

PACS numbers: 05.10.Gg, 05.40.-a, 05.65.+b, 61.72.Bb, 61.80.Az, 64.60.-i, 81.30.Mh

Моделювання мікроструктурних перетворень у системах, підданих радіаційному впливу

Д. О. Харченко*, І. О. Лисенко*, В. О. Харченко**

**Інститут прикладної фізики НАН України,
вул. Петропавлівська, 58,
40030 Суми, Україна*

***Інститут фізики, Аугсбургський університет,
вул. Університетська, 1,
86135 Аугсбург, Німеччина*

Розвинуто формалізм для послідовного опису мікроструктурних перетворень і фазового розшарування у системах, що перебувають у сильно нерівноважних умовах, викликаних дією опромінення. Аналізу проведено в рамках методи фазового поля кристалу, що дає змогу проводити дослідження на просторових масштабах молекулярної динаміки, однак на часових інтервалах дифузійної динаміки. Виявлено умови перебігу мікроструктурних перетворень у періодичних однокомпонентних системах кристалічного типу за наявності конкуруювальних стохастичних потоків: термічно стимульованого та балістичного перемішування атомів. Аналізом поведінки систем на більш високому ієрархічному рівні для бінарних систем еквіатомового складу встановлено реверсивний характер перебігу процесу фазового розшарування. Для систем із несумірними часовими масштабами розповсюдження збурень, що характеризуються ефектами пам'яті, виявлено присутність процесів відбору структур за наявності флюктуацій довжин стрибків атомів, вибитих високоенергетичними частинками.

Formalism is developed for description of microstructure transformations and phase separation in systems under irradiation. Investigation is made within the scope of the crystal phase-field method. This approach allows one to simulate materials on the molecular-dynamics spatial scales but on the diffusive-dynamics temporal scales. Considering a model for a periodic one-component system driven by both competing stochastic fluxes—thermally-stimulated and external ballistic mixing fluxes of atoms, conditions of microstructure-transformations' appearance are determined. Analysis of the system on a mesoscopic level for a binary equiatomic system is performed. Reentrant character of phase-separation process is revealed. For systems with transient dynamics, for instance, with incommensurable time scales of propagation of disturbances, which are characterized by the memory effects, at presence of fluc-

tuations of lengths of jumps of the atoms knocked-on by high-energy particles, occurrence of pattern-selection processes is revealed.

Развит формализм для последовательного описания микроструктурных превращений и фазового расслоения в системах, пребывающих в сильно-неравновесных условиях, вызванных облучением. Анализ проведен в рамках метода фазового поля кристалла, который позволяет проводить исследование на пространственных масштабах молекулярной динамики, но на временных интервалах диффузионной динамики. Определены условия прохождения микроструктурных превращений в периодических однокомпонентных системах кристаллического типа при наличии конкурирующих стохастических потоков: термически стимулируемого и баллистического перемешивания атомов. При анализе поведения системы на более высоком иерархическом уровне для бинарных систем эквивалентного состава установлен реверсивный характер протекания процесса фазового расслоения. Для систем с несоизмеримыми временными масштабами распространения возмущений, которые характеризуются эффектами памяти, обнаружено присутствие процессов отбора структур при наличии флуктуаций длин прыжков атомов, выбитых высокоэнергетическими частицами.

Ключові слова: кристалічна система, балістична дифузія, шум, спиноподальний розпад, метода фазового поля кристалу.

(Отримано 24 лютого 2012 р.)

1. ВСТУП

Розвиток сучасної теорії конденсованого стану вимагає всебічного дослідження процесів упорядкування в системах, значно віддалених від рівноваги [1]. Останнім часом велику увагу в галузі теоретичної фізики конденсованого стану сконцентровано на дослідженні нерівноважних процесів микроструктурних перетворень, що відбуваються у матеріалах, підданих опроміненню високоенергетичними частинками (електронами, йонами). Такі системи є об'єктом для вивчення процесів структуроутворення, упорядкування–розупорядкування, фазового розшарування, аморфізації, тощо. Характер їх перебігу позначається на стійкості конструкційних матеріалів (металів та їх сплавів) щодо опромінення. Тому проблема стійкості фаз, що виникає внаслідок збудження атомової конфігурації, особливостей їх утворення завдяки зовнішньому впливу на систему стає все більш актуальною, оскільки її розв'язання уможливило виявити нові характеристики систем і відповідних процесів, що знаходять своє застосування не лише в реакторному матеріалознавстві, а й при прогнозуванні властивостей матеріалів, яких піддано опроміненню [2]. Першорядною задачею при цьому є виявлення характеру й особливостей впливу зовнішніх чинників на процеси утворення когерентних станів та микроструктурних перетворень

[3]. Важливим при такого роду дослідженнях є той факт, що розглядані системи перебувають у режимі підвищених температур з великими інтенсивностями флюктуацій та опромінюються потоком частинок з певним розкидом енергій, що спонукає до стохастичного характеру перерозподілу енергій в атомовій конфігурації. Саме це призводить до необхідності статистичного опису ефектів мікроструктурних перетворень у відповідних системах, що перебувають у сильно нерівноважних стохастичних умовах. Важливою особливістю процесів утворення когерентних станів у складних стохастичних системах є те, що флюктуаційні складові їх еволюції можуть призводити до виникнення макроскопічних фаз, що не реалізуються у безшумових (детерміністичних) умовах [4–6].

З'ясування механізмів, що призводять до мікроструктурних перетворень у конденсованих системах, підданих опроміненню, є важливою задачею сучасної теоретичної фізики. Це уможливило пояснити виникнення хемічного порядку при взаємодії опромінення з речовиною, встановити області керувальних параметрів, що описують процеси макроскопічного фазового розшарування, індукованого дією високоенергетичних частинок і виявити додаткові чинники впливу на процеси мікроструктурних перетворень. Одержана інформація про відповідні процеси може бути використана для аналізу стійкості матеріалів та прогнозування їх поведінки на макроскопічному рівні, де реалізуються процеси розпухання, утворення механічних дефектів типу тріщин, тощо. Велику кількість експериментальних спостережень за відповідними процесами при опроміненні матеріалів в основному описано у рамках середньопольових теорій та числового моделювання; окрім того, досліджувалися ефекти в матеріалах після зняття опромінення. Однак, важливими з теоретичної та практичної точок зору є дослідження, спрямовані на виявлення динаміки процесів утворення упорядкованих станів у таких системах при сталій дії опромінення. Цікавим питанням є встановлення впливу ефектів пам'яті, що описують зв'язок між рушійними силами і потоками в системі, з одного боку, та флюктуаційними силами, що моделюють вплив мікроскопічних процесів при описі системи на мезоскопічному рівні, з другого.

У даному огляді обговорюються способи дослідження кінетики нерівноважних фазових переходів у стохастичних системах зі збереженою динамікою, що викликані дією опромінення, та досліджується організуюча роль флюктуацій потоку. За мету огляду ставиться подання, обговорення та розвинення сучасних теоретичних уявлень про процеси мікроструктурних перетворень в однокомпонентних системах кристалічного типу та фазового розшарування у бінарних розчинах для випадку додаткового атермічного перемішування атомів системи, індукованого дією опромінення.

Структура даної роботи є наступною. У другому розділі проведе-

но аналізу літературних даних експериментальних спостережень стосовно радіаційних ефектів та представлено основні перспективні методи дослідження мікроструктурних перетворень у кристалічних системах, у бінарних стопах. Проілюстровано методи щодо адекватного подання поведінки кристалічної системи на двох ієрархічних рівнях опису, які відносяться до релаксації пружних напружень і дифузійної динаміки. Розглянуто методи аналітичного дослідження процесів упорядкування та фазового розшарування бінарних систем. Наведено способи опису впливу опромінення на поведінку конденсованих систем і зазначено області, в яких відомі теоретичні положення можуть бути узагальнені та розширені на випадок включення у розгляд внеску мікроскопічних процесів (флюктуацій або шумів).

Одним із завдань представленої роботи є опис нерівноважних фазових переходів зі зміною мікроструктури періодичних систем кристалічного типу, з аналізом впливу структурного безладу, індукованого дією опромінення, на характер перебігу процесів упорядкування в однокомпонентних системах. Тому у третьому розділі на основі методи фазового поля кристалу Гранта–Елдера, що враховує ефекти перерозподілу напружень при організації періодичного розподілу поля атомової густини, обговорюється стохастичний модель впливу взаємодії високоенергетичних частинок з атомами кристалу. Стохастичність такого процесу пов'язується з утворенням Френкелевих пар і збуджень атомової конфігурації внаслідок розкиду довжин вибитих атомів; вивчаються процеси мікроскопічних перетворень з утворенням когерентних структур, індукованих дією опромінення. Така аналіза ґрунтується на використанні теорії середнього поля та числового моделювання. Також досліджуються процеси відбору структур на початкових стадіях структуроутворення у випадку несумірних масштабів розповсюдження збурень, викликаних дією термічно стимульованого дифузійного потоку та балістичного потоку опромінення. Досліджуються ефекти конкуренції названих потоків і вплив їх статистичних характеристик на відповідні процеси просторової організації поля атомової густини.

У четвертому розділі проводиться опис просторового упорядкування на вищому ієрархічному рівні, де розглядаються ефекти перерозподілу композиційного поля (концентрації) бінарних систем (стопів) у процесах фазового розшарування. Із використанням припущення про балістичний характер радіаційно-стимульованої дифузії проведено узагальнення теорій Кана–Хілліярд–Кука та Мартанового підходу на випадок впливу опромінення на процеси розпаду бінарних систем еквіатомового складу. З припущенням наявності стохастичної компоненти потоку опромінення, обумовленої розкидом довжин стрибків вибитих атомів у каскадах, описано процеси розпаду на ранніх стадіях та проаналізовано картину роз-

паду на пізніх етапах еволюції. Показано, що, керуючи дисперсією довжин стрибків вибитих атомів, бінарну систему можна підтримувати у стані бінарного розчину (неупорядкованому стані) або у стані розділених фаз (упорядкованому стані), реалізуючи тим самим реверсивні процеси упорядкування. Показано, що в області фазового розшарування реалізується закон росту розмірів зерен Ліфшиця–Сльозова; вивчаються процеси відбору структур на початкових стадіях розпаду у системах із пам'яттю.

2. НЕРІВНОВАЖНІ ПРОЦЕСИ В МАТЕРІАЛАХ ПІД ДІЄЮ ОПРОМІНЕННЯ ТА МЕТОДИ ЇХ ОПИСУ

2.1. Радіаційно-стимульовані ефекти в опромінюваних матеріалах

Матеріали, що знаходяться під сталою дією опромінення є нерівноважними дисипативними системами, здатними до самоорганізації [2, 7]. Важливою задачею їх дослідження є виявлення керувальних параметрів, відповідальних за процеси самоорганізації, пов'язаних із структуроутворенням [8, 9], мікроструктурними перетвореннями [2], фазовими переходами та фазовим розшаруванням [10–12].

2.1.1. Мікроструктурні перетворення в об'ємі матеріалів

Процеси взаємодії високоенергетичних частинок (неutronів, йонів, електронів) з речовиною (атомами мішені), що відбуваються за підвищених температур в інтервалі від 350–600 К, призводять до проходження каскадів — зміщень атомів зі своїх положень, наслідком чого є формування структурного безладу. Окрім того, це призводить до посиленого хемічного змішування при стрибках вибитих атомів на певну довжину R та утворення зон хемічного безладу. Якщо, внаслідок пружних процесів взаємодії, атом металу одержує кінетичну енергію E_T вище порогової $E_d \cong 25$ еВ, то він вибивається зі свого положення, утворюючи Френкелеву пару, ансамбль яких формує структурний безлад. Було показано, що саме середня довжина стрибка $\langle R \rangle$ є основною характеристикою конкуруючих реакцій в опромінюваних стопах, що призводить до процесів самоорганізації мікроструктури стопів [8]. Експериментально вплив середньої довжини стрибка на утворення структур розглянуто при дослідженні тонких плівок Au–Cu [13] і Cu–Co [14].

У випадку опромінення електронами передана енергія не перевищує за порядком 100 еВ. Тому кількість вибитих атомів є малою, і Френкелеві пари формуються в ізоляції. При сталій дії опромінення матеріал перенасичується точковими дефектами, що сприяє збільшенню атомової рухливості. Деякі атоми при зміщенні зі сво-

їх положень можуть займати відповідні положення у кристалічній ґратниці. Це спричиняє хемічне змішування та хемічне розупорядкування стопів.

При опроміненні швидкими нейтронами або тяжкими йонами енергія передана атомам речовини перевищує порядок 1 кеВ, що сприяє утворенню Френкелевих пар, організація яких призводить до формування кластерів дефектів. Після закінчення каскаду (тривалістю 10^{-13} – 10^{-12} с) у кристалічній системі формуються ядра, збагачені на вакансії, та периферія, збагачена на міжвузлові атоми. При цьому велика кількість атомів (від сотень до кількох тисяч) замінюються іншими.

Дослідження процесів утворення Френкелевих пар у Cu та Ni методами молекулярної динаміки показали, що впродовж тривалості каскаду атом одержує енергію, взаємодіє з сусідами доки енергія не стане меншою за E_d [15–17]. За цей час густина, температура та кореляційні функції всередині каскаду відповідають рідкій фазі матеріалу. Одержана кількість Френкелевих пар відповідала оціночному співвідношенню $N_{FP} = E_T / (2E_d)$ [18] та узгоджувалася з експериментальними даними [19]. У випадку хемічно упорядкованих стопів такі каскади призводять до утворення зон хемічного безладу. На основі результатів моделювання методами молекулярної динаміки з'ясовано, що при енергіях первинно вибитих атомів, що перевищують 1 кеВ, реалізуються області, де параметер далекого порядку стає безмежно малим. Такі дослідження проводилися для стопів Cu_3Au , Ni_3Al [20]. Виявлено, що розупорядковані зони мають лінійний розмір 3,2 нм для Ni_3Al та 4,4 нм для Cu_3Au при енергіях поширення каскаду 5 кеВ. Розмір таких областей зростає при збільшенні енергії первинно вибитого атому.

В останні п'ятдесят років було експериментально показано, що під впливом опромінення упорядковані стопи здатні проявляти різного роду ефекти самоорганізації. Починаючи з 1949 р., було встановлено ефекти розупорядкування упорядкованого стопу Cu_3Au , опромінюваного нейтронами з енергіями 0,5 МеВ при температурі 310 К. Встановлено, що крива залежності електричного опору від потоку опромінення зростає до значень, що відповідають розупорядкованому стопу [21]. Аналогічні ефекти спостерігалися у стопах Ni_3Mn , Nb_3Al , Zr_3Al [22–24]. Проведені численні дослідження показали, що процеси розупорядкування відбуваються при опроміненні за низьких температур.

Ще однією добре відомою особливістю опромінюваних стопів є їх упорядкування внаслідок дії опромінення за підвищених температур. Такі процеси спостерігалися для стопів Cu_3Au при опроміненні нейтронами та електронами [25, 26]. Крім описаних переходів типу лад–безлад, є ще ряд особливостей, які проявляють себе під впливом опромінення — це і виникнення аморфної фази [27], і стійке

співіснування кристалічної та аморфної фаз [28], розчин та сегрегація виділень [29]. Ще одним цікавим ефектом є зміна характеру фазового переходу, як, наприклад, при опроміненні стопу заліза FeAl з інтенсивністю 1 МеВ замість переходу першого роду реалізувався перехід другого роду [30].

При дослідженні процесів фазового розшарування бінарних систем підданих радіаційному впливу було встановлено, як теоретично, так і експериментально, що, на відміну від звичайних (див. рис. 1, *a*), в опроміненних матеріялах такі процеси відбуваються реверсивним чином. Так, для бінарної системи Ga–Sb фазове розшарування спостерігалось у фіксованому інтервалі температур від 363 К до 49 К при електронному опроміненні з енергіями 75 кеВ (див. рис. 1, *б*) [31]. Було виявлено, що такий процес реалізується при енергіях до декількох десятків кеВ та пригнічується із зростанням енергії електронів. Теоретично та шляхом числового моделювання ефект фіксованого інтервалу температур для фазового розшарування було виявлено у роботах [10–12] (див. рис. 1, *в*). Однак, автори цих робіт здебільшого досліджували стаціонарний режим, тоді як динаміку відповідних процесів не було досліджено у повній мірі. Відомо, що за певних зовнішніх умов дисипативні системи здатні до процесів самоорганізації у так звані дисипативні структури [7]. Велика кількість експериментальних спостережень за утворенням дисипативних структур у металах при опроміненні показала, що структурні дефекти організуються у кластери періодичних «стінок» дефектів, ґратниць пустот та газонаповнених пор. Кластери «стінок» дефектів спостерігалися, наприклад, у Ni, Cu та Zr при опроміненні швидкими нейтронами, протонами та важкими йонами [33]. Ґратниці пор були виявлені у кристалах Mo та інших матеріялах при рі-

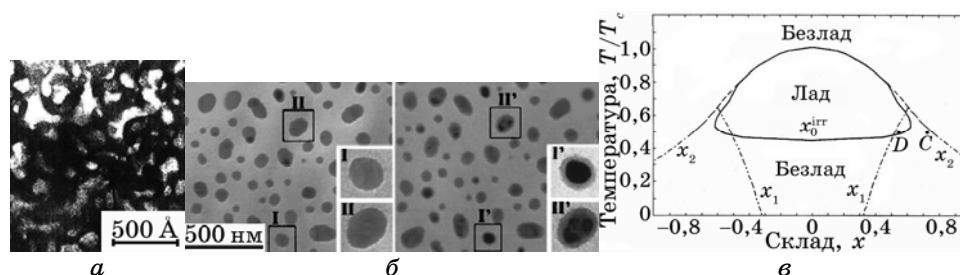


Рис. 1. *a* — фазове розшарування у системі Ni_3Fe (рисунок взято з роботи [32]); *б* — типовий приклад структурної зміни у наночастинках GaSb до та після опромінення електронами з енергіями 75 кеВ при температурі 49 К (двофазна суміш представляє кристалічну сурму обмежену рідким галієм; рисунок взято з роботи [31]); *в* — фазова діаграма обмеженої області температур фазового розшарування при опроміненні бінарного розчину в координатах концентрація–температура (рисунок взято з роботи [12]).

зних дозах опромінення [2]. Спостерігалася також надгратниці газонаповнених пор. Симетрія надгратниці пор має симетрію кристалу-матриці. Було встановлено, що період надгратниці є величиною порядку сотень Онгштремів, а радіус пор — десятків Онгштремів.

Відомо також, що проявом самоорганізації в кристалах при опроміненні є утворення періодичних структур дислокацій [2]. Виникнення періодичних ґратниць радіаційних дефектів спостерігалось у цирконійових стопах з 10%-м вмістом Nb. Як зазначено у [3], при йонному опроміненні стопів на основі заліза, ніклю та кристалів Ti, Zr кінетичні фазові переходи виявляються лише у певній області температур і лише при опроміненні. Після вимкнення опромінення без зміни температури кристал повертається до свого початкового стану. Це свідчить про те, що досліджувані структури є дисипативними.

Експериментальні дані та результати числового моделювання показали, що при атомовому перемішуванні, індукваному йонним бомбардуванням, в дво- та багатокомпонентних матеріалах можли-

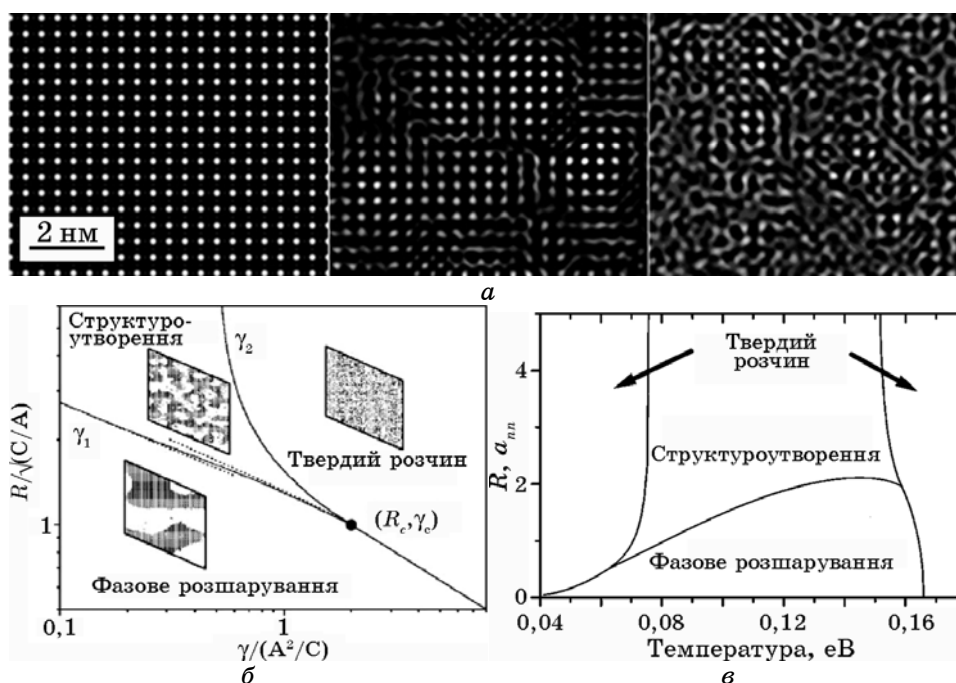


Рис. 2. Моделювання зміни мікроструктури при опроміненні: *a* — зміна мікроструктури Ni_3Al (рисунок взято з роботи [9]) при збільшенні швидкості балістичних стрибків; *б* — динамічна фазова діаграма в координатах «середня довжина зміни позицій атомів (R)—інтенсивність опромінення (γ)»; *в* — динамічна фазова діаграма в координатах «середня довжина зміни позицій атомів—температура» (рисунок взято з роботи [35]).

ве утворення нанокомпозитів. Наприклад, такі процеси спостерігалися для системи Ag–Cu при опроміненні важкими йонами (Ne^+ , Ar^+ , Kr^+) з енергіями до 1 МеВ. Результати були підтверджені методами молекулярної динаміки та Монте-Карло [8, 34]. Було встановлено, що основним критерієм для такої самоорганізації є величина середньої довжини стрибка вибитого атома $\langle R \rangle$. Було встановлено динамічну фазову діаграму, яка ілюструє процес утворення дисипативних структур: формування нанорозмірної кристалічної (упорядкованої) фази, зануреної у неупорядковану фазу (див. рис. 2) [9]. Виявлено, що процеси переходу від твердого розчину до фази з наноструктурами та до процесів фазового розшарування можуть бути контрольовані швидкістю балістичних стрибків, середньою довжиною стрибків вибитих атомів і температурою. При цьому виявлено, що як процеси фазового розшарування, так і процеси виникнення упорядкованого стану можуть перебігати реверсивним чином [35].

2.2. Теоретичні підходи щодо опису мікроструктурних перетворень

2.2.1. Мультимасштабний підхід числового моделювання

При дослідженні процесів, викликаних дією опромінення, окрім теоретичних підходів, представлених нижче, особливу увагу останнім часом приділяють використанню метод числового моделювання, що самоузгодженим чином мають враховувати результати дослідження на різних рівнях опису досліджуваної системи. Загальну схему багаторівневого моделювання представлено на рис. 3. До таких рівнів опису відносять розрахунки з перших принципів (*ab initio*), де встановлюється оптимальна атомова структура досліджуваного матеріалу або стопу, обчислюються густина станів, енергетичні, фононні та оптичні спектри. Цей рівень квантово-механічних розрахунків, що відповідає часовим інтервалам $\cong 10^{-15}$ – 10^{-14} с та нанорозмірним об'єктам, ґрунтується на чисельному розв'язанні стаціонарного рівняння Шрединґера у наближенні теорії функціоналу густини та псевдопотенціалу, методі лінеаризованих приєднаних пласких хвиль та наближенні узагальненого градієнту.

За одержаними результатами, що відповідають низьким температурам, у подальшому використовуються підходи молекулярної динаміки, де опис системи проводиться на часових інтервалах $\cong 10^{-13}$ – 10^{-10} с та просторах від нано- до мікрометрів в області кімнатної та підвищених температур.

Результати *ab initio* уможливають встановити вигляд потенціалу міжчастинкової взаємодії. У рамках такої методи розглядається система з N частинок маси m_i з імпульсами p_i , положення яких задаються координатами r_i ; $i = 1, \dots, N$. Енергія такої системи задається Гамільтоніаном

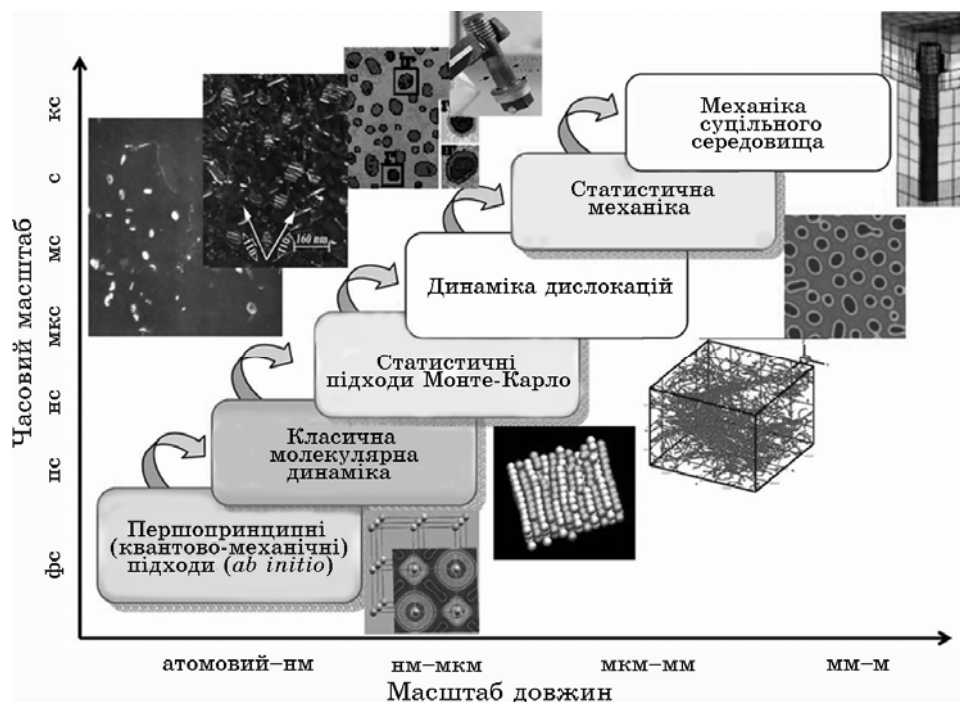


Рис. 3. Загальна схема мультимасштабного моделювання поведінки високотемпературних матеріалів.

$$H_N = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + V(r_1, \dots, r_N), \quad (1)$$

де $V(r_1, \dots, r_N)$ — потенціал міжчастинкової взаємодії. Опис системи ґрунтується на числовому розв'язанні Гамільтонових рівнянь. Такі обчислення уможливають здебільшого встановити фізику явищ, що відбуваються на мікрорівні, як-то: рух атомів, перерозподіл вакансій, рух дислокацій, тощо. При використанні такого підходу обчислюються просторові кореляційні функції, за якими встановлюється вигляд структурного фактора, положення основного піку, його висота, тощо. Хоча аналіза метод комп'ютерного моделювання і показала ефективність молекулярної динаміки, досі залишаються деякі суттєві обмеження — це малі розміри досліджуваної системи ($\cong 10^9$ атомів) та малий час дослідження ($\cong 10^8$ с). Найбільш критичними такі обмеження є у випадку, коли час дослідження є мезоскопічним, а відповідні довжини — атомовими. Таким чином, виникла необхідність створення метод огрубленого опису для моделювання мікроструктури матеріалу.

На підґрунті результатів молекулярної динаміки на вищому іє-

рархічному рівні використовуються методи кінетичного Монте-Карло та Метрополісові методи [36], сутність яких полягає у знаходженні не положення частинок, а ймовірності реалізації положень атомів чи формування атомових структур $P(\mathbf{x})$. У загальній математичній інтерпретації, розглядаючи систему у дифузійних просторово-часових масштабах, задачу зводять до розв'язання основного кінетичного рівняння:

$$\frac{\partial P(\mathbf{x})}{\partial t} = \sum_{\mathbf{x}'} [W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \mathbf{x})P(\mathbf{x} - \mathbf{x}') - W(\mathbf{x}, \mathbf{x} - \mathbf{x}')P(\mathbf{x})], \quad (2)$$

де $W(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \mathbf{x})$ — ймовірність мікроскопічних переходів з конфігурації $\mathbf{x} - \mathbf{x}'$ до стану \mathbf{x} , що визначаються часом стрибка атома та енергетичним бар'єром [36]. Безпосереднє використання такого підходу для дослідження опромінюваних стопів викладено у роботі [9]. Слід зазначити, що у дифузійній границі замість кінетичного рівняння (2) можна скористатися підходами стохастичної динаміки на основі Ланжевенового рівняння, що відповідає (2).

За результатами про стійкість кристалічних структур у подальшому використовуються методи дислокаційної динаміки, що уможливають виявити перерозподіл лінійних дефектів, утворення меж зерен, тощо. На вищому ієрархічному рівні дослідження розглядуваної системи проводиться методами статистичної механіки, де описуються статистичні ансамблі просторових утворень, вивчаються макроскопічні характеристики матеріалів, формулюються феноменологічні підходи. Нарешті, самий верхній рівень моделювання уможливує описати розвиток геометрії дефектних утворень на макрорівні (тріщини, тощо). Тут використовуються методи скінченних елементів.

2.2.2. Фазово-польові підходи опису мікроструктурних змін

Дослідження кристалічних систем, в яких в упорядкованому стані можлива поява періодичних структур, проводиться на основі фазово-польового підходу [37]. У рамках узагальнення такого підходу кристалічна система описується полем атомової густини матеріалу, розподіленої періодично за структурою кристалу. Такий підхід відомий в літературі як метода фазового поля кристалу (ФПК) [38–40]. В рамках цієї методи можна дослідити еволюцію атомової густини системи з дисипативною динамікою за мінімізацією функціоналу вільної енергії. Перевага ФПК перед методами молекулярної динаміки полягає у вилученні швидких ступенів вільності; тому поведінка системи описується на мезоскопічних часових інтервалах. Цей підхід уможливує описати пружні та пластичні деформації кристалів. Його використовують для дослідження динаміки

дефектів та дислокацій у кристалах [38], динаміки розповсюдження меж зерен та ін.

Модель ФПК для чистих матеріалів. Для конструювання функціоналу вільної енергії у рамках ФПК важливими є дані про положення головного піку структурного фактора, його висоти, що досліджується методами молекулярної динаміки або методами Монте-Карло.

Далі застосовується огрублений опис результатів молекулярної динаміки, де замість положень частинок (атомів) використовується мікроскопічне поле густини $\rho_m(r) = \sum_{i=1}^N \delta(r - r_i(t))$. Величиною, що описує поведінку системи, є поле густини, огрублене у часі масштабу молекулярної динаміки τ : $\rho(r) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt \rho_m(r, t)$, яке є періодичним.

Як показано в роботах [41–43], періодичність поля густини уможливило врахувати ефекти пружності системи, орієнтацію складних кристалів, нуклеацію і рух дислокацій. У загальному вигляді функціонал вільної енергії є таким:

$$\frac{F}{T} = \int d\mathbf{r} \left\{ \rho(\mathbf{r}) \ln \frac{\rho(\mathbf{r})}{\rho_0} - (\rho(\mathbf{r}) - \rho_0) \right\} - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \prod_{i=1}^n d\mathbf{r} (\rho(\mathbf{r}_i) - \rho_0) C_n(\mathbf{r}), \quad (3)$$

де ρ_0 — початкова густина (зазвичай відповідає точкам на лінії ліквідусу на фазовій діаграмі (ρ, T)), T — температура. У випадку бінарної системи кореляційну функцію $C_n(\mathbf{r}_0)$ можна розкласти в ряд в околі $k=0$: $C = C_0 + C_2 k^2 + C_4 k^4 + \dots$. При розвиненні у ряд густини вільної енергії в околі ρ_0 після деяких перетворів і введення заміни функціонал вільної енергії з просторовою взаємодією Свіфта–Хогенберга [44] набуває вигляду [40]

$$F[x(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{1}{2} x(\mathbf{r}) \left[\alpha + \lambda (q_0^2 + \nabla^2)^2 \right] x(\mathbf{r}) + \frac{g}{4} x(\mathbf{r})^4 \right\}, \quad (4)$$

де нова величина $x = (\rho - \rho_0) / \rho_0$; безрозмірнені параметри системи є такими: $\alpha = T(1/S(k_m) - a^2/4b) / \rho_0$, $\lambda = T\Gamma / \rho_0 k_m^4$, $g = k_b T b / 3\rho_0^3$; $q_0 = k_m$ — період кристалічної ґратниці, що відповідає положенню піка структурного фактора $S(k = k_m)$; a, b — параметри розвинення в ряд густини функціоналу (3), $\Gamma = S(k_m) - S(0)$ задає висоту піка структурного фактора відносно $S(k = 0)$ [42, 46, 47]. Для моделю чистого заліза у роботі [40] було виконано оцінку значень параметрів: $T = 1833$ К, $k_T = 1,04 \cdot 10^{-11}$ м²/Н, $C_0 = -10,9153$, $C_2 = 2,6$ Å², $C_4 = -0,1459$ Å⁴, $k_m = 2,985$ Å⁻¹, $1/S(k_m) = 1 - C(k_m) = 0,332$, $a = 0,6917$, $b = 0,08540$.

Для періодичних (кристалічних) систем перша мода, що втрачає стійкість, характеризується ненульовим хвильовим числом k_m , а рівноважна конфігурація, що визначається мінімізацією функціоналу вільної енергії, відповідає періодичним просторовим структурам. Функціонал вільної енергії для методи ФПК, яка враховує всі

вищезазначені властивості, можна одержати з класичної теорії охолодження [38]. Як було показано раніше [38, 39, 42, 47], при розвиненні функціоналу вільної енергії у ряд за градієнтними членами коефіцієнт при $|\nabla x|^2$ має бути від'ємним. Це призводить до нестійкості, яка компенсується врахуванням наступного члену ряду ($\propto |\nabla^2 x|^2$). В результаті функціонал вільної енергії набирає вигляду $F = \int d\mathbf{r} \{f(x) + (-\beta|\nabla x|^2 + \gamma|\nabla^2 x|^2)\}$, де β і γ — феноменологічні константи. Зазначимо, що наведений модель враховує пружні властивості системи. Дійсно, якщо поле x подати у вигляді пласкої хвилі $x = A \sin(2\pi r/a)$ з $\beta = 1/\pi^2$, $\gamma = 8/a_0^2$ і підставити його у F , то одержуємо вираз $F/a \cong a^{-1} \int d\mathbf{r} f(x) - A^2/a_0^2 + (4A^2/a_0^4)\epsilon^2$, де $\epsilon \equiv a - a_0$. Функціонал вільної енергії набуває свого мінімального значення за умови $a = a_0$. Таким чином, a_0 задає рівноважний стан періодичної системи. Можна переписати вільну енергію у вигляді Гукового закону для опису пружності (третій доданок у останньому виразі для F/a); тоді малі відхилення від рівноваги відбуваються пружньо [42] і при цьому сталі β і γ є об'ємним модулем кристалу та константою ґратниці відповідно [38]. Таким чином, для функціоналу вільної енергії кристалу маємо вираз у вигляді [42] $F = \int d\mathbf{r} \{f(x) + xL(\nabla^2)x/2\}$, де густина вільної енергії з оператором просторової взаємодії Свіфта–Хогенберґа [44] мають наступні вирази: $f(x) = \alpha \Delta T x^2/2 + ux^4/4$, $L(\nabla^2) = \beta(q_0^2 + \nabla^2)^2$, де ΔT — різниця температур, яка задає вигляд густини вільної енергії; α , u і β — феноменологічні сталі.

Таким чином, маючи функціонал вільної енергії, динаміку поля атомової густини задамо рівнянням непереривності:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_D, \quad \mathbf{J}_D = -\nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \xi_D, \quad (5)$$

де дифузійний потік \mathbf{J}_D задається як регулярною ($-\nabla \delta F / \delta x$), так і стохастичною (ξ_D) компонентами; $\nabla \cdot \equiv \text{div}$. Фазова діаграма для такої системи ілюструє, що зміна керувального параметра або початкової концентрації може призводити до появи різного роду структур [47]: смугових та гексагональних структур, гомогенного стану, та областей співіснування. Однак вплив шумів на таку поведінку періодичних систем не досліджено в повній мірі.

Варто зазначити, що рівняння (5) описує поле x лише на дифузійних часових інтервалах, тоді як більш швидкими («миттєвими») процесами пружних релаксацій напружень понехтувано. Для усунення цієї неточності у роботі [47] запропоновано ввести складову, що враховує дану швидку динаміку включенням інерціальної складової до рівняння непереривності. Таким чином, модифікова-

не ФПК-рівняння набуває вигляду:

$$\tau_D \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \frac{\partial x}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \xi_D \right), \quad (6)$$

де τ_D задає масштаб проходження «миттєвих» процесів. Такий вигляд рівняння еволюції уможлиблює дослідити атомарні перетворення на довших часових інтервалах, ніж характерні для молекулярної динаміки, та врахувати «миттєві» пружні взаємодії. Характерно, що така інерціально складова враховує обмеженість швидкості розповсюдження збурень $v_D = l_D/\tau_D$, де l_D — дифузійна довжина. Отже, при $\tau_D = 0$ швидкість розповсюдження фронту є нескінченною, тоді як при $\tau_D \neq 0$ вона є обмеженою, що відповідає реальній фізичній картині.

Модель ФПК для бінарних стопів. У роботі [38] показано, що наведений формалізм може бути узагальнений на випадок бінарних систем, що складаються з атомів сорту A і B з густинами ρ_A й ρ_B відповідно. У такому разі опис системи ґрунтується на використанні повної густини $\rho = \rho_A + \rho_B$ і локальної концентрації $c = \rho_A/\rho$. Тоді при нехтуванні кристалічним порядком узагальнений вираз (3) зводиться до функціоналу вільної енергії, що визначається полем концентрації:

$$\frac{F}{T} = \int d\mathbf{r} \left(c \ln c + (1 - c) \ln(1 - c) + \omega c(1 - c) + \frac{\beta |\nabla c|^2}{2} \right), \quad (7)$$

де ω — енергія упорядкування, β — параметер просторової взаємодії, що є другою похідною Фур'є-перетвору енергії міжатомової взаємодії $v(k)$ ($\beta = v''(k=0)/2$) і задає масштаб кореляції концентрації. Розвиваючи в ряд густину функціоналу (7) в околі концентрації $\bar{c} = 1/2$, одержуємо вираз: $F[x] = \int d\mathbf{r} \{ -\varepsilon x^2/2 + x^4/4 + (\beta/2)(\nabla x)^2 \} d\mathbf{r}$, де $x = c - \bar{c}$, ε — керувальний параметер, що характеризує переохолодження стопу. Такий формалізм широко використовується при аналізі процесів фазового розшарування в теорії Кана-Хілліярд-Кука для спиnodального розпаду бінарних систем. При розгляді окремо кристалічних властивостей вважається, що концентрація є сталою, і опис системи ґрунтується на вищенаведених положеннях ФПК чистих матеріалів. У загальному випадку функціонал вільної енергії залежить від полів густини та концентрації, динаміка яких є збереженою.

Добре відомо, що системи, яких можна вважати квазірівноважними, описуються в рамках гіпотези локальної рівноваги, де принципову роль відіграють процеси на дифузійних масштабах. В рамках цієї гіпотези вважається, що, хоча система є нерівноважною, в безмежно малих об'ємах встановлюється локальна термодинамічна рівновага [7]. Однак, при значному відхилі від рівноваги ця гіпоте-

за порушується, наприклад, при швидких процесах спинодального розпаду та швидкоплинних процесах переходу від нестійкого до метастабільного та стабільного станів [21]. Важливими тоді стають ефекти пам'яті, що описують зв'язок між рушійними силами та потоками в системі. У такому разі еволюція поля концентрації задається рівнянням непереривності $\partial x / \partial t = -\nabla \cdot \mathbf{J}$, де дифузійний потік \mathbf{J} має певний час релаксації τ_D , такий, що замість звичайного Фікового закону маємо його узагальнення введенням функції пам'яті $M(t, t')$, тобто $\mathbf{J} = -\int_0^t dt' M(t, t') \nabla \delta F / \delta x(\mathbf{r}, t')$. У випадку експоненційно спадної функції пам'яті еволюція поля концентрації описується гіперболічним рівнянням типу (6), де час релаксації потоку задає час розповсюдження фронту збурень в системі. Характерно, що гіперболічне рівняння (6) допускає хвильові розв'язки, що можуть описувати відбір структур при організації кристалічної структури (мікроструктурних перетвореннях) або у процесах спинодального розпаду бінарних систем. Дослідження останнього випадку наведено у роботі [48].

Модель балістичної дифузії радіаційно-стимульованого атомового перемішування. При теоретичному дослідженні бінарних стопів, підданих дії опромінення, вперше Мартаном було показано, що вплив опромінення можна описати уведенням у розгляд потоку додаткового атермічного перемішування, викликаного лише переміщеннями атомів зі своїх положень (балістичною дифузією) [10]. Пізніше цю ідею було використано при конструюванні мікроскопічної теорії упорядкування [11, 12]. Суть запропонованого положення полягала у використанні рівняння непереривності для поля концентрації бінарного розчину, де дифузійні потоки було розділено на дві складові, що описували термічно активовану (стимульовану) дифузію і дифузію атермічного перемішування: $\mathbf{J}_{\text{tot}} = \mathbf{J}_D + \mathbf{J}_e$, де перший член описує звичайну дифузію з коефіцієнтом $D_{\text{th}} = D_0 \exp(-E_a / T)$ і енергією активації, яка зводиться до енергії міграції вакансій, а другий доданок визначає переміщення атомів внаслідок впливу опромінення. Ефективний коефіцієнт дифузії задавався потоком опромінення ϕ , перерізом розсіяння σ_r , що визначає число атомів, які змінили свої позиції через одиницю дози опромінення, та середньою довжиною стрибка вибитого атома $\langle R \rangle$, тобто $\mathbf{J}_e = -D_e \nabla x$, $D_e = \phi \sigma_r \langle R \rangle^2$. При цьому вважалося, що вибитий атом переміщується не лише у позиції найближчих сусідів, але й у дальші сусідні позиції. Також вважалося, що такий потік не спричиняє температурних збурень, а призводить до радіаційно-стимульованого переміщення атомів, тобто він описує процеси зіткнень високоенергетичних частинок з атомами середовища і тому є балістичним, а відповідна дифузія — балістичною. У рамках середньопольового формалізму було встановлено, що при описі системи ефективною вільною енергією,

що враховує ефекти балістичної дифузії у рамках швидкісної теорії, яка задає еволюцію вакансій і міжвузлових атомів за наявності опромінення, ефективна температура системи зростає внаслідок дії опромінення: $T_{\text{ef}} = T(1 + D_e/D_{\text{th}})$. Цей Мартанів критерій було перевірено методами Монте-Карло [35, 49, 50].

При дослідженні процесів фазового розшарування бінарних розчинів ідея балістичної дифузії набула розвитку у роботах Абромайта (див., наприклад, [12]). При цьому було застосовано статистичний підхід, який враховував адитивні флюктуації поля концентрації та поля параметра далекого порядку стопу. Але, як відомо, такі флюктуації, що моделюються білим шумом, дають лише статистичну картину явища.

З використанням експериментальних спостережень та числового моделювання авторами робіт [8] проведено апроксимацію розподілу за довжинами стрибків вибитих атомів та запропоновано середньопольовий модель для представлення балістичної дифузії щодо опису процесів фазового розшарування та структуроутворення у бінарних системах.

У роботі [51], на відміну від попередніх досліджень, на прикладі лінійного дифузійного моделю було показано, що із врахуванням збурення атомової конфігурації при утворенні структурного безладу внаслідок дії опромінення коефіцієнт дифузії можна вважати таким, що складається з регулярної та стохастичної частин: $D_e \rightarrow D_e(\mathbf{r}, t) = D_e^0 + \xi(\mathbf{r}, t)$. При цьому стохастична складова $\xi(\mathbf{r}, t)$ описує флюктуації температури та концентрації точкових дефектів. Якщо коефіцієнт балістичної дифузії є випадковою величиною, як у просторі, так і у часі, то автоматично враховується нелокальність процесу — атоми здійснюють блукання на віддалі, які перевищують розміри перших декількох координаційних сфер, що принципово відрізняє такий процес дифузії від звичайного. При дослідженні було виявлено, що регулярна та стохастична компоненти такого потоку мають протилежні напрямленості і конкурують між собою. Останнє є наслідком кореляційних властивостей стохастичної компоненти потоку.

Із наведеного випливає, що поведінка системи, яку піддано радіаційному впливу, де два дифузійні потоки загалом мають стохастичні властивості, може бути описана Ланжевеновим рівнянням загального вигляду:

$$\frac{\partial x(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = f(x(\mathbf{r}, t), \boldsymbol{\alpha}, \nabla) + \sum_m g_m(x(\mathbf{r}, t), \nabla) \xi_m(\mathbf{r}, t), \quad (8)$$

де детерміністична сила $f(x(\mathbf{r}, t), \boldsymbol{\alpha}, \nabla)$ впливає з визначення варіаційної похідної від функціоналу вільної енергії вихідної системи і залежить від вектора (набора) керувальних параметрів $\boldsymbol{\alpha}$. Другий член враховує флюктуаційні сили, кожна з яких характеризується

амплітудою g_m ; ξ_m — випадковий процес/поле, що моделює події (локальні збудження), які відбуваються на мікроскопічному рівні (стохастичне атомове перемішування).

У рамках стандартних положень теорії стохастичних полів зі збереженою динамікою, дослідження динаміки на початкових стадіях у лінійній аналізі на стійкість проводиться відносно структурного фактора $S(k, t)$ як Фур'є-образу двоточкової кореляційної функції поля $x(\mathbf{r}, t)$. Він може бути зіставлений з експериментальними даними по розсіянню Рентгенових променів. Дослідження нелінійних процесів у таких складних системах проводиться з використанням метод числового моделювання. Аналітичне дослідження стохастичних систем зі збереженою динамікою у стаціонарному випадку ґрунтується на використанні положень Вейссової теорії середнього поля, яку було розвинуто у роботах [5, 52, 53]. Для цього спочатку система подається на дискретній ґратниці з характерним розміром комірки l так, що поле всередині i -тої комірки $x_i = \sum_{\alpha} s_{\alpha}$, задається сумою Ізінґових змінних $s_{\alpha} \in [-1, 1]$, які описують ймовірності заняття комірки атомами. Далі одержується ефективно рівняння Фоккера–Планка, що описує еволюцію функціоналу розподілу поля x , яке фактично має відповідати рівнянню (2) [5, 6, 54, 55, 56]. Подальше дослідження полягає у ефективній заміні просторових (дискретних) операторів введенням середнього поля η (наприклад, $\Delta x \rightarrow (x - \eta)$, $(\nabla x)^2 \rightarrow (x - \eta)^2$, тощо), що описує втрату симетрії шуканої стаціонарної функції розподілу. При описі систем, що формують структури у періодичних системах, ця теорія знайшла подальший розвиток у роботах [57, 58]. Однак, основні зусилля було сконцентровано на дослідженні систем із незбереженою динамікою та без врахування балістичної дифузії.

3. РАДІАЦІЙНО-СТИМУЛЬОВАНЕ ФОРМУВАННЯ ВПОРЯДКОВАНИХ СТРУКТУР В ОДНОКОМПОНЕНТНИХ СИСТЕМАХ

Використовуючи теорію ФПК, запропоновану Грантом та Елдером [42, 46, 47], що враховує ефекти пружності у розподілі атомової густини, можна описати процеси структуроутворення (виникнення атомового порядку) у періодичних (кристалічних) системах однокомпонентного складу. Основну увагу при цьому зосередимо на конкуренції процесів термічного перемішування атомів та перемішування внаслідок балістичної дифузії, викликаной дією опромінення високоенергетичними частинками. У рамках розвинутої далі теорії ФПК для систем зі стохастичними дифузійними потоками проводиться аналіза часової та стаціонарної картини утворення дисипативних структур внаслідок мікроструктурних перетворень. Спочатку розглянуто використання стандартного підходу, основа-

ного на застосуванні наближення Фікової дифузії, коли дифузійні потоки вважаються стаціонарними. Аналітичне та чисельне моделювання для такого класу систем уможливорює пояснити картину утворення просторового порядку у кристалічних системах та проаналізувати вплив зовнішнього потоку опромінення на характер упорядкування. Далі розглядається узагальнений модель структуроутворення, коли часові масштаби зміни термічно стимульованого дифузійного потоку та балістичного потоку різняться. Це уможливорює провести детальну аналізу відповідних процесів на мікроскопічному та мезоскопічному рівнях опису системи.

3.1. Структуроутворення у періодичних системах зі стохастичними Фіковими потоками

На основі представлення Фікової дифузії розглянуто процеси формування просторового кристалічного порядку у періодичних системах за наявності потоку атермічного перемішування. Проведено аналізу поведінки системи на початкових стадіях її еволюції та розвинуто теорію середнього поля для аналізу стаціонарної поведінки системи [59].

3.1.1. Фазово-польове представлення кристалічної системи

Розглянемо клас періодичних (кристалічних) систем, які описуються скалярним полем атомової густини $x(\mathbf{r}, t)$, динаміка якого є збереженою, тобто виконується умова $\int d\mathbf{r} x(\mathbf{r}, t) = \text{const}$. За формалізмом фазового поля кристалу, який ґрунтується на підході функціоналу густини, поле x визначається як відносна різниця між поточною густиною $\rho(\mathbf{r}, t)$ та наперед заданою початковою ρ_0 , тобто $x \equiv (\rho - \rho_0)/\rho_0$ [42, 46, 47].

У d -вимірному просторі динаміка поля $x(\mathbf{r}, t)$ задається рівнянням неперервності:

$$\partial_t x = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{tot}}, \quad (9)$$

де \mathbf{J}_{tot} — повний дифузійний потік. Оскільки кристалічна система знаходиться під зовнішнім впливом, що відіграє роль опромінення високоенергетичними частинками, далі вважатимемо, що повний потік складається з двох компонент: перша задає внутрішній (звичай, термічно стимульований дифузійний) потік \mathbf{J}_D , друга виникає в результаті зовнішнього впливу — опромінення (балістичний потік \mathbf{J}_e). Тому для повного потоку маємо вираз $\mathbf{J}_{\text{tot}} = \mathbf{J}_D + \mathbf{J}_e$. Основна увага далі приділяється дослідженню конкуренції внутрішнього та зовнішнього потоків у процесах мікроструктурних перет-

ворень у моделю однокомпонентної кристалічної системи.

Для розгляду особливостей поведінки системи в умовах, наближених до реальних, припустимо, що потоки, окрім регулярної, мають стохастичну складову. З урахуванням цього, термічно підтримуваний потік складається з регулярної та випадкової частин, тобто $\mathbf{J}_D = \mathbf{J}_D^d + \mathbf{J}_D^s$. У загальному випадку Фікової дифузії для нерівноважних процесів термічно стимульований потік задається виразом

$$\mathbf{J}_D = -M\nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \sqrt{M}\xi(\mathbf{r}, t), \quad (10)$$

де M — рухливість, F — функціонал вільної енергії. Стохастична складова потоку описується введенням Ланжевенового джерела $\xi(\mathbf{r}, t)$, яке моделює термічні флюктуації. Він задовольняє флюктуаційно-дисипаційній теоремі [60, 61] та має Гавсові властивості:

$$\langle \xi(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(\mathbf{r}, t)\xi(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\sigma^2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'), \quad (11)$$

де σ^2 — інтенсивність шуму, що пропорційна температурі теплової бані T , виміряної в енергетичних одиницях.

У найпростішому випадку для зовнішнього потоку скористаємося Фіковим законом $\mathbf{J}_e = -D_e^0\nabla x$, де D_e^0 — ефективний «коефіцієнт дифузії», який описує атермічне перемішування атомів, викликане зовнішнім впливом [10]. Таке подання зовнішнього потоку описує процеси балістичної дифузії атомів системи. Їх можна порівняти з турбулентністю (постійним підтриманням структурного безладу), викликаного взаємодією енергетичних частинок з атомами. У рамках стандартного формалізму опису балістичної дифузії величина D_e^0 пропорційна перетину дефектоутворення σ_r , потоку бомбардувальних частинок ϕ та квадрату середньої довжини $\langle R \rangle^2$ стрибків вибитих атомів кристалу [10, 12, 35, 49, 50]. У припущенні про стохастичність потоку бомбардувальних частинок, де високоенергетичні частинки мають розкид за імпульсами (енергіями), можна вважати, що ефективний коефіцієнт дифузії має як регулярну, так і нерегулярну складову, тобто $D_e^0 = D_e + \zeta(\mathbf{r}, t)$, де $\zeta(\mathbf{r}, t)$ — випадкова компонента, яка моделює флюктуації потоку опромінення [62]. Таким чином, зовнішній потік також складається з регулярної та випадкової компонент, $\mathbf{J}_e = -(D_e + \zeta(\mathbf{r}, t))\nabla x$ [51]. Варто зазначити, що стохастична складова наділена наступними властивостями:

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(\mathbf{r}, t)\zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D_e\sigma_e^2 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; r_c)\delta(t - t'), \quad (12)$$

де σ_e^2 — інтенсивність зовнішнього шуму. Наявність величини D_e у кореляторі шуму (12) свідчить про те, що випадкова складова виникає лише у випадку дії зовнішнього джерела. Кореляційну функцію $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ визначимо у вигляді:

$$C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\sqrt{2\pi}r_c)^{-d} \exp\{-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 / (2r_c^2)\}, \quad (13)$$

де r_c — радіус кореляції зовнішніх флюктуацій (у випадку $r_c \rightarrow 0$ зовнішній шум $\zeta(\mathbf{r}, t)$ стає некорельованим). Оскільки величина D_e пропорційна квадрату середньої довжини стрибка вибитого атому, то інтенсивність зовнішнього шуму пов'яжемо з дисперсією довжини таких стрибків, тобто $\sigma_e^2 = \langle (\delta R)^2 \rangle / \langle R \rangle^2$. Радіус кореляції зовнішніх флюктуацій має порядок середньої довжини стрибка $\langle R \rangle$. У подальшому розглянемо найпростіший випадок, коли r_c і σ_e^2 — незалежні величини.

Для періодичних (кристалічних) систем, яких розглядатимемо нижче, функціонал вільної енергії оберемо у вигляді [38, 39, 42, 47]

$$F = \int d\mathbf{r} \left(f(x) + \frac{1}{2} x L(\nabla^2) x \right), \quad (14)$$

де густина вільної енергії з оператором просторової взаємодії Свіфта-Хогенберга [44] мають такі вирази, відповідно:

$$f(x) = \frac{\alpha \Delta T}{2} x^2 + \frac{u}{4} x^4, \quad L(\nabla^2) = \beta(q_0^2 + \nabla^2)^2, \quad (15)$$

де ΔT — різниця температур, яка задає вигляд густини вільної енергії; α , u і β — феноменологічні сталі.

У загальному випадку для рухливості оберімо апроксимацію

$$M(x) \cong \frac{M_0}{1 + \tilde{\alpha} x^2}, \quad (16)$$

де M_0 і $\tilde{\alpha}$ — позитивні сталі; $\tilde{\alpha}$ задає швидкість затухання флюктуацій при переході з розрідженого $x = 0$ до щільного $x \neq 0$ стану. Апроксимація (16) забезпечує збільшення рухливості (флюктуацій) в областях з малою густиною та, відповідно, зменшення рухливості (флюктуацій), в областях з підвищеними значеннями густини [45].

В результаті на основі рівняння непереривності (9) одержимо стохастичне рівняння еволюції для збереженого поля [11]:

$$\partial_t x = \nabla \cdot M \left[\nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \frac{D_e}{M} \nabla x \right] + \nabla \cdot \sqrt{M} \xi + \nabla \cdot \zeta \nabla x. \quad (17)$$

Для подальшого розгляду доцільно перейти до безрозмірних величин:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} q_0, \quad x' = x \sqrt{u/\beta q_0^4}, \quad \varepsilon = \alpha \Delta T / \beta q_0^4, \quad t' = M_0 \beta q_0^6 t, \quad \sigma'^2 = u T q_0^{d-4} / \beta^2, \\ \alpha' = \tilde{\alpha} u / \beta q_0^4, \quad M' = (1 + \alpha' x'^2), \quad F' = F / F_0, \quad D_e' = D_e / M_0 \beta q_0^4. \quad (18)$$

Керувальний параметер ε пов'язаний з внутрішньою інтенсивністю

шуму σ^2 наступним чином, $\varepsilon = \theta - 1$ з $\theta = (T' - T'_c) / T'_c$, де T'_c — критична температура, від якої залежить зміна модальності функції $f(x)$; $\sigma'^2 = \theta$, $uq_0^d / \alpha\beta = 1$.

Диференціюючи функціонал вільної енергії і підставляючи одержаний вираз у (17), приходимо до рівняння параболічного типу:

$$\partial_t x = \nabla \cdot M \left[\left(\partial_{xx}^2 f + \frac{D_e}{M} \right) \nabla x + \nabla L(\nabla^2) x \right] + \nabla \cdot \sqrt{M} \xi + \nabla \cdot \zeta \nabla x. \quad (19)$$

З урахуванням позначення для перенормованої густини вільної енергії $\phi(x)$, з

$$\partial_{xx}^2 \phi = \partial_{xx}^2 f + \frac{D_e}{M}, \quad (20)$$

перепишемо Ланжевеніві рівняння (19) у вигляді

$$\partial_t x = \nabla \cdot M \left[\partial_{xx}^2 \phi \nabla x + \nabla L(\nabla^2) x \right] + \nabla \cdot m \xi + \nabla \cdot \zeta \nabla x, \quad (21)$$

де $M \equiv m^2$. Таким чином, стохастичне динамічне рівняння (21) уможлиблює описати періодичні (кристалічні) системи за наявності термічно стимульованого потоку та зовнішнього (атермічного) потоку, викликаного дією опромінення, в умовах флюктуацій кожного з них.

3.1.2. Стійкість лінеаризованої системи параболічного типу

Дослідимо стійкість неупорядкованого гомогенного стану з $x = 0$, що відповідає максимуму густини вільної енергії $f(x)$. Оскільки розглядувана система має властивості збереженої динаміки, основну інформацію про її поведінку буде нести не перший статистичний момент, а структурний фактор — Фур'є-образ двоточкової кореляційної функції. Динамічне рівняння для структурного фактора має вигляд:

$$\frac{dS(k, t)}{dt} = -\frac{2\alpha\theta k^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} S(\mathbf{q}, t) + \frac{2k^2 D_e \sigma_e^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} C(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) S(\mathbf{q}, t) - 2k^2 \omega(k) S(k, t) + 2\theta k^2. \quad (22)$$

При цьому закон дисперсії є таким:

$$\omega(k) = \varepsilon + D_e + (1 - k^2)^2 + \alpha\theta - D_e \sigma_e^2 C(0) k^2 + D_e \sigma_e^2 [\nabla^2 C(|r|)]_{r=0}, \quad (23)$$

$$[\nabla^2 C(|r|)]_{r=0} < 0.$$

Рівняння (22) задає еволюцію структурного фактора поблизу порога, де поле густини є малим, що уможлиблює використати лінійну

апроксимацію.

З одержаного закону випливає, що зовнішній потік призводить до перенормування керувального параметра так, що поведінка системи тепер визначається ефективним його значенням

$$\varepsilon_{ef} = \theta(1 + \alpha) - 1 + D_e + D_e \sigma_e^2 [\nabla^2 C(|r|)]_{r=0}. \quad (24)$$

Очевидно, що при $\varepsilon_{ef} < 0$ збурення гармонік в околі $k_0 = 1$ зростають, результатом чого є формування періодичних структур. Як впливає з наведеного виразу, при $D_e = 0$ критичне значення температури $\theta_{c0} = 1/(1 + \alpha)$, нижче якого в системі проходить упорядкування, зворотно-пропорційно залежить від сталої α — швидкості спадання флюктуацій в околі неупорядкованого стану. У випадку наявності потоку опромінення $D_e \neq 0$, причім вважається, що всі високоенергетичні частинки мають однакові значення енергії ($\sigma_e^2 = 0$); тоді критичне значення температури зменшується при зростанні потоку опромінення, тобто $\theta_{cD} = (1 - D_e)/(1 + \alpha)$. Якщо частинки у потоці опромінення мають розкид за енергіями (імпульсами) ($\sigma_e^2 \neq 0$), то, враховуючи, що $[\nabla^2 C(|r|)]_{r=0} < 0$, стохастична складова потоку \mathbf{J}_e призводить до порушення стійкості, зменшуючи значення ефективного керувального параметра.

Таким чином, регулярна і стохастична складові потоку опромінення \mathbf{J}_e мають протилежний вплив на динаміку системи, що узгоджується з результатами Мартанової теорії середнього поля для детерміністичних систем [10] та аналізою поведінки систем зі стохастичним потоком опромінення [51].

Із закону дисперсії знаходимо критичні значення хвильових чисел $k \in (k_c^{(-)}, k_c^{(+)})$, які обмежують область існування нестійких мод:

$$(k_c^{(\pm)})^2 = 1 + \frac{1}{2} \left(D_e \sigma_e^2 C(0) \pm \sqrt{D_e \sigma_e^2 C(0) [4 + \sigma_e^2 C(0)] - 4\{\varepsilon + D_e + \alpha\theta - D_e \sigma_e^2 |\nabla^2 C(|r|)]_{r=0}\}} \right). \quad (25)$$

При таких значеннях хвильових чисел фактор підсилення $R(k) = -k^2 \alpha(k)$ набуває нульових значень (рис. 4, а). Максимум функції $R(k)$ досягається при $k = k_m^{(\pm)}$, де

$$(k_m^{(\pm)})^2 = \frac{2}{3} + \frac{1}{3} \left(D_e \sigma_e^2 C(0) \pm \sqrt{1 + D_e \sigma_e^2 C(0) [4 + D_e \sigma_e^2 C(0)] - 3\{\varepsilon + D_e + \alpha\theta - D_e \sigma_e^2 |\nabla^2 C(|r|)]_{r=0}\}} \right), \quad (26)$$

$k_m^{(+)}$ — значення хвильового числа для найбільш нестійкої моди. Залежності $k_c^{(\pm)}(\sigma_e^2)$ та $k_m(\sigma_e^2)$ зображено на рис. 4, б (суцільна та штрихова криві відповідно). Як бачимо, зі зростанням інтенсивнос-

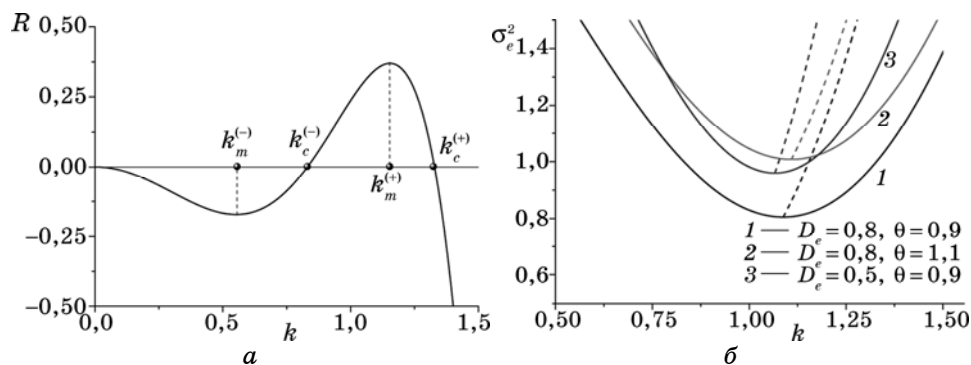


Рис. 4. *a* — фактор підсилення при різних значеннях параметрів системи при $\alpha = 0,5$, $\theta = 0,9$, $D_e = 0,8$, $\sigma_e^2 = 1,0$, $r_c = 0,7$; *б* — критичні значення хвильового числа (суцільні лінії) та хвильові числа для найбільш нестійких мод (штрихові лінії) при $\alpha = 0,5$, $r_c = 0,7$.

ти шуму σ_e^2 , значення нестійкої моди також зростає. При високих температурах і фіксованому значенні D_e збільшується критичне значення σ_e^2 , тоді як збільшення D_e спонукає до упорядкування при меншій інтенсивності шуму σ_e^2 .

При $k_c^{(+)} = k_c^{(-)}$ реалізується перша нестійка мода; це можливе при

$$\theta_0(1 + \alpha) = \frac{D_e \sigma_e^2 C(0)[4 + D_e \sigma_e^2 C(0)]}{4} + D_e \sigma_e^2 |\nabla^2 C(r)|_{r=0} - D_e + 1. \quad (27)$$

Хвильове число для першої нестійкої моди залежить лише від інтенсивності зовнішнього шуму та радіуса кореляцій флюктуацій, тобто $k_1 = \sqrt{1 + D_e \sigma_e^2 C(0)} / 2$.

Значення параметрів системи, за яких можлива поява першої нестійкої моди, зображено на рис. 5. Як бачимо, за низьких температур θ та інтенсивностей шуму σ_e^2 стійкість порушується лише за малих значень кореляційного радіуса r_c . При збільшенні σ_e^2 нестійкі моди починають зростати незалежно від величини радіуса кореляції r_c .

Таким чином, стохастичність призводить до появи в системі нестійких мод навіть за температур $\theta > 1$.

Прослідкуємо за динамікою структуроутворення на ранніх стадіях.

Розв'язки рівняння (22) зображено на рис. 6, *a* для різних часових зрізів. З часом єдиний пік $S(k)$ реалізується в околі найбільш нестійкої моди k_m , а його висота зростає, що свідчить про проходження процесів упорядкування в системі. Поведінка структурного фактора при різних значеннях температури та інтенсивності зов-

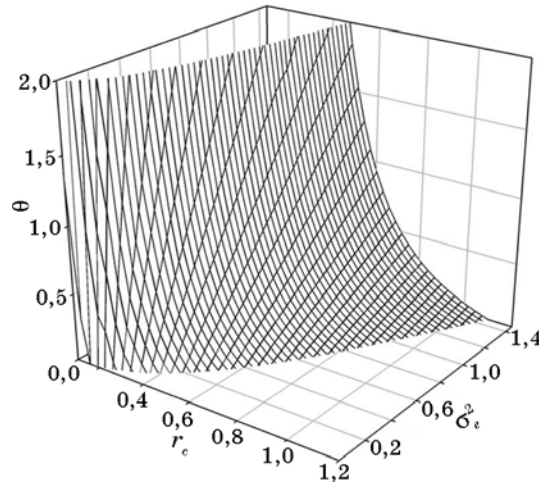


Рис. 5. Критичні значення температури, при яких з'являється перша нестійка мода k_1 при $D_e = 0,5$, $\alpha = 0,5$.

нішнього шуму представлено на рис. 6, б. З нього видно, що за підвищених температур ($\theta > 1$) в системі можливе упорядкування (порівняйте суцільну та пунктирну криві).

Дія зовнішнього шуму сприяє упорядкуванню на ранніх стадіях, підвищуючи максимум структурного фактора (порівняйте суцільну та штрихову лінії), тобто структури мають бути явно вираженими при більших значеннях інтенсивності зовнішнього шуму.

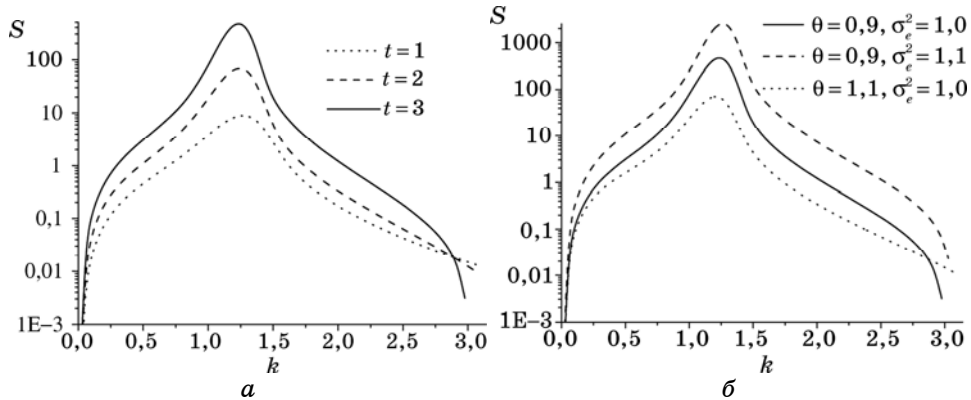


Рис. 6. а — динаміка структурного фактора; б — поведінка структурного фактора при різних значеннях параметрів системи при $t = 3$. Значення параметрів для рисунку а: $\theta = 0,9$, $\alpha = 0,5$, $D_e = 0,8$, $\sigma_e^2 = 1,0$, $r_c = 0,7$; для рисунку б: $\alpha = 0,5$, $D_e = 0,8$, $r_c = 0,7$, $t = 3$.

3.1.3. Індуковані шумом мікроструктурні перетворення

Розглянемо особливості поведінки системи у стаціонарному випадку, поклавши $t \rightarrow \infty$. Оскільки статистичний опис у такому часовому інтервалі ґрунтується на використанні функції розподілу поля густини, то основне завдання полягає у знаходженні такої функції розподілу та її застосуванні для опису мікроструктурних перетворень.

Рівняння Фоккера–Планка системи з двома шумами. У рамках стандартного підходу з метою уникнення розбіжностей, пов'язаних з використанням дельта-функцій, здійснюється перехід до дискретного простору, де замість континуального поля розглядається відповідний набір величин на просторовій ґратниці. Тоді функціонал густини розподілу поля у певний момент часу подається у вигляді [5, 54, 65]

$$P([x], t) = \left\langle \prod_{i=1}^{N^d} \rho_i(t) \right\rangle \equiv \langle \rho(t) \rangle, \quad \rho_i(t) = \overline{\delta(x_i(t) - x_i)}_{IC} \quad (28)$$

згідно з лемою Ван Кампена [66], де $\overline{\dots}_{IC}$ — усереднення за початковими умовами, а $\langle \dots \rangle$ — усереднення за флюктуаціями; індекси у польових змінних нумерують точки дискретного простору. На основі стохастичного Ліувіллевого рівняння визначимо рівняння еволюції функції $\rho(t)$:

$$\partial_t \rho = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\dot{x}_i \rho). \quad (29)$$

Підставляючи вирази для відповідних часових похідних з рівняння (22) та усереднюючи за шумом, одержуємо:

$$\begin{aligned} \partial_t P &= \quad (30) \\ &= - \frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \nabla_{ij}^L M_j \left[\nabla_{jl}^R \frac{\partial F}{\partial x_i} + \frac{D_e}{M_j} \nabla_{jl}^R x_i \right] \right\} P - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\langle \nabla_{ij}^L m_j \xi_j(t) \rho \rangle + \langle \Delta_{ij} x_j \zeta_j(t) \rho \rangle \right]. \end{aligned}$$

Корелятори у другій частині обчислюємо за теоремою Новікова [64]. При $l = 1$ маємо:

$$\begin{aligned} \langle \nabla_{ij}^L m_j(t) \xi_j(t) \rho \rangle &= \theta \int_0^t dt' \delta_{jk} \delta(t-t') \left\langle \frac{\delta \nabla_{ij}^L m_j(t) \rho}{\delta \xi_k(t')} \right\rangle, \\ \langle \Delta_{ij} x_j \zeta_j(t) \rho \rangle &= D_e \sigma_e^2 \int_0^t dt' C_{|j-k|} \delta(t-t') \left\langle \frac{\delta \Delta_{ij} x_j \rho}{\delta \zeta_k(t')} \right\rangle. \end{aligned} \quad (31)$$

Враховуючи позначення $g_{ij} = \{(\nabla_L)_{ij} m_j, \Delta_{ij} x_j\}$, $\lambda = \{\xi, \zeta\}$, для останнього множника маємо

$$\frac{\delta g_{ij} \rho(t)}{\delta \lambda_k(t')} = - \sum_l g_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta x_l(t)}{\delta \lambda_k(t')} \Big|_{t=t'} \rho. \quad (32)$$

За формальним розв'язком Ланжевенового рівняння шукана функція набуває вигляду:

$$\frac{\delta x_l(t)}{\delta \xi_k(t')} \Big|_{t=t'} = \nabla_{lk}^L m_k, \quad \frac{\delta x_l(t)}{\delta \zeta_k(t')} \Big|_{t=t'} = \Delta_{lk} x_k. \quad (33)$$

В дискретному просторі рівняння Фоккера–Планка для загальної густини ймовірності P набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \partial_t P = & - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\nabla_{ij}^L M_j \left[\nabla_{jl}^R \frac{\partial F}{\partial x_l} + \frac{D_e}{M_i} \Delta_{ij} x_j \right] \right) P - \\ & - \theta \frac{\partial}{\partial x_i} \nabla_{ij}^L m_j \frac{\partial}{\partial x_j} \nabla_{ji}^R m_i P + D_e \sigma_e^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \Delta_{ij} x_j \frac{\partial}{\partial x_l} C_{|j-k|} \Delta_{kl} x_l P, \end{aligned} \quad (34)$$

де використано зв'язок між ліво- та правостороннім ґрадієнтними операторами.

Наближення середнього поля. На підґрунті одержаного рівняння Фоккера–Планка можна використати теорію середнього поля, що уможливить проаналізувати упорядкування в системі у стаціонарному режимі. Відомо, що стандартний Вейссів підхід для систем зі збереженою динамікою не може бути застосований безпосередньо, однак його розвинення для такого класу систем, проведене у роботах [7, 53, 67], уможливлює адекватно перейти до стандартних визначень теорії молекулярного поля. Оскільки теорія середнього поля може бути застосована при розгляді одночастинкової густини ймовірності при інтегруванні за рештою степенів вільності, то далі перейдемо до рівняння для одночастинкової густини.

Така густина ймовірності одержується у стандартний спосіб — інтегруванням повної густини ймовірності за всіма змінними, окрім x_i : $P_i(t) = \int \left[\prod_{k \neq i} dx_k \right] P$. Тоді приходимо до рівняння у вигляді

$$\frac{\partial P_i(t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \Delta_{ij} \langle M_j \rangle P_i(t), \quad (35)$$

де

$$M_j = M_j \left[- \frac{\partial f}{\partial x_j} - L_{(js)} x_s - \frac{D_e x_j}{M_j} \right] - \theta m_j \frac{\partial}{\partial x_j} m_j + D_e \sigma_e^2 x_j \frac{\partial}{\partial x_n} \Delta_{mn} C_{|j-n|} x_n. \quad (36)$$

У стаціонарному випадку за відсутності потоку ймовірності се-

редне $\langle M_j \rangle$ задовольняє умові

$$\Delta_{ij} \langle M_j \rangle P_s(x_i) = 0, \quad (37)$$

де P_s — невідома стаціонарна функція розподілу.

Для систем, де просторова взаємодія задається оператором Свіфта–Хогенберга [44, 57, 58, 68], модуляція поля x у точці \mathbf{r}' , пов'язана з точкою \mathbf{r} , задається анзацем $x(\mathbf{r}') = A(k^*) \sum_{k^*} \cos[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]]$, де сума береться за хвильовими числами k^* , а всі моди припускаються такими, що мають однакову вагу $A(k^*)$. Вплив оператора L на анзац описано в роботах [57, 58, 68]. Таким чином, у нашому випадку одержуємо:

$$Lx(\mathbf{r}) = -D_1 \left[n(k^*) A(k^*) - x(\mathbf{r}) \right],$$

$$D_1 = \left[\left(\frac{2d}{l^2} - 1 \right)^2 + \frac{2d}{l^4} \right], \quad n(k^*) = \frac{d\pi^{d/2}}{\Gamma(1+d/2)} \left(\frac{Nk^*}{2\pi} \right)^{d-1}, \quad (38)$$

де k^* — хвильові числа, які для дискретних систем є максимумами закону дисперсії $\omega(\mathbf{k})$, l — крок дискретної ґратниці розмірністю d . Значимо, що $\omega(\mathbf{k})$ є власним значенням оператора L , тоді як його власною функцією є пласка хвиля $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$. У континуальному наближенні найбільш нестійка мода k_0 задовольняє рівняння $\omega(\mathbf{k}) = 0$. Для неї маємо $k_0 = k^*$. Різниця між k_0 і k^* при $k_0 l \leq 1$ для дискретних систем складає близько 3% [57, 58]. Величина $n(k^*)$ в (38) задає кількість мод k^* , де N^d — кількість дискретних комірок у d -вимірній системі.

Поклавши для зручності $l = 1$, при $i = j$, одержимо стаціонарне середньопольове рівняння [53]

$$-hP_s = \left(M \left[-\partial_x f - D_1[\eta - x] - \frac{D_e}{M} x \right] - \frac{\theta}{2} \partial_x M + 2dD_e \sigma_e^2 x \left[C_1 \eta \frac{\partial}{\partial x} - C_0 \frac{\partial}{\partial x} x \right] \right) P_s, \quad (39)$$

де h — стала величина, $\eta \equiv n(k^*) A(k^*)$ — середнє поле, яке задає кількість мод із заданими амплітудами. Розв'язок рівняння (38) має вигляд

$$P_s(x, \eta, h) = N \exp \left(\int dx' \frac{\Omega(x'; \eta, h)}{\Xi(x'; \eta)} \right), \quad (40)$$

де

$$\Omega(x, \eta, h) = -M \partial_x f - D_e x - D_1 M (\eta - x) - \frac{\theta}{2} \partial_x M - 2dD_e \sigma_e^2 C_0 x + h, \quad (41)$$

$$\Xi(x; \eta) = \theta M + 2dD_e \sigma_e^2 x (C_0 x - C_1 \eta).$$

Пошук невідомих величин h і η ґрунтується на припущенні, що розглядуваний середньопольовий підхід є локальним. Представимо стаціонарний розподіл P_s для однієї комірки, як функцію величин h та η . Оскільки густина вільної енергії $f(x)$ і рухливість $M(x)$ є симетричними функціями, то і розподіл P_s має бути симетричним у точці $\eta = 0$. Однак стала h , що обчислюється за початковими умовами $\eta = x_0$ (де x_0 — початкова густина) у вигляді $x_0 = \int P_s(x; x_0, h) dx$, буде призводити до порушення симетрії [52, 53, 67, 69]. При значеннях параметрів системи, де $h = 0$, одночасно тривіальним є середнє поле η . Тому, при вивченні характеру упорядкування розглядуваного класу систем достатньо скористатися припущенням, що $h = 0$, досліджуючи поведінку лише середнього поля [11].

У рамках теорії середнього поля величина η визначається розв'язком рівняння самоузгодження:

$$\eta = \int x P_s(x, \eta, h = 0) dx. \quad (42)$$

Відомо, що тривіальний розв'язок $\eta = 0$ рівняння (42) для систем зі збереженою динамікою відповідає гомогенному стану. Поява його нетривіальних розв'язків означає виникнення $n(k^*)$ мод з амплітудами $A(k^*)$ — тобто утворення просторового порядку в системі. Якщо відомі розв'язки рівняння самоузгодження, то середньопольовий структурний фактор $S(k^*) = n(k^*) A^2(k^*)$ виступає у ролі параметра порядку. З іншого боку, у наведеній апроксимації параметер порядку тотожній другому статистичному моменту: $J \equiv S(k^*) = \langle x^2 \rangle$.

Одержані залежності середнього поля зображено на рис. 7. З нього видно, що зниження температури θ сприяє упорядкуванню системи, про це свідчить поява нетривіального розв'язку рівняння самоузгодження: $\eta \neq 0$. З рисунку 7, а випливає, що зовнішнє перемішування, яке задає величина D_e , знижує критичні значення температури. Одержані результати можна пов'язати з Мартановою теорією середнього поля [10], де показано, що зовнішнє перемішування підвищує температуру системи, знижуючи критичне значення. Зображені залежності $\eta(r_c)$ і $S(r_c)$ показують, що при великому значенні r_c в системі структури не утворюються. Залежність $\eta(D_e)$ зображена на рис. 7, б ілюструє, що додатковий (зовнішній) потік призводить до гомогенізації системи: збільшення D_e знижує значення η , що добре узгоджується з теоретичними розрахунками та експериментальними даними про структуроутворення за наявності потоку опромінення [70–72]. Залежності $\eta(\sigma_e^2)$, $S(\sigma_e^2)$ на рис. 7, б показують конструктивну природу флюктуацій цього потоку, що сприяє структуроутворенню. Таким чином, спостерігається конкуренція двох компонент зовнішнього потоку J_e : незважаючи на те,

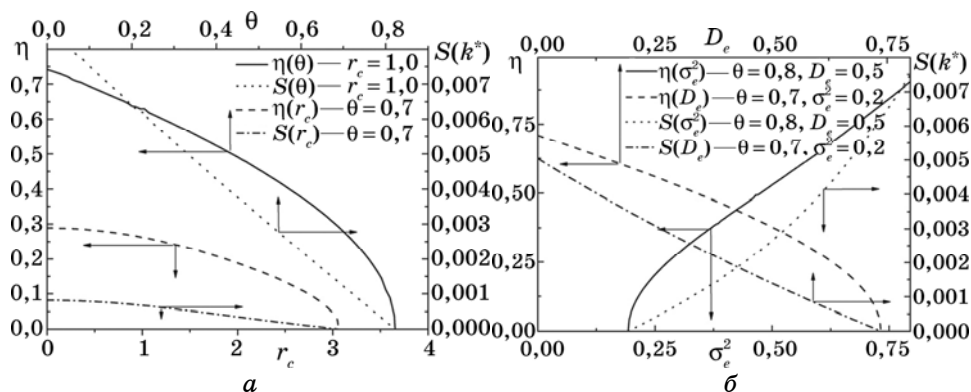


Рис. 7. Біфуркаційні діаграми для середнього поля $\eta = n(k^*)A(k^*)$ і параметра порядку $S(k^*) = n(k^*)A^2(k^*)$: *a* — залежності η і S від температури θ і просторового радіуса кореляції флюктуацій r_c при $D_e = 0,5, \alpha = 0,5, \sigma_e^2 = 0,2$; *б* — залежності η і S від регулярної та випадкової компонент зовнішнього перемішування, D_e і σ_e^2 при $r_c = 1, \alpha = 0,5$.

що дійсна частина J_e сприяє процесам гомогенізації, його випадкова складова посилює процеси упорядкування.

Критичні значення параметрів системи зображено на рис. 8. З нього видно, що збільшення інтенсивності зовнішнього шуму підвищує критичні значення температури та інтенсивності зовнішнього перемішування. Таким чином, великі зовнішні флюктуації сприяють структуроутворенню за підвищених значень θ та D_e .

Як показано на рис. 8, *a*, зовнішнє перемішування знижує критичну температуру. Внутрішні флюктуації тісно пов'язані з параметром α , від якого залежить форма рухливості $M(x)$. Тому розглядувані залежності побудовано для різних значень параметра α . При великих α , коли флюктуації швидко спадають, критичні значення температури, навпаки, зростають. Даний ефект відрізняється від того, що одержаний для ранніх стадій розвитку, де внутрішні флюктуації підтримують безлад у системі. Така ситуація є типовою, для систем з мультиплікативним шумом, який задовольняє флюктуаційно-дисипаційній теоремі, коли упорядкування відбувається за ентропійно-керованим механізмом, а відповідні процеси не залежать від короточасної нестійкості [58, 67, 73].

На рисунку 8, *б* показано, що збільшення D_e зсуває критичне значення інтенсивності шуму внаслідок процесів конкуренції регулярної і стохастичної компонент потоку опромінення. Процеси упорядкування при зниженій температурі θ відбуваються при малих значеннях D_e . Якщо зростає інтенсивність внутрішніх флюктуацій θ , то для фіксованих значень D_e перехід в упорядковану фазу можливий при малих інтенсивностях зовнішнього шуму σ_e^2 .

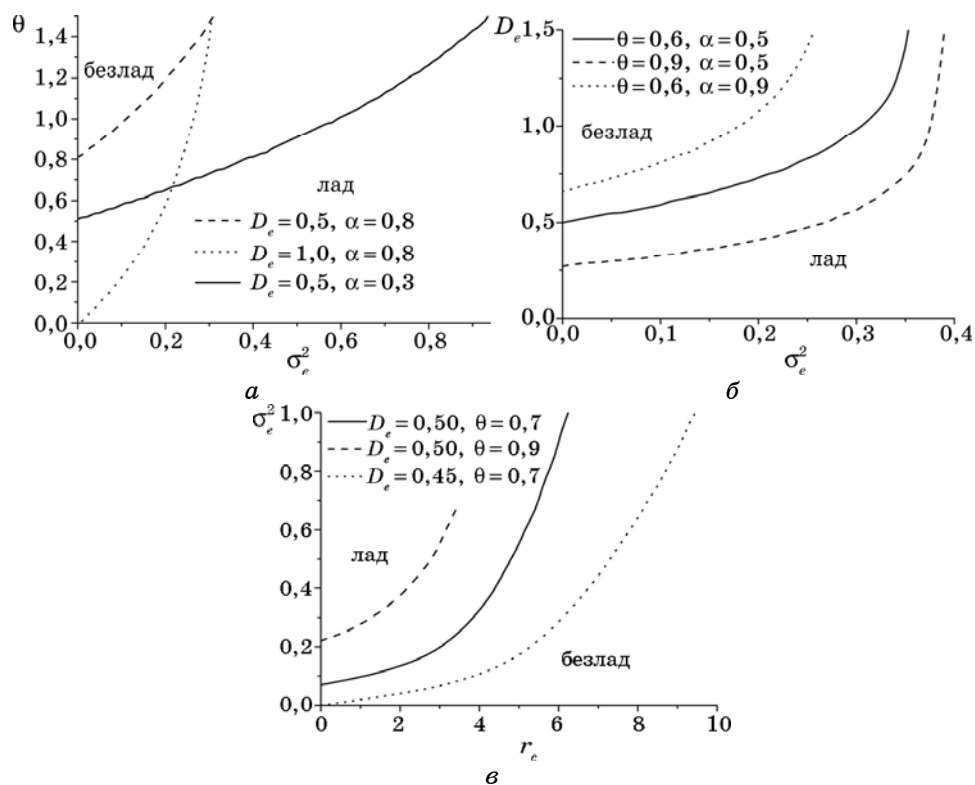


Рис. 8. Середньопольові фазові діаграми: а — на площині (σ_e^2, θ) при $r_c = 0,6$; б — на площині (σ_e^2, D_e) при $r_c = 0,6$; в — на площині (r_c, σ_e^2) при $\alpha = 0,5$.

Аналізуючи рис. 8, в, можна стверджувати, що зростання радіуса просторових кореляцій зовнішнього шуму сприяє упорядкуванню при великих значеннях σ_e^2 . При підвищеній температурі і фіксованому значенні σ_e^2 , упорядкування відбувається при слабкокорельованих флюктуаціях (малих r_c).

Моделювання процесу формування структур. З метою підтвердження результатів аналітичних розрахунків проведемо чисельне незалежне моделювання розглядуваної системи. Для числового дослідження інтегрується відповідне Ланжевенівське рівняння (22) на двовимірній ґратниці ($d=2$) розміром $N=120l$, де крок ґратниці $l=1,0$, з часовим кроком $\delta t=0,005$. Крайові умови вибиралися періодичними; початкові умови задавалися такими: $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$, $\langle (\delta x)^2 \rangle = 0,01$. Для моделювання білого шуму термічно стимульованого потоку використовувався алгоритм Бокса–Мюллера [36, 74]. Для моделювання кольорового шуму за простором застосовувався алгоритм генерації випадкового процесу за заданою кореляційною функцією у Фур'є-просторі [5]. Одержані числові характеристики

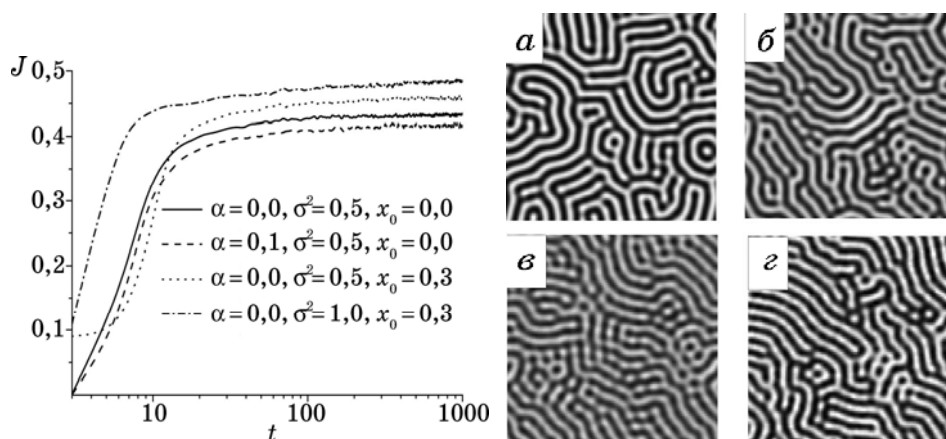


Рис. 9. Еволюція параметра порядку $J(t)$ на ранніх стадіях при різних інтенсивностях впливу стохастичних джерел і зовнішнього перемішування; $a, б, в, з$ — знімки структур при $t = 40$ для відповідних кривих.

усереднювалися за 10-ма незалежними експериментами.

Зосередимо увагу на дослідженні впливу двох типів шумів на процеси упорядкування. Спочатку розглянемо початкові стадії еволюції системи. На рисунку 9 зображено поведінку параметра порядку $J(t) = N^{-2} \langle \sum_r x_r^2 \rangle$ на малих інтервалах часу, в теорії структуроутворення відомого як конвективний потік [5]. В теорії упорядкування для систем зі збереженою та незбереженою динамікою відомо, що його зростання з часом говорить про проходження процесів упорядкування. Для систем з адитивним шумом ($\alpha = 0, D_e = 0$) параметер порядку зростає до стаціонарного значення J_{st} , найбільшого в порівнянні з іншими випадками (порівняйте суцільну криву з рештою; відповідні структури зображено на знімку a). Присутність мультиплікативного шуму ($\alpha \neq 0, D_e = 0$) уповільнює структуроутворення. При цьому параметер порядку набуває менших значень, а структури стають більш дифузними (див. знімок $б$). Включення зовнішнього перемішування ($D_e \neq 0$) при $\sigma_e^2 = 0$ суттєво уповільнює структуроутворення із розмитішими структурами (знімок $в$). Поява зовнішнього шуму σ_e^2 прискорює процеси упорядкування. Таким чином, дані структури відповідають більшим значенням величини J , і на знімку $з$ смугові структури є краще вираженими. Таким чином, приходимо до висновку про конструктивну роль флюктуацій зовнішнього потоку, що узгоджується з результатами теорії середнього поля.

Оскільки величина J подає інтегральний ефект, для встановлення більшої інформації про процеси структуроутворення доцільним є дослідження поведінки структурного фактора. На рисунку 10 зо-

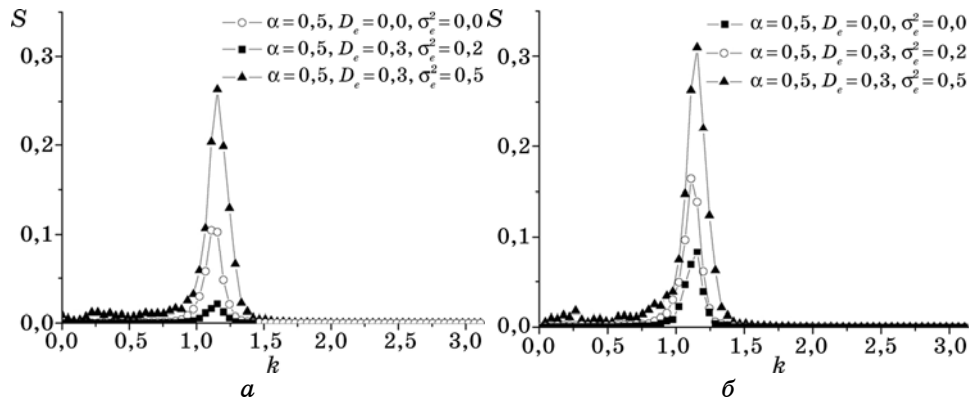


Рис. 10. Поведінка структурного фактора при різних значеннях параметрів системи, при $\theta = 0,4$ і $r_c = 0,7$ та різних значеннях часу: *a* — $t = 15$, *б* — $t = 20$.

бражено динаміку сферично усередненого структурного фактора $S(k, t) = (N_k)^{-1} \sum_{k \leq |k| \leq k + \Delta k} S_k(t)$, при різних інтенсивностях шуму σ_e^2 та різних часових зрізах (графіки *a* і *б* відповідно).

Із результатів аналітичного дослідження випливає, що під час еволюції системи пік структурного фактора зростає, а збільшення інтенсивності шуму призводить до його зсуву в бік найбільш нестійкої моди. Зазначимо, що зміна висоти піку $S(k)$ безпосередньо пов'язана з властивостями упорядкування системи. Така поведінка прослідковується у обчисленому структурному факторі за даними числового експерименту.

Для підтвердження результатів теорії середнього поля, незалежне комп'ютерне моделювання було проведено на великих часових інтервалах ($t = 3000-8000$), де статистичні характеристики ставали незалежними від часу. На цьому часовому інтервалі було проведено усереднення відповідних величин. Для контролю збереженої динаміки обчислювалися такі характеристики: $\langle x^+ \rangle = N^{-2} \langle \sum_r x_r^+ \rangle$ з $x^+ > 0$ та $\langle x^- \rangle = N^{-2} \langle \sum_r x_r^- \rangle$ з $x^- > 0$, сума яких дає нуль. Окрім того, обчислювалися параметер порядку J та сферично усереднений структурний фактор S при різних значеннях параметрів системи.

На рисунку 11, *a* зображено поведінку параметра порядку у стаціонарному режимі. Як випливає з очевидних міркувань, збільшення параметра α , який задає швидкість спадання флюктуацій в околі неупорядкованого стану, зменшує параметер порядку. Однак, зростання інтенсивності зовнішнього шуму сприяє проходженню процесів упорядкування. Структурний фактор, побудований при різних інтенсивностях шуму, зображено на рис. 11, *б*.

Розвинуті структури виникають при великих σ_e^2 , оскільки саме таким значенням інтенсивності шуму відповідає чітко виражений пік. Динаміка мікроструктурних перетворень системи при різних початкових умовах зображена на рис. 11, а. З нього видно, що за-

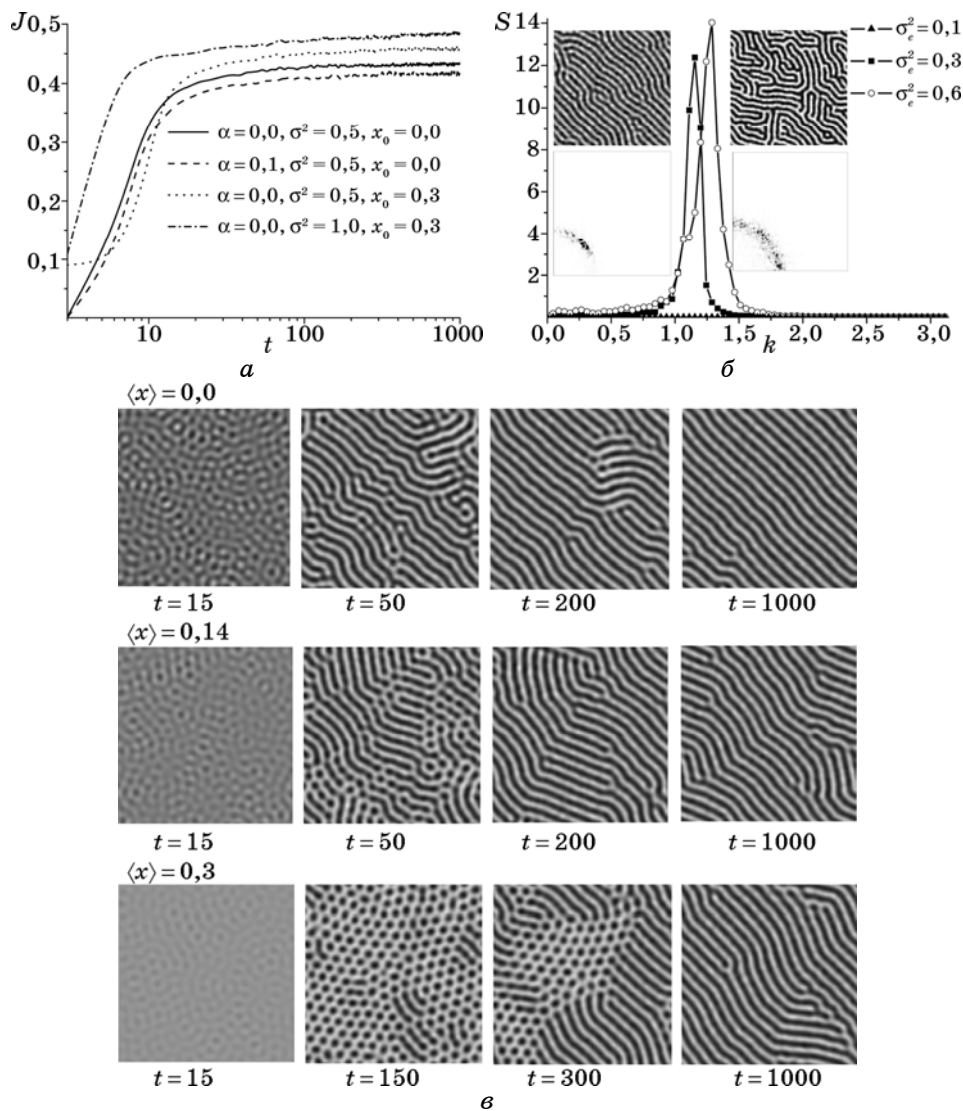


Рис. 11. *a* — еволюція параметра порядку при різних інтенсивностях шуму та початкових умовах; *б* — структурний фактор одержаний при різних інтенсивностях шуму у момент часу $t = 200$; *в* — знімки еволюції системи для різних початкових умов: $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0, 0,14, 0,3$. Інші параметри: $\theta = 0,4, D_e = 0,3, \sigma_e^2 = 0,2$.

лежно від початкових умов, а саме, середньої густини $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle$, на початкових стадіях утворюються різні типи структур. При малих значеннях початкової густини формуються смугові структури (рух атомів вздовж атомових площин). На великих густинах утворюються ґратниці типу кристалічних структур (окремі фіксовані області позицій атомів системи), що моделюють гексагональну симетрію. На проміжних значеннях початкової густини реалізується суміш смугових структур та структур кристалічної ґратниці (нанорозмірні домени кристалічної структури з розмитими позиціями атомів вздовж атомових площин). Така картина реалізується у аналогічній детерміністичній системі, однак, утворювані структури на ранніх стадіях зберігають свою морфологію на пізніх стадіях і в стаціонарному випадку. У даному випадку зовнішній шум на великих часових інтервалах призводить до утворення у системі смугових структур з відповідними дефектами (дислокаціями та дисклинаціями), незалежно від обраних початкових умов. Таким чином, зовнішній шум принципово змінює морфологію дисипативних структур, що утворюються у системі, і здатний кардинально впливати на мікроструктурні перетворення при радіаційному опроміненні. Отже, маємо узгодження одержаних результатів з результатами роботи [9] (див. рис. 2, а).

Порівняємо аналітичні результати, одержані у середньопольовому наближенні, з комп'ютерним експериментом. Зазвичай, у стандартній теорії середнє поле η інтерпретують як усереднення поля x . З фізичним сенсом маємо лише розв'язки $\eta = 0$ і $\eta > 0$. Але при чисельному моделюванні еквівалентним критерієм для $\eta > 0$ є величина $\langle x^+ \rangle$; аналогічно для $\eta < 0$. При заданих початкових умовах $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$ маємо $\langle x^+ \rangle = \langle x^- \rangle$. Таким чином, приходимо до ситуації, аналогічної фазовому розшаруванню, коли x — поле, що зберігається, і фазове розшарування (спинодальний розпад) призводить до утворення двох однакових фаз, де при статистичному усередненні $\langle x^+ \rangle = -\langle x^- \rangle$.

Величину $\langle x^+ \rangle$, як об'ємну долю системи з $x > 0$, та середнє поле η зображено на рис. 12, а.

Очевидно, що наведені результати не суперечать один одному і вказують на топологічно однакову поведінку системи: при малій інтенсивності D_e система знаходиться в упорядкованому стані, і зовнішній шум сприяє упорядкуванню. При великому D_e система є розупорядкованою (формується структурний безлад) внаслідок атермічного перемішування атомів системи до критичного значення інтенсивності зовнішніх флюктуацій. При переході через це значення зовнішні флюктуації потоку опромінення здатні перевести систему до упорядкованої фази — відбувається індуковане шумом упорядкування, що виражається в утворенні атомових площин, вздовж яких спостерігається рух атомів (смугові структури).

На рисунку 12, б зображено поведінку параметра порядку J при

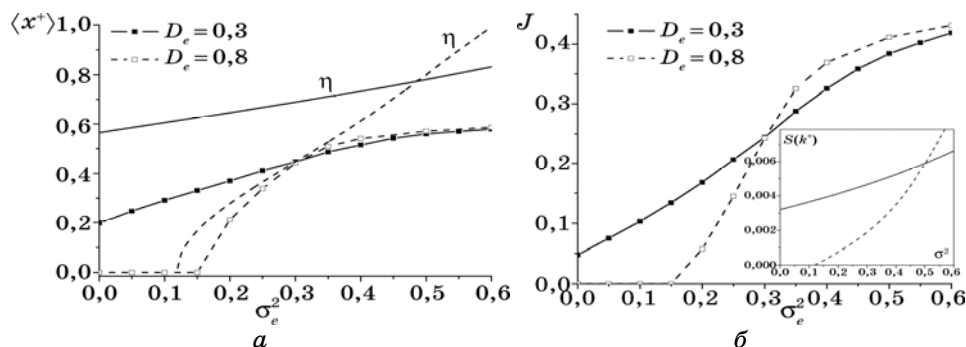


Рис. 12. *a* — стаціонарні залежності для величини $\langle x^+ \rangle$ і середнього поля η (відповідно суцільна та штрихова криві); *б* — поведінка параметра порядку $J(\sigma_e^2)$ одержана при моделюванні та у середньопольовому наближенні (суцільна і штрихова криві та відповідні криві на вставці) при різних значеннях D_e . Інші параметри: $\theta = 0,4$, $\alpha = 0,5$, $r_c = 0,65$.

зміні інтенсивності зовнішнього шуму, і проведено порівняння з результатами теорії середнього поля $S(\sigma_e^2)$. Можна бачити, що при великому значенні регулярної частини атермічного перемішування D_e його випадкова складова сприяє збільшенню параметра порядку. Критичні значення інтенсивності зовнішнього шуму, одержані при моделюванні, підтверджують середньопольові результати.

3.2. Особливості відбору структур у кристалічних системах з пам'яттю

На відміну від попереднього випадку, де приймалося припущення про еквівалентність часових інтервалів передачі збурень опроміненням та дифузійним перемішуванням атомів кристалу, тут зосередимо увагу на дослідженні процесів упорядкування із врахуванням різниці у наведених часових масштабах [75]. Відомо, що в реальних системах час проходження каскаду складає величину $\cong 10^{-15} - 10^{-13}$ с, тоді як час дифузійного перемішування (стрибка атома) співпадає з Дебайовим часом. Очевидно, така різниця може спричиняти нетривіальну поведінку системи на ранніх стадіях її еволюції.

3.2.1. Фазово-польовий модель періодичної системи з пам'яттю

Грунтуючись на різниці наведених часових масштабів передачі збурень полю густини, слід очікувати, що потік опромінення є локальним, тобто збурення, викликані ним, миттєво передаються системі, тоді як збудження, викликані термічно стимульованим потоком, проходять за певний кінцевий час. Таким чином, розгляду-

вана періодична система (кристал) є нерівноважною тому, що у ній існує часова нелокальність, тобто пам'ять.

Як і раніше, еволюція поля атомової густини x описується рівнянням непереривності (9), де повний потік подається сумою термічно стимульованого дифузійного потоку і потоку атомового перемішування, індукованого опроміненням. Для врахування ефектів нелокальності скористаємося узагальненням Фікового закону [76, 77]:

$$\mathbf{J}_\nu = -D_\nu \int_0^t M_\nu(t, t') \nabla \mu(x(\mathbf{r}, t')) dt', \quad (43)$$

де індекс $\nu = \{D, e\}$ означає належність компоненти потоку до термічно стимульованого потоку або до зовнішнього (потіку опромінення), D_ν — відповідний коефіцієнт дифузії, μ — відіграє роль хемічного потенціалу, $M_\nu(t, t')$ — функція пам'яті, що задає нелокальність відповідної компоненти потоку.

Якщо за одиницю міряння часу обрати час розповсюдження збурень, викликаних проходженням каскаду, далі вважатимемо, що функція пам'яті для атермічного (балістичного) потоку \mathbf{J}_e може бути апроксимована дельта-функцією Дірака: $M_e(t, t') \equiv \delta(t - t')$, а узагальнений Фіків закон зводиться до стандартної форми: $\mathbf{J}_e = -D_e^0 \nabla x$. У припущенні стохастичності потоку опромінення для балістичного потоку маємо $\mathbf{J}_e = -(D_e + \zeta(\mathbf{r}, t)) \nabla x$, де випадкове джерело ζ наділено Гаусовими властивостями (12) з кореляційною функцією (13).

Для термічно стимульованого потоку швидкість розповсюдження збурень є кінцевою величиною, оскільки час передачі збурень τ_D є фіксованим. Найпростішим моделюванням функції пам'яті, що враховує цей ефект, є спадна експонента $M_D = \tau_D^{-1} \exp(-|t - t'| / \tau_D)$. Тоді, враховуючи, що модель кристалу описується вільною енергією (14) з компонентами (15), термічно стимульований потік може бути записаний у вигляді

$$\mathbf{J}_D = -\frac{M}{\tau_D} \int_0^t \exp\left(-\frac{|t - t'|}{\tau_D}\right) \nabla \frac{\delta F}{\delta x(\mathbf{r}, t')} dt',$$

де $M = \text{const}$ — рухливість. Диференціювання за часом потоку \mathbf{J}_D уможливорює переписати узагальнений Фіків закон у вигляді релаксаційного рівняння Максвелла–Катанео [76–78], яке при узагальненні його на випадок присутності випадкового джерела ξ , що задає флюктуації потоку, зводиться до Ланжевенового рівняння:

$$\tau_D \partial_t \mathbf{J}_D = -\mathbf{J}_D - M \nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \xi(\mathbf{r}, t), \quad (44)$$

де джерело Гаусового шуму ξ задовольняє флюктуаційно-дисипаційній теоремі: $\langle \xi(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$, $\langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t) \rangle = 2\sigma_0^2 M \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$; σ_0^2 — ін-

тенсивність, що зводиться до температури теплової бані T . Наявність скінченного часу релаксації τ_D призводить до обмеженої швидкості розповсюдження збурень $v_D = \sqrt{M / \tau_D}$. У випадку $\tau_D \rightarrow 0$ дифузійний потік набуває звичного вигляду $\mathbf{J}_D \cong -M\nabla\delta F/\delta x + \xi$ з миттєвим відгуком і швидкістю $v_D \rightarrow \infty$. Однак, реальним дифузійним процесам притаманна обмежена швидкість v_D ; тому далі вважатимемо $\tau_D \neq 0$.

Таким чином, система динамічних рівнянь, яка описує поведінку системи підданої стохастичному впливу набуває вигляду [13]

$$\partial_t x = -\nabla \cdot \mathbf{J}_D + D_e \Delta x + \nabla \cdot (\zeta \nabla x), \quad (45)$$

$$\tau_D \partial_t \mathbf{J}_D = -\mathbf{J}_D - M\nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \xi.$$

Якщо розглянути граничний випадок $D_e = 0$ (тобто $\mathbf{J}_e = \mathbf{0}$), то одержану систему рівнянь (45) можна переписати у вигляді стандартного моделю для фазового поля кристалу [38, 42, 46, 47, 80]:

$$\tau_D \partial_t^2 x + \partial_t x = \nabla \cdot (M\nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \xi).$$

Легко бачити, що гіперболічний транспорт (друга похідна за часом) тісно пов'язаний з релаксацією дифузійного потоку. Спираючись на відомі твердження [40, 47, 81], зазначимо, що одержаний модель уможливіє дослідити динаміку системи на часових і просторових проміжках характерних як для молекулярної динаміки ($\cong 10^{-12}$ с, $\cong 10^{-9}$ м), так і на дифузійних інтервалах. Розглядуваний модель є узагальненим на випадок наявності стохастичного зовнішнього впливу з миттєвим відгуком зовнішніх збурень для кожної точки. Це уможливіє розширити спектр дослідження, розглядаючи мікроструктурні перетворення на двох ієрархічних рівнях мультимасштабного моделювання поведінки матеріалів.

3.2.2. Осциляційна динаміка усереднених величин

Еволюція першого статистичного моменту та структурного фактора. Одержимо динамічне рівняння для величини $\langle x \rangle$, усереднюючи систему рівнянь (45) за шумом:

$$\partial_t \langle x \rangle = -\nabla \cdot \langle \mathbf{J}_D \rangle + D_e \Delta \langle x \rangle + \nabla \cdot \langle \zeta \nabla x \rangle, \quad (46)$$

$$\tau_D \partial_t \langle \mathbf{J}_D \rangle = -\langle \mathbf{J}_D \rangle - \nabla M \left\langle \frac{\delta F}{\delta x} \right\rangle.$$

Корелятори у першому рівнянні розпишемо з використанням теореми Новікова [64]:

$$\langle \zeta \nabla x \rangle = D_e \sigma_e^2 \int_{-\infty}^{\infty} C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla \left\langle \frac{\delta x(\mathbf{r}, t)}{\delta \zeta(\mathbf{r}', t)} \right\rangle d\mathbf{r}'. \quad (47)$$

Функцію відгуку у правій частині рівняння (47) знайдемо з формального розв'язку Ланжевенового рівняння (45) для поля x

$$\frac{\delta x(\mathbf{r}, t)}{\delta \zeta(\mathbf{r}', t)} = \nabla (\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla x(\mathbf{r}, t)). \quad (48)$$

Підставляючи (48) у (47), одержимо [5, 51]:

$$\begin{aligned} \langle \zeta \nabla x \rangle = D_e \sigma_e^2 \left[C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \nabla^3 \langle x \rangle + \right. \\ \left. + 2 \left(\nabla C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \right) \nabla^2 \langle x \rangle + (\nabla \langle x \rangle) \nabla^2 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \right]. \quad (49) \end{aligned}$$

Зазначимо, що функція $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ сягає свого максимуму при $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, тобто справедливими є співвідношення:

$$\nabla C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = \mathbf{0}; \quad \nabla^2 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} < 0. \quad (50)$$

Вводячи позначення $\omega(\nabla^2) = \varepsilon + L^2 + 3x_0^2$ з $M = 1$, де x_0 задає однорідний стан, одержимо систему рівнянь:

$$\begin{cases} \partial_t \langle x \rangle = -\nabla \langle \mathbf{J}_D \rangle + D_e \Delta \langle x \rangle + D_e \sigma_e^2 \nabla^2 C(r) \Big|_{r=0} \Delta \langle x \rangle + D_e \sigma_e^2 C(0) \nabla^4 \langle x \rangle, \\ \tau_D \partial_t \langle \mathbf{J}_D \rangle = -\langle \mathbf{J}_D \rangle - \nabla \omega(\nabla^2) \langle x \rangle. \end{cases} \quad (51)$$

Подальше дослідження можливе у Фур'є-просторі. Так, вводячи Фур'є-компоненти $\langle x_{\mathbf{k}}(t) \rangle = \int d\mathbf{r} \langle x(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, $\langle \mathbf{J}_{\mathbf{k}}(t) \rangle = \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \rangle e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, перепишемо систему (51) у вигляді:

$$\begin{cases} \frac{d\langle x_{\mathbf{k}} \rangle}{dt} = -i\mathbf{k} \langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} \rangle - D_e k^2 \langle x_{\mathbf{k}} \rangle - D_e \sigma_e^2 \nabla^2 C(\mathbf{r}) \Big|_{r=0} k^2 \langle x_{\mathbf{k}} \rangle + D_e \sigma_e^2 C(0) k^4 \langle x_{\mathbf{k}} \rangle, \\ \tau_D \frac{d\langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} \rangle}{dt} = -\langle \mathbf{J}_{D\mathbf{k}} \rangle - ik\omega(k^2) \langle x_{\mathbf{k}} \rangle. \end{cases} \quad (52)$$

Одержана система простих диференціальних рівнянь (52) має аналітичний розв'язок.

На основі відомого динамічного рівняння для середнього $\langle x_{\mathbf{k}} \rangle$ проведемо аналіз стійкості однорідного стану x_0 . Для цього здиференціюємо перше рівняння системи (52) за часом t . Виражаючи з першого рівняння потік $\mathbf{J}_{D\mathbf{k}}$ та використовуючи похідну потоку з другого, одержимо:

$$\tau_D \frac{d^2 \langle x_{\mathbf{k}} \rangle}{dt^2} = -\left(1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)\right) \frac{d\langle x_{\mathbf{k}} \rangle}{dt} - k^2 \left(D_e \Xi(k^2) + \omega(k^2)\right) \langle x_{\mathbf{k}} \rangle, \quad (53)$$

де за означенням $\Xi(k^2) \equiv 1 + \sigma_e^2 (\nabla^2 C(|r|)_{r=0} - C(0)k^2)$. Розв'язок одержаного рівняння шукатимемо у вигляді $\langle x_{|k|}(t) \rangle = \langle x_{|k|}(0) \rangle \exp(\varphi(k)t)$. Підставляючи його у рівняння (53), одержуємо вираз для фази:

$$\varphi(k)_{\pm} = -\frac{1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)}{2\tau_D} \pm \frac{1}{2\tau_D} \sqrt{(1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2))^2 - 4\tau_D k^2 (D_e \Xi(k^2) + \omega(k^2))}. \quad (54)$$

Цей вираз може мати дійсну і уявну частини: $\varphi(k) = \Re\varphi(k) + i\Im\varphi(k)$, що свідчить про можливість появи нестійких мод лише у випадку $\Re\varphi(k)_+ > 0$. Для систем з просторовою взаємодією Свіфта–Хогенберга є певний інтервал хвильових чисел $k_{c1} \leq k \leq k_{c2}$, де $\Re\varphi(k)_+ > 0$, з $k_{c1}, k_{c2} \neq 0$. Іншими словами, перша нестійка мода завжди матиме обмежений період, заданий хвильовим числом із цього інтервалу. Величина $\Re\varphi(k)_+ > 0$ завжди матиме єдиний пік, положення якого відповідає найбільш нестійкій моді, з хвильовим числом k_m .

Уявна частина фази (54) з'являється за умови

$$\{1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)\}^2 < 4\tau_D k^2 \{D_e \Xi(k^2) + \omega(k^2)\}.$$

Таким чином, еволюція середнього $\langle x_{|k|}(t) \rangle$ може супроводжуватися наявністю осциляцій з частотою $\Im\varphi(k)$ та декрементом затухання $\{1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)\} / 2\tau_D > 0$. Область затухання збурень визначається з умови $1 + \tau_D D_e k^2 \Xi(k^2) > 0$. Область стійких мод обмежена значенням хвильового числа:

$$k_d^2 = \frac{1}{2\sigma_e^2 C(0)} \left(1 + \sigma_e^2 \nabla^2 C(|r|)_{r=0} + \sqrt{(1 + \sigma_e^2 \nabla^2 C(|r|)_{r=0})^2 + \frac{4\sigma_e^2 C(0)}{\tau_D D_e}} \right). \quad (55)$$

Осциляційна поведінка $\langle x_{|k|}(t) \rangle$ проявляється в області, яку визначено значенням $k_0 = k_0(\theta, D_e, \sigma_e^2, r_c)$ як розв'язком рівняння

$$1 - 2\tau_D k^2 \{D_e \Xi(k^2) + 2\omega(k^2)\} + \{\tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)\}^2 < 0. \quad (56)$$

Динамічне рівняння для структурного фактора S_k має вигляд:

$$\tau_D \frac{d^2 S_k}{dt^2} = -\{1 + 2k^2 \tau_D D_e \Xi(k^2)\} \frac{dS_k}{dt} - 2k^2 \{D_e \Xi(k^2) + \omega(k^2)\} S_k + 2\theta k^2 - \frac{2k^2 D_e \sigma_e^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k}' C(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) S_{\mathbf{k}'}(t) - \frac{2k^2 \tau_D D_e \sigma_e^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k}' C(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \frac{dS_{\mathbf{k}'}(t)}{dt}, \quad (57)$$

де $\sigma_0^2 = \theta$. Розв'язок рівняння (57) доцільно шукати у вигляді $S(k, t) \propto e^{\varphi(k)t}$. У загальному випадку фаза $\varphi(k)$ складається з дійсної та уявної частин, $\varphi(k) = \Re\varphi(k) + i\Im\varphi(k)$. В теорії спинодального розпаду, для систем з гіперболічним транспортом ($\tau_D \neq 0$) [79], в яких просторова взаємодія задається оператором $|\nabla x|^2$, дійсна частина фази $\Re\varphi(k)_+$ відома як фактор підсилення $R(k) = -\Re\varphi(k)_+$, де $S(k, t) \propto e^{-R(k)t}$; уявна частина $\Im\varphi(k)$ відповідає за процеси відбору структур. Визначимо особливості поведінки системи на основі аналізу поведінки фази $\varphi(k)$. Процеси відбору структур проаналізуємо спираючись на динаміку структурного фактора.

Вплив зовнішнього шуму на процеси відбору структур. Розглянемо стійкість стану $x_0 = 0$. Динаміку дійсної і уявної частин фази зображено на рис. 13. У випадку відсутності зовнішнього потоку $D_e = 0$ (суцільна крива), і область нестійких мод знаходиться у фіксованому інтервалі хвильових чисел $k_{c1} \leq k \leq k_{c2}$. Детерміністичний зовнішній вплив (пунктирна крива) пригнічує процеси нестійкості, і область нестійких мод звужується. Однак, флуктуації зовнішнього потоку J_e мають протилежний вплив, ніж його детерміністична складова: з ростом σ_e^2 область нестійких мод розширюється та з'являються осциляції розв'язків при великих σ_e^2 (див. рис. 13, б). Варто зазначити, що значення хвильового числа, яке відповідає найбільш нестійкій моді і, відповідно, визначає період формування структур, залежить від температури θ та інтенсивності D_e .

Розглянемо динаміку структурного фактора, зображену на рис. 14. Легко бачити присутність часових осциляцій на залежності $S(k, t)$ для різних значень k , що свідчить про протікання процесів відбору структур під час еволюції системи. Вигляд динамічного рівняння структурного фактора передбачає саме таку поведінку. Найвищий пік на залежності $S(k)$ задає головний період структур,

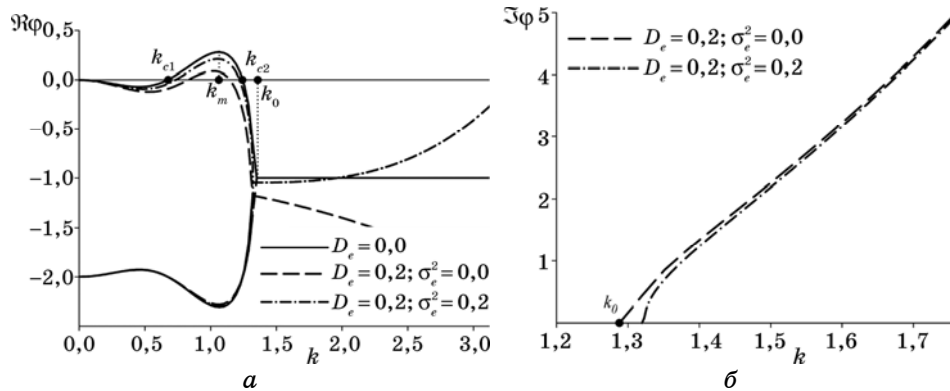


Рис. 13. Дійсна (а) й уявна (б) частини фази $\varphi(k)$ в околі стану $x_0 = 0$ за різних значень параметрів D_e і σ_e^2 . Решта параметрів: $\theta = 0,7$, $\tau_D = 0,5$, $r_c = 0,5$.

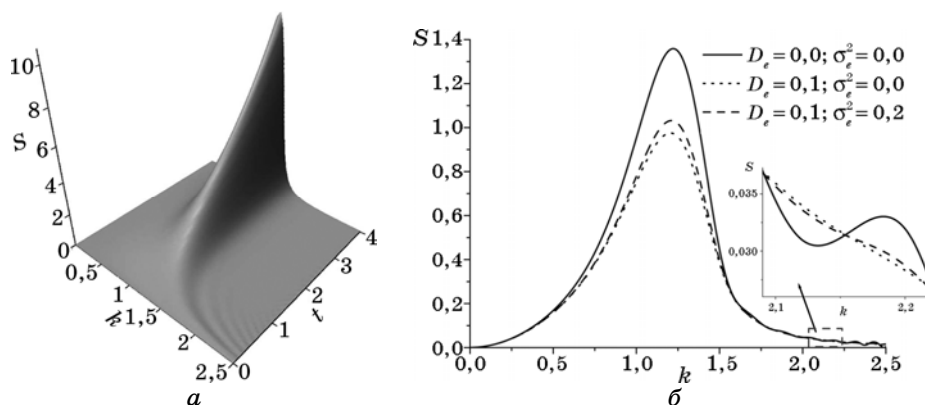


Рис. 14. *a* — еволюція структурного фактора на малих проміжках часу при $D_e = 0,1, \sigma_e^2 = 0,2$; *б* — поведінка структурного фактора при $t = 2$ для $\tau_D = 1,0, r_c = 1,0, \theta = 0,7$.

тоді як менші піки свідчать про наявність процесів відбору структур з меншими періодами. Осциляції структурного фактора з часом затухають, тобто відбувається вибір єдиної найбільш нестійкої моди $k \cong k_m$, яка задає подальший процес структуроутворення. Схожі осциляції спостерігаються при розв’язку рівняння для середнього $\langle x \rangle$. Із рисунку 14, *a* видно, що під час еволюції системи пік структурного фактора зсувається в бік найбільш нестійкої моди $k \cong k_m$; ширина піку зменшується, а висота, навпаки, збільшується. Тобто можна стверджувати, що структури стають краще вираженими, з більш чіткими межами.

Як видно з залежності $S(k)$ при фіксованому t , зовнішній потік суттєво впливає на процеси відбору структур. Регулярна складова потоку ($D_e \neq 0, \sigma_e^2 = 0$) уповільнює їх, тоді як випадковий чинник ($\sigma_e^2 \neq 0$) — прискорює. Зазначимо, що конкуренція випадкової і регулярної компонент зовнішнього потоку призводить до зниження основного піку залежності $S(k)$ при великих значеннях D_e , та збільшення його ширини. Це є ознакою того, що внаслідок впливу додаткової (атермічної) дифузії утворювані структури стають більш розмитими, тобто, утворюється структурний безлад, внаслідок чого система гомогенізується. Випадковий характер впливу J_e призводить до зворотнього ефекту. Зі зменшенням температури θ положення головного піку структурного фактора зміщується у бік великих значень k .

На рисунку 15 представлено залежність головного періоду структур від температури. Період $2\pi/k_{\max}$ визначається хвильовим числом k_{\max} , що відповідає максимуму структурного фактора $S_{\max} = S(k_{\max})$. Розрахунки проводилися на часових інтервалах, коли положення піку вже не змінюється. Як бачимо, збільшення температури та ко-

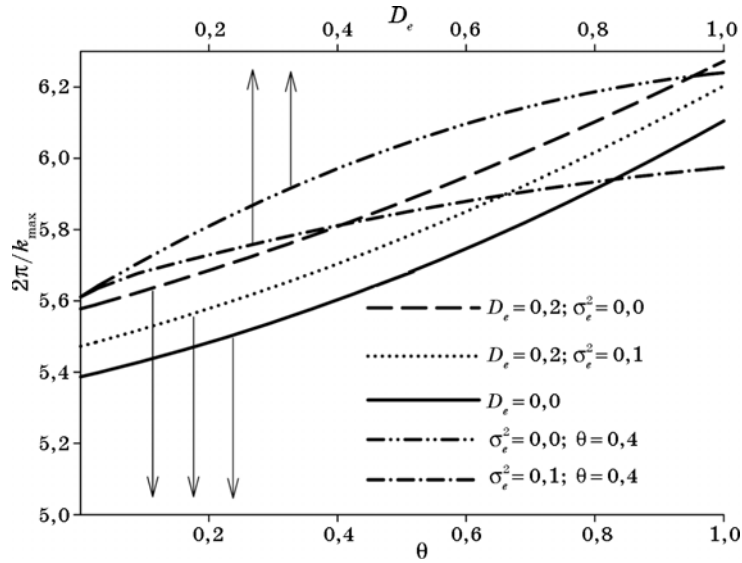


Рис. 15. Період структур $2\pi/k_{\max}$ в залежності від температури і коефіцієнта D_e при різних σ_e^2 з $\tau_D = 0,5$, $r_c = 0,5$.

ефіцієнта D_e призводять до формування структур з більшим періодом. Таким чином, атермічний вплив є причиною перенормування ефективної температури $\theta_{\text{ef}} = 1 - \theta + D_e$. При великих D_e для заданої θ період структур зростає, але джерело зовнішнього шуму уповільнює його.

Моделювання системи з гіперболічним транспортом. Для підтвердження аналітично одержаних результатів проведемо чисельне моделювання. Для цього представимо розглядувану систему (45) на дискретній двовимірній ґратниці $N \times N$ з розміром комірки $l = 1$. Система диференціальних рівнянь (45) у дискретному просторі має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= -(\nabla_R)_{ij} J_j + D_e \Delta_{ij} x_j + (\nabla_R)_{ik} \zeta_k (\nabla_L)_{kl} x_l, \\ \tau_D \frac{dJ_i}{dt} &= -J_i - M (\nabla_L)_{ij} \frac{\partial F}{\partial x_j} + \xi_i, \\ \tau_\zeta \frac{d\zeta_i}{dt} &= -(\delta_{ij} - r_c^2 \Delta_{ij}) \zeta_j + \tilde{\xi}_i, \end{aligned} \quad (58)$$

де індекс i позначає номер комірки, $i = 1, \dots, N^2$, $N = 128$; дискретні ліво- і правосторонні оператори подано виразами (9); $\xi_i(t)$ — чисто білий Гавсів шум з одиничною інтенсивністю. При наближенні $\tau_\zeta = 1$ одержимо білий шум у часі з наступними властивостями

$$\langle \zeta_i(t) \rangle = 0, \langle \zeta_i(t) \zeta_j(t') \rangle \cong C_{|i-j|} \delta_{ij} \delta(t-t').$$

Щоб підтвердити осциляційну поведінку першого статистичного моменту та структурного фактора розглянемо еволюцію окремо усереднених значень випадкового поля x : $\langle x^+ \rangle$ та $\langle x^- \rangle$. Зростання з часом величин $\langle x^+ \rangle$, $\langle x^- \rangle$ є однією з ознак упорядкування системи, при цьому завжди виконується закон збереження. Зростання другого статистичного моменту $J = N^{-2} \langle \sum_r x_r^2 \rangle$ також свідчить про наявність упорядкованого стану [5]. Альтернативним визначенням є $J(t) = \sum_k S(k, t)$, де $S(k, t)$ — сферично усереднений структурний фактор. Таким чином $J(t)$ задає площу під кривою $S(k, t)$. Очевидно, що присутність осциляцій $J(t)$ є ознакою хвильової поведінки структурного фактора з часом; про присутність в системі процесів відбору структур свідчать осциляції на залежності сферично усередненого структурного фактора $S(k)$.

Комп'ютерний експеримент показав, що з часом середні $\langle x(t)^\pm \rangle$ та параметр порядку $J(t)$ зростають, причому їх ріст супроводжується осциляціями (див. рис. 16, а). Крім того, осциляції $\langle x^+ \rangle$ і $\langle x^- \rangle$ відбуваються у протифазі, що свідчить про виконання закону збереження. Ріст параметра порядку $J(t)$ є ознакою упорядкування в системі, а осциляції — відповідають часовим осциляціям структурного фактора. На рисунку 16, б зображено залежність $S(k)$ для нелінійної системи, з якої видно, що для сферично усередненого структурного фактора також характерна є наявність осциляцій при зміні k ; із часом додаткові піки зникають. Наведені залежності одержано при $\tau_D = 1$. Для випадку $\tau_D < 1$ супутні піки не так чітко виражені, але є. Для збільшення висоти піку процеси релаксації дифузійного термічно стимульованого потоку мають характеризуватися $\tau_D > 1$. Вочевидь, така картина властива аморфним тілам.

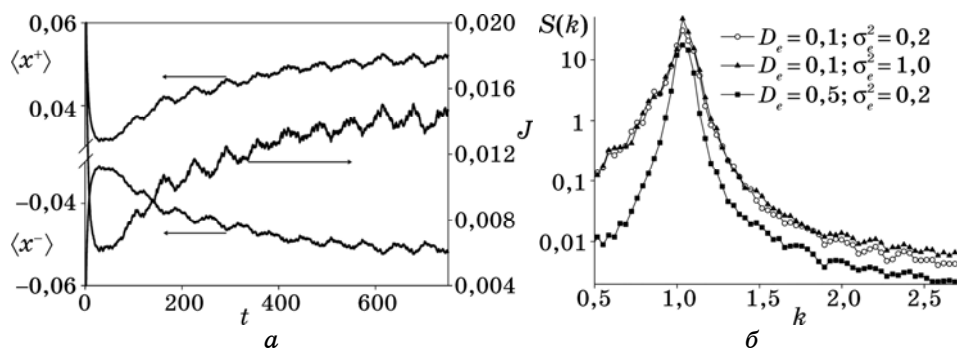


Рис. 16. а — еволюція середніх $\langle x^+ \rangle$, $\langle x^- \rangle$, параметра порядку $J = \langle x^2 \rangle$, при $\tau_D = 0,5$, $r_c = 1,0$, $\theta = 0,5$, $D_e = 1,0$, $\sigma_e^2 = 1,0$, б — сферично усередненого структурного фактора $S(k)$ при $t = 1000$, $\tau_D = 1,0$, $r_c = 1,0$, $\theta = 0,2$, $D_e = 0,1$, $\sigma_e^2 = 0,2$.

Як було раніше показано, просторова взаємодія, що описується оператором Свіфта–Хогенберга, призводить до нерівноважних процесів структуроутворення. Для більш детального їх вивчення використано стандартний підхід, який застосовується до аналізу рівноважних фазових переходів. У випадку нерівноважних систем параметром порядку є величина $\eta \equiv \langle J \rangle$. Узагальнена сприйнятливості $\chi = N^{-2}(\langle J^2 \rangle - \langle J \rangle^2) / \langle J \rangle^2$ характеризує присутні у системі флюктуації. Таким чином, у неупорядкованому (гомогенному) стані маємо $\eta = \langle x^+ \rangle = \langle x^- \rangle = 0$, тоді як для упорядкованого стану — $\eta, \langle x^+ \rangle, \langle x^- \rangle \neq 0$. В околі критичної температури флюктуації в системі зростають і, відповідно, сприйнятливості також зростає.

На рисунку 17, а зображено особливості поведінки рівноважного параметра порядку η та середнього $\langle x^+ \rangle$ при зміні температури та параметра D_e , для різних значень інтенсивності шуму σ_e^2 . З нього видно, що з ростом температури та інтенсивності балістичного перемішування D_e параметр порядку та середнє $\langle x^+ \rangle$ — спадають. В околі критичної точки $\theta \equiv \theta_{ef}^c$, де параметр порядку досягає нуля, на залежності сприйнятливості від температури присутній максимум. Очевидно, що наявність флюктуацій призводить до перенормування керувального параметра ε . Легко бачити, що критичне значення, одержане для індукованого шумом структуроутворення, співпадає зі своїм середньопольовим аналогом $\theta_c = 1$. Однак, збільшення інтенсивності шуму при фіксованому D_e збільшує критичне значення температури θ_{ef}^c . Зсув критичної температури під впливом шуму зображено на рис. 17, б. При заданій інтенсивності шуму σ_e^2 ріст балістичного перемішування D_e знижує θ_{ef}^c . Даний результат співпадає з тим, який одержано при лінійній аналізі на стійкість. Крім того, варто зазначити, що в околі критичної температури θ_{ef}^c , де флюктуації є великими, просторові структури є дифузні-

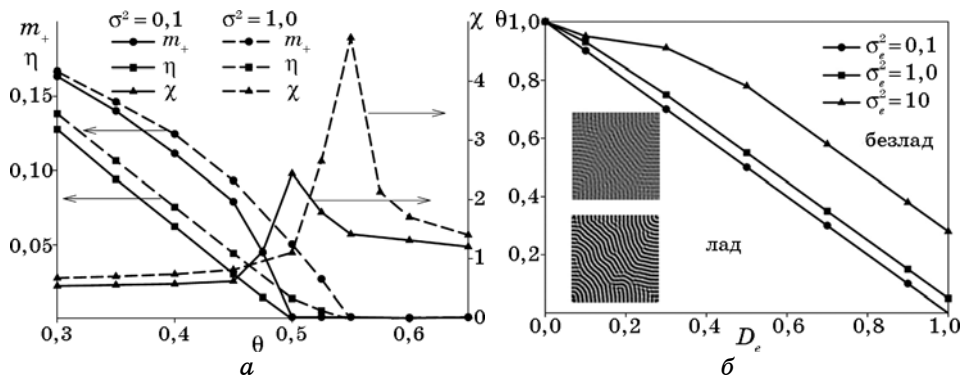


Рис. 17. а — поведінка рівноважного параметра порядку η , середнього $\langle x^+ \rangle$ і сприйнятливості χ для $D_e = 0,5$, б — фазові діаграми для нерівноважних фазових переходів. Інші параметри є такими: $\tau_D = 0,5$, $r_c = 1,0$.

ми, тоді як нижче критичних значень температури структури, навпаки, є добре вираженими (див. вставки на фазовій діаграмі).

4. ОСОБЛИВОСТІ ФАЗОВОГО РОЗШАРУВАННЯ БІНАРНИХ СИСТЕМ ПІД ДІЄЮ ОПРОМІНЕННЯ

Цікавим питанням є дослідження нерівноважних процесів фазового розшарування у конденсованих бінарних системах еквіатомового складу (бінарні стопи) під дією опромінення [82, 83]. Для цього, зазвичай, використовується відомий модель Кана-Хілліярд-Кука [1, 84, 85]. Нижче нами буде розглянуто модель, де ефектами когерентних напружень, анізотропії, які можуть виникати при фазовому розшаруванні, понехтувано. Основним питанням розділу є опис фазового розпаду бінарних систем у випадково неоднорідному середовищі, що виникає в результаті опромінення, та визначення ролі індукованих зовнішнім впливом ефектів.

Задача з'ясування стійкості фаз, особливостей їх утворення завдяки зовнішньому впливу на систему стає все більш актуальною, оскільки, її розв'язання уможливорює виявити нові характеристики систем та відповідних процесів, що знаходять своє застосування не лише в матеріалознавстві [2], в електроніці [86, 19], а й загалом, при прогнозуванні властивостей матеріалів, що піддані дії агресивного середовища. У першому підрозділі розглядаються процеси розпаду бінарних систем (стопів) та стійкість фаз за наявності балістичної дифузії. Модель, що розглядається, ґрунтується на виконанні гіпотези локальної рівноваги, де дифузійні потоки є Фіковими. У другому підрозділі увагу зосереджено на системах, в яких гіпотеза локальної рівноваги порушується внаслідок наявності ефектів пам'яті. Розглянуто процеси відбору структур у класі таких систем на початкових стадіях спинодального розпаду.

4.1. Фазове розшарування в параболічному моделю бінарної системи з двома мультиплікативними шумами

Метою даного підрозділу є висвітлення загального теоретичного формалізму для аналізу стохастичної системи зі збереженою динамікою за наявності двох мультиплікативних (внутрішнього та зовнішнього) шумів. Нами буде показано, що для таких систем важливу роль у процесах фазового розшарування відведено просторовим кореляціям флюктуаційних сил.

4.1.1. Узагальнений модель бінарної системи з двома шумами

Розглянемо бінарну систему $A_c B_{1-c}$, яка описується композиційним

полем $x(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r}) - \bar{c}$, де $c(\mathbf{r})$ — концентрація одного з компонентів бінарного розчину; $\bar{c} = 1/2$. Еволюція збереженого поля $x(\mathbf{r}, t)$ задається рівнянням неперервності $\partial_t x = -\nabla \cdot \mathbf{J}_D$, де \mathbf{J}_D — дифузійний потік. Припускаючи потік динамічним, можна задіяти й модифікувати Фіків закон $\mathbf{J}_D \equiv -M \nabla \delta F[x] / \delta x + \xi(x; \mathbf{r}, t)$, де ξ — флюктуації потоку, що вважаються Гавсовими і можуть загалом бути функцією поля x . У разі залежної від поля концентрації кінетичного коефіцієнта $M = M(x)$, флюктуаційно-дисипаційна теорема дає за визначенням: $\langle \xi(x; \mathbf{r}, t) \rangle = 0$, $\langle \xi(x; \mathbf{r}, t) \xi(x; \mathbf{r}', t') \rangle = 2\sigma^2 M(x) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$.

Для функціоналу вільної енергії використовуємо модель Гінзбурга–Ландау:

$$F[x] = \int \left(f(x) + \frac{1}{4} \beta d^{-1} (\nabla x)^2 \right) d\mathbf{r}, \quad (59)$$

де $f(x)$ — густина вільної енергії однорідного стопу, β — стала, пов'язана з радіусом взаємодії $\beta \equiv r_0^2 = \partial^2 F / \partial (\nabla x)^2 |_{\nabla x=0}$, інтегрування проводиться за об'ємом V , d — розмірність простору. Будемо вважати, що система описується густиною вільної енергії

$$f(x) = \frac{1}{2} \varepsilon x^2 + \frac{1}{4} x^4, \quad (60)$$

де керувальний параметер і безрозмірна температура визначаються співвідношеннями $\varepsilon = \theta - 1$, $\theta = T/T_c$ відповідно. Для залежної від поля рухливості використовуємо апроксимацію банеподібною функцією¹:

$$M(x) = \frac{1}{1 + \alpha x^2}, \quad \alpha \in [0, 1]. \quad (61)$$

Наближення (61) уможливило уникнути випадку, коли частинки системи перестають рухатися, потрапляючи в мінімуми потенціалу вільної енергії. Такий вибір успадковує відомі математичні моделі рухливості [87] і є апроксимацією моделю рухливості Кана–Хілліяра [74]. Характерно, що у такому моделю варіація парамет-

¹ Загалом, вигляд густини вільної енергії (60) можна одержати при розгляді стандартного моделю з використанням апроксимації Бреґга–Вільямса для вільної енергії бінарного стопу A – B : $f_{BW}(c) = \frac{1}{2} Z w_{AB} c(1-c) + T[c \ln(c) + (1-c) \ln(1-c)]$, де Z — число першої координаційної сфери, а w_{AB} — енергія упорядкування ($w_{AB} = 0,0553$ еВ для стопу Cu – Co за критичної температури $T_c = 0,1335$ еВ). Розвиваючи в ряд f_{BW} в околі критичної концентрації $\bar{c} = 1/2$, одержимо вираз (60). Енергія міжфазної взаємодії β є другою похідною Фур'є-перетвору енергії міжатомової взаємодії $v(k)$: $\beta = v''(k=0)/2$. Рухливість (61) задає клас відповідних функцій, що за певних умов для x^2 і α описує атомову рухливість для Канового дифузійного моделю: $M = c(1-c)$ [108].

ра α уможливилює розглянути окремо вплив адитивного шуму при $\alpha = 0$ та мультиплікативного при $\alpha \neq 0$. Для зручності, далі перейдемо до безрозмірних величин, вимірюючи \mathbf{r} в одиницях дифузійної довжини l_D , тобто $\mathbf{r}' = \mathbf{r}/l_D$, де параметер просторової взаємодії $\beta' \equiv r_0^2 / l_D^2$. Штрихи далі опустимо.

Оскільки інтенсивність впливу середовища визначається керувальним параметром, то для опису реальної ситуації є справедливим припущення про його флюктуації: $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_0 + \zeta(\mathbf{r}, t)$. Ланжевенове джерело $\zeta(\mathbf{r}, t)$ припустимо таким, що має Гавсові властивості $\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$, $\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = \tilde{\sigma}^2 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$ із просторовою кореляційною функцією $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ у вигляді (13). Підстановка виразу для дифузійного потоку у рівняння неперервності призводить до стохастичного рівняння неперервності, яке набирає вигляду

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M(x) \nabla \left[\frac{\delta F[x]}{\delta x} + x \zeta(\mathbf{r}, t) \right] \right) + \nabla m(x) \xi(\mathbf{r}, t). \quad (62)$$

Одержаний модель є стохастичним узагальненням відомого моделю фазового розшарування бінарних систем [88].

3.1.2. Реверсивні процеси розпаду бінарного розчину

Розглянемо принципи застосування теорії середнього поля, ґрунтуючись на стаціонарній функції розподілу, рівняння еволюції якої має врахувати відповідні особливості класів моделей. Для цього перейдемо до дискретного простору, переписуючи континуальне рівняння (62) у вигляді

$$\frac{dx_i}{dt} = (\nabla_L)_{ij} M_j (\nabla_R)_{jl} \left[\frac{\partial F}{\partial x_l} + x_l \zeta_l(t) \right] + (\nabla_L)_{ij} m_j \xi_j(t). \quad (63)$$

Одержання рівняння еволюції густини розподілу спирається на певні особливості оперування з дискретними градієнтними операторами. У рамках стандартних положень повна густина ймовірності $P([x], t)$ задовольняє рівнянню Фоккера–Планка [5, 53, 54, 89]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t} = & \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \Delta_{ij} \left(M_j \left[-\frac{\partial f}{\partial x_j} + \frac{\beta}{2d} \sum_r \Delta_{jr} x_r \right] - \right. \\ & \left. - \sigma^2 m_j \frac{\partial}{\partial x_j} m_j + \tilde{\sigma}^2 g_j \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial x_n} \Delta_{mn} c_{|j-n|} g_n \right) P, \end{aligned} \quad (64)$$

де $c_{|j-n|}$ — дискретне подання просторової кореляційної функції зовнішнього шуму.

Рівняння еволюції одноточкової густини ймовірності одержу-

ється інтегруванням (64) за всіма змінними, окрім x_i . У результаті приходимо до рівняння

$$\frac{\partial P_i(t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_j \Delta_{ij} \langle \widehat{M}_j \rangle P_i(t), \quad (65)$$

де введено позначення

$$\widehat{M}_j = M_j \left[-\frac{\partial f}{\partial x_j} + \frac{\beta}{2d} \sum_r \Delta_{jr} x_r \right] - \sigma^2 m_j \frac{\partial}{\partial x_j} m_j + \tilde{\sigma}^2 g_j \sum_{m,n} \frac{\partial}{\partial x_n} \Delta_{mn} c_{|j-n|} g_n. \quad (66)$$

Якщо стаціонарний розподіл — безпотоковий, $\langle \widehat{M}_j \rangle$ має задовольняти рівнянню $\sum_j \Delta_{ij} \langle \widehat{M}_j \rangle P_s(x_i) = 0$.

Для подальшого, звернімося до детерміністичного рівняння еволюції поля $x(\mathbf{r}, t)$, яке має вигляд $\partial x / \partial t = \nabla M \nabla \delta F / \delta x$. Для таких систем важливим є обмеження, яке накладається законом збереження

$$x_0 = \int d\mathbf{r} x(\mathbf{r}, t),$$

де x_0 — вихідне значення, задане початковими умовами. Саме останні суттєво впливають на характер фазового розшарування в системі. За положеннями теорії фазового розшарування для таких систем можна ввести точку переходу $\varepsilon_T(x_0)$: при $\varepsilon > \varepsilon_T(x_0)$ однорідний стан x_0 є стійким; при $\varepsilon < \varepsilon_T(x_0)$ система розшаровується на дві фази із x_1 та x_2 . Точка переходу буде співпадати із критичною лише при $x_0 = 0$, тобто $\varepsilon_T(x_0 = 0) = \varepsilon_c$. Відомо, що у детерміністичному випадку кінетичний коефіцієнт впливає лише на динаміку фазових переходів, не змінюючи стаціонарні стани системи. Отже, стаціонарні стани можуть бути обчислені розв'язанням скороченого рівняння $\nabla \delta F / \delta x = 0$. Тому, обмежений розв'язок буде таким $\delta F / \delta x = h$, де h — стала, що загалом подає ефективне поле, яке у рівноважних системах зводиться до різниці хемічних потенціалів двох фаз. У випадку гомогенної системи поле h залежить від початкових умов x_0 . Вище точки переходу однорідний стан є нестійким і система розшаровується на дві фази із значеннями поля x_1 та x_2 , а відповідна доля u задається за правилом $ux_1 + (1-u)x_2 = x_0$. Оскільки питомий потенціал вільної енергії є симетричним, то $x_1 = -x_2$, і тому маємо визначення $h = 0$, тобто дві фази мають тотожні хемічні потенціали [53].

Наведені міркування можуть бути застосовані і до стохастичного випадку. Враховуючи визначення умовного середнього,

$$\sum_{j \in nn(i)} \int \left[\prod_{m \neq i} dx_m \right] P x_j = \left[\sum_{j \in nn(i)} \int dx_j P(x_j | x_i, t) x_j \right] P_i(t) = 2d \langle x \rangle P_i(t), \quad (67)$$

та положення теорії середнього поля, за яких $\sum_j \Delta_{ij} x_j \rightarrow 2d(\langle x \rangle - x)$, при $\langle \widehat{M}_j \rangle = -h$ та $i = j$ одержимо рівняння:

$$-hP_s(x) = \left(M(x) [-\partial_x f(x) + \beta(\langle x \rangle - x)] - \sigma^2 m(x) \partial_x m(x) + 2d\tilde{\sigma}^2 g(x) [C_1 g(\langle x \rangle) \partial_x - C_0 \partial_x g(x)] \right) P_s(x), \quad (68)$$

де внаслідок середньопольового усереднення функції $g(x)$ по найближчих сусідах прийнято $\langle g(x) \rangle \cong g(\langle x \rangle)$ услід за [53]. Розв'язок цього рівняння буде таким:

$$P_s(x, \langle x \rangle, h) = N \exp \left(\int dx' \frac{\Omega(x'; \langle x \rangle; h)}{\Theta(x'; \langle x \rangle)} \right), \quad (69)$$

де

$$\Omega(x; \langle x \rangle; h) = M(x) [-\partial_x f(x) + \beta(\langle x \rangle - x)] - \frac{\sigma^2}{2} \partial_x M(x) - d\tilde{\sigma}^2 C_0 \partial_x g^2(x) + h, \quad (70)$$

$$\Theta(x; \langle x \rangle) = \sigma^2 M(x) + 2d\tilde{\sigma}^2 g(x) (C_0 g(x) - C_1 g(\langle x \rangle)).$$

Слід зауважити, що стаціонарний розподіл залежить тепер від двох параметрів, а саме, від середнього поля $\langle x \rangle$ та ефективного поля h , які, у свою чергу, самоузгодженим чином визначаються через стаціонарний розподіл.

Для обчислення цих невідомих параметрів зазначимо, що подана теорія середнього поля є суто локальною та призводить до визначень функції розподілу через h та $\langle x \rangle$ лише в околі даного елемента просторової ґратниці. Отже, в однорідному випадку середнє поле є однаковим по всій системі та збігається із початковою умовою, тобто $\langle x \rangle = x_0$. Тоді, за рахунок підстановки заданого значення x_0 замість $\langle x \rangle$ у стаціонарний розподіл (69), величина h обчислюватиметься розв'язанням рівняння

$$\langle x \rangle = \int x P_s(x, \langle x \rangle, h) dx \quad (71)$$

при $P_s = P_s(x; x_0; h)$. За точкою переходу, де система розділена на дві фази з $\langle x_1 \rangle$ та $\langle x_2 \rangle$, унаслідок симетрії питомого потенціалу $f(x)$ впливає рівність $\langle x_1 \rangle = -\langle x_2 \rangle$. Тому тепер h є однаковим для двох фаз, і у такому упорядкованому стані можна покласти $h = 0$. Отже, функція розподілу стає залежною від одного параметра $\langle x \rangle$, який знаходиться розв'язанням рівняння самоузгодження (71) при $P_s = P_s(x; \langle x \rangle; 0)$.

Залежність середнього поля від інтенсивностей внутрішнього та зовнішнього шумів подано на рис. 18, а при $h = 0$. Із нього видно, що

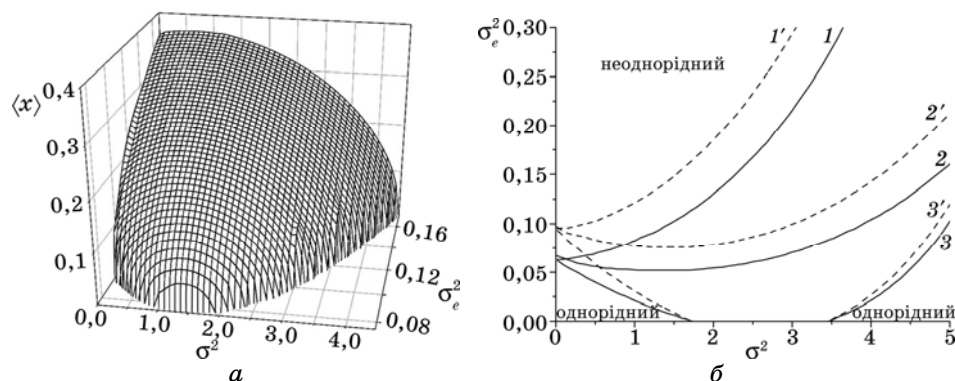


Рис. 18. Залежність середнього поля від інтенсивностей шумів при $\alpha = 0,4$, $\varepsilon = 0,2$, $\beta = 10$ (а) та фазова діаграма при різних значеннях радіуса кореляції r_c , параметра просторової неоднорідності β та параметра α (криві 1, 2, 3 відповідають $r_c = 0,0$, а 1', 2', 3' — $r_c = 1,0$: 1, 1' — $\beta = 8,3$, $\alpha = 0,4$; 2, 2' — $\beta = 10,0$, $\alpha = 0,4$, 3, 3' — $\beta = 8,3$, $\alpha = 0,6$) (б).

зростання інтенсивності зовнішнього шуму при від'ємних значеннях керувального параметра пригнічує реверсивне проходження фазового переходу вздовж осі інтенсивності внутрішнього шуму σ^2 . Перша критична точка σ_{c1}^2 зміщується ліворуч і при відсутності внутрішнього шуму система є упорядкованою завдяки зовнішнім флюктуаціям при переході через критичне значення. Критична точка σ_{c2}^2 рухається праворуч, так що зростання σ^2 розширює область інтенсивності внутрішнього шуму, де у системі реалізуються дві рівноправні фази з $\langle x_1 \rangle = -\langle x_2 \rangle$. Розглянемо вплив просторових кореляцій зовнішнього шуму r_c на положення критичних точок. Відповідну фазову діаграму подано на рис. 18, б при різних значеннях параметра неоднорідності β , параметра α (криві 1, 2, 3) та різних радіусах просторової кореляції шуму r_c (для порівняння впливу r_c при відповідних β та α криві із штрихованими позначками). Із рисунка видно, що зростання β призводить до зниження критичних інтенсивностей $\tilde{\sigma}^2$ та реалізації реверсивного проходження фазового переходу (порівняйте криві 1, 2), аналогічна ситуація спостерігається при зростанні параметра α (порівняйте криві 1, 3). Зростання радіуса кореляцій зовнішнього шуму призводить до зростання критичних значень його інтенсивності (порівняйте криві 1', 2', 3'). При цьому область реверсивного поведіння середнього поля вздовж осі інтенсивності внутрішнього шуму звужується.

Розглянемо макроскопічне наближення, поклавши $\beta \rightarrow \infty$, що уможливило знехтувати кореляціями, подаючи усереднення у вигляді $\langle \varphi(x) \rangle$; $\varphi(\langle x \rangle)$. У такому разі стаціонарний розподіл набирає форми $P_s(x, \langle x \rangle) = \delta(x - \langle x \rangle)$. Це уможливило записати стаціонарне

рівняння для визначення критичних значень параметрів системи у вигляді

$$h = M(\langle x \rangle) f'(\langle x \rangle) - \frac{\sigma^2}{2} M'(\langle x \rangle) + \frac{2d(C_1 - C_0)\tilde{\sigma}^2}{2} (\langle x \rangle^2 M^2(\langle x \rangle))', \quad (72)$$

де штрих означає диференціювання за аргументом. Наведене рівняння одержується інтегруванням рівняння (68).

Слід враховувати вплив початкових умов, які задають величину ефективного поля h . При $\varepsilon > \varepsilon_T$ поле є гомогенним, тому у рівнянні (72) слід покласти $\langle x \rangle = x_0$, що подає величину h , як функцію від x_0 . При $\varepsilon < \varepsilon_T$ маємо $h = 0$. Тоді рівняння (72) розв'язується відносно $\langle x \rangle$. Лінія переходу відповідає умові $\langle x \rangle_1 = x_0$ і відповідним чином подає точку переходу ε_T ; критична точка $\varepsilon_c = \varepsilon_T(x_0 = 0)$ тепер задається виразом

$$\varepsilon_c = -\alpha\sigma^2 + 2d\tilde{\sigma}^2(C_0 - C_1). \quad (73)$$

Таким чином, маємо конкуренцію флюктуаційних сил: внутрішній шум призводить до пониження критичного значення керувального параметра, а зовнішній збільшує його. Маємо зміщення критичної точки із множителем $2d$, пов'язане не лише із інтенсивністю шуму $\tilde{\sigma}^2 C_0$, але й з просторовими кореляціями (доданок C_1) перших сусідів. Кореляційний внесок від сусідніх вузлів ґратниці для моделей зі збереженою динамікою є суттєвим.

Наприкінці зазначимо, що у макроскопічному наближенні маємо лише одне критичне значення керувального параметра, яке відповідає одній точці фазового переходу. Це пов'язане лише з тим, що використовується припущення $\beta \rightarrow \infty$. Дві точки фазового переходу та й реверсивність поведінки параметра порядку можливі лише при скінченних значеннях інтенсивності просторової взаємодії [90, 91].

4.2. Фазове розшарування у стохастичних системах параболічного типу під дією опромінення

Метою даного підрозділу є висвітлення особливостей процесів фазового розшарування бінарних систем, що знаходяться під дією опромінення високоенергетичними частинками у потоці зі стохастичними властивостями. Розглядаються системи, що описуються Фіковими потоками: термічно стимульованим та балістичним (атермічним) потоком. Їх сума призводить до повного потоку, який входячи до рівняння неперервності композиційного поля, призводить до параболічного рівняння Кана-Хілл'ярда [1, 84, 85]. За умов наявності флюктуацій дифузійних потоків проводиться опис процесів розпаду та встановлюється характер впливу стохастичних джерел на процеси фазового розшарування.

4.2.1. Статистичне представлення бінарної системи параболічного типу зі стохастичними потоками

Для дослідження поведінки опромінюваної бінарної системи скористаємося модельними представленнями, наведеними у підрозділі 4.1.1. Інтенсивність шуму σ^2 дифузійного потоку \mathbf{J}_D зводиться до температури теплової бані у вигляді: $\sigma^2 = T\Delta \exp(-E_{mv}/T)$, де E_{mv} — енергія міграції вакансій (наприклад, $E_{mv} = 0,8$ еВ для Cu), Δ — стала (надалі для зручності $\Delta = 1, 0$).

Для опису дифузії у флюктуаційному середовищі, згенерованому дією опромінення, яке характеризується потоком $\mathbf{J}_e = -D_e^0 \Delta x$, надалі, як і раніше, будемо вважати, що величина D_e^0 має регулярну D_e та випадкову ζ складові. Тоді величину \mathbf{J}_e можна визначити як суму $\mathbf{J}_e = \mathbf{J}_e^{\text{det}} + \mathbf{J}_e^{\text{st}}$. Регулярна частина $\mathbf{J}_e^{\text{det}}$ характеризується величиною $D_e = \phi \sigma_r \langle R \rangle^2$, де σ_r — переріз розсіяння, що визначає число вакансій, утворених за одиницю дози опромінення. Відповідна стохастична частина \mathbf{J}_e^{st} задає дисперсію довжин атомових стрибків $\langle (\delta R)^2 \rangle$. Тоді стохастична компонента $\zeta(\mathbf{r}, t)$ має Гавсові властивості:

$$\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2D_e \sigma_e^2 C \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{r_c} \right) \delta(t - t'), \quad \sigma_e = \langle (\delta R)^2 \rangle / \langle R \rangle^2. \quad (74)$$

Шум $\zeta(\mathbf{r}, t)$ є зовнішнім, оскільки він викликаний зовнішнім впливом на систему. Просторова кореляційна функція має вигляд (13) з радіусом кореляції положень атомів r_c , що змінили свої позиції. В подальшому розглянемо випадок, коли $\phi \sigma_r \tau_0 = 1$, де τ_0 — характерний часовий масштаб.

Таким чином, еволюція композиційного поля задається рівнянням непереривності $\partial_t x = -\nabla \cdot \mathbf{J}_{\text{tot}}$, де повний потік \mathbf{J}_{tot} складається з двох частин: $\mathbf{J}_{\text{tot}} = \mathbf{J}_D + \mathbf{J}_e$. З урахуванням попередніх виразів рівняння непереривності набуває вигляду:

$$\partial_t x = \nabla \cdot M \left[\nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \frac{D_{\text{bal}}}{M} \nabla x \right] + \nabla \cdot \sqrt{M} \xi + \nabla \cdot \zeta \nabla x. \quad (75)$$

Функціонал вільної енергії запишемо у формі Гінзбурга–Ландау (59) з густиною вільної енергії у формі (60) та рухливістю (61). Для зручності, далі скористаємося процедурою обезрозмірнення, наведеною у підрозділі 4.1.1.

Підставляючи похідну функціонала вільної енергії у вираз (75), одержимо:

$$\partial_t x = \nabla \cdot M \left[\left(\partial_{xx}^2 f + \frac{D_e}{M} \right) \nabla x - \beta \nabla^3 x \right] + \nabla \cdot \sqrt{M} \xi + \nabla \cdot \zeta \nabla x. \quad (76)$$

Вводячи позначення для перенормованої густини вільної енергії $\varphi(x)$, де

$$\partial_{xx}^2 \varphi = \partial_{xx}^2 f + \frac{D_e}{M}, \quad (77)$$

Ланжевенове рівняння (76) можна переписати у вигляді:

$$\partial_t x = \nabla \cdot M[\partial_{xx}^2 \varphi \nabla x - \beta \nabla^3 x] + \nabla \cdot \sqrt{M} \xi + \nabla \cdot \zeta \nabla x. \quad (78)$$

На його основі можна скористатися Мартановою теорією середнього поля [10] для встановлення особливостей стійкості фаз.

4.2.2. Ранні стадії розпаду

В континуальній границі динаміка структурного фактора підкоряється рівнянню

$$\begin{aligned} \frac{dS(k, t)}{dt} = & \quad (79) \\ = -2k^2 \omega(k) S(k, t) + 2\sigma^2 k^2 - \frac{2\alpha k^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} S(q, t) + \frac{2k^2 D_e \sigma_e^2}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{q} C(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) S(q, t) \end{aligned}$$

із законом дисперсії

$$\omega(k) = \varepsilon + D_e + \alpha \sigma^2 + [\beta - D_e \sigma_e^2 C(0)] k^2 + D_e \sigma_e^2 [\nabla^2 C(r)]_{r=0}. \quad (80)$$

З аналізу останнього виразу випливає, що однорідний стан є стійким при $\omega(k) < 0$. Таким чином можна визначити ефективний керувальний параметер

$$\varepsilon_{ef} = \varepsilon + D_e + \alpha \sigma^2 - D_e \sigma_e^2 |\nabla^2 C(r)|_{r=0}. \quad (81)$$

Якщо ε набуває додатніх значень, то нульовий стан буде стійким. З приведенного випливає, що зовнішні флюктуації знаходяться в конкуренції не тільки з регулярною компонентою зовнішнього джерела, але і з внутрішнім флюктуаційним джерелом: зростання D_e і $\alpha \sigma^2$ збільшує критичне значення керувального параметра, стримуючи систему в однорідному стані, а зовнішні флюктуації інтенсивності σ_e^2 , за рахунок їх скорельованості у просторі, сприяють втраті стійкості однорідного стану. Таким чином, втрата стійкості визначається температурою θ^T , зображеною на рис. 19, а. З нього випливає, що з ростом кореляційного радіуса зовнішнього шуму критичне значення температури знижується, тобто при скорельованих флюктуаціях розвиток нестійких хвиль відбувається при темпера-

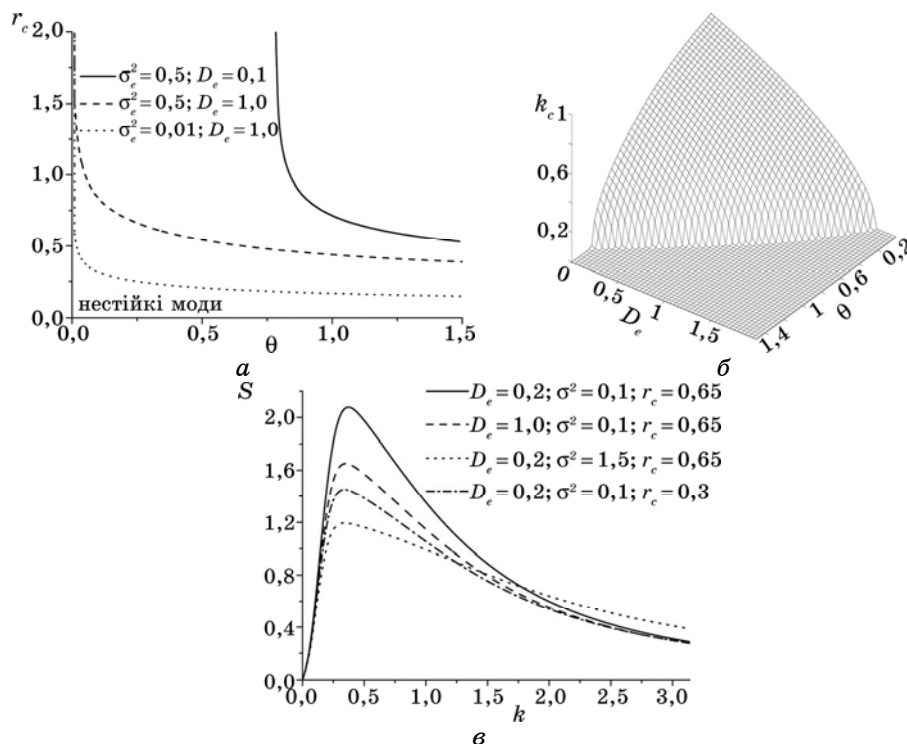


Рис. 19. Фазова діаграма для лінійної аналізи на стійкість (а), критичні значення хвильового вектора k_c від температури θ і D_e (б) та структурний фактор $S(k)$ при $t = 5$. Нестійкі моди з $k < k_c$ з'являються під кривою при: $D_e = 0,1$, $\sigma_e^2 = 0,5$ (суцільна лінія), $D_e = 1,0$, $\sigma_e^2 = 0,5$ (штрихова лінія) і $D_e = 1,0$, $\sigma_e^2 = 0,01$ (суцільна лінія). На рисунку (в) залежності одержано при $\alpha = 0,5$, $\beta = 2,0$, $\theta = 0,3$.

турах, нижчих, аніж за відсутності кореляційних ефектів.

З виразу (80) можна визначити критичне значення хвильового числа, яке обмежує область реалізації нестійких мод: $k < k_c$, де

$$k_c = \sqrt{\frac{\sigma_e^2 \left[\left[\nabla^2 C(r) \right]_{r=0} \right] - \alpha \sigma^2(\theta) - \varepsilon(\theta) - D_e}{\beta - D_e \sigma_e^2 C(0)}}. \quad (82)$$

З рисунку 19, б видно, що зростання інтенсивності балістичного перемішування D_e призводить до зростання періоду модульованої структури при розпаді на ранніх стадіях. Аналогічна ситуація спостерігається при рості температури, що свідчить про еквівалентність внесків температури і балістичного перемішування та підвищення температури внаслідок балістичної дифузії. Аналізуючи одержаний закон дисперсії, приходимо до висновку, що максимальні значення

фактора підсилення $R(k) = -k^2 \omega(k)$ відповідають $k_m = k_c / \sqrt{2}$.

Як показало дослідження поведінки структурного фактора (рис. 19, *е*), виникнення структурного безладу, викликане збільшенням D_e , гомогенізує розчин, що підтверджує зниження піку структурного фактора.

Зниження піку $S(k)$ на ранніх стадіях спостерігається також із ростом σ_e^2 , однак збільшення радіуса кореляції r_c сприяє структуроутворенню, що підтверджує зростання піку $S(k)$.

4.2.3. Індукований зовнішнім потоком реверсивний характер фазового розшарування

Для вивчення особливостей протікання фазового розпаду в стаціонарному наближенні необхідно знати стаціонарну густину ймовірності $P_s([x])$. На її основі у рамках модифікованої теорії середнього поля може бути проведено аналітичне дослідження біфуркаційних та фазових діаграм, що ілюструють характер фазового розшарування. Як і в класичній Вейссовій теорії молекулярного поля, поведінка системи описується середнім полем, яке є параметром порядку для таких фазових переходів [52, 53, 92]. Відповідні процеси у бінарній системі без зовнішнього потоку було висвітлено у роботі [67]. У даному підрозділі увагу зосереджено на впливі компонент балістичного потоку на процеси розпаду бінарної системи.

Рівняння еволюції густини ймовірності. Для одержання рівняння Фоккера–Планка скористаємося результатами узагальненого підходу [7], у рамках якого розглянуто два класи стохастичних систем з двома шумами різної природи. У роботах [7, 52, 53, 89] було виявлено, що принципову роль у стохастичних системах зі збереженою динамікою відіграють просторові кореляції флюктуаційних джерел.

Використовуючи стандартний підхід для одержання рівняння Фоккера–Планка, розглянемо стохастичне Ліувіллове рівняння (29) для розподілу $\rho(t)$, яким визначається повна густина ймовірності $P_s([x], t)$ за визначенням (28). Після підстановки в нього часової похідної приходимо до рівняння:

$$\begin{aligned} \partial_t P = & -\frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \nabla_{ij}^L M_j \left[\nabla_{jl}^R \frac{\partial F}{\partial x_l} + \frac{D_e}{M_j} \nabla_{jl}^R x_l \right] \right\} P - \\ & -\frac{\partial}{\partial x_i} \left[\langle \nabla_{ij}^L m_j \xi_j(t) \rho \rangle + \langle \Delta_{ij} x_j \zeta_j(t) \rho \rangle \right]. \end{aligned} \quad (83)$$

Для обчислення кореляторів у другій частині рівняння використаємо теорему Новікова [64], згідно з якою при $l = 1$ маємо:

$$\langle \nabla_{ij}^L m_j(t) \xi_j(t) \rho \rangle = \sigma^2 \int_0^t dt' \delta_{jk} \delta(t-t') \left\langle \frac{\delta \nabla_{ij}^L m_j(t) \rho}{\delta \xi_k(t')} \right\rangle, \quad (84)$$

$$\langle \Delta_{ij} x_j \zeta_j(t) \rho \rangle = D_e \sigma_e^2 \int_0^t dt' C_{|j-k|} \delta(t-t') \left\langle \frac{\delta \Delta_{ij} x_j \rho}{\delta \zeta_k(t')} \right\rangle.$$

Вводячи позначення $g_{ij} = \{(\nabla_L)_{ij} m_j, \Delta_{ij} x_j\}$, $\lambda = \{\xi, \zeta\}$, для останнього множника одержимо:

$$\frac{\delta g_{ij} \rho(t)}{\delta \lambda_k(t')} = - \sum_l g_{ij} \frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\delta x_l(t)}{\delta \lambda_k(t')} \Big|_{t=t'} \rho. \quad (85)$$

Згідно з формальним розв'язком Ланжевенового рівняння, функції відгуку набувають вигляду:

$$\frac{\delta x_l(t)}{\delta \xi_k(t')} \Big|_{t=t'} = \nabla_{lk}^L m_k, \quad \frac{\delta x_l(t)}{\delta \zeta_k(t')} \Big|_{t=t'} = \Delta_{lk} x_k. \quad (86)$$

Враховуючи вирази (83)–(86), приходимо до рівняння Фоккера–Планка для повної густини ймовірності P у дискретному просторі:

$$\begin{aligned} \partial_t P = & - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\nabla_{ij}^L M_j \left[\nabla_{jl}^R \frac{\partial F}{\partial x_l} + \frac{D_e}{M_i} \Delta_{ij} x_j \right] \right) P - \\ & - \sigma^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \nabla_{ij}^L m_j \frac{\partial}{\partial x_j} \nabla_{ji}^R m_i P + D_e \sigma_e^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \Delta_{ij} x_j \frac{\partial}{\partial x_l} C_{|j-k|} \Delta_{kl} x_l P, \end{aligned} \quad (87)$$

де враховані вирази для ліво- і правосторонніх градієнтних операторів.

Знайдемо еволюційне рівняння для одноточкової густини ймовірності $P_i(t) = \int [\prod_{k \neq i} dx_k] P$. Інтегруючи одержане рівняння (87), маємо

ємо $\frac{\partial P_i(t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \Delta_{ij} \langle M_j \rangle P_i(t)$, де введено оператор

$$M_j = M_j \left[- \frac{\partial f}{\partial x_j} + \frac{\beta}{2d} \Delta_{jr} x_r - \frac{D_e x_j}{M_j} \right] - \sigma^2 m_j \frac{\partial}{\partial x_j} m_j + \tilde{\sigma}^2 x_j \frac{\partial}{\partial x_n} \Delta_{mn} C_{|j-n|} x_n. \quad (88)$$

Середньопольове представлення у стаціонарному режимі. В стаціонарному випадку, при умові відсутності потоку, середнє $\langle \tilde{M}_j \rangle$ задовольняє умові $\Delta_{ij} \langle \tilde{M}_j \rangle P_s(x_i) = 0$, де P_s — стаціонарна функція розподілу. Приймаючи $i = j$ та опускаючи індекси, одержимо середньо-

польове стаціонарне рівняння [53]:

$$\begin{aligned}
 -hP_s &= & (89) \\
 &= \left(M \left[-\partial_x f + \beta(\eta - x) - \frac{D_e x}{M} \right] - \frac{\sigma^2}{2} \partial_x M + 2dD_e \sigma_e^2 x \left[C_1 \eta \frac{\partial}{\partial x} - C_0 \frac{\partial}{\partial x} x \right] \right) P_s,
 \end{aligned}$$

де $h = \text{const}$ — ефективне стаціонарне поле, яке для рівноважних систем є різницею хемічних потенціалів двох фаз. Просторова взаємодія, яка описується Ляпласіаном, задається введенням середнього поля η згідно з правилом: $\Delta_{ij} x_j \rightarrow 2d(\langle x \rangle - x)$, $\eta \equiv \langle x \rangle$.

Розв'язок рівняння (89) набуває квази-Гіббсового вигляду:

$$P_s(x, \eta, h) = N \exp \left(\int dx' \frac{\Omega(x', \eta, h)}{\Xi(x'; \eta)} \right), \quad (90)$$

де

$$\begin{aligned}
 \Omega(x, \eta, h) &= -M \partial_x f - D_e x + \beta M(\eta - x) - \frac{\sigma^2}{2} \partial_x M - 2dD_e \sigma_e^2 C_0 x + h, \\
 \Xi(x; \eta) &= \sigma^2 M + 2dD_e \sigma_e^2 x(C_0 x - C_1 \eta).
 \end{aligned} \quad (91)$$

Для визначення невідомих величин h і η використаємо умову локальності розглянутого середньопольового підходу, і визначимо розподіл P_s для даної комірки, як функцію від h і середнього поля η сусідніх комірок.

Знайдемо точки переходу та критичні точки. Для цього скористаємося процедурою, описаною у підрозділі 4.1.2. Розв'язуючи рівняння самоузгодження (71) з $\langle x \rangle \equiv \eta$ при фіксованому значенні середнього поля, одержуємо ефективне поле h . Нижче порогу система розпадається на дві фази з $\langle x_1 \rangle = -\langle x_2 \rangle$, і поле h має бути однаковим в кожній з цих двох фаз і дорівнювати нулю. Отже, лише нижче порогу значення $\langle x \rangle$ визначене, як розв'язок рівняння самоузгодження з $P_s(x, \eta, 0)$.

Розглянемо найпростіший випадок, при фіксованому значенні початкової концентрації x_0 . Значення ефективного постійного поля h в залежності від σ_e^2 , D_e і θ зображено на рис. 20. Точки переходу для вище зазначених величин визначаються з умови $h = 0$. З зображених залежностей $h(D_e)$ і $h(\theta)$, видно, що поле h приймає ненульові значення вище точок переходу, D_e^T і θ^T , відповідно. Оскільки поле h для розглядуваної системи виступає в якості хемічного потенціалу, можна стверджувати, що при фіксованому x_0 величина h є скомпенсованою, і спинодальний розпад відбувається в області параметрів, де $h = 0$. З аналізу наведеної залежності $h(\sigma_e^2)$ випливає, що упорядкування відбувається в інтервалі інтенсивностей шуму $(\sigma_{e1}^{2T}, \sigma_{e2}^{2T})$.

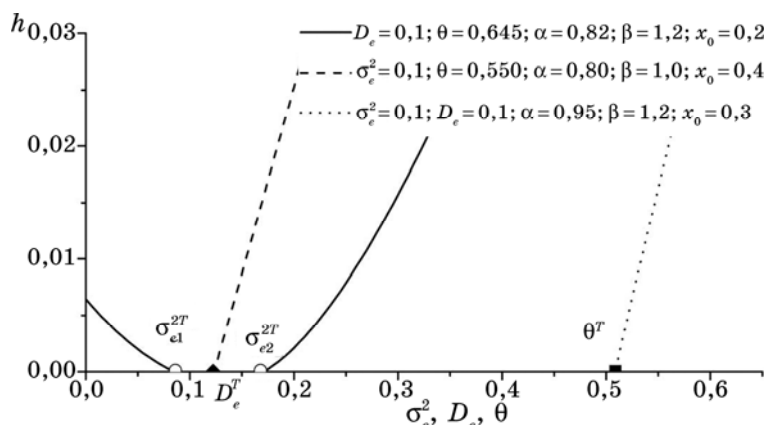


Рис. 20. Постійне поле h в залежності від σ_e^2 (суцільна крива), D_e (пунктирна крива) і θ (точкова крива) одержане при $r_c = 0,65$ та заданому значенні початкової концентрації x_0 . Решта параметрів задано на вставці.

Таким чином, проведені обчислення вказують на існування обмеженого інтервалу критичних значень інтенсивності шуму, для яких $\eta \neq 0$.

Проведемо аналіз поведінки середнього поля η від параметрів системи, як розв'язку рівняння самоузгодження при $h = 0$. Як показано на рис. 21, а, зі зменшенням інтенсивності балістичного перемішування D_e , система потрапляє в область розпаду, де величина середнього поля приймає ненульові значення. Слід зазначити, що опромінення призводить до гомогенізації композиційного поля. При переході через критичне значення D_e^c система розпадається на дві еквівалентні фази $\langle x_1 \rangle = -\langle x_2 \rangle$; відповідний фазовий перехід відповідає спиnodальному розпаду. При заданому початковому значенні концентрації $\langle x \rangle = x_0$, точка переходу відповідає значенню $D_e = D_e^T$, при цьому працює правило важеля, яке визначає частки двох компонентів розчину $\langle x_1 \rangle \neq -\langle x_2 \rangle$. Як бачимо, зростання інтенсивності зовнішнього шуму σ_e^2 зсуває критичне значення D_e^c в бік великих значень. Однак подальше зростання інтенсивності σ_e^2 знову понижує величину D_e^c .

Порівнюючи криві з різним радіусом кореляції флюктуацій r_c , легко прослідкувати немонотонний характер поведінки середнього поля при великих значеннях r_c . Зі зростанням r_c критичне значення D_e^c зменшується. Крім того, присутня конкуренція детерміністичної та стохастичної компонент потоку опромінення. На рисунку 21, б зображено залежність $\eta(\sigma_e^2)$ при різних значеннях радіуса кореляцій зовнішніх флюктуацій r_c та інтенсивності D_e . Легко бачити немонотонність поведінки параметра порядку від інтенсивності зовнішнього шуму σ_e^2 . Спиnodальний розпад відбувається у фіксо-

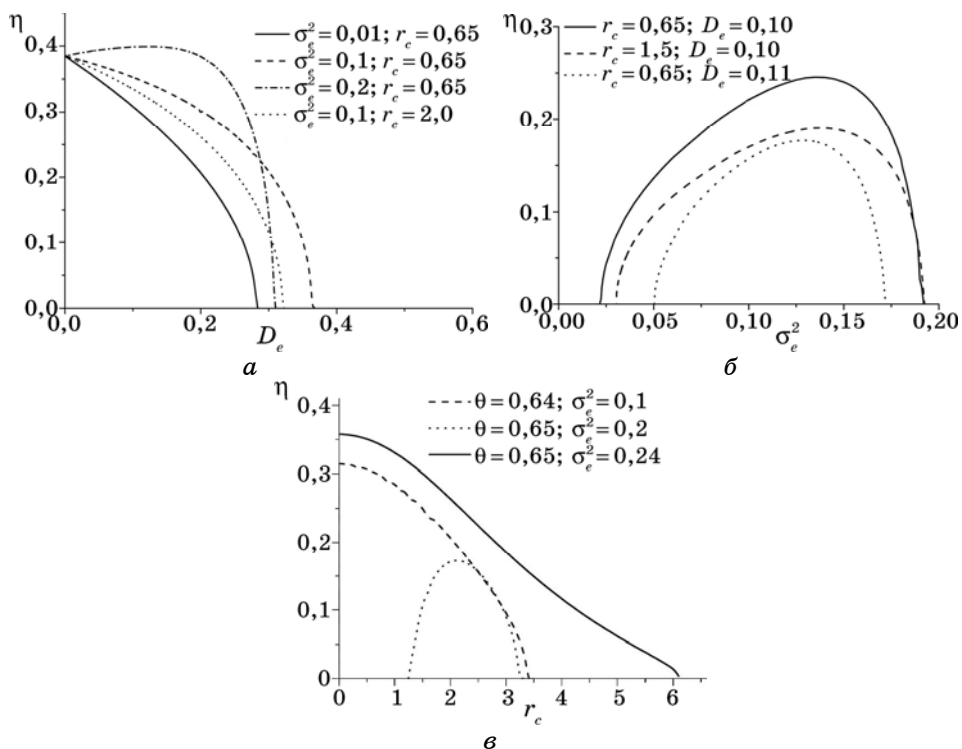


Рис. 21. Значення середнього поля η від: *a* — інтенсивності регулярної частини балістичного перемішування D_e ; *б* — інтенсивності зовнішнього шуму σ_e^2 ; *в* — радіуса кореляцій зовнішніх флюктуацій. Решта параметрів: $\alpha = 0,82, \beta = 1,2; a - \theta = 0,645; б - \theta = 0,645; в - D_e = 0,1$.

ваному інтервалі інтенсивностей шуму. Зростання значення регулярної частини балістичного перемішування зменшує область розшарування.

На рисунку 21, *в* показано можливість появи упорядкованого стану всередині фіксованого інтервалу значень радіуса кореляцій флюктуацій. Великі флюктуації пригнічують реверсивність поведінки середнього поля. Зазначені перетворення станів системи можна пояснити у такий спосіб. При низьких температурах балістичне перемішування призводить до появи лише безладу (гомогенізації бінарного розчину). Збільшення температури спонукає еволюцію системи до гомогенного стану, супроводжувану термічним шумом та випадковими перескоками атомів, що викликані незначним зовнішнім шумом σ_e^2 . Однак, великі флюктуації σ_e^2 руйнують упорядковані стани системи. Отже, перемішування атомів внаслідок детермінованої дії потоку, коли всі високоенергетичні частинки, взаємодіючи з речовиною, призводять до вибиття атомів на середню до-

вжину, може бути пригнічено розкидом довжин таких стрибків внаслідок розкиду частинок потоку опромінення за енергіями. Великий розкид за енергіями або великий розкид за довжинами стрибків призводять до хаосу у розподілі атомів, тобто гомогенізації при великих інтенсивностях зовнішнього шуму. Одержаний результат щодо існування упорядкованого стану системи у фіксованому інтервалі інтенсивностей зовнішнього шуму, з одного боку, є наслідком конкуренції регулярної та випадкової складових потоку опромінення, а з іншого, — скорельованості зовнішніх флюктуацій, яка призводить до конкуренції термічно стимульованого потоку та балістичного перемішування.

Для більш детальної аналізи знайдених особливостей поведінки параметра порядку розглянемо відповідні фазові діаграми, які задають появу нетривіального розв'язку рівняння самоузгодження при $h=0$. Як бачимо з рис. 22, *a*, зростання дисперсії довжин атомових

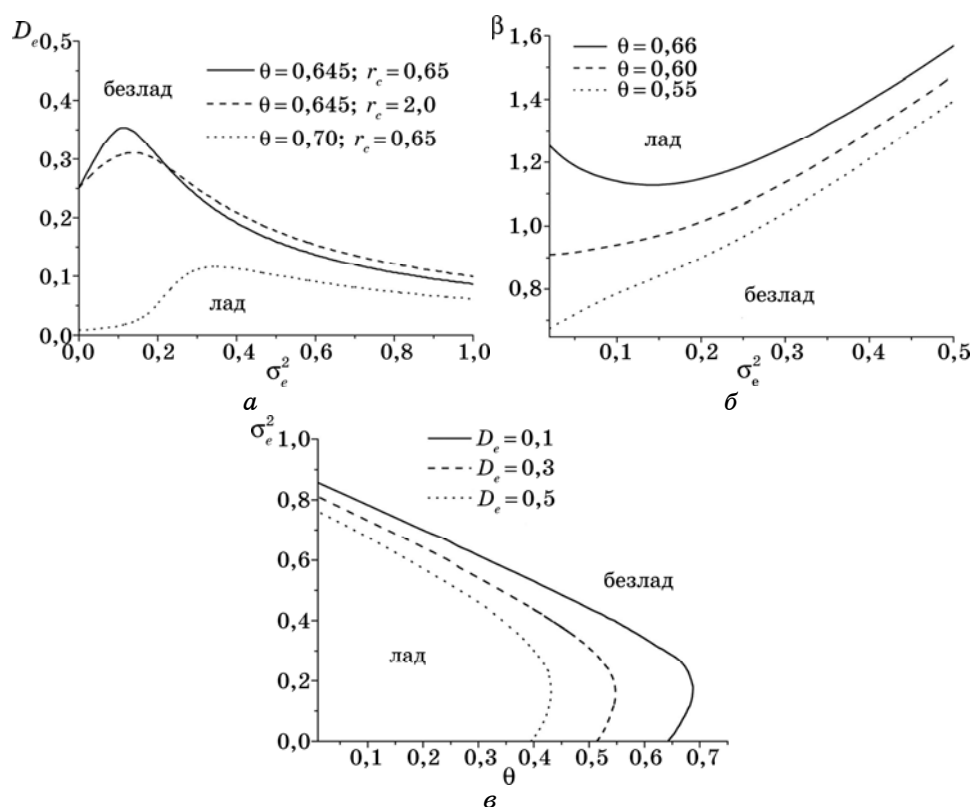


Рис. 22. Середньопольові фазові діаграми з $r_c = 0,65$: *a* — при різній температурі θ та $\beta = 1,2$, з $\alpha = 0,8$; *б* — при різній θ та $D_e = 0,1$, з $\alpha = 0,95$; *в* — при різних D_e , з $\alpha = 0,95$, $\beta = 1,2$.

стрибків викликає безлад у системі при низьких дозах опромінення. При підвищенні дози D_e^2 спочатку повністю неупорядкована система зі збільшенням σ_e^2 упорядковується. Однак, великі флюктуації гомогенізують стоп. З рисунку 22 бачимо, що при низьких температурах спостерігається монотонне зростання критичного радіуса взаємодії $r_0 \propto \sqrt{\beta}$ з підвищенням інтенсивності зовнішніх флюктуацій. Однак, ріст температури призводить до немонотонної залежності від β^2 і, як наслідок, до реверсивного фазового переходу.

Варто зазначити, що детермінована та стохастична складові зовнішнього потоку, незалежно один від одного, переводять систему в неупорядкований стан, але одночасно можуть і конкурувати між собою в обмеженій області інтенсивності зовнішнього шуму, індуючи реверсивні процеси упорядкування (рис. 22, *в*).

Моделювання процесів розпаду. Для підтвердження результатів одержаних в теорії середнього поля проведемо їх порівняння з комп'ютерним моделюванням. Для цього чисельно проінтегруємо Ланжевенове рівняння (78) на квадратній двовимірній ґратниці з $N \times N = 120 \times 120$ комітками та періодичними межовими умовами. При чисельному моделюванні використано Мільштейнову методу [5] з кроком по ґратниці $l = 0,5$ та кроком інтегрування $\Delta t = 0,002$. При вихідній початковій конфігурації $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle \neq 0$ та невеликим початковим розкидом композиційного поля $\langle (\delta x)^2 \rangle = 0,2$ система розпадається на дві фази за механізмом нуклеації, зображеним на рис. 23, *а*. Для випадку початкової конфігурації з $\langle x(\mathbf{r}, 0) \rangle = 0$ в системі утворюються модульовані структури, і розпад відбувається за механізмом спиnodального розпаду (див. рис. 23, *б*).

Для ілюстрації реверсивних фазових переходів в системі, значення основних параметрів обрані таким чином, щоб реверсивність виникала лише при зміні інтенсивності зовнішнього шуму. Відповідні просторові структури, одержані при чисельному моделюванні на великих часових інтервалах при різних значеннях інтенсивності зовнішнього шуму, приведені на рис. 24. З нього видно, що при малих інтенсивностях зовнішнього шуму (див. рис. 24, *а*) поле концентрації мало відхиляється від 0, і модульовані структури практично не утворюються, міжфазні межі є занадто розмитими. При значеннях σ_e^2 , які відповідають області упорядкування (рис. 24, *б*), в системі відбувається спиnodальний розпад з модульованими структурами, що мають чіткі міжфазні межі, що добре зіставляється з результатами теорії середнього поля. При великих σ_e^2 (див. рис. 24, *в*) шум руйнує області упорядкування, в результаті чого спостерігаємо стохастичну картину локального впорядкування–розупорядкування без фазового розпаду.

Додаткову інформацію щодо даного процесу можна одержати, якщо розглянути поведінку сферично усередненого структурного

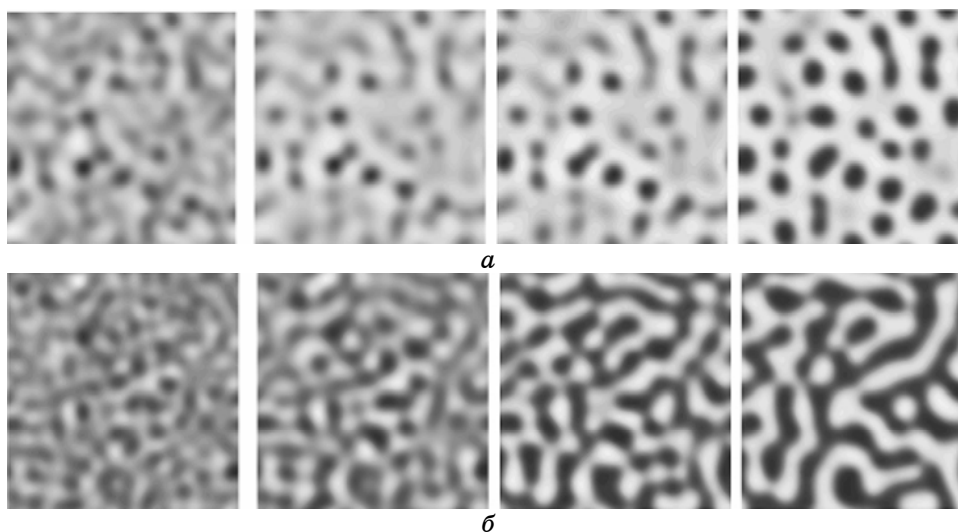


Рис. 23. Чисельне моделювання процесу розпаду бінарної системи на квадратній ґратниці за механізмом нуклеації (а) та спинодального розпаду (б) в області параметрів системи, які відповідають упорядкуванню системи. Композиційне поле x змінюється від -1 (темні комірки) до 1 (світлі комірки).

фактора. Розглянемо ранні стадії розпаду. Поведінку структурного фактора при різних інтенсивностях шуму σ_e^2 зображено на рис. 24 під відповідними структурами. З часом пік структурного фактора $S(k, t)$ зміщується в бік малих k , що говорить про грубшання зерен виділень. Для невеликих інтенсивностей шуму σ_e^2 пік структурного фактора слабо виражений і розмитий (рис. 24, а), що говорить про слабку виразність структур із сильно дифузними межами. На проміжних σ_e^2 у відповідній залежності структурного фактора присутній добре виражений пік (рис. 24, б), тобто межі структур стають менш дифузними і об'єднання атомів утворює модульовані структури спинодального розпаду. Великі флюктуації (рис. 24, в) руйнують регулярні структури, відсутність піка свідчить про рівноправність всіх мод — неможливість утворення упорядкованих фаз.

Зростання другого статистичного моменту $J(t)$, яке говорить про процеси упорядкування в системі при різних значеннях інтенсивності шуму, зображено на рис. 25, а. З нього видно, що при $\sigma_e^2 = 0,1$ величина $J(t)$ зростає, і досягає свого стаціонарного значення, що говорить про реалізацію упорядкування в системі. При малих σ_e^2 другий момент спочатку спадає до нуля і далі суттєво не змінюється на великих проміжках часу (для порівняння динаміки $J(t)$ при малих і середніх σ_e^2 див. вставку на рис. 25, а). При великих σ_e^2 нестійкі моди відсутні, і відповідне значення $J(t)$ не зростає, а випадковим чином змінюється в деякій заданій обмеженій області (представлена

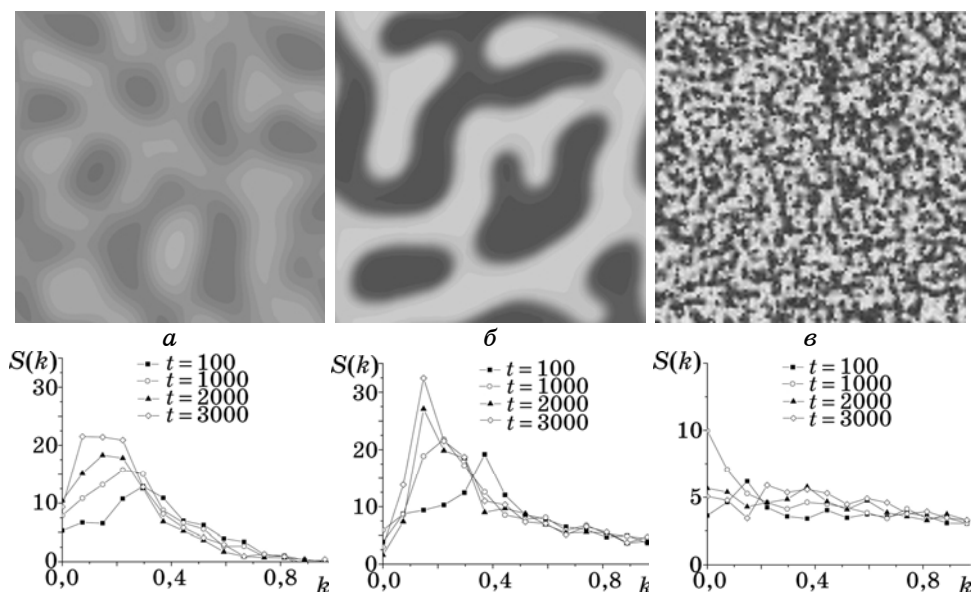


Рис. 24. Структури одержані з рівняння (91) при $t = 1000$, $T = 0,65$, $\beta = 2,0$, $r_c = 0,65$, $D_e = 0,1$, $\Delta = 1,0$, $E_{mv} = 0,9$, $\alpha = 0,8$ і а — $\sigma_e^2 = 0,005$, б — $\sigma_e^2 = 0,1$, в — $\sigma_e^2 = 1,0$. Поле концентрації x змінюється в межах від -1 (чорні комірки) до 1 (білі комірки). Відповідні залежності структурного фактора для різних часових зрізів наведено під структурами.

залежність відповідає Гавсовому шуму). Стаціонарну поведінку параметра J після усереднення на великих часових інтервалах за 10-ма незалежними експериментами зображено на рис. 25, б. З нього видно, що з ростом σ_e^2 характерна величина $\langle J \rangle = \langle J(t \rightarrow \infty) \rangle$ спочатку зростає, а потім починає спадати.

Таким чином, є дві особливі точки, в яких якісно змінюється тип поведінки системи. Дійсно, на одержаній залежності узагальненої сприйнятливості $\chi = \langle J^2 \rangle - \langle J \rangle^2$, яка вимірює зміну флюктуацій величини J в залежності від інтенсивності шуму σ_e^2 , маємо дві особливості на малих і великих значеннях σ_e^2 . Це відповідає зростанню флюктуацій параметра порядку в двох критичних точках, тобто, реалізації реверсивного фазового переходу при зміні інтенсивності зовнішнього шуму.

Як відомо, процес фазового розпаду характеризується наявністю режиму коалесценції, з законом росту зерен $R(t) \propto t^z$, де z — показник росту. Зміну середнього розміру доменів з часом $R(t)$ зображено на рис. 26, а при малих, середніх і великих значеннях інтенсивності шуму σ_e^2 . Як бачимо, при середніх значеннях σ_e^2 на пізніх стадіях спостерігається альгебрична форма закону росту домен із $z \approx 0,337$ (див. вставку), що задовольняє закону Ліфшиця–Сльозова

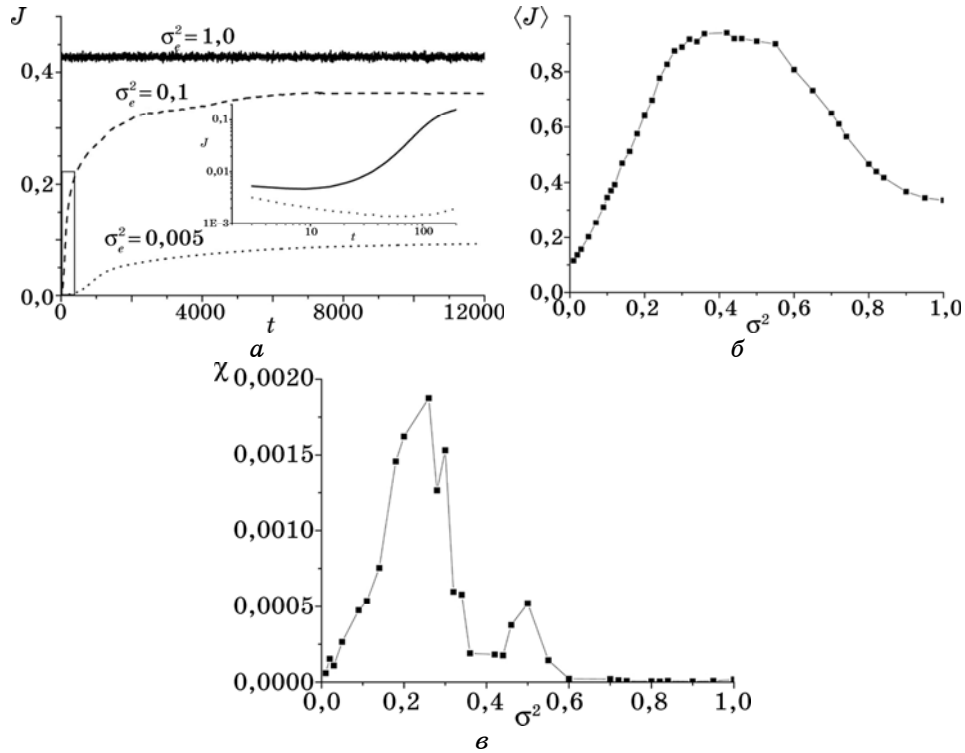


Рис. 25. Залежності другого статистичного моменту та узагальненої сприйнятливості від інтенсивності зовнішнього шуму (а) динаміка J при різних значеннях σ_e^2 ; б і в — відповідають залежностям параметра порядку $\langle J \rangle = \langle J(t \rightarrow \infty) \rangle$ і узагальненої сприйнятливості χ за різних значень σ_e^2 . Решта параметрів $T = 0,65$, $\beta = 2,0$, $r_c = 0,65$, $D_e = 0,1$, $\Delta = 1,0$, $E_{mv} = 0,9$, $\alpha = 0,8$.

$R(t) \propto t^{1/3}$ [93]. При малих σ_e^2 на пізніх стадіях росту доменів $R(t)$ не спостерігається. Це означає, що процес при малих σ_e^2 неможна класифікувати, як фазовий розпад, який описується механізмом дифузії. При великих σ_e^2 спостерігається стаціонарна стохастична поведінка функції $R(t)$, це свідчить про постійне утворення областей упорядкування різного розміру. Одержані результати підтверджують середньопольові результати.

Важливим аспектом є визначення універсальних властивостей моделю на великих часових проміжках. Для цього обчислимо масштабований сферично усереднений структурний фактор $S(kR(t)) = [R(t)]^2 S(k, t)$ як функцію від безрозмірного хвильового числа kR (див. рис. 26, б). Форма одержаної функції однакова для різних часових зрізів. Але при малих значеннях σ_e^2 пік не так явно виражений і розмитий, тоді як при середніх значеннях інтенсивності шуму залежність $S(kR(t))$ характеризується явно вираженим піком, зсу-

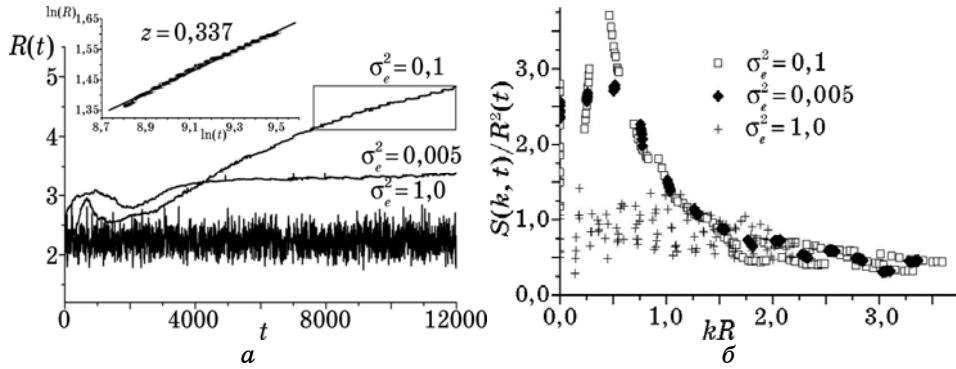


Рис. 26. Залежності: (а) середнього розміру домени R при $\sigma_e^2 = 0,005$, $\sigma_e^2 = 0,1$ і $\sigma_e^2 = 1,0$; (б) сферично усередненого структурного фактора $S(kR(t))$ при різних інтенсивностях шуму. Решта параметрів: $T = 0,65$, $\beta = 2,0$, $r_c = 0,65$, $D_e = 0,1$, $\Delta = 1,0$, $E_{mv} = 0,9$, $\alpha = 0,8$.

нутим у бік ненульових значень kR . При великих інтенсивностях шуму залежність $S(kR(t))$ має пласку форму з невизначеним піком. Таким чином, вплив зовнішнього мультиплікативного шуму суттєво впливає на динаміку росту домен розглядуваної системи.

Феноменологічне представлення розпаду бінарної системи. Розглянемо наближення сильної взаємодії, допускаючи $\beta \rightarrow \infty$, що уможливить одержати деякі результати дослідження в аналітичній формі. Для такого випадку стаціонарний розподіл набирає вигляду $P_s(x, \eta) = \delta(x - \eta)$. Рівняння для ефективного поля h одержимо з інтегрування виразу (89) з урахуванням позначення $x \leftrightarrow \eta$:

$$h = M(\eta) \left[\partial_\eta f(\eta) + \frac{D_e}{M(\eta)} \eta \right] - \frac{\sigma^2}{2} \partial_\eta M(\eta) - 2dD_e \sigma_e^2 (C_0 - C_1) \eta. \quad (92)$$

При $h = 0$ одержимо розв'язок для двох фаз:

$$\eta_{1,2} = \pm \frac{\sqrt{-2\alpha AB + \sqrt{C}}}{2\alpha A}, \quad (93)$$

де $A \equiv 2\alpha d D_e \sigma_e^2 (C_0 - C_1) - 1 - \alpha D_e$, $B = 2A - 1 - \alpha \varepsilon$, $C = 1 + 8\alpha^2 \sigma^2 (A - 1) - 2\alpha \varepsilon$. Лінію переходу, яка визначається з умови $\eta_1 = x_0$, одержимо точно з рівняння (93). При $\eta = 0$ критичні значення параметрів системи визначаються з виразу

$$\varepsilon(\theta_c) = 2dD_e \sigma_e^2 (C_0 - C_1) - D_e - 2\alpha \sigma^2 (\theta_c). \quad (94)$$

Відповідні критичні значення знаходяться на поверхні, зображеній на рис. 27. Область упорядкування знаходиться під поверхнею.

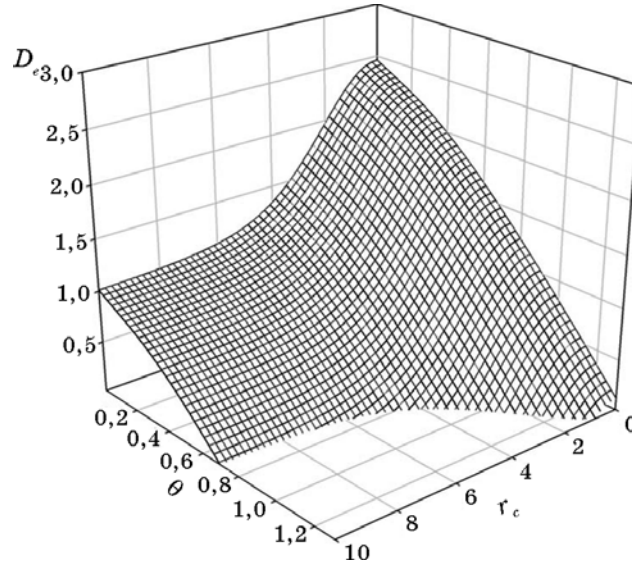


Рис. 27. Фазова діаграма критичних значень температури θ , коефіцієнта балістичної дифузії D_e та радіуса кореляції зовнішнього шуму r_c . Решта параметрів: $\sigma_e^2 = 1,5$, $\Delta = 1,0$, $E_{mv} = 0,8$, $\alpha = 0,8$.

Одержані результати ще раз підтверджують результати, одержані при лінійній аналізі на стійкість, та показують наявність однієї критичної точки.

Для аналітичного визначення конкуренції різних упорядкувальних механізмів розглянемо найпростіший випадок макроскопічного наближення, припускаючи відсутність кореляцій: $\langle A(x) \rangle \cong A(\eta)$. Таким чином, повний усереднений потік спрощеного рівняння $\partial_t \eta = -\nabla \cdot \langle \mathbf{J}_{\text{tot}} \rangle$ має вигляд

$$\langle \mathbf{J}_{\text{tot}} \rangle = \langle \mathbf{J}_{\text{tot}}^{\text{det}} \rangle + \langle \mathbf{J}_D^{\text{stoch}} \rangle + \langle \mathbf{J}_e^{\text{stoch}} \rangle. \quad (95)$$

Опускаючи кутові дужки ($x = \langle x \rangle \equiv \eta$) одержимо

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\text{tot}} &= \quad (96) \\ &= -M \left[\left(\partial_{\eta\eta}^2 \varphi - \frac{\sigma^2}{2M} \partial_{\eta\eta}^2 M + \frac{D_e \sigma_e^2}{M} \nabla^2 C(r-r') \Big|_{r=r'} \right) \nabla \eta - \left(\beta - \frac{D_e \sigma_e^2 C(0)}{M} \right) \nabla^3 \eta \right]. \end{aligned}$$

Множник перед першою просторовою похідною в рівнянні (96) є другою похідною від ефективної вільної енергії:

$$\partial_{\eta\eta}^2 \psi = \partial_{\eta\eta}^2 \varphi - \frac{\sigma^2}{2M} \partial_{\eta\eta}^2 M + \frac{D_e \sigma_e^2}{M} \nabla^2 C(r-r') \Big|_{r=r'}. \quad (97)$$

Після інтегрування одержуємо вираз

$$\psi(\eta) = \frac{\varepsilon_{\text{ef}}}{2} \eta^2 + \frac{\lambda}{4} \eta^4 - \sigma^2 \left(\sqrt{\alpha} \eta \arctan(\sqrt{\alpha} \eta) - \frac{3}{2} \ln(1 + \alpha \eta^2) \right), \quad (98)$$

де введено перенормовані керувальні параметри:

$$\varepsilon_{\text{ef}} = \varepsilon + D_{\text{bal}} - \frac{D_e \sigma_e^2}{2\pi r_c^4}; \quad \lambda = 1 + \frac{\alpha D_e}{3} - \frac{D_e \sigma_e^2 \alpha}{6\pi r_c^4}. \quad (99)$$

Аналізуючи вирази (99), можна зробити висновок, що балістичні стрибки призводять до перенормування температури: зростання усередненої інтенсивності балістичних стрибків збільшує температуру θ (ефект стабілізації), а дисперсія таких стрибків σ_e^2 знижує θ , що в результаті дестабілізує стан $\eta = 0$.

Порівняємо одержані результати з результатами, одержаними в теорії середнього поля [10, 94]. Для цього використаємо вільну енергію Бреґґа–Вільямса $f_{BW}(c) = \omega c(1-c) + T[c \ln(c) + (1-c) \ln(1-c)]$ та рухливість для моделю Кана–Хілліярда $M(c) = D_{\text{chem}} c(1-c)/T$, де D_{chem} — коефіцієнт хемічної дифузії. Беручи за основу вираз (97), одержимо другу похідну густини ефективної вільної енергії у вигляді

$$\partial_{cc}^2 \Psi = \partial_{cc}^2 f_{BW} + \frac{1}{M(c)} \left[D_e + \sigma^2(T) - D_e \sigma_e \left| \nabla^2 C(r-r')_{r=r'} \right|^2 \right]. \quad (100)$$

Таким чином,

$$\psi(c) = \omega c(1-c) + T(1 + \Delta_{\text{ef}}) [c \ln(c) + (1-c) \ln(1-c)]. \quad (101)$$

Температурний зсув задається величиною

$$\Delta_{\text{ef}} = \frac{D_e}{D_{\text{chem}}} + \frac{\sigma^2(T)}{TD_{\text{chem}}} - \frac{D_e \sigma_e \left| \nabla^2 C(r-r')_{r=r'} \right|}{D_{\text{chem}}}. \quad (102)$$

Для визначення вкладу внутрішнього шуму використаємо вираз (75) з урахуванням того, що $D_{\text{chem}} \propto \exp(-E_{mv}/T)$; тоді

$$\frac{\sigma^2}{TD_{\text{chem}}} = \text{const}. \quad (103)$$

Таким чином, внутрішній шум призводить до перенормування температури T .

Для подальшої аналізи скористаємося швидкісною теорією, яка задає еволюцію вакансій (v) та міжвузлових атомів (i) при низькій температурі:

$$\frac{dc_\alpha}{dt} = G - Rc_i c_v - k^2 D_\alpha c_\alpha \quad (\alpha = i, v), \quad (104)$$

де G — інтенсивність утворення Френкелевих пар, $R = 4\pi l_c (D_i + D_v) N_v$ — фактор рекомбінації (l_c — радіус рекомбінації), D_α — коефіцієнт дифузії дефектів сорту α .

Для стаціонарного випадку $D_i c_i = D_v c_v$, і маємо $c_v \cong [G/(4\pi l_c D_v N_v)]^{1/2}$ з $G = \phi \sigma_r$, де, як і раніше, ϕ — потік опромінення.

Регулярна складова D_e/D_{chem} величини Δ_{ef} зводиться до

$$\frac{D_e}{D_{\text{chem}}} \cong \frac{c_v^0(T) \phi^{1/2} \sigma_r \langle R \rangle^2}{D_{\text{chem}}(T, \phi = 0)} \sqrt{\frac{4\pi l_c D_v N_v}{\sigma_d}}, \quad (105)$$

де σ_d — переріз розсіяння (визначає число вакансій, що генеруються за одиницю дози опромінення) [10].

Таким чином, з урахуванням впливу термічно стимульованої дифузії приходимо до відомого результату [10]:

$$\frac{D_e}{D_{\text{chem}}} \cong \Delta_{\text{reg}} e^{\frac{E_{mv}}{2T}}. \quad (106)$$

Для стохастичної компоненти балістичного перемішування маємо $D_e \sigma_e^2 = \phi \sigma_r \langle (\delta R)^2 \rangle$. Якщо порівняти кореляційний радіус з середньою довжиною стрибка $r_c \cong \langle R \rangle$, то одержимо:

$$\frac{|\nabla^2 C(r-r')_{r=r'}| D_e \sigma_e^2}{D_{\text{chem}}} \cong \frac{c_v^0(T) \phi^{1/2} \sigma_r \langle (\delta R)^2 \rangle^2}{D_{\text{chem}}(T, \sigma = 0) \langle R \rangle^2} \sqrt{\frac{4\pi l_c D_v N_v}{\sigma_d}}. \quad (107)$$

Тоді при термічно стимульованій хемічній дифузії з $C(r-r')_{r=r'} < 0$ одержимо внесок $-\Delta_{\text{st}} e^{\frac{E_{mv}}{2T}}$.

З наведених виразів для складових зсуву температури можна зробити висновок, що регулярна складова балістичного перемішування призводить до росту температури системи, тоді як стохастична частина — зменшує її.

Отже, одержуємо конкуренцію регулярної та стохастичної частин балістичної дифузії, яка призводить до

$$\Delta_{\text{ef}} = \text{const} + (\Delta_{\text{reg}} - \Delta_{\text{st}}) e^{\frac{E_{mv}}{2T}}. \quad (108)$$

Незважаючи на те, що даний результат був одержаний через перенормовані параметри, результати в наближенні середнього поля свідчать, що картина фазових переходів в опромінюваних матеріалах може бути керована зміною дисперсії атомових стрибків, пов'язаною з дисперсією енергії частинок опромінення і середньою довжиною стрибка, які визначені умовами опромінення.

4.3. ПРОЦЕСИ ВІДБОРУ СТРУКТУР ПРИ СПИНОДАЛЬНОМУ РОЗПАДІ СИСТЕМ ГІПЕРБОЛІЧНОГО ТИПУ

У попередньому розділі було розглянуто стійкість фаз при розпаді бінарних систем в умовах зовнішнього впливу в рамках гіпотези локальної рівноваги (у дифузійній границі). Однак, перехідні процеси, які становлять не лише теоретичний інтерес, в суттєво нерівноважних системах, наприклад, за наявності пам'яті, не досліджувалися. Важливо відмітити, що часова скорельованість дифузійного потоку призводить до таких процесів, як відбір структур при спинодальному розпаді на характерних часових інтервалах, які опускаються при розгляді повільних (дифузійних) процесів внаслідок миттєвої релаксації дифузійних потоків [103]. Однак, такі процеси здебільшого досліджені у так званих «безшумових» умовах, де флюктуації вважаються безмежно малими. Окрім того, не вивченими залишаються процеси відбору структур, коли система піддана зовнішньому впливу, що має стохастичну природу, де інтенсивність зовнішніх флюктуацій може набувати великих значень. Тому у даному підрозділі за мету ставиться дослідження процесів відбору структур у системах, для яких ефекти пам'яті відіграють визначальну роль за наявності зовнішнього фактора, який має як регулярну, так і флюктуаційну складові.

4.3.1. Відбір структур у моделю з флюктуаціями дифузійного потоку

Розглянемо клас бінарних систем, що описуються моделю фазового розшарування Кана–Хіллйарда–Кука з гіперболічним транспортом (внаслідок ефектів пам'яті) [95, 96]. Для широкого кола фізичних систем, віддалених від рівноваги, таких як неньютонові рідини, швидко охолоджені кристалізовані стопи та системи, матеріали глибоко заморожені в спинодальній області або загалом системи з пам'яттю, гіпотеза локальної рівноваги не спрацьовує [97, 98]. У таких випадках дифузійний потік задається загальним виразом (43) із функцією пам'яті $M_D(t - t'; \tau_D)$.

У разі миттєвої реакції на збурення (за часовий інтервал $\tau_D \rightarrow 0$) функція пам'яті зводиться до $M_D(t - t') = \delta(t - t')$, що дає право використовувати вираз $\mathbf{J}_D = -M\nabla\delta F/\delta x$, справедливий в умовах локальної рівноваги [84, 85, 99–101]. Якщо ефекти пам'яті здатні відігравати принципову роль у динаміці відповідних фізичних процесів, то $\tau_D \neq 0$. Найпростішим моделю, що враховує таку особливість реакції дифузійного потоку, є експоненційна форма для $M(t - t')$ у вигляді $M_D(t - t') = (\tau_D)^{-1}\exp(-|t - t'|/\tau_D)$. Тоді зміна дифузійного потоку у часі буде задаватися релаксаційним рівнянням. Слід зазначити, що наявність ефектів пам'яті у нерівноважних системах призводить до важливого висновку про обмеженість швидкості $v_D = l_D/\tau_D$

поширення збурень поля x , де l_D — дифузійна довжина².

Припускаючи далі, що в реальних умовах завжди існують флюктуації потоку ξ , замість релаксаційного приходимо до стохастичного Ланжевенового рівняння у вигляді

$$\tau_D \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = -\mathbf{J} - M(x) \nabla \frac{\delta F[x]}{\delta x} + \sqrt{M(x)} \xi(\mathbf{r}, t), \quad (109)$$

де проведено узагальнення на випадок мультиплікативного шуму, пов'язаного з залежною від поля рухливістю $M(x)$ (див. (61)). Функціонал вільної енергії прийемо у вигляді (59). Із узагальненого вигляду для потоку випливає, що відповідні флюктуації мають характеризуватися кореляційною функцією, що співпадає з функцією пам'яті. Припустимо, що Гавсів процес ξ має просторову кореляційну функцію $C_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\sqrt{2\pi} \lambda_\xi)^{-d} \exp(-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 / 2\lambda_\xi^2)$, де λ_ξ — радіус просторових кореляцій флюктуацій дифузійного потоку. У наближенні $\lambda_\xi, \tau_D \rightarrow 0$ шум ξ стає білим у просторі та часі.

Якщо за масштаб часу обрати $\tau_x = \omega_D^{-1} e^{E_a/T}$ — час переходу атома з однієї позиції до іншої, де ω_D — Дебайова частота, E_a — енергія активації, T — температура, то у випадку $\tau_D \rightarrow 0$, де $\tau_{D'} = \tau_D / \tau_x$, приходимо до границі миттєвої релаксації дифузійного потоку з $v_D \gg 1$ (штрих далі випускаємо). Детальний опис процесів спинодального розшарування у бінарних системах з гіперболічним транспортом наведено у роботі [48]. Далі, визначимо просторовий радіус кореляції флюктуацій $\lambda' \equiv \lambda_\xi / l_D$. В якості величини часу візьмемо час τ_x необхідний для переміщення частинки з однієї позиції в іншу. Зазвичай його знаходять із Арреніусового закону $\tau_x = \omega_D^{-1} \exp(E_a / T)$, де ω_D — Дебайова частота, E_a — енергія активації. Для потоку і шуму введемо величину $v_D = l_D / \tau_D$. Отже, безрозмірні величини: $\mathbf{J}' = \mathbf{J} / v_D$, $\xi' = \xi / v_D$. При подальшому розгляді покладемо $D / (v_D l_D) = 1$. **Стійкість системи в околі гомогенного стану.** Розглянемо поведінку системи на ранніх стадіях розвитку. Для цього проведемо аналізу стійкості однорідного стану ($x_i(t) = 0$). Динамічне рівняння для структурного фактора набирає вигляду:

$$\tau_D \frac{\partial^2 S(\mathbf{k}, t)}{\partial t^2} + \frac{\partial S(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -2k^2 \left\{ \left(-\varepsilon + \frac{\beta}{2d} k^2 \right) S(\mathbf{k}, t) - (M^{(0)} + M^{(1)}) \int \frac{dq}{(2\pi)^d} C(|\mathbf{k} - \mathbf{q}|) (1 - \alpha S(\mathbf{q}, t)) \right\}, \quad (110)$$

де $M^{(n)} = (\sigma^2 / n!) \int \tau^n C(\tau) d\tau$ — моменти кореляційної функції $C(t - t')$.

² Для розмірної величини τ_D , наприклад, у системі SiO_2 -12% Na_2O , маємо оцінку $\tau_D = 10^{-11}$ с при коефіцієнті дифузії $D \cong 2,3 \cdot 10^{-14}$ cm^2/c .

Аналітичне дослідження динаміки структурного фактора на ранніх стадіях можливо провести для шуму, білого у просторі і часі, тобто $C(t-t'; \mathbf{r}-\mathbf{r}') = C_i(|t-t'|/\tau_\zeta)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Після деяких перетворів приходимо до динамічного рівняння у формі:

$$\left(\tau_D \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial}{\partial t}\right) S(\mathbf{k}, t) = -2k^2 \left(-\varepsilon + \frac{\beta}{2d} k^2 + \alpha(M^{(0)} + M^{(1)})\right) S(\mathbf{k}, t) + 2k^2(M^{(0)} + M^{(1)}) - 2\alpha(M^{(0)} + M^{(1)})k^2 \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} S(\mathbf{q}, t). \quad (111)$$

Розв'язок рівняння (111) шукаємо у вигляді $S(\mathbf{k}, t) \propto e^{-i\omega(\mathbf{k})t}$. Підставимо його у рівняння (111). Одержимо дисперсійне співвідношення

$$\omega(\mathbf{k}) = -\frac{i}{2\tau_D} \left[1 \pm \sqrt{1 - 8\tau_D w_\alpha(\mathbf{k}; \sigma^2, \tau_D)}\right], \quad (112)$$

де $w_\alpha(\mathbf{k}; \sigma^2, \tau_D) = k^2|-\varepsilon + \beta k^2/2d + \alpha(M^{(0)} + M^{(1)})|$. Очевидно, що вираз (112) є стохастичним представленням закону дисперсії, зазвичай розглядуваного для чисто детерміністичного випадку [102].

Критичне значення хвильового числа k_c , що задає межу для нестійких мод, одержується як розв'язок рівняння $w_\alpha(\mathbf{k}; \sigma^2, \tau_D) = 0$:

$$k_c = \sqrt{2d[\varepsilon - \alpha(M^{(0)} + M^{(1)})]}/\beta.$$

У випадку локальної стійкості $\tau_D = 1$, і маємо:

$$\omega(\mathbf{k})|_{\tau_D=1} = -\frac{i}{2\tau_D} \left[1 \pm 4\tau_D w_\alpha(\mathbf{k}; \sigma^2, \tau_D)\right]. \quad (113)$$

При $k < k_c$ уявну частину частоти (112)

$$\Im\omega_\pm(\mathbf{k}) = \frac{1}{2\tau_D} \left[-1 \pm \sqrt{1 - 8\tau_D w_\alpha(\mathbf{k}; \sigma^2, \tau_D)}\right] \quad (114)$$

можна використати для пошуку максимальної амплітуди хвильового числа k_m і фактора підсилення $R(\mathbf{k})$, які входять у розв'язок у вигляді $S(\mathbf{k}, t) \propto e^{R(\mathbf{k})t}$, $R(\mathbf{k}) = \Im\omega_+(k)$. Врахування додаткової умови $w_\alpha(\mathbf{k}; \sigma^2, \tau_D) > 1/(8\tau_D)$ уможливило виявити осциляційну поведінку структурного фактора з експоненціальним спаданням. Дійсно, з позначенням $\omega(\mathbf{k}) = \sqrt{1 - 8\tau_D w_\alpha(\mathbf{k}; \sigma^2, \tau_D)}$ розв'язок рівняння (111) набуває вигляду:

$$S(\mathbf{k}, t) \propto \exp\left(-\frac{t}{2\tau_D}\right) \exp\left(\frac{i\omega(k)t}{2\tau_D}\right), \quad (115)$$

де перший множник описує експоненційно спадну амплітуду, а другий відповідає за осциляції. Критичне значення k_0 задає межу між модами з осциляціями та простими експоненційно спадними модами, відому як ультрафіолетова границя. Вона відсутня при розгляді еволюції, описуваної лінійним параболічним рівнянням. Границю визначено наступним чином:

$$k_0^2 = \frac{d}{\beta} \left(\varepsilon - \alpha(M^{(0)} + M^{(1)}) + \sqrt{[\varepsilon - \alpha(M^{(0)} + M^{(1)})]^2 + \frac{\beta}{2d} \frac{1}{2\tau_D}} \right). \quad (116)$$

В чисто детерміністичному випадку ($\sigma^2 = 0$) результати аналізу рівняння (116) опубліковано в роботі [103].

На рисунку 28 зображено діаграму з областями експоненційно спадних мод (D) та мод, які спадають з осциляціями ($D + O$), при різних значеннях інтенсивності шуму σ^2 .

З представленої залежності критичних $k_c(\tau_D)$ і біфуркаційних $k_0(\tau_D)$ значень можна визначити обраний під час еволюції системи тип нестійкої моди. Зростання τ_D призводить до вибору системою структур з меншими k_0 . Якщо збільшується інтенсивність шуму, то осциляції виникають навіть для мод з дуже малим хвильовим числом. Крім того, можна стверджувати, що, якщо в системі відсутні стійкі моди (див. криву для великих $\sigma^2 = 0,5$), осциляційна поведінка структурного фактора $S(k, t)$ можлива для великих τ_D .

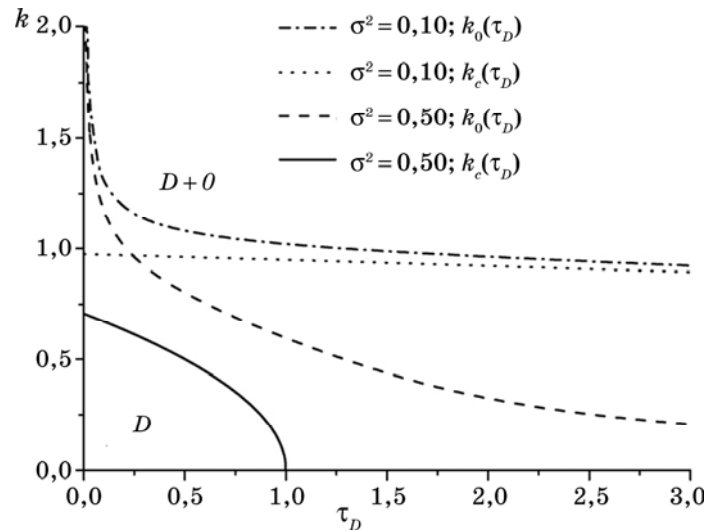


Рис. 28. Біфуркаційна діаграма, що ілюструє області з простими спадними модами та модами з осциляціями для різних σ^2 . Інші параметри: $\varepsilon = 1,0$, $\beta/2d = 1,0$, $\alpha = 0,5$. Позначки « D » і « $D + O$ » означають області параметрів k і τ_D з експоненційно й осциляційно спадними модами відповідно.

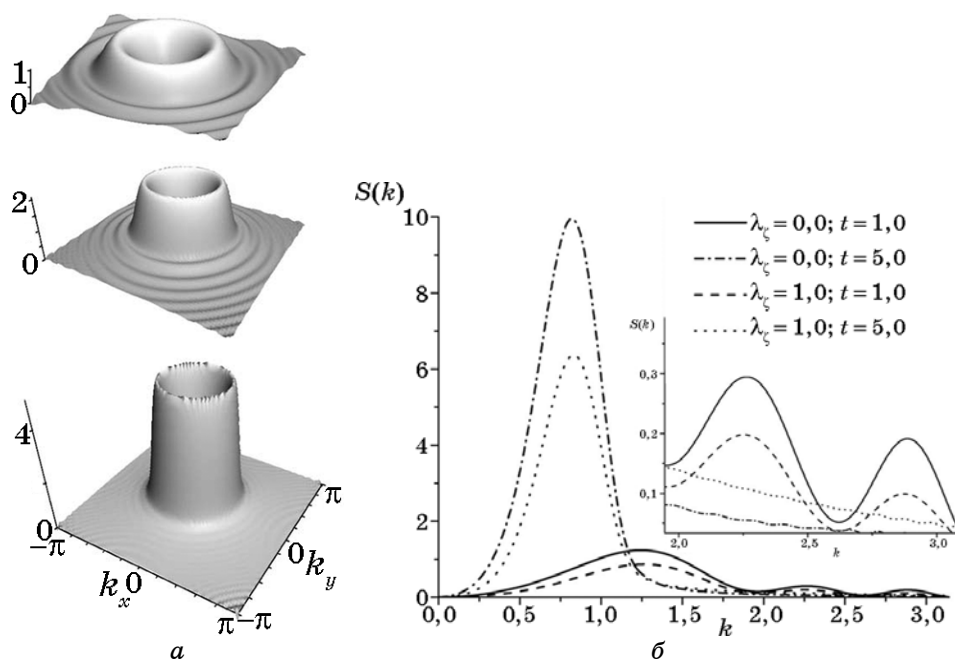


Рис. 29. Еволюція структурного фактора (а) при $\lambda = 0$, $\tau_D = 3$ для $t = 2, 3, 4, 6$ (зверху вниз) і структурний фактор для різних λ при $\tau_D = 3$ (б). На рисунку б представлено залежності при $t = 1$ і $t = 5$. Інші параметри: $\varepsilon = 1,0$, $\beta/2d = 1,0$, $\sigma^2 = 0,5$, $\alpha = 0,5$.

Чисельний розв’язок рівняння (110) для фіксованих значень t зображено на рис. 29. З нього видно, що на ранніх стадіях розпаду структурний фактор $S(k)$ має декілька явних піків при $\tau_D > 1$. Це означає, що при корельованому потоці, структура для однієї фази має розбиття для різних k . Шум призводить до перенормування максимального значення хвильового числа k_m . З ростом інтенсивності шуму σ^2 значення k_m зменшується. Розглянемо вплив просторово корельованої складової шуму на еволюцію системи. Розв’язок рівняння (110) з $\lambda \neq 0$ для фіксованих значень τ_D зображено на рис. 29. З нього видно, що просторові кореляції флюктуацій потоку при збільшенні кореляційного радіуса λ призводять до зниження піку та зменшення ширини структурного фактора $S(k)$. Більше того, амплітуда осциляцій для великих k теж зменшується. Отже, просторові кореляції шуму прискорюють вибір структур у процесі еволюції системи.

Нормований фактор посилення розпаду. Розглянемо зміну поведінки фактора підсилення залежно від хвильового числа при переході від параболічного моделю до гіперболічного. Для цього скористаємося дисперсійними співвідношеннями для обох типів моделей. Визначимо величину фактора підсилення $\omega_{НС}(k_m)$ для моделю Кана-

Хілл'ярда–Кука з мультиплікативними флюктуаціями, як нормувальний фактор з $k_m = k_c/\sqrt{2}$. Він характеризує незворотнє зростання довжини хвилі декомпозиції. Тоді нормалізований фактор підсилення гіперболічного моделю буде мати наступний вигляд: $\omega_{\text{гип}}^*(q)/q^2 = [\omega_{\text{гип}}(q)/\omega_{\text{СНС}}(k_m)]/q^2$, де $q = k/k_c$, а дисперсійне співвідношення $\omega_{\text{гип}}(q)$ задається виразом $\omega_{\text{гип}}(q) = \Im[\omega(q)]$. Тоді для гіперболічного моделю маємо:

$$\frac{\omega^*(q)}{q^2} = \frac{\beta}{\tau_D q^2} \frac{\sqrt{1 + 8\tau_D \beta^{-1} [\varepsilon - \alpha(M^{(0)} + M^{(1)})]^2 q^2 (1 - q^2)} - 1}{[\varepsilon - \alpha(M^{(0)} + M^{(1)})]^2}. \quad (117)$$

У такому разі для обох типів моделей виконуються умови: $\omega(q)/q^2 = 0$ при $q = 1$ та $\omega(q)/q^2 = 4$ при $q = 0$. У детермінованому випадку $\sigma^2 = 0$ параболічного моделю ($\tau_D \rightarrow 0$) приходимо до лінійної залежності $\omega(q)/q^2$. У стохастичному випадку ($\sigma^2 \neq 0$) цей фактор включає часові кореляції шуму, тоді як просторові кореляції не дають внеску до його величини на ранніх стадіях. Розглядаючи хвильові числа $k < k_c$, слід врахувати, що нестійкі моди починають рости, якщо $\varepsilon > \alpha(M^{(0)} + M^{(1)})$. З виразу (117) випливає, що флюктуації потоку при $\tau_D \neq 0$ пригнічують відхил від лінійної залежності $\omega(q)/q^2$. Дійсно, зростання інтенсивності шуму σ^2 або α спричиняють зменшення множника $\varepsilon - \alpha(M^{(0)} + M^{(1)})$ (рис. 30), тобто залежність $\omega^*(q)/q^2$ у випадку мультиплікативних флюктуацій вироджуються у пряму лінію.

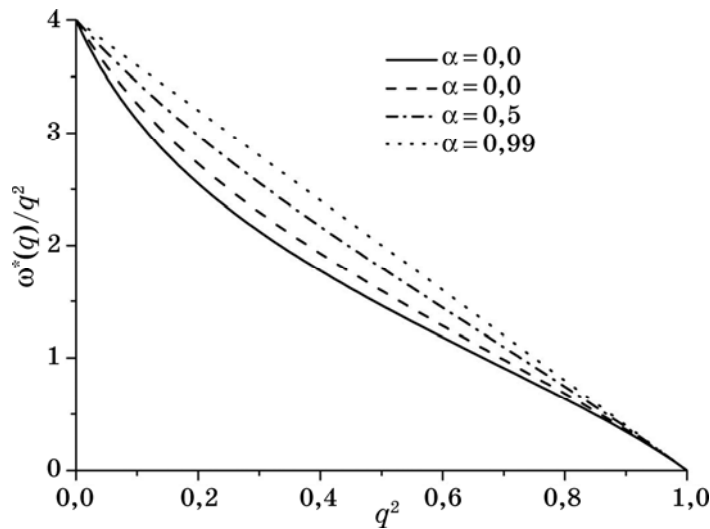


Рис. 30. Нормований фактор підсилення при $\tau_D = 1$ та різних значеннях параметра затухання флюктуацій α . Інші параметри: $\varepsilon = 1,0$, $\beta = 1,0$, $\sigma^2 = 0,5$.

4.3.2. Процеси відбору структур за наявності балістичної дифузії

Проаналізуємо процеси відбору структур за наявності балістичної дифузії зі стохастичним потоком \mathbf{J}_e [104], що задовольняє Фіковому закону: $\mathbf{J}_e = -D_e^0 \nabla x$. Вважаючи, що високоенергетичні бомбардувальні частинки мають стохастичну природу (характеризуються розкидом швидкостей за Максвеллом [62]), очевидним є припущення про стохастичність такого перемішування, тобто можна покласти $D_e^0 = D_e + \zeta(\mathbf{r}, t)$, де D_e і $\zeta(\mathbf{r}, t)$ визначено у попередньому розділі.

Таким чином, повна система рівнянь, що описує еволюцію випадкового поля має вигляд

$$\partial_t x = -\nabla \cdot \mathbf{J}_D + D_e \Delta x + \nabla \cdot (\zeta \nabla x), \quad \tau_D \partial_t \mathbf{J}_D = -\mathbf{J}_D - M \nabla \frac{\delta F}{\delta x} + \xi, \quad (118)$$

де для спрощення розгляду покладемо далі $M \equiv \text{const} = 1$, а функціонал вільної енергії має вигляд (59) з густиною вільної енергії (60). Інтенсивність шуму ξ термічно стимульованого потоку покладемо рівною безрозмірній температурі $\sigma^2 = \theta \equiv T/T_c$.

Рівняння динаміки структурного фактора. Встановимо вигляд рівняння динаміки $S_k(t)$, записуючи систему (118) у Фур'є-просторі:

$$\frac{dx_k}{dt} = -ik \mathbf{J}_{Dk} - k^2 D_e x_k - k^2 \zeta_k x_k, \quad \tau_D \frac{d\mathbf{J}_{Dk}}{dt} = -\mathbf{J}_{Dk} - ik \omega(k^2) x_k + \xi_k, \quad (119)$$

де $\omega(k^2) = \theta - 1 + k^2$. Тоді рівняння на структурний фактор $S_k = \langle x_k x_{-k} \rangle$ набуває вигляду

$$\frac{dS_k}{dt} = -ik \langle \mathbf{J}_{Dk} x_{-k} \rangle + ik \langle \mathbf{J}_{D-k} x_k \rangle - 2k^2 D_e S_k - k^2 (\langle \zeta_k x_k x_{-k} \rangle + \langle \zeta_{-k} x_{-k} x_k \rangle). \quad (120)$$

Відповідні корелятори потоку та поля обчислюються з рівняння

$$\tau_D \frac{d\langle \mathbf{J}_{Dk} x_{-k} \rangle}{dt} = -\langle \mathbf{J}_{Dk} x_{-k} \rangle - ik \omega(k^2) S_k + \langle \xi_k x_{-k} \rangle. \quad (121)$$

Далі, беручи похідну за часом від рівняння (120) та виражаючи корелятор потоку з (120) при застосуванні (121), одержуємо рівняння другого порядку для структурного фактора у вигляді

$$\begin{aligned} \tau_D \frac{d^2 S_k}{dt^2} = & -(1 + 2k^2 \tau_D D_e) \frac{dS_k}{dt} - \\ & - 2k^2 \{D_e + \omega(k^2)\} S_k - k^2 (\langle \zeta_k x_k x_{-k} \rangle + \langle \zeta_{-k} x_{-k} x_k \rangle) - \\ & - ik (\langle \xi_k x_{-k} \rangle + \langle \xi_{-k} x_k \rangle) - k^2 \tau_D \frac{d}{dt} (\langle \zeta_k x_k x_{-k} \rangle + \langle \zeta_{-k} x_{-k} x_k \rangle). \end{aligned} \quad (122)$$

Розкриваючи корелятори за теоремою Новікова, приходимо до шуканого динамічного рівняння:

$$\tau_D \frac{d^2 S_k}{dt^2} = -(1 + 2k^2 \tau_D D_e \Xi(k^2)) \frac{dS_k}{dt} - 2k^2 (D_e \Xi(k^2) + \omega(k^2)) S_k + 2\theta k^2 - \frac{2k^2 D_e \sigma^2}{(2\pi)^d} \int dk' C(|k - k'|) S_{k'}(t) - \frac{2k^2 \tau_D D_e \sigma^2}{(2\pi)^d} \int dk' C(|k - k'|) \frac{dS_{k'}(t)}{dt}, \quad (123)$$

де введено позначення $\Xi(k^2) \equiv 1 + \sigma_e^2 (\nabla^2 C(|r|)_{r=0} - C(0)k^2)$. Як видно зі структури рівняння (123), воно припускає розв'язок у вигляді $S - S_0 \propto e^{\varphi(k)t}$, де

$$\varphi(k)_\pm = -\frac{1 + 2\tau_D D_e k^2 \Xi(k^2)}{2\tau_D} \pm \frac{1}{2\tau_D} \left[(1 + 2\tau_D D_e k^2 \Xi(k^2))^2 - 4\tau_D k^2 (2D_e \Xi(k^2) + \omega(k^2)) \right]^{1/2} \quad (124)$$

також за певних умов може мати дійсну та уявну частини, тобто $\varphi(k) = \Re\varphi(k) + i\Im\varphi(k)$. В теорії спинодального розпаду дійсна частина $\Re\varphi(k)_+$ відома як коефіцієнт посилення $R(k) = -\Re\varphi(k)_+$, так що $S - S_0 \propto e^{-R(k)t}$, а уявна частина $\Im\varphi(k)$, що виникає лише при $\tau_D \neq 0$, відповідає за процеси відбору структур.

Стійкість однорідного стану. Дослідимо стійкість неупорядкованого стану $x_0 = 0$. Для цього розглянемо дійсну та уявну частини фази $\varphi(k)$, яких подано на рис. 31, залежно від зовнішніх умов. У найпростішому випадку відсутності зовнішнього потоку (суцільна лінія на рис. 31, а) при двоямній формі вихідної густини вільної енер-

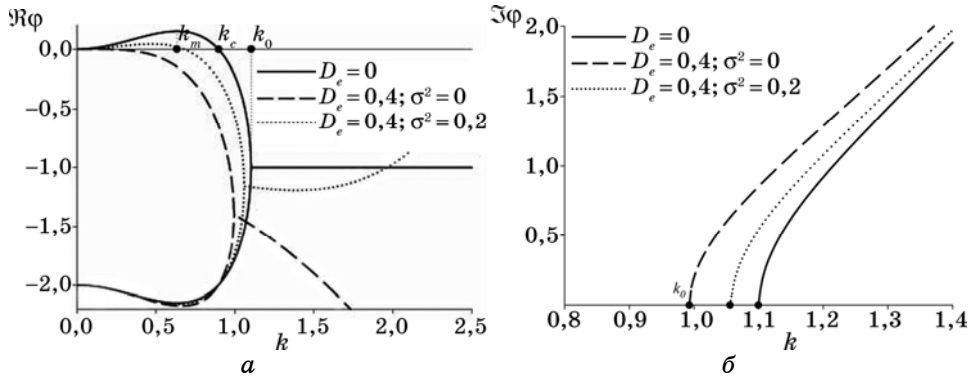


Рис. 31. Дійсна (а) та уявна (б) частини фази $\varphi(k)$ при зміні параметрів зовнішнього потоку D_e та σ^2 в околі стану $x_0 = 0$. Криві одержано при: $\theta = 0,4$, $\tau_D = 0,5$, $r_c = 0,5$.

гії ($\theta < 1$) маємо стандартну картину нестійкості, коли одна з гілок дійсної частини фази ($\Re\varphi(k)_+$) стає позитивною в інтервалі $0 \leq k \leq k_c$, де k_c обмежує область нестійких мод. Найбільш нестійка мода відповідає значенню k_m . При досяганні хвильовим числом значення $k = k_0$ дві гілки дійсної частини фази вироджуються, так що дійсна частина має єдине значення, не залежне від хвильового числа, і визначає декремент затухання розв'язків рівняння еволюції структурного фактора. При $k > k_0$ виникає уявна частина фази $\Im\varphi(k)$ — проявляється хвильова поведінка структурного фактора (рис. 31, б). При включенні детермінованого зовнішнього впливу з $D_e \neq 0$ при $\sigma^2 = 0$ (штрихова крива) область нестійкості звужується (зменшується значення k_c). При цьому також спостерігається зменшення значення хвильового числа k_0 , вище якого реалізується осциляційний режим. Важливим при цьому є втрата нестійкості, що індукується додатковим перемішуванням. Як видно із виразу для $\varphi(k)$, коефіцієнт D_e призводить до зростання ефективної температури системи на величину D_e [10]. Зазначимо, що зовнішні флюктуації ($\sigma^2 \neq 0$ при $D_e \neq 0$) (пунктирна крива) призводять до виникнення нестійкостей, розширення простору нестійких мод та підвищення значення k_0 .

Слід зазначити, що за наявності зовнішнього потоку уявна частина фази поводить себе аналогічно до випадку відсутності потоку (порівняйте криві на рис. 31, б). Однак, дійсна частина фази змінює свій характер при виникненні нестійких мод: у разі реалізації лише стійких мод (штрихова крива на рис. 31, а) маємо спадаючу криву дійсної частини фази при $k > k_0$, тоді як при виникненні нестійкостей на малих k величина $\Re\varphi(k)$ зростає. При цьому, значення $\Re\varphi(k) = 0$ реалізується при $k = k_a$. Тому у аналітичному розгляді ми обмежуємося вибором значень параметрів системи, задовольняючи умову $k_a \leq \pi$.

Нормований фактор посилення розпаду. На основі виразу для фази $\varphi(k)$ (або закону дисперсії $\omega(k) = i\varphi(k)$) можна встановити характер поведінки нормованого фактора посилення розпаду $\Re\omega(k)/k^2$. У Кановій теорії така залежність є суттєво лінійною. Однак, при спинодальному розпаді у стеклах, наприклад, Na_2OSiO_2 , спостерігається відхил від Канового лінійного закону [48, 85]. Для пояснення таких нелінійних ефектів було запропоновано провести узагальнення моделю Кана–Хілліяра–Кука введенням у розгляд додаткової релаксаційної змінної з незбереженою динамікою [105–107], роль якої може відігравати дифузійний потік [78]. У рамках використання гіперболічного моделю такий відхил пояснюється наявністю ефектів пам'яті у рамках гіпотези локальної нерівноважності [48]. У даному параграфі встановимо, яким чином зовнішній потік може впливати на такий відхил.

Для одержання нормованого фактора посилення необхідно провести порівняння дисперсійних співвідношень для параболічного

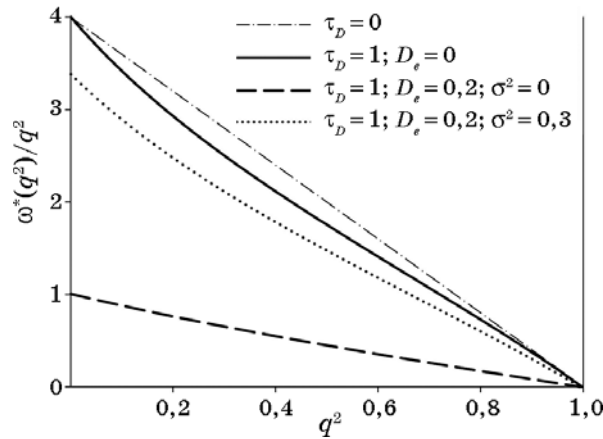


Рис. 32. Нормований фактор посилення на ранніх стадіях при $\tau_D = 1,0$, $r_c = 0,5$, $\theta = 0,2$.

моделю Кана–Хілліярд–Кука та запропонованого моделю. Скори-ставшись формалізмом, наведеним у попередньому підрозділі, нормованому фактору посилення надамо вигляду $\omega^*(q)/q^2 = \omega(q)/\omega_{CHC}(k_m)/q^2$, де дисперсійне співвідношення $\omega(q)$ обчислюється із зв'язку $\omega(q) = \Re\phi(q)_+$. Таким чином, для нашого моделю маємо $\omega^*(q)/q^2 = 4/q^2 \Re\phi_+(q)/\varepsilon^2$. Залежність нормованого фактора посилення на ранніх стадіях наведено на рис. 32. У випадку $D_e = 0$ для параболічного та гіперболічного моделів маємо такі граничні значення: $\omega^*(q)/q^2 = 0$ при $q = 1$ та $\omega^*(q)/q^2 = 4$ при $q = 0$. У границі $\tau_D \rightarrow 0$ (модель Кана–Хілліярд–Кука) приходимо до лінійного закону $\omega^*(q)/q^2$ від q^2 (тонка штрих-пунктирна лінія). При $\tau_D = 0,1$ прослідковується відхил від лінійного закону (суцільна лінія). У випадку $\tau_D = 0,1$, $D_e \neq 0$, $\sigma^2 = 0$ атермічне перемішування призводить до лінеаризації залежності фактора посилення, внаслідок перенормування ефективної температури (штрихова лінія). Однак, за наявності стохастичного зовнішнього впливу, який призводить до ефектів дестабілізації, нелінійність на залежності фактора посилення відновлюється (пунктирна лінія). Таким чином, відхил від лінійного Канового закону можуть бути пригнічені детермінованою компонентою атермічного перемішуванням, тоді як його стохастична складова відновлює нерівноважність.

Еволюція структурного фактора в околі гомогенного стану. Еволюцію структурного фактора в околі стану $x_0 = 0$ наведено на рис. 33. З нього видно, що осциляційна поведінка $S(k, t)$ спостерігається як з часом, так і при зміні хвильового числа. Тоді як осциляційна поведінка у часі пояснюється видом рівняння для середнього та структурного фактора, важливим при цьому є наявність коливань у просторі значень хвильового числа. Відомо, що у звичайному параболі-

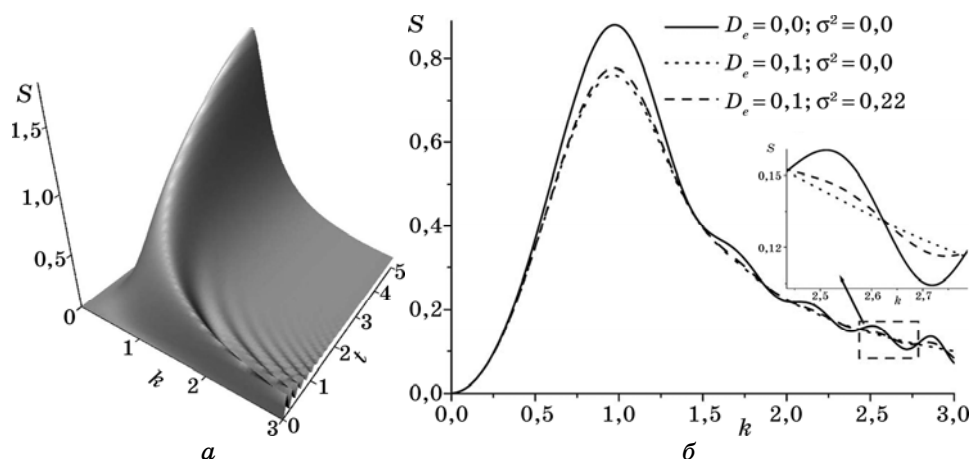


Рис. 33. Динаміка структурного фактора на ранніх стадіях при $\tau_D = 1, 0$, $r_c = 1, 0$, $\theta = 0, 9$. Параметри системи на графіку $S(k, t)$: *a* — $D_e = 0, 1$, $\sigma^2 = 0, 22$; *б* — залежність $S(k)$ побудовано при $t = 2$.

чному моделю Канна–Хіллйярда–Кука ($\tau_D = 0$) в системі на ранніх стадіях реалізуються нестійкі моди, що у подальшому дають поштовх розвитку концентраційних хвиль, так що структурний фактор має лише один пік залежно від k , який відповідає найбільш нестійкій моді k_m . Однак, у гіперболічному моделю ($\tau_D \neq 0$), що враховує релаксацію дифузійного потоку, окрім осциляційної поведінки з часом та головного піку на залежності структурного фактора від k можлива присутність супутніх піків, які відповідають за реалізацію структур із іншими значеннями хвильового числа. Оскільки амплітуда таких осциляцій за k спадає з часом, то це говорить про відбір структур протягом еволюції фізичної системи, коли реалізуються структури з єдиним значенням $k = k_m$. Характерно, що в розглянутому випадку такі згасні просторово-часові осциляції спостерігаються при дослідженні системи як в термінах середнього значення стохастичного поля, так і структурного фактора. Загальна часова поведінка відповідного структурного фактора є стандартною: на ранніх стадіях основний пік структурного фактора зміщується в область малих k , тобто відбувається грубшання зерен, його ширина звужується — міжфазні межі стають більш чіткими.

Із залежностей структурного фактора від хвильового числа (вставка праворуч на рис. 33, б) видно, що на характер відбору структур принципово впливає зовнішня дія. При цьому регулярна компонента атермічного потоку ($D_e \neq 0$, $\sigma^2 = 0$) пригнічує процес відбору структур, тоді як стохастична складова $\sigma^2 \neq 0$ призводить до посилення значень структурного фактора на супутніх піках, сприяючи процесам відбору. Слід зазначити, що конкуренція регулярної та

стохастичної складових зовнішнього (атермічного) потоку призводить до того, що при великих D_e основний пік $S(k)$ зменшується, а його ширина збільшується. Це говорить про те, що міжфазні межі стають більш дифузними, що є очевидним, оскільки регулярна компонента зовнішнього потоку призводить до додаткової дифузії, наслідком якої є розмивання міжфазних меж. Слід також зазначити, що з пониженням θ головний пік структурного фактора зміщується в область великих k , тобто відбувається подрібнення зерен при низьких температурах.

Моделювання осциляційної поведінки. Аналітичні розрахунки щодо осциляційної поведінки першого статистичного моменту та структурного фактора можуть бути підтверджені незалежним чисельним моделюванням. Моделювання проводилося з кроком інтегрування $\delta = 10^{-3}$ при $l = 1,0$ на ґратниці розміром 128×128 . Для підтвердження осциляційної поведінки першого статистичного моменту та структурного фактора з часом нами було обчислено еволюцію усереднених величин. Оскільки розглянута система відноситься до класу систем зі збереженою динамікою ($\int dr x(\mathbf{r}, t) = \text{const}$, де в нашому випадку $\text{const} = 0$), то вимірюваними в чисельному експерименті були вибрані середні, що відповідають окремо позитивним та негативним значенням поля x , тобто $\langle x^+ \rangle$ та $\langle x^- \rangle$. Якщо в системі виникають осциляції першого моменту при відхиленні від певного стаціонарного значення, то вони мають бути зображені на залежностях $\langle x(t)^\pm \rangle$.

При чисельному моделюванні встановлено, що компоненти $\langle x(t)^\pm \rangle$ повного середнього дійсно зростають до свого стаціонарного значення та мають осциляційну поведінку (див. рис. 34, а). При цьому коливання $\langle x^+ \rangle$ та $\langle x^- \rangle$ відбуваються у протифазі, що призводить до виконання закону збереження. Зображена на рис. 34, а зростаюча часова залежність параметра порядку $J(t)$ (другого статистичного моменту) свідчить про проходження упорядкування в системі, а відповідні осциляції на ній є віддзеркаленням відповідної поведінки структурного фактора у часі. Залежності структурного фактора від хвильового числа представлено на рис. 34, б.

З нього видно, що у випадку відсутності додаткового атермічного перемішування атомів ($D_e = 0$), яке викликане зовнішнім впливом, залежність $S(k)$ характеризується чітко вираженим основним піком, який відповідає найбільш нестійкій моді ($k = k_m$), та коливальним характером спадання при $k > k_m$, що свідчить про те, що в системі відбувається процес відбору структур. У випадку існування зовнішнього потоку ($D_e \neq 0$) стохастичного характеру ($\sigma^2 \neq 0$) основний пік структурного фактора зменшується, що говорить про дифузність міжфазних меж, а додаткові коливання структурного фактора відбуваються з меншою амплітудою — процеси відбору структур пригнічуються. Характерно, що з пониженням температури відбу-

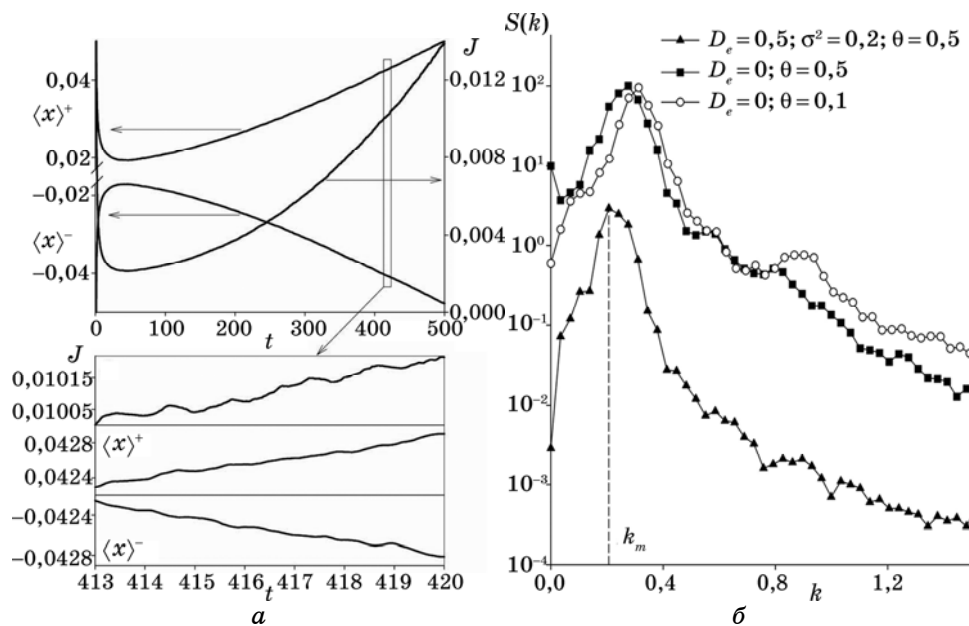


Рис. 34. Еволюція середніх значень поля $\langle x^+ \rangle$, $\langle x^- \rangle$ та другого статистичного моменту (параметра порядку) $J = \langle x^2 \rangle$ при $\tau_D = 0,5$, $r_c = 1,0$, $\theta = 0,5$, $D_e = 0,5$, $\sigma^2 = 1,0$ (а) та залежності структурного фактора від хвильового числа при $\tau_D = 1,0$, $r_c = 1,0$ (б).

вається подрібнення зерен (зміщення положення основного піку $S(k)$ в область великих k). Одержані при комп'ютерному моделюванні залежності структурного фактора якісно підтверджують одержані залежності в аналізі на стійкість.

Для встановлення характеру зміни критичних значень основних параметрів системи при зовнішньому впливі у рамках загально відомих положень розглядається поведінка вимірюваних статистичних величин у стаціонарному випадку $t \rightarrow \infty$. При цьому інформативними будуть величини $m_+ \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \overline{\langle x(t)^+ \rangle}$ та $\eta \equiv \lim_{t \rightarrow \infty} \overline{\langle J \rangle}$, додатково усереднені за великим часовим інтервалом (позначка $\overline{\dots}$) при $t \rightarrow \infty$, коли релаксаційні процеси вже закінчилися. Оскільки η є параметром порядку, усередненим за часом (у припущенні виконання ергодичної гіпотези), то доцільно визначити узагальнену сприйнятливість χ у стандартний спосіб $\chi = N^{-2}(\overline{\langle J^2 \rangle} - \langle J \rangle^2) / \langle J \rangle^2$. При цьому в неупорядкованій фазі маємо $\eta = 0$, а в упорядкованій $\eta \neq 0$. В околі точки переходу (наприклад при $\theta; \tilde{\theta}_c$) зростання флюктуацій має призводити до зростання узагальненої сприйнятливос-

ти $\chi \propto \overline{\langle \delta J^2 \rangle}$, де $\tilde{\theta}_c$ — критична температура переходу індукованого дією зовнішнього шуму.

На рисунку 35, *a* подано діаграму температурної залежності середніх m_- , m_+ у границі $t \rightarrow \infty$. Із неї видно, що при фіксованому значенні інтенсивності шуму σ^2 зростання детермінованої частини потоку призводить до пониження критичного значення температури θ_c . Вставки на рис. 35, *a* ілюструють типові картини упорядкування при різних значеннях температури. На рисунку 35, *б* наведено температурні залежності величини m_+ , параметра порядку η та сприйнятливості χ при $D_e = 0,5$ та $\sigma^2 = 0,1$. Із них випливає, що зі зростанням температури до критичного значення $\tilde{\theta}_c$ величина m_+ та параметр порядку η спадають до нуля, де при $\theta \cong \theta_c$ узагальнена сприйнятливість суттєво зростає. Окрім того видно, що при фіксо-

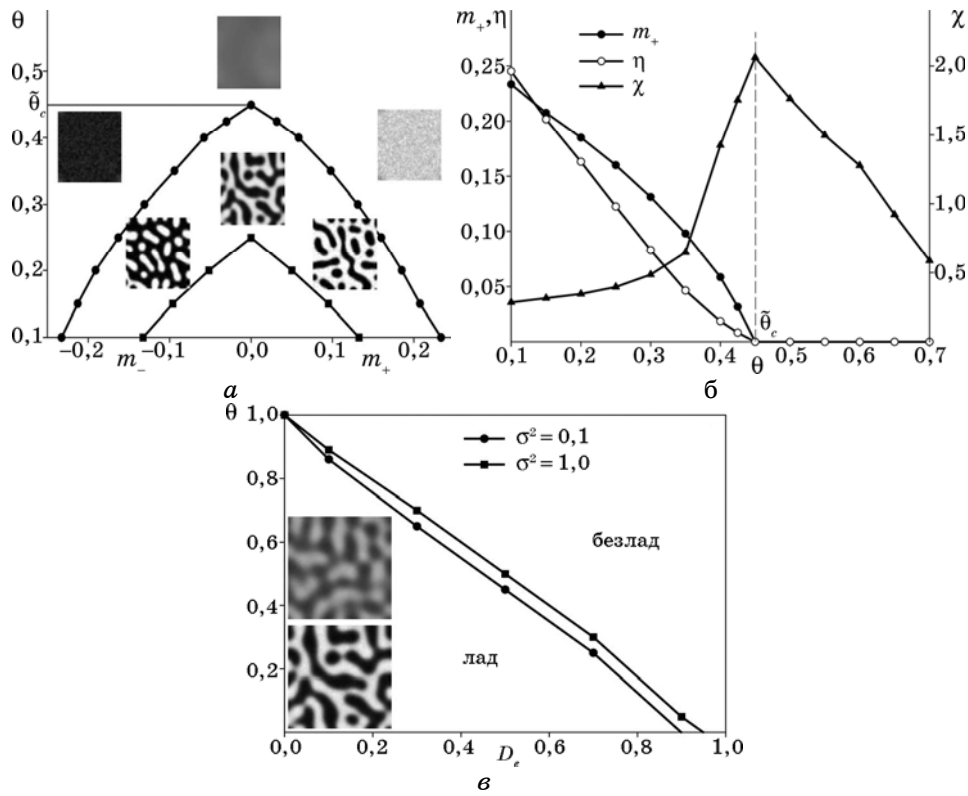


Рис. 35. Типові залежності середнього m_- , m_+ від температури θ при $D_e = 0,5, 0,7$ (кілця та квадрати) (*a*), величини m_+ , параметра порядку η та узагальної сприйнятливості χ при $D_e = 0,5$, $\sigma^2 = 0,1$ (*б*), та діаграма упорядкування (*в*) (вставки наведено при $D_e = 0,5$, $\sigma^2 = 0,1$ та $\theta = 0,3, 0,4$); решта параметрів: $\tau_D = 0,5$, $r_c = 1,0$.

ваному D_e зі зростанням інтенсивності шуму σ^2 значення $\tilde{\theta}_c$ наближається до свого середньопольового $\theta_c = 1$, що визначає зміну модальності густини вільної енергії $f(x)$. Фазову діаграму, що ілюструє характер впливу двох складових зовнішнього потоку на картину упорядкування, наведено на рис. 35, в. З неї видно, що D_e призводить до пониження критичного значення θ_c , яке лежить на відповідних лініях, а зростання σ^2 призводить до нестійкості неупорядкованого стану на підвищених температурах (збільшення θ_c). Цей висновок добре узгоджується з аналізом системи на ранніх стадіях. Також слід зазначити, що в області, близькій до критичної, флюктуації поля x стають великими, а тому структури є розмитими, тоді як при відхиленні від θ_c просторові структури стають чітко вираженими (див. вставки на фазовій діаграмі при $D_e = 0,5$, $\theta = 0,3$, $0,4$).

5. ВИСНОВКИ

Проведено аналізу процесів мікроструктурних перетворень у конденсованих системах зі збереженою динамікою за наявності термічно стимульованого J_D та балістичного J_e потоків, що мають стохастичну природу. Розглянуто розвиток теорії нерівноважних фазових переходів та мікроструктурних перетворень у стохастичних системах, підданих радіаційному впливу.

Основою є методі фазового поля кристалу Гранта–Елдера, побудований модель для дослідження поведінки однокомпонентних систем кристалічного типу в умовах опромінення. При цьому окремо розглянуто випадок, коли швидкість розповсюдження збурень є кінцевою величиною, тобто швидкості розповсюдження збурень викликаних термічно стимульованим та атермічним потоками різняться. Встановлено конкурентний вплив на процеси структуроутворення регулярної та стохастичної компонент потоку опромінення, а саме, що регулярна складова потоку перешкоджає упорядкуванню, тоді як стохастична компонента сприяє проходженню атомового упорядкування. Для однокомпонентної кристалічної системи з сумірними та несумірними масштабами розповсюдження збурень, внаслідок сумісної дії опромінення та термічно стимульованого перемішування, флюктуації довжини стрибка вибитих атомів призводять до мікроструктурних перетворень з формуванням дисипативних структур з розподілом атомової густини вздовж атомових площин. Якщо швидкість розповсюдження збурень є кінцевою, та різною для кожного з потоків, то, на ранніх стадіях упорядкування при опроміненні, у системі відбувається відбір структур. Про це свідчить наявність декількох піків на залежності сферично усередненого структурного фактора. З часом, в системі формуються структури з одним періодом, залежним від потоку опромінення,

середньої довжини стрибка вибитого атома та дисперсії довжин таких стрибків. Встановлено, що флюктуації довжин стрибків вибитих атомів сприяють проходженню процесів відбору структур на ранніх стадіях структуроутворення.

Узагальнюючи теорію Кана–Хіллія–Кука та Мартанів підхід, на випадок впливу опромінення, зроблено опис просторового упорядкування на вищому ієрархічному рівні для процесів фазового розшарування бінарних стопів еквіатомового складу. Показано, що в системі реалізується реверсивна картина упорядкування, що є наслідком конкуренції термічно стимульованої дифузії та балістичного перемішування. Показано конкуренцію регулярної та стохастичної компонент балістичного потоку. При розгляді бінарних систем з гіперболічним транспортом, що зазнають спинодального розпаду, виявлено, що мікроструктурні перетворення таких систем суттєво залежать від часу релаксації термічно стимульованого дифузійного потоку і можуть бути контрольовані кореляційними властивостями його флюктуацій та регулярною і стохастичною компонентами потоку опромінення.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. A. Onuki, *Phase Transition Dynamics* (Cambridge: Cambridge University Press: 2004).
2. В. Н. Воеводин, И. М. Неклюдов, *Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов* (Киев: Наукова думка: 2006).
3. В. Й. Сугаков, *Основи синергетики* (Київ: Обереги: 2001).
4. W. Horsthemke and R. Lefever, *Noise-Induced Transitions* (Berlin: Springer-Verlag: 1984).
5. J. Garcia-Ojalvo and J. M. Sancho, *Noise in Spatially Extended Systems* (New York: Springer-Verlag: 1999).
6. А. И. Олемской, Д. О. Харченко, *Самоорганизация самоподобных стохастических систем* (Ижевск–Москва: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»: 2007).
7. Дж. Николис, И. Пригожин, *Самоорганизация в неравновесных системах* (Москва: Мир: 1979).
8. R. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **60**: 14649 (1999).
9. J. Ye and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **70**: 094104 (2004).
10. G. Martin, *Phys. Rev. B*, **30**: 1424 (1984).
11. V. G. Vaks and V. V. Kamyshenko, *Phys. Lett. A*, **177**: 269 (1993).
12. S. Matsumara, Y. Tanaka, S. Miller, and C. Abromeit, *J. Nucl. Instrum.*, **239**: 42 (1996).
13. R. Enrique and P. Bellon, *Appl. Phys. Lett.*, **78**: 4178 (2001).
14. P. Krasnochtchekov, R.S. Averback, and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **72**: 174102 (2005).
15. T. Diaz de la Rubia, R. S. Averback, and H. Hsieh, *J. Mater. Res.*, **4**: 579 (1989).
16. T. Diaz de la Rubia, R. S. Averback, R. Benedek, and W. E. King, *Phys. Rev.*

- Lett.*, **59**: 1930 (1987).
17. R. S. Averbach, T. Diaz de la Rubia, and R. Benedek, *Nucl. Instrum. Methods*, **B33**: 693 (1988).
 18. G. H. Kinchin and R. S. Pease, *Rep. Prog. Phys.*, **18**: 1 (1955).
 19. R. S. Averbach, R. Benedek, K. L. Merkle et al., *J. Nucl. Mater.*, **113**: 211 (1983).
 20. T. Diaz de la Rubia, A. Caro, and M. Spaczer, *Phys. Rev. B*, **47**: 11483 (1993).
 21. S. Siegel, *Phys. Rev.*, **75**: 1823 (1949).
 22. A. R. Sweedler and D. E. Cox, *Phys. Rev. B*, **12**: 147 (1975).
 23. L. R. Aronin, *J. Appl. Phys.*, **25**: 344 (1954).
 24. G. J. C. Carpenter and E. M. Shulson, *J. Num. Mat.*, **73**: 180 (1978).
 25. H. L. Glick, F. C. Brooks, W. F. Witzig, and W. E. Johnson, *Phys. Rev.*, **87**: 1074 (1952).
 26. J. Gilbert, *Radiat. Eff.*, **20**: 37 (1973).
 27. A. Ali, *Phil. Mag. B*, **37**: 353 (1978); G. Thomas, *Scr. Metall.*, **16**: 589 (1982).
 28. J. Koike, P. R. Okamoto, and M. Meshii, *J. Non-Cryst. Solids*, **106**: 90 (1988).
 29. K. C. Russel, *Prog. Mater. Sci.*, **28**, No. 3–4: 229 (1984).
 30. F. Foisson and D. Duibisson, *Met. Mat. Soc.*, 981 (1994).
 31. H. Yasuda, H. Mori, and J. G. Lee, *Phys. Rev. B*, **70**: 214105 (2004).
 32. D. G. Morris, G. T. Brown, R. C. Piller, and R. E. Smallman, *Acta Metall.*, **24**: 21 (2008).
 33. M. Griffiths, *J. Nucl. Mater.*, **159**: 190 (1988).
 34. R. A. Enrique, K. Nordlund, R. S. Averbach, and P. Bellon, *J. Appl. Phys.*, **93**: 2917 (2003).
 35. R. A. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. E*, **63**: 134111(12) (2001).
 36. P. K. MacKeown, *Stochastic Simulation in Physics* (Singapore: Springer-Verlag: 1997).
 37. J. S. Langer, *Directions in Condensed Matter Physics* (Singapore: World Scientific: 1986).
 38. K. R. Elder, N. Provatas, J. Berry et al., *Phys. Rev. B*, **75**: 064107(14) (2007).
 39. J. Berry, K. R. Elder, and M. Grant, *Phys. Rev. E*, **77**: 061506 (2008).
 40. A. Jaatinen, C. V. Achim, K. R. Elder, and T. Ala-Nissila, *Phys. Rev. E*, **80**: 031602(10) (2009).
 41. K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, and M. Grant, *Phys. Rev. Lett.*, **88**: 245701 (2002).
 42. K. R. Elder and M. Grant, *Phys. Rev. E*, **70**: 051605 (2004).
 43. J. Berry, M. Garnt, and K. R. Elder, *Phys. Rev. E*, **73**: 031609 (2006).
 44. J. Swift and P. C. Hohenberg, *Phys. Rev. A*, **15**: 319 (1977).
 45. B. von Haefen, G. Izús, S. Mangioni et al., *arXiv:nlin*, 0309029.
 46. K. R. Elder, M. Katakowski, M. Haataja, and M. Grant, *Phys. Rev. Lett.*, **88**: 245701 (2002).
 47. P. Stefanovich, M. Haataja, and N. Provatas, *Phys. Rev. Lett.*, **96**: 225504(4) (2006).
 48. D. Kharchenko, P. Galenko, and V. Lebedev, *Usp. Fiz. Met.*, **10**: 27 (2009).
 49. R. A. Enrique and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **63**: 134111 (2001).
 50. J. Ye and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **70**: 094104 (2004).
 51. V. I. Dubinko, A. V. Tur, and V. V. Yanovsky, *Radiat. Eff.*, **112**: 233 (1990).
 52. J. Garcia-Ojalvo, A. M. Lacasta, J. M. Sancho, and R. Toral, *Europhys. Lett.*, **42**: 125 (1998).

53. M. Ibanes, J. Garcia-Ojalvo, R. Toral, and J. M. Sancho, *Phys. Rev. E*, **60**: 3597 (1999).
54. H. Risken, *The Fokker–Planck Equation* (Berlin: Springer-Verlag: 1984).
55. C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods* (Berlin–Heidelberg–New-York–Tokyo: Springer-Verlag: 1985).
56. D. O. Kharchenko, A. V. Dvornichenko, and I. O. Lysenko, *Ukr. Phys. Journ.*, **53**: 917 (2008).
57. J. Buceta, M. Ibanes, J. M. Sancho, and K. Lindenberg, *Phys. Rev. E*, **67**: 021113 (2003).
58. K. Wood, J. Buceta, and K. Lindenberg, *Phys. Rev. E*, **73**: 022101 (2006).
59. D. Kharchenko, I. Lysenko, and V. Kharchenko, *Physica A*, **389**: 3356 (2010).
60. U. M. Marconi, A. Puglisi, L. Rondoni, and A. Vulpiani, *Phys. Rep.*, **461**: 111 (2008).
61. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика. Том V* (Москва: Наука: 1976).
62. A. A. Ponomarev, V. I. Miroshnichenko, and A. G. Ponomarev, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **267**, Iss. 12–13: 2041 (2009).
63. M. Ibanes, J. Garcia-Ojalvo, R. Toral, and J. M. Sancho, *Lecture Notes in Physics*, **557**: 247 (Eds. J. A. Freund and T. Poschel) (Berlin: Springer-Verlag: 2000).
64. Е. А. Новиков, *ЖЭТФ*, **20**: 1290 (1965).
65. К. В. Гардинер, *Стохастические методы в естественных науках* (Москва: Мир: 1986).
66. Н. Г. Ван Кампен, *Стохастические процессы в физике и химии* (Москва: Высшая школа: 1990).
67. D. O. Kharchenko and A. V. Dvornichenko, *Physica A*, **387**: 5342 (2008).
68. J. M. R. Parrondo, C. Van der Broeck, J. Buceta, and F. J. de la Rubia, *Physica A*, **224**: 153 (1996).
69. J. D. Gunton, M. San Miguel, and P. S. Sahni, In: *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Eds. C. Domb and J. L. Lebowitz) (New York: Academic Press: 1983).
70. G. Schmitz, J. C. Ewert, F. Harbsmeier et al., *Phys. Rev. B*, **63**: 224113 (2001).
71. J. Ye and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **70**: 094104 (2004).
72. J. Ye and P. Bellon, *Phys. Rev. B*, **70**: 094105 (2004).
73. D. O. Kharchenko and A. V. Dvornichenko, *Eur. Phys. J. B*, **61**: 95 (2008).
74. G. E. P. Box and M. E. Müller, *Ann. Math. Stat.*, **29**: 610 (1958).
75. D. O. Kharchenko, V. O. Kharchenko, and I. O. Lysenko, *Cent. Eur. J. Phys.*, **9**: 698 (2011).
76. D. D. Joseph and L. Preziosi, *Rev. Mod. Phys.*, **61**: 41 (1989).
77. Г. Репке, *Неравновесная статистическая механика* (Москва: Мир: 1990).
78. D. Jou, J. Casas Vazquez, and G. Lebon, *Extended Irreversible Thermodynamics* (Berlin: Springer-Verlag: 2001).
79. P. Galenko, D. Danilov, and V. Lebedev, *Phys. Rev. E*, **79**: 051110 (2009).
80. J. A. P. Ramos, E. Granato, S. C. Ying et al., *Phys. Rev. E*, **81**: 011121(7) (2010).
81. К.-А. Wu, A. Adland, and A. Karma, *Phys. Rev. E*, **81**: 061601(15) (2010).
82. D. O. Kharchenko, I. O. Lysenko, and S. V. Kokhan, *Eur. Phys. J. B*, **76**: 37 (2010).
83. Д. О. Харченко, И. О. Лисенко, В. О. Харченко, *Металлофиз. новейшие*

- технол.*, **32**, № 6: 783 (2010).
84. A. G. Khachaturyan, *Theory of Structural Transformations in Solids* (New York: Wiley: 1983).
 85. В. П. Скрипов, А. В. Скрипов, *УФН*, **128**: 193 (1979).
 86. W. J. Moberly Chan, D. P. Adams, M. J. Aziz et al., *MRS Bulletin*, **32**: 424 (2007).
 87. C. L. Emmott and A. J. Bray, *Phys. Rev. E*, **59**: 213 (1999).
 88. J. W. Cahn and J. E. Hilliard, *J. Chem. Phys.*, **28**: 258 (1958).
 89. C. W. Gardiner, *Handbook of Stochastic Methods* (Berlin–Heidelberg–New York: Springer-Verlag: 1985).
 90. D. O. Kharchenko and I. A. Knyaz', *Eur. Phys. J. B*, **32**: 375 (2003).
 91. A. I. Olemskoi, D. O. Kharchenko, and I. A. Knyaz', *Phys. Rev. E*, **71**: 041101 (2005).
 92. M. Ibanes, J. Garcia-Ojalvo, R. Toral, and J. M. Sancho, *Phys. Rev. Lett.*, **87**: 020601 (2001).
 93. I. M. Lifshitz and V. V. Slyozov, *J. Phys. Chem. Solids*, **19**: 35 (1961).
 94. G. Martin and P. Bellon, *Solid State Phys.*, **50**: 189 (1996).
 95. P. K. Galenko, D. O. Kharchenko, and I. O. Lysenko, *Physica A*, **389**: 3443 (2010).
 96. P. Galenko and D. Jou, *Physica A*, **388**: 3113 (2009).
 97. D. Jou, J. Casas-Vazquez, and G. Lebon, *Rep. Prog. Phys.*, **51**: 1005 (1988).
 98. D. Joseph and L. Preziosi, *Rev. Mod. Phys.*, **61**: 41 (1989).
 99. J. W. Cahn and J. E. Hilliard, *J. Chem. Phys.*, **28**: 258 (1958).
 100. J. W. Cahn, *Acta Metall.*, **9**: 795 (1961).
 101. H. E. Cook, *Acta Metall.*, **18**: 297 (1970).
 102. P. Galenko and V. Lebedev, *Phys. Lett. A*, **372**: 985 (2008).
 103. N. Lecoq, H. Zapolsky, and P. Galenko, *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, **177**: 165 (2009).
 104. Д. О. Харченко, І. О. Лисенко, В. О. Харченко, *Укр. фіз. ж.*, **55**: 1226 (2010).
 105. K. Binder and P. Fratzl, *Phase Transformations in Materials* (Eds. G. Kostorz) (Weinheim–New York–Chichester–Brisbane–Singapore–Tokyo: Wiley-VCH: 2001).
 106. Y. Yackle and M. Piesoth, *Z. Phys. B*, **72**: 25 (1988).
 107. K. Binder, *Festkörperprobleme—Advances in Solid State Physics* (Eds. P. Grosse) (Braunschweig: Vieweg: 1986).
 108. G. Martin, *Phys. Rev. B*, **41**: 2279 (1990).