

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ**

Баштова Анна Іванівна

УДК 530.182, 531.3

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОСТОРОВОЇ ОРГАНІЗАЦІЇ
ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ В ОПРОМІНЮВАНИХ
СИСТЕМАХ**

01.04.02 — теоретична фізика

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації

**на здобуття наукового ступеня кандидата
фізико–математичних наук**

Суми – 2018

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Інституті прикладної фізики НАН України

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, професор
Харченко Дмитро Олегович,
Інститут прикладної фізики НАН України,
завідувач відділом моделювання радіаційних
ефектів та мікроструктурних перетворень
у конструкційних матеріалах.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор
Яновський Володимир Володимирович,
Інститут монокристалів НАН України,
завідувач відділом теорії конденсованої речовини;

доктор фізико-математичних наук, професор
Денисов Станіслав Іванович
Сумський державний університет,
професор кафедри електроніки,
загальної та прикладної фізики.

Захист відбудеться “4” липня о 15 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради К 55.250.01 при Інституті прикладної фізики НАН України за адресою: м. Суми, вул. Петропавлівська 58, конференц-зал.

Із дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Інституту прикладної фізики НАН України.

Автореферат розісланий “31” травня 2018 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради
кандидат фізико-математичних наук

Недорешта В.М.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

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

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

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Роботу виконано в Інституті прикладної фізики НАН України відповідно до цільової програми Відділення ядерної фізики та енергетики НАН України "Розвиток перспективних напрямів фундаментальних досліджень в ядерній, радіаційній фізиці та ядерної енергетиці" проект "До-

слідження самоорганізації ансамблю дефектів при еволюції мікроструктури кристалічних систем, підданих дії опромінюючих потоків” (номер державної реєстрації 0116U005851, строк виконання 2017-2021 рр.), проєкт “Багатомасштабне моделювання процесів мікроструктурних перетворень у матеріалах, підданих радіаційному опроміненню” (номер державної реєстрації 0111U010614, строк виконання 2012-2016 рр.), проєкт “Моделювання процесів дефектоутворення при деформації кристалічних систем, підданих дії опромінення” (номер державної реєстрації 0115U004688, строк виконання 2015 р.), проєкт “Мультимасштабне моделювання динаміки радіаційних дефектів і формування вакансійних кластерів в чистому цирконії” (номер державної реєстрації 0115U005810, строк виконання 2016 р.); проєкт “Багаторівневе моделювання самоорганізації точкових дефектів в конструкційних матеріалах при сталій дії опромінення” (номер державної реєстрації 0117U003561, строк виконання 2017 р.).

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

- установити характер впливу пружних деформацій в околі дефектів на процеси формування вакансійних кластерів та росту густини дислокаційних петель в режимах опромінення в реакторі та на прискорювачах;
- з’ясувати особливості перебігу процесів структуроутворення вакансій за наявності флуктуацій швидкості пошкоджень;
- установити вплив деформаційних нестійкостей на процеси стохастичного пороутворення за різної інтенсивності стоків точкових дефектів;
- виявити умови проходження процесів відбору структур при кластеризації вакансій, зміни морфології кластерів у приповерхневих шарах опромінюваних тонких плівок за наявності флуктуацій швидкості набору дози;
- з’ясувати умови структуризації вакансій в опромінюваних бінарних сплавах, що зазнають фазового розшарування за вакансійним механізмом з деформаційними нестійкостями;
- для бінарних опромінюваних систем описати виділення фаз із стохастичним потоком атермічного атомового перемішування за наявності дислокацій невідповідності .

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

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

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

Наукова новизна отриманих результатів полягає у тому, що вперше:

- показано, що процеси самоорганізації в системі точкових дефектів з виникненням компактних кластерів, дислокаційних петель та пор пов'язані з локальними деформаційними нестійкостями, генерованими самими дефектами, їхньою просторовою взаємодією та флуктуаціями швидкості радіаційних пошкоджень;
- у рамках використання стохастичного підходу для дослідження процесів формування дефектних структур вакансійного типу виявлено, що флуктуації швидкості набору дози прискорюють просторовий перерозподіл дефектів у скупчення з нанометровим розміром;
- встановлено, що флуктуації швидкості набору дози збільшують критичний радіус вакансійних пор, зі збільшенням інтенсивності стоків точкових дефектів відбувається уповільнення процесу росту пор з переходом від сценарію Ліфшиця-Алена-Кана до режиму Ліфшиця-Сльозова-Вагнера (зі спаданням показника росту середнього розміру пори з часом від значення $1/2$ до $1/3$);
- з'ясовано, що при кластеризації вакансій у приповерхневих шарах тонких плівок процеси відбору структур відбуваються внаслідок взаємозв'язку між концентрацією дефектів і локальними змінами температури приповерхневого шару, при зростанні швидкості пошкоджень відбувається зміна морфології вакансійних кластерів;
- виявлено, що при збільшенні швидкості набору дози опромінення радіаційно-стимульоване випадіння фаз у бінарному твердому роз-

чині за вакансійним механізмом трансформується у процес формування структур вакансій, перерозподіл вакансій приводить до уповільнення спінодального розпаду відповідно до зворотного ефекту Кіркендала;

- показано, що конкуренція регулярної та скорельованої стохастичної складових атермічного потоку атомового перемішування спричиняє реверсивне проходження поділу фаз за дислокаційно-підтримуваним механізмом зі згуртуванням дислокацій в околі меж поділу, динаміка росту виділень фаз уповільнюється при зростанні ефективності дислокаційного механізму.

Практичне значення результатів. Отримані у роботі результати можуть бути використані для пояснення процесів формування кластерів дефектів та виникнення дислокаційних петель і пор у конструкційних матеріалах, що зазнають сталого дії опромінення в режимах опромінення в реакторах та на прискорювачах у широкому інтервалі температур та швидкостей пошкоджень. Вони можуть бути застосовані для пояснення радіаційно-стимульованих процесів сегрегації за вакансійним та дислокаційним механізмами у дво- та багатокомпонентних сплавах та оцінювання значень величин, що характеризують розпухання та радіаційний ріст існуючих та нових матеріалів, що експлуатуються в умовах радіаційного опромінення. Розвинуті підходи можуть бути корисними для моделювання і прогнозування стійкості матеріалів при виборі сплавів для конструкційних елементів реакторів нового покоління.

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

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

У роботах [1, 2] автор брав участь у одержанні основних диференціальних рівнянь, проведенні аналізу стійкості лінеаризованої системи та аналітичних розрахунках фазових діаграм, статистичному аналізу даних моделювання. У роботі [3] автором проведено розрахунки в теорії сере-

днього поля, проведено аналіз стійкості, взято участь у розробленні числового алгоритму, проведено моделювання та проведено статистичний аналіз отриманих даних. У роботі [5] дисертанту належать результати з моделювання структуроутворення, розрахунку поведінки структурного фактора, проведення аналізу еволюції функцій розподілу. У роботах [4, 6] автор виконав аналітичне та числове дослідження систем, провів розрахунки пов'язані з обробкою даних числового моделювання. У роботі [7] автор дисертації взяв участь у дослідженні динаміки системи з однорідним розподілом точкових дефектів і просторово розподіленої системи за різних режимів опромінення. Тези доповідей [8–14] підготовлено здобувачем особисто.

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

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

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

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

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність теми дослідження, сформульовано мету роботи, висвітлено її наукову новизну і практичне значення, встановлено предмет і об'єкт дослідження, вказано зв'язок дисертаційної роботи з науково-дослідницькими роботами, визначено особистий внесок здобувача у публікаціях у співавторстві та вказано відомості про апробацію результатів дисертаційної роботи.

Перший розділ “**Нерівноважні процеси в матеріалах під дією опромінення та методи їх опису**” містить опис радіаційних ефектів,

які розглядаються у дисертаційному дослідженні з висвітленням основних теоретичних методів їх вивчення та аналізу. Обговорено сучасний стан досліджуваної проблеми та відповідні математичні моделі, результати попередніх досліджень у вибраному напрямку. З оглянутих літературних джерел зроблено висновок про незавершеність теоретичних досліджень процесів кластеризації, пороутворення та радіаційно-індукованого фазового розшарування. На підставі зроблених висновків визначені завдання дослідження.

У другому розділі **“Формування нанорозмірних структур точкових дефектів під дією опромінення”** на основі розвиненої швидкісної теорії, яка враховує процеси дифузії та взаємодії точкових дефектів та динаміку стоків, проводиться дослідження процесів формування скупчень дефектів вакансійного типу за наявності флуктуацій внутрішньої динаміки та швидкості пошкоджень. Проводиться аналіз умов виникнення структур дефектів в робочих режимах опромінення у реакторах та на прискорювачах у рамках використання аналітичних підходів та методів числового моделювання. Основна модель досліджуваної системи за умови швидкої динаміки міжвузлів має вигляд

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

Рівняння (1) записані для $x = c_v \alpha_r / D_v \rho_N$ – знерозміреної концентрації вакансій у знерозміреному часі $t \equiv t_0 D_v \rho_N$, де c_v і t_0 – реальна концентрація і час, x_0 – рівноважна концентрація, α_r – коефіцієнт рекомбінації, $P \equiv \alpha_r \mathcal{K} / (D_v \rho_N)^2$ – перенормована швидкість набору дози залежна від реальної швидкості дефектоутворення \mathcal{K} та температури T , що міститься у коефіцієнті дифузії вакансій D_v ; $\varepsilon_{i,v}$ – ефективності кластеризації міжвузлів та вакансій відповідно; ρ_N – густина дислокаційної сітки, ρ_i та ρ_v – знерозмірені густини дислокаційних міжвузлових та вакансійних петель, вимірних у ρ_N ; $\mathbf{J} \equiv - [\nabla x - \varepsilon x \nabla (x + \ell^2 \nabla^2 x)]$ – перенормований потік взаємодіючих дефектів. Просторову координату та довжину взаємодії дефектів ℓ , залежну від радіуса та знерозміреної енергії їх взаємодії $\varepsilon = Z E_0^e / T$ (E_0^e – енергія поля деформації, Z – координаційне число), виміряно в одиницях дифузійної довжини $L_D = (\rho_N)^{-1/2}$, де ($\ell \ll L_D$); часові

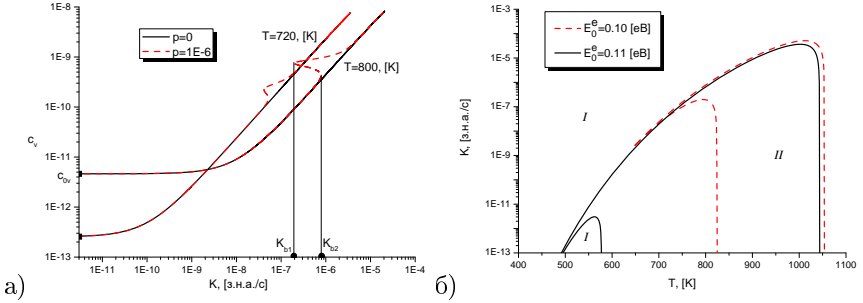


Рис. 1. (а) Стационарні залежності концентрації вакансій при $E_0^e = 0.1$ eВ. (б) Фазова діаграма існування бімодального режиму при $p = 10^{-6}$

масштаби τ_i , τ_v задаються модулем вектора Бюргерса b , радіусом захвата дислокаційної петлі r_v^0 та густиною числа петель N ; $\Delta B = B - B'$, $A \equiv 1 + B$, $\tilde{A} \equiv 1 + \Delta B$, B – фактор зміщення, $G \equiv p\omega_D\alpha_r/(D_v\rho N)^2$ – частотний фактор, визначений через дебаївську частоту ω_D та ефективність зміни активаційного бар'єра утворення дефекту за рахунок пружної деформації середовища; $\epsilon \ll 1$ задає відношення коефіцієнтів дифузії вакансій і міжвузлів.

Із аналізу стаціонарних станів встановлено, що в інтервалі швидкостей пошкоджень $[K_{b1}, K_{b2}]$ система знаходиться у бістабільному режимі (див. рис.1а). За відсутності впливу пружного поля ($p = 0$) концентрація вакансій монотонно збільшується на декілька порядків. У випадку $p \neq 0$ система стає бімодальною. Бінодалі, яким належать K_{b1} та K_{b2} , при заданій температурі утворюють фазову діаграму, зображену на рис.1б (область II відповідає бістабільним станам, області I – унімодальним). При підвищенні частотного фактору G або енергії деформації E_0^e область бімодальності розширюється на низькі температури. Було проаналізовано стійкість стаціонарних станів та визначено інтервали температур та швидкостей пошкоджень, за яких у системі виникає деформаційна нестійкість. Її наслідком є проходження процесів структуроутворення – формування скупчень дефектів.

У роботі розглянуто вплив флуктуацій швидкості пошкоджень у припущенні $P \rightarrow P_0 + \zeta(\mathbf{r}, t)$, де $\zeta(\mathbf{r}, t)$ зовнішній білий шум з інтенсивністю σ^2 , пропорційною P_0 , що означає, що джерела флуктуацій виникають лише за наявності опромінення. У такому разі ланжевенівська динаміка системи описується рівнянням $\partial_t x = R_x(x) - \nabla \cdot \mathbf{J} + g_x(x)\zeta(\mathbf{r}, t)$, де $R_x(x)$ відповідає регулярній компоненті рівняння еволюції вакансій з (1),

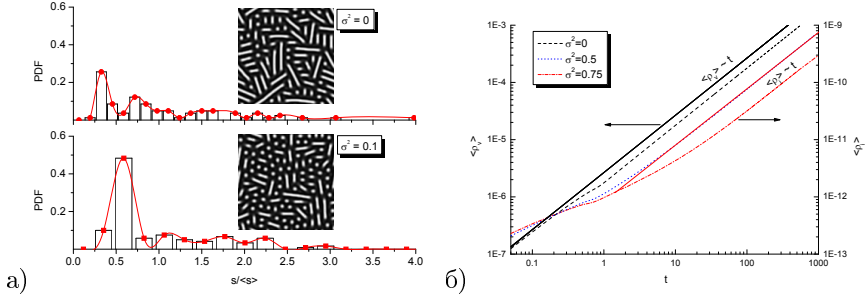


Рис. 2. (а) Залежності стаціонарної функції густини розподілу вакансійних кластерів за розмірами s для детерміністичного ($\sigma^2 = 0$) та стохастичного ($\sigma^2 = 0.5$) випадків. (б) Динаміка середньої густини стоків $\langle \rho_i \rangle$ та $\langle \rho_v \rangle$ при різних значеннях інтенсивності флуктуацій швидкості набору дози в реакторних умовах

$g_x^2(x) = (1 - \varepsilon_v)^2 + \left(\frac{\varepsilon(1 - \varepsilon_i)x}{A(1 + \rho_v + \rho_i) + \varepsilon x} \right)^2$. З аналізу стійкості встановлено, що зовнішній шум приводить до дестабілізації однорідного стану, а при збільшенні густини стоків кількість нестійких мод зменшується внаслідок інтенсивного поглинання дефектів і, відповідно, зменшення пересичення дефектами.

Застосування середньопольового наближення у стаціонарному випадку при слабкій взаємодії дефектів ($\ell \ll 1$) дозволило встановити, що критичне пересичення точкових дефектів зменшується з ростом як \mathcal{K} , так і T , що означає проходження процесів структуризації при меншій населеності точкових дефектів при підвищенні швидкості пошкоджень (температури).

Числове моделювання повної системи за наявності флуктуацій швидкості пошкоджень проводилося на двовимірній квадратній решітці 128×128 з періодичними граничними умовами. Для числового інтегрування був використаний метод Мільштайна. Було досліджено процеси кластеризації вакансій і росту густин петель за умов опромінення в реакторах ($T = 773K$, $\mathcal{K} = 10^{-6}$ з.н.а./с) та на прискорювачах ($T = 973K$, $\mathcal{K} = 10^{-3}$ з.н.а./с). Установлено, що на ранніх стадіях еволюції системи, починаючи з гаусівського розподілу вакансій в околі рівноважного значення, відбувається структурна організація дефектів з реалізацією як сферичних, так і протяжних кластерів. Виявлено, що зовнішні флуктуації приводять до організації вакансій у структури з переважно сферичними кластерами. З отриманих гістограм розподілу вакансійних кластерів

за розмірами встановлено, що у детерміністичному випадку цей розподіл показує виникнення сферичних кластерів з розмірами s , меншими за середній $\langle s \rangle$, та протяжних структурах, що мають розміри $\simeq \langle s \rangle$ та $s > \langle s \rangle$. При підвищених значеннях σ^2 процес формування протяжних вакансійних кластерів пригнічується (див. розподіли скупчень дефектів за розмірами на рис.2 а). Установлено, що флуктуації швидкості набору дози приводять до зменшення середньої концентрації міжвузлових та вакансійних петель. Середні густини петель $\langle \rho_i \rangle$, $\langle \rho_v \rangle$ зростають з часом (дозою опромінення) за лінійним законом при підвищених дозах. Флуктуації швидкості набору дози приводять до уповільнення динаміки густини міжвузлових петель $\langle \rho_i \rangle$ на початкових стадіях опромінення.

За великих швидкостей набору дози дефекти вакансійного типу організуються у кластери сферичної форми без утворення протяжних структур дефектів. За таких умов унаслідок комбінаційного ефекту генерації дефектів та впливу стохастичного джерела кількість дефектів зростає, при цьому стохастичні складові приводять до формування лише сферичних вакансійних кластерів розмірами $s \simeq \langle s \rangle$. Дія шуму істотно не впливає на густину вакансійних кластерів, кількість кластерів незначно зростає з підвищенням σ^2 . Показано, що період розташування вакансійних кластерів при опроміненні на прискорювачах має зменшуватись до 6.25 – 6.6% порівняно з відповідними розмірами при опроміненні в реакторах за тих самих стохастичних умов, середній розмір вакансійного кластера $\simeq 7.5$ нм. Установлено, що при опроміненні на прискорювачах реалізується лінійний ріст для $\langle \rho_v(t) \rangle$, $\langle \rho_i(t) \rangle \propto t$ навіть при малих часових інтервалах еволюції системи. У цьому випадку відсутня повільна динаміка стоків, характерна для дифузійних процесів. Зовнішні флуктуації приводять до зменшення значення густини стоків. При великих \mathcal{K} густина стоків стає на три порядки більшою за відповідні значення при опроміненні в реакторних умовах.

Другий розділ **“Структурутворення та процеси відбору в опромінюваних тонких плівках”** присвячено вивченню процесів формування скупчень дефектів та процесів відбору структур у металевих плівках товщиною $h \sim 0.5 \mu\text{m}$ з нестійкостями Грінфелда при опроміненні з високими швидкостями пошкоджень. Тут ураховується, що нестійкості класу Маллінса-Секеркі приводять до виникнення коливання температури в приповерхневому шарі. Обмеженням у дослідженні є розгляд лише двох залежних між собою полів, а саме, знерозмірених концентрації точкових дефектів $x \equiv \mu c_v$ та локальної температури $\Theta \equiv T/T_0$, де $\mu \equiv \alpha_r/D_i\rho_N$,

T_0 - температура середовища. Модель такої системи набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \partial_t x &= \frac{P_0}{1+x} - \phi(\Theta)(x - x_0) + \nabla \cdot \phi(\Theta) \left[\nabla x - \frac{\epsilon x}{\Theta} \left(\nabla \mathcal{L} x - \mathcal{L} x \frac{\nabla \Theta}{\Theta} \right) \right] + \\ &+ g_x(x) \xi(t); \\ \eta \partial_t \Theta &= \kappa \Delta \Theta - (\Theta - 1) + \varpi \left[P_0 \left(\zeta + \frac{x}{1+x} \right) + \phi(\Theta)(x - x_0) \right] + g_\Theta(x) \xi(t), \end{aligned} \quad (2)$$

де $\mathcal{L} \equiv (1 + \ell^2 \nabla^2)$, $\phi(\Theta) \equiv e^{-\varepsilon/\Theta}$, $g_x(x) = 1/(1+x)$, $g_\Theta(x) = \sqrt{\varpi} (\zeta + x g_x(x))$. Час виміряно в одиницях $\tau_d \equiv (\rho_N D_v)^{-1}$, а просторові координати у одиницях L_D . Решту параметрів визначено через $\theta_d \equiv \Omega K$ - потенціал напруженості дефекту, K - модуль пружності, ν - коефіцієнт Пуассона, ρ - густину, C - питому теплоємність, χ - теплопровідність, γ_0 - коефіцієнт теплопередачі, $\zeta \gg 1$ - відношення енергії опромінення, яка використовується на нагрівання, до енергії опромінення, яка використовується на формування дефектів; E_f - енергію формування дефектів $\sigma_{||}$ - ізотропні напруження розтягнення на насиченій дефектами поверхні висоти h у вигляді: $c_{||}^2 = \sigma_{||}/\rho$, $l_{||} = h/2\sqrt{3}$, $\ell \equiv l_{||}/L_D$, $\epsilon \equiv \nu \theta_d^2/\mu \sigma_{||} T_0$, $P \equiv \mu \mathcal{K} \tau_d$, $\eta \equiv C \rho h/\tau_d \gamma_0$, $\kappa \equiv \chi h/L_D^2 \gamma_0$, $\varpi \equiv E_f h/T_0 \mu \tau_d \gamma_0$, $\varepsilon \equiv E_v/T_0$. Прийнято стохастичні умови опромінення: $P \rightarrow P_0 + \xi(t)$. Дослідження динаміки цієї системи проводилося при: $\mathcal{K} \sim 10^{-3}$ з.н.а./с, $T_0 \in [300, 900]K$, $L_D \simeq 10^{-7}m$, $\tau_d \simeq 10^{-6}c$, $E_f = 1.6eV$, $\eta = 100$, $\kappa = 1$, $\ell = 0.7$, $\zeta = 7$, $\varpi = 0.1$, $\mu \simeq 10^8$.

Із проведеного аналізу на стійкість з'ясовано, що в такій моделі деформаційні нестійкості та нелінійний зв'язок концентрації дефектів з локальною температурою приповерхневого шару, що змінюється при формуванні та анігіляції дефектів приводять до виникнення згасаючих осциляцій полів $c_v(\mathbf{r}, t)$ і $T(\mathbf{r}, t)$, що зрештою, приводять до відбору найбільш стійких (за морфологією та розміром) структур. Флуктуації швидкості пошкоджень приводять до обмеження області значень регулярної компоненти швидкості дефектоутворення \mathcal{K} та температури T_0 , за яких можливе проходження процесів відбору структур (відповідну фазову діаграму наведено на рис.3а, де область осциляторної динаміки обмежується суцільною та відповідною штриховою лініями). Установлено, що період просторових структур двох полів має порядок L_D і слабо залежить від T_0 , \mathcal{K} та σ^2 . Процеси відбору структур було проаналізовано числовим моделюванням на квадратній ґратниці розміром 128×128 вузлів, лінійний розмір складав $9.2L_D$. Досліджувалася поведінка структурного фактора (Фур'є-перетворення двоточкової кореляційної функції поля концентрації) $S_x(k, t)$, де k - хвильове число. Його поведінка у певний визначений

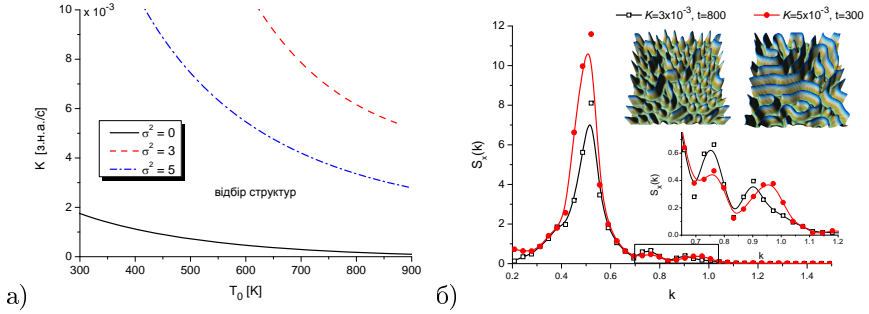


Рис. 3. (а) Фазова діаграма для лінійного аналізу на стійкість при різних інтенсивностях шуму σ^2 . (б) Структурний фактор $S_x(k)$, що ілюструє процеси відбору структур. Криві отримані при $\sigma^2 = 0$, $T_0 = 500K$ і $K = 3 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с, $t = 800$ (квадрати), $K = 5 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с, $t = 300$ (кола). Відповідні конфігурації для концентрації вакансій зображено у вставках

момент часу при різних значеннях ступеня пошкодження зображена на рис.3б. Головний пік визначає основний період просторових структур, а слабкі осциляції при більших значеннях k є ознакою того, що в системі реалізуються структури іншого розміру та морфології (сферичні та видовжені). З часом такі осциляції згасають і залишається лише один основний пік, що відповідає найбільш стійкому просторовому утворенню. На вищому рівні процеси відбору проявляються в осциляторній динаміці не лише усереднених величин та їх дисперсій, вона спостерігається для середнього радіуса просторових структур $\langle R \rangle \simeq 0.3L_D \simeq 30 - 300$ нм (відповідна відстань між ними знаходиться в околі дифузійної довжини) та їх кількості N (див. рис. 4) з протифазними осциляціями. Отримана осциляторна поведінка вакансійних кластерів якісно повторює експериментальні спостереження осциляцій вакансійних кластерів у зразках нікелю при опроміненні власними іонами.

Третій розділ **“Особливості формування пор у стохастичній системі дефектів”** присвячено вивченню впливу стоків на процеси пороутворення при стохастичній генерації точкових дефектів. Досліджується вплив зовнішніх флуктуацій на критичний розмір пор, а також теоретично та числовим моделюванням вивчається універсальність динаміки росту пор.

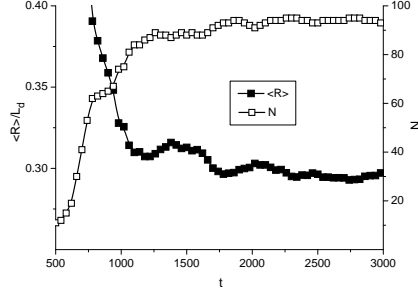


Рис. 4. Еволюція середнього радіуса $\langle R \rangle$ сферичних вакансійних кластерів (заповнені квадратики) і відповідної кількості кластерів (порожні квадратики) при $\mathcal{K} = 3 \cdot 10^{-3}$ з.н.а./с і $T_0 = 500K$, $\sigma^2 = 0$

Відповідна динамічна модель має вигляд:

$$\begin{cases} \partial_t x = P - (1 + \theta R)x - xy - \nabla \mathbf{J}_v; \\ \partial_t y = P - \epsilon(1 + \theta R)y - xy - \epsilon \nabla \mathbf{J}_i; \\ \nu \partial_t R = \frac{1}{R} (x - (x(R) - x_0) - \kappa \epsilon y), \end{cases} \quad (3)$$

де x та y — знерозмірені концентрації вакансій та міжвузлів, радіус пор R вимірюється в одиницях постійної ґратниці; $\epsilon \gg 1$ задає відношення часів життя вакансій і міжвузлів; θ інтенсивність стоків), $\kappa < 1$ описує відношення відповідних інтенсивностей стоків, вважається $P \rightarrow P_0 + \xi(t)$.

Для дослідження впливу шуму на критичний радіус пор було розглянуто динаміку середнього розміру пори. Знайдено стаціонарний критичний радіус пори R_c , залежний від швидкості пошкоджень та інтенсивності шуму. У стохастичному випадку розв'язання цієї задачі може бути отримане у високотемпературному режимі, де використовується розв'язання $x(R) \simeq x_0(1 + 2\Omega\gamma_0/TR)$, де γ_0 — поверхнева енергія пори. Із отриманих залежностей випливає, що флуктуаційна компонента в швидкості набору дози діє протилежно до її регулярної частини. Дія шуму стимулює зростання R_c .

Установлено, що у випадку домінуючого внеску дислокації як стоків точкових дефектів радіус пор росте за законом Ліфшиця-Алена-Кана $R(t) = [2P\nu^{-1}(1 - \kappa)(t - t_0)]^{1/2}$, а зміна повного об'єму системи задається асимптотою $\Delta V \propto (Pt)^{3/2}$. У випадку, коли пори служать додатковими стоками дефектів, то маємо динаміку Ліфшиця-Сльозова-Вагнера: $R(t) = (3(\nu\theta)^{-1}(1 - \kappa)P(t - t_0))^{1/3}$ з динамікою розпухання $\Delta V/V \propto Pt$.

Отже, додаткові стоки вакансій затримують ріст пор та розпухання відповідно. Отримані аналітично дані було підтверджено числовим моделюванням за наявності просторової взаємодії дефектів. Виявлено, що динаміка середнього розміру пори $\langle R \rangle$, показаного на рис. 5а, при великому внеску дислокацій як стоків точкових дефектів ($\theta \rightarrow 0$) відповідають теоретичній залежності з динамічним показником $1/2$. Зі зростанням внеску пор ($\theta \neq 0$) показник росту зменшується до значення $1/3$. Дія шуму приводить до збільшення значення R , оскільки збільшується R_c .

Проведено дослідження впливу швидкості набору дози на динаміку системи у наближенні $R_c^{-1} \simeq R_s^{-1}(1 + \beta)$, де $\beta \equiv (1 - \kappa)P/x_0$ – ефективна швидкість пошкоджень. У випадку коли $\beta = 0$ (відсутній вплив опромінення) маємо стандартну картину, де $R_c(\beta = 0) \equiv R_{c0}$. Досліджувалася динаміка ефективного радіуса пори $u \equiv R/R_{c0}$, що описується рівнянням $du/d\tau = v(u)$, де $v(u) \equiv (1 + \beta)u^{-1} - u^{-2} - \chi u$ у перенормованому часі Ліфшиця-Сльозова. Для описання флуктуацій швидкості набору дози припускалось таке: $\beta \rightarrow \beta(\tau) = \beta + \xi(\tau)$, де $\langle \xi(\tau) \rangle = 0$, $\langle \xi(\tau)\xi(\tau') \rangle = 2\beta\Sigma\delta(\tau - \tau')$. Отже, стохастична динаміка розміру пор визначається рівнянням Ланжевена типу $du/d\tau = v(u) + g(u)\xi(\tau)$, $g(u) = u^{-1}$. Розв'язки відповідного рівняння Фоккера-Планка для густини ймовірності $P(\tau, u)$ знаходились у випадку великого шуму ($\Sigma^{-1} \ll 1$) у автомодельному режимі: $P(\tau, u) = e^{-\lambda\tau}\phi(u)$. Установлено скейлінги для середнього радіуса пори $\langle R(t) \rangle \propto t^H$, де показник Гьольдера $H = 1/3$; для кількості пор $N(t) \propto t^{H(1+\gamma)}$, де $|\gamma| = 1 + 3\lambda/\chi$, $1 < |\gamma| < 4$, $0 < \lambda < \chi$, $\chi = 4(1 + \beta)^3/27$; повного об'єму пор $q(t) \propto t^{(4+\gamma)/3}$. Показник α росту пересичення вакансій $\Delta(t) + q(t) = Qt^\alpha$ є таким $0 \leq \alpha < 1$. Звідси випливає, що оскільки $\chi = \chi(\beta)$, то всі скейлінгові показники залежать від швидкості набору дози. Було проведене числове дослідження поведінки системи за різних наборів дози та за різних значень інтенсивності шуму. Установлено, що розподіл $P(u/\langle u \rangle; \tau)$ залишається незмінним у різних часових масштабах, що свідчить про універсальність динаміки системи (див. рис. 5б).

Розділ “Моделювання розшарування бінарних твердих розчинів при радіаційному опроміненні” присвячено дослідженню радіаційно-індукованих процесів фазового розшарування в рамках узагальнення теорії Кана-Хільярда у конденсованих бінарних системах з концентраціями c_A та c_B атомів сорту A та B . Густина вільної енергії сплаву задається теорією Брега-Вільямса $f = Zw_0c_Ac_B/2 + T(c_A \ln c_A + c_B \ln c_B)$, де Z – координаційне число; w_0 – енергія упорядкування; ураховано неоднорідність композиційного поля з параметром неоднорідності β_0 відповідно до теорії Кривоглаза-Клаппа-Мосса.

У розділі досліджується кінетика розпаду та структуроутворення за

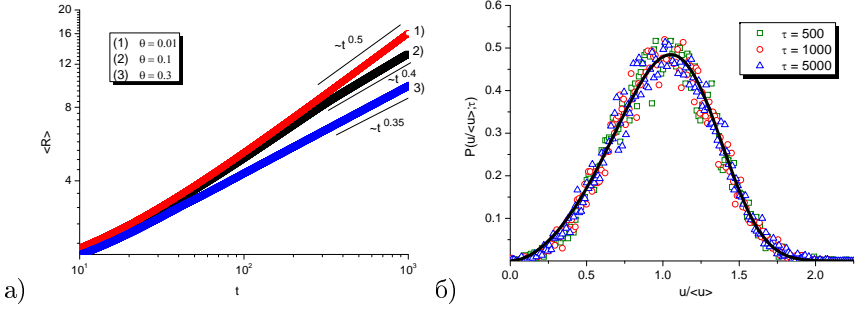


Рис. 5. (а) Часові залежності усередненого радіуса пор при $P = 0.25$, $\epsilon = 1000$, $R/R_s = 1.2$, $\theta = 0.01$, $\epsilon = 12.5$. (б) Універсальна поведінка функції густини ймовірності $P(u/\langle u \rangle, \tau)$ при $\beta = 1$, $\Sigma = 1$.

вакансійним механізмом (з несумірними коефіцієнтами самодифузії двох компонент сплаву D_A^* та D_B^*) за різних швидкостей набору дози, використовуючи підхід Даркена. Отримано кінетичну модель, що описує процеси поділу фаз та сегрегаційні процеси структуроутворення, де використано такі знерозмірені величини $c \equiv c_B$, $\epsilon \equiv Zw_0/T$, $\beta \equiv \beta_0/T$ – параметр неоднорідності, $\tilde{D} \equiv D_A^*/D_B^*$, $t' \equiv tD_B^*\rho$, $P \equiv K/D_B^*\rho$. Просторові координати вимірюються в одиницях L_D ; $\ell \equiv r_0/L_D$. Концентрація вакансій масштабувалась з параметром $\gamma \equiv 4\pi r_0/\Omega\rho_N$ (r_0 та Ω задають радіус взаємодії дефектів та атомний об'єм), $x_v \equiv \gamma c_v$, концентрацію міжвузлів адиабатично вилучено. Основні рівняння еволюції досліджуваної системи мають вигляд:

$$\begin{aligned}
 \gamma^{-1} \partial_t x_v &= \frac{P}{1 + x_v - x_v^0} - [\tilde{D} + c(1 - \tilde{D})] \frac{x_v - x_v^0}{x_v} - \\
 & - \nabla \cdot \left\{ (1 - \tilde{D})c(1 - c) \left[-\epsilon \nabla c + \frac{\nabla c}{c(1 - c)} - \beta \nabla^3 c \right] - \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\tilde{D} + c(1 - \tilde{D})}{x_v} \nabla x_v + \theta x_v \nabla (x_v + \ell^2 \nabla^2 x_v) \right\}, \quad (4) \\
 \partial_t c &= \nabla \cdot \left\{ (1 - c(1 - \tilde{D})) c(1 - c) \times \right. \\
 & \quad \left. \times \left[-\epsilon \nabla c + \frac{\nabla c}{c(1 - c)} - \beta \nabla^3 c \right] - \frac{(1 - \tilde{D})c(1 - c)}{x_v} \nabla x_v \right\}.
 \end{aligned}$$

Дослідження проводилось при $r_0 \simeq b/2$, де b – модуль вектора Бюргерса, $r_0 \sim 10^{-9}\text{м}$, $\Omega \sim 10^{-29}\text{м}^3$, $L_D \simeq 10^{-7}\text{м}$, $\ell \sim 10^{-2}$, $\gamma \sim 10^7$.

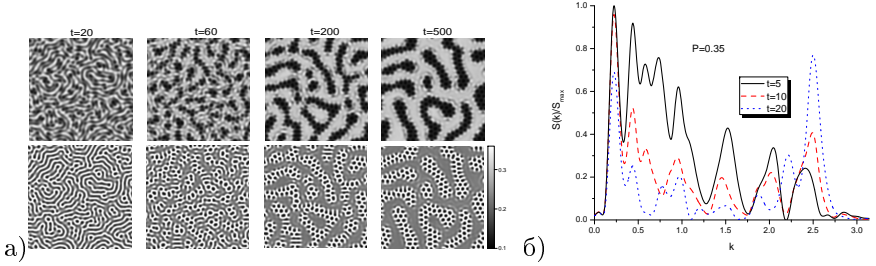


Рис. 6. Еволюція полів концентрації: c –верхня панель та x_v –нижня панель (а) при $\tilde{D} = 0.1$ та $P = 0.5$ та динаміка структурного фактора на початкових стадіях (б)

З аналізу на стійкість систем з різним співвідношенням між D_A^* та D_B^* установлено, що в системах із меншою різницею у коефіцієнтах самодифузії кількість нерівноважних вакансій стає меншою, оскільки, згідно з ефектом Кіркендала, потік вакансій до фази з більшим коефіцієнтом дифузії буде зменшуватися при вирівнюванні коефіцієнтів самодифузії. З'ясовано, що за певних швидкостей набору дози та температури в системі відбуваються процеси відбору структур. Установлено, що на малих швидкостях дефектоутворення ($P \ll 1$) відбувається звичайний процес фазового розшарування, де внаслідок ефекту Кіркендала, вакансії переважно мігрують в область фази з більшим коефіцієнтом дифузії ($D_B^* \gg D_A^*$). Із подальшим збільшенням швидкості дефектоутворення в системі виникають лише довгохвильові структури, нерівноважні вакансії істотно стримують процес розпаду внаслідок зворотного ефекту Кіркендала. Подальше підвищення P приводить до структуроутворення, яке супроводжується процесами відбору структур.

Картина структуроутворення з проходженням процесів відбору при моделюванні на квадратній ґратниці 256×256 зображена на рис. 6а. Тут при підвищеній швидкості P відбувається формування вакансійних структур і відповідний перерозподіл атомів розчину. Із плином часу при пересиченні нерівноважними вакансіями на великому часі формуються вакансійні кластери у фазі з меншим коефіцієнтом самодифузії атомів (у “твердій” фазі) та на границях поділу. Така картина пояснюється тим, що інтенсивність релаксації нерівноважних вакансій є більшою у фазі з більшим коефіцієнтом самодифузії атомів (“м’яка” фаза). Вакансії у “твердій” фазі є менш рухливими, що приводить до їх самоорганізації у кластери внаслідок пересичення та взаємодії у цій фазі, тоді як у “м’якій” фазі накопичені нерівноважні вакансії анігілюють та виходять на стоки

із більшою інтенсивністю. Осциляторна динаміка структурного фактору, що характеризує процеси відбору, зображена на рис. 6б. Упродовж подальшої еволюції супутні до основного піки, які відповідають розмірам структур, що відбираються, будуть зникати і лишиться один пік, характерний для найбільш нестійкої моди.

Окремо розвинено модель фазового розшарування з дислокаціями невідповідності в бінарних системах, підданих опроміненню у стохастичних умовах. Тут густина вільної енергії Брегга-Вільямса розвивається в ряд в околі критичної концентрації розчину $\bar{c} = 1/2$ і динаміка системи описується полем $c \equiv (c_B - \bar{c})$. Вільна енергія розчину задається функціоналом $\mathcal{F}_{tot} = \mathcal{F}_0 + \mathcal{F}_e + \mathcal{F}_d + \mathcal{F}_\psi$, де $\mathcal{F}_0 = \int dV (-Ac^2/2 + Bc^4/4 + \beta_0^2(\nabla c)^2/2)$ визначено з параметрами розвинення A , B ; β_0 — параметр взаємодії; $\mathcal{F}_e = (\nu^2 E/2) \int dV c^2$ задає енергією, що виникає внаслідок невідповідності ґратниці двох фаз; E — модуль Юнга; ν — параметр, пов'язаний зі зміною параметра ґратниці (закон Вегарда) $a = a_0(1 + \nu c)$; $\mathcal{F}_d = \int dV [C|b|^2/2 + (\nabla^2 \varpi)^2/2E]$ — енергія взаємодії дислокація-дислокація; C пов'язується з енергією дислокаційного ядра; функція Ейрі ϖ задовольняє рівняння $\nabla^4 \varpi = E(\nabla_x b_x - \nabla_y b_y)$, де b_x та b_y компоненти неперервного поля густини вектора Бюргерса $\mathbf{b} = \{b_x, b_y\}$; зв'язок композиційного поля c з полем напруження має вигляд $\mathcal{F}_c = \nu \int dV c \nabla^2 \varpi$.

Приймається, що атомове переміщення індукуюється балістичними стрибками вибитих атомів і описується атермічною дифузією з коефіцієнтом D_b^0 та потоком $\mathbf{J}_b = -D_b^0 \nabla c$, $D_b^0 \rightarrow D_b + \zeta(\mathbf{r}, t)$. Локальні флуктуації температури та числа точкових дефектів описуються стохастичною компонентою балістичного потоку $\zeta(\mathbf{r}, t)$ із властивостями: $\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \rangle = 0$, $\langle \zeta(\mathbf{r}, t) \zeta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2\sigma^2 D_b^0 C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t')$, де σ^2 інтенсивність зовнішнього шуму; $C(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (\sqrt{2\pi r_c})^{-2} \exp(-(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2/2r_c^2)$; r_c — радіус кореляцій. Тоді повний дифузійний потік є таким: $\mathbf{J} = -M(c) \nabla \delta F[c]/\delta c + \mathbf{J}_b$, де $M(c)$ — рухливість.

Дислокаційна динаміка описується зміною величини $\phi \equiv \nabla^4 \varpi$. У припущенні про концентраційно-залежну рухливість атомів $M = M_0 \tilde{M}(\psi)$, де M_0 стала, використовуються знерозмірені величини: $c' = \sqrt{B/A} c$, $\varpi' = \sqrt{B/\beta_0^2} \varpi$, $\alpha = \sqrt{E/A} \nu$, $\mathbf{r}' = \sqrt{A/\beta_0} \mathbf{r}$, $t' = (M_0 A^2/\beta) t$, $D_b' = D_b/M_0 A$, $\mathbf{b}' = \sqrt{EB\beta_0/A^3} \mathbf{b}$, $M_{c,g}' = M_{c,g} \beta_0 E/M_0 A^2$, $M_c = M_g$ — рухливості переповзання та ковзання, $e = AC/E\beta_0$, $m \equiv M_{c,g} \beta_0 E/M_0 A^2$. Припускається $\tilde{M}(c') = 1 - c'^2$. Опускаючи штрихи, маємо основну си-

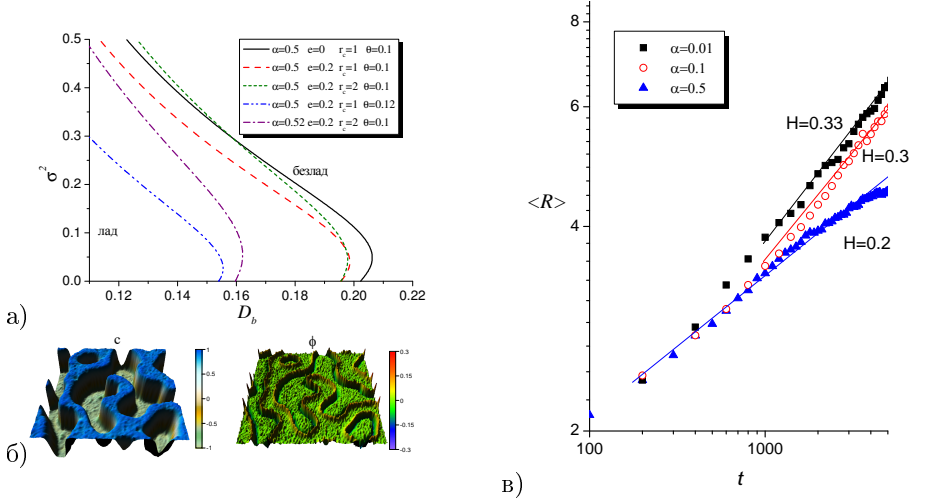


Рис. 7. (а) Фазова діаграма середнього поля. (б) Типові розподіли полів c і ϕ при розшаруванні. (в) Динаміка середнього розміру доменів нової фази

стему рівнянь:

$$\begin{aligned} \partial_t c &= \nabla \cdot \tilde{M}(c) [\partial_{cc}^2 \Omega(c) \nabla c - \nabla^3 c] + \alpha \phi + \nabla \cdot \zeta(\mathbf{r}, t) \nabla c + \nabla \cdot \sqrt{\tilde{M}(c)} \xi(\mathbf{r}, t); \\ \partial_t \phi &= -m(\phi + \alpha \nabla^2 c - e \nabla^2 \phi), \end{aligned} \quad (5)$$

де $\partial_{cc}^2 \Omega = \partial_{cc}^2 f + D_b/M(c)$, $f(c) = -(1 - \alpha^2)c^2/2 + c^4/4$. Останній доданок у рівнянні для c є внутрішнім білим шумом інтенсивності θ , що пропорційна температурі теплової бані.

У випадку $m \gg 1$ (рухомі дислокації миттєво підстроюються до еволюції композиційного поля) проведено аналіз стійкості, з якого встановлено, що регулярна компонента балістичного потоку збільшує ефективну температуру системи, тоді як кореляційні ефекти зовнішнього шуму зменшують її значення. У цей самий час балістична дифузія здатна зменшувати ширину міжфазної границі. При слабкій взаємодії дислокацій і поля композиції ($\alpha \ll 1$) дислокаційний механізм приводить до зменшення критичного хвильового числа, що обмежує нестійкі моди. Натомість зростання величини α приводить до довгохвильових модуляцій композиційного поля. Проведено опис особливостей випадіння фаз у рамках теорії середнього поля, коли просторова взаємодія описується ефективним

середнім полем Вейса $\eta = \langle c \rangle$ у припущенні $\Delta c \rightarrow (c - \eta)$, де середнє поле визначається стандартною умовою самоузгодження $\eta = \int c P_s(c, \eta) dc$, визначеною через стаціонарний розподіл $P_s(c, \eta)$, що отримується із розв'язання відповідного стаціонарного рівняння Фоккера-Планка. Було знайдено фазову діаграму (див. рис. 7а), що ілюструє можливість реверсивного проходження фазового розшарування при зростанні інтенсивності флуктуацій балістичного потоку. Цей ефект пов'язаний із кореляційними властивостями зовнішнього шуму. Дислокаційний механізм уповільнює проходження упорядкування в системі. У випадку $m \sim 1$ було проведено аналіз стійкості і числове моделювання, з якого встановлено, що дислокаційні ядра сегрегуються на межах поділу фаз, що видно з рис. 7б. При малих інтенсивностях σ^2 зовнішній шум підтримує формування упорядкованого стану за рахунок просторових кореляцій. При високих інтенсивностях шуму відбувається стохастизація всього процесу. Досліджено динаміку росту розмірів доменів нових фаз і показано, що при зростанні ефективності дислокаційного механізму сегрегації динамічний показник зменшується від значення $1/3$, що відповідає сценарію Ліфшиця-Сльозова-Вагнера, до значення $1/6$ (див. рис. 7в). Таким чином, хоча сегрегація відбувається переважно за дислокаційним механізмом, процес росту фаз уповільнюється.

ВИСНОВКИ

1. Проведено узагальнення динамічного підходу еволюції точкових дефектів та їх стоків із урахуванням процесів генерування дефектів полями деформації та взаємодією дефектів за наявності флуктуацій швидкості радіаційних пошкоджень. Установлено, що виникнення локальних деформаційних нестійкостей в обмеженому інтервалі температур та швидкості генерації дефектів приводить до формування бістабільних станів та утворення вакансійних комплексів у вигляді кластерів нанометрових розмірів.

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

3. При дослідженні динаміки пороутворення виявлено, що флуктуації швидкості набору дози збільшують критичний радіус пори внаслідок ефективного зростання температури системи дефектів. У випадку домінуючого внеску дислокацій розмір пори еволюціонує відповідно до динаміки Ліфшиця-Аллена-Кана з показником росту $1/2$; у випадку, коли

пори є основними стоками, ріст розміру пори описується за сценарієм Ліфшиця-Сльозова-Вагнера з динамічним показником $1/3$.

4. Установлено, що внаслідок взаємозв'язку між локальними змінами концентрації точкових дефектів та температурою у приповерхневих шарах опромінованих іонами металевих тонких плівок проходять процеси відбору структур з утворенням вакансійних кластерів. Флуктуації швидкості радіаційних пошкоджень приводять до зменшення критичних значень швидкості генерування дефектів та температури мішені, за яких можливе проходження відбору структур.

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

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

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Харченко Д.О. Моделирование просторовой организации точковых дефектов в опроминиваемых системах / Д.О.Харченко, В.О.Харченко, **А.І.Баштова** // Укр.фіз.журн. – 2013.– Т.58.– В.10.– С.994-1009.
2. Kharchenko Vasyl O. Modeling self-organization of nano-size vacancy clusters in stochastic systems subjected to irradiation / Vasyl O.Kharchenko, Dmitrii O.Kharchenko, **Anna I.Bashtova** // Radiation Effects & Defects in Solids.– 2014.– V.169.– N 5.– P.418-436.
3. Kharchenko D.O. A study of phase separation processes in presence of dislocations in binary systems subjected to irradiation / D.O.Kharchenko, O.M.Schokotova, **A.I.Bashtova**, I.O.Lysenko // Cond.Mat.Phys.– 2015.– V.18.– P.23003.

4. Kharchenko D.O. A study of void size growth in nonequilibrium stochastic systems of point defects / D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko, **A.I.Bashtova** // Eur.Phys.J.B.–2016.– V.89.– P.123.
5. Харченко Д.О.Самоорганізація вакансійного ансамблю при спін-одальному розпаді бінарних систем, підданих сталій дії радіаційного опромінення / Д.О.Харченко, В.О.Харченко, **А.І.Баштова** // Укр.фіз.журн.– 2016.– Т.61.– В.3.– С.276-288.
6. Kharchenko Dmitrii O. Patterning and pattern selection in a surface layer: Feedback between point defects population and surface layer temperature variations / Dmitrii O. Kharchenko, Vasyl O. Kharchenko, **Anna I. Bashtova**, Irina O. Lysenko // Physica A.– 2016.– V.463.– P.152-162.
7. Харченко В.О. Мультимасштабне моделювання самоорганізації нерівноважних точкових дефектів в опромінюваному α -цирконії / В.О. Харченко, І.О. Лисенко, О.М. Щокотова, **А.І. Баштова**, Д.О. Харченко та інші // Успехи физ. мет. – 2017.– Т.4.– С.294-400.
8. **Баштова А.І.** Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінованих системах / А.І.Баштова // Наукові доповіді призерів II туру Всеукраїнського конкурсу студентських наукових робіт з фізики.– Суми, 2013.– С.4.
9. **Баштова А.** Просторова організація дефектів вакансійного типу при сталій дії опромінення / А.Баштова, Д.Харченко, В.Харченко // Збірник тез Міжнародної конференції студентів та молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “ЕВРИКА-2014”, (Львів, 15-17 травня 2013 р.).– Львів, 2013.– С.Е1.
10. **Баштова А.І.** Фазове розшарування з дислокаційним механізмом в бінарних системах, підданих опроміненню / А.І.Баштова, Д.О.Харченко, В.О.Харченко // Збірник тез школи-семінару “Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах”,(Суми,21-22 жовтня 2014 р.).– Суми, 2014.– С.26.
11. **Баштова А.І.** Моделювання самоорганізації нанорозмірних вакансійних кластерів в стохастичних системах, підданих опроміненню /А.І.Баштової, Д.О.Харченка, В.О.Харченка // Збірник тез 14-ї Всеукраїнської школи-семінара та Конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 4-6 червня 2014 р.).– Львів, 2014.– С.Д15.

12. **Bashtova A.I.** A study external noise-induced effects in processes of voids growth / A.I.Bashtova, Kharchenko D.O., Kharchenko V.O. // Abstract book of International research and practice conference: “Nanotechnology and nanomaterials” (NANO - 2016), (Lviv, 24-17 August 2016).– Lviv, 2016.– P.303.
13. Kharchenko D.O. Pattern selection in a surface layer of irradiated foils: effect of the surface layer temperature variations / D.O.Kharchenko, V.O.Kharchenko, **A.I.Bashtova**, I.O.Lysenko // Abstract book of International research and practice conference: “Nanotechnology and nanomaterials”(NANO - 2016), (Lviv, 24-17 August 2016).– Lviv, 2016.– P.326.
14. **Баштова А.І.** Роль нерівноважних дефектів у процесі поділу фаз в опроміюваних системах / А.І.Баштової, Д.О.Харченка, В.О.Харченка // Збірник тез 17-ї Всеукраїнської школи-семінара та Конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 8-9 червня 2017 р.).– Львів,2017.– С.Д4.

АНОТАЦІЯ

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

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

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

Установлено умови проходження процесів структуроутворення точкових дефектів унаслідок дії опромінення і виникнення деформаційних нестійкостей при врахуванні стохастичної генерації дефектів. Виявлено динамічні режими росту кластерів вакансійного типу та дислокаційних петель в чистих металах на прикладі нікелю. У рамках розвинених підходів показано, що характерний розмір вакансійних кластерів складає величину декількох нанометрів залежно від швидкості пошкоджень та температури опромінення. Виявлено умови та особливості проходження процесів відбору структур при опроміненні тонких металевих плівок. Установлено, що стохастичний процес генерації дефектів не приводить

до порушення автомодельного режиму росту пор, збільшуючи лише розмір пор. Виявлено, що при зростанні інтенсивності дислокацій відбувається кросовер динамічних режимів росту розмірів пор зі зменшенням динамічного показника від $1/2$ до $1/3$. Розглянуто процеси перерозподілу нерівноважних вакансій при спінодальному розпаді опромінюваного бінарного твердого розчину. Виявлено, що зі збільшенням швидкості дефектоутворення процеси спінодального розпаду замінюються процесами формування просторових вакансійних структур. Установлено, що формування кластерів вакансій супроводжується відбором структур. Досліджено процеси фазового розшарування за дислокаційним механізмом в опромінюваних бінарних системах з балістичним потоком атомового переміщення. Показано, що дислокаційний механізм уповільнює процес упорядкування. Установлено, що просторові кореляції шуму балістичного потоку стимулюють сегрегацію ядер дислокацій в околі міжфазних границь.

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

АННОТАЦІЯ

Баштовая А.И. Моделирование пространственной организации точечных дефектов в облучаемых системах. — Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Институт прикладной физики НАН Украины, г.Сумы, 2018.

Диссертация посвящена развитию теоретических положений по изучению процессов структурообразования ансамбля точечных дефектов в кристаллических системах, испытывающих постоянное действие облучения, анализу процессов формирования скоплений дефектов и пор и влияния точечных и линейных дефектов на процессы перераспределения композиционного состава облучаемых бинарных сплавов.

Установлены условия прохождения процессов структурообразования точечных дефектов в результате действия облучения и возникновения деформационных неустойчивостей при учете стохастической генерации дефектов. Виявлено динамічні режими росту кластерів вакансійного типу і дислокаційних петель в чистих металах на прикладі нікелю. В рамках розвинутих підходів показано, що характерний розмір вакансійних кластерів становить величину декількох нанометрів в залежності від швидкості пошкоджень і температури облучення. Виявлені умови і особливості проходження процесів відбору структур при облученні тонких металічних плінок. Установлено, що стохастичний процес генерации дефектов не приводит к нарушению автомодель-

ного режима роста пор, увеличивая только размер пор. Обнаружено, что при росте интенсивности дислокаций происходит кроссовер динамических режимов роста размеров пор с уменьшением динамического показателя от $1/2$ до $1/3$. Рассмотрены процессы перераспределения неравновесных вакансий при спинодальном распаде облучаемого бинарного твердого раствора. Выявлено, что с увеличением скорости дефектообразования процессы спинодального распада заменяются процессами формирования пространственных вакансионных структур. Установлено, что формирование кластеров вакансий сопровождается отбором структур. Исследованы процессы фазового распада по дислокационному механизму в облучаемых бинарных системах с баллистическим потоком атомного перемешивания. Показано, что дислокационный механизм замедляет процесс упорядочения. Установлено, что пространственные корреляции шума баллистического потока стимулируют сегрегацию ядер дислокаций в окрестности межфазных границ.

Ключевые слова: точечные дефекты, дислокации, поры, облучение. структурообразование, фазовое расслоение, моделирование.

SUMMARY

Bashtova A.I. Modeling spatial organization of point defects in irradiated systems. — Manuscript.

The thesis for a candidate degree in physics and mathematics, speciality 01.04.02 – Theoretical Physics. – Institute of applied physics of NAS of Ukraine, Sumy, 2018.

The dissertation is devoted to the development of theoretical approaches concerning the study of the structure formation processes of the point defects ensemble in crystalline systems under sustained irradiation, the analysis of the formation processes of defects and voids and the influence of point and line defects on the processes of rearrangement of the composition of irradiated binary alloys.

The conditions for the passage of the processes of the formation of point defects as a result of the action of irradiation and the appearance of deformation instabilities are established when stochastic defect generation is taken into account. Dynamic regimes of growth of vacancy-type clusters and dislocation loops in pure metals are revealed on the example of nickel. In the framework of developed approaches, it is shown that the characteristic size of the vacancy clusters is several nanometers, depending on the rate of damage and the temperature of irradiation. The conditions and properties of the passage of the selection processes of structures upon irradiation of thin metallic films are revealed. It is established that the stochastic process of defect generation does not lead to a disruption of the self-similar void growth

regime, increasing only the void size. It is found that when the intensity of dislocations increases, a crossover of dynamic regimes of void size growth takes place with a decrease in the dynamic index from $1/2$ to $1/3$. The processes of nonequilibrium vacancies rearrangement during spinodal decomposition of the irradiated binary solid solution are studied in details. It was revealed that with increasing the rates of defect formation processes of spinodal decomposition are replaced by processes formation of spatial vacancy structures. It was established that the formation clusters of vacancies is accompanied by the selection of structures. The processes of phase decomposition by a dislocation-sustained mechanism in irradiated binary systems with ballistic the flow of mixing atoms are studied. It is shown that the dislocation mechanism slows down the process ordering. It is established that the spatial correlations of the ballistic flow noise stimulate segregation of dislocation nuclei in the vicinity of interphase boundaries.

Keywords: point defects, dislocations, voids, irradiation, structure formation, phase decomposition, modeling.