

УДК 539.21 : 539.12.045.35.373.3

## КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

*Н. В. Бриллиантов, П. Л. Крапивский*

Исследована система нелинейных уравнений коагуляционной кинетики с ядром нового типа, описывающая процесс кластеризации точечных дефектов в твердом теле. Рассмотрены случаи системы с источником и без него. Для класса модельных кинетических коэффициентов найдены решения в области больших времен. В системе с источником полученные зависимости имеют «скейлинговую» форму.

### 1. Введение. Формулировка модели

В физике твердого тела встречается целый класс задач коагуляционной кинетики. К ним можно отнести задачи радиационной физики о кластеризации собственных дефектов — междуузлий и вакансий, задачи сегрегационной кинетики и др. В процессе роста дефектных скоплений, который можно считать диффузионно-лимитированным, образуются кластеры различных размеров, различной формы и внутренней структуры. Общее рассмотрение провести достаточно сложно, поэтому часто ограничиваются рассмотрением пространственно-однородного случая и ищут средние по объему концентрации  $k$ -частичных кластеров  $c_k(t)$ . Классические уравнения коагуляционной кинетики в этом случае имеют вид [1, 2]

$$\frac{dc_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{ij} c_i c_j - c_k \sum_{j=1}^{\infty} K_{kj} c_j. \quad (1)$$

Кинетические коэффициенты  $K_{ij}$  для диффузионно-лимитированных процессов  $[i]+[j] \rightarrow [i+j]$  выражаются через радиусы кластеров  $R$  и коэффициенты диффузии  $D_i$ , соотношением  $K_{ij} = 4\pi (R_i + R_j)(D_i + D_j)$  [1]. Кластеризация точечных дефектов в твердых телах имеет важную особенность: коэффициент диффузии кластера как целого пренебрежимо мал по сравнению с последним для единичного дефекта (мономера). Поэтому в дальнейшем предполагается, что  $D_i = 0$  при  $i > 1$ , так что  $K_{ij} = 0$ , если  $i, j > 1$ . Зависимость радиуса кластера от количества частиц в нем в общем случае достаточно сложная, однако при  $k \gg 1$  можно использовать соотношение  $R_k \sim k^\alpha$ . Здесь  $\alpha = 1/d$ , где  $d$  — размерность кластера. Например, в случае плоских скоплений (междоузельные диски)  $\alpha = 1/2$ , в случае сферических  $\alpha = 1/3$  (вакансационные поры). Следует отметить, что объекты, образующиеся при диффузионно-лимитированной агрегации, могут иметь фрактальную (дробную) размерность (см., например, [3, 4]); так, в классической модели Виттена—Сандера  $d = 2.67$  [5]. Точное значение  $d$  можно определить из микроскопической модели процесса.

Таким образом, в настоящей работе рассматривается следующая модель кинетических коэффициентов:  $K_{ij} = a (i^\alpha \delta_{j1} + j^\alpha \delta_{i1})$ , где  $a \sim D_0 r_0$  ( $D_0$  — коэффициент диффузии мономеров,  $r_0$  — постоянная решетки), а параметр  $\alpha$  принадлежит физически значимому интервалу  $0 \leq \alpha \leq 1$ . С учё-

том постоянного источника  $G$ , равного количеству мономеров, образующихся в единице объема в единицу времени, система уравнений (1) принимает вид

$$\begin{aligned} dc_1/dt &= G - ac_1(c_1 + A), \quad A = \sum_{k=1}^{\infty} c_k k^{\alpha}, \\ dc_k/dt &= ac_1(c_{k-1}(k-1)^{\alpha} - c_k k^{\alpha}), \quad k \geq 2. \end{aligned} \quad (2)$$

Система (2) описывает кластеризацию однотипных дефектов и может, как уже отмечалось выше, моделировать кинетику сегрегации примесных атомов (при  $G=0$ ) или радиационно-индукционную сегрегацию ( $G \neq 0$ ), когда в веществе образуются атомы новых элементов. Для описания кинетики кластеризации радиационных дефектов — междуузлий и вакансий — в систему (2) необходимо, строго говоря, ввести члены, учитывающие процессы аннигиляции дефектов. Однако в ряде случаев этими процессами можно пренебречь. Например, часто подвижность одной из компонент пары Френкеля (обычно вакансий) много меньше подвижности другой (междуузлий). При этом в процессе радиационного воздействия образуются целые области с большой концентрацией однотипных дефектов (обычно вакансий). Подобная ситуация может реализоваться в полупроводниках (см., например, [6, 7]).

В системе (2) также не учитываются процессы «испарения» мономеров из кластеров и захват мономеров различного рода ловушками. Заметим, однако, что «испарением» можно пренебречь, если равновесная концентрация дефектов много меньше концентрации мономеров в системе. Захватом на ловушки дислокации, другие нарушения кристалла можно пренебречь, если их концентрация низка, например в случае монокристаллов, а темп генерации мономеров достаточно высок. Таким образом, несмотря на ряд ограничений, модель является достаточно общей и имеет широкий спектр применения.

Система уравнений, соответствующая системе (2), в которой учитывались все перечисленные выше процессы, изучалась численно в работах [8–10]. Следует отметить, что при численных исследованиях трудно выделить качественные закономерности поведения системы, тогда как аналитическое рассмотрение более простых моделей позволяет сделать это достаточно полно.

## 2. Анализ простейших моделей

Рассмотрение начнем с наиболее простых моделей  $\alpha=0$  и  $\alpha=1$ . Для последних удается найти явные выражения для решения системы (2), а также его асимптотики при  $t \rightarrow \infty$  и проверить адекватность других менее строгих методов решения системы. При  $\alpha=0$ ,  $G=0$  в безразмерных переменных имеем

$$\begin{aligned} dc_1/dt &= -c_1(c_1 + N), \quad N = \sum_{k=1}^{\infty} c_k, \\ dc_k/dt &= c_1(c_{k-1} - c_k), \quad k \geq 2. \end{aligned} \quad (3)$$

За единицу времени здесь принята величина  $(ac_0)^{-1}$ , где  $c_0$  — единица концентрации. Введение новой переменной

$$\tau = \int_0^t c_1(t') dt', \quad c_1^{-1} d/dt = d/d\tau \quad (4)$$

линеаризует систему (3). Решение последней нетрудно найти, используя преобразование Лапласа. Приведем результат для случая монодисперсных начальных условий  $c_k(0)=\delta_{k1}$ , отмечая уголком сверху зависимость от  $\tau$

$$\hat{c}_k(\tau) = (\tau^{k-1}/(k-1)! - \tau^k/k!) e^{-\tau}, \quad t = \int_{1-\tau}^{\tau} \frac{dv}{v} \exp(1-v). \quad (5)$$

Заметим, что при  $t \rightarrow \infty$  ( $\tau \rightarrow 1$ ) функции  $c_k(t)$  экспоненциально стремятся к асимптотическому распределению  $c_1(\infty)=0$ ,  $c_k(\infty)=(ek(k-2)!)^{-1}$ . При  $\alpha=1$  решение системы может быть найдено методом производящей функции и для монодисперсных начальных условий имеет вид

$$c_k(t) = [(1-2e^{-t})^{k-1} - k^{-1}(1-2e^{-t})^k] [2(1-e^{-t})]^{-k}. \quad (6)$$

В этом случае также наблюдается экспоненциальная релаксация к асимптотическому распределению  $c_k(\infty)=(1-k^{-1})2^{-k}$  при  $t \rightarrow \infty$ . Можно показать, что такой характер асимптотики является общим для всех моделей  $0 \leq \alpha \leq 1$  в системах без источника ( $G=0$ ) независимо от начальных условий.

При наличии в системе источника для модели  $\alpha=0$  имеем

$$dc_1/dt = 1 + (c_1 + N)c_1, \quad dc_k/dt = c_1(c_{k-1} - c_k), \quad k \geq 2, \quad (7)$$

где за единицу времени для систем с источником принято  $t^*=(aG)^{-1/2}$ , а за единицу концентрации  $c^*=(G/a)^{1/2}$ . Для моментов нулевого и первого порядков  $N$  и  $M$  получим

$$dN/dt = 1 - c_1 N, \quad dM/dt = 1, \quad (8)$$

где  $N = \sum_{k=1}^{\infty} c_k$  представляет собой полное количество кластеров, а  $M = \sum_{k=1}^{\infty} kc_k$  — общее количество частиц в единице объема, так что условие  $dM/dt = \text{const}$  выражает закон сохранения числа частиц в системах с источником.

Из (7) и (8) получаем замкнутое уравнение для  $c_1(t)$

$$\dot{c}_1 - \dot{c}_1^2/c_1 + \dot{c}_1/c_1 + 2c_1\dot{c}_1 + c_1^3 = 0,$$

из которого определяем асимптотику при  $t \rightarrow \infty$

$$c_1(t) \simeq (3t)^{-1/2}, \quad \tau \simeq (3t)^{1/2}/2. \quad (9)$$

Чтобы понять поведение решения при  $k \gg 1$ , заменим в правой части (7) разностный оператор дифференциальным и решим получающееся волновое уравнение

$$\left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial k} \right) \hat{c}_k(\tau) = 0, \quad \hat{c}_k(\tau) \simeq \hat{c}_1(\tau - k) \simeq [2\pi(1 - k/\tau)]^{-1/2}. \quad (10)$$

Этот результат можно вывести более строго. Решая (7) рекуррентно, найдем

$$\hat{c}_{k+2}(\tau) = \frac{1}{k!} \int_0^{\tau} dv \hat{c}_1(\tau - v) v^k \exp(-v). \quad (11)$$

В области (которую можно назвать скейлинговой)

$$\tau \rightarrow \infty, \quad k \rightarrow \infty, \quad x = k/\tau = \text{fix} < 1,$$

оценивая интеграл (11) методом перевала, находим

$$\hat{c}_{k+2}(\tau) \simeq \frac{\exp(k \ln k - k)}{k!} \int_{-\infty}^{\infty} dW \hat{c}_1(\tau - k + W) \exp\left(-\frac{W^2}{2k}\right) \simeq \hat{c}_1(\tau - k) \quad (12)$$

в полном соответствии с ранее полученным ответом (10). В области  $k/\tau > 1$  решение  $\hat{c}_k(\tau)$ , как показывает анализ (11), экспоненциально быстро убы-

вает, поэтому при проведении вычислений с точностью до экспоненциаль но малых членов суммирование по  $k$  можно проводить до  $k_{\max} = \tau$ . Эти соображения позволяют вычислить моментную функцию

$$\hat{M}_\gamma(\tau) = \sum_{k=1}^{\infty} k^\gamma c_k \simeq \int_1^{\tau} \frac{k^\gamma dk}{2^{1/2} (\tau - k)^{1/2}} \simeq \frac{\Gamma(\gamma + 1) \Gamma(3/2)}{\Gamma(\gamma + 3/2)} \frac{(2\tau)^{-\frac{2\gamma+1}{2}}}{2^\gamma}. \quad (13)$$

Учитывая, что  $t = (2\tau)^{1/2}/3$ , запишем (11) и (13) в «реальном» времени

$$c_k(t) = [(3t)^{1/2} - 2k]^{-1/2}, \quad k_{\max} = k \gg 1, \quad (14)$$

$$M_\gamma(t) = \frac{\Gamma(\gamma + 1) \Gamma(3/2)}{\Gamma(\gamma + 3/2)} \frac{(3t)^{-\frac{3}{2}}}{2^\gamma}, \quad k_{\max} = \frac{(3t)^{1/2}}{2}. \quad (15)$$

Заметим, что при  $\gamma = 0$  и  $\gamma = 1$  из (15) получаем соотношения для  $N$  и  $M$ , которые также непосредственно следуют из (8). Также отметим, что при  $t \rightarrow \infty$   $k/t \ll 1$ ,  $c_k(t) = c_1(t) = (3t)^{-1/2}$ .

В модели  $\alpha = 1$  с источником удается найти точное решение при моно дисперсных начальных условиях

$$c_k(t) = t^{k-1} (1+t)^{-k} \simeq t^{-1} \quad \text{при } t \rightarrow \infty, \quad (16)$$

$$M_\gamma(t) = t^{-1} \sum_{k=1}^{\infty} k^\gamma \left( \frac{t}{1+t} \right)^k \simeq t^\gamma \Gamma(1+\gamma) \quad \text{при } t \rightarrow \infty.$$

Асимптотика решения (16) может быть также получена менее строгим методом, основанным на использовании соответствующего волнового уравнения. Последний удобен для исследования более сложных моделей.

### 3. Анализ моделей при $0 < \alpha < 1$

Запишем систему (2) в безразмерном виде

$$dc_1/dt = 1 - c_1(c_1 + A), \quad \frac{dc_k}{dt} = c_1((k-1)^\alpha c_{k-1} - k^\alpha c_k), \quad A = M_\alpha. \quad (17)$$

Как было показано выше, при  $\alpha = 0$  и  $\alpha = 1$  асимптотические зависимости для функций  $c_k(t)$  имеют степенной вид:  $c_k \sim t^{-\beta}$ , где  $\beta = 1/3$  при  $\alpha = 0$  и  $\beta = 1$  при  $\alpha = 1$ . Поэтому естественно предположить, что решение при произвольном  $0 < \alpha < 1$  имеет такой же вид с параметром  $\beta$ , лежащим в интервале  $1/3 < \beta < 1$ . Если  $\beta < 1$ , то  $dc_k/dt \ll c_1 c_k$  при  $t \rightarrow \infty$  и величинами  $dc_k/dt$  в первом приближении можно пренебречь. В результате при  $k/t \ll 1$  приходим к асимптотическим соотношениям

$$c_k(t) = B k^{-\alpha} t^{-\beta}, \quad A(t) = t^\beta B^{-1}. \quad (18)$$

Для определения констант  $B$  и  $\beta$  перейдем к переменной  $\tau$

$$\begin{aligned} \tau &= B(1-\beta)^{-1} t^{1-\beta}, \quad A(\tau) = \tau^{\frac{\beta}{1-\beta}}(1-\beta)^{-1}, \\ c_k(\tau) &= B [B(1-\beta)^{-1}]^{\frac{\beta}{1-\beta}} \tau^{-\frac{\beta}{1-\beta}} k^{-\alpha}. \end{aligned} \quad (19)$$

Чтобы найти распределение  $\hat{c}_k(\tau)$  при  $k/\tau \sim 1$ , запишем, как и прежде,  $k$ -е уравнение системы в «волновом» виде

$$(\partial/\partial\tau + \partial/\partial m)(k^\alpha c_k(\tau)) = 0, \quad m = k^{1-\alpha}(1-\alpha)^{-1}, \quad (20)$$

решением которого будет функция  $\hat{c}_k(\tau) = f(\tau - m) k^{-\alpha}$ . При  $\tau \gg m$   $\hat{c}_k(\tau) \simeq f(\tau) k^{-\alpha}$ . Сравнивая этот результат с соотношением (19), найдем  $f(\tau)$ . Так что

$$\hat{c}_k(\tau) = B [B(1-\beta)^{-1}]^{\frac{\beta}{1-\beta}} (\tau - m)^{-\frac{\beta}{1-\beta}} k^{-\alpha}, \quad (21)$$

где  $k_{\max} - k \gg 1$ , с оценкой для  $k_{\max}$  вида  $m(k_{\max}) = \tau$ . Подставляя (21) в выражение  $\hat{A}(\tau) = \hat{M}_a(\tau)$  и проводя преобразования, правомерные при  $\beta < 1/2$  (при  $\beta \geq 1/2$  интеграл расходится), получим

$$\hat{A}(\tau) \approx \int_1^{k_{\max}} dk k^\alpha \hat{c}_k(\tau) = B \left( \frac{B}{1-\beta} \right)^{\frac{\beta}{1-\beta}} (1-\alpha)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-\alpha}\right) \Gamma\left(\frac{1-2\beta}{1-\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-\alpha} + \frac{1-2\beta}{1-\beta}\right)} \tau^{1+\frac{\alpha}{1-\alpha}-\frac{\beta}{1-\beta}}. \quad (22)$$

Сравнивая результат с соотношением (19) для  $\hat{A}(\tau)$ , найдем константы

$$B = \frac{(1-\beta)^\beta}{(1-\alpha)^{\alpha\beta}} \left[ \frac{\Gamma\left(\frac{1}{1-\alpha} + \frac{1-2\beta}{1-\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-\alpha}\right) \Gamma\left(\frac{1-2\beta}{1-\beta}\right)} \right]^{\frac{\beta(1-\alpha)}{1-\beta}}, \quad (23)$$

откуда видно, что условием самосогласованности является ограничение на параметр  $\alpha$ :  $0 \leq \alpha < 1/2$ .

Приведем также результат вычисления моментной функции для этого интервала  $\alpha$

$$M_\gamma(t) = \left( \frac{B}{2\beta} \right)^{\frac{\gamma-1}{1-\alpha}} \frac{\Gamma\left(\frac{5-4\alpha}{2-2\alpha}\right) \Gamma\left(\frac{\gamma-\alpha+1}{1-\alpha}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-\alpha}{1-\alpha}\right) \Gamma\left(\frac{2\gamma+3-4\alpha}{2-2\alpha}\right)} t^{\frac{2\gamma-2\alpha+1}{3-2\alpha}}. \quad (24)$$

В случае  $\alpha \geq 1/2$  интеграл в (22) содержит не имеющую физического смысла расходимость на верхнем пределе. Последняя связана с использованием выражения (21) для  $\hat{c}_k(\tau)$  в области  $\tau - m \rightarrow 0$ , т. е. с нарушением условия  $k_{\max} - k \gg 1$ . Не зная точного поведения  $\hat{c}_k(\tau)$ , в рассматриваемой области можно обойти эту трудность «обрезанием» верхнего предела интегрирования. При  $\alpha \leq 1/2$  это не отразится на конечном результате, а при  $\alpha > 1/2$  появятся неизвестные константы, однако, как можно показать, характер временной зависимости не изменится. Проводя оценку интеграла с «обрезанным» верхним пределом и сравнивая результат с выражением (19) для  $\hat{A}(\tau)$ , найдем, что при  $1/2 < \alpha < 1$   $\beta = \alpha$ , так что

$$c_k(t) \sim k^{-\alpha} t^{-\alpha}, \quad k/t \ll 1, \quad M_\gamma(t) = t^\gamma, \quad \text{при } t \rightarrow \infty. \quad (25)$$

В случае  $\alpha = 1/2$  рассуждения несколько удлиняются. Пусть  $\hat{c}_1(\tau) = -f(\tau)$ , тогда, как и прежде,  $\hat{A}(\tau) = \hat{c}_1^{-1}(\tau)$ ,  $\hat{c}_k(\tau) = f(\tau - m)/k^{1/2}$ , где  $m = k^{1-\alpha}(1-\alpha)^{-1} = 2k^{1/2}$ , и  $\tau - m \gg 1$ . Функцию  $f(x)$  ищем в виде  $f(x) = -x^{-1}b^{-1}(x)$ , где  $b(x)$  — медленно меняющаяся функция. В новых обозначениях выражение для  $\hat{A}(\tau)$  можно записать в виде

$$\hat{A}(\tau) \approx \frac{1}{2} \int_a^\tau dx \frac{(\tau-x)}{xb(x)} = \frac{\tau}{2} \int_a^\tau \frac{dx}{xb(x)} - \int_a^\tau \frac{dx}{b(x)}, \quad (26)$$

где  $a$  — константа «обрезания». Предположим, что при  $\tau \gg 1$  вторым членом в левой части (26) можно пренебречь по сравнению с первым, который тогда можно приравнять  $\hat{c}_1^{-1}(\tau)$  ( $\hat{c}_1(\tau) = \tau^{-1}b^{-1}(\tau)$ ). Дифференцируя полученное равенство по  $\tau$ , имеем

$$\tau b'(\tau) = 2b'(\tau),$$

откуда  $b(x) = (\ln x)^{1/2}$ . Справедливость использованного выше предположения проверяется прямым вычислением. Зная  $b(x)$ , можно определить все интересующие величины

$$c_k(t) \simeq t^{-1/2} (2 \ln t)^{-1/4} k^{-1/2}, \quad k \ll t, \quad M_\gamma(t) = t^\gamma (2 \ln t)^{\frac{1}{2}}. \quad (27)$$

Зависимости  $c_k(t)$  при  $k/t \sim 1$  получим из выражения для  $\hat{c}_k(\tau)$ , учитывая, что  $m=2k^{1/2}$ , а  $\tau \simeq 2t^{1/2}(2 \ln t)^{1/4}$ . Заметим, что соотношения (27) справедливы с точностью до  $\ln(\ln t)/\ln t$ , т. е. выход решений на асимптотику происходит при  $\alpha=1/2$  крайне медленно. Важной характеристикой системы является средний радиус кластеров, определяемый соотношением

$$\bar{R}_\alpha(t) = \sum_{k=1}^{\infty} k^\alpha c_k(t) \left[ \sum_{k=1}^{\infty} c_k(t) \right]^{-1} = \frac{M_\alpha(t)}{M_0(t)}, \quad (28)$$

$\bar{R}_\alpha(t)$  и полную концентрацию кластеров  $N(t)=M_0(t)$  можно определить, используя выражения (16), (24), (25), (27) для моментных функций.

### 3. Обсуждение результатов

Проведенное выше исследование асимптотической кинетики модельных систем уравнений с ядром  $K_{ij}=a(i^{\alpha} \delta_{j1} + j^{\alpha} \delta_{i1})$  отражающим специфику коагуляции точечных дефектов в твердом теле, позволяет выявить следующие закономерности этих процессов.

1) При отсутствии источника мономеров система экспоненциально-релаксирует к стационарному распределению для всех значений  $0 \leq \alpha \leq 1$ . Скорость релаксации и вид асимптотического распределения зависят от начальных условий.

2) В системе с источником асимптотика решений не зависит от начальных условий. Важной качественной особенностью таких систем является скейлинговый характер решений

$$c_k(t) \simeq t^{-\beta} \Phi(k/t^z) \quad \text{при } k \rightarrow \infty, \quad t \rightarrow \infty, \quad k/t^z = \text{fix},$$

где скейлинговые показатели  $\beta$ ,  $z$  и вид функции  $\Phi(x)$  зависят от параметра  $\alpha$ . Зависимости этих и некоторых других представляющих интерес показателей от  $\alpha$  приведены в таблице. Интересно отметить наличие особой точки  $\alpha=1/2$ , в которой появляются логарифмические поправки в решении.

Скейлинговые показатели основных функций

$\alpha$	$c_k \sim k^{-\alpha} t^{-\beta}$	$k_{\max} \sim t^z$	$\bar{R}_\alpha \sim t^r$	$N \sim t^n$	$M_\gamma \sim t^{m_\gamma}$
	$\beta$	$z$	$r$	$n$	$m_\gamma$
$0 \leq \alpha < 1/2$	$\frac{1}{3-2\alpha}$	$\frac{2}{3-2\alpha}$	$\frac{2\alpha}{3-2\alpha}$	$\frac{1-2\alpha}{3-2\alpha}$	$\frac{2\gamma+1-2\alpha}{3-2\alpha}$
$\alpha = 1/2$	$1/2$	$1$	$1/2$	$0$	$\gamma$
Степенная зависимость умножается на . . . . .	$(\ln t)^{-1/4}$	$(\ln t)^{-1/2}$	$(\ln t)^{-1/4}$	$(\ln t)^{1/2}$	$(\ln t)^{\frac{1-\gamma}{2}}$
$1/2 < \alpha < 1$	$\alpha$	$1$	$\alpha$	$0$	$\gamma$

3) Отметим также, что при  $\alpha=0$  полное число кластеров растет, тогда как средний радиус остается постоянным. Это означает, что весь приток мономеров расходуется на образование новых скоплений и в системе возникает большое число мелких кластеров. При  $\alpha > 1/2$ , напротив, полное число кластеров остается постоянным, а их средний радиус быстро растет. Поток мономеров при этом идет на увеличение уже имеющихся скоплений и в системе образуется небольшое число крупных кластеров. На интервале  $0 \leq \alpha < 1/2$  наблюдается постепенный переход от первого режима эволюции ко второму. Точка  $\alpha=1/2$  является переходной — полное число кластеров растет, но логарифмически медленно.

Обсудим некоторые известные дефектные скопления. В случае вакансационных пор в металлах принято считать, что они представляют собой компактные сферические образования, так что радиус связан с количеством частиц условием  $R_k \sim k^{1/3}$ , т. е.  $\alpha = 1/3$ , тогда

$$R_{\text{void}} \sim t^{2/3}, \quad N_{\text{void}} \sim t^{1/3}.$$

Другим примером дефектных скоплений может служить скопление междоузлий, которые образуют плоские диски. В этом случае  $R_k \sim k^{1/2}$ , т. е.  $\alpha = 1/2$ , следовательно,

$$R_{\text{disk}} \sim t^{1/2} (\ln t)^{-1/4}, \quad N_{\text{disk}} \sim (\ln t)^{1/2}.$$

Таким образом, для междоузельных комплексов характерен гораздо более быстрый, чем для вакансационных пор, рост среднего радиуса скоплений при значительно более медленном увеличении полного числа кластеров. В численных экспериментах [10] наблюдалась та же тенденция: образование большого числа мелких вакансационных пор и значительно меньшего числа крупных междоузельных дисков (подчеркнем, однако, что в [10] исследовалась система уравнений с учетом аннигиляции, испарения и т. д.; число уравнений при этом было конечное).

В работе [11] при экспериментальном исследовании радиационно-индуцированной сегрегации также было обнаружено, что радиус плоских скоплений в среднем в несколько раз превосходит радиус сферических.

Эти примеры свидетельствуют о качественном согласии модельного описания с экспериментом. Вопрос об уровне количественного согласия в настоящее время остается открытым ввиду отсутствия достаточно детального экспериментального материала.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Чандрасенар С. Стохастические проблемы в физике и астрономии. М., 1947. 168 с.
- [2] Волоцук В. М. Кинетическая теория коагуляции. Л., 1984. 283 с.
- [3] Смирнов Б. М. // УФН. 1986. Т. 149. № 2. С. 177—217.
- [4] Jullien R. // Contemp. Phys. 1987. V. 28. N 5. P. 477—493.
- [5] Witten T. A. Jr., Sander L. M. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. N 14. P. 1400—1403.
- [6] Винецкий В. Л., Холодарь Г. А. Радиационная физика полупроводников. Клев, 1979. 336 с.
- [7] Гани В. В., Ганатаров Л. В., Волобуев А. В., Резниченко Э. А. // АЭ. 1987. Т. 62. № 2. С. 91—95.
- [8] Kiritany M. // J. Phys. Soc. Jap. 1983. V. 35. P. 95—105.
- [9] Choi Y. H., Bement A. L., Russel K. C. // Proc. Intern. Conf. held at Gatlingburg. 1975. Oct. 1—3. V. 11. P. 1.
- [10] Рязанов А. И., Сидоренко А. Д., Филиппов С. С. // Препринт ИАЭ-4224/6. М., 1985. 36 с.
- [11] Щербак В. И., Тарашков В. П., Быков В. Н., Руденко В. А. // АЭ. 1986. Т. 60. № 3. С. 190—193.

ВНИИТ  
Москва

Поступило в Редакцию  
11 апреля 1988 г.  
В окончательной редакции  
20 сентября 1988 г.