних вакансій від композиції розчину (див. рис. 1, а). Слід відзначити, що процеси структуроутворення відбуваються лише при підвищених швидкостях  $P$ , що відповідає лійнійому аналізу на стійкість.

Відповідно до отриманих числових даних можна проаналізувати процеси відбору структур на малих часових інтервалах. Для цього обчислюється двоточкова кореляційна функція  $\langle \delta c(\mathbf{r}, t) \delta c(\mathbf{r}', t) \rangle$  та знаходиться структурний фактор  $S(\mathbf{k}, t) = \int \langle \delta c(\mathbf{0}, t) \delta c(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r}$ , для якого проводиться сферичне усереднення за формулою:  $S(k, t) = N_k^{-1} \sum_{k < |\mathbf{k}| < k + \Delta k} S(\mathbf{k}, t)$ , де  $N_k$  — кількість кіл шириною  $\Delta k$ . Динаміку останнього за різних значень  $P$  подано на рис.5. Як впливає з рис. 5, а при малих  $P$  у системі спостерігається процес фазового розшарування: тут положення піка структурного фактора 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 різниться із попереднім випадком. Так, на рис. 5, б видно наявність декількох піків структурного фактора на різних часових зрізах. 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, в, що відповідає  $P = 0,5$ , але тут із часом зростає висота піка 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,



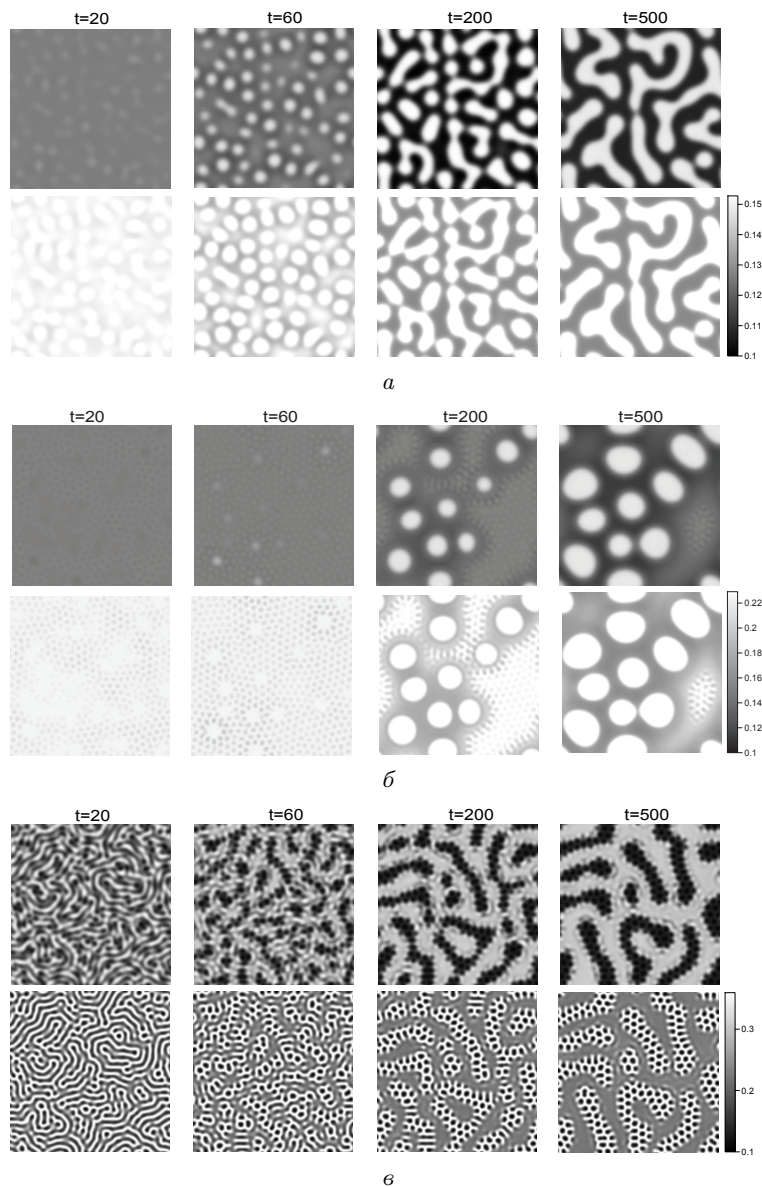


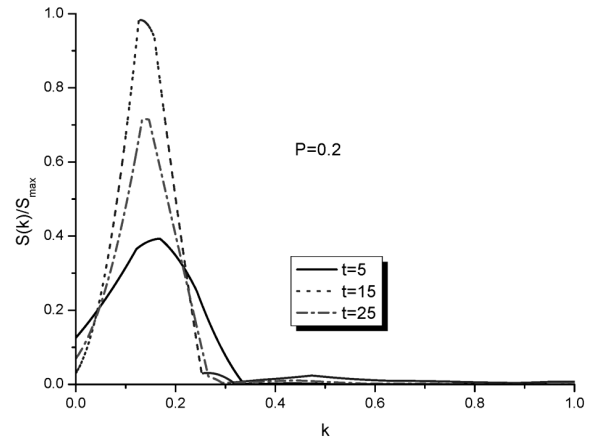
Рис. 4. Динаміка полів концентрації розчину та вакансій при  $\tilde{D} = 0,1$  та різних  $P$ :  $P = 0,2$  (а);  $P = 0,35$  (б);  $P = 0,5$  (в)

що було показано на рис. 3 при  $P = 0,5$ , де  $\Im\lambda \neq 0$ ,  $\Re\lambda > 0$ . З подальшим плином часу залишиться лише один пік, що відповідає хвильовому числу  $k_{\max}$ .

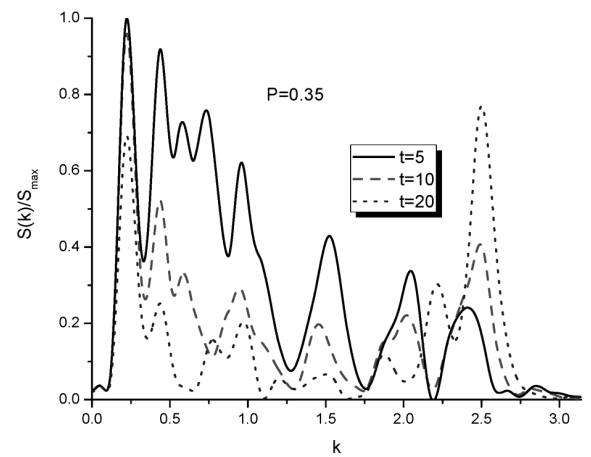
Розглянемо динаміку упорядкування, досліджуючи:  $\langle x_v(t) \rangle$ ,  $J_v(t) = \langle (\delta x_v(\mathbf{r}, t))^2 \rangle$ ,  $J_c = \langle (\delta c(\mathbf{r}, t))^2 \rangle$ . Перша величина є середнім значенням концентрації вакансій по системі (середнє значення концентрації розчину залишається 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 скупчень (структур, фаз), тобто про упорядкування початково гомогенної (розупорядкованої) системи. Відповідні часові залежності показано на рис. 4, а, б, в. Із отриманих залежностей  $\langle x_v(t) \rangle$  (див. рис. 4, а) ви-

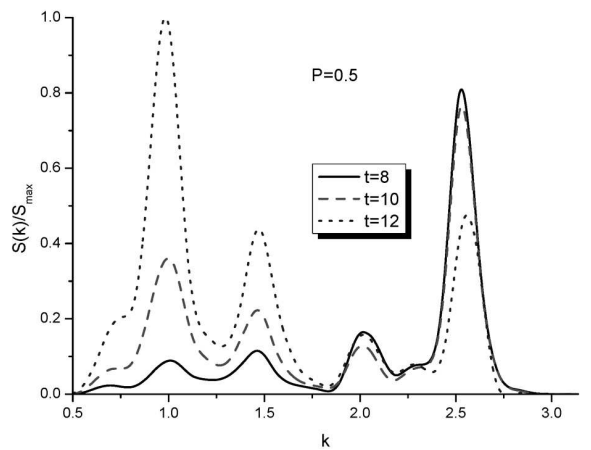
пливає, що стартуючи із рівноважної концентрації вакансій, спочатку спостерігається зростання (накопичення вакансій), потім вихід на стоки (швидке спадання) та уповільнений перехід до стаціонарного режиму (перерозподіл з виходом в область “м’якої фази” та/або формуванням структур). Залежно від значення  $P$  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. 4, б) маємо спочатку спадання параметра 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. 4, б). 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 стаціонарного 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 впливає з аналізу стійкості у лінійному наближенні та динаміки структурного фактора 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 параметра порядку  $J_c$ , зображену на рис. 4, в. 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  $\delta J_c$ , динаміка якої явно ілюструє осциляційні процеси відбору (див. вставку на рис. 4, в).



а



б



в

Рис. 5. Динаміка структурного фактора при різних  $P$  (початкові стадії):  $P = 0,2$  (а);  $P = 0,35$  (б);  $P = 0,5$  (в)

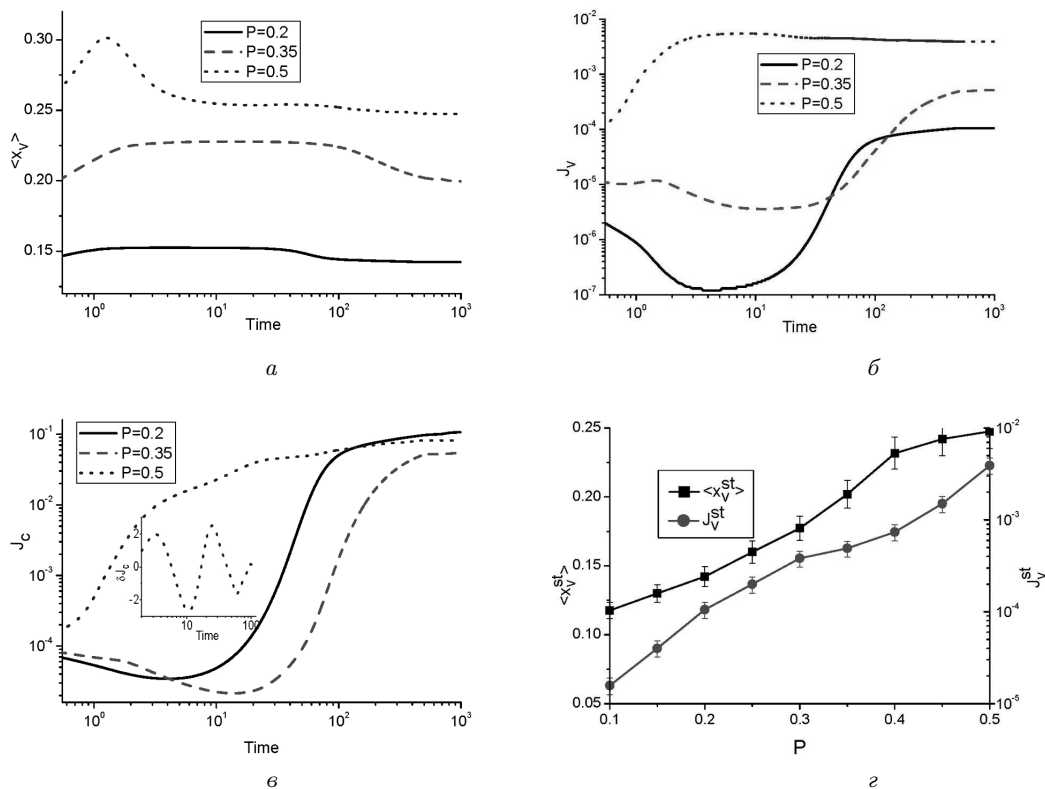


Рис. 6. Часові залежності: середньої концентрації вакансій  $\langle x_v \rangle$  (а), параметрів порядку  $J_v$ ,  $J_c$  (панелі (б) та (с)). Стаціонарні значення  $\langle x_v^{st} \rangle$  та  $J_v^{st}$  від  $P$  (д)

Вплив швидкості дефектоутворення на стаціонарні значення середньої концентрації вакансій та відповідного параметра порядку подано на рис. 4, з. 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 просторові нестійкості. Таке демпфування пов'язується, перш за все, із зворотним ефектом Кіркендала, коли нерівноважні вакансії уповільнюють процеси поділу фаз [45]. За подальшого зростання  $P$  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.

Проведемо аналіз еволюції функцій розподілу  $p(c, x_v; t)$  концентрації розчину та концентрації ва-

кансій при різних швидкостях набору дози. Відповідні залежності зображено на рис. 7. Загальний характер розподілу поля концентрації розчину є таким: на малих часах відбувається розмиття уні-modalного розподілу концентрації розчину в околі початкової концентрації  $c_0 = 0,5$ ; у подальшому цей розподіл стає бімодальним – випадіння двох фаз, збагачених на атоми сортів  $A$  та  $B$ . Залежно від набраної дози властивості такого розмиття та формування бімодального розподілу різняться лише у деталях. При цьому принципово відрізняються розподіли концентрацій вакансій при малих та великих  $P$ , що зображено на вставках на рис. 7. Так, при малих  $P$  (див. вставку на рис. 7, а) із уні-modalного розподілу формується бімодальний на великих часових інтервалах. Це означає, що в ході еволюції в системі виділяються області, збіднені та збагачені на вакансії. Така картина є характерною при швидкостях дефектоутворення, коли в системі ще спостерігаються процеси розшарування. При зростанні  $P$  (див. вставку на рис. 7, б), коли відбу-

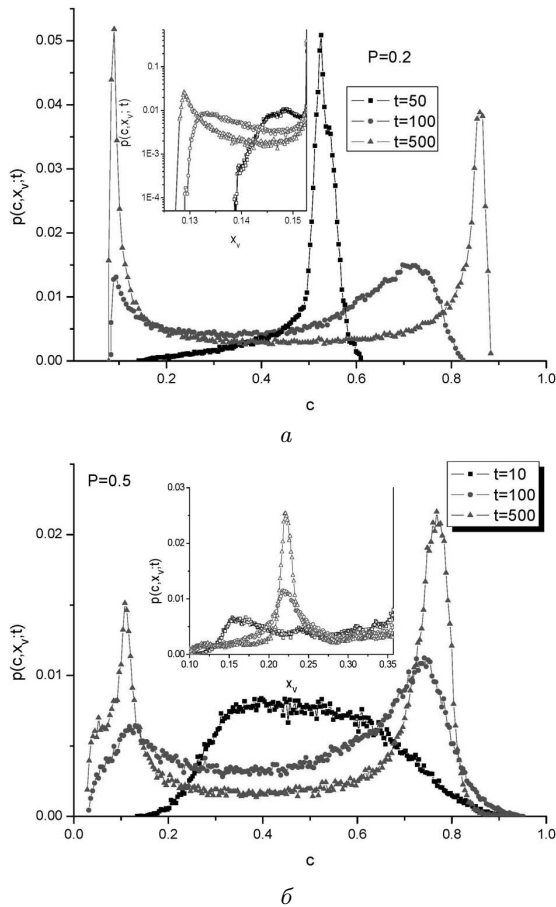


Рис. 7. Динаміка функції розподілу значень  $c$  та  $x_v$  при:  $P = 0,2$  (а);  $P = 0,5$  (б)

вається структуроутворення, навіть при малих часах початковий унімодальний розподіл вакансій є істотно розмитим і на великих часах трансформується в унімодальний в істотно широкому інтервалі значень концентрації вакансій порівняно із попередніми двома. Наявність єдиного піка на відповідному розподілі свідчить про випадіння фази зі структурами вакансій, які зосереджено у “твердій” фазі так, що існує лише слабе розмиття вакансій за значеннями в околі меж поділу фаз та в іншій фазі.

## 5. Висновки

У рамках узагальненої моделі перерозподілу нерівноважних вакансій у процесах спінодального розпаду бінарного твердого розчину, що зазнає сталої дії опромінення, досліджено вплив швидкості

дефектоутворення на характер самоорганізації дефектної структури.

Виявлено, що при зростанні швидкості дефектоутворення процес спінодального розпаду пригнічується залишковими нерівноважними вакансіями і трансформується у процес формування структур вакансій. При цьому, формування кластерів вакансій при великих швидкостях радіаційних пошкоджень супроводжується процесами відбору структур на початкових стадіях. Із проведеного дослідження динаміки упорядкування встановлено, що нерівноважний розподіл вакансій приводить до уповільнення процесів спінодального розпаду відповідно до зворотного ефекту Кіркендала. Зі статистичного аналізу розподілів нерівноважних вакансій у процесах спінодального розпаду та структуроутворення виявлено, що у першому випадку 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 скупчень у ламелях “твердої” фази та на межах поділу із розмиттям вакансій в ламелях іншої фази.

Автори сподіваються, що отримані теоретичні результати можуть бути використані для пояснення процесів спінодального розпаду бінарних систем (сплавів) та процесів утворення структур дефектів за різних умов опромінення та зможуть ініціювати відповідні експериментальні дослідження у цьому напрямку при розробці нових конструкційних матеріалів.

1. J.H. Evans, *Nature* **229**, 403 (1971).
2. S. Saass and B.L. Eyre, *Phil. Mag.* **27**, 1447 (1973).
3. P.B. Johnson, D.J. Mazey, and J.H. Evans, *Radiat. Eff.* **78**, 147 (1983).
4. J.E. Evans and D.J. Mazey, *J. Nucl. Mater.* **138**, 176 (1986).
5. A. Jostobns and K. Farrel, *Radiat. Eff.* **15**, 217 (1972).
6. J.O. Steigler and K. Farrel, *Scripta Metall.* **8**, 651 (1974).
7. В.Н. Воеводин, И.М. Неклодов, *Эволюция структурнофазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов* (Наукова думка, Київ, 2006).
8. D. Walgraef, *Spatio-Temporal Pattern Formation* (Springer, New York, 1996).
9. D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, and A.I. Bashtova, *Ukr. J. Phys.* **58**, 993 (2013).

10. D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, and A.I. Bashtova, *Radiat. Eff. Defects Solids* **169**, 418 (2014).
11. D. Kharchenko, V. Kharchenko, and I. Lysenko, *Centr. Eur. J. Phys.* **9**, 698 (2011).
12. D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, S.V. Kokhan, and I.O. Lysenko, *Ukr. J. Phys.* **57**, 1069 (2012).
13. G. Martin, *Phys. Rev. B* **30**, 1424 (1984).
14. C. Abromeit and G. Martin, *J. Nucl. Mater.* **271–272**, 251 (1999).
15. N.M. Ghoniem and D. Walgraef, *Model. Simul. Mat. Sci. Eng.* **1**, 569 (1993).
16. D. Walgraef, J. Lauzeral, and N.M. Ghoniem, *Phys. Rev. B* **53**, 14782 (1996).
17. P.A. Selischev and V.I. Sugakov, *Radiat. Eff.* **133**, 237 (1995).
18. V.O. Kharchenko and D.O. Kharchenko, *Eur. Phys. J. B* **85**, 383 (2012).
19. V.O. Kharchenko and D.O. Kharchenko, *Condens. Matter Phys.* **16**, 33001 (2013).
20. F.Kh. Mirzoev, V.Ya. Panchenko, and L.A. Shelepin, *Physics Uspekhi* **39**, 1 (1996).
21. L.A. Maksimov and A.I. Ryazanov, *Sov. Phys. JETP* **52**, 1170 (1980).
22. A.I. Olemskoi and A.Ya. Flat, *Phys. Solid State* **35**, 278 (1993).
23. V. Kharchenko and D. Kharchenko, *Phys. Rev. E* **89**, 042133 (2014).
24. J.W. Cahn and J.E. Hilliard, *J. Chem. Phys.* **28**, 258 (1958).
25. L.S. Darken, *Trans. AIME* **175**, 184 (1948).
26. A.M. Gusak, S.V. Kornienko, and G.V. Lutsenko, *Def. Diff. Forum* **264**, 109 (2007).
27. А.В. Назаров, К.П. Гуров, *ФММ* **37**, 496 (1974).
28. К.П. Гуров, А.М. Гусак, *ФММ* **59**, 1062 (1985).
29. А.М. Gusak, T.V. Zaporozhets, Yu.O. Lyashenko, S.V. Kornienko, M.O. Pasichnyy, and A.S. Shirinyan, *Diffusion-Controlled Solid State Reactions in Alloys, Thin Films and Nanosystems* (Wiley-VCH, Berlin, 2010).
30. N.V. Tyutyunnyk and A.M. Gusak, *Ukr. Fiz. Zh.* **57**, 629 (2012).
31. R. Bullough and R.C. Newman, *Rep. Prog. Phys.* **33**, 101 (1970).
32. F.Kh. Mirzoev, V.Ya. Panchenko, and L.A. Shelepin, *Techn. Phys. Lett.* **22**, No. 13, 28 (1996).
33. D.O. Kharchenko, S.V. Kokhan, and A.V. Dvornichenko, *Physica D* **238**, 2251 (2009).
34. D. Batogkh, M. Hildebrandt, F. Krischer, and A. Mikhailov, *Phys. Rep.* **288**, 435 (1997).
35. D.O. Kharchenko, S.V. Kokhan, and A.V. Dvornichenko, *Metallofiz. Noveish. Tekhnol.* **31**, 23 (2009).
36. P.K. Galenko, D. Kharchenko, and I. Lysenko, *Physica A* **389**, 3443 (2010).
37. D. Kharchenko, I. Lysenko, and P.K. Galenko, in *Stochastic Differential Equations*, edited by N. Halidias (Nova Science, New York, 2011), p. 97.
38. D.O. Kharchenko, I.O. Lysenko, and V.O. Kharchenko, *Usp. Fiz. Met.* **13**, 1001 (2012).
39. D.O. Kharchenko, I.O. Lysenko, and S.V. Kokhan, *Eur. Phys. J. B* **76**, 37 (2010).
40. D. Kharchenko, I. Lysenko, and V. Kharchenko, *Physica A* **389**, 3356 (2010).
41. D.O. Kharchenko, I.O. Lysenko, and V.O. Kharchenko, *Ukr. J. Phys.* **55**, 1225 (2010).
42. R.A. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2885 (2000).
43. R.A. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. B* **63**, 134111 (2001).
44. J.J. Hoyt and M. Naataja, *Phys. Rev. E* **83**, 174106 (2011).
45. A.D. Marwick, *J. Phys. F* **8**, 1849 (1978).

Одержано 06.05.15

Д.А. Харченко, В.А. Харченко, А.И. Баштова

САМООРГАНИЗАЦИЯ ВАКАНСИОННОГО АНСАМБЛЯ ПРИ СПИНОДАЛЬНОМ РАСПАДЕ БИНАРНЫХ СИСТЕМ, ПОДДАЮЩИХСЯ ПОСТОЯННОМУ ДЕЙСТВИЮ РАДИАЦИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Резюме

Рассмотрены процессы перераспределения неравновесных вакансий при спиновальном распаде бинарного твердого раствора, находящегося при постоянном действии облучения, в рамках обобщенной модели Кана–Хиллиарда, которая учитывает формирование структурного беспорядка в результате облучения. Выявлено, что с увеличением скорости дефектообразования процессы спиновального распада заменяются процессами формирования пространственных вакансионных структур. Установлено, что формирование кластеров вакансий сопровождается отбором структур. Исследована кинетика распада и структурообразования, статистические распределения полей концентрации раствора и концентрации вакансий при разных скоростях набора дозы облучения.

D.O. Kharchenko, V.O. Kharchenko, A.I. Bashtova

SELF-ORGANIZATION OF AN ENSEMBLE OF VACANCIES UNDER THE SPINODAL DECOMPOSITION OF BINARY SYSTEMS AT CONTINUOUS IRRADIATION

Summary

The redistribution processes of non-equilibrium vacancies under the spinodal decomposition in a continuously irradiated solid solution have been considered. The consideration is carried out in the framework of the generalized Cahn–Hilliard model, which makes allowance for the structural disorder formation under irradiation. As the defect production rate increases, the spinodal decomposition processes are found to transform into the processes of vacancy pattern formation. It is shown that the formation of vacancy clusters is accompanied by the pattern selection processes. The decomposition and patterning kinetics, as well as the statistical distributions of solute and vacancy concentrations at various dose rates are studied.