Письма в ЖТФ, том 18, вып. 7 12 апреля 1992 г.

01; 05

ГРАНИЦЫ ОБЛАСТЕЙ УПОРЯДОЧЕНИЯ ПРИ АГРЕГАТИЗАЦИИ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ ФРЕНКЕЛЯ

Г.А. Л я х о в, С.Л. П о п ы р и н

Исследование процесса агрегатизации радиационных дефектов Френкеля, актуальное для задач радиационного материаловедения [1] (при образовании агрегатов стационарная концентрация дефектов может в несколько раз превышать концентрацию, характерную для их хаотического пространственного распределения), продвинуто к настоящему времени во многих направлениях (см. обзор [2]). Ниже показано, что при сильной нелокальности рекомбинационного взаимодействия агрегатизация дефектов может приводить к возникновению ближнего и дальнего порядка в их расположении.

Учет нелокальности естественным образом обобщает уравнения [3], управляющие рождением и гибелью электрически нейтральных рекомбинирующих дефектов двух сортов A и B:

$$\partial C_A/\partial t = D_{A,B}\Delta C_{A,B} - \\ -kC_{A,B}(\vec{r},t)\int G(|\vec{r}-\vec{r}'|)C_{B,A}(\vec{r}',t)d^3\vec{r}' + i_{A,B}(\vec{r},t). \tag{1}$$

Здесь $C_{A,B}$ – концентрации, $D_{A,B}$ – коэффициенты диффузии, k – скорость рекомбинации, $G(r)$ – нормированная вероятность рекомбинации в единицу времени пары разноименных дефектов, $i_{A,B}$ – интенсивности (некоррелированного) рождения дефектов. Система (1) при надлежащем выборе $G(r)$ описывает и модель „черной сферы", и туннельную перезарядку [2]. Разлагая $C_{A,B}$ $(\vec{r}', t)$ по степеням $(\vec{r}-\vec{r}')$ до шестого порядка, получим

$$\partial C_{A,B}/\partial t = D_{A,B}\Delta C_{A,B} - kC_{A,B}(1+G_2\Delta + G_4\Delta^2 + \\ + G_6\Delta^3)C_{B,A} + i_{A,B}, \tag{2}$$

где $G_{2m} = ((2m)!)^{-1}\int G(|\vec{r}|)|\vec{r}|^{2m}d^3\vec{r}$ – моменты функции G.

Система (2) явно учитывает локальную рекомбинацию, перекрестную вынужденную диффузию [4], дисперсию последней.

Полагаем $i_A = i_B = i_0$, $D_A = D_B = D$ и линеаризуем (2) около однородного стационарного решения $C_A = C_B = C_0 = (i_0/k)^{1/2}$; стационарное решение отыскиваем в виде $C_{A,B}(\vec{r}) = X_{A,B}(x) + Y_{A,B}$ (y)+

$+ Z_{A,B}(z)$. Системе (2) при этом сопоставляется характеристическое уравнение

$$G_6 æ^4 - G_4 æ^2 + G_2 + D/kc_0 = 0. \quad (3)$$

Если выполняется условие

$$G_4^2 > 4G_6(G_2 + D/kc_0), \quad (4)$$

корни (3) вещественны, что соответствует пространственной периодичности концентраций, т.е. наличию дальнего порядка. Если (4) нарушается, корни (3) становятся комплексными; это соответствует осцилляционному затуханию концентраций с ростом $|\vec{r}|$, т.е. наличию ближнего порядка. Корни (3) чисто мнимы (затухание концентраций монотонно) лишь при знакопеременных функциях G. Таким образом, возможность полного отсутствия пространственного упорядочения связана с нарушением принятого в (1) предположения об отсутствии корреляций между i_A и i_B.

Разложение нелокальности в (1) по длине рекомбинации до более высоких, чем шестой, порядков качественно не изменяет результата; меньшее же, чем 6, число членов разложения не дает возможности различить ближний и дальний порядок (ср. с [5], где отмечено, что различение кристаллографических твердотельных структур и текстур требует учета материальных тензоров до шестого ранга включительно).

Для различения ближнего и дальнего порядков более принятым является использование не одночастичных концентраций, а парных корреляционных функций. Для равновесных парных корреляционных функций одноименных, $g_1(\vec{r}-\vec{r}')$, и разноименных, $g_2(\vec{r}-\vec{r}')$ дефектов в суперпозиционном приближении Кирквуда системе (1) соответствует система:

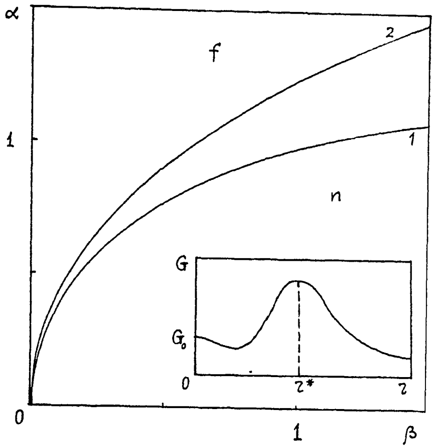
$$D\Delta g_{1,2} - kc_0^{-3} g_{1,2} \int G(\vec{r}-\vec{r}'')g_{2,1}(\vec{r}'-\vec{r}'')g_2(\vec{r}-\vec{r}'')d^3\vec{r} + i_0 c_0 = 0. \quad (5)$$

Разлагая нелокальности в (5) до шестого порядка и используя условие ослабления корреляций, получаем:

$$D\Delta g_{1,2} - kc_0^{-1} g_1 g_2 - kc_0^{-3} g_{1,2}\big(G_2 u\Delta + G_4(u\Delta^2 + 2v\Delta) + G_6(u\Delta^3 + 3v\Delta^2 + 3w\Delta)\big)g_{2,1} + i_0 c_0 = 0, \quad (6)$$

где $u = g_2(0)$, $v = \Delta g_2(0)$, $w = \Delta^2 g_2(0)$. Линеаризация (6) около однородного стационарного решения $g_1(\vec{r}-\vec{r}') = g_2(\vec{r}-\vec{r}') = c_0^2$ дает характеристическое уравнение

$$G_6 u æ^4 - (G_4 u + 3G_6 v)æ^2 + G_2 u + 2G_4 v + 3G_6 w + D/kc_0 = 0. \quad (7)$$



Межфазная граница нелокальной модели: f – фаза с дальним, n – фаза с ближним порядком; 1 – метод одночастичных концентраций, 2 – метод парных корреляционных функций. На врезке показана типичная зависимость $G(r)$, требуемая для реализации f-фазы: $r^* = \rho^2 + \sqrt{\rho^4 - R^4}$.

Подставляя в (7) значения u, v, w, вычисленные в более низких, чем шестое, приближениях, получаем, что при

$$3G_6^2 + 2G_4^2 G_2 > 3G_6 G_2^3 + 4G_2 G_4 G_6 + (5G_6 G_2^2 - G_4 G_2^3) D/kc_0^2 \quad (8)$$

корни (7) вещественны и парные корреляционные функции периодичны (дальний порядок). Если (8) нарушается, корни (7) комплексны, что соответствует осцилляционному затуханию $g_{1,2}$ с ростом $|\vec{r} - \vec{r}'|$ (ближний порядок). Чисто мнимых корней (7) не имеет при знакопостоянной G; учет более высоких членов разложения качественно не изменяет результатов, использование разложений до более низких, чем шестой, порядков, не позволяет различить ближний и дальний порядок.

Таким образом, использование парной корреляционной функции приводит к тем же качественным результатам, что и подход, ограниченный одночастичными концентрациями. Степень количественного соответствия этих подходов характеризуется расчетом межфазных границ (4) и (8) в переменных $\alpha = G_4/G_2^2$, $\beta = G_6/4G_2^3$ при $D = 0$ (см. рисунок). Из (4) и (8) следует, что состояния с дальним порядком надо в первую очередь искать при больших значениях α^2/β, т.е. когда зависимость $G(r)$ немонотонна. Пусть, например, $G(r) = G_0(1 + r^4/R^4)\exp(-r^2/\rho^2)$, где $G_0 = \pi^{-3/2}\rho^{-3}(1 + 3.75\rho^4/R^4)$ (см. врезку на рис. 1), тогда из (4) следует, что дальний порядок возможен лишь при

$$\rho/R > \left((D/kc_0G_2+0.160)/(0.147-6.46D/kc_0G_2)\right)^{1/4}. \qquad (9)$$

Отметим, что требуется достаточно резкая немонотонность $G(r)$ вблизи нуля: степень r/R в $G(r)$ должна быть не меньше 4. В отсутствие диффузии ($D=0$) дальний порядок возникает, если $\rho > 1.02R$. Сильная диффузия, $D \sim k/8\pi R_0^2$, где R_0 – радиус рекомбинации [2], разрушает дальний порядок: из (9) следует трудновыполнимое условие $u_0 = 4/3\pi R_0^3 c_0 \sim 10^2$.

Список литературы

[1] Кирсанов В.В., Суворов А.Л., Трушин Ю.В. Процессы радиационного дефектообразования в металлах. М.: Энергоатомиздат, 1985. 272 с.

[2] Винецкий В.Л., Калнинь Ю.Х., Котомин Е.А., Овчинников А.А. // УФН. 1990. Т. 160. В. 10. С. 1–33.

[3] Овчинников А.А., Бурлацкий С.Ф. // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 43. С. 494–496.

[4] Таланов В.И. // ДАН СССР. 1981. Т. 258. В. 3. С. 604–607.

[5] Ляхов Г.А., Свирко Ю.П. // Изв. АН СССР. Сер. физич. 1989. Т. 53. С. 1581–1585.

Институт общей физики
РАН, Москва

Поступило в Редакцию
16 февраля 1992 г.