СТОХАСТИЧЕСКИЙ АСПЕКТ ОБРАЗОВАНИЯ ДИССИПАТИВНЫХ СТРУКТУР РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ

П.А.Селищев

Киевский университет имени Тараса Шевченко, физический факультет,

пр.Глушкова, 6, Киев-022, 02022, Украина

Теоретически исследуется влияние флуктуаций скорости генерации дефектов и неоднородности облучаемого кристалла на образование пространственно-периодической диссипативной структуры плотности дефектов. Учтены взаимодействие. дефектов и корреляция скорости их создания с неоднородностью кристалла. Установлены условия, при которых однородное и стационарное случайное распределение точечных дефектов становится неустойчивым по отношению к возникновению стохастического поля с пространственно периодическим изменением его моментов. Определена вероятность развития неустойчивости.

Введение

Как известно, при облучении кристалла потоком частиц высокой энергии в нем могут развиваться диссипативные структуры (ДС) радиационных дефектов [1,2].

ДС возникают в открытых, существенно неравновесных системах с нелинейными внутренними связями [3]. Важнейшим фактором нелинейной эволюции открытых неравновесных систем, приводящим к развитию ДС, являются флуктуации внешних и внутренних параметров.

Во-первых, это связано с распадом неустойчивых состояний и структур, которые сменяются новыми, устойчивыми. Во-вторых, флуктуации внешних параметров не ведут себя как обратные степени характерного размера системы и при определенных условиях перестают быть пренебрежимо малыми. В-третьих, для состояний системы, значительно отличающихся от равновесного, как правило, существует набор возможных путей эволюции. Влияние стохастичности становится решающим при достижении параметрами критических значений: в моменты выбора конкретного пути эволюции, выбора между различными ДС. И, наконец, результат воздействия флуктуаций внешних параметров зависит от состояния системы [4]. Вследствие этого, флуктуации могут не только изменять свойства локальной устойчивости ДС, но и индуцировать их новые виды, приводить к структурированию нелинейных систем, не имеющему детерминированного аналога.

Стохастичность развития структуры радиационных дефектов связана с самой природой явления. Благодаря флуктуациям плотности потока бомбардирующих частиц, их статистическому распределению по энергиям, вероятностному (квантово-механическому) характеру взаимодействия облучения с атомами вещества и тепловым колебаниям атомов кристалла, создание первичных радиационных дефектов происходит случайным образом.

С другой стороны, она вызвана хаотическим расположением различных несовершенств облучаемого кристалла. Поскольку энергии (а следовательно, и вероятности) образования дефектов внутри совершенного кристалла и в области различных нарушений кристаллической решетки (дислокации, выделения, границы зерен и т.п.) - различны [5], существует корреляционная связь между образованием радиационных дефектов и неоднородностью облучаемого образца. Эта корреляция может влиять как на статистические характеристики стационарного однородного распределения дефектов [6], так и на критерий развития его неустойчивости.

Развитие неустойчивости, изучаемой в

данной работе, связано с тем, что для определенных направлений в матрице дефекты могут притягиваться. Если энергия теплового движения дефектов значительно превышает энергию их силового взаимодействия, то декремент затухания любого малого возмущения будет отрицателен, и однородное распределение дефектов будет устойчивым. При повышении плотности дефектов взаимодействие между ними начнет доминировать над влиянием диффузии. Декремент затухания для некоторой моды (с $k = k_c$) малого возмущения плотности дефектов становится положительным. Развивается неустойчивость по отношению к установлению пространственно-периодической ДС плотности дефектов с периодом равным $2\pi / k_c$.

В настоящей работе исследуется вероятностная природа образования ДС плотности радиационных дефектов, которая обусловлена флуктуациями их генерации и случайной неоднородностью облучаемого кристалла. Изучено влияние корреляционной связи между этими флуктуациями.

Флуктуации условий облучения как многомерное случайное поле

Рассмотрим кристаллический образец, в котором под действием внешнего облучения случайным образом создаются вакансии и междоузельные атомы. Они подвижны, могут рекомбинировать, поглощаться случайно распределенными неподвижными стоками и взаимодействовать между собой, например, через упругие поля деформации. Стоками являются протяженные дефекты - различные несовершенства облучаемого кристалла.

Стохастический характер скорости создания смещений, K(r,t), и распределения плотности стоков, ρ(r), будем рассматривать как случайное поле трех пространственных и одной временной независимых переменных. В различных единичных опытах получаются различные реализации этого поля. Набор реализаций случайного поля характеризует его свойства только с той или иной степенью приближения. Для описания случайного поля в конкретной точке пространства и в конкретный момент времени достаточно задать одномерный закон распределения вероятности случайной величины: значения поля в этой точке. Этим законом полностью определяются средние значения, $K=\langle K(r,t)\rangle$, $\rho=\langle\rho(r)\rangle$, и дисперсии для скорости создания смещений и плотности стоков. Они уже являются детерминистическими функциями, первая - координат и времени, а вторая - только координат. Однако распределение первого порядка не отражает взаимную зависимость ординат случайного поля. Более детальной характеристикой является двухмерный закон распределения вероятности случайного поля для двух значений аргумента. Он позволяет решать задачу в рамках корреляционного приближения: находить необходимые корреляционные функции. Этот процесс можно продолжать и далее, вводя законы распределения более высокой размерности.

Многомерные распределения плотности вероятности имеют вид:

$$p(K_1 / r_1, t_1; K_2 / r_2, t_2; ...; K_n / r_n, t_n; \rho_1 / r'_1; \rho_2 / r'_2; ...; \rho_m / r'_m), \qquad (1)$$

где $pdK_1dK_2...dK_n...d\rho_1 d\rho_2....d\rho_m$ определяет вероятность того, что в точках пространства $r_1, r_2,...r_n$. и в моменты времени $t_1, t_2,...,t_n$ скорости образования дефектов, K, лежат, соответственно, в интервалах $K_1<K<K_1+dK_1$, $K_2<K<K_2+dK_2$,..., $K_n<K<K_n+dK_n$, а плотность протяженных дефектов облучаемого металла, ρ, в точках $r'_1, r'_2,...r'_m$.- соответственно, в интервалах $\rho_1<\rho<\rho_1+d\rho_1$, $\rho_2<\rho<\rho_2+d\rho_2$,...$\rho_m<\rho<\rho_m+d\rho_m$. Распределения плотности вероятности меньшего порядка получаются из (1) интегрированием по “лишним” переменным. Совокупность многомерных распределений позволяет определить моменты более высокого порядка. Случайное поле скорости создания точечных дефектов и плотности стоков будем полагать стационарным, однородным и изотропным. Стационарность и однородность означают, что все многомерные законы распределения зависят только от взаимного расположения временных и пространственных аргументов, но не от самих значений этих величин. Следовательно, одномерный закон распределения и, соответственно, средние значения и дисперсии не зависят от времени и координат, а двухмерный закон и корреляционные функции зависят от разности, соответственно, временных и пространственных аргументов: $r_1 - r_2$ и $t_1 - t_2$. Изотропность означает отсутствие выделенного направления.

Вероятность образования ДС плотности дефектов

Плотность радиационных точечных дефектов - вакансий и междоузельных атомов - также будет случайным полем, статистические характеристики которого подлежат определению. Поскольку, благодаря малой концентрации междоузельных атомов, их взаимодействие между собой и с вакансиями значительно более слабое, чем между вакансиями, то, пренебрегая этим взаимодействием, а также рекомбинацией дефектов, будем рассматривать междоузельные атомы и вакансии независимо.

Отдельная реализация эволюции плотности дефектов каждого типа описывается следующим стохастическим уравнением (для определенности, в дальнейшем будем говорить о вакансиях)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = K(r,t) - \beta(r)n + div\{D(\nabla n - nF/T)\} \qquad (2)$$

Здесь

$$F(r) = -\int \nabla_r V(r,r')n(r')dr' \qquad (3)$$

сила взаимодействия вакансий в точке r со всеми остальными вакансиями, $V(r,r') = V(|r-r'|)$ - энергия взаимодействия. Взаимодействие дефектов образует положительную обратную связь, которая приводит к развитию неустойчивости однородного распределения по отношению к возникновению пространственно-периодического. $\beta(r) = \rho(r)D$. $D = D_0\exp(-E_m/T)$ - коэффициент диффузии, E_m - энергия миграции, T - температура в энергетических единицах. Не интересуясь эффектами на поверхности, воспользуемся циклическими граничными условиями.

В детерминистическом случае возникновение пространственно-периодической ДС дефектов происходит, если температура облучаемого образца удовлетворяет условию $T<T_{KP}$, где $T_{KP} = K_{KP}V^0\beta^{-1}\left(\sqrt{B\rho}+\sqrt{B\rho+1}\right)^{-2}$ [7].

При наличии флуктуаций, с приближением температуры облучаемого кристалла, T, к T_{KP} будет находиться все больше реализаций с периодическим распределением плотности дефектов на том или ином интервале длины. Поэтому необходимо говорить о вероятности образования ДС дефектов для данного значения температуры облучаемого кристалла, скорости создания смещений или любого другого параметра.

Для того, чтобы в случае конкретной реализации возникло периодическое распределение плотности дефектов, необходимо превышение критического значения в течение периода времени, сравнимого с характерным временем развития структуры. Длительность последнего определяется кинетическими процессами в области неустойчивости и величиной превышения критического значения.

Оценим вероятность образования ДС, когда флуктуации температуры облучаемого кристалла, $\tilde{T}$, которые вызваны как внутренними, так и внешними (облучение) причинами, однородны по образцу, и является нормальным случайным процессом. $T=\langle T\rangle+\tilde{T}$. Будем предполагать, что развитие структуры дефектов происходит гораздо быстрее изменения случайного процесса дефектообразования.

Обозначим вероятность того, что за бесконечно малый промежуток времени dt, непосредственно следующий за моментом времени t, температура облучаемого кристалла станет ниже критического значения, следующим образом

$$P(T(t)>T_{KP};T(t+dt)<T_{KP}) \tag{4}$$

Предполагая непрерывное изменение флуктуаций температуры облучаемого кристалла, имеем $T(t+dt)=T(t)+(dT/dt)dt$. Поэтому (4), вводя обозначение $V=dT/dt$, можно переписать следующим образом

$$P(T_{KP}-Vdt>T(t)>T_{KP})=\int\limits_0^{\infty}\int\limits_{T_{KP}-Vdt}^{T_{KP}}p(T,V/t)dTdV \tag{5}$$

Интервалы интегрирования охватывают все значения $T(t)$ и $V(t)$, удовлетворяющие неравенствам: $T_{KP}-V(t)dt>T(t)>T_{KP}$ при $V(t)<0$. $p(T,V/t)$ – двухмерный закон распределения ординат случайной функции и скорости ее изменения в один и тот же момент времени t. $p(T,V/t)dTdV$ определяет вероятность того, что в момент времени t температура облучаемого кристалла, T, и скорость ее изменения, V, лежат, соответственно, в интервалах $T<T<T+dT$ и $V<V<V+dV$. Так как пределы интегрирования внутреннего интеграла в (5) отличаются на бесконечно малую величину, он может быть вычислен сразу. Пользуясь теоремой о среднем , получаем

$$P(T_{KP}-Vdt<T(t)<T_{KP})=dt\int\limits_0^{\infty}p(T_{KP},V/t)VdV \tag{6}$$

Из (6) следует, что искомая вероятность достижения критического значения в течение бесконечно малого интервала времени dt пропорциональна величине этого интервала.

Так как в (6) входит закон распределения $p(T,V/t)$ (для стационарного процесса - $p(T,V)$), то для получения окончательных числовых результатов необходимо располагать этим законом распределения. Для нормального процесса, наиболее важного с точки зрения приложений, могут быть получены простые расчетные формулы.

В данном случае закон распределения ординат случайной функции однозначно выражается через математическое ожидание случайной функции $\langle T\rangle$ и ее дисперсию $\sigma_T^2=\langle\tilde{T}(t)\tilde{T}(t)\rangle$. Скорость изменения ординаты случайного процесса и ордината случайного процесса для того же момента времени являются несвязанными случайными величинами, а для нормального случайного процесса, следовательно, и независимыми величинами [8]. Поэтому двухмерная плотность распределения вероятностей $p(T,V)$ распадается на произведение нормальных плотностей распределения для T и V

$$p(T,V)=\frac{1}{\sigma_T\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\left(T-\langle T\rangle\right)^2/2\sigma_T^2\right)\frac{1}{\sigma_V\sqrt{2\pi}}\exp\left(-V^2/2\sigma_V^2\right) \tag{7}$$

где дисперсия скорости изменения ординаты случайной функции, σ_V^2, равна значению ее корреляционной функции в нуле и, согласно [8], равна второй производной по времени от корреляционной функции случайного процесса $\tilde{T}(t)$

$$\sigma_V^2 = -\frac{d^2}{d\tau^2}\left[\langle \tilde{T}(t)\tilde{T}(t+\tau)\rangle\right]_{\tau=0} \qquad (8)$$

а математическое ожидание $V(t)$, вследствие стационарности случайного процесса равно нулю.

Подставляя (7) в (6) и проводя интегрирование, для вероятности (в единицу времени) развития ДС плотности дефектов при средней температуре облучаемого образца равной $\langle T \rangle$ получаем

$$P = \frac{\sigma_V}{2\pi\sigma_T}\exp\left(-\left(T_{KP} - \langle T \rangle\right)^2 / 2\sigma_T^2\right) \qquad (9)$$

Следовательно, распределение вероятности развития неустойчивости стационарного однородного распределения дефектов - гауссово, его максимум достигается при средней температуре облучаемого образца равной T_{KP}, а полуширина определяется дисперсией внешних флуктуаций.

Критерий образования ДС плотности дефектов

Используя (1) и усредняя (2) по всевозможным реализациям случайного поля, получаем уравнение для изменения среднего значения плотности дефектов

$$\frac{\partial \bar{n}(r,t)}{\partial t} = K - \beta\bar{n}(r,t) - \langle \tilde{\beta}\tilde{n}(r,t)\rangle + D\Delta\bar{n}(r,t) + \frac{D}{T}\nabla\int \bar{n}(r,t)\bar{n}(r',t)\nabla_r V(r-r')dr' + \frac{D}{T}\nabla\int\langle \tilde{n}(r,t)\tilde{n}(r',t)\rangle\nabla_r V(r-r')dr' \qquad (10)$$

Вычитая (10) из (2) и пренебрегая флуктуациями произведения случайных функций, получаем уравнение для эволюции стохастической части плотности дефектов

$$\frac{\partial \tilde{n}(r,t)}{\partial t} = \tilde{K} - \beta\tilde{n}(r,t) + D\Delta\tilde{n}(r,t) + \frac{D}{T}\nabla\int \tilde{n}(r,t)\bar{n}(r',t)\nabla_r V(r-r')dr' + \frac{D}{T}\nabla\int \bar{n}(r,t)\tilde{n}(r',t)\nabla_r V(r-r')dr' + \langle \tilde{\beta}\tilde{n}(r,t)\rangle - \tilde{\beta}\bar{n}(r,t) + \frac{D}{T}\nabla\int\{\tilde{n}(r,t)\tilde{n}(r',t) - \langle\tilde{n}(r,t)\tilde{n}(r',t)\rangle\}\nabla_r V(r-r')dr' \qquad (11)$$

Здесь $\tilde{K} \equiv \tilde{K}(r,t) = K(r,t) - K$, $\tilde{\beta} = D\tilde{\rho}(r)$, $\beta = D\rho$, $\tilde{\rho}(r) = \rho(r) - \rho$.

Однородное стационарное случайное поле плотности вакансий, $n_0(r,t)$, является одним из решений стохастического эволюционного уравнения (2) [9]. Его среднее значение, n_o, не зависит от координат и времени. Также как в [9], для определения условий устойчивости однородного стационарного случайного поля плотности дефектов $n_0(r,t)$, рассмотрим эволюцию малого возмущения распределения вероятностей плотности вакансий, которому соответствует возмущение стационарного среднего значения, n_o, равное $\delta\bar{n}(r,t)$ и возмущение флуктуационной части стационарного поля, $\tilde{n}_o(r,t) = n_o(r,t) - n_o$, равное $\delta\tilde{n}(r,t)$. Но в отличии от [9] учтем корреляцию флуктуаций скорости создания смещений и плотности стоков.

$$\frac{\partial\delta\bar{n}(r,t)}{\partial t} = K - \beta\delta\bar{n}(r,t) - \langle\tilde{\beta}\delta\tilde{n}(r,t)\rangle + D\Delta_r\delta\bar{n}(r,t) + \frac{Dn_0}{T}\int\delta\bar{n}(r',t)\Delta_r V(r-r')dr' + \frac{D}{T}\nabla\int\{\langle\tilde{n}_0(r,t)\delta\tilde{n}(r',t)\rangle + \langle\delta\tilde{n}(r,t)\tilde{n}_0(r',t)\rangle\}\nabla_r V(r-r')dr' \qquad (12)$$

$$\frac{\partial\delta\tilde{n}(r,t)}{\partial t} = -\beta\delta\tilde{n}(r,t) + D\Delta_r\delta\tilde{n}(r,t) + \\ + \frac{Dn_0}{T}\Delta_r\int\delta\tilde{n}(r',t)V(r-r')dr' - \\ - \tilde{\beta}\delta\tilde{n}(r,t) + \frac{D}{T}\nabla_r\{\ \tilde{n}_0(r,t)\int\delta\tilde{n}(r',t)\nabla_r V(r-r')dr' + \\ + \delta\tilde{n}(r,t)\int\tilde{n}_0(r',t)\nabla_r V(r-r')dr'\ \} \tag{13}$$

Система (12) -(13) имеет переменные коэффициенты и не является замкнутой, поскольку содержит $\left\langle\tilde{\beta}\delta n(r,t)\right\rangle$ и $\left\langle\tilde{n}_0(r,t)\delta\tilde{n}(r',t)\right\rangle$. Но, так как в (13) переменные коэффициенты только при $\delta\tilde{n}(r,t)$, то, рассматривая соответствующие слагаемые как неоднородность уравнения (13), находим $\delta\tilde{n}(r,t)$. Теперь $\delta\tilde{n}(r,t)$ является функционалом $\delta\tilde{n}(r,t)$.

Подставляя $\delta\tilde{n}(r,t)$ в (12), проводя усреднение и полагая $\delta\tilde{n}(r,t)\sim\exp\left(\lambda_f t+ikr\right)$, для декремента затухания возмущения (k-ой моды), $\lambda_f(k)$, получаем характеристическое уравнение

$$\lambda_f = -\lambda(k) + D^2\rho^2\int dkS(k',k) \tag{14}$$

где

$$S(k',k) = \frac{G_{22}(k')(S_1-1)(S_2-1)}{\lambda_f+\lambda(k-k')} + \frac{G_{12}(k')(S_1+S_2-2S_1S_2)}{\lambda_f+\lambda(k-k')} + \\ +S_1S_2\lambda^2(k')\int_{-\infty}^{0}d\tau_1\int_{-\infty}^{0}d\tau_2\int_{-\infty}^{0}d\tau_3 G_{11}(k',\tau_1-\tau_2-\tau_3)\exp(\lambda(k')(\tau_1+\tau_3)+\lambda(k-k')\tau_2) \tag{15}$$

$$S_1 = \frac{\alpha D(k'-k)}{\lambda(k)}(kU(k)-k'U(k')) \tag{16}$$

$$S_2 = \frac{\alpha Dk}{\lambda(k)}(k'U(k')-(k'-k)U(k-k')) \tag{17}$$

$\lambda(k) = k^2D\left(1+\alpha U(k)\right)+\beta$ - декремент затухания k-ой моды малого возмущения стационарного однородного распределения дефектов в отсутствии внешнего шума.

$V(k) = \int_{-\infty}^{\infty}drV(r)\cdot e^{-ikr} = V^o\ U(k)$ - фурье-образ потенциала взаимодействия. $\alpha=n_oV^0/T$, $V^0=/V(k\to 0)/$.

С учетом однородности внешних флуктуаций, спектральные плотности по пространственным переменным (k-плотности), соответствующие корреляционным функциям $<h_1(r_1,t_1)h_1(r_2,t_2)>$, $<h_1(r_1,t_1)h_2(r_2)>$, $<h_2(r_1)h_2(r_2)>$, имеют аргументы: $G_{11}(k,t)$, $G_{12}(k)$, $G_{22}(k)$. Здесь $h_1(r,t)=\tilde{K}(r,t)/D\rho n_o$ и $h_2(r)=\tilde{\rho}(r)/\rho$ - нормированные компоненты случайного поля. Вследствие его стационарности, $G_{11}(k,t)$ зависит от разности времен $t=t_1-t_2$, а $<h_1(r_1,t_1)h_2(r_2)>$ и $G_{22}(k)$ от времени не зависят. Действительно,

$$\langle h_1(r_1,t_1)h_2(r_2)\rangle = \int p(h_1/r_1,t_1;h_2/r_2)h_1h_2dh_1dh_2 \tag{18}$$

Но в силу стационарности $\int p(h_1/r_1,t_1;h_2/r_2)h_1h_2dh_1dh_2 = \int p(h_1/r_1,0;h_2/r_2)h_1h_2dh_1dh_2$ и зависимость от времени пропадает.

Критерий развития неустойчивости имеет вид $\lambda_f = 0$. Декремент затухания λ_f является функцией k. В силу анизотропии кристалла взаимодействие дефектов зависит от направления. Поэтому неустойчивой станет прежде всего мода для определенного направления и определенной величины k_c. В дальнейшем будем полагать, что волновой вектор k направлен по k_c.

Поскольку взаимодействие дефектов происходит через упругое поле деформаций, $V(k)$ может быть представлен в виде [10]

$$V(k) = V^o(-1+Bk^2) \tag{19}$$

V^0 является функцией упругих модулей и изменения объема кристалла при введении в матрицу дефекта. B - порядка квадрата нескольких периодов кристаллической решетки.

Роль взаимной корреляции между флуктуациями плотности стоков и генерации дефектов

Взаимная корреляции между флуктуациями плотности стоков и генерации дефектов может привести как к увеличению критического значения, так и к его уменьшению, поскольку знакоопределенность второго слагаемого в (14) в общем случае установить не удается. Действительно, функции $G_{12}(k)$, $G_{22}(k)$ являются положительно определенными, а $G_{11}(k,t)$ - нет. Поэтому, все будет зависеть от конкретного вида внешнего случайного поля и свойств облучаемого образца. Если критическое значение, например, средней скорости создания смещений $K_c < K_{KP}$, где K_{KP} - критическое значение в отсутствии флуктуаций, то при его достижении ($K=K_c$) $\lambda(k)$ не убывает до нуля. Дисперсия плотности дефектов, обратно пропорциональная λ^2 [6], принимает максимальное значение в критической точке, но ее расходимости не наблюдается. Если $K_c > K_{KP}$, то флуктуации будут максимальны и "аномально" велики до достижения критической точки K_c.

Чтобы установить как влияет взаимная корреляция флуктуаций плотности стоков и генерации дефектов на порог развития неустойчивости, рассмотрим (14) для некоторых граничных случаев. При этом используем соотношения между величинами параметров задачи и особенности исследуемых функций.

Для физически допустимых значений параметров $Bk_c^2 << 1$ и $V(k_c) \approx V(0)$. Функция $\lambda^{-1}(k)$ максимальна в нуле и быстро спадает с ростом k (как k^{-4}), $S_1(k)$ и $S_2(k)$ ограничены. Таким образом, подынтегральная функция в (14) локализована вблизи нуля в интервале равном нескольким k_c.

Предположим, что спектральные плотности однородного случайного поля (1) слабо меняются в этом интервале: $G_{11}(k,t) \approx G_{11}(0,t)$, $G_{12}(k) \approx G_{12}(0) \equiv G_{12}$, $G_{22}(k) \approx G_{22}(0) \equiv G_{22}$. Считая внешние флуктуации малыми, положим $K_c = K_{KP} + \Delta K$, где ΔK малая добавка к $K_{KP} = \beta T\left(\sqrt{B\rho} + \sqrt{B\rho+1}\right)^2 / V^o$. Тогда $k_c = k_{kp}\left(1 + \Delta K / (K_{KP}\sqrt{\rho B})\right)$, где $k^2_{kp} = \left(B + \sqrt{B + 1/\rho}\right)^{-1}$ - квадрат волнового вектора неустойчивой моды в отсутствии флуктуаций.

Рассмотрим ситуацию, когда характерное время изменения интересующего исследователя процесса много больше времени развития каскада и среднего времени между двумя последовательными каскадами, которые происходят в одной "физической" точке. Тогда временные флуктуации скорости создания смещений обусловлены флуктуациями интенсивности потока налетающих частиц, и временную зависимость случайного поля (1) можно считать практически одинаковой во всех точках облучаемого образца.

В случае, когда временными флуктуациями потока налетающих частиц можно пренебречь, $G_{11}(0,t) = G_{11}$. Переходя в (14) от интегрирования к суммированию и удерживая члены одного порядка малости, находим

$$\Delta K / K_{KP} = -\sqrt[3]{\tfrac{1}{2}\rho^{3/4} B^{1/4}\left(G_{11} - 2G_{12} + G_{22}\right)} \tag{20}$$

ΔK отрицательно, т.к. $G_{11} - 2G_{12} + G_{22} \geq 0$.

Действительно, в силу стационарности

$G_{11}(0)G_{22}(0)=(2\pi)^{-6}\rho^{-2}\beta^{-2}n_o^{-2}\int\langle K(r)K(0)\rangle dr\int\langle\rho(r')\rho(0)\rangle dr'$. Используя неравенство Коши-Буняковского, и обозначая $d\theta = dK_1dK_2d\rho_1d\rho_2dr$, имеем

$$G_{11}(0)G_{22}(0)=(2\pi)^{-6}\rho^{-2}\beta^{-2}n_o^{-2}\int p(K_1/r;K_2/0;\rho_1/r';\rho_2/0)K_1K_2d\theta\int p(K_1/r';K_2/0;\rho_1/r;\rho_2/0)\rho_1\rho_2d\theta\geq$$

$$\geq(2\pi)^{-6}\rho^{-2}\beta^{-2}n_o^{-2}\left(\int\sqrt{p(K_1/r;K_2/0;\rho_1/r';\rho_2/0)p(K_1/r';K_2/0;\rho_1/r;\rho_2/0)K_1K_2\rho_1\rho_2}d\theta\right)^2=$$

$$=(2\pi)^{-6}\rho^{-2}\beta^{-2}n_o^{-2}\left(\int\sqrt{p(K_1/r;K_2/0;\rho_1/r';\rho_2/0)K_1\rho_1}\sqrt{p(K_1/r';K_2/0;\rho_1/r;\rho_2/0)K_2\rho_2}d\theta\right)^2=$$

(переобозначаем переменные интегрирования и используем условия стационарности и изотропности)

$$=(2\pi)^{-6}\rho^{-2}\beta^{-2}n_o^{-2}\left(\int\sqrt{p(K_1/r;K_2/0;\rho_1/r';\rho_2/0)K_1\rho_1}\sqrt{p(K_1/r;K_2/0;\rho_1/r';\rho_2/0)K_1\rho_1}d\theta\right)^2=$$

$$=(2\pi)^{-6}\rho^{-2}\beta^{-2}n_o^{-2}\left(\int\left(\int p(K_1/r;K_2/0;\rho_1/r';\rho_2/0)dK_2d\rho_2\right)K_1\rho_1dK_1d\rho_1dr\right)^2=G_{12}^2(0)$$

и окончательно $G_{11}+G_{22}\geq 2\sqrt{G_{11}G_{22}}\geq 2G_{12}$.

В данном случае влияние флуктуаций приводит к уменьшению периода возникающей неоднородности, $d=2\pi/k_c$.

Наоборот, если время корреляции, τ, внешних флуктуаций меньше всех характерных времен задачи, можно положить $G_{11}(0,t)=G_{11}\tau\delta(t)$ и для определения ΔK получаем уравнение

$$(\Delta K/K_{KP})-\tfrac{1}{4}\rho^{5/4}B^{-1/4}G_{11}\tau(\Delta K/K_{KP})^{-1}+\tfrac{1}{2}\rho^{3/4}B^{1/4}(G_{22}-2G_{21})(\Delta K/K_{KP})^{-2}=0. \quad (21)$$

Полученное уравнение имеет три корня. Если между скоростью генерации дефектов и неоднородностями облучаемого кристалла существует сильная корреляция, например, при подпороговом облучении, то $G_{22}-2G_{12}<0$ и отрицательные корни могут отсутствовать. Условия этого следующие

$$G_{12}\geq\frac{1}{2}(G_{22}+\frac{1}{2\bullet 3^{3/2}}\rho^{9/8}B^{-5/8}(G_{11}\tau)^{3/2}) \quad \text{и} \quad G_{12}{}^2<G_{22}G_{11}. \quad (22)$$

Тогда ΔK положительно. Разброс значений плотности дефектов (дисперсия) достигает "аномально" большой максимальной величины до начала перехода к их пространственно-периодическому случайному полю. Период изменения среднего значения случайного распределения вакансий увеличивается по сравнению с периодом детерминистической модели.

Если корреляции между флуктуациями плотности стоков и генерации дефектов слабая, или доминирует какой-либо один из двух источников внешних флуктуаций, то минимальный корень отрицателен. Остальные корни не имеют физического смысла, потому что они находятся в области неустойчивости, в которой данный анализ не применим. ΔK отрицательно, область неустойчивости расширяется, дисперсия монотонно растет вплоть до критических значений, сингулярность отсутствует, период стохастического распределения меньше периода детерминистического распределения.

В случае доминирования флуктуаций дефектообразования и слабой корреляции

$K(r,t)$ и $\rho(r)$, например, для высокоэнергетичных частиц облучения,

$$\Delta K/K_{KP} = -\tfrac{1}{2}\sqrt{\rho^{5/4}B^{-1/4}G_{11}\tau} \qquad (23)$$

Если влияние флуктуаций дефектообразования незначительно, то

$$\Delta K/K_{KP} = -\sqrt[3]{\tfrac{1}{2}\rho^{3/4}B^{1/4}(G_{22}-2G_{12})} \qquad (24)$$

Таким образом, в рамках настоящей модели взаимная корреляция между скоростью создания смещений и неоднородностью облучаемого металла может приводить к "аномальному" возрастанию дисперсии плотности радиационных дефектов, которое наступает до перехода к их пространственно-периодическому распределения. Порог образования и период неоднородной структуры при этом увеличиваются.

Сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными [11-13], проведенное для ряда материалов, является косвенным, поскольку на эксперименте наблюдаются следствия пространственно-периодического распределения точечных дефектов. Оно показывает следующее.

Теоретическое значение средней величины периода структуры плотности дефектов близко к экспериментально наблюдаемым величинам, составляющим сотни нанометров.

Условия, при которых наблюдается пространственно-периодическое распределение микроструктуры облучаемых кристаллов, выходят за теоретически установленные пределы. Такое несоответствие может быть объяснено использованием упрощенной модели. В ней, в частности, пренебрегалось комплексообразованием. Но связанные в комплексы дефекты менее подвижны. Их концентрация и, следовательно, создаваемые ими упругие напряжения значительно выше. Как показано в [1,2], это приводит к расширению области существования пространственно-неоднородного распределения дефектов.

1. Сугаков В.И., Селищев П.А. Возникновение периодических диссипативных структур дефектов в примесных кристаллах под облучением. // ФТТ. 1986. Т.28. С.2921-2926.
2. Selishchev P.A., Sugakov V.I. Self-organization phenomena in impure irradiated crystals. // Radiation Effects and Defects in Solids. 1995. V.133. P.237-245.
3. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах. М.,"Мир", 1980, 406 с.
4. Хорстемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. М.,"Мир", 1987, 398 с.
5. Ганн В.В., Марченко И.Г. Математическое моделирование дефектов в кристалле, содержащем дислокацию. // ВАНТ.Сер. Физ. радиац. повреждений и радиац. материаловед. 1983. №1(24). С.17-19.
6. Селищев П.А. Вероятностные характеристики распределения радиационных дефектов при их стохастической генерации в случайно-неоднородных средах. // ФММ. 1999. Т.87.№2. С.10-15.
7. Сугаков В.И. О сверхрешетках плотности дефектов в облучаемых кристаллах.-Киев. 1984. 30с.(Препр./ АН УССР.ИТФ;ИТФ-84-70р).
8. Пугачев В.С., Синицын И.Н. Стохастические дифференциальные системы. М.: Наука, 1985. 560 с.
9. Селищев П.А. Влияние внешних флуктуаций на образование структуры плотности радиационных дефектов. // Металлофизика и новейшие технологии. 1999. Т.21. №9. С. 11-15.
10. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1983. 407 с.
11. Garner F.A., Brager H.R., Hamilton M.L. et. al. New developments in irradiation-induced microstructural evolution of austenitic alloys and their consequences on mechanical properties. // Radiat.Eff. 1986. V.101. P. 37-53.
12. Miller M.K., Stoller R.E., Russel K.F. Effect of neutron-irradiation on the

spinodal decomposition of Fe-32%Cr model alloy. // J. Nucl. Mater. 1996. V.230. P.219-225.
13. Колковский И.И., Лукьяница В.В. Особенности накопления радиационных дефектов вакансионного и междоузельного типов в бездислокационном кремнии с различным содержанием кислорода. // ФТП. 1997. Т.31, №4. С.405-409.

STOCHASTIC ASPECT OF DISSIPATIVE STRUCTURE FORMATION IN CRYSTAL UNDER IRRADIATION

P.A. Selishchev

Kiev T.Shevchenko University, Physics department,

Prospekt Glushkova 6, Kiev-022, 02022, Ukraine

A theoretical approach for influence of fluctuations of defect production rate and nonhomogeneity of irradiated crystal on formation of defect density structure is developed. We took into account elastic interaction of defects and correlation between defect production rate and crystal nonhomogeneity. We determined conditions when stationary homogenous stochastic field of defect density becomes unstable due to interaction of defect density fluctuations and stochastic field with spatial periodical mean value is formed. It is obtained probability of instability development .

СТОХАСТИЧНИЙ АСПЕКТ ВИНИКНЕННЯ ДІСІПАТИВНИХ СТРУКТУР РАДІАЦІЙНИХ ДЕФЕКТІВ

П.О. Селищев

Київський університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет,

пр. Глушкова, 6, Київ 22, 02022, Україна

Теоретично досліджується вплив коррельованих флюктуації швидкості створення дефектів і недосконалостей кристалічної гратки на утворення періодичних дісіпативніх структур густини дефектів, між якимі існує силова взаимодія. Отримані умови, при яких однорідне стаціонарне випадкове поле втрачає стійкість по відношенню до стохастичного поля з просторово періодичною зміною його моментів. Визначена ймовірність розвитку нестійкісті.

* Відповідальний редактор приносить щиросердечне вибачення за помилкове повторне опублікування статті П.О. Селищева “Возникновение пространственно-периодических диссипативных структур плотности точечных дефектов и кислородных преципитатов в облучаемом кремнии” у “Віснику” № 9, ст. 40.