

ЛЕКЦІЯ №6. ФОРМУВАННЯ ПРОСТОРОВО-НЕОДНОРІДНИХ СТРУКТУР ТА ЇХ ОПИС

6.1. Приклади систем нестабільних частинок, що мають фазові переходи

Розглянемо приклади нестабільних частинок, що притягуються одна до одної, неперервно генеруються зовнішнім джерелом і мають скінченний час життя.

1) Сильно збуджений газ, збуджені атоми (молекули) якого притягуються між собою з більшою силою, ніж атоми в основному стані. Це притягання за певних умов [73]–[75] може призвести до утворення нової фази з високою концентрацією збуджених молекул. Такі фази спостерігались експериментально [76]–[77].

2) Електронно-діркова рідина в напівпровідниках [78]. Внаслідок кореляції в русі електронів енергія, що припадає на пару електрон–дірка її стані електронно-діркової рідини, є набагато нижчою, ніж в стані з низькою концентрацією електронів і дірок. Тому в системі з великою концентрацією носіїв заряду утворюється фаза електронно-діркової рідини. Огляд досліджень електронно-діркової рідини представлений в роботі [79].

3) Екситонна рідина в кристалах. У розділі 4 ми ознайомилися з екситонами – квазічастинками в кристалах, які збуджуються світлом. При великих концентраціях екситонів та за наявності сил притягання між ними можливе утворення конденсованої фази екситонів [80]. Проте в напівпровідникових кристалах радіус екситонів є великим, а енергія зв'язку електрона і дірки в екситоні є малою, тому при високій концентрації екситонів вони розвалюються і утворюється електронно-діркова рідина, про яку йшлося в попередньому пункті. В останні роки були одержані дані про існування конденсованої фази екситонів у кристалах з проміжним значенням радіусів екситонів, характерним для напівпровідників і молекулярних кристалів: ZnP_2 [81] і CuO_2 [82].

4) Системи з високою концентрацією вакансій, міжвузлових атомів або інших дефектів у кристалах [47], [83]. Як уже зазначалося в розділі 4, у кристалі під дією потоку високоенергетичних частинок утворюються дефекти. Найпростішими дефектами є точкові дефекти: вакансії та міжвузлові атоми. Після виникнення частина дефектів рекомбінує, а частина об'єднується в кластери, утворюючи стійкі дефектні структури. На початковій стадії опромінювання (до дози $\square 0,1$ зміщень на атом) можна вважати, що число кластерів є невеликим. У разі інтенсивного опромінювання, коли концентрація точкових дефектів стає значною, починає відігравати роль взаємодія між ними. Таким чином, при опромінюванні кристала квазічастинки (міжвузлові атоми й вакансії) неперервно створюються зовнішнім джерелом, живуть скінченний час внаслідок процесів рекомбінації та захоплювання стоками і взаємодіють між собою. На великих відстанях між дефектами (набагато більшими за період кристалічної ґратки) енергія взаємодії між дефектами, що знаходяться на відстані \mathbf{r} , у кубічному кристалі із слабкою анізотропією має вигляд [84]–[86]

$$V(\mathbf{r}) = \frac{3\Delta V_i \Delta V_v}{8\pi r^3} \left(\frac{\bar{K}}{C_{11}} \right)^2 C_a \left[-3 + 5 \left(\cos^4 \vartheta_x + \cos^4 \vartheta_y + \cos^4 \vartheta_z \right) \right], \quad (6.1)$$

де C_a – параметр анізотропії; C_{ij} – пружні константи; ϑ_i – кути між радіус-вектором \mathbf{r} і i -ою віссю кристала ($i = x, y, z$); $\Delta V_{i(v)}$ – параметр, який визначає зміну об'єму комірки, зумовленого появою дефекту, для вакансії $\Delta V_v < 0$, для міжвузлового атома $\Delta V_i > 0$.

З формули (6.1) випливає, що взаємодія між дефектами повільно зменшується із зростанням відстані і має складну кутову залежність. Для деяких напрямків ця взаємодія є притяганням, для інших – відштовхуванням. У кристалах з від'ємною анізотропією ($C_a < 0$) для дефектів однакового типу (або i - або v -типу) енергія взаємодії є від'ємною (тобто має місце притягання), якщо радіуси-вектори, які з'єднують дефекти, спрямовані вздовж осі (100), і є позитивною (тобто дефекти відштовхуються), якщо вони

з'єднані вектором, що орієнтований вздовж діагоналі куба. Коли відстань між дефектами стає зрівняною з періодом ґратки, формула (6.1) вже несправедлива. Можна вважати, що при $\mathbf{r} \rightarrow 0$ енергія взаємодії додатна і нескінченно велика, оскільки два однакових дефекти не можуть знаходитися в одній точці.

Внаслідок притягання між окремими частинками можливе їх скупчення і утворення нової фази.

У випадках 1–3 квазічастинки (електрони, дірки, екситони, збуджені молекули) створюються світлом, велика концентрація квазічастинок (вакансій, міжвузлових атомів та інших дефектів) у випадку 4 може бути створена потоком високоенергетичних частинок (протонів, нейтронів, іонів та ін.).

В усіх наведених випадках квазічастинки живуть скінченний час: збуджені молекули та екситони мають природний час життя і, крім того, руйнуються при різноманітних взаємодіях; електрони й дірки, а також вакансії та міжвузлові атоми рекомбінують між собою, захоплюються уловлювачами та стоками. Часто вищезазначені системи розглядаються як рівноважні з концентрацією, рівною стаціонарній концентрації, створеній зовнішнім опромінюванням. Проте, як ми побачимо, скінченність часу життя впливає на стан системи.

6.2. Нестабільність однорідного розподілу частинок, що притягуються, генеруються з постійною швидкістю і мають скінченний час життя

У циклі робіт [51], [87], [88] (див. також [9]) досліджено процеси утворення надґраток густини в системі взаємодіючих частинок, які стаціонарно і оперуються та живуть скінченний час. Наявність частинок визначається зовнішнім джерелом, тому надґратка може існувати тільки в нерівноважних умовах, отже, вона є типовим представником дисипативної структури.

Дослідимо спочатку явище утворення надгіраток на прикладі частинок, що притягуються, одного типу. Такими частинками можуть бути збуджені атоми (п. 1 підрозділу 6.1.), екситони (п.3), вакансії, створені ядерним опромінюванням, (п.4). Щодо останнього прикладу, то потрібно «уважити, що високоенергетичними частинками створюються як вакансії, так і міжвузлові атоми (та інші дефекти також), проте, наприклад, у металах міжвузлові атоми швидко мігрують по кристалу і, як наслідок, інтенсивно захоплюються різноманітними стоками і їхня стаціонарна концентрація набагато менша, ніж концентрація вакансій. Тому взаємодію між міжвузловими атомами та міжвузловими атомами й вакансіями можна не враховувати. Таким чином, задача зводиться до вивчення квазічастинок одного типу – вакансій, які створюються зовнішнім джерелом, взаємодіють між собою і живуть скінченний час внаслідок захоплювання їх стоками. Критерій цього наближення та більш точні моделі будуть розглядатися нижче.

Розглянемо згідно з роботою [51] динаміку взаємодіючих дефектів. Оскільки коефіцієнт дифузії міжвузлових атомів у металах набагато перевищує коефіцієнт дифузії вакансій, то такі атоми ефективніше захоплюються стоками і їхня стаціонарна концентрація набагато нижче за концентрацію вакансій.

Отже, дослідимо частинки одного типу. Позначимо їх концентрацію через n . Залежність густини від координати і часу визначається рівнянням

$$\frac{\partial n}{\partial t} = K - \frac{n}{\tau} - \operatorname{div} \mathbf{j}, \quad (6.2)$$

де K – кількість частинок, які народжуються за одиницю часу в одиниці об'єму зовнішнім джерелом; τ – час життя частинок; \mathbf{j} – густина потоку частинок, яка в проекціях на осі координат має вигляд:

$$j_i = -D_{ij} \left(\frac{\partial n}{\partial x_j} - n \frac{F_j}{kT} \right), \quad (6.3)$$

де D_{ij} – компоненти тензора дифузії; \mathbf{F} – сила, що діє на одну частинку з боку інших частинок:

$$\mathbf{F} = - \int d\mathbf{r}' \vec{\nabla} V(\mathbf{r}, \mathbf{r}') n(\mathbf{r}'), \quad (6.4)$$

$V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – енергія взаємодії частинок, які знаходяться в точках \mathbf{r} і \mathbf{r}' . Вважатимемо, що поверхневими ефектами можна нехтувати. Тоді функція $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ залежить від різниці $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Далі ми будемо часто використовувати фур'є-компоненти потенціалу взаємодії

$$V(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (6.5)$$

Функція $V(\mathbf{k})$ у загальному випадку при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ залежить від напрямку \mathbf{k} . У разі пружної взаємодії між дефектами (наприклад, вакансіями) (6.1) це пов'язане з далекосяжним характером пружних сил. Справді, тут взаємодія спадає з віддаллю за законом r^{-3} , інтеграл $\int_{R_1}^R \frac{1}{r^3} r^2 dr \propto \ln \frac{R}{R_1}$ є розбіжним при $R \rightarrow \infty$. Збіжність інтеграла (6.5) при $\mathbf{k} \rightarrow 0$ досягається. Через те, що кутова залежність взаємодії (6.1) є знакозмінною. Проте результуючий вираз для $V(\mathbf{k})$ є неаналітичною функцією \mathbf{k} .

Другий член у правій частині (6.3) пов'язаний з силами, що діють на частинку. В даному разі цими силами є сили взаємодії з іншими частинками. У співвідношенні (6.4) не враховано кореляцію в положенні частинок. Таке наближення відповідає наближенню самоузгодженого поля, яке є справедливим при взаємодії частинки з багатьма частинками, тобто при далекосяжній взаємодії між частинками. Другий член у правій частині (6.3) є нелінійним (квадратичним) по n . Саме внаслідок присутності цього члена (а з фізичної точки зору – саме завдяки динамічній взаємодії) виникає іспіпативна структура.

Введемо безрозмірні змінні за формулами

$$\tilde{x}_i = (D_{ii}\tau)^{-1/2} x_i, \tilde{t} = t/\tau, \quad i = x, y, z, \quad (6.6)$$

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_0} V\left((D_{11}\tau)^{1/2} \tilde{x}, (D_{22}\tau)^{1/2} \tilde{y}, (D_{33}\tau)^{1/2} \tilde{z}\right) (D_{11}D_{22}D_{33})^{1/2}, \quad (6.7)$$

$$\lambda = n_0 V_0 / kT, \quad (6.8)$$

$$X = \frac{n - n_0}{n_0}, \quad (6.9)$$

де $n_0 = K\tau$ – середня концентрація частинок; $V_0 = \max V(\mathbf{k})|_{\mathbf{k} \rightarrow 0}$. Параметр λ , пов'язаний з концентрацією частинок, визначається зовнішнім джерелом утворення дефектів і температурою, і, як в розділі 4, у подальшому він буде називатися параметром накачування.

Після нескладних перетворень рівняння (6.2) приводиться до такого вигляду (знак \square над аргументами для спрощення опускаємо):

$$L_{\lambda r} X + \lambda \operatorname{div} \left[X(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \vec{\nabla}_r X(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] = \left(\frac{\partial X}{\partial t} \right), \quad (6.10)$$

де

$$L_{\lambda r} X = \Delta X(\mathbf{r}) + \lambda \left[\int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \Delta X(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] - X. \quad (6.10)$$

Одним з розв'язків рівняння (6.10) є $X = 0$, який відповідає однорідному розподілу квазічастинок з густиною n_0 . Покажемо, що за наявності притягання між квазічастинками при концентрації частинок, вищій за деяке порогове значення, однорідний стан стає нестійким. Для дослідження стійкості однорідного розв'язку розглянемо лінійізоване стосовно X рівняння (6.10)

$$L_{\lambda r} X^{(0)} = \left(\frac{\partial X^{(0)}}{\partial t} \right). \quad (6.12)$$

Покладемо $X^{(0)} = X_0^{(0)} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} + p_0(\mathbf{k}, \lambda)t)$ з (6.12) дістанемо

$$p_0(\mathbf{k}, \lambda) = -k^2 (1 + \lambda U(\mathbf{k})) - 1, \quad (6.13)$$

де $U(\mathbf{k})$ – фур'є-перетворення потенційної енергії взаємодії між квазі-частинками (6.7).

При малих концентраціях квазічастинок ($\lambda \rightarrow 0$) при дійсних значеннях k маємо $p_0 = -(k^2 + 1) < 0$ і однорідний стан є стійким. Для деяких напрямків \mathbf{k} у випадку пружної взаємодії має місце $U(\mathbf{k}) < 0$, що відповідає притяганню між квазічастинками при їхньому розміщенні в певних площинах. Тоді при значеннях накачування λ , більших за деяке порогове значення λ_c , при $k = k_c$ величина $p_0(k_c, \lambda_c)$ стає позитивною, а однорідний стан нестійким. У цьому разі вплив взаємодії, яка приводить до притягання, домінує над дифузійним розпливанням функції розподілу частинок. Мінімальне значення параметра накачування $\lambda = \lambda_c$, при якому рівняння

$$k_c^2 [1 + \lambda_c U(k_c)] + 1 = 0 \quad (6.14)$$

має розв'язок при дійсних значення k , є точкою біфуркації. k_c визначає хвильовий вектор і, отже, просторовий характер дисипативної структури, яка виникає за порогом нестійкості. Для визначення λ_c і k_c потрібно задати конкретний вигляд взаємодії між частинками. Розглянемо приклад, коли досліджуваними нестабільними частинками є вакансії, створені високоенергетичними частинками. Тоді взаємодія між частинками визначається далекосяжною взаємодією (6.1) і частиною, що описує взаємодію на близьких віддальх. Якщо період структури, яка виникає, набагато перевищує період кристалічної ґратки, то $U(\mathbf{k})$ можна розкласти в ряд по степенях k^2 (у кристалах з центром інверсії напрямки \mathbf{k} і $-\mathbf{k}$ еквівалентні, і непарних стосовно \mathbf{k} доданків немає)

$$U(\mathbf{k}) = A\left(\frac{\mathbf{k}}{k}\right) + B\left(\frac{\mathbf{k}}{k}\right)k^2 + \dots \quad (6.15)$$

Перший член у цій формулі є максимальним за величиною і визначає головний внесок у порогове значення λ . У визначених раніше позначеннях

він має максимальне значення, яке дорівнює -1 при певних напрямках \mathbf{k} . У деяких випадках можна визначити залежність $A\left(\frac{\mathbf{k}}{k}\right)$ аналітично. Так, у кубічних кристалах зі слабкою анізотропією при пружній взаємодії між дефектами (6.1) фур'є-представлення (6.5) має вигляд [86]

$$A\left(\frac{\mathbf{k}}{k}\right) = k^{-4} (k_x^4 + k_y^4 + k_z^4) \text{sign}(C_a), \quad (6.16)$$

$$V_0 = (\Delta V)^2 \left(\frac{K}{C_{11}}\right)^2 |C_a|.$$

З формули (6.16) випливає, що фур'є-компонента енергії взаємодії максимальна при $k = k_x$, або $k = k_y$, або $k = k_z$, тобто для напрямків вектора \mathbf{k} , паралельних осям кристала.

Другий член (6.15) описує фур'є-перетворення доданків, які не враховані в (6.1) і які зменшуються зі збільшенням відстані швидше, ніж r^{-3} . Врахування цих доданків необхідне для побудови стійких розв'язків у запороговій області. За порядком величини для пружної взаємодії між частинками $B \approx R_0^2 / l_0^2$, де $l_0 = (D\tau)^{1/2}$ – довжина пробігу частинки; R_0 – величина порядку періоду кристалічної ґратки.

6.3. Одновимірна надґратка

Розглянемо розвинення нестабільності однорідного стану при збільшенні накачування щодо утворення одновимірної ґратки. Нестабільність виникає для напрямків \mathbf{k} , при яких $A\left(\frac{\mathbf{k}}{k}\right)$ у формулі (6.15) набуває найменшого значення, тобто коли хвильовий вектор надґратки \mathbf{k} паралельний одній з осей кристала. При цьому $X(\mathbf{r}) \equiv X(z)$ (вважаємо, що вісь z спрямована вздовж осі кристала). У безрозмірних одиницях при від'ємній анізотропії $A\left(\frac{\mathbf{k}}{k}\right) = -1$. Отже,

$$U(k) = -1 + Bk^2, \quad (6.17)$$

де $B = B(1, 0, 0)$.

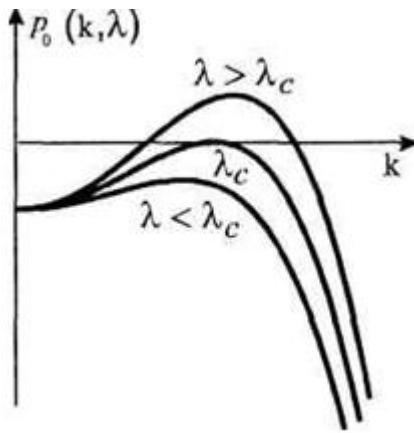


Рис. 6.1 Поява нестабільності однорідного розподілу при зміні зовнішнього параметра

На рис. 6.1 зображено залежність $p_0(\mathbf{k}, \lambda)$ згідно із співвідношеннями (6.13) і (6.17) для різних значень накачування λ . При $\lambda < \lambda_c$ для довільних значень k величина $p_0(\mathbf{k}, \lambda)$ є негативною і, отже, однорідний розв'язок є стабільним. Нестабільність виникає,

коли зі збільшенням накачування $\lambda(\lambda) p_0(\mathbf{k}, \lambda)$ досягає нуля при певному значенні $k = k_c$. Це значення λ відповідає біфуркаційній точці. У біфуркаційній точці $p_0(\mathbf{k}, \lambda) = 0$ і $\partial p_0(k_c, \lambda_c) / \partial k_c = 0$. Враховуючи (6.13), матимемо

$$\lambda_c = 1 + 2\sqrt{B}(\sqrt{B} + \sqrt{B+1}), \quad (6.18)$$

$$k = (\lambda_c B)^{1/4}. \quad (6.19)$$

Повертаючись до розмірних одиниць, для періоду надгратки, маємо

$$d = 2\pi(\lambda_c)^{1/4} (l_0 R_0)^{1/2}. \quad (6.20)$$

Як впливає з (6.20), період надгратки густини визначається кінетичні і ми параметрами (коефіцієнтом дифузії, часом життя частинок). Це є наслідком нерівноважності системи. При великому часі життя ($\tau \rightarrow \infty$) період дорівнює нескінченності.

Амплітуду коливань надгратки можна знайти, розв'язавши задачу за порогом стійкості. Вивчення одновимірної гратки зводиться до визначення інтеграційного розв'язку одновимірного інтегродиференційного рівняння, яке впливає з (6.10),

$$L_{\lambda z} X + \lambda \frac{d}{dz} \left(X(z) \int dz' U(z') \frac{d}{dz} X(z - z') \right) = 0, \quad (6.21)$$

де $U(z) = \int dx dy U(\mathbf{r})$,

$$L_{\lambda r} X = \frac{d^2}{dz^2} X(\mathbf{r}) + \lambda \left[\int d\mathbf{r}' U(\mathbf{r}') \frac{d^2}{dz^2} X(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right] - X. \quad (6.22)$$

У загальному випадку розв'язок рівняння (6.21) вимагає числових методів. Проте при значеннях зовнішнього параметра λ , близьких до біфуркаційного ($\lambda \approx \lambda_c$), можна знайти аналітичний розв'язок за допомогою розкладу за малим параметром (див. підрозділ 1.8). Перепишемо рівняння (6.21) у вигляді

$$L_{\lambda_c z} = q, \quad (6.23)$$

де

$$q = (L_{\lambda_c z} - L_{\lambda z}) X - \lambda \frac{d}{dz} \left(X(z) \int dz' U(z') \frac{d}{dz} X(z - z') \right).$$

Розклавши $X, \lambda - \lambda_c, q$ за малим параметром ε , маємо

$$X = \sum_{n=1}^{\infty} X_n \varepsilon^n, \quad (6.24)$$

$$\lambda - \lambda_c = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \varepsilon^n, \quad (6.25)$$

$$q = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n q_n, \quad (6.26)$$

Щоб отримати значення коефіцієнтів X_n, ε, q_n , підставимо суми (6.24) – (6.26) у рівняння (6.23), порівняємо коефіцієнти при однакових степенях ε , знайдемо розв'язок одержаних рівнянь, враховуючи при цьому, що права частина рівняння (6.23) повинна бути ортогональною розв'язку лівій частині цього рівняння. Розпишемо остаточний результат, знайдений з точністю до членів порядку ε^4 :

$$X_n = X_n^0 \cos n(k_c + \varphi), \quad (6.27)$$

$$n = 1, 2, 3.$$

$$X_4 = X_4^{(2)} \cos 2(k_c z + \varphi) + X_4^{(4)} \cos 4(k_c z + \varphi), \quad (6.28)$$

$$X_1^0 = 1, X_2^0 = \frac{\lambda_c k_c^2 U(0, k_c)}{p_0(0, 2k_c; \lambda_c)}, \quad (6.29)$$

$$X_3^0 = \frac{3\lambda_c k_c^2 X_2^0 [2U(0, 2k_c) + U(0, k_c)]}{2p_0(0, 3k_c; \lambda_c)}, \quad (6.30)$$

$$X_4^{(2)} = \frac{\lambda_c k_c^2 [U(0, k_c) + 4U(0, 2k_c) X_2^0] + \lambda_c X_3^0 (3U(0, 3k_c) - U(0, k_c))}{p_0(0, 2k_c; \lambda_c)}, \quad (6.31)$$

$$X_4^{(4)} = 2\lambda_c k_c^2 \frac{X_3^0 [3U(0, 3k_c) + U(0, k_c)] + 2X_2^{02} U(0, 2k_c)}{2p_0(0, 2k_c; \lambda_c)}, \quad (6.32)$$

$$\lambda_1 = \lambda_3 = 0,$$

$$\lambda_2 = -\lambda_c^2 k_c^2 \frac{2U(0, 2k_c) - U(0, k_c)}{2p_0(0, 2k_c; \lambda_c)}, \quad (6.33)$$

$$\begin{aligned} \lambda_4 = & -\frac{(X_4^{02} \lambda_c + X_2^0 \lambda_2)(2U(0, 2k_c) - U(0, k_c))}{2U(0, k_c)} - \\ & -\frac{\lambda_c X_2^0 X_3^0 (3U(0, 3k_c) - 2U(0, k_c))}{2U(0, k_c)}, \end{aligned} \quad (6.34)$$

де покладено $U(\mathbf{k}) = U(k_\perp, k_{11})$, $p_c = p_c(k_\perp, k_{11})$, k_\perp і k_{11} – відповідно поперечна і повздовжня складові хвильового вектора; φ – довільна фаза. Формули (6.24)–(6.26), враховуючи (6.27)–(6.34), дають можливість зв'язати густину частинок в надґратках з накачуванням. При $\varepsilon \rightarrow 0$ із співвідношення (6.25) з точністю до квадратичних членів стосовно ε матимемо:

$$\varepsilon = ((\lambda - \lambda_c)/\lambda_2)^{1/2}. \quad (6.35)$$

Співвідношення (6.24), (6.33) та (6.35) визначають амплітуду надґратки илежно від накачування. Залежність амплітуди від λ подібна до залежності амплітуди просторової структури в хімічних реакціях у моделі

«брюсселятор» (рис. 5.4) при $B > 0,02856$ (у цьому разі $\lambda_2 > 0$). За таких умов має місце надкритична біфуркація і надгратка виникає при $\lambda > \lambda_c$. При $B < 0,02856$ реалізується підкритична біфуркація. Щоб описати залежність амплітуди від накачування в цьому випадку, потрібно враховувати у співвідношенні (6.25) доданки розкладу по ε з точністю до ε^4 . Така залежність представлена на рис. 5.5, з якого видно, що при $\lambda < \lambda_c$ існують два стабільних стани: один з однорідним розподілом густини частинок, а другий з періодичним розподілом. Це означає, що при формуванні надгратки можливі явища гістерезису.

6.4. Стійкість надграток

Для дослідження стійкості одновимірної надгратки розглянемо поведінку флуктуації динамічної змінної. Для цього покладемо в рівнянні (6.10)

$$X(\mathbf{r}) \rightarrow X(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}) \exp(p(\mathbf{k}, \lambda)t)$$

(6.36)

і опустимо доданки, квадратичні відносно $\delta(\mathbf{r})$. Таким чином, матимемо лінійне рівняння для визначення $\delta(\mathbf{r})$, коефіцієнти якого є періодичними функціями координат. Відомо, що спектр рівняння з періодичними коефіцієнтами має зонний характер: складається з областей $p(\mathbf{k}, \lambda)$, в яких розв'язки існують, і областей, при яких розв'язків немає. Розв'язок є стабільним, якщо реальні частини всіх власних значень $p(\mathbf{k}, \lambda)$ є від'ємними (за винятком власного значення $p(\mathbf{k}, \lambda)$, яке завжди присутнє в розглядуваній задачі внаслідок трансляційної інваріантності досліджуваного рівняння). Спектр системи визначається числовими методами. Опустимо деталі розрахунків і наведемо найбільш важливі результати. Нестабільність одновимірної надгратки в тривимірній системі виникає при деякому значенні

накачування λ , щодо наростання поперечних мод з $\mathbf{k}_\perp \neq 0$. У випадку сферично-симетричного потенціалу взаємодії між частинками ($U(\mathbf{r}) = U(r)$) плоска надгратка в тривимірному просторі є нестабільною. Чим більшою є асиметрія потенціалу взаємодії, тим ширшою є область параметра λ , в якій може існувати одновимірна надгратка. Одновимірна надгратка густини дефектів є стабільною в кубічних кристалах, де пружна взаємодія (6.1) не є сферично симетричною функцією. У кубічному кристалі можливе існування трьох плоских надграток із взаємно перпендикулярними орієнтаціями осей.

Зі збільшенням накачування λ при певній області параметра існують вторинні біфуркації. Існування численних розв'язків в запороговій області є характерною особливістю дисипативних структур.

Зробимо два зауваження.

У даному розділі досліджується система з однією змінною (густиною) і показано існування дисипативних структур у такій системі. На перший погляд, цей результат суперечить висновку підрозділу 5.1, в якому показано, що в системі з однією змінною неоднорідні структури є нестабільними. Протиріччя усувається, якщо врахувати, що ми досліджували інтегродиференційне рівняння (6.10), а не диференційне рівняння (5.1). Взагалі кажучи, ми могли б ввести іншу динамічну змінну – поле деформацій, яке визначається окремим рівнянням теорії пружності. Тоді система описувалася б двома рівняннями з двома незалежними змінними, заборона на існування дисипативних структур у цьому разі відсутня. Ми використали вже відомий розв'язок для рівняння теорії пружності. Тому мали справу з одним рівнянням, проте з нелокальним зв'язком між силою, що виникає при деформації, та густиною дефектів, що створюють деформацію. Нелокальний зв'язок приводить до інтегродиференційного рівняння, яке не збігається з рівнянням, дослідженим у підрозділі 5.1, і тому є незастосовними висновки, одержані в ньому.

Періодичні структури в системі взаємодіючих частинок на певних проміжках часу виникають в явищі спінодального розпаду. Спінодальний розпад спостерігається, коли система з області високих температур, де існує лише одна фаза, швидко переводиться в область низьких температур, в якій може існувати кілька фаз. Питання про спінодальний розпад ми ще розглядатимемо в розділі 8. Внаслідок взаємодії між частинками в системі відбувається розшарування на фази і може утворюватися періодична структура. Проте існує принципова різниця між розглядуваною системою взаємодіючих частинок зі скінченним часом життя і спінодальним розпадом:

1) В явищі спінодального розпаду періодична структура існує тільки на перших етапах розпаду. Вона зникає при $t \rightarrow \infty$, розміри областей з різними фазами нескінченно зростають у нескінченній системі. Для системи взаємодіючих нестабільних частинок можливий періодичний стаціонарний розв'язок.

2) Період надгратки, що виникає при спінодальному розпаді на перших його етапах, не залежить від кінетичних коефіцієнтів (наприклад, від коефіцієнта дифузії). Період розглядуваної системи визначається коефіцієнтом дифузії (див. (6.20)). Це пов'язано з тим, що розглядувана система нестабільних частинок, що неперервно генеруються, є нерівноважною структурою.

6.5. Утворення просторово-неоднорідних структур густини антиструктурних дефектів

У підрозділі 4.3.3 ми показали, що в бінарних кристалах при ядерному опромінюванні утворюється велика кількість антиструктурних дефектів. Накопичення антиструктурних дефектів у системі зумовлює виникнення великих пружних полів, що може призвести до нестійкості однорідного розподілу дефектів. Для дослідження системи на стійкість стосовно просторово-неоднорідних збурень, кінетичні рівняння необхідно модифікувати. У випадку неоднорідного розподілу дефектів переходи атомів у різних напрямках уже не є рівноймовірними через різницю концентрацій та

енергій дефектів з різних боків від розглядуваної точки. Урахування цього в наближенні малості градієнтів концентрацій дефектів призводить до включення в кінетичні рівняння дифузійних доданків. Для системи з багатьма типами дефектів (двох типів антиструктурних дефектів, вакансій, міжвузлових атомів) рівняння є дуже громіздкі і тут не наводяться. Детально вони описані в [89]. Для аналізу системи потрібно врахувати взаємодію між різними дефектами. Концентрації міжвузлових атомів і вакансій (див. рис. 4.18) є малими і взаємодією міжвузлових атомів з вакансіями та іншими дефектами можна нехтувати. Тому в першу чергу в опромінюваних бінарних кристалах потрібно враховувати взаємодію між антиструктурними дефектами, оскільки їхня концентрація є максимальною. У наближенні самоузгодженого поля можна записати:

$$U_{\alpha}(\mathbf{r}) = \int U_{\alpha A_b}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') A_b(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \int U_{\alpha B_a}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') B_a(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (6.37)$$

де $U_{\alpha\beta}(\mathbf{r})$ – енергія парної взаємодії між дефектами типу α і β ; A_b , B_a – концентрації антиструктурних дефектів. У кубічному кристалі зі слабкою анізотропією енергія взаємодії пружних полів, що виникають навколо дефектів, представлена формулою (6.1) через пружні сталі. Наведемо результати розрахунків. На рис. 6.2 на площині температури й інтенсивності опромінювання показана область нестійкості розв'язку з однорідним розподілом концентрацій. В області 1 однорідне рішення є стійким, в області 2 – нестійким. Криві, що розділяють ці області, майже збігаються з лініями постійної концентрації антиструктурних дефектів. При температурах та інтенсивностях опромінювання, що відповідають області 2, у системі повинен утворитися періодичний розподіл густини дефектів (надгратка), тобто періодичні у просторі осциляції композиційного складу сплаву.

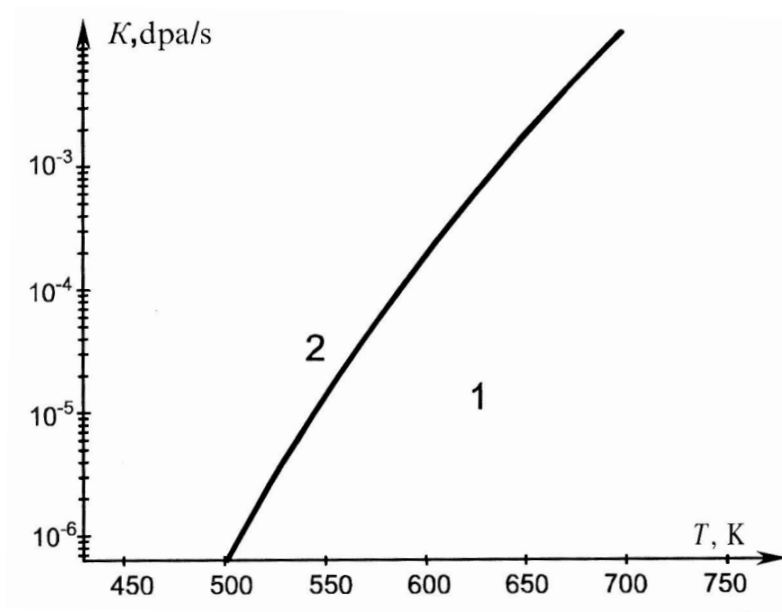


Рис. 6.2. Область існування надграток густини антиструктурних дефектів у бінарному кристалі при ядерному опромінюванні

Зауважимо, що розглядувана надгратка густини дефектів є дисипативною структурою, що існує при наявності опромінювання. Проте при вимкненні опромінювання температура кристала істотно зменшується, процеси релаксації до однорідного стану уповільнюються і надгратка може існувати тривалий час.

6.6. Експериментальні спостереження періодичних структур при ядерному опромінюванні

Як відомо, атоми в кристалах утворюють періодичну структуру. Високоенергетичні частинки зміщують атоми з положень рівноваги. Ці атоми переміщуючись по кристалу, взаємодіють між собою і, врешті-решт у кристалі утворюються різноманітні дефекти. Виявляється, що в деяких випадках радіаційні дефекти можуть розміщуватись у кристалі періодично, утворюючи так звану надгратку дефектів. Утворення різноманітних періодичних структур у кристалах при ядерному опромінюванні виявлено у численних експериментах. Періодичні структури спостерігались у різних матеріалах при різних типах опромінювання: електронному, іонному, нейтронному, протонами, α -частинками, лазерному. Зробимо короткий огляд цих робіт.

Красивим явищем є поява надгратки пор в опромінених кристалах. Вперше це явище спостерігалось Евансом у 1971 році [90] на кристалах молібдену, опромінені іонами азоту. В подальшому періодичне розміщення пор було виявлене в інших матеріалах при різних типах опромінювання, а також спостерігалась надгратка газонаповнених пор (див. огляди [60], [91]). Симетрія надгратки пор має симетрію кристала – матриці. Період надгратки пор є величиною порядку кількох сотень ангстремів, а радіус пор – десятків ангстремів.

Одним із проявів ефектів самоорганізації в кристалах під опромінюванням є утворення періодичних структур дислокацій. Вони спостерігаються при різних типах опромінювання (іонному, нейтронному, лазерному) у різноманітних матеріалах (див., наприклад, огляди [50], [92]). У роботі [93] відзначається періодичне розташування дефектів упаковки при електронному опромінюванні тонкої нікелевої фольги великими дозами. В роботі [94] спостерігали виникнення періодичних ґраток радіаційних дефектів у сплаві $Zr-10\%Nb$. Проведені в роботі [95] дослідження показали утворення періодично розташованих «стінок» дефектів в опромінених іонами кристалах.

У багатокомпонентних кристалах ефекти самоорганізації, зумовлені опромінюванням, стають більш різноманітними – крім структур дефектів можлива поява структур, пов'язаних з різними компонентами матеріалу.

Періодичні осциляції складу сплаву, які можуть бути проявом отриманої в попередніх підрозділах нестійкості, спостерігалися в циклі робіт по опромінюванню сплавів $Fe-Ni$ і $Fe-Cr-Ni$ при атомній концентрації нікелю близько 35% [96]—[98]. У роботі [99] мова йде про спостереження осциляцій концентрації Zn у сплаві $Al-Zn$ при опромінюванні електронами. Автори робіт [100], [101] спостерігали періодичне розташування другофазних краплень. У роботі [102] зроблено огляд процесів утворення металевих наночасток при опромінюванні пластинок SiO_2 іонами різних матеріалів: хрому, титану, міді, платини та ін. Зазначається, що процес утворення

наночасток металу залежить від зв'язку металу з кремнієм, від концентрації впровадженого металу, а також від його рухливості у склі.

Авторами робіт [103]–[104] проведені спостереження радіаційної зміни структури різноманітних сплавів на основі заліза, нікелю або вольфраму, а також для кристалів *Ti* і *Zr* при опромінюванні іонами різних енергій і виявлено в певній області температур існування кінетичних фазових переходів у новий стан, який існує лише за наявності опромінювання, і після вимкнення опромінювання без зміни температури кристал повертається до початкового стану. Це свідчить, що досліджувана структура є дисипативною структурою.