

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ  
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ  
ХАРЬКОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени В. Н. КАРАЗИНА

Серия «Проблемы теоретической  
и математической физики»

## **ПРОБЛЕМЫ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

**Научные труды**

**Выпуск 3**

Харьков – 2019

УДК 53.01  
П 78

**Серия «Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды»  
под общей редакцией академика А. Г. Загороднего, академика Н. Ф. Шульги**

**Рецензенты:**

академик НАН Украины **Бакай А. С.**;  
академик НАН Украины **Семиноженко В. П.**

*Утверждено к печати решением Ученого совета  
Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина  
(протокол № 5 от 22.04.2019 г.)*

**Проблемы** теоретической физики. Научные труды. Выпуск 3 / Ю. Л. Болотин, В. Е. Захаров, В. И. Карась, В. М. Куклин, Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, В. И. Соколенко, А. В. Тур, А. А. Туркин, В. В. Яновский ; под общей редакцией А. Г. Загороднего, Н. Ф. Шульги, ред. вып. В. В. Яновский. – Х. : ХНУ имени В. Н. Каразина, 2019. – Вып. 3. – 398 с. (Сер. «Проблемы теоретической и математической физики».)

ISBN 978-966-285-594-4

Обсуждается неравновесная кинетика электрон-фононной подсистемы кристалла при наличии переменных электрических и магнитных полей. Рассмотрены результаты исследований кинетики фазовых превращений и стабильности фаз в облучаемых сплавах. Обсуждаются механизмы возникновения скалярных полей и формирование пространственно неоднородной крупномасштабной структуры современной Вселенной, а также происхождение «тёмной энергии» и «тёмной материи». Рассмотрена физика планковских масштабов и предельно достижимые величины в нашей Вселенной. Обсуждается развитие модуляционной неустойчивости интенсивных периодических структур в волновых и неволновых средах.

Для ученых в области естествознания, преподавателей, аспирантов и студентов старших курсов физических факультетов.

**УДК 53.01**

ISBN 978-966-285-144-1 (вып. 1)

© Национальная академия наук Украины, 2014  
© Харьковский национальный университет имени  
В. Н. Каразина, 2014

ISBN 978-966-285-377-5 (вып. 2)

© Национальная академия наук Украины, 2017  
© Харьковский национальный университет имени  
В. Н. Каразина, 2017

ISBN 978-966-285-594-4 (вып. 3)

© Национальная академия наук Украины, 2019  
© Харьковский национальный университет имени  
В. Н. Каразина, 2019  
© Ю. Л. Болотин, В. Е. Захаров, В. И. Карась, В. М. Куклин,  
Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, В. И. Соколенко, А. В. Тур,  
А. А. Туркин, В. В. Яновский, 2019  
© Дончик И. Н., макет обложки, 2019

# О Г Л А В Л Е Н И Е

---

От редакторов научных трудов ..... 7

**ЧАСТЬ I. НЕРАВНОВЕСНАЯ КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ КРИСТАЛЛА ПРИ ДЕЙСТВИИ ПЕРЕМЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ КАК ОСНОВА ЭЛЕКТРО- И МАГНИТО-ПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТОВ..... 9**

В.Е. Захаров, В.И. Карась, В.И. Соколенко

1. Введение ..... 10

2. Изменения физико-механических свойств и структуры феррито-перлитной стали 15Х2НМФА вследствие жесткой низкотемпературной деформации и действия переменного магнитного поля ..... 12

3. Исследования в режиме ползучести особенностей пластического течения поликристаллического никеля в переменном магнитном поле при температуре 77 К ..... 21

4. Экспериментальные исследования в режиме ползучести особенностей пластического течения никеля в гармоническом и однополярном магнитном поле в условиях стабильной температуры 77 К ..... 27

5. Электропластический эффект в металлах ..... 29

6. Неравновесная кинетика электрон-фононной подсистемы кристалла в электрическом поле как основа электропластического эффекта ..... 36

7. Заключение ..... 51

Список литературы ..... 55

**ЧАСТЬ II. ТЕОРИЯ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВАХ ЗАМЕЩЕНИЯ ПОД ОБЛУЧЕНИЕМ..... 58**

А. А. Туркин

1. Введение ..... 59

2. Модель радиационно-индуцированной сегрегации в концентрированных сплавах ..... 74

2.1. Формулировка модели сегрегации и обсуждение пределов ее применимости .....	75
2.2. Подход эффективной среды для бинарных сплавов.....	79
2.3. Устойчивость квазистационарного состояния.....	86
2.4. Выводы.....	89
3. Фазовая стабильность при бескаскадном облучении.....	90
3.1. Рост выделений под облучением.....	90
3.2. Структурно-фазовые диаграммы.....	99
3.3. Сравнение с экспериментальными наблюдениями .....	102
3.4. Обсуждение .....	104
3.5. Выводы.....	105
4. Влияние сегрегации и каскадного разупорядочения на равновесие фаз.....	106
4.1. Формулировка модели.....	106
4.2. Структурно-фазовые диаграммы при каскадообразующем облучении.....	112
4.3. Сравнение с экспериментальными данными .....	113
4.4. Выводы.....	115
5. Фазовые превращения при низкотемпературном каскадообразующем облучении.....	116
5.1. Эволюция функции распределения пластинчатых выделений .....	117
5.2. Моделирование низкотемпературного радиационно- индуцированного атомного перемешивания в двухфазных системах .....	127
5.3. Выводы.....	137
6. Формирование стационарного распределения выделений вторых фаз в сплавах при каскадообразующем облучении.....	138
6.1. Введение.....	139
6.2. Описание модели .....	142
6.3. Численный метод решения эволюционных уравнений для функции распределения выделений.....	146
6.4. Результаты моделирования .....	152
6.5. Зависимость ширины стационарной функции распределения от параметров каскадов.....	162
6.6. Выводы.....	164
7. Кинетика фазовых превращений в системах с сильными гетерофазными флуктуациями .....	166
7.1. Моделирование кинетики диффузионного распада в системах с сильными гетерофазными флуктуациями (без облучения).....	167
7.2. Эволюция ансамбля выделений в бинарных сплавах при каскадообразующем облучении.....	178
7.3. Выводы.....	188
8. Заключение.....	189
Список литературы.....	190

<b>ЧАСТЬ III. ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СПОНТАННО НАРУШЕННЫЕ СИММЕТРИИ В РАННЕЙ ВСЕЛЕННОЙ</b> .....	200
Э.А. Пашицкий, В.И. Пентегов	
Введение. Краткий исторический экскурс .....	201
1. Скалярные поля и эволюция ранней Вселенной.....	204
1.1. Взаимодействие скалярного и гравитационного полей.....	205
1.2. Фазовый переход первого рода в ранней холодной Вселенной.....	208
1.3. Эволюция ранней Вселенной, заполненной веществом с уравнением состояния $P > \varepsilon/3$ : сценарий «гиперинфляции».....	211
1.4. Инфляция Вселенной, заполненной неидеальным релятивистским ферми-газом с короткодействующим отталкиванием между частицами.....	220
1.5. Процесс «скатывания» Вселенной в минимум потенциала скалярного поля и проблема нагрева Вселенной .....	227
2. О квантовой природе гравитации .....	230
2.1. Спонтанное нарушение калибровочной симметрии гравитонов и механизм генерации массы тензорных бозонов.....	233
2.2. Подobie между электрослабыми и гравитационными силами и происхождение гравитационной постоянной Ньютона .....	236
2.3. Фундаментальное скалярное поле как результат неустойчивости нейтрального фермионного вакуума, заполненного безмассовыми фермионами с разными знаками зарядов .....	242
3. Аннигиляционный нагрев и формирование неоднородной структуры современной Вселенной.....	246
3.1. «Большой взрыв» и нагрев Вселенной за счёт аннигиляции вещества и антивещества .....	247
3.2. Формирование крупномасштабной неоднородной структуры современной Вселенной: сценарий «стохастической инфляции» .....	250
Заключение .....	252
Список литературы .....	254
 <b>ЧАСТЬ IV. ФИЗИКА ПЛАНКОВСКОГО МАСШТАБА         В ТЕРМИНАХ ПРЕДЕЛЬНЫХ ВЕЛИЧИН</b> .....	 258
Ю.Л.Болотин, А.В.Тур, В.В.Яновский	
1. Введение .....	259
2. Квантовые проявления классической гравитации .....	263
2.1. Обобщённый принцип неопределенности.....	264
2.2. Минимальная длина.....	267
2.3. Принцип максимальной силы.....	269
2.4. Модифицированные планковские единицы .....	273
2.5. Пространственно-временная пена .....	275
3. Новая физика, порождаемая синтезом квантовой механики и гравитации.....	282
3.1. Связь больших и малых масштабов (IR-UV соответствие) .....	282
3.2. Информационные пределы .....	287

3.3. Дискретная структура пространства и голография.....	290
3.4. Предельное ускорение .....	296
3.5. Нарушение лоренц-инвариантности.....	300
3.6. Космологические аспекты физики предельных величин .....	303
Заключение.....	308
Список литературы.....	310
<b>ЧАСТЬ V. МОДУЛЯЦИОННЫЕ НЕУСТОЙЧИВОСТИ.....</b>	<b>313</b>
В. М. Куклин	
Введение.....	314
1. Самоподобные структуры и модуляционная неустойчивость.....	317
2. Возникновение волн аномальной амплитуды.....	330
3. Волны-убийцы в океане. Механизм образования волн аномальной амплитуды .....	338
4. Модуляционная неустойчивость слоя конвекции и эффект гидродинамического динамо .....	352
5. Структуры на поверхности и в объеме кристаллов .....	364
6. Параметрическая и/или модуляционная неустойчивости? .....	369
Список литературы.....	372

# ОТ РЕДАКТОРОВ НАУЧНЫХ ТРУДОВ

---

Предлагаемый читателю третий выпуск научных трудов содержит современные результаты в областях физики, в которых присутствует значительный вклад украинской школы теоретической физики.

Обзорные работы, как правило, более продуманы, формируются в течение десятков лет, в наибольшей степени свободны от поспешных и неапробированных временем решений, являются собой весьма ценный для науки материал, на основе которого постепенно и основательно строится величественное здание науки. Можно надеяться, что представленные в данных сборниках научных трудов обзорные работы найдут свое место в этом процессе.

В третий выпуск научных трудов включен ряд обзоров научных исследований, полученных в последние годы в области теоретической физики в направлениях, которые на протяжении многих лет интенсивно развиваются в Украине, в соседних странах и получили всемирную известность.

Сборник начинается с обзорной работы выдающегося представителя советской нелинейной физики В. Е. Захарова и В. И. Карася, В. И. Соколенко в которой предложен подход к описанию электро- и магнито-пластического эффектов. Основываясь на действии индуцированных полей на электронную подсистему, показано, что передача энергии в фононную подсистему приводит к их сильно неравновесному состоянию. Такое неравновесное распределение фононов значительно сильнее влияет на дефектную структуру кристаллов по сравнению с их равновесным распределением фононов. Это приводит к существенному изменению дефектной структуры и соответственно к изменению свойств материала, которые собственно и определяются его дефектной структурой.

Обзор А. В. Туркина посвящен теории фазовых превращений в неупорядоченных бинарных сплавах замещения под облучением, ки-

нетике фазовых превращений и стабильности фаз в облучаемых сплавах. Обзор насыщен новыми результатами. Он важен для решения многих проблем реакторостроения и, в частности, для прогнозирования стабильности материалов в условиях облучения и оптимизации состава конструкционных реакторных материалов.

Следующий обзор Э. А. Пашицкого и В. И. Пентегона затрагивает фундаментальные проблемы квантовой космологии и, в определенном смысле, демонстрирует связи между различными областями физики. Исходя из представлений о квантовых макроскопических явлениях физики конденсированных состояний, обсуждаются формирование пространственно неоднородной крупномасштабной структуры современной Вселенной, а также происхождение «тёмной энергии» и «тёмной материи». В обзоре предпринята попытка понять явления в диапазоне энергий и температур, охватывающих 32 порядка.

Естественное продолжение эта тема находит в обзоре Ю. Л. Болотина, А. В. Тур и В. В. Яновского, посвященном физике предельно достижимых значений физических величин в нашей Вселенной. По сути это означает переход в область физики, которая может быть названа физикой планковских масштабов. В нем обсуждаются следствия, которые связаны с существованием предельных значений, и закономерности, которые могут возникать в еще не созданной квантовой гравитации.

В обзоре В. М. Куклина обсуждается спектр физических явлений, тесно связанных с механизмом модуляционной неустойчивости. Охватывая анализ общих свойств модуляционной неустойчивости и влияние на нее различных факторов, демонстрируются ее яркие проявления в океанском волнении, в конвективных структурах и даже кристаллических материалах. Обсуждаются общие черты параметрических и модуляционных неустойчивостей.

**Академик НАН Украины  
Академик НАН Украины**

**А. Г. Загородний  
Н. Ф. Шульга**

УДК 538.91, 538.95, 538.97

PACS numbers: 61.72.Ff, 61.72.Hh, 62.20.Hg, 63.20.kd, 63.20.kp, 75.80.+q, 83.60.Np

## ЧАСТЬ I

---

# НЕРАВНОВЕСНАЯ КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ КРИСТАЛЛА ПРИ ДЕЙСТВИИ ПЕРЕМЕННЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ КАК ОСНОВА ЭЛЕКТРО- И МАГНИТО-ПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТОВ

**В.Е. Захаров**

*Физический институт им. П.Н. Лебедева, Российской академии наук,  
Ленинский проспект, 53, Москва, 119991, Российская Федерация*

**В.И. Карась**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»  
Национальной академии наук Украины, ул. Академическая, 1,  
Харьков, 61108, Украина*

*Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4.  
Харьков, 61022, Украина*

**В.И. Соколенко**

*Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»  
Национальной академии наук Украины, ул. Академическая, 1,  
Харьков, 61108, Украина*

**Т**еоретические экспериментальные исследования и численное моделирование кинетических процессов в магнитных кристаллах, находящихся в изменяющемся магнитном поле и/или импульсном электрическом поле, были направлены на

установление основных механизмов их влияния на структуру, механические, диссипативные и магнитные характеристики магнитных кристаллов (например сильно деформированной феррито-перлитной стали 15Х2НМФА и никеля).

Представлены результаты последовательного кинетического рассмотрения неравновесной динамики электрон-фононной подсистемы магнитного кристалла в электрическом поле на основе предложенного метода численного решения системы уравнений Больцмана для функций распределения электронов и фононов без разложения функции распределения электронов в ряд по энергии фононов. Показано, что электрическое поле возбуждает электронную подсистему, которая, передавая энергию в фононную подсистему, создает большое количество коротковолновых фононов, эффективно влияющих на дефекты решетки (точечные, линейные, границы разных фаз), что приводит к перераспределению и уменьшению плотности дефектов кристаллической решетки, устранению повреждений, снижению локальных пиков напряжений и снижению степени деградации конструкционных свойств материалов.

Установлено, что под действием индукционного электрического поля функция распределения электронов становится неравновесной вблизи энергии Ферми и благодаря электрон-фононным столкновениям передает существенную энергию в фононную подсистему, формируя неравновесную функцию распределения фононов. На основе модифицированной модели Гранато-Люкке и Ландау-Гофмана с помощью рассчитанной функции распределения фононов показано, что сила влияния фононов на дислокации значительно больше, чем это было бы в случае термодинамического равновесия при нагревании образца на наблюдаемые в эксперименте 12 К.

Ключевые слова: численное моделирование, кинетические процессы, магнитные кристаллы, магнитное поле, электрическое поле, структура, механические, диссипативные и магнитные характеристики.

## 1. В В Е Д Е Н И Е

Открытие магнитоэластического эффекта (МПЭ) [1, 2] и электропластического эффекта (ЭПЭ) [3-6] стимулировало проведение широкого круга детальных исследований влияния включения постоянного и переменного магнитных полей на структуру и механические свойства ферро- и антиферромагнетиков [7]. Наблюдаемые эффекты связывались с изменением динамики дислокаций при их взаимодействии со спиновой подсистемой, а также изменениями характеристик барьеров.

В шестидесятых годах XX столетия было обнаружено явление резкого уменьшения устойчивости к пластическим деформациям металлов в случае воздействия потоков заряженных частиц или электромагнитного излучения, а также импульсов электрического тока высокой плотно-

сти ( $J=10^8-10^9$  А/м<sup>2</sup>). Это явление получило название электропластический эффект (ЭПЭ) [3]. Этот эффект уже применяется в промышленности (волочение, плющение, вытяжка, штамповка и прокатка металлических изделий [4-6]). Экспериментально были изучены проявления ЭПЭ при различных условиях, а также была установлена зависимость интенсивности эффекта от таких параметров, как: вид и скорость деформации образца, температура, амплитуда плотности тока, частота и длительность импульсов, направление тока, структурные характеристики кристаллических образцов.

Приведем некоторые экспериментальные закономерности ЭПЭ. В наиболее чистом виде ЭПЭ наблюдался в монокристаллах Zn, Cd, Sn, Pb, если в процессе деформации импульсный электрический ток с плотностью  $J = 10^8-10^9$  А/м<sup>2</sup> проходил через образцы или если образцы облучались ускоренными электронами (с энергией, меньшей пороговой для выбивания атома из узла решетки) в направлении скольжения дислокаций. ЭПЭ проявляет себя в импульсных уменьшениях деформирующего напряжения, необходимого для поддержания постоянной скорости деформации [3-6].

Для монокристаллов наблюдается сильно выраженная зависимость величины эффекта от ориентации деформируемых образцов. Зависимость ЭПЭ от величины плотности тока имеет пороговый характер, т. е. становится заметной, начиная с конкретных значений плотности импульсного тока. Эта величина зависит от вида деформации кристаллов, а также от температуры и скорости деформации. Например, для цинка при  $T = 77$  К она составляет  $4 \cdot 10^8-5 \cdot 10^8$  А/м<sup>2</sup> [5]. Увеличение частоты повторения импульсов тока снижает деформирующее пороговое значение напряжения, что также уменьшает величину сброса напряжения. Возрастание длительности импульса при постоянной амплитуде плотности тока увеличивает глубину сброса. Это явление было зарегистрировано как в тестах релаксации напряжений, так и в исследованиях ползучести [3-6]. Основные закономерности ЭПЭ, выявленные при деформации монокристаллов, можно наблюдать в более слабой форме и в экспериментах с поликристаллическими материалами. Но величина ЭПЭ снижается с уменьшением размера зерна и даже исчезает в нанокристаллах [6]. Таким образом, ЭПЭ – структурно-чувствительное явление.

Подобные явления наблюдаются при облучении материала пакетами импульсов ускоренных электронов. Объединение действия электрического тока с облучением заряженными частицами приводит к интенсификации эффекта [5].

Фундаментальный и прикладной интерес представляет влияние магнитного поля на структуру и физические свойства магнитных материалов, подверженных различным видам нагрузок (деформация, тепловое воздействие, облучение и т.п.), а также сварных соединений [7-11]. Результаты теоретических и экспериментальных исследований и численного моделирования кинетических процессов в немагнитных кристаллах, находящихся в магнитном поле, достаточно регулярно освеща-

ются, в частности, в журнале «Успехи физических наук» (см., например, в мартовском номере за 2017 год детальный обзор В.И. Альшица и др. «Физическая кинетика движения дислокаций в немагнитных кристаллах: взгляд через магнитное окно»), поэтому из-за ограниченности объема в нашем обзоре не приводятся.

## 2. ИЗМЕНЕНИЯ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ И СТРУКТУРЫ ФЕРРИТО-ПЕРЛИТНОЙ СТАЛИ 15Х2НМФА В СЛЕДСТВИЕ ЖЕСТКОЙ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ДЕФОРМАЦИИ И ДЕЙСТВИЯ ПЕРЕМЕННОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ [10, 11]

Цель этого раздела – изложение результатов изучения изменений в результате воздействия переменного магнитного поля структуры, механических, диссипативных и магнитных характеристик сильно деформированной феррито-перлитной стали 15Х2НМФА.

### 2.1. М а т е р и а л и м е т о д ы и с с л е д о в а н и я

Из подвергнутой стандартной заводской механико-термической обработке массивной заготовки феррито-перлитной стали 15Х2НМФА вырезались тонкие ( $h \sim 1$  мм) пластинки. Часть из них деформировалась прокаткой на 57 % при  $T \approx 90$  К. Из пластинок исходной и деформированной стали изготавливались образцы для механических испытаний с длиной рабочей части  $L = 15$  мм и площадью поперечного сечения  $S_1 = 2 \times 0,7$  мм<sup>2</sup> и  $S_2 = 2 \times 0,4$  мм<sup>2</sup>, соответственно, характеризовавшиеся сопротивлением при комнатной температуре  $\sim 3,1 \cdot 10^{-5}$  Ом·см и  $\sim 3,2 \cdot 10^{-5}$  Ом·см, соответственно. Механические характеристики образцов стали в исходном состоянии, деформированном состоянии и после воздействия переменного магнитного поля  $H \parallel L$  определялись в температурном интервале 138...293 К в условиях одноосного растяжения со скоростью  $10^{-3}$  с<sup>-1</sup>. Низкотемпературное термостатирование производилось в среде охлажденного бензина с точностью 0,5 К. Магнитное поле создавалось соленоидом, откалиброванным датчиком Холла. Для исключения из рассмотрения эффектов джоулева разогрева при магнитной обработке образцы омывались проточной водой. Путем варьирования напряженности магнитного поля  $H$  в

интервале  $4 \cdot 10^3 \dots 8 \cdot 10^4$  А/м и продолжительности воздействия  $t$  был определен оптимальный режим, который обеспечивал максимальный эффект изменения механических свойств деформированных образцов:  $4 \cdot 10^4$  А/м,  $t=900$  с.

Измерения полевых зависимостей намагниченности  $M(H)$  производились при  $T=300$  К на специальном магнетометре KRM-Z-MA. При измерениях широкая грань образца ориентировалась перпендикулярно магнитному полю. Измерения магнитных характеристик проводили на одном и том же образце до и после магнитной обработки. Из зависимостей  $M(H)$  определялись значения коэрцитивной силы  $H_c$ .

С использованием методики обратного крутильного маятника на частоте  $\sim 0,5$  Гц исследовались внутреннее трение  $\delta$  и модуль сдвига  $G$  образцов в различных структурных состояниях в области температур  $300 \dots 800$  К.

## 2.2. Результаты и обсуждение

**Механические характеристики.** В табл. 1 представлены характеристики прочности ( $\sigma_{02}$  – условный предел текучести,  $\sigma_B$  – предел прочности,  $\sigma_f$  – напряжение разрушения) и пластичности ( $\varepsilon_p$  – равномерное удлинение,  $\varepsilon_o$  – общее удлинение,  $\psi$  – поперечное сужение) в интервале температур  $293 \dots 138$  К стали 15Х2НМФА в исходном состоянии.

При  $T=293$  К значения  $\sigma_{02}$ ,  $\sigma_B$ ,  $\varepsilon_o$  и  $\psi$  хорошо соответствуют характеристикам этой стали по ТУ 08 93-013-00212179-2003. С уменьшением температуры происходит упрочнение, сопровождающееся снижением пластичности. Из табл. 1 также видно, что при понижении температуры от 218 до 138 К значение  $\sigma_f$  практически не изменяется, но поперечное сужение заметно снижается.

Таблица 1

**Механические характеристики стали 15Х2НМФА  
в исходном состоянии**

T, К	$\sigma_{02}$	$\sigma_B$	$\sigma_f$	$\varepsilon_p$	$\varepsilon_o$	$\psi$
	МПа			%		
293	500	620	1140	7	17	60
273	500	660	1230	7	16	60
258	580	730	1700	6	10	70
218	590	730	2060	6	10	71
138	700	900	2060	6	11	58

Для переходных ОЦК металлов и сплавов типичным является резкое повышение предела текучести при температурах ниже  $(0,15 \dots 0,2) T_{пл}$  ( $T_{пл}$  – температура плавления). С этим связывают изменение характера разрушения от вязкого до хрупкого, происходящее в до-

вольно широком интервале температур (см., например, [12]). В условиях испытаний на растяжение верхняя граница вязко-хрупкого перехода  $T_x^B$  определяется по началу снижения напряжения разрушения  $\sigma_f$  на фоне некоторого уменьшения поперечного сужения  $\psi$ . Фактографическим проявлением этой границы является появление признаков разрушения сколом на поверхности излома.

Учитывая сказанное выше, следует полагать, что  $T_x^B$  стали 15X2НМФА в исходном состоянии находится в температурном интервале 218...138 К. Ввиду того, что при снижении температуры испытаний от 218 К до 138 К величина  $\sigma_f$  практически не изменилась, но при этом значение  $\psi$  снизилось на  $\approx 18\%$ , верхнюю границу хрупко-пластического перехода можно оценить по нижнему значению температуры в указанном интервале, т.е.  $T_x^B \approx 138$  К ( $-135^\circ\text{C}$ ).

Следует отметить, что значения температуры вязко-хрупкого перехода  $T_{x0}$ , определяемые в условиях одноосного растяжения, ниже по сравнению с характеристиками, получаемыми при испытаниях на ударную вязкость, причем последние для стали 15X2НМФА значительно отличаются у разных авторов. Так, по данным [13]  $T_{x0}$  для состояния «сорбит отпуска» составляет  $-80^\circ\text{C}$  для малогабаритных образцов и  $-20^\circ\text{C}$  для стандартных образцов. Механические характеристики стали в деформированном состоянии представлены в табл. 2.

Из сравнения данных в табл. 1 и табл. 2 видно, что в результате сильной низкотемпературной деформации происходит типичное увеличение прочности и снижение пластичности.

Таблица 2

**Механические характеристики стали 15X2НМФА  
в деформированном состоянии**

Т, К	$\sigma_02$	$\sigma_B$	$\sigma_f$	$\varepsilon_p$	$\varepsilon_0$	$\psi$
	МПа			%		
293	810	910	1590	1,2	2,2	49
273	820	900	1200	1,0	2,0	40
258	880	950	1730	0,8	1,5	50
218	970	980	1920	0,6	1,7	54
198	980	1060	2100	0,5	1,7	54
168	1050	1070	2300	0,5	1,8	45
138	1080	1090	2280	0,5	1,8	39

Если говорить о верхней границе вязко-хрупкого перехода стали 15X2МНФА в деформированном состоянии, то снижение  $\psi$  на те же, что и в исходном состоянии, 17-18 % происходит в интервале 168...138 К. Принимая во внимание тот факт, что тенденция к снижению напряжения разрушения наблюдается при 168 К, что сопровождается уменьшением  $\psi$ , то данное значение температуры можно считать верхней границей вязко-

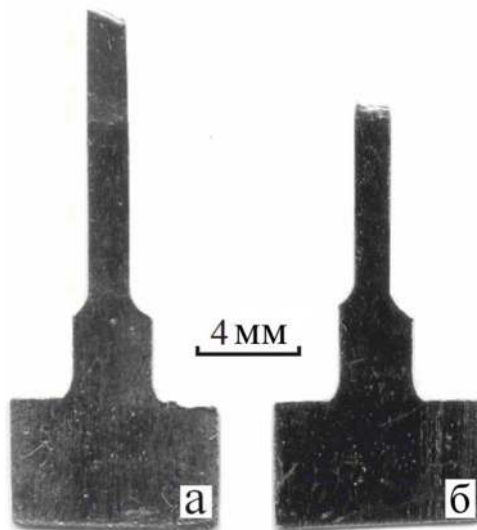
хрупкого перехода для деформированного состояния. Таким образом, в результате сильной низкотемпературной деформации происходит заметное повышение (по меньшей мере, на 30 К) начала вязко-хрупкого перехода.

Изменение механических характеристик деформированной стали 15Х2НМФА в результате воздействия переменного магнитного поля иллюстрируют данные, приведенные в табл. 3.

Таблица 3

**Механические характеристики деформированной стали 15Х2НМФА  
после воздействия переменного магнитного поля**

Т, К	$\sigma_{02}$	$\sigma_B$	$\sigma_f$	$\epsilon_p$	$\epsilon_0$	$\psi$
	МПа			%		
293	660	790	1700	0,7	2,4	58
273	670	800	1290	1,3	2,6	43
258	800	920	1880	0,8	2,0	63
218	890	1000	2020	1,2	1,8	60
198	1000	1110	2300	1,2	2,5	66
168	1000	1150	2760	1,3	2,5	60
138	950	1150	2620	1,5	3,0	64



*Рис. 1. Характер разрушения образцов при  $T=300$  К: а – срез (деформированное состояние); б – чашка-конус (деформированное состояние + воздействие переменного магнитного поля)*

Из сравнения данных в табл. 2 и табл. 3 видно, что для деформированных образцов после воздействия поля характерны существенно более низкие значения предела текучести и более высокие значения напряжения разрушения во всей исследованной области температур.

В частности, значение  $\sigma_{02}$  при  $T=293$  К уменьшается с 810 МПа до 660 МПа,  $\sigma_f$  возрастает с 1590 до 1700 МПа,  $\psi$  увеличивается на 20 %. При этом разрушение деформированного образца после магнитной обработки происходит с образованием конуса и чашки ( $\psi \approx 64$  %), тогда как до обработки – срезом ( $\psi \approx 49$  %) (рис. 1). Даже при низких температурах ( $T=138$  К) образцы после воздействия магнитного поля деформируются с упрочнением и имеют заметный запас пластичности: общее и равномерное удлинения для них составляют 3 и 1,5 % против 1,8 и 0,5 % для деформированного состояния.

**Внутреннее трение и модуль сдвига.** Материал в исходном состоянии не имеет аномалий температурных зависимостей декремента затухания  $\delta(T)$  и модуля сдвига  $G(T)$  в исследованной области температур (рис. 2, рис. 3, кривая 1). При  $T=270$  К уровень фона  $\approx 1,5 \cdot 10^{-3}$ ; в интервале 600...700 К наблюдается небольшой монотонный рост фона, максимальные значения которого не превышают  $4 \cdot 10^{-3}$ . При  $T > 740$  К внутреннее трение экспоненциально возрастает, что может быть проявлением низкотемпературной ветви пика, расположенного при  $T > 800$  К. Модуль сдвига при  $T=270$  К составляет  $8 \cdot 10^4$  МПа и с повышением температуры снижается с коэффициентом  $\sim 2,6 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ .

Для деформированного состояния фон внутреннего трения заметно увеличивается, в области 350...570 К наблюдается широкий максимум  $\delta$ , правая ветвь которого переходит в участок экспоненциального роста  $\delta$  (рис. 2, кривая 2). Модуль сдвига в результате деформации снижается, в частности, при 290 К на  $\sim 2000$  МПа; с ростом температуры выше 500 К эффект деформации идентифицировать сложно (рис. 3, кривые 1, 2).

Отметим, что для материала в исходном состоянии магнитная обработка в указанном режиме практически не повлияла на исследуемые характеристики.

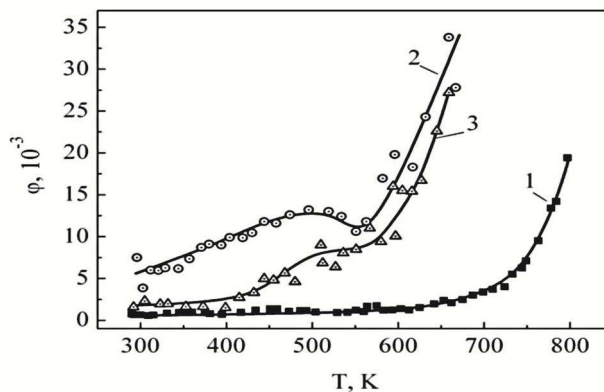


Рис. 2. Температурная зависимость внутреннего трения стали 15Х2НМФА в различных состояниях: 1 – исходное; 2 – после деформации; 3 – состояние 2 после воздействия переменного магнитного поля

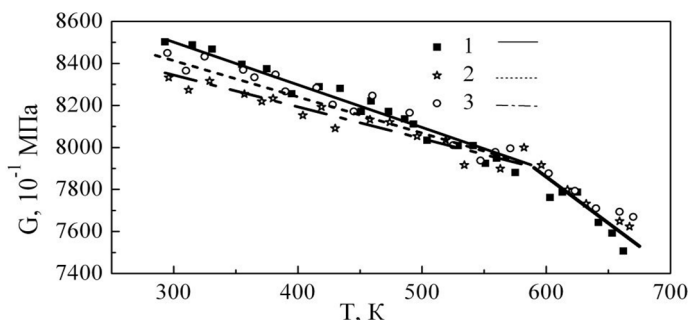


Рис. 3. Температурная зависимость модуля сдвига стали 15Х2НМФА в различных состояниях: 1 – исходное; 2 – после деформации, 3 – состояние 2 после воздействия переменного магнитного поля

Для деформированных образцов после обработки переменным магнитным полем значения модуля сдвига близки к характеристикам исходного состояния во всем исследованном интервале температур (рис. 3, кривая 3). Фон внутреннего трения обработанных образцов в области 290...420 К снижается (рис. 2, кривая 3), широкий максимум, выявленный для деформированного состояния, деградирует, что отражает протекание процессов частичной релаксации напряженного состояния материала. После обработки магнитным полем экспоненциальный рост внутреннего трения при  $T > 550$  К сохраняется, однако проявляется некоторое смещение участка нарастания  $\delta$  в область более высоких температур, что следует из сравнения кривой 3 и кривой 2.

**Магнитные характеристики.** Из полевой зависимости намагниченности  $M(H)$  следует, что для деформированных образцов, подвергшихся воздействию переменного магнитного поля, магнитная проницаемость возрастает, что сопровождается уменьшением площади петли гистерезиса, увеличившейся в результате предшествующей деформации. Полученные петли гистерезиса близки к предельным кривым намагничивания, принимая во внимание фактор размагничивания. В качестве примера в таблице 4 приведены значения коэрцитивной силы  $H_c$  образца. Снижение  $H_c$  достигает  $\approx 10\%$  после магнитной обработки по сравнению с деформированным состоянием.

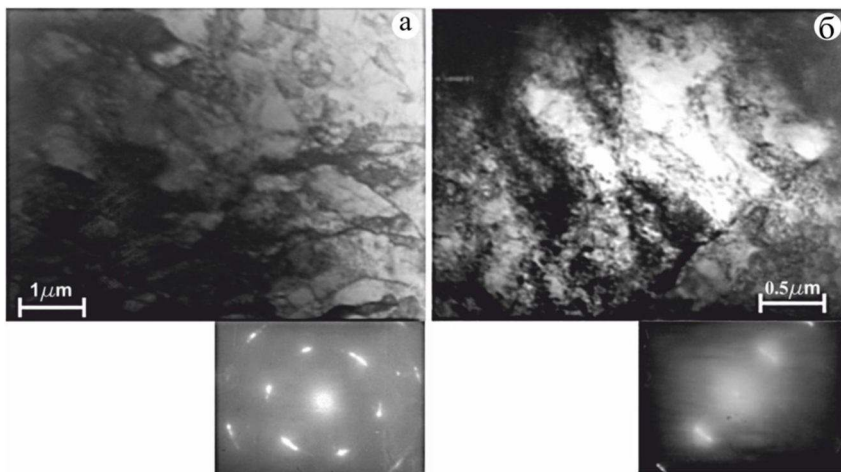
Таблица 4

**Коэрцитивная сила стали 15Х2НМФА в различных состояниях**

Состояние	$H_c$ , А/м
Исходное	920,0
После деформации	1820,0
После воздействия переменного магнитного поля	1690,0

**Структурные характеристики.** В результате сильной низкотемпературной деформации прокаткой в образцах стали формируется разно-

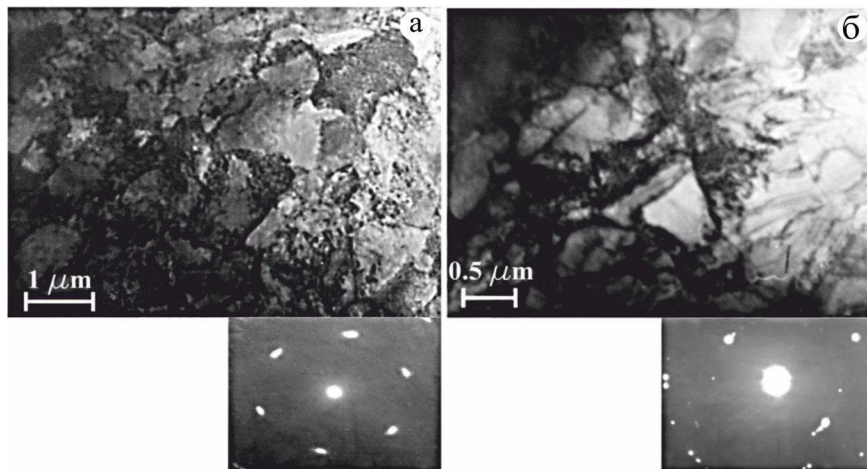
родная по типу и количеству дефектов структура в зависимости от ориентации структурных элементов по отношению к плоскости прокатки. Так, в микрообъемах, ориентация которых незначительно отличается от текстурной, пластическое течение достаточно развито и сопровождается формированием ячеистой и фрагментированной структур со средним поперечным размером ячеек 0,25 мкм. Разориентировки между отдельными фрагментами или ячейками составляют  $\sim 6^\circ$ , накопление разворотов в исследуемом микрообъеме достигает  $18^\circ$  (рис. 4а). В микрообластях с более высокими индексами ориентации выявлена высоконапряженная структура с вытянутыми дислокационными образованиями в виде плотных скоплений дислокаций одного знака, вызывающих разориентировку до  $19^\circ$  (рис. 4б), что свидетельствует о высоких упругих искажениях решетки и незавершенности реализации поворотных мод до текстурных ориентаций. В структуре выявлены отдельные высокоугловые границы дисклинационного происхождения с разориентировками  $\sim 21^\circ$ . Высокая степень неоднородности дефектной структуры обуславливает высокий интегральный уровень внутренних напряжений с локальной их концентрацией как внутри микрообластей конечного размера, так и на границах областей с различной степенью дефектности. Об этом могут свидетельствовать обнаруженные дислокационные заряды у границ. Сильное размытие рефлексов на электронограммах подтверждает сказанное.



*Рис. 4. Структура стали 15X2НМФА после деформации прокаткой при 90 К. Разориентировки между отдельными фрагментами или ячейками составляют  $\sim 6^\circ$ , накопление разворотов в исследуемом микрообъеме достигает  $18^\circ$  (а); высоконапряженная структура с вытянутыми дислокационными образованиями в виде плотных скоплений дислокаций одного знака, вызывающих разориентировку до  $19^\circ$  (б)*

Наложение переменного магнитного поля на такую дефектную структуру приводит к снижению уровня и выравниванию спектра внут-

ренных напряжений в объеме материала, что является следствием магнитной релаксации. Отмечены существенные структурные изменения: в областях с развитой дислокационной структурой, т.е. ячеистым ансамблем, увеличилось количество дислокационных границ при уменьшении среднего размера ячеек до  $0,17 \mu\text{м}$  и углов их разориентации до  $5^\circ$  (рис. 5а).



*Рис. 5. Структура стали 15X2НМФА после деформации прокаткой при 90 К и магнитной обработки. Области с развитой дислокационной структурой, т.е. ячеистый ансамбль, увеличилось количество дислокационных границ при уменьшении среднего размера ячеек до  $0,17 \mu\text{м}$  и углов их разориентации до  $5^\circ$  (а); формирование границ на месте мощных плотных скоплений одноименных дислокаций (б)*

В микрообъемах с более высоким уровнем упругих напряжений эффекты пластической релаксации выражены более наглядно: в местах с локальными неоднородностями в структуре концентрация внутренних напряжений снижается путем размножения и перераспределения дислокаций, а также рассредоточения дислокаций в самих скоплениях. При этом углы разориентировки уменьшаются до  $9^\circ$ . Наблюдается формирование границ на месте мощных плотных скоплений одноименных дислокаций (рис. 5б), что также можно трактовать как аспекты релаксации.

Структурные изменения в деформированной стали в результате магнитной обработки соответствуют наблюдаемым изменениям механических, диссипативных и магнитных свойств.

**Возможные каналы для поглощения энергии переменного магнитного поля.** Коротко рассмотрим возможные каналы для поглощения энергии переменного магнитного поля, которое вызывает релаксационные процессы в микроразонах ферромагнитного материала с высоким уровнем внутренних напряжений.

Релаксационные процессы возможны в дислокационных скоплениях высокой мощности и границах фрагментов при их взаимодействии с границами магнитных доменов, движущихся под действием внешнего переменного магнитного поля. Рис. 6 иллюстрирует возможность снижения локальных внутренних напряжений  $\tau$ , связанных с торможением дислокационных скоплений, в результате прохождения доменной границы и уменьшения числа дислокаций в скоплении.

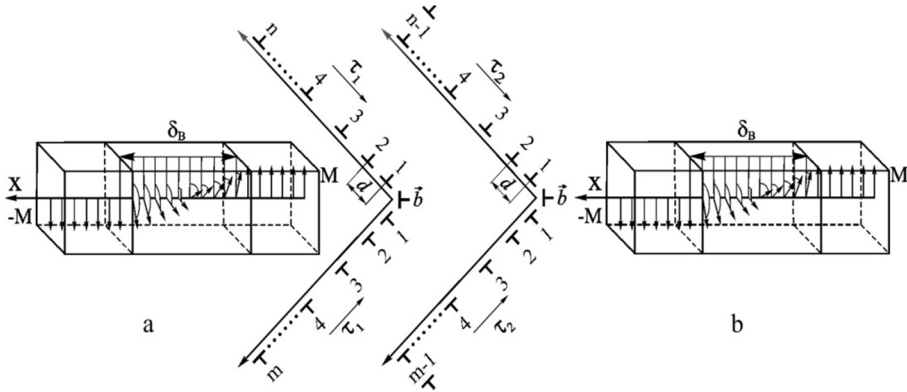


Рис. 6. Уменьшение числа дислокаций в плоских скоплениях в модели Коттрелла при прохождении через скопление границы домена (слева направо), чему соответствует  $\tau_2 < \tau_1$ . Стрелками в различных положениях показано вращение спинов в блоховской стенке шириной  $\delta_B$

Подобное «выталкивание» дислокаций в соседние плоскости скольжения возможно вследствие генерации и движения двойных перегибов за счет нелинейной динамики дислокаций в поле знакопеременных магнитострикционных деформаций [14]. Кроме того, магнитострикционные деформации, включая смещение доменных стенок и вращение вектора намагниченности, обуславливают эффективное размягчение упругих модулей [15], что облегчает перемещение дислокаций.

Магнитная релаксация типа ориентационного последействия [16] будет способствовать перемещению в решетке примесей внедрения и других дефектов, характеризующихся локальными магнитными моментами. В результате можно ожидать частичную разблокировку дислокаций от закрепляющих их точечных дефектов, перераспределение и уход дефектов на границы раздела и другие преимущественные стоки, что обусловит снижение напряжения течения. Дополнительным каналом релаксации пиковых напряжений является работа разблокированных источников дислокаций.

Переменное магнитное поле кроме магнитного компонента порождает в объеме проводника электрическое поле, которое действует на электронную подсистему. В последнее время изучению механизмов влияния возбуждения электронной подсистемы на реальные кристалли-

ческие тела уделяется значительное внимание [17]. Суть в том, что под действием электрического поля появляются электроны высокой энергии, которые взаимодействуют с фононами, порождая множество фононов с энергиями, близкими к дебаевской, которые взаимодействуют с дислокациями, отсоединяют их от точечных дефектов (стопоров) [18].

В данном случае мы имеем дело с неравновесной кинетикой (турбулентностью) в электрон-фононной подсистеме кристалла, находящегося под воздействием электрического поля. Ясно, что в этом случае мы находимся в состоянии, далеком от термодинамического равновесия, и поэтому описывать систему такими характеристиками, как, например, температура, нельзя. Описание неравновесных систем в рамках слабой турбулентности было предложено В.Е. Захаровым [19-20] и получило дальнейшее широкое развитие в работах его научной школы и последователей (см., в частности, [18, 21-36]).

### 3. ИССЛЕДОВАНИЯ В РЕЖИМЕ ПОЛЗУЧЕСТИ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЛАСТИЧЕСКОГО ТЕЧЕНИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО НИКЕЛЯ В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ 77 К

В разделе приведены основные результаты изучения влияния гармонического магнитного поля и импульсного с различными временами установления постоянного магнитного поля на характеристики ползучести, а также их связь со структурным состоянием материала. Объектом исследования служил поликристаллический никель чистотой 99,99%, отожженный при 900°C в течение 2 ч. Испытания проводили на переходной стадии ползучести в режиме ступенчатого нагружения в среде жидкого азота при  $T=77$  К на установке [37] с захватами и тягами из немагнитного материала. Величина прироста напряжения на каждой ступени составляла 2-3 МПа. Точность измерения удлинения составляла  $\sim 5 \cdot 10^{-5}$  см. Активационные параметры и уровень внутренних напряжений определяли с помощью дифференциальных методик, описанных в [38]. Проведены также электронномикроскопические исследования дефектной структуры никеля до и после воздействия магнитного поля.

Для изучения влияния магнитного поля испытуемый образец помещали в соленоид, в котором создавалось продольное постоянное или переменное магнитное поле напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м. Частота переменного магнитного поля составляла 50 Гц.

Ранее было показано [2], что включение переменного и постоянно магнитного поля в процессе пластической деформации никеля приводит к разупрочнению материала. Величина эффекта разупрочнения при включении и выключении магнитного поля не зависит от текущей скорости ползучести, но зависит от величины приложенного напряжения и напряженности магнитного поля. Это свидетельствует о том, что величина эффекта в основном обусловлена структурой, сформированной предыдущей деформацией.

Для определения особенностей структуры, сформировавшейся в процессе ползучести при 77 К в диапазоне напряжений  $\sigma \leq 0,5\sigma_B$ , были исследованы активационные параметры, позволяющие сделать определенные выводы о типе барьеров и о механизмах, контролирующих пластическое течение никеля в процессе ползучести.

Проведенные экспериментальные исследования показали, что активационный объем и энергия активации, рассчитанные в рамках теории термоактивированной пластической деформации, составляют  $\sim 0,5 \cdot 10^{-21} \text{ см}^3$  и 0,14 эВ соответственно и уменьшаются с увеличением напряжения. Это означает, что скольжение дислокаций контролируется дефектами, возникающими в процессе пластического течения. Величина полной энергии активации, необходимой для преодоления препятствия, составляет 0,22 эВ и не зависит от напряжения. Существует ряд препятствий, которые могут контролировать низкотемпературную ползучесть никеля, т.е. имеют активационные параметры, близкие к полученным. Это примеси, деформационные точечные дефекты и дислокации леса.

Поскольку экспериментально установлено, что активационный объем зависит от напряжения, примеси, очевидно, не контролируют ползучесть никеля при 77 К. В то же время концентрация точечных дефектов и плотность дислокаций увеличиваются с ростом деформации, и поэтому активационный объем должен уменьшаться, что согласуется с экспериментом. Таким образом, проведенные экспериментальные исследования и оценки позволяют сделать вывод, что дислокации леса с учетом плотности дислокаций в пределах ячеек и точечные дефекты (преимущественно межузельные атомы на начальных стадиях деформирования) являются барьерами, которые контролируют процесс низкотемпературной деформации никеля.

Механизм активированного пересечения дислокациями вышперечисленных препятствий является основным механизмом пластического течения никеля при 77 К. Электронномикроскопические исследования показали, что отожженный никель отличается высокой степенью равновесности структуры в результате рекристаллизации при отжиге, о чем свидетельствуют ровные протяженные следы границ зерен. Плотность дислокаций составляет  $\sim 5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-2}$  (рис. 7).

Ползучесть при 77 К приводит к пространственно неоднородному развитию течения материала, появляется резкая ориентационная зависимость дефектообразования от ориентации зерна по отношению к направлению действия внешнего напряжения. Например, в некоторых

зернах наблюдается ячеистая структура с рыхлыми границами и размером ячеек 0,5 – 0,8 мкм. Средняя плотность дислокаций внутри ячеек составляет  $\sim 2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ , в пределах ячеек  $\sim 9 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . При этом в соседнем зерне видны сформированные мощные дислокационные скопления с плотностью дислокаций  $\sim 8 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$  (рис. 8). Наряду с этим встречаются зерна, где прошли только начальные стадии пластического течения с преимущественным скольжением дислокаций вдоль границ и образованием скоплений в тройных стыках с плотностью дислокаций  $\sim 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ . Основная серия опытов с наложением магнитного поля на процесс пластической деформации при ползучести была проведена по следующей схеме. После приложения нагрузки и достижения скорости ползучести  $\sim 5 \cdot 10^{-6} \text{ с}^{-1}$  включали магнитное поле и в течение 180 с фиксировали ползучесть. После выключения поля ползучесть продолжалась еще 180 с. Затем образец снова догружали. Исследования проводились на переходной стадии ползучести при напряжениях  $\sigma \leq 0,5 \sigma_B$ . В результате проведенных экспериментов установлено, что включение постоянного магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4 \text{ А/м}$  в процессе ползучести образцов никеля вызывает прирост деформации, причем снятие магнитного поля также сопровождается приростом деформации. На рис. 9 приведено типичное изменение кривых ползучести никеля в результате наложения и снятия постоянного магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4 \text{ А/м}$  при различном деформирующем напряжении. Как видно, после включения и выключения поля характер кривой ползучести качественно не меняется и ползучесть в постоянном магнитном поле описывается логарифмическим законом. Ранее было показано [38], что при наложении постоянного магнитного поля зависимость эффекта разупрочнения от напряжения немонотонная, поэтому в наших экспериментах была выбрана для исследований узкая область напряжений, соответствующая максимальному эффекту.

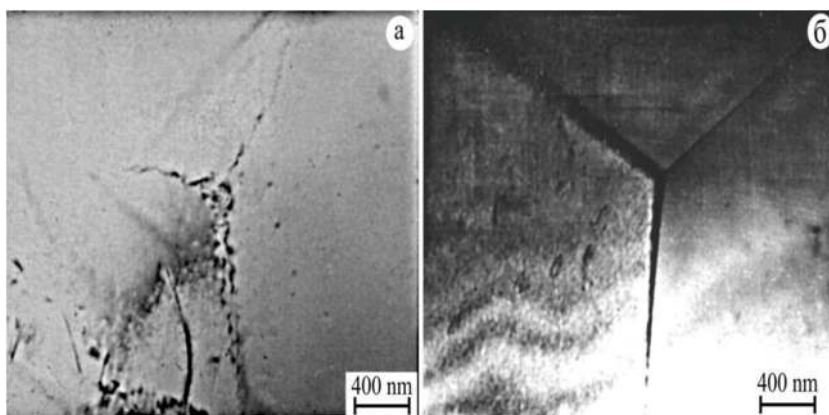


Рис. 7. Дислокационная структура Ni после отжига при  $900^\circ\text{C}$  в течение 2 ч

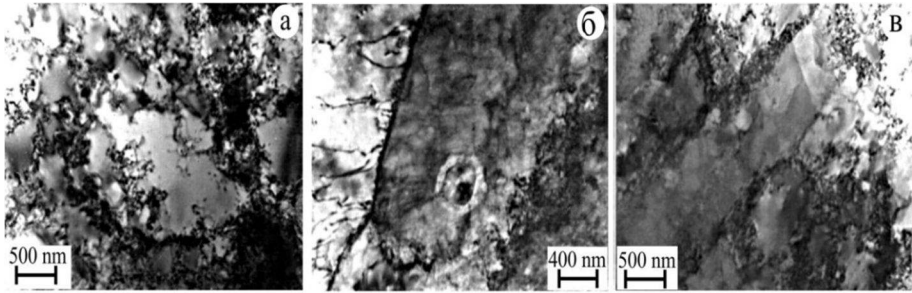


Рис. 8. Дислокационная структура Ni после деформации на 9% в условиях ступенчатой ползучести при  $T = 77\text{ K}$

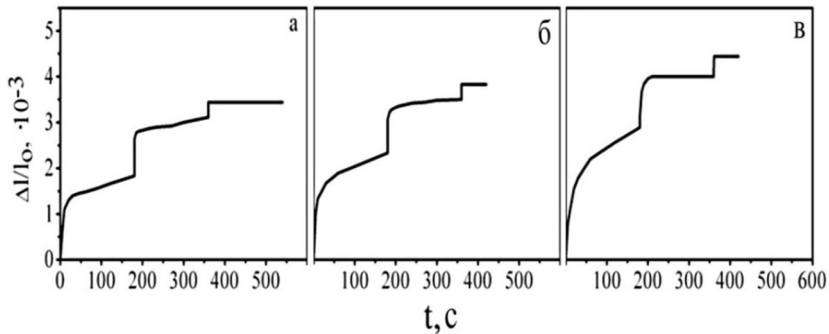


Рис. 9. Влияние времени нарастания постоянного магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4 \text{ A/m}$  (время включения поля 1 с) на деформацию ползучести Ni при стабильной температуре  $77\text{ K}$  для различных напряжений  $\sigma$ :  $0,3\sigma_B$  (а),  $0,4\sigma_B$  (б),  $0,5\sigma_B$  (в)

Как известно [38-45], одной из причин эффекта разупрочнения может быть повышение температуры образца вследствие нагрева вихревыми токами. Величина разогрева при прочих равных условиях зависит от скорости изменения магнитного поля, и снижение последней должно привести к уменьшению величины эффекта. Для исключения влияния разогрева образца вихревыми токами образец охлаждался жидким азотом и его температура оставалась  $77\text{ K}$  [46-49].

На рис. 10 приведена зависимость деформации ползучести от времени при включении поля  $4 \cdot 10^4 \text{ A/m}$  в течение 60 с. Как видно, медленное повышение напряженности магнитного поля также приводит к приросту деформации, однако величина эффекта разупрочнения существенно меньше, чем при быстром (в течение 1 с) повышении напряженности магнитного поля (см. рис. 9).

Структурные исследования показали, что наложение магнитного поля на процесс ползучести повышает степень однородности распределения дислокаций на начальных стадиях пластического течения, но не меняет характера формирования структуры. При температуре  $77\text{ K}$ ,

напряжениях  $\sigma \leq 0,5$  и действии импульсного постоянной амплитуды магнитного поля  $4 \cdot 10^4$  А/м формируется ячеистая структура с плотностью дислокаций в теле ячеек, не превышающей  $\sim 10^{10}$  см<sup>-2</sup>. Дислокации в стенках ячеек распределяются более равномерно по длине границы, которые напоминают границу кручения, что свидетельствует об определенном развитии процессов динамического возврата (рис. 11).

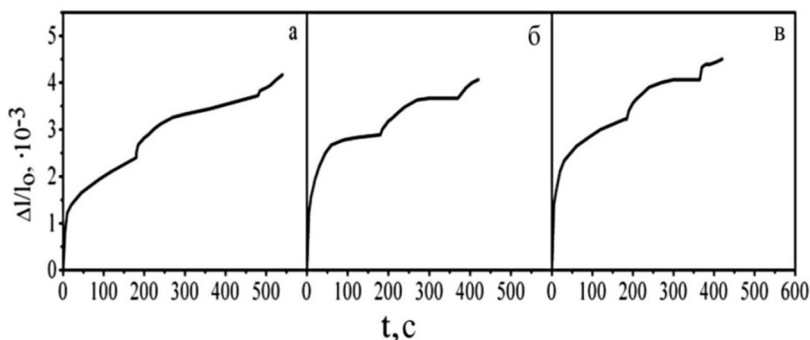


Рис. 10. Влияние времени нарастания постоянного магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м (время включения поля 60 с) на деформацию ползучести Ni при стабильной температуре 77 К для различных напряжений  $\sigma$ :  $0,3\sigma_{в}$  (а);  $0,4\sigma_{в}$  (б);  $0,5\sigma_{в}$  (в)

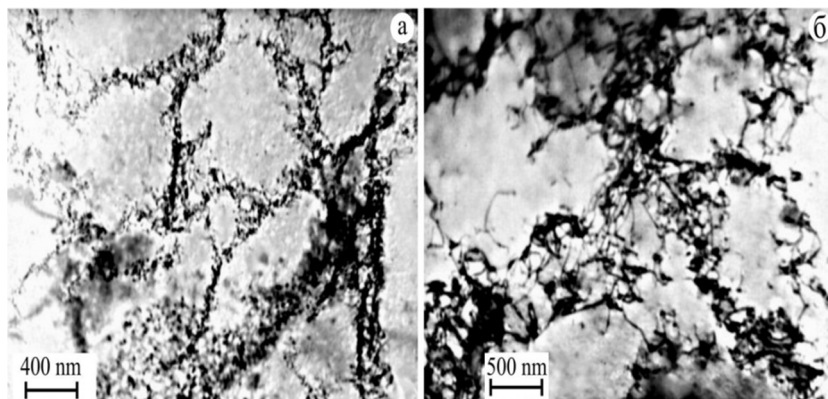


Рис. 11. Дислокационная структура никеля при  $T = 77$  К после деформации на 9% в условиях ступенчатой ползучести (а) и наложения импульсного постоянной амплитуды магнитного поля  $4 \cdot 10^4$  А/м (б)

Воздействие переменного магнитного поля в процессе ползучести никеля при 77 К вызывает заметное увеличение величины деформации и скорости ползучести. Типичное изменение кривой ползучести при  $\sigma \leq 0,5 \sigma_{в}$  в результате воздействия переменного магнитного поля частотой 50 Гц и напряженностью  $H = 4 \cdot 10^4$  А/м характеризует рис. 12.

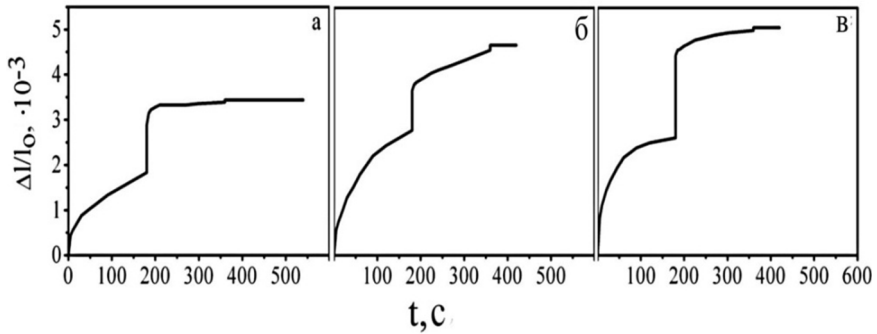


Рис. 12. Влияние гармонического (частота 50 Гц) магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м на деформацию образца никеля в режиме ползучести Ni при температуре 77 К и различных напряжениях  $\sigma$ : 0,3 $\sigma_v$  (а); 0,4 $\sigma_v$  (б); 0,5 $\sigma_v$  (в)

Зависимость деформации ползучести от времени испытания после включения поля так же, как и после очередного догружения, описывается обычным логарифмическим законом. Как видно, здесь величина деформации увеличивается с ростом напряжения, что согласуется с литературными данными [42]. Как показали электронномикроскопические исследования, гармоническое (частота 50 Гц) магнитное поле влияет на структуру материала значительно сильнее, чем импульсное для той же амплитуды напряженности поля  $4 \cdot 10^4$  А/м. Тело ячеек практически очищается от дислокаций, они концентрируются в границах. Плотность дислокаций в границах значительно превышает  $10^{11}$  см $^{-2}$ , а у границ зерен формируются мощные дислокационные скопления (рис. 13).

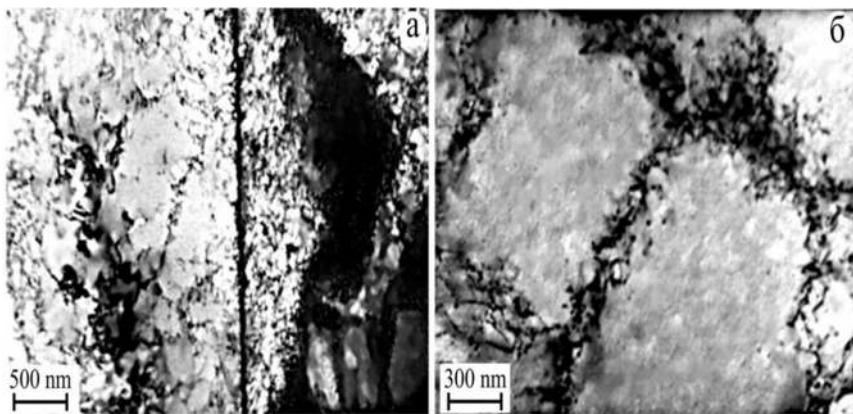


Рис. 13. Дислокационная структура Ni при  $T = 77$  К после деформации на 9% в условиях ступенчатой ползучести (а) и наложения гармонического магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м и частотой 50 Гц (б)

#### 4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ В РЕЖИМЕ ПОЛЗУЧЕСТИ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЛАСТИЧЕСКОГО ТЕЧЕНИЯ НИКЕЛЯ В ГАРМОНИЧЕСКОМ И ОДНОПОЛЯРНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ В УСЛОВИЯХ СТАБИЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ 77 К

В этом разделе описано влияние на характеристики ползучести никеля нестационарного магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м гармонического (50 Гц) и однополярного (той же частоты)[49]. На рис. 14 представлена зависимость деформации от времени для 4 режимов включения нестационарного магнитного поля с различными временами нарастания  $\tau$ : 60 с (включение постоянного поля) (а); 0,005 с (периодические монополярные импульсы с размагничиванием образца) (б); 0,005 с (периодические монополярные импульсы без размагничивания образца) (в); 0,005 с (гармонические импульсы) (г). Причем верхний ряд графиков соответствует напряжению  $\sigma=0,3\sigma_B$ ; средний ряд  $-\sigma=0,4\sigma_B$ ; а нижний ряд  $-\sigma=0,5\sigma_B$ .

Т.к. зависимость деформации от времени для всех 4 режимов включения нестационарного магнитного поля в режиме ползучести снималась при ступенчатом увеличении напряжения  $\sigma$ :  $0,3\sigma_B$  (верхний ряд),  $0,4\sigma_B$  (средний ряд),  $0,5\sigma_B$  (нижний ряд) без каких-либо замен образцов и смен режимов, то благодаря размагничиванию в режиме (б) перед каждым увеличением напряжения действие одинакового однополярного импульса магнитного поля в режимах (б) и (в) приводило к различной деформации образцов (это очень хорошо видно как на рис. 14, так и на приведенном ниже рис. 15). Такое различие в деформации образцов в режимах (б) и (в) обусловлено существенно большим индукционным вихревым электрическим полем в режиме (б), чем в режиме (в). Эксперименты показали, что только при медленном включении и выключении стационарного магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м при ползучести никелевых образцов происходит увеличение деформации как при включении, так и при выключении магнитного поля. Быстрое же включение магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м при ползучести никелевых образцов (см. рис. 14(б) и (в)) приводит к увеличению деформации только при включении магнитного поля, затем наблюдается прекращение роста деформации без увеличения напряжения, а также отсутствие роста деформации при выключении магнитного поля.

Рис. 15 иллюстрирует при разных величинах деформации проявление эффекта разупрочнения поликристаллического никеля для режима ползучести в результате действия на образцы импульсов магнитного поля одинаковой напряженности  $4 \cdot 10^4$  А/м с различным временем нарастания  $\tau$ .

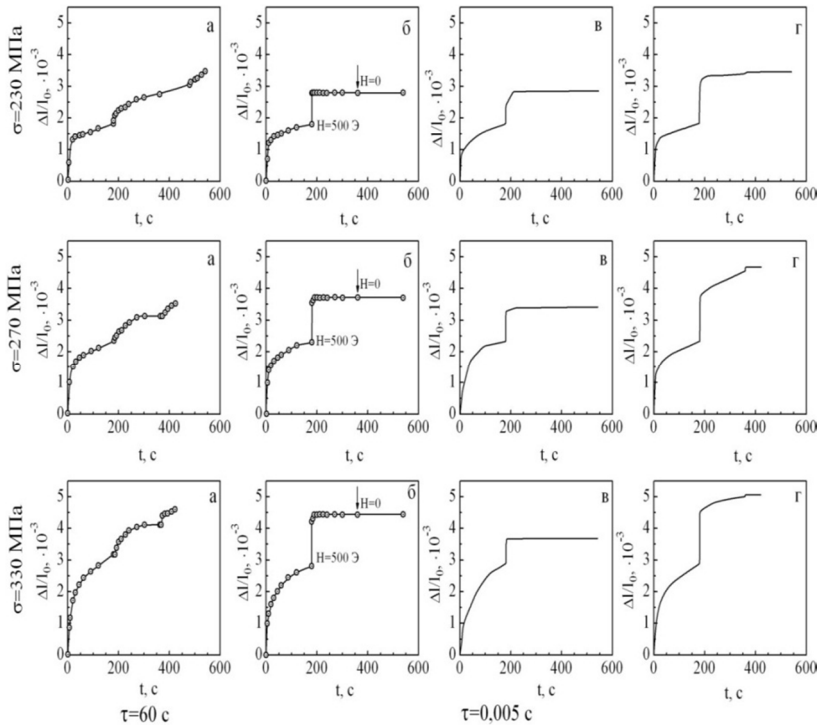


Рис. 14. Влияние переменного магнитного поля с напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м на ползучесть никеля при 77 К и различных напряжениях для разного вида импульсов магнитного поля  $\tau$ : 60 с (включение постоянного поля) (а); 0,005 с (периодические монополярные импульсы с размагничиванием образца) (б); 0,005 с (периодические монополярные импульсы без размагничивания образца) (в); 0,005 с (гармонические импульсы) (г)

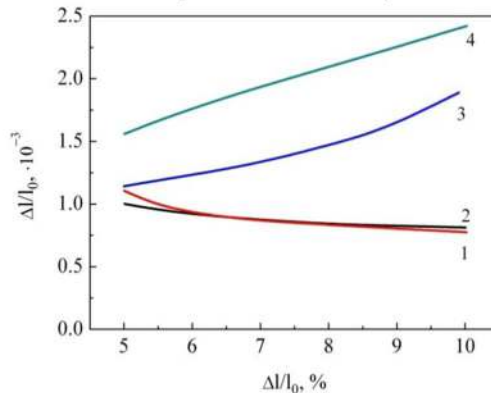
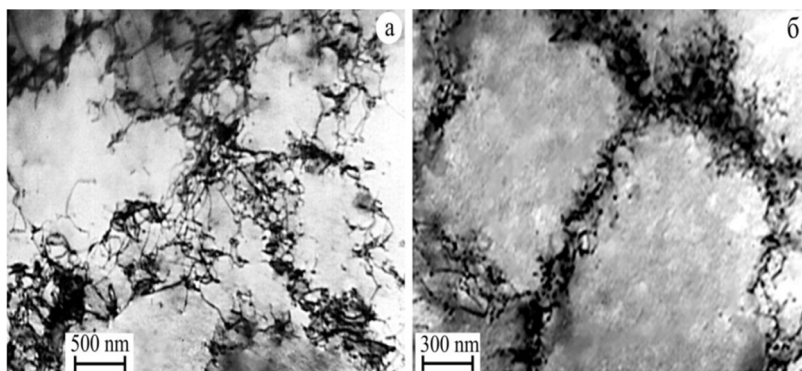


Рис. 15. Зависимость величины разупрочнения поликристаллического никеля при 77 К от величины деформации для разного типа импульсов магнитного поля напряженностью  $4 \cdot 10^4$  А/м с различным временем нарастания  $\tau$ : 1 с (включение постоянного поля) (1); 0,005 с (периодические монополярные импульсы без размагничивания образца) (2); 0,005 с (периодические монополярные импульсы с размагничиванием образца) (3); 0,005 с (гармонические импульсы) (4)

Из рис.15, в частности, видно, что разупрочнение при воздействии монополярных импульсов без размагничивания образца и постоянного поля со временем нарастания  $I$  с практически совпадает в широком интервале степеней деформации ползучести. Для гармонических же импульсов величина разупрочнения существенно возрастает с увеличением деформации, как и для периодических монополярных импульсов с размагничиванием образца после недлинной серии импульсов.



*Рис. 16. Дислокационная структура никеля после деформации на 9% в условиях ступенчатой ползучести при  $T = 77$  К и наложения нестационарного магнитного поля  $4 \cdot 10^4$  А/м с разным временем нарастания поля  $\tau$ : 60 с (а) (единичный импульс); 0,005 с (периодические монополярные импульсы) (б)*

Исследования на электронном микроскопе показали, что нестационарное магнитное поле влияет на структуру материала тем сильнее, чем меньше время нарастания поля (рис. 16). Тело ячеек очищается от дислокаций, и они концентрируются только на границах (рис. 16 (б)). Плотность дислокаций на границах значительно превосходит  $10^{11}$  см<sup>-2</sup>, а в границах зерен формируются мощные скопления дислокаций (рис. 16 (б)).

## 5. ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В МЕТАЛЛАХ [6, 50]

Одной из задач работы В.И. Спицына и О.А. Троицкого [50] было установить экспериментальным путем, окажет ли влияние изменение состояния энергетического спектра электронов в кристаллах металлов на прочность и пластичность последних, – ведь еще недавно считалось, что эти свойства зависят только от взаимного расположения атомов, колебаний в решетке, взаимодействия дислокаций и т. д.

Главная трудность подобного рода опытов состоит в том, что в металлах практически невозможно влиять на электронную подсистему, не вызывая изменений в решеточной подсистеме, не вызывая нагрева металла. Существуют и другие трудности, в частности обусловленные ограничениями дрейфовых скоростей электронов, что, как ни парадоксально, связано с высокой проводимостью металлов. Из самых общих физических положений следует, что в металлических кристаллах должно происходить «электрон-дислокационное взаимодействие», – значит, влияние изменения состояния электронной подсистемы на движение и взаимодействие дислокаций, а вместе с тем на пластические и прочностные свойства кристаллов может наблюдаться экспериментально.

Если к металлу приложить электрическое поле, по нему потечет ток. При плотности тока выше  $\sim 1 \text{ А/мм}^2$  возникает заметный нагрев образцов. Но используя импульсный ток, можно повысить плотность на порядки величины и оставить металл практически холодным. Указанный прием, примененный авторами [50], позволил провести серию экспериментов по изучению влияния электрического тока на пластическую деформацию металла в условиях, не осложненных нагревом образцов.

Другой прием, также впервые примененный авторами [50], заключается в инъекции ускоренных электронов в металл во время его деформации, что приводит к появлению электронных плазменных колебаний и, как предполагалось, к электрон-дислокационному взаимодействию, аналогичному взаимодействию тока с дислокациями. В этом случае используются электроны с энергией преимущественно ниже порога выбивания атомов, когда не может возникнуть истинно радиационное действие (обусловленное радиационными дефектами в решетке) – упрочнение и снижение пластичности металла при низких температурах за счет блокировки дислокаций точечными дефектами и их ансамблями или, наоборот, разупрочнение при средних и высоких температурах за счет термического движения радиационных дефектов.

С помощью описанных методик было обнаружено новое явление, названное авторами электропластическим эффектом. Суть его заключается в том, что при передаче энергии системе электронов уменьшается сопротивление металла пластической деформации, т.е. металл пластифицируется. Оказалось, что под влиянием электрического тока и облучения металлические кристаллы, растягиваемые (сжимаемые) с постоянной скоростью или испытываемые на ползучесть при постоянном механическом напряжении, разупрочняются. Максимальный эффект может составлять десятки процентов.

Была исследована зависимость эффекта от температуры, плотности и частоты тока, энергии ускоренных электронов. Повышение температуры снижает величину эффекта, но эта зависимость слаба. С увеличением плотности и частоты тока эффект усиливается. Увеличение энергии ускоренных электронов, инжектируемых в деформируемый металл, также усиливает эффект, однако с переходом порога выбивания атомов вместо пластифицирования возникает упрочнение металла (при низких темпе-

ратурах), т. е. происходит инверсия эффекта, связанная с обычным радиационным действием.

Использование двойного образца с рабочей деформируемой частью А и недеформируемой частью Б позволяет разделить два эффекта воздействия электрического тока на образец. При прохождении импульсного тока по части А снижение деформирующего усилия  $\Delta P_A$  объясняется суммарным действием тока и пинч-эффекта (магнитного сжатия образцов собственным магнитным полем); при прохождении импульсного тока по части Б величину снижения  $\Delta P_B$  можно отнести уже только за счет пинч-эффекта; разность  $\Delta P_A - \Delta P_B$  можно считать в отсутствие теплового действия тока истинной электропластической деформацией образцов. Полученные авторами [50] экспериментальные данные указывают на то, что возможны три типа механизма электропластического эффекта. Как авторы уже говорили, величина эффекта нарастает пропорционально плотности тока, а также энергии ускоренных электронов, – следовательно, можно было бы думать, что электропластический эффект связан с созданием «электронного ветра» в решетке металла, с возникновением и усилением электронного ускорения движущихся дислокаций. С этим предположением согласуются все полученные экспериментальные результаты, за исключением данных о влиянии легирования. Было установлено, что в легированных образцах эффект имеет существенно большую величину, чем в «чистом» металле. Если бы электропластический эффект целиком определялся ускорением дислокаций, «электронным ветром», то в легированном металле, содержащем большое число препятствий для движения дислокаций в виде примесных атомов, естественно было бы ожидать уменьшения эффекта, а не его возрастания. Значит, *зависимость эффекта от содержания* в металле примесей противоречит описанному механизму. Другой вероятный механизм эффекта заключается в том, что электронные возбуждения («электронный ветер» в токовой методике и электронные плазменные колебания в методике облучения) вызывают изменения в динамике колеблющихся дислокационных сегментов, приводящие к уменьшению времени преодоления дислокациями препятствий, к срыву с них скоплений дислокаций. Этот механизм представляется им более реальным. В статье [50] приведены зависимости падения деформирующего усилия  $\Delta P$  и приращения длины образцов  $\Delta l \cdot 10^3$  мм, в результате прохождения одиночных импульсов тока от тока как для чистых кристаллов цинка, так и для легированных. После легирования увеличиваются пороговые значения плотности тока, с которых начинаются осцилляции деформирующего усилия, и ход зависимости от тока становится более крутым.

Причиной указанных изменений может быть либо изменение электрического взаимодействия заряженных примесей с дислокациями в металле, либо возникновение ангармоничности тепловых колебаний дислокационных сегментов в связи с активным демпфированием сегментов электронами проводимости или электронными плазменными колебаниями, т. е. в результате прямого электрон-дислокационного взаи-

действия, происходящего не на движущихся дислокациях, а на тех из них, которые находятся накануне срыва закрепляющих их центров (большой частью на головных дислокациях в скоплениях).

Механизм изменения электрического взаимодействия заряженных примесей и дислокаций отпадает, так как эффект имеет место не только при действии тока, но и при облучении, когда к образцу не прикладывается потенциал и не может существенно измениться взаимодействие между примесями и дислокациями. В пользу механизма электронного демпфирования дислокационных сегментов свидетельствует зависимость электропластического эффекта от наличия в металле примесей, а также от частоты импульсного тока. Действительно, для легированных образцов увеличивается число критических мест в нагруженном кристалле, где дислокации находятся накануне срыва, а также растет число дислокаций в скоплениях, разряжающихся при срывах с препятствий головных дислокаций. Становится понятной и частотная зависимость эффекта – с ростом частоты посылок тока увеличивается частота электронных воздействий на дислокационные сегменты и повышается частота попыток преодоления дислокациями препятствий. В рамки этого механизма укладываются также зависимости эффекта от плотности тока и от энергии ускоренных электронов (в методике облучения) – увеличение интенсивности электронного воздействия позволяет ожидать уменьшения времени преодоления дислокациями препятствий.

Таким образом, предлагаемая авторами модель для объяснения электропластического эффекта состоит в следующем. Электрический ток или электронные плазменные колебания (в методике облучения) изменяют взаимодействие дислокаций с закрепляющими их центрами за счет активного электронного демпфирования колеблющихся дислокационных сегментов, появления ангармоничности в тепловых колебаниях сегментов и увеличения вероятности преодоления дислокациями препятствий (уменьшение времени преодоления дислокациями препятствий). Поэтому в опытах на растяжение (сжатие) образцов с постоянной скоростью происходит уменьшение деформирующего усилия, а в опытах с релаксацией приложенных напряжений и ползучестью – соответственно возрастание релаксированной части напряжений и скорости релаксации и ползучести.

Температурная зависимость электропластической деформации также находит свое естественное объяснение в рамках принятой модели. Поскольку электрон-дислокационное взаимодействие в области средних температур мало зависит от температуры, слабую температурную зависимость должна проявлять также электропластическая деформация металла. Проведенные эксперименты представляют собой первый этап исследования электропластической деформации металла. Детальное изучение влияния электронного состояния металла на его механические свойства, по мнению авторов [50], позволит уточнить механизм электрон-дислокационного взаимодействия в металлах и радиационного действия ускоренных электронов и других заряженных частиц на свойства металлов. Можно предположить, что с

расширением этих работ, с проникновением в область более низких температур, больших плотностей и частот тока, с применением высокочастотных методов исследования кристаллов, содержащих подвижные дислокации, при создании экстремальных условий облучения (в частности при создании в металле сверхплотной концентрации свободных электронов) будут открыты новые явления.

Для проведения экспериментов использовались монокристаллы цинка (99,998% Zn), свинца (99,9995% Pb), индия (99,9995% In) и легированного цинка ( $2 \cdot 10^{-200}$  Cd) с ориентацией в середине стандартного треугольника, а также поликристаллические образцы цинка, кадмия, олова, свинца и индия с чистотой не хуже 99,99%. На концах образцов вваривались электрические контакты, соединенные с источником тока. Испытания на растяжение и сжатие с постоянной скоростью 0,1 мм/мин проводились на машине Instron либо на специально сконструированной дистанционной машине (в случае работы с облучением). Образцы устанавливались в изолированные зажимы. Точность определения нагрузок составляла 2 г. В опытах на растяжение и релаксацию напряжений использовались образцы длиной 15-16 мм и диаметром около 1 мм, в опытах на сжатие – длиной 6 мм и диаметром 2,5 мм. В методике измерения релаксации напряжений деформацию образцов в какой-то момент прекращали и наблюдали падение показаний упругого динамометра за счет пластической деформации образца. Использовалась также методика испытания образцов на ползучесть под постоянным приложенным напряжением со ступенями нагружения 25 г на дистанционной установке с измерительной частью, выполненной на основе электронно-механического преобразователя Э-2Д1. Точность определения деформаций составляла 0,2%.

Время ползучести было равно 10 мин. Деформация за первые 3 секунды после приложения нагрузки характеризовала скорость неустановившейся ползучести образцов  $v_{п.ну}$ . Скорость установившейся ползучести  $v_{п.у}$  определялась как средняя величина за последние 9 мин деформации. В случае действия электрическим током через деформируемые образцы периодически разряжалась батарея электролитических конденсаторов емкостью около  $10^3$  мкФ. За один импульс пропусклось примерно 0,1 Кл электричества. Длительность импульса составляла около  $10^{-4}$  с, частота посылок 0,3-0,4 Гц, напряжение 50-200 В. При температуре жидкого азота импульсы тока приводили к тепловыделениям в образцах не более 5-10 мВт или возможному нагреву образцов лишь на доли градуса, что не фиксировалось приваренными к ним дифференциальными хромель-копелевыми термопарами. Использованные режимы гарантировали также объемный эффект действия тока (отсутствие скин-эффекта) и малую величину магнитного сжатия от собственного магнитного поля образца (пинч-эффект).

В серии работ О.А. Троицкого и др. (см., например, [6, 50]) экспериментально обнаружено новое физическое явление – электронно-пластический эффект (ЭПЭ), заключающийся в снижении сопротивле-

ния металла деформированию и повышении пластичности металла под влиянием тока, помимо теплового и пондеромоторного действия.

– Обнаружена скачкообразная деформация металлических кристаллов в импульсах тока, характеризующаяся большой величиной эффекта в области предела текучести образцов, повышением однородности сдвигообразований, усилением эффекта в поверхностно-активной среде, управляемостью процесса – зависимостью величины скачков от силы тока и частоты следования импульсов, слабой зависимостью от температуры.

– Импульсы тока увеличивают предшествующую хрупкому разрушению пластическую деформацию кристаллов цинка на 100-120% при 78 К и на 50-60% при комнатной температуре (для эмалированного цинка). В процессе электропластической деформации кристаллов возрастает критический уровень нормальных напряжений на плоскостях скольжения  $p$ , а сама зависимость  $p$  от удельного кристаллографического сдвига  $a(\kappa)$  становится более слабой, что является следствием уменьшения хрупкого разрушения кристаллов. В результате действия тока снижаются критические скальвающие напряжения на плоскостях скольжения, что является результатом уменьшения стартовых напряжений для движения дислокаций. Под влиянием тока граница хладноломкости металла смещается в сторону более низких температур.

– С увеличением частоты следования импульсов происходит усиление эффекта, оцениваемого по изменению сопротивления кристаллов деформированию. Вместе с тем, величина отдельных скачков деформации снижается в связи с истощением дислокационной структуры в предыдущих импульсах тока. Роль частотного фактора важна для эффективных попыток дислокаций преодолевать препятствия в плоскостях скольжения.

– С увеличением амплитудной плотности тока в кристаллах величина эффекта нарастает, начиная с некоторых пороговых значений плотности тока. Вызванная током пластическая деформация металла начинается не сразу, а по истечении некоторого времени задержки, равного единицам или десяткам секунд.

– С увеличением длительности импульсов тока величина эффекта усиливается, а сам эффект появляется, начиная также с некоторых пороговых значений длительности импульсов тока, соответствующих по величине временам элементарных скачков деформации в кристаллах. Зависимость эффекта от длительности импульсов можно связать с изменением импульса дислокационной структуры кристаллов.

– При исследовании зависимости ЭПЭ от условий деформации металла и наличия в нем примесей установлено увеличение скачков деформации с ростом скорости растяжения кристаллов, что связано с накоплением и срывом под влиянием тока скоплений дислокаций. Эффект характеризуется слабой температурной зависимостью. Эффект действия тока возрастает при увеличении концентрации примеси в металле вплоть до 1 ат%, что связано с повышением однородности сдвигообразований в кристаллах и влиянием тока на процесс накопления и разрядки незавершенных сдвигов. Вместе с тем, под влиянием легирования уве-

личивается порог механических и электрических напряжений, с которых начинается эффект действия тока.

– Установлено, что при особом режиме пропускания тока (парные импульсы, направленные в одном направлении или встречно при различном расстоянии между импульсами в паре) на фоне электронного ускорения пластического течения может возникнуть снижение эффекта, т.е. частичная инверсия ЭПЭ или торможение пластического течения металла током.

– Рассмотрена роль поверхности Ферми в электронно-пластическом эффекте. Приведены параметры поверхности Ферми в металлах, показывающих большую величину ЭПЭ. Качественно обсуждена роль различных фермиевских носителей тока – электронов и «дырок» – в передаче импульсов силы и энергии на дислокации. Оценена роль закрытости поверхности Ферми в передачах импульсов силы и энергии на дислокации. Рассмотрена роль малых объемов и фрагментов поверхности Ферми в указанных процессах и благоприятные направления смещения поверхности Ферми, а также роль электрического контакта деформируемого металла с другим металлом. Анализируются возможные трансформации поверхности Ферми в ходе ЭПЭ и корреляция ее состояния с величиной ЭПЭ в гранецентрированных кубических и гексагональных плотноупакованных металлах, а также механизм передачи импульсов от носителей тока к дислокациям при ЭПЭ.

– Предложена модель электронно-пластического эффекта, учитывающая основные положения динамической и инерционной теории участия электронов проводимости в пластической деформации металла, исходящая из эквивалентности действия тока приложению к кристаллам дополнительных эффективных напряжений, влияния тока на скопления дислокаций, на перестройку и срыв скоплений со стопоров в виде примесей и дислокаций в других системах скольжения, а также с других препятствий.

Резюмируя результаты теоретического рассмотрения ЭПД А.М. Рошупкиным и И.Д. Батароновым, которые объяснили основные экспериментальные данные по ЭПД, авторы [6] отметили следующие наиболее важные выводы.

– Полученная функция экранированной электронной реакции металла в токовом состоянии позволяет проанализировать изменение энергии взаимодействия дислокации с локальным стопором в присутствии тока высокой плотности. Установлено, что это изменение для обычных примесей может достигать заметной величины лишь в электрических полях атомной величины.

– В рамках электронной теории металлов построена микроскопическая теория динамического пинч-эффекта и проанализированы обусловленные им эффекты механического воздействия на деформируемый металл, в том числе полярного характера, хотя сам пинч-эффект, в силу его квадратичной зависимости от тока, неполярен.

– Проанализированы различные эффекты, связанные с формированием в проводнике неоднородного температурного поля и сопутству-

ющих напряжений. Установлено, что во время действия импульса тока возникают термоупругие напряжения, которые имеют тот же порядок величины, что и напряжения от пинч-эффекта.

– Получено общее выражение для силы электрон-фононного увлечения дислокаций и точечных дефектов, на основании которого проанализированы вклады фононного, электронного и электрон-фононного механизмов увлечения в силы, вызываемые потоками тепла и электрическим током. Показано, что силовое действие электрического тока на точечные дефекты и границы раздела определяется электронным механизмом увлечения. Тогда как для дислокаций доминирующей может быть сила электрон-фононного увлечения.

– Предложен механизм срыва скоплений дислокаций со стопоров и деструкции полей внутренних напряжений в металле под влиянием импульсов тока, основанный на динамических свойствах застопоренных дислокационных скоплений. Показано, что время задержки действия импульсного тока, обнаруженное экспериментально, совпадает со временем динамической реакции дислокационного скопления.

– Теоретические представления о процессах пластической деформации металла при токовых воздействиях остались недостаточными и неоднозначными, а физическая природа эффекта пластификации металлов под влиянием тока не раскрытой до конца.

Для описания ЭПЭ и МПЭ мы далее будем опираться на подход описания неравновесной электрон-фононной подсистемы кристалла, находящегося в электрическом и/или магнитном поле. Разделение вкладов магнитных и электрических компонент переменного магнитного поля во влиянии на структурные дефекты реального кристалла требует рассмотрения микроскопических моделей, что и является предметом следующего раздела [18, 32-36, 49].

## 6. НЕРАВНОВЕСНАЯ КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ КРИСТАЛЛА В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ КАК ОСНОВА ЭЛЕКТРОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

В данном разделе статьи показано, что экспериментально наблюдаемые закономерности ЭПЭ могут быть описаны количественно, если принять во внимание влияние на движение дислокаций неравновесных фононов, возбужденных неравновесными электронами, получившими энергию от электрического поля. Сценарий развития ЭПЭ иллюстрирует схема на рис. 17.

Пластическая деформация кристаллов под действием внешних нагрузок в большинстве случаев осуществляется путем скольжения дислокаций. Основное уравнение, описывающее кинетику процесса пластической деформации, – модифицированное уравнение Орована (см., например, [51]):

$$\dot{\epsilon}_d = b l \rho_d v_d(\sigma^*), \quad \sigma^* = \sigma - \sigma_i \quad , \quad (6.1)$$

где  $\dot{\epsilon}_d$  – скорость деформации,  $b$  – вектор Бюргера,  $l$  – среднее расстояние между стопорами,  $\rho_d$  – плотность подвижных дислокаций,  $v_d(\sigma^*)$  – частота преодоления дислокациями барьера,  $\sigma^*$  – эффективное напряжение сдвига,  $\sigma_i$  – внутреннее напряжение сдвига в плоскости скольжения.

### ПРЕДЛОЖЕННЫЙ СЦЕНАРИЙ



Рис. 17. Предложенный сценарий развития электропластического эффекта

### 6.1. Модификация модели Гранато-Люкке, описывающей влияние фононов на движение дислокаций

В случае термодинамического равновесия выражение  $v_d(\sigma^*, T)$  имеет вид:

$$v_d(\sigma^*, T) = v_d^0 \exp\left(-\frac{H(\sigma^*)}{k_B T}\right). \quad (6.2)$$

Явный вид  $H(\sigma^*)$  функции зависит от модели потенциала барьера. Для рассмотрения более общего случая, т.е. когда подсистемы электро-

нов и фононов могут быть, вообще говоря, не в состоянии термодинамического равновесия, используется модель Ландау–Гофмана [52]. Потенциальная яма имеет параболическую форму:

$$U(x) = \begin{cases} \zeta x^2, & |x| \leq x_{cr} \\ 0, & |x| > x_{cr} \end{cases}, \zeta x_{cr}^2 = U_0. \quad (6.3)$$

Сдвиг дислокационного сегмента длиной  $L$  под напряжением  $\sigma$  описывается в приближении упругих колебаний струны (модель Гранато–Люкке [53]):

$$M \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + B \frac{\partial u}{\partial t} - C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = b\sigma + f(t). \quad (6.4)$$

Здесь  $u(y, t)$  – смещение линии дислокации в точке  $y$  в направлении  $x$ ,  $M = \frac{\rho b^2}{2}$  – эффективная масса единицы длины,  $\rho$  – плотность материала,  $B$  – коэффициент силы динамического трения на единицу длины,  $C = \frac{G b^2}{2}$  – линейное натяжение струны,  $G$  – модуль сдвига,  $f(t)$  – сила случайных толчков, происходящих в кристалле, на единицу длины дислокации. Граничные условия:

$$u'(0, t) = ku(0, t); \quad -u'(L, t) = ku(L, t); \quad k = \frac{2\zeta}{c}. \quad (6.5)$$

Уравнение линейное, поэтому его решение может быть записано в виде суммы

$$u(y, t) = u_{st}(y) + u_{osc}(y, t),$$

где  $u_{st}(y)$  – статический прогиб, вызванный внешним напряжением  $\sigma$ , а  $u_{osc}(y, t)$  – колебания под действием случайных сил.

$$u_{st}(y) = \frac{by(L-y)}{2c} + \frac{bL\sigma}{2ck}; \quad u_{osc}(y, t) = \sum_{n=1}^N Q_n(t) \left( \sin(q_n y) + \frac{q_n}{k} \cos(q_n y) \right); \quad (6.6a)$$

$$\operatorname{ctg}(q_n y) = \frac{q_n^2 - k^2}{2q_n k}. \quad (6.6b)$$

Величина  $Q_n(t)$  удовлетворяет следующему уравнению:

$$M\ddot{Q}_n(t) + B\dot{Q}_n(t) + M\omega_n^2 Q_n(t) = f_n(t); \quad \omega_n^2 = q_n^2 \frac{c}{M}. \quad (6.7)$$

Рассмотрим «точку закрепления» при  $y = 0$ . Пусть длины отрезков, по обе стороны от нее, равны  $L$ . Тогда полное отклонение в «точке закрепления» равно:

$$\tilde{u}(0, t) = 2u_{st}(y) + 2u_{osc}(y, t) = \tilde{u}_{st}(y) + \tilde{u}_{osc}(y, t) . \quad (6.8)$$

Ситуация случайной силы была рассмотрена в работе [53]. Теперь мы должны провести некоторые расчеты в справочных целях. Если в какой-то момент времени происходит случайное событие, такое, что  $\delta\tilde{u}(0, t) \geq \delta\tilde{u}_{cr}$ , то условия преодоления препятствия будут удовлетворены. Пусть  $f_n(t)$  стационарный Гауссов процесс. Т.к. уравнение (6.7) – линейное,  $Q_n(t)$  и, соответственно,  $\tilde{u}(0, t)$  также представляют собой стационарный Гауссов процесс, для которых среднее количество прыжков с превышением определенной величины  $\delta\tilde{u}_{cr}$  в единицу времени равно:

$$v = \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{\Psi''(0)}{\Psi(0)}} \exp\left\{-\frac{\delta\tilde{u}_{cr}^2}{2\Psi(0)}\right\}, \quad (6.9)$$

$$\Psi(\tau) = 2 \sum_{n=1}^{\bar{n}} \frac{q_n^2}{k^2} \overline{Q_n(t)Q_n(t+\tau)} \equiv 2 \sum_{n=1}^{\bar{n}} \frac{q_n^2}{k^2} \psi(\tau), \quad (6.10)$$

$$\delta\tilde{u}_{cr} = x_{cr} - \frac{bL\sigma}{ck} = x_{cr} \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_{cr}}\right), \quad \sigma_{cr} \equiv \frac{ckx_{cr}}{bL}, \quad (6.11)$$

где  $\Psi(\tau)$  – корреляционная функция случайного процесса  $\delta\tilde{u}(0, t)$ , выражающаяся через корреляционную функцию  $\psi(\tau)$  случайного процесса  $Q_n(t)$ ;  $\Psi''(0)$  вторая производная по  $\tau$  при  $\tau = 0$ . Для компоненты Фурье  $(Q_n)_\omega$  от  $Q_n(t)$  мы можем написать:

$$\Psi(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} (Q_n)_\omega^2 e^{-i\omega\tau} d\omega, \quad (6.12)$$

где определение величины  $(Q_n)_\omega^2$  дается соотношением

$$\overline{(Q_n)_\omega (Q_n)_{\omega'}} = (Q_n)_\omega^2 \delta(\omega + \omega') . \quad (6.13)$$

Каждая может формально рассматриваться как самостоятельный осциллятор с трением  $\chi$  и частотой гармоника  $\omega_n$ :

$$m\ddot{Q} + \chi\dot{Q} + m\omega_n^2 Q = F, \quad (6.14)$$

где  $m$  – коэффициент пропорциональности между обобщенным импульсом и скоростью  $\dot{Q}$ ,  $\chi$  – коэффициент трения,  $F$  – случайная сила [52-54].

$$m = M \frac{L\xi_n}{2}, \quad \chi = B \frac{L\xi_n}{2}, \quad F = f_n \frac{L\xi_n}{2}, \quad \xi_n = 1 - \frac{2}{kL} + \frac{q_n^2}{k^2}. \quad (6.15)$$

Таким образом, для фурье-компоненты мы получим такую формулу:

$$(Q_n)_\omega^2 = \frac{(F_\omega)^2}{m^2(\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \chi^2\omega^2}. \quad (6.16)$$

Спектральную плотность случайной силы можно найти из выражения [18, 35, 36]:

$$(F_{\omega})^2 = \frac{\chi}{\pi} \hbar \omega \left( \frac{1}{2} + N(\omega) \right). \quad (6.17)$$

Поэтому для оценки силы, действующей со стороны фононов на дислокацию, нужно сначала найти функцию распределения фононов  $N(\omega)$ .

## 6.2. Кинетические уравнения для функций распределения электронов и фононов

В некоторых работах по динамике электрон-фононной подсистемы в металлических пленках было использовано предположение о ферми-дираковском виде изотропной части функции распределения электронов, температура которой зависит от времени [55]. В данной работе мы, следуя нашим предыдущим статьям [18, 32-36], не будем делать такого допущения, и, таким образом, вычисленные функции распределения могут оказаться, вообще говоря, сильнонеравновесными. В такой ситуации поведение электронов и фононов описывается функциями распределения.

Для описания неравновесной динамики электрон-фононной подсистемы необходимо разрешить систему кинетических уравнений Больцмана для функций распределения электронов  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  и фононов  $N(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t)$  соответственно. Для функции распределения электронов  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  кинетическое уравнение Больцмана имеет вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = I_{ee} + I_{ep} + I_{ed}, \quad (6.18)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\{\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + [\mathbf{v}, \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)]\}, \quad (6.19)$$

где  $\mathbf{v}$  – скорость,  $\mathbf{p}$  – импульс,  $t$  – время,  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор,  $\mathbf{E}$  – напряженность электрического поля,  $\mathbf{B}$  – магнитная индукция. Далее мы будем рассматривать ситуации, когда параметры магнитного поля таковы, что существенной является его нестационарность, приводящая к появлению вихревого индукционного электрического поля, а несущественным является влияние магнитного поля на искривление траектории электронов, т.е. вторым слагаемым в правой части уравнения (6.19) можно пренебречь. Электрическое поле, а также электронную и фононную функции распределения мы для упрощения проблемы считаем пространственно однородными.

–  $I_{ee}$  – электрон-электронный интеграл столкновений. В общем случае для проводников и полупроводников, в которых мы имеем дело с вырожденным электронным газом, он имеет следующую форму [56-58]:

$$I_{ee} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^6} \int d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 d\mathbf{p}_3 W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3) [f(\mathbf{p}_2, t) f(\mathbf{p}_3, t) (1 - f(\mathbf{p}_1, t)) (1 - f(\mathbf{p}, t)) - f(\mathbf{p}, t) f(\mathbf{p}_1, t) (1 - f(\mathbf{p}_2, t)) (1 - f(\mathbf{p}_3, t))] \delta(\varepsilon + \varepsilon_1 - \varepsilon_2 - \varepsilon_3) \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3), \quad (6.20)$$

где  $f(\mathbf{p}, t)$  – однородная в пространстве функция распределения электронов (числа заполнения),  $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p}_i)$  – энергия электрона, имеющего импульс  $\mathbf{p}_i$ ,  $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3)$  – матричный элемент, описывающий экранированное кулоновское взаимодействие (см., например, [56-58] для модели «желе»):

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3) = (2\pi\hbar)^3 2e^4 (|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_3|^2 + a_1^2)^{-2}, \quad (6.21)$$

где  $W(\mathbf{p}, \mathbf{p}_1 | \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3)$  – вероятность рассеяния электронов с импульсами  $\mathbf{p}_2$  и  $\mathbf{p}_3$  в состояния с импульсами  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}_1$  в результате столкновения,  $a_1$  – характерный параметр экранирования. Для относительно невысоких напряженностей электрических полей вклад в формирование изотропной части электронной функции распределения электрон-электронных столкновений существенно меньше, чем вклад от электрон-фононного взаимодействия, и, таким образом, далее при малых временных интервалах электрон-электронные столкновения не будут приниматься во внимание.

–  $I_{ep}$  – электрон-фононный интеграл столкновений [56-58]:

$$I_{ep} = \int d\mathbf{q} w(\mathbf{q}) \{ \delta(\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{p}) - \hbar\Omega(\mathbf{q})) [f(\mathbf{p} + \mathbf{q}, t) (1 - f(\mathbf{p}, t)) (N(\mathbf{q}, t) + 1) - f(\mathbf{p}, t) (1 - f(\mathbf{p} + \mathbf{q}, t)) N(\mathbf{q}, t)] + \delta(\varepsilon(\mathbf{p} - \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{p}) + \hbar\Omega(\mathbf{q})) [f(\mathbf{p} - \mathbf{q}, t) (1 - f(\mathbf{p}, t)) N(\mathbf{q}, t) - f(\mathbf{p}, t) (1 - f(\mathbf{p} - \mathbf{q}, t)) (N(\mathbf{q}, t) + 1)] \}, \quad (6.22)$$

где  $N(\mathbf{q}, t)$  – однородная в пространстве фононная функция распределения, далее для упрощения записи не записываем явно зависимость от времени функций распределения электронов и фононов.

–  $I_{ed}$  – электрон-примесный или электрон-дефектный интегралы столкновений. Они могут быть получены путем подстановки в  $I_{ep}$ :  $\hbar\Omega = 0$  и  $N(\mathbf{q}, t) = 0$ .

$$I_{ed} = \int d\mathbf{p}' w_{ed}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \delta(\varepsilon(\mathbf{p}') - \varepsilon(\mathbf{p})) \{f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p})\}. \quad (6.23)$$

Фононная функция распределения также удовлетворяет кинетическому уравнению:

$$\frac{\partial N(\mathbf{q})}{\partial t} = I_{pe} + I_{pp} + I_{pd}. \quad (6.24)$$

–  $I_{pe}$  – фонон-электронный интеграл столкновений [56-58]:

$$I_{pe} = \int d\vec{p} w(\mathbf{q}) \{ \delta(\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{p}) - \hbar\Omega(\mathbf{q})) [f(\mathbf{p} + \mathbf{q})(1 - f(\mathbf{p}))(N(\mathbf{q}) + 1)] - f(\mathbf{p})(1 - f(\mathbf{p} + \mathbf{q}))N(\mathbf{q}) \}. \quad (6.25)$$

Фонон-фононный и фонон-дефектный интегралы столкновений в  $\tau$ -приближении имеют такой вид:

–  $I_{pp}$  – фонон-фононный интеграл столкновений.

$$I_{pp} = -v_{pp}(\mathbf{q})[N(\mathbf{q}) - N_T(\mathbf{q})], \quad v_{pp}(\mathbf{q}) = v_{pp0}q^2; \quad v_{pp0} = \frac{T^3 s}{a_c T_D^3 M_c}. \quad (6.26)$$

–  $I_{pd}$  – фонон-дефектный интеграл столкновений

$$I_{pd} = -v_{pd}(\mathbf{q})[N(\mathbf{q}) - \overline{N(\mathbf{q})}], \quad (6.27)$$

где  $N_T(q) = \left[ \exp\left(\frac{\hbar\Omega}{T}\right) - 1 \right]^{-1}$  – термодинамически равновесная функция распределения фононов – функция Бозе-Эйнштейна;

$\overline{N}(q) = \frac{1}{4\pi} \int N(\mathbf{q}) d\Omega$  – функция распределения фононов, усредненная по углам.

Предполагая, что электрон-примесные, электрон-дефектные столкновения обеспечивают изотропизацию электронной функции распределения, мы будем искать ее в виде суммы изотропной функции распределения и малой анизотропной добавки:

$$f(\mathbf{p}) = f(\varepsilon(p)) + \mathbf{f}_1(\varepsilon(p)) \frac{\mathbf{p}}{p}, \quad (6.28)$$

$$w(q) = w_0 q; \quad w_0 = \frac{\varepsilon_{1A}^2}{2(2\pi\hbar)^2 \hbar \rho_s}; \quad \hbar\Omega(q) = sq. \quad (6.29)$$

После конкретизации и подстановки параметров получаем:

$$I_{pp} = -v_{pd0} q [N(\mathbf{q}) - N_T(\mathbf{q})], \quad (6.30)$$

$$I_{ed} \left\{ \mathbf{f}_1(\varepsilon) \frac{\mathbf{p}}{p} \right\} = -v_{ed} \mathbf{f}_1(\varepsilon) \frac{\mathbf{p}}{p}, \quad (6.31)$$

где  $v_{ed} = 3 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$  – частота столкновений электронов с примесями и дефектами, которая в данном случае (низкие температуры) определяет изотропизацию функции распределения электронов.

$$I_{ep} \left\{ \mathbf{f}_1(\varepsilon) \frac{\mathbf{p}}{p} \right\} = -v(\varepsilon) \mathbf{f}_1(\varepsilon) \frac{\mathbf{p}}{p}; \quad v(\varepsilon) = \frac{\pi w_0}{\sqrt{m\varepsilon^3}} \int_0^{\sqrt{8m\varepsilon}} dq q^3 \left[ N(q) + \frac{1}{2} \right]. \quad (6.32)$$

Для анизотропной добавки имеем уравнение:

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} \frac{p}{p} - e \mathbf{E} \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} = -v_{ed} f_1(\varepsilon) \frac{p}{p}. \quad (6.33)$$

Столкновения с дефектами и примесями в реальных поликристаллических образцах происходят очень часто, по сравнению с характерным временем взаимодействия фононов с электронами, поэтому анизотропную добавку можно считать стационарной, а также пространственно однородной.

В результате мы получаем окончательную систему из двух уравнений для изотропных функций распределения электронов и акустических фононов [32-35], которую мы будем решать без разложения в ряд Тейлора функции распределения электронов:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial \tilde{t}} - 4\Delta \tilde{\varepsilon} \frac{1}{\tilde{\varepsilon}^{1/2}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\varepsilon}} \left[ \tilde{\varepsilon}^2 \frac{\partial f}{\partial \tilde{\varepsilon}} \right] = \frac{1}{8} \alpha^{-5/2} \left\{ \frac{1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}}} \int_0^{\tilde{\varepsilon}-} d\tilde{\varepsilon}_{ph} \tilde{\varepsilon}_{ph}^2 \left[ f(\tilde{\varepsilon} - \tilde{\varepsilon}_{ph}) N(\tilde{\varepsilon}_{ph}) + \right. \right. \\ \left. \left. f(\tilde{\varepsilon}) \left( f(\tilde{\varepsilon} - \tilde{\varepsilon}_{ph}) - 1 - [N(\tilde{\varepsilon}_{ph}) + 1] N(\tilde{\varepsilon}_{ph}) \right) \right] + \frac{1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}}} \int_0^{\tilde{\varepsilon}+} d\tilde{\varepsilon}_{ph} \tilde{\varepsilon}_{ph}^2 \left[ f(\tilde{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}_{ph}) - \right. \right. \\ \left. \left. f(\tilde{\varepsilon}) \left( f(\tilde{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}_{ph}) + N(\tilde{\varepsilon}_{ph}) \right) \right] \right\}, \quad (6.34) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial N(q)}{\partial \tilde{t}} = \frac{1}{2\alpha} \int_{\varepsilon_0}^{\infty} d\tilde{\varepsilon} \left[ \left( f(\tilde{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}_{ph}) - f(\tilde{\varepsilon}) \right) N(\tilde{\varepsilon}_{ph}) + f(\tilde{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}_{ph}) (1 - f(\tilde{\varepsilon})) \right]. \quad (35)$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$\alpha = \frac{ms^2}{2k_B T_e}; \quad \Delta \tilde{\varepsilon} = \frac{e^2 E^2 \tau_{ep0}}{6m v_{ed} k_B T_e}; \quad \tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{k_B T_e}; \quad \tilde{p} = \frac{p}{\sqrt{2m k_B T_e}}; \quad \tilde{\varepsilon}_{ph} = \frac{\varepsilon_{ph}}{k_B T_e}; \quad \tilde{t} = \frac{t}{\tau_{ep0}};$$

$$\tilde{q} = \frac{q}{\sqrt{2m k_B T_e}}, \quad \tau_{ep0} = \frac{(2\pi\hbar)^3 \hbar \rho}{\pi m^3 s \varepsilon_{1A}^2} = 3.446 \cdot 10^{-7} s.$$

Пределы интегрирования, полученные из законов сохранения импульса и энергии, равны соответственно

$$\begin{aligned} \varepsilon_- = \min \left[ 4(\sqrt{\tilde{\varepsilon}\alpha} - \alpha), \tilde{\varepsilon}_{ph_D} \right], \quad \varepsilon_+ = \min \left[ 4(\sqrt{\tilde{\varepsilon}\alpha} + \alpha), \tilde{\varepsilon}_{ph_D} \right], \\ \varepsilon_0 = \frac{\tilde{\varepsilon}_{ph}^2}{16\alpha} - \frac{\tilde{\varepsilon}_{ph}}{2} + \alpha. \quad (6.36) \end{aligned}$$

Функции распределения электронов  $f(\varepsilon)$  и фононов  $N(q)$  являются безразмерными величинами, удовлетворяющими следующим условиям нормировки:

$$\frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon = n, \quad (6.37)$$

где  $n$  – концентрация электронов в валентной зоне (для металлов зона проводимости заполнена лишь частично).

$$\frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{1}{\hbar^3} \right) \int_0^{q_D} q^2 N(q) dq < \infty, \quad (6.38)$$

где  $q_D$  – импульс дебаевского фонона, определяется равенством:

$$q_D = \pi \hbar / a. \quad (6.39)$$

Все величины берутся для никеля:  $s = 2,96 \cdot 10^3$  м/с – поперечная скорость звука,  $n = 2,5 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup> – концентрация электронов проводимости,  $a = 3,5 \cdot 10^{-8}$  см – постоянная решетки,  $\rho_s^{-1} = 0,333 \cdot 10^6$  См / см.

Термодинамически равновесной функцией распределения электронов по энергиям является функция Ферми-Дирака:

$$f_0(\varepsilon) = \left[ \exp \left( \frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_b T_e} \right) + 1 \right]^{-1}. \quad (6.40)$$

Для никеля  $\varepsilon_F = 5 \cdot 10^{-19}$  Дж.

### 6.3. Численное решение системы кинетических уравнений для электронной и фононной функций распределения и обсуждение результатов

Для численного решения системы уравнений (6.34-6.35) был использован метод конечных разностей первого порядка аппроксимации по времени и второго порядка в пространстве энергий. Система (6.34-6.35) была представлена таким набором разностных уравнений [35]:

$$\frac{f_i^{v+1} - f_i^v}{\tau} = 6\Delta\tilde{\varepsilon} \frac{f_{i+1}^{v+1} - f_{i-1}^{v+1}}{2h_{\tilde{\varepsilon}}} + 4\tilde{\varepsilon}_i \Delta\tilde{\varepsilon} \frac{f_{i+1}^{v+1} - 2f_i^{v+1} + f_{i-1}^{v+1}}{h_{\tilde{\varepsilon}}^2} + J_i, \quad (6.41)$$

$$J_i = \frac{1}{8\sqrt{\tilde{\varepsilon}_i} \alpha^5} \frac{1}{2} \left\{ \sum_{j=0} h_{\tilde{\varepsilon}_{ph}} \tilde{\varepsilon}_{phj}^2 [f_k^v N_j + f_i^v (f_k^v - N_j - 1)] + \sum_{j=0} h_{\tilde{\varepsilon}_{ph}} \tilde{\varepsilon}_{phj}^2 [f_i^v (N_j + 1) - f_i^v (f_i^v + N_j)] + \sum_{j=0} h_{\tilde{\varepsilon}_{ph}} \tilde{\varepsilon}_{phj+1}^2 [f_{k-1}^v N_{j+1} + f_i^v (f_{k-1}^v - N_{j+1} - 1)] + \sum_{j=0} h_{\tilde{\varepsilon}_{ph}} \tilde{\varepsilon}_{phj+1}^2 [f_{i+1}^v (N_{j+1} + 1) - f_i^v (f_{i+1}^v + N_{j+1})] \right\}, \quad (6.42)$$

$$\frac{N_j^{v+1} - N_j^v}{\tau} = \frac{1}{2\alpha^2} \sum_i h_{\tilde{\varepsilon}} [(f_k^v - f_i^v) N_j^v + f_k^v (1 - f_i^v) + (f_{k+1}^v - f_{i+1}^v) N_j^v + f_{k+1}^v (1 - f_{i+1}^v)], \quad (6.43)$$

$$f_k^v = f(\tilde{\epsilon}_i - \tilde{\epsilon}_{ph_j}), \quad f_l^v = f(\tilde{\epsilon}_i + \tilde{\epsilon}_{ph_j}). \quad (6.44)$$

Границы суммирования определяются из (6.36). Шаги сетки были выбраны  $\tilde{\epsilon}_i$  таким образом, чтобы:

$$-\tilde{\epsilon}_{ph_j} = \tilde{\epsilon}_k, \quad \tilde{\epsilon}_i + \tilde{\epsilon}_{ph_j} = \tilde{\epsilon}_l. \quad (6.45)$$

Здесь  $k$  и  $l$  натуральные числа. В результате расчета были найдены функции распределения электронов и фононов.

На рис. 18а и рис. 18в представлена зависимость функции распределения электронов от безразмерного импульса электрона  $\tilde{p} = \frac{p}{\sqrt{2mk_B T_e}}$  для разных моментов времени  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350; 400$  нс и двух значений напряженности электрического поля: 10 В/см и 5 В/см. На рис. 18б и 18г представлена зависимость функции распределения фононов, умноженная на куб безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}^3$ , от безразмерного импульса фонона  $\tilde{q} = \frac{q}{\sqrt{2mk_B T_e}}$  для разных моментов времени  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350; 400$  нс и двух значений напряженности электрического поля: 10 В/см и 5 В/см. Кривые показывают монотонное возрастание количества высокоэнергетичных электронов и фононов со временем. Кривые (самые нижние) для времени  $t = 0$  соответствуют равновесным функциям распределения. В частности, функция распределения фононов, умноженная на куб безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}^3$ , для напряженности электрического поля 10 В/см в момент времени ( $t = 400$  нс) больше в 3 раза, чем для поля 5 В/см в тот же момент времени ( $t = 400$  нс).

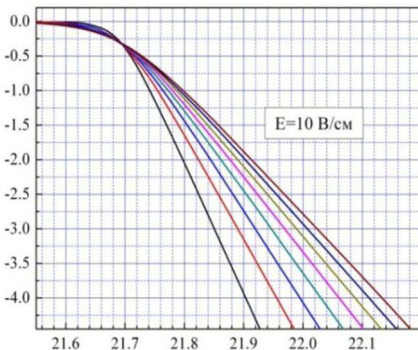


Рис. 18а. Зависимость десятичного логарифма функции распределения электронов от безразмерного импульса электрона  $\tilde{p}$  при  $E = 10$  В/см для разных моментов времени  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350$  нс

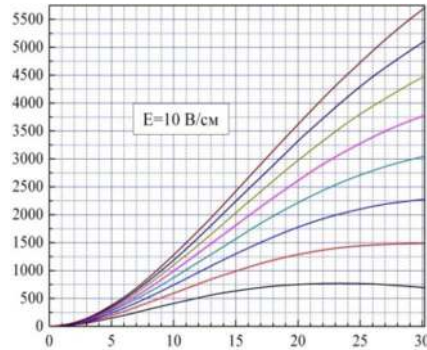


Рис. 18б. Зависимость функции распределения фононов, умноженной на куб безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}^3$ , от безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}$  при  $E = 10$  В/см для разных моментов времени  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350$  нс

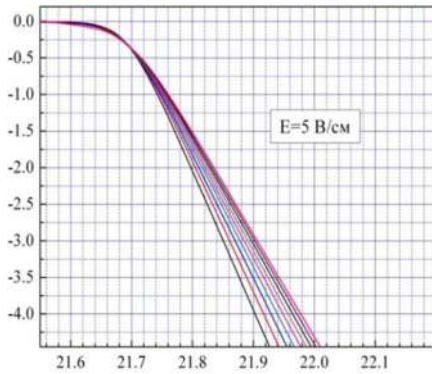


Рис. 18в. Зависимость десятичного логарифма функции распределения электронов от безразмерного импульса электрона  $\tilde{\rho}$  при  $E = 5 \text{ В/см}$  для разных моментов времени  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350 \text{ нс}$

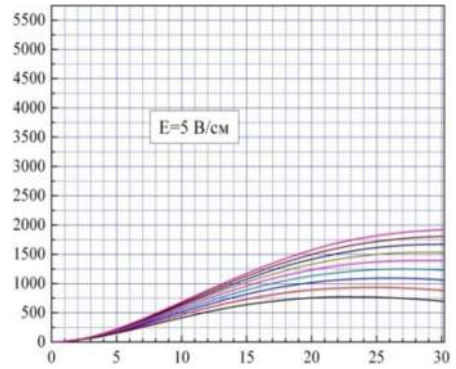


Рис. 18г. Зависимость функции распределения фононов, умноженной на куб безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}^3$ , от безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}$  при  $E = 5 \text{ В/см}$  для разных моментов времени  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350; 400 \text{ нс}$

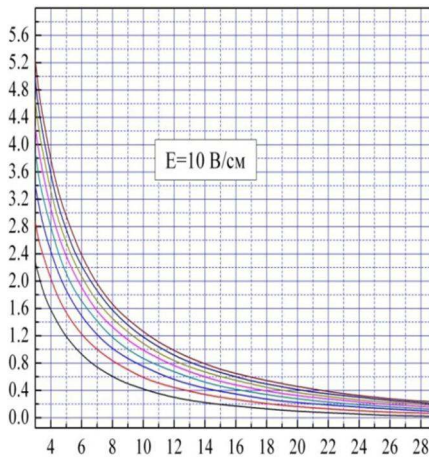


Рис. 19а. Зависимость десятичного логарифма функции распределения фононов от безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}$  при напряженности электрического поля  $E = 10 \text{ В/см}$  для разных моментов времени:  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350 \text{ нс}$

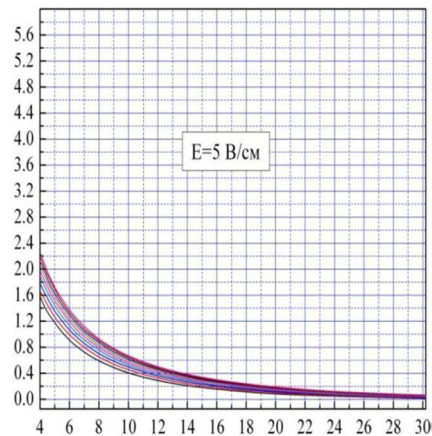


Рис. 19б. Зависимость десятичного логарифма функции распределения фононов от безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}$  при напряженности электрического поля  $E = 5 \text{ В/см}$  для разных моментов времени:  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350; 400 \text{ нс}$

Для тех же значений  $t$  и напряженности электрического поля  $5 \text{ В/см}$  значения импульса электрона, при котором функция распределения электронов равняется  $10^{-4}$ , отличается в 1,00239 раза. Для тех же

значений  $t$  и напряженности электрического поля 10 В/см значение импульса электрона, при котором функция распределения электронов равняется  $10^{-4}$ , отличается в 1,00811 раза. На рис. 18а и 18б представлена зависимость функции распределения фононов от безразмерного импульса фонона  $\tilde{q}$  для разных моментов времени  $t = 0; 50; 100; 150; 200; 250; 300; 350; 400$  нс и двух значений напряженности электрического поля: 10 В/см и 5 В/см.

Для оценки влияния на пластическую деформацию была построена зависимость (см. рис. 20):

$$\frac{(F_{\tilde{q}})^2}{(F_{\tilde{q}_0})^2} = \frac{\left(\frac{1}{2} + N(\tilde{q})\right)}{\left(\frac{1}{2} + N_0(\tilde{q})\right)}, \quad (6.46)$$

где  $N_0(\tilde{q})$  – функция Бозе–Эйнштейна для температуры 32 К, т.е., больше, чем начальная температура на 12 К.

В большей части экспериментов [5] нагревание не превышало 0.5-3 К.  $N(\tilde{q})$  – функция распределения фононов, найденная в результате численных расчетов.

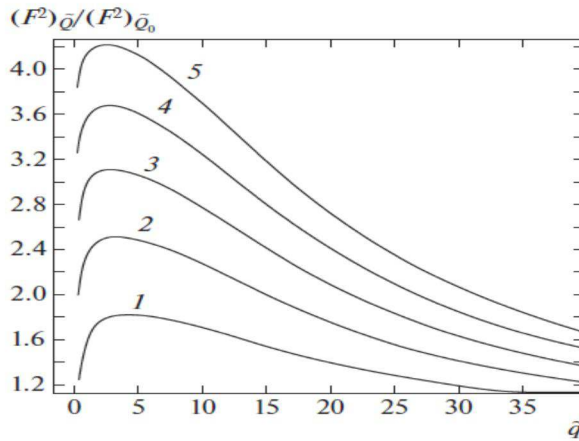


Рис. 20. Зависимость отношения  $\frac{(F_{\tilde{q}})^2}{(F_{\tilde{q}_0})^2}$  от безразмерного импульса фонона для разных моментов времени:  $t = 0,25; 0,5; 0,75; 1; 1.25$  мкс при  $E = 10$  В/см. Кривые соответствуют этим моментам времени в таком порядке: 1, 2, 3, 4, 5

Из рис. 20 видно, что сила, которая действует со стороны фононов на дислокации, больше, чем в случае простого нагревания, и имеет тенденцию к возрастанию со временем.

#### 6.4. Теоретические исследования разупрочнения никеля при ползучести в переменном магнитном поле

Поскольку мы исследуем поведение образца в гармоническом и детектированном (однополярном) магнитном поле, важно определить влияние вихревого электрического поля, индуцированного нестационарным магнитным полем, на изменение механических свойств образца. Воспользовавшись уравнениями Максвелла, мы можем определить характерную величину электрического поля

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}(\mu \mu_0 \vec{H}), \quad E_0 = \frac{4\pi \mu_0 H_0}{\tau} l_x \left( \mu + H_z \frac{\partial \mu}{\partial H_z} \right), \quad (6.47)$$

$$H_z = H_0 \left| \sin(\pi t / 2\tau) \right|, \quad \mu = \mu(H_z(t), t), \quad \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Гн/м}$$

где  $\tau$  – время нарастания магнитного поля,  $l_x$  – ширина образца,  $l_x=3$  мм. Для параметров эксперимента с гармоническими и однополярными импульсами (см. раздел 4): ширина образца  $l_x$  значительно больше его толщины  $l_y=0,3$  мм и индукционное электрическое поле оказывается около 1 В/см.

Кроме того, оценен максимальный вклад от продольной магнитострикции, который обычно учитывают [54]. Магнитострикционной деформацией можно пренебречь, поскольку: 1) она имеет противоположный знак (значит, не может помочь нам удлинить образец); 2) ее величина не превышает  $10^{-4}$  от наблюдаемых экспериментальных данных.

Для простоты при интегрировании системы кинетических уравнений для электронов и акустических фононов мы рассматриваем пространственно однородные электрическое поле, а также функции распределения электронов и фононов. Функция распределения электронов становится изотропной вследствие электрон-примесных столкновений [35]. В нашем случае мы также можем пренебречь процессами переброса. Для относительно слабых электрических полей вклад от электрон-электронных столкновений значительно меньше, чем вклад электрон-фононного взаимодействия, и на рассмотренных малых промежутках времени электрон-электронные столкновения не учитывались.

Для фононной функции распределения мы также принимали во внимание конечное время жизни фононов (второе слагаемое в (6.48)) в нашей системе кинетических уравнений:

$$\frac{\partial N(\vec{q})}{\partial t} = I_{pe} - \frac{N_0(\vec{q}) - N(\vec{q})}{\tau_b}, \quad (6.48)$$

где  $I_{pe}$  – фонон-электронный интеграл столкновений [56-58],  $N_0(\bar{q}) = [\exp(\hbar\Omega/k_B T) - 1]^{-1}$  – термодинамически равновесная функция распределения фононов – функция Бозе–Эйнштейна при  $T_0$ ,  $T_0 = 77$  К – температура жидкого азота,  $\hbar\Omega(q) = sq$ ,  $\bar{q}$  – импульс фонона,  $s$  – поперечная скорость звука,  $v_b = (s/s_{uc})^2 I_y / 2s$ ,  $s_{uc}$  – скорость поперечного звука в подложке.

В рассматриваемом случае частота электрон-фононных столкновений значительно меньше частоты столкновений электронов с дефектами. Столкновения с дефектами и примесями происходят очень часто, т.е. за промежутки времени, малые по сравнению с характерным временем взаимодействия фононов с электронами, поэтому неизотропную добавку можно считать стационарной и пространственно однородной.

В результате получаем окончательную систему двух уравнений для изотропных функций распределения электронов и поперечных акустических фононов (6.34-6.35) [18, 32-36], которую разрешали без разложения функции распределения электронов в ряд Тейлора.

Термодинамически равновесной функцией распределения электронов по энергиям является функция Ферми–Дирака:

$$f_0(\varepsilon) = \left[ \exp\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T_e}\right) + 1 \right]^{-1}, \quad (6.49)$$

где  $\varepsilon_F$  – энергия Ферми,  $T_e$  – начальная электронная температура 77 К.

## 6.5. Сравнение полученных теоретических результатов с экспериментальными данными

На рис. 21 представлена зависимость падения нагрузки от плотности тока.

Величину уменьшения нагрузки находили следующим образом. Вначале мы подставили полученные значения функции распределения фононов в формулу (6.17) и нашли спектральную плотность случайной силы. Затем подставили это выражение в (6.16) и нашли  $(Q_n)_\omega^2$ :

$$(Q_n)_\omega^2 = \frac{\frac{\chi}{\pi} \hbar \omega \left(\frac{1}{2} + N(\omega)\right)}{m^2 (\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \chi^2 \omega^2}. \quad (6.50)$$

Зная  $(Q_n)_\omega^2$ , рассчитали корреляционную функцию  $\psi(0)$  и ее вторую производную по формуле (6.12):

$$\begin{aligned}\psi(0, N(\omega)) &= \lim_{\tau \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\chi \hbar \omega}{\pi} \left(\frac{1}{2} + N(\omega)\right)}{m^2 (\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \chi^2 \omega^2} e^{-i\omega\tau} d\omega, \psi''(0, N(\omega)) = \\ &= - \lim_{\tau \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\chi \hbar \omega^3}{\pi} \left(\frac{1}{2} + N(\omega)\right)}{m^2 (\omega_n^2 - \omega^2)^2 + \chi^2 \omega^2} e^{-i\omega\tau} d\omega.\end{aligned}\quad (6.51)$$

После этого мы нашли  $\Psi(\tau)$  и  $\Psi''(0)$  с использованием (6.10):

$$\Psi(0, N(\omega)) = 2 \sum_{n=1}^{\tilde{n}} \frac{q_n^2}{k^2} \psi(0, N(\omega)), \quad (6.52)$$

$$\Psi''(0, N(\omega)) = 2 \sum_{n=1}^{\tilde{n}} \frac{q_n^2}{k^2} \psi''(0, N(\omega)). \quad (6.53)$$

После подстановки (6.9) в (6.1) мы получаем соотношение, которое позволяет найти  $\delta \tilde{u}_{cr}^2$ , когда все другие величины известны:

$$\dot{\epsilon}_d = b l \rho_d \frac{1}{2\pi} \sqrt{-\frac{\Psi''(0, N(\omega))}{\Psi(0, N(\omega))}} \exp \left\{ -\frac{\delta \tilde{u}_{cr}^2}{2\Psi(0, N(\omega))} \right\}, \quad (6.54)$$

$$\delta \tilde{u}_{cr}(N(\omega)) = \sqrt{2\Psi(0, N(\omega)) \ln \left( \frac{b l \rho_d}{2\pi \dot{\epsilon}_d} \sqrt{-\frac{\Psi''(0, N(\omega))}{\Psi(0, N(\omega))}} \right)}. \quad (6.55)$$

Наконец находим  $\sigma$  из равенства (6.11):

$$\sigma = \sigma_{cr} \left( 1 - \frac{\delta \tilde{u}_{cr}(N(\omega))}{x_{cr}} \right), \quad (6.56)$$

$$\Delta\sigma(N(\omega)) = \sigma_{ext} - \sigma(N(\omega)). \quad (6.57)$$

Сравнение между вычисленными результатами и экспериментальными данными сделано для никеля при следующих значениях экспериментальных параметров: приложенное внешнее напряжение  $\sigma_{ext} = 68,885$  МПа,  $\dot{\epsilon}_d = 1,19 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ ,  $b = 3,52 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ , произведение  $l\rho_d = 435 \text{ см}^1$ ,  $U_0 = 3,34 \cdot 10^{19} \text{ Дж}$ ,  $x_{cr} = 0,2b$ ,  $L = 3,5 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ ,  $B = 2 \cdot 10^{-10} \text{ Н} \cdot \text{с} \cdot \text{см}^{-2}$ .

Рис. 21 ясно демонстрирует, что наш подход дает результаты того же порядка, что и экспериментальные данные. Ожидаемое снижение напряжения в случае нагрева в условиях термодинамического равновесия на несколько порядков ниже полученного в экспериментах, поэтому мы не смогли даже привести его на рис. 21. Вычисленное, используя полученные данные, падение напряжения  $\Delta\sigma$  следует рассматривать как оценку снизу, потому что в вычислениях длительность процесса действия электрического поля была взята в несколько раз короче, чем длительность токового импульса в эксперименте.

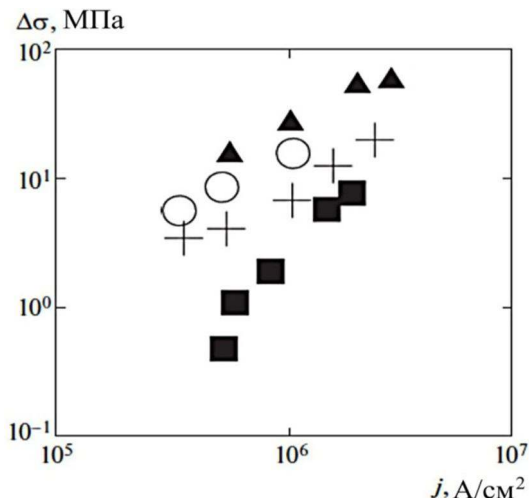


Рис. 21. Зависимость падения нагрузки от плотности тока. Квадратами обозначены экспериментальные данные, полученные О.А. Троицким [5, 6, 50] для цинка. Треугольниками отвечают экспериментам В.П. Лебедева и С.В. Савича [47] для меди. Крестики отвечают нашим результатам, полученным на основе моделей Гранато–Люкке и Ландау–Гофмана с функцией распределения фононов в момент времени  $t = 4$  мкс для напряженностей электрического поля 1; 2; 5; 8; 10 В/см, пустые кружки – результаты в момент времени  $T = 12$  мкс для напряженностей электрического поля 1; 2; 5 В/см

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Электрическое воздействие на твердые тела ни в коем случае не сводится только к их нагреву. Дефекты структуры, определяющие механические свойства материалов, обладают электрическими зарядами и немедленно отзываются на приложение полей или протекание электрического тока. Это особенно существенно при малых размерах объектов, например в современных микроминиатюрных электронных устройствах. Они могут не только постепенно изменять свое состояние, но и вообще разрушаться при работе, которая состоит, собственно, в определенной реакции на действие электрического сигнала.

1. Показано, что для корпусной стали 15X2НМФА (2Cr, 1Ni, 0,5Mn, 0,5Mo), которая характеризуется низкой пластичностью и высокой прочностью после жесткой низкотемпературной деформации, применение переменного магнитного поля приводит к значительному снижению текучести (18%) и повышению напряжения разрушения (до 10%), общего удлинения (до 9%) и шейки (до 60%) в диапазоне температур от 293-138 К. В то же время существенного уменьшения внутреннего трения (~ 2 раза) и коэрцитивной силы (до ~10%), и возрастания динамического модуля сдвига в диапазоне 300-500 К.

2. Изменения физико-механических свойств и структуры, связанные с магнитными и электрическими процессами, вызывают релаксацию напряжений в микрizonaх с высоким уровнем внутренних напряжений (границы с высокими углами разориентации, мощные плотные скопления дислокаций).

3. Обоснована необходимость проведения кинетического рассмотрения неравновесной динамики электрон-фононной подсистемы кристалла в сильном электрическом поле [58].

4. Предложен метод численного решения системы кинетических уравнений Больцмана для функций распределения электронов и фононов без разложения функции распределения электронов в ряд по энергии фононов [32-35].

5. Показано, что под действием сильного электрического поля функция распределения электронов становится неравновесной вблизи энергии Ферми благодаря электрон-фононным столкновениям передает существенную часть энергии в фононную подсистему, формируя неравновесную функцию распределения фононов. На основе модифицированной модели Гранато–Люкке и модели Ландау–Гофмана с помощью вычисленной функции распределения фононов показано, что влияние фононов на дислокации значительно сильнее, чем это было бы в случае термодинамического равновесия при нагревании образца на зафиксированные в экспериментах 12 К [6].

6. Проведенное сравнение между расчетными результатами и экспериментальными данными при электропластическом эффекте для поликристаллического никеля ясно продемонстрировало, что предложенный нами подход дает результаты того же порядка, что и экспериментальные данные, в отличие от существующих подходов, не позволяющих количественно описывать наблюдающиеся закономерности.

7. Разупрочнение никеля в режиме ползучести под влиянием импульсов постоянного или переменного магнитного поля (в том числе и однополярных) проявляется в области активного пластического течения, которое, как известно, обусловлено наличием в кристалле большого количества подвижных дислокаций, их перемещением, закреплением и откреплением от стопоров. Поэтому причины влияния магнитного поля на пластические свойства материала, очевидно, связаны с его влиянием на динамические характеристики дислокаций.

8. Известно, что подвижные при перемагничивании доменные границы, взаимодействуя с дислокациями, помогают им преодолевать локальные препятствия и приводят к увеличению плотности подвижных дислокаций и увеличению деформации при ползучести [54]. Для исключения такого взаимодействия мы специально проводили экспериментальные исследования по влиянию переменного магнитного поля (которое менялось по величине, но не изменяло знак) в условиях стабильной температуры (охлаждение образца жидким азотом), чтобы исключить вклад в изменение подвижности дислокаций при включении магнитного поля от взаимодействия дислокаций с подвижными доменными грани-

цами, а также тепловых эффектов. Как показано в работах [37-42, 54], обычно заметный вклад в эффекты разупрочнения под влиянием магнитного поля может вносить джоулев нагрев образцов вихревыми токами при изменении магнитного поля.

9. Было рассмотрено несколько различных подходов к пояснению электропластического эффекта [62-75]. Каждый из подходов опирается на абсолютно различные механизмы влияния электрического тока на деформацию. При этом три теории не только не сводятся одна к другой, но и не являются взаимоисключающими. Так, тепловое расширение с высокой скоростью, о котором говорят Билык и Унгер с сотрудниками [66-67], никак не запрещает влияние магнитного поля на спины примесей и ядер закрепленных дислокаций, как это рассматривается в модели Молоцкого [63-65]. Также не исключаются и иные возможные механизмы. Например, ни одной из вышеприведенных теорий не противоречит повышенное рождение неравновесными электронами коротковолновых фононов, которые, в свою очередь, эффективно открепляют от стопоров дислокации. Отсюда вытекает необходимость проведения дальнейших экспериментальных исследований с целью подтвердить/опровергнуть каждую из теорий отдельно. При планировании экспериментов необходимо решить следующие важные вопросы.

Для проверки модели Билыка и др. [66-67] необходимо отделить быстрый нагрев от электромагнитного влияния.

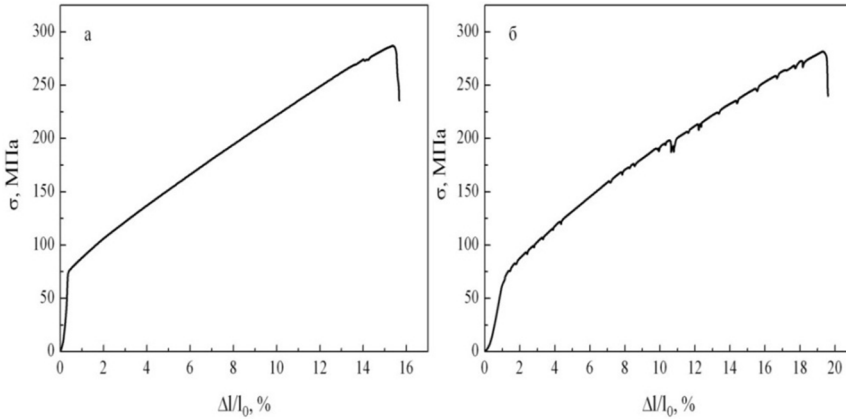
Для проверки модели Молоцкого [63-65] необходимо проводить эксперименты на материалах без парамагнитных примесей.

10. Для оценки вклада индукционной составляющей электрического поля, вызванного изменением индукции однополярного магнитного поля, С.В. Лебедевым (ХНУ им. В.Н. Каразина) было проведено экспериментальное исследование влияния плотности импульсного электрического тока на уменьшение напряжения текучести в течение импульсов тока. Сравнительные эксперименты проводились на одинаковых образцах поликристаллического никеля повышенной чистоты (99,996 %). Параметры плотности электрического тока соответствовали напряженности индукционного электрического поля, возникающего в результате действия однополярных импульсов магнитного поля при исследовании ползучести (см. разделы 4,6). Как видно из рис.22б, во время импульса тока происходит уменьшение напряжения текучести приблизительно на 1 %, что соответствует 0.1 % деформации. Эти экспериментальные данные соответствуют структурным изменениям (см. рис. 21).

10.1. Совершенно необходимо проведение комплексных теоретических и экспериментальных исследований и разработка физической и математической модели для описания нестационарной неравновесной кинетики электрон-фононной подсистемы кристалла в электрическом и/или магнитном полях с учетом возбуждения плазмонных солитонов, бризеров и других нелинейных образований.

10.2. Построение физической модели для количественного описания влияния нестационарности неравновесности электронных и фо-

нонных функций распределения при учете возбуждения нелинейных образований на структурные изменения в кристалле, влияющие на комплекс физико-механических свойств кристаллов.



*Рис. 22. Зависимость напряжения текучести поликристаллического никеля от деформации: левый график – без дополнительного действия электрического тока; правый график – при периодическом действии импульсного электрического тока плотностью  $2,75 \cdot 10^5 \text{ A/cm}^2$*

10.3. Экспериментальные исследования и проверка построенной физической модели и описание влияния нестационарности неравновесности электронных и фононных функций распределения при учете возбужденных нелинейных образований на структурные изменения в кристалле, обусловленные поведением точечных и протяженных дефектов решетки, которые определяют: тепловые, электрические и другие макроскопические характеристики кристалла, в частности его пластичность, твердость и т.п., а также интерпретацию экспериментальных результатов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hayashi S., Takahashi S., Yamamoto M. Effect of amagnetic field on the flow stress of Co and Fe single crystals // *Phys. Soc. Japan* 25 381-384 (1968).
2. Гиндин И. А., Лавриненко И. С., Неклюдов И. М. Магнитоэластический эффект в поликристаллическом никеле // *Письма в ЖЭТФ* 16(6)341-343 (1972).
3. Троицкий О. А., Лихтман В. И. Электроэластическая деформация металлов // *ДАН СССР* 148 (2) 334-337 (1963).
4. Громов В. Е., Целлермайер В. Я., Базайкин В. И. Электростимулированное волочение: анализ процесса и микроструктура (М.: Недра, 1996).
5. Спицын В. И., Троицкий О.А. Электроэластическая деформация металлов (М: Наука, 1985).
6. Троицкий О. А., Баранов Ю. В., Авраамов Ю. С., Шляпин А.Д. Физические основы обработки современных материалов (теория, технология, структура и свойства). В двух томах (Москва-Ижевск: Изд-во Ин-та комп. техн., 2004). Т. 1. 590 с.
7. Неклюдов И. М., Стародубов Я. Д., Соколенко В. И. Влияние магнитных полей на сопротивление пластической деформации кристаллических тел (обзор) // *УФЖ* 50 (8A) A113-A121 (2005).
8. Неклюдов И. М. и др. Влияние магнитной обработки на механические характеристики и термические напряжения сварных соединений корпусной стали 15X2НМФА // *Физика и химия обработки материалов*— 2011. - №1. - С.84-88.
9. Васильев М. А. Особенности пластической деформации металлов и сплавов в магнитном поле // *Успехи физики металлов* 8 65-105 (2007).
10. Sokolenko V. I. et al. Changes in the physical-mechanical properties and structure of ferritic-pearlitic steel 15Kh2NMFA from severe low temperature deformation and exposure to alternating magnetic field. // *Journal of Low Temperature Physics* 41, 399-408 (2015).
11. Ажажа В.М., Неклюдов И. М., Соколенко В.И. и др. Изменение деформационной подалливости корпусной стали 15X2НМФА в результате магнитных воздействий // *Труды 18-й Международной конференции по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению* (Харьков, НИЦ ХФТИ, 2008, с.156-157).
12. Трефилов В И и др. Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических металлов (Киев: Наукова думка, 1989).
13. Крайнюк Е А и др. Влияние эксплуатационных дефектов на прочностные свойства металла теплообменных труб // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение* 3(85) 165 (2004).
14. Неклюдов И. М., Соколенко В. И., Ткаченко В. И. О релаксации дефектных структур и внутренних напряжений в металлах // *Труды 9-ой Международной конференции “Физические явления в твердых телах”* (Харьков, 2009, с.93-94).
15. Сосин А., Кифер Д. В. Пластичность металлов (М.: Металлургия, 1972).
16. Мицек А. И., Пушкарь В. Н. Реальные кристаллы с магнитным упорядочением (Киев: Наукова думка, 1978).
17. Дубинко В.И., Карась В.И., Клепиков В.Ф., Остапчук П.Н., Потапенко И.Ф. Моделирование повышения пластичности материалов под действием импульсов электрического тока // *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение* 4-2(94) 158-166 (2009).
18. Захаров В.Е., Карась В.И. Неравновесные колмогоровского типа распределения частиц и их применения // *УФН* 183 (1) 55-85 (2013); [Zakharov V.E., Karas V.I. *Physics-Uspekh* 56 49 (2013)].
19. Захаров В. Е. Колмогоровские спектры в задачах слабой турбулентности // *Основы физики плазмы*. 2 48 (М.: Энергоатомиздат, 1984) [Zakharov V E Kolmogorov spectra in weak turbulence problems, *Handbook of plasma physics*. Vol.2. Basic plasma physics II, pp. 3-36 (1984). Ed. by A.A. Galeev, R.N. Sudan, North-Holland, 1984]
20. Захаров В. Е. Слабая турбулентность в средах с распадным спектром // *ПМТФ* 435-39 (1965)
21. Захаров В. Е., Филоненко Н.Н. Спектр энергии для стохастических колебаний поверхности жидкости // *ДАН СССР* 170 (6) 1292-1295 (1966)
22. Захаров В. Е., Филоненко Н.Н. Слабая турбулентность капиллярных волн // *ПМТФ* 5 62-67 (1967)
23. Захаров В. Е. Об устойчивости волн в нелинейных средах с дисперсией // *ЖЭТФ* 51(3) 688-696 (1966)

24. Захаров В.Е., Сагдеев Р.З.О спектре акустической турбулентности // ДАН СССР 192 297-300 (1970)
25. Zakharov V., Dias F., Pushkarev A. One-dimensional wave turbulence // Physics Reports 398(1) 1-65 (2004).
26. Nonlinear Waves and Weak Turbulence edited by: V. E. Zakharov (Amer. Math. Soc. Transl. Ser. 2, 182(1998) 197 pp)
27. Musher S. L., Rubenchik A. M., Zakharov V. E. Weak Langmuir turbulence // Physics Reports 252(4) 178-274 (1995)
28. Zakharov V. E., L'vov V. S., Falkovich G. Kolmogorov spectra of turbulence I. Wave turbulence (Berlin: Springer-Verlag, 1992).
29. Конторович В. М. Линейные и нелинейные волны // Радиофизика и радиоастрономия 11 5 (2006)
30. Кац А. В., Конторович В. М., Моисеев С. С., Новиков В. Е. Точные степенные решения кинетических уравнений для частиц // ЖЭТФ 71 177 (1976)
31. Карась В. И., Моисеев С. С., Новиков В. Е. Неравновесные стационарные распределения частиц в твердотельной плазме // ЖЭТФ 71 1421 (1976)
32. Karas` V.I. et al. Nonequilibrium kinetics of electron-phonon subsystem of a crystal in strong electric field as a base of electroplastic effect // The International Conference MSS-14. Mode conversion, coherent structure and turbulence (Moscow. Conference Proceedings 2014, p. 64-69).
33. Zakharov V. E., Karas` V. I., Vlasenko A. M. Nonequilibrium kinetics of electron-phonon subsystem of a crystal in strong electric field // The International Conference MSS-14. Mode conversion, coherent structure and turbulence (Moscow. Conference Proceedings 2014, p. 34-39).
34. Karas` V I, Vlasenko A M, Voyevodin V N, Sokolenko V I, Zakharov V E. Nonequilibrium kinetics of electron-phonon subsystem of a crystal in strong electric and magnetic field as a base of electro- and magnetoplastic effects // East Europe Journal of Physics 1(3) 40-52 (2014)
35. Karas` V I, Vlasenko A M, Sokolenko V I, Zakharov V E. Nonequilibrium kinetics of electron-phonon subsystem of a crystal in strong electric field as a base of electroplastic effect // ЖЭТФ 148 (3) 573-582 (2015) [Karas` V I, Vlasenko A. M., Sokolenko V. I., Zakharov V. E. JETP 121 (3) 499 (2015)].
36. Карась В. И., Потапенко И. Ф. Динамика неравновесной электрон-фононной системы для полупроводников и металлов в сильном электрическом поле // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение 4-2 (62) 150-157 (2009).
37. Гиндин И. А., Кравченко С. Ф., Стародубов Я. Д. Установка для исследования ползучести металлов // ПТЭ 3 269-271 (1963).
38. Аксенов В. К. и др. Структурные и активационные характеристики ползучести никеля в интервале температур 4,2-140 К // ФНТ 6 (1) 118-129 (1980).
39. Аксенов В. К. и др. Влияние магнитного поля на ползучесть никеля // ФНТ 3 (7) 922-931 (1977).
40. Гиндин И. А., Лавриненко И. С., Неклюдов И. М. Магнитопластический эффект в поликристаллическом никеле // ФТТ 15 636-638 (1973).
41. Chow C.R., Nembach E. Magnetically and thermally activated dislocation motion in Ni single crystals // ActaMet. 24 (5) 453 (1976).
42. Аксенов В. К. и др. Влияние переменного магнитного поля на ползучесть монокристаллов никеля при гелиевых температурах // ФНТ 4 (10) 1316-1319 (1978).
43. Большуткин Д. Н., Десненко В. А., Ильичев В. Я. Низкотемпературная пластическая деформация никеля в магнитных полях до 34 кЭ // ФНТ 2 (2) 256-262 (1976).
44. Большуткин Д. Н., Десненко В. А., Ильичев В. Я. Магнитопластический эффект и нагрев вихревыми токами // ФНТ 2 (12) 1544-1549 (1976).
45. Довбня А. Н. и др. Влияние переменного магнитного поля на ползучесть облученной корпусной стали 15Х2НМФА // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение 2(90) 39-42 (2014).
46. Karas` V.I., Sokolenko V.I., Karasyova E.V., Mats A.V., Vlasenko A.M. Исследование ползучести никеля во внешнем магнитном поле // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma Electronics and New Acceleration Methods 4(98) 277-281 (2015).
47. Karas` V. I., Vlasenko A. M., Zakharov V. E. Influence of alternating magnetic field on physical and mechanical properties of crystals // Proc. VI International Conference for Young Scientists "Low Temperature Physics" ICYS LTP 2015 (Kharkov 2015, p. 51).
48. Захаров В. Е., Карась В. И. Неравновесные колмогоровского типа распределения частиц и их применения // Проблемы теоретической физики. Научные труды (Х.: ХНУ им. В.Н. Каразина, вып. 1 248-279 (2014).

49. Karas` V. I., Karasyova E. V., Mats A. V., Sokolenko V. I., Vlasenko A. M., Zakharov V. E. Influence of alternating magnetic field on physical and mechanical properties of crystals // *Metalofizika I noveishie tehnologii* 38(8) 1024-1051 (2016).
50. Спицын В.И., Троицкий О.А. Электропластический эффект в металлах // *Вестник АН СССР* №11 10-14(1974)
51. Неклюдов И.М., Камышанченко Н. В. Физические основы прочности и пластичности металлов. Часть 2: Дефекты в кристаллах (Москва-Белгород: Изд-во Белгородского ГУ, 1997).
52. Ландау А. И., Гофман Ю. И. Анализ процесса выхода дислокации из параболической ямы на основе стохастического метода Ланжевена // *Физика твердого тела* 16 (11) 3427-3234 (1974).
53. Granato A., Lücke K.J. Theory of mechanical damping due to dislocations // *Appl. Phys.* 27 583-593 (1956).
54. Каганов М.И., Кравченко В.Я., Нацик В.Д. Торможение дислокаций электронами в металлах // *УФН* 111 655-682 (1973).
55. Perrin N., Budd H. Phonon generation by Joule heating in metal films // *Phys. Rev. Let.* 28(26) 1701-1704 (1972).
56. Басс Ф. Г., Гуревич Ю. Г. Горячие электроны в сильных электромагнитных волнах в плазмеполупроводников и газового разряда (М.: Наука, 1975).
57. Силин В. П. Введение в кинетическую теорию газов. Издание 3, исправленное и дополненное (М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2013).
58. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика (М.: Физмат-лит, 2002).
59. Karas` V. I., Potapenko F., Vlasenko A. M. Кинетика неравновесной электрон-фононной системы для полупроводников и металлов в электрическом поле // *Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma Electronics and New Acceleration Methods* 4(86) 272-278 (2013).
60. Карась В. И., Власенко А. М., Соколенко В. И. Кинетика неравновесной электрон-фононной системы кристаллов в электрическом поле // *Материалы 55-й Международной конференции «Актуальные проблемы прочности»* (Харьков: ННЦ ХФТИ, 2014 с. 14).
61. Лебедев В. П., Савич С. В. Воздействие импульсов электрического тока плотностью  $2,3 \cdot 10^{10}$  А·м<sup>2</sup> на деформацию меди // *Вестник ХНУ, серия «Физика»* 962(15) 88-91 (2011).
62. Sprecher A. F., Mannan S. L., Conrad H. On the mechanisms of the electroplastic effect in metals // *Acta Material* 34 (7) 1145-1162 (1986).
63. Molotskii M., Fleurov V. Magnetic effects in electroplasticity of metals // *Physical Review* B52 (22) 829-834 (1995).
64. Molotskii M., Fleurov V. Spin effects in plasticity // *Physical Review Letters* 78 (14) 2779-2782 (1997).
65. Molotskii M. Theoretical basis for electro- and magneto- plasticity // *Materials science and engineering* A287 248-258 (2000).
66. Bilyk S. R., Ramesh K. T., Wright T. W. Finite deformations of metal cylinders subjected to electromagnetic fields and mechanical forces // *Journal of the mechanics and physics of solids* 53 525-544 (2005).
67. Unger J. et al. On the effect of current pulses on the material behavior during electromagnetic metal forming // *Proc. 2nd International Conference on High Speed Forming (Dortmund, 2006, p.23-28)*
68. Столяров В. В. Электропластический эффект и фазовые превращения в аморфных и нанокристаллических сплавах под влиянием растяжения с током // *Изв. РАН. Сер. физ.* 79 (9) 1314-1317 (2015); [Stolyarov V.V. *Bull. Russ. Acad. Sci.: Physics* 79(1) 1314-1317 (2015)].
69. Столяров В. В. Влияние химического и фазового состава на проявление электропластического эффекта в титановых сплавах // *Изв. РАН. Сер. физ.* 78 (3) 357-361 (2014); [Stolyarov V.V. *Bull. Russ. Acad. Sci.: Physics* 78(3) 357-361 (2014)].
70. Столяров В.В. Электропластический эффект в титановых сплавах // *Вестник научно-технического развития* 67 35-39 (2013)
71. Conrad H. A study into the mechanism(s) for the electroplastic effect in metals and its application to metalworking, processing and fatigue // *Mater. Sci. Eng. A* 287 276-289 (2000).
72. Меденцов В. Э., Столяров В. В. Деформация и разрушение материалов 12 37-43 (2012).
73. Столяров В. В. Роль внешних воздействий в наноструктурных титановых сплавах // *Изв. РАН. Сер. физ.* 76 (1) 108-112 (2012); [Stolyarov V. V. *Bull. Russ. Acad. Sci.: Physics* 76(1) 108-112 (2012)].
74. Столяров В. В., Угурчиев У. Х. Деформируемость и микротвердость крупнозернистых титановых сплавов при прокатке с током // *ФТВД* 19 92-102(2009).
75. Зуев Л. Б. Физические основы прочности материалов. 2-е изд. (Долгопрудный: Изд. Дом Интеллект, 2016).

## ЧАСТЬ II

---

# ТЕОРИЯ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВАХ ЗАМЕЩЕНИЯ ПОД ОБЛУЧЕНИЕМ

**А. А. Туркин**

*Институт теоретической физики им. А. И. Ахиезера  
Национальный научный центр  
«Харьковский физико-технический институт»  
ул. Академическая, 1; г. Харьков, 61108, Украина*

**О**бообщены результаты теоретических исследований кинетики фазовых превращений и стабильности фаз в облучаемых сплавах, построена теория фазовых превращений в неупорядоченных бинарных сплавах замещения под облучением. Сформулирована модель радиационно-индуцированной сегрегации в концентрированных бинарных сплавах. Проведен анализ устойчивости стационарного распределения компонентов в облучаемом сплаве относительно пространственных флуктуаций состава сплава и показано, что стационарное состояние асимптотически устойчиво. Для нахождения средних концентраций радиационных точечных дефектов (ТД) построена модель эффективной среды для сплавов. Показано, что радиационно-индуцированная сегрегация не приводит к возникновению эффектов предпочтения (преференса) в сплаве без выделений. Необходимой предпосылкой для сегрегационного преференса является различие состава сплава в окрестности стоков различных типов.

Исследован рост выделений новой фазы в концентрированных сплавах замещения с учетом основных механизмов потери фазовой стабильности: радиационно-индуцированной сегрегации и каскадного разупорядочения. Условия стабильности фаз сформулированы в терминах радиационно-модифицированных растворимостей примеси по

отношению к когерентным и некогерентным выделениям. Разработан метод построения радиационно-модифицированных фазовых диаграмм.

Построена модель низкотемпературного растворения пластинчатых выделений каскадами атомных соударений, которая согласуется с экспериментальными данными. Сформулирована модель низкотемпературного переноса атомов вследствие перемешивания в каскадах смещений, которая учитывает неоднородность пространственной структуры каскада. Показано, что доминирующий вклад вносит атомное перемешивание в области термического пика. С помощью моделирования по методу Монте-Карло установлено, что диффузия носит гауссов характер.

Исследовано влияние потери когерентности на характер эволюции выделений при каскадообразующем облучении. Сформулирована модель эволюции смешанного ансамбля когерентных, полукogerентных и некогерентных выделений. Показано, что зарождение когерентных выделений, их рост, с последующей потерей когерентности, а также каскадное растворение больших некогерентных выделений могут происходить одновременно, что приводит к формированию узкого квазистационарного распределения по размерам полукogerентных выделений.

Предложен новый численный метод для моделирования кинетики зарождения, роста и поздней стадии эволюции выделений новой фазы. В развитом методе гибридный подход (конечно-разностная система уравнений в области малых размеров и континуальное описание в области больших размеров) используется в комбинации с методом линий по временной переменной и неравномерной сеткой по пространственной переменной.

Проведено моделирование кинетики распада в сплавах с сильными гетерофазными флуктуациями, в которых стандартные модели зарождения и коалесценции не применимы. Показано, что гетерофазные флуктуации замедляют гомогенное зарождение даже в сильно пересыщенных твердых растворах. Гетерофазные флуктуации влияют на форму функции распределения выделений на стадии перехода к асимптотическому режиму коалесценции. В сплавах без облучения на больших временах распределение выделений по размерам стремится к устойчивому распределению, близкому к авторемольному решению Лифшица–Слёзова.

## 1. В В Е Д Е Н И Е

Облучение многокомпонентных сплавов высокоэнергетичными частицами обычно ведет к заметным изменениям в их фазовой микроструктуре. Потеря фазовой стабильности существенно влияет на исходные свойства сплава. Наблюдаются распухание и ползучесть материалов, изменяются пластические свойства и прочность сплава [1, 2]. В много-

численных реакторных и имитационных экспериментах были обнаружены следующие явления [3-8]:

- аморфизация кристаллических фаз;
- разупорядочение упорядоченных выделений (превращение порядок–беспорядок);
- пространственное перераспределение компонентов сплава вблизи стоков ТД;
- зарождение и рост выделений неравновесных фаз;
- растворение выделений термически устойчивых фаз;
- радиационно-ускоренная коалесценция выделений;
- обратная коалесценция (уменьшение среднего размера выделений).

В настоящем обзоре не рассматривается радиационно-индуцированная аморфизация и разупорядочение упорядоченных массивных выделений (превращения без изменения конценораций компонентов), рассмотрение этих вопросов можно найти в работах [9-11] и [12, 13], соответственно.

Гиббсовская фазовая диаграмма сплава не может быть использована для предсказания изменений фазовой микроструктуры, вызванных облучением. Например, в случае недосыщенных твердых растворов Ni-Si, Ni-Ge [14] и Al-Zn [15] было установлено, что положение границы однофазной области твердого раствора зависит от скорости создания смещений. В работе [16] приведены примеры образования радиационно-индуцированных фаз в системах Mg-Cd, Al-Zn, Al-Ag, Ni-Be, Ni-Si, Ni-Ge, Cu-Be, Pd-Mo, Pd-W, W-Re. Подтверждением того, что выделения вызваны именно облучением, являлось растворение выделений при послерадиационном отжиге при температурах ниже температуры облучения. Образование выделений неравновесных фаз означает уменьшение предела растворимости примеси<sup>1</sup> под облучением.

Облучение создает большое количество неравновесных ТД – вакансий и междоузельных атомов (МА). На первый взгляд простое добавление вклада от радиационных ТД в свободную энергию различных реальных или потенциально возможных фаз способно учесть влияние облучения на фазовый состав материала. То есть любая комбинация фаз, соответствующая минимуму свободной энергии системы, будет определять конечное фазовое состояние сплава после продолжительного облучения, когда заканчиваются переходные кинетические процессы. Применимость такого подхода в действительности весьма ограничена. Причина состоит в том, что концентрации радиационных дефектов, как правило, невелики ( $<10^{-4}$  атомных долей) и их вклад не приводит к заметному изменению свободной энергии фаз [17]. Другая причина – при облучении нарушаются условия равновесия. Принцип минимума свободной энергии применим к изолированным системам [18]. Облучаемый металл не является изолированной системой, так как подвергается воздействию потока частиц высокой

---

<sup>1</sup> Здесь и далее примесью будем называть компонент сплава, который контролирует фазовое превращение (solute в англоязычной терминологии).

энергии, пересекающих границы тела. Этим частицам трудно приписать какой-либо химический потенциал, «температура» частиц при характерной энергии порядка мегаэлектронвольт выше температуры облучаемого металла на много порядков.

В металлах при облучении (даже в установившемся режиме) существуют градиенты концентраций ТД и, как правило, примесных атомов, что обусловлено радиационно-индуцированной сегрегацией (см. ниже). Эти градиенты нарушают термодинамические условия, согласно которым при равновесии химический потенциал каждой частицы в системе остается постоянным. В облучаемых системах нарушается принцип микроскопической обратимости [17], хотя бы потому, что ТД, образующиеся при выбивании атомов из узлов кристаллической решетки, диффундируют к стокам, однако обратных потоков ТД от стоков нет.

Таким образом, оказывается, что методы расчета фазовых диаграмм, основанные на минимизации свободной энергии (см., например, [19, 20]), неприменимы в условиях облучения, даже если рассматривать неравновесные радиационные ТД как дополнительные химические компоненты.

Отмеченные обстоятельства показывают, что материалы под облучением находятся в необратимых термодинамических условиях. В принципе, в этих условиях они могут достигать некоторого квазистационарного состояния, но не термодинамического равновесия. Подобные системы могут быть описаны на основе континуального приближения, использующего принципы оптимизации, например принцип минимума производства энтропии при достижении установившейся конфигурации системы [21]. Однако такие схемы, как отмечается в [17], часто приводят к неверным результатам [22].

Более продуктивным для исследования кинетики радиационных повреждений металлов и сплавов является подход, основанный на атомистических представлениях. В этом подходе анализируется кинетика различных процессов, в которых участвуют радиационные дефекты, исследуются закономерности изменения скоростей процессов, делаются попытки определения конечного состояния системы, а также возможных путей приближения к этому состоянию.

К настоящему времени установлены основные элементарные физические механизмы, ответственные за перераспределение компонентов сплава под облучением: радиационное перемешивание, радиационно-ускоренная диффузия и радиационно-индуцированная сегрегация. Все они связаны со смещением атомов из узлов кристаллической решетки во время облучения и с миграцией образующихся ТД – вакансий и (МА). Вклад каждого механизма в микроструктурные изменения зависит от начального состояния сплава и условий облучения.

При достаточно высоких температурах радиационные вакансии и междоузельные атомы могут диффундировать по решетке до поглощения стоками, которыми могут быть такие несовершенства структуры, как дислокации, границы зерен, межфазные границы или свободные поверх-

ности. При встрече с дефектами противоположного знака происходит взаимная рекомбинация. Диффузия дефектов по решетке неизбежно связана с перемещением атомов, следовательно, диффузия ТД ускоряет все кинетические процессы, зависящие от подвижности атомов.

Важным проявлением диффузии радиационных ТД является сегрегационное перераспределение примесных атомов вблизи стоков дефектов: атомы либо стремятся к стоку, либо удаляются от него. С точки зрения фазовой стабильности сплавов при облучении важно то, что сегрегация примесных атомов может приводить к значительным локальным изменениям состава сплава, достаточным для изменения локального фазового равновесия. Образовавшиеся фазы могут находиться в равновесии с ближайшими областями кристалла, но не с участками, где явление сегрегации не проявилось.

Согласно [2], предположение о том, что сегрегация или «расслоение» однородного сплава может быть вызвана потоком радиационных ТД, было впервые высказано в 1969 г. [23]. Экспериментальное подтверждение явления сегрегации растворенных атомов за счет вакансионных потоков в закаленных металлах, а также теоретическое описание сегрегации у границ зерен и пор дано в работе [24]. Первые прямые экспериментальные доказательства существования явления радиационно-индуцированной сегрегации были получены в работах [25, 26]. Электронная микроскопия выявила аномально высокий деформационный контраст вокруг небольших пор в облученной электронами нержавеющей стали (18%Cr–8%Ni), которая содержала некоторое количество кремния. Было высказано предположение, что этот контраст был связан с появлением избыточной концентрации кремния вблизи пор из-за радиационно-индуцированной сегрегации после сравнительно небольшой дозы облучения 0,3 сна. В работе [26] в том же сплаве наблюдали выделение неравновесной фазы на поверхности пор после более высокой дозы облучения (4,3 сна). Неожиданное открытие  $\gamma'$ -фазы Ni<sub>3</sub>Si вблизи вакансионных пор в нержавеющей стали 316 продемонстрировало практическую важность явления радиационной сегрегации растворенных атомов и фазовой нестабильности [27].

Сегрегационные эффекты в облучаемых сплавах возникают благодаря связи между потоками компонентов сплава и потоками ТД. В разбавленных и концентрированных сплавах различают два механизма сегрегации. В разбавленных сплавах связь потоков возникает благодаря образованию сильно связанных подвижных комплексов дефект-примесь, которые переносят атомы примеси к стокам. Модели, основанные на переносе примеси при помощи комплексов дефект-примесь, были успешно применены для интерпретации ряда экспериментальных наблюдений [28-31]. Термин «разбавленный сплав» означает, что атомы примеси в сплаве изолированы. То есть ТД может взаимодействовать только с одним атомом примеси. В случае концентрированных бинарных сплавов сегрегационные модели работ [32, 33] основаны на модели неупорядоченных сплавов Маннинга [34]. В этих моделях предполагается, что причина радиационно-индуцированной сегрегации – это обратный эффект Киркен-

далла, возникающий из-за различий в скоростях диффузии компонентов сплава при миграции по вакансионному и междоузельному механизмам. Первые модели радиационно-индуцированной сегрегации в бинарных сплавах, которые включают уравнения диффузии радиационных ТД и компонентов сплава, были построены в работах [32, 33]. Затем были проведены дальнейшие уточнения модели (учет корреляционных и термодинамических факторов в выражениях для потоков примеси и ТД [35-37]), которые не затронули существа модели работ [32, 33].

С помощью моделей сегрегации в разбавленных и концентрированных сплавах был объяснен ряд экспериментально наблюдаемых закономерностей (см. обзор [38]). Однако и большинство результатов, на которых основаны многие качественные выводы, получены методом численного моделирования сегрегации в тонких пленках, приповерхностных слоях сплавов и вблизи границ зерен [39-43]. Аналитические расчеты немногочисленны и проделаны в основном для случая разбавленных сплавов (см., например, [29, 44]).

При низких температурах, когда процессы термоактивируемой диффузии ТД подавлены, радиационное перемешивание за счет одиночных атомных соударений (recoil dissolution) и разупорядочения внутри областей каскадов столкновений может приводить к растворению выделений [45] и увеличению предела растворимости примеси [46-48]. Однако в этих работах радиационно-индуцированная сегрегация не учитывалась, предполагалось, что атомы примеси диффундируют с некоторым эффективным постоянным коэффициентом диффузии.

В одной из первых работ [49], посвященной изменению фазовой стабильности за счет баллистических эффектов, была предложена феноменологическая средне-полевая модель, согласно которой баллистические эффекты приводят к следующему закону соответственных состояний: равновесной конфигурацией твердого раствора при температуре  $T$  и мощности облучения  $K$  является конфигурация системы без облучения при температуре  $T' = T[1 + \Delta(T, K)]$ , где  $\Delta$  – это функция температуры и мощности облучения, а также параметров материалов. Основная идея работы [49] – переформулировать теорию баллистических эффектов в общем виде для сплава как целого, не рассматривая поведение его локальных частей. Такой подход представляется слишком упрощенным.

Важную роль в кинетике распада под облучением может играть взаимная рекомбинация ТД. В серии работ [50] для объяснения гомогенного радиационно-индуцированного образования когерентных выделений предложен механизм их роста, который связан с взаимной рекомбинацией вакансий и МА на ловушках ТД, содержащихся на поверхности выделения. В работах [50] была рассмотрена кинетика зарождения в разбавленных сплавах и показано, что рекомбинация дефектов приводит к уменьшению предела растворимости примеси. По существу, модель этих работ [50] похожа на сегрегационные модели, которые связывают возникновение градиентов состава сплава вокруг стоков

ТД с радиационно-ускоренным переносом примеси посредством мигрирующих ТД, в то время как рекомбинация ТД на поверхности стока предотвращает обратную диффузию примеси.

Представленный выше обзор показывает, что к концу 1980-х гг. были развиты основные подходы и модели для теоретического описания изменения фазовой стабильности сплавов под облучением. Эти модели качественно поясняют экспериментально наблюдаемые закономерности. Вместе с тем целый ряд практически важных задач остался нерешенным. В частности, не были рассмотрены следующие задачи:

- построение модели эффективной поглощающей среды для сплавов с целью нахождения концентраций ТД и эффективностей стоков ТД;
- совместное влияние радиационно-индуцированной сегрегации и радиационного перемешивания на устойчивость выделений в сплавах;
- зависимость устойчивости выделений новой фазы под облучением от типа межфазной границы;
- кинетика эволюции смешанного ансамбля когерентных, полукogerентных и некогерентных выделений в облучаемом сплаве и формирование распределений по размерам выделений новой фазы в зависимости от условий облучения;
- влияние мелких кластеров (гетерофазных флуктуаций) на кинетику диффузионно-лимитируемого распада пересыщенных твердых растворов в термических условиях и под облучением;
- влияние выделений вторых фаз на средние концентрации ТД, скорость их рекомбинации и рост вакансионных пор в облучаемых материалах.

Отсутствие корректного описания радиационных эффектов в сплавах часто приводит к ошибочным выводам. Например, в случае сплавов использование модели эффективной поглощающей среды, разработанной для чистых металлов, привело к ошибочному заключению о возникновении эффектов предпочтительного поглощения ТД определенного типа поверхностью тонкой пленки из-за обратного эффекта Киркендалла [51].

Рассмотрению отмеченных выше задач посвящен настоящий обзор работ авторов. Ниже дано краткое описание выполненных исследований и сравнение с моделями других авторов. Для удобства изложения и аргументации дополнительные сведения обзорного характера и сопоставление с подходами других авторов будет также представлено в каждом разделе при решении конкретных задач.

Любое описание диффузионных процессов и фазовой стабильности облучаемых сплавов должно начинаться с построения системы диффузионных уравнений. Во втором разделе сформулирована модель радиационно-индуцированной сегрегации в концентрированных бинарных сплавах замещения [52-54] и рассмотрена связь этой модели с моделями сегрегации, описанными в литературе. Рассматривается неупорядоченный твердый раствор замещения элементов А и В. Компонент А называется примесью. Под облучением в сплаве образуются вакансии и МА. Взаимо-

действие между ТД и полями напряжений, которые могут создавать выделения и стоки ТД, не учитывается. В простейшем случае совокупность МА состоит из А и В атомов. Для нахождения диффузионных потоков ТД и атомов примеси используется модель неупорядоченного сплава, которая была разработана Маннингом [34, 55] для описания вакансионного механизма диффузии в концентрированных сплавах. Согласно модели Маннинга: а) вакансии не образуют комплексов с элементами сплава и б) частота скачков вакансии зависит только от типа атома, с которым вакансия обменивается положением, то есть вводится два коэффициента диффузии вакансий  $d_{Av}$  и  $d_{Bv}$ . Что касается диффузии междоузлий – используется аналогичная модель и диффузия междоузельных атомов А и В описывается двумя диффузионными коэффициентами  $d_{Ai}$  и  $d_{Bi}$  соответственно. Важным является то, что при построении сегрегационной модели учитываются взаимные превращения междоузельных атомов А и В при взаимодействии с атомами решетки.

С помощью построенной модели сегрегации исследованы общие свойства квазистационарных распределений ТД и примеси в облучаемом сплаве со стоками, но без выделений вторых фаз и полей упругих напряжений. Сформулирован подход эффективной среды для бинарных сплавов замещения и построены уравнения скоростей реакций для нахождения средних концентраций ТД. Проводится сравнение этого подхода с существующими моделями для чистых металлов [56-58].

При построении модели эффективной поглощающей среды неизбежно возникает вопрос о предпочтительном поглощении стоками ТД дефектов определенного типа. В чистых металлах эффекты предпочтения (преференса) возникают из-за 1) асимметрии взаимодействия между ТД и стоками различного типа и 2) зависимости граничных условий для концентраций дефектов от типа стока [59, 60]. Третья причина, специфичная для сплавов, может возникать из-за сегрегации. Дело в том, что локальное перераспределение компонентов сплава в окрестности стока может приводить к отклонению эффективностей захвата для вакансий и МА от их величин в чистом металле; то есть эффективность стока по отношению к поглощению дефектов определенного типа может измениться [35, 51]. Во втором разделе рассмотрен случай, когда граничные условия для ТД на всех стоках одинаковы, а ТД не взаимодействуют со стоками. Показано, что в таком сплаве стоки ТД не обладают предпочтением к поглощению ТД определенного типа, несмотря на неоднородности состава сплава в окрестности стоков, которые возникают благодаря обратному эффекту Киркендалла.

В разделе 2.3. проведен анализ устойчивости стационарного распределения компонентов в облучаемом сплаве относительно пространственных флуктуаций состава сплава и показано, что стационарное состояние асимптотически устойчиво. Найдено характерное время релаксации малых возмущений состава сплава, которое можно использовать для оценки времени формирования сегрегационного профиля концентрации вблизи

стока ТД. Заметим, что в работах [61, 62] обсуждалась устойчивость однородного распределения компонентов сплавов, описываемых системами уравнений общего вида. Однако в этих работах механизмы переноса атомов не конкретизируются, а находятся лишь условия, которым должна удовлетворять матрица коэффициентов диффузии, чтобы сплав был устойчив относительно локального расслоения.

В третьем разделе рассмотрена фазовая стабильность сплава при бескасадном облучении. Рассмотрено влияние радиационно-индуцированной сегрегации на рост выделений второй фазы в концентрированном бинарном сплаве с учетом структуры межфазных границ. Устойчивость выделений в облучаемом сплаве существенно зависит от типа границ выделений и определяется не только термодинамическими, но и кинетическими факторами, такими как диффузионные константы компонентов сплава, средние концентрации неравновесных ТД. Рассмотрено два предельных случая межфазных границ выделение-матрица, а именно полностью когерентные и полностью некогерентные границы. Предполагается, что структура и тип границы выделения не изменяются вследствие облучения. Идеальная когерентная граница не имеет дефектных участков, которые могли бы поглощать ТД, и является прозрачной для ТД. По этой причине в окрестности изолированного когерентного выделения, расположенного вдали от стоков, потоки ТД малы по сравнению с потоками ТД на сток [53]. Миграция ТД вблизи когерентного выделения и через его границу может быть обусловлена разными причинами: а) отклонением концентраций ТД от квазистационарных значений; движением самой границы; б) наличием стоков вокруг выделения, которые формируют диффузионные поля ТД (см. раздел 3.1.3); в) усиленной рекомбинацией ТД внутри когерентного выделения [63].

Некогерентное выделение отличается от когерентного выделения тем, что на его поверхности поддерживаются термически равновесные концентрации дефектов, то есть некогерентное выделение является стоком ТД. При наличии предпочтительной связи потока одного из компонентов сплава с потоком дефектов того или иного типа происходит сегрегационное разделение компонентов сплава в окрестности некогерентного выделения. Следовательно, сегрегационные процессы могут существенно изменить кинетику роста некогерентных выделений, но не столь важны для эволюции когерентных выделений. Основные результаты анализа особенностей роста некогерентных выделений в облучаемом сплаве качественно справедливы также для когерентных выделений, расположенных на стоках ТД (или в непосредственной близости от них). Отличие состоит в том, что вакансии и МА рекомбинируют не на границе выделения с матрицей, а на стоке ТД, который содержится в этом выделении. Для иллюстрации в разделах 3.1.5 и 3.1.6 рассмотрен рост слоя новой фазы на поре, который имеет внешнюю когерентную границу, и рост когерентного цилиндрического выделения, которое содержит внутри себя краевую дислокацию. Показано, что скорость изменения объема выделения может зависеть от разности потоков вакансий и МА на сток.

Результаты исследований фазовой стабильности удобно представлять на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме, которую будем также называть структурно-фазовой диаграммой, чтобы подчеркнуть зависимость стабильности сплава как от структуры межфазных границ, так и от микроструктуры матрицы. В разделе 3.2 для построения радиационно-модифицированных фазовых диаграмм используется следующий подход: точки диаграммы, в которых скорость фазового превращения (в данном случае скорость роста выделения) обращается в нуль, определяют кривую равновесия, которая разделяет области стабильности соответствующих структурно-фазовых состояний. Из-за значительного различия между скоростями роста когерентных и некогерентных выделений в облучаемом сплаве критерии стабильности для когерентных и некогерентных выделений отличаются. Это означает, что под облучением кривая термической растворимости разделяется на две кривые. Бескаскадное облучение влияет на некогерентную растворимость, в то время как когерентная растворимость остается неизменной. В качестве примера для иллюстрации развитого метода построения радиационно-модифицированных фазовых диаграмм построены диаграммы сплавов Ni-Si, Ni-Al и Al-Zn на плоскости (состав, температура) и (температура, скорость создания смещений). Проведено сравнение расчетных диаграмм с имеющимися экспериментальными и теоретическими диаграммами для сплава Al-Zn.

В четвертом разделе исследовано совместное влияние радиационно-индуцированной сегрегации и каскадного растворения на рост и устойчивость когерентных и некогерентных выделений новой фазы в неупорядоченном сплаве замещения. При описании растворения выделений каскадами смещений предполагается, что каскады разупорядочивают приповерхностный слой выделения на глубину порядка характерного размера каскада и частично выбрасывают примесь в матрицу. В матрице вблизи выделения формируется неоднородность концентрации примеси с характерным пространственным масштабом порядка или меньше размера каскада. Математически эта неоднородность эквивалентна источнику примеси, локализованному в окрестности выделения. Далее проведен анализ решения диффузионной задачи в окрестности когерентного и некогерентного выделения в облучаемом сплаве. Результаты исследования стабильности выделений представлены на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме. Расчеты проделаны для сплавов типа Ni-Si и Ni-Al, которые отличаются направлением сегрегации примеси. Оказывается, что каскадное разупорядочение увеличивает предел растворимости независимо от типа межфазной границы между матрицей и выделением. При каскадообразующем облучении растворимость определяется балансом между каскадным перемешиванием, которое разрушает выделения, сегрегацией и радиационно-ускоренной диффузией, которая стремится восстановить выделения. При достаточно низких температурах каскадное перемешивание приводит к растворению выделений и обогащению матрицы примесью. С понижением температуры взаимная диффузия и сегрегация, устраняющие беспорядок, вносимый каскадным

перемешиванием, замедляются. По этой причине на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме появляется низкотемпературная граница устойчивости крупных выделений. Граница устойчивости когерентных выделений расположена в области более низких температур по сравнению с границей устойчивости некогерентных выделений. Положение обеих границ зависит от скорости создания смещений и эффективности каскадного перемешивания. В разделе проведено качественное и количественное сравнение с экспериментальными данными для ряда сплавов. Таким образом, в разделах 3 и 4 показано, что в зависимости от направления сегрегации примеси (к стокам дефектов или от них) и типа облучения существует четыре типа диаграмм с разной топологией. В работе [64] для различных типов облучения (бескаскадного и каскадообразующего) построены радиационно-модифицированные фазовые диаграммы Zr-Nb сплава. Анализ экспериментальных данных и радиационно-модифицированной фазовой диаграммы Zr-Nb сплава показывает, что в реакторных условиях некогерентные выделения неустойчивы, в то время как когерентные выделения являются устойчивыми. Получены простые аналитические выражения для низкотемпературных порогов стабильности некогерентных и когерентных выделений. Модель потери фазовой стабильности Zr-Nb сплава под облучением дает представление о поведении сплава при высокодозном облучении и показывает микроструктурные параметры материала, которые влияют на эволюцию фазового состава.

В пятом разделе детально рассмотрены фазовые превращения при низкотемпературном каскадообразующем облучении. В разделе 5.1 изучена эволюция функции распределения пластинчатых выделений при низкотемпературном ионном облучении. Для проверки модели использовались экспериментальные данные, полученные при низкотемпературном облучении сплава  $\text{Cu-1,15at\%Cr-0,03at\%Zr-0,14at\%Si}$ , который имеет ряд потенциальных применений в термоядерных установках, например в качестве охлаждающих труб для пластин дивертора. Высокая прочность этого сплава достигается путем создания большой плотности мелких когерентных выделений Cr в форме дисков (пластин) с ГЦК решеткой [65]. Стабильность этого сплава под облучением изучалась в работе [66]. Образцы облучались при комнатной температуре ионами  $\text{Cu}^+$  с энергией 300 кэВ со скоростью создания смещений  $2,3 \times 10^{-5}$  сна/с до дозы 0,1 сна. При увеличении дозы облучения средний размер выделений и ширина распределения уменьшались. В то же время количество выделений оставалось приблизительно постоянным. Попытки объяснить экспериментальные наблюдения в терминах средней эффективности ионного перемешивания [66] оказались безуспешными – по оценкам скорость растворения оказалась на порядок меньше наблюдаемой. Тем не менее, модельные расчеты разделов 5.1.2 и 5.1.3 показывают, что хорошее согласие с экспериментальными данными может быть получено, используя минимум предположений о механизме растворения и структуре каскада. Основное предположение модели – часть выделения, в которую попал каскад, растворяется и больше не вносит вклад в экспериментально определяемый размер выделения. Так

как при низкой температуре выделения не взаимодействуют друг с другом – ни прямо, ни посредством диффузионных полей, эволюция каждого выделения рассматривается отдельно. В рамках аналитической модели каскадно-индуцированного уменьшения размеров пластинчатых выделений рассмотрена эволюция функции распределения пластинчатых выделений по размерам. Аналитические результаты хорошо согласуются с результатами моделирования эволюции функции распределения по методу Монте-Карло и с экспериментальными данными.

При рассмотрении низкотемпературной эволюции пластинчатых выделений структура каскада не конкретизировалась. В разделе 5.2 сформулирована модель низкотемпературного переноса атомов благодаря атомному перемешиванию в каскадах атомных столкновений. При этом учитывается внутренняя структура каскада столкновений. При низких температурах, когда термически активированные скачки атомов заморожены, миграция атомов происходит при прямом смещении атомов налетающей частицей или в каскаде соударений, который производит эта частица (см., например, [67, 68] и цитированные там работы). Низкотемпературный перенос посредством атомных столкновений – это случайный процесс, приводящий к сглаживанию градиентов концентрации компонентов сплава. Этот эффект должен наблюдаться при любом виде облучения, но он особенно выражен при каскадообразующем облучении. Два механизма дают вклад в атомное перемешивание под облучением – баллистическое перемешивание и перемешивание в области термического пика [68, 69]. Баллистическое перемешивание происходит за счет выбивания первичных атомов (primary recoil mixing) и каскадного перемешивания. В первом случае перераспределение атомов происходит благодаря повторяющимся столкновениям между налетающим ионом и атомами мишени. Первично-выбитый атом (ПВА) может продолжить процесс выбивания атомов, производя каскад столкновений, замещений и смещений в пространственно ограниченной области. Атомы в области каскада столкновений подвергаются многократным некоррелированным смещениям и перестановкам. Такое изотропное перемешивание называют каскадным перемешиванием.

Современные молекулярно-динамические (МД) расчеты показывают, что баллистическая фаза эволюции каскада длится нескольких десятых пикосекунды [70, 71]. Однако коллективное движение атомов в каскаде продолжается еще в течение нескольких десятков пикосекунд, то есть значительно дольше, чем баллистическая фаза. Согласно МД расчетам, на этой стадии развития каскад может проявлять жидкоподобные свойства, так как температура в каскадной области, найденная путем оценки кинетической энергии атомов, может быть намного выше температуры плавления материала (фаза термического пика) [72]. Перенос атомов на большие расстояния при низкотемпературном облучении возникает из-за атомного перемешивания в каскадах и многократных наложений каскадов. Развитие адекватной модели переноса наталкивается на серьезные трудности из-за неоднородного и многочастичного характера

каскадов. В настоящее время только МД-моделирование на ЭВМ может дать детальную картину динамики каскада смещений. Однако, в силу ограничений на размер образца и время моделирования, связанных с производительностью ЭВМ, МД-моделирование не способно даже в обозримом будущем [70] описать эволюцию каскадов и перекрытие каскадов на временах типичного диффузионного процесса. Несмотря на это МД-моделирование одиночных каскадных событий представляет собой хорошую стартовую точку для дальнейших расчетов эволюции микроструктуры в сплавах под облучением. Результаты МД исследований могут использоваться как входные параметры для моделирования на атомном уровне по методу Монте-Карло или в феноменологической теории скоростей реакций.

В разделе 5.2 используется решеточный метод Монте-Карло (РМК) для описания сглаживания неоднородностей концентрации и разрушения двухфазных структур благодаря атомному перемешиванию в каскадах столкновений. РМК метод особенно эффективен при моделировании диффузии на большие расстояния. В методе РМК считается, что все атомы занимают узлы решетки и рассматриваются только события, которые приводят к перестановкам атомов по узлам решетки [73]. Другие процессы, которые не приводят к изменению структуры (типа атомных колебаний), игнорируются. В разделе 5.2.1 сформулирована решеточная модель атомного перемешивания в каскаде. Предположения о свойствах отдельных каскадов основаны на результатах МД расчетов. Найдена зависимость эффективности перемешивания от размера каскада и размера области термического пика. Показано, что диффузия носит гауссов характер. На больших временах при каскадообразующем облучении меченые атомы испытывают броуновское движение  $\langle r^2(t) \rangle \propto t$ . Проведено моделирование эволюции различных начальных концентрационных профилей при низкотемпературном каскадообразующем облучении. Показано, что доминирующий вклад вносит атомное перемешивание в области термического пика. Свойства материала, такие как энергия когезии и температура плавления, влияют на параметры каскада и, следовательно, на процесс атомного перемешивания. Также рассмотрено применение модели к описанию низкотемпературной эволюции выделений в облучаемых сплавах. Показано, что результаты модели находятся в соответствии с предположениями работы [74], в которой рассмотрено растворение пластинчатых выделений хрома в медном сплаве при низкотемпературном ионном облучении (см. раздел 5.1.1).

В шестом разделе на основании представлений, развитых в предыдущих разделах, рассмотрено влияние потери когерентности на формирование распределения по размерам выделений вторых фаз при каскадообразующем облучении. Низкотемпературная граница устойчивости некогерентных выделений расположена в области более высоких температур, чем соответствующая граница для когерентных выделений,  $T_{coh} < T_{inc}$ . Существование двух порогов устойчивости выделений означает,

что в облучаемых сплавах при температурах  $T$ , удовлетворяющих неравенству  $T_{coh} < T < T_{inc}$ , может формироваться квазистационарное распределение полукогерентных выделений [64]. Механизм этого явления связан с конкуренцией процессов: а) зарождения и роста когерентных выделений в пересыщенном твердом растворе и б) каскадно-индуцированного растворения больших выделений, которые в процессе роста теряют когерентность после достижения некоторого критического размера. Пересыщенность в сплаве может создаваться и поддерживаться вследствие каскадно-индуцированного растворения некогерентных выделений, существовавших в сплаве до облучения.

Потеря когерентности описывается с помощью феноменологического параметра – степени когерентности, который зависит от размера выделения, при котором происходит превращение в некогерентное состояние, и ширины области превращения в пространстве размеров. Более детальное описание, по-видимому, возможно только с помощью МД методов. Однако предложенный подход оказался полезным для изучения возможных путей эволюции сплава под облучением. В разделе 6.2 построена скорость роста выделения как функция степени когерентности. Затем, для описания эволюции смешанного ансамбля когерентных, полукогерентных и некогерентных выделений, формулируется система конечно-разностных уравнений (Master equation), то есть система кинетических уравнений для подвижных мономеров примеси, ТД и кластеров примеси всех размеров. Влияние потери когерентности на мощность стоков, концентрацию ТД и скорость роста выделений учитывается самосогласованно. Из-за нелинейности и сложности система кинетических уравнений может быть решена только численно. Но и в этом случае предъявляются серьезные требования к компьютерным ресурсам (для системы с размерами выделений  $R \leq 10$  нм количество уравнений больше, чем  $10^5$ ). Эта трудность является характерной для задач неравновесной эволюции распределения кластеров. В разделе 6.3 представлен обзор существующих методов решения уравнений кинетики зарождения кластеров частиц и их роста [75-98]. Общая стратегия решения иерархии уравнений скоростей реакций для всех размеров кластеров состоит в том, чтобы свести дискретную формулировку к непрерывному описанию и к численной схеме с контролируемым количеством уравнений. Чтобы значительно уменьшить количество уравнений, в разделе 6.3 сформулирована новая реализация гибридного подхода, который использовался в работах [87, 88, 93]. Подобно [87, 93] первоначальная конечно-разностная система уравнений сохраняется до некоторого количества атомов в кластерах  $N \gg 1$ . Для больших размеров система конечно-разностных уравнений преобразуется в дифференциальное уравнение в частных производных типа уравнения Фоккера–Планка для распределения с непрерывной переменной. Комбинированная система конечно-разностных уравнений и непрерывное уравнение Фоккера–Планка решаются численно, используя технику, известную как метод линий (МЛ) [99, 100]. В методе линий пространст-

венная и временная дискретизация уравнения в частных производных производится и анализируется независимо. Сначала пространственные производные аппроксимируются алгебраическими выражениями на пространственной сетке, сохраняя непрерывные производные по времени. Затем возникающая система обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) интегрируется численно, используя пакет RADAU, который был развит для решения жестких и дифференциально-алгебраических систем уравнений [101]. Нами применяется неравномерная сетка по пространственной переменной. Такая сетка, например с увеличивающимся шагом, особенно полезна в задаче коалесценции (созревание Оствальда), когда средний размер кластеров и ширина распределения по размерам растут со временем, и поэтому в области больших размеров можно использовать более грубую сетку. Развитый численный метод оказался эффективным для моделирования эволюции распределения кластеров и в других задачах [102].

Используя развитый гибридный метод и параметры, типичные для реакторных материалов, проведено моделирование и показано, что под облучением узкие медленно-эволюционирующие распределения полукогерентных выделений могут формироваться как в отожженных на твердый раствор сплавах, так и в состаренных сплавах. Однако квазистационарные состояния в этих двух сплавах отличаются, то есть отличаются значения среднего радиуса выделений и их плотности. На первый взгляд конечное асимптотическое состояние не должно зависеть от исходного состояния сплава. Но из-за сильной зависимости скорости зарождения от пересыщенности примеси асимптотическое поведение облучаемого сплава зависит от исходного состояния сплава (твердый раствор или состаренный сплав с выделениями). Другими словами, в зависимости от степени конкуренции между процессами зарождения, роста выделений и каскадным растворением система оказывается кинетически арестованной в различных квазистационарных асимптотических состояниях. С практической точки зрения, готовя определенное исходное состояние сплава, в принципе можно выбрать нужное квазистационарное асимптотическое состояние и время достижения этого состояния.

Седьмой раздел посвящен рассмотрению кинетики зарождения и коалесценции в системах с сильными гетерофазными флуктуациями. Существует большая группа промышленных сплавов, которые в обычных условиях содержат медленно эволюционирующие распределения когерентных выделений. Такими сплавами являются суперсплавы на основе никеля [103]; высокопрочные низколегированные стали с добавками меди (HSLA = high-strength low-alloy) [104, 105]; сплавы алюминия, легированные скандием [106, 107], и другие сплавы. Вследствие выпадения высокой плотности когерентных нанометровых частиц эти сплавы имеют значительную прочность. В зависимости от применения сплава эффект упрочнения может быть полезным или вредным. Например, выпадение в ферритных сталях корпусов атомных реакторов частиц, обогащенных медью, приводит к упрочнению и охрупчиванию стали [108, 109].

Особенностью перечисленных выше сплавов является низкая межфазная энергия когерентных выделений. Процессы зарождения, роста и коалесценции в системе когерентных выделений с низкой межфазной энергией могут происходить одновременно, что затрудняет интерпретацию поведения сплава. Существующие модели поздней стадии распада рассматривают только крупные коалесцирующие выделения и подвижные мономеры примеси, в то время как совокупность подкритических кластеров игнорируется. Однако даже в недосыщенных твердых растворах вследствие непрерывного зарождения и распада неустойчивых кластеров образуется стационарное распределение мелких кластеров. Еще в 1939 г. Френкель назвал это распределение гетерофазными флуктуациями (ГФ) [110, 111].

В разделе 7.1 рассмотрено влияние ГФ на кинетику диффузионно-лимитируемого распада пересыщенных твердых растворов в отсутствие облучения. Модель основана на иерархии уравнений скоростей реакций для кластеров всех размеров (уравнения Беккера–Деринга [112]). Предполагается, что подвижны только мономеры примеси. Прямые столкновения кластеров не рассматриваются в модели Беккера–Деринга. Для решения системы кинетических уравнений используется численный метод, описанный в разделе 6.3. Согласно результатам моделирования в пересыщенном твердом растворе в области малых размеров быстро формируется квазистационарное распределение кластеров. В конце стадии зарождения в распределении кластеров примеси появляется щель, которая отделяет совокупность малых кластеров (ГФ) от распределения крупных выделений. Объемная доля ГФ зависит от параметров материала и температуры. С уменьшением межфазной энергии объемная доля ГФ увеличивается. Это означает, что ГФ могут вносить значительный вклад в полный баланс атомов растворенного вещества и влиять на кинетику крупных выделений. В разделе 7.1 показано, что справедливо следующее утверждение: *растворимость примеси – это полное равновесное содержание атомов примеси в насыщенном растворе, включая атомы примеси в докритических кластерах, которые образуются и распадаются вследствие флуктуаций*. Именно такое количество примеси переходит в матрицу при контакте с массивной фазой примеси при достижении термодинамического равновесия. Очевидно, сформулированное определение растворимости соответствует линии растворимости на экспериментальных равновесных фазовых диаграммах сплавов.

Известно, что на поздней стадии распада пересыщенных растворов (созревание Оствальда) распределение выделений по размерам демонстрирует скейлинговое поведение в соответствии с теорией коалесценции Лифшица–Слэзова [113, 114]. В разделе 7.1.2 исследовано влияние ГФ на кинетику поздней стадии распада твердого раствора, а именно рассмотрена задача о тепловой коалесценции и проведено сравнение численных результатов с асимптотическим автомодельным решением Лифшица–Слэзова. Оказалось, что на поздней стадии распада распределение выделений по размерам в переменных, масштабированных на средний радиус, стремится к стационарной форме, которая хорошо совпадает с реше-

нием Лифшица–Слёзова. Однако ГФ замедляют гомогенное зарождение даже в сильно пересыщенных твердых растворах. ГФ также замедляют процесс перехода к настоящему асимптотическому поведению и приводят к уширению функции распределения выделений на переходной стадии. Рассмотрены некоторые следствия модели, важные для интерпретации экспериментальных данных и оценки параметров сплава.

В разделе 7.2 изучено влияние ГФ на фазовую стабильность под облучением. Рассмотрена качественная картина эволюции фазового состава сплава замещения при каскадообразующем облучении в различных температурных областях. Каскадообразующее облучение, растворяя когерентные выделения, эффективно увеличивает растворимость мономеров. То есть крупные когерентные выделения устойчивы при концентрации мономеров, превышающих их термическую растворимость. Но это означает, что в системе должны зарождаться мелкие когерентные выделения. В твердом растворе мономеров, недосыщенном относительно крупных выделений, вновь зарождающиеся когерентные выделения неустойчивы, поскольку они растворяются после попадания в них каскадов смещений. Таким образом формируется стационарная функция распределения мелких когерентных выделений, максимальный размер которых порядка размера каскада. Мелкие выделения являются прямым аналогом ГФ в твердом растворе без облучения и играют важную роль в балансе вещества и кинетике роста крупных (по сравнению с размерами каскада) выделений. Радиационно-модифицированная когерентная растворимость, определяющая границу устойчивости крупных выделений, является суммой кинетически равновесной концентрации мономеров и содержания вещества в радиационно-индуцированных ГФ. Расчеты показывают, что вклад ГФ сильно зависит от энергии межфазной границы. Для типичных значений энергии межфазной границы  $\gamma'$ -фазы в бинарных сплавах (порядка десятков мДж/м<sup>2</sup> [115]) учет ГФ приводит к заметному смещению низкотемпературной границы устойчивости когерентных выделений на радиационно-модифицированной диаграмме. Выше низкотемпературного порога устойчивости происходит радиационно-ускоренная коалесценция когерентных выделений. Для описания этого процесса найдены асимптотические выражения для первых моментов функции распределения выделений по размерам.

## 2. МОДЕЛЬ РАДИАЦИОННО- ИНДУЦИРОВАННОЙ СЕГРЕГАЦИИ В КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ СПЛАВАХ

В этом разделе построена модель радиационно-индуцированной сегрегации в концентрированных сплавах и сформулирована система связанных уравнений диффузии, которая описывает диффузию радиа-

ционных ТД и компонентов сплава. Исследованы общие свойства квазистационарных распределений компонентов сплава и ТД в сплаве со стоками, но без выделений. Построена модель эффективной поглощающей среды для облучаемого сплава. Проведено сравнение этой модели с существующими моделями для чистых металлов. Исследована устойчивость стационарного распределения компонентов в облучаемом сплаве относительно пространственно-периодических флуктуаций состава сплава и найдено характерное время формирования сегрегационных профилей вблизи стоков ТД.

## 2.1. Формулировка модели сегрегации и обсуждение пределов ее применимости

Следуя работам [53, 54], опишем модель сегрегации примеси под облучением. Рассмотрим неупорядоченный твердый раствор замещения элементов А и В. Ниже компонент А называется примесью. Под облучением в сплаве образуются вакансии и МА. Далее не учитывается взаимодействие между ТД и полями напряжений, которые могут создавать выделения и стоки ТД. В простейшем случае МА имеют нерасщепленную конфигурацию, то есть в междоузельных положениях находятся одиночные атомы А и В. Для нахождения диффузионных потоков ТД и атомов примеси будем использовать модель неупорядоченного сплава, разработанную Маннингом [34, 55] для описания вакансионного механизма диффузии в концентрированных сплавах. В этой модели предполагается, что вакансии не образуют связанных комплексов с элементами сплава и что частота скачков вакансии зависит только от типа атома, с которым вакансия обменивается положением. Что касается диффузии междоузлий, будем использовать аналогичную модель и введем два диффузионных коэффициента,  $d_{Ai}$  и  $d_{Bi}$ , для междоузельных атомов А и В, соответственно. Однако следует учесть, что взаимные превращения междоузельных атомов А и В (благодаря столкновениям с атомами решетки) могут приводить к неслучайному размещению атомов А и В в междоузельных полостях. Важность такого взаимодействия МА и атомов решетки была подчеркнута в работе [116]. Концентрации МА типов А и В  $C_i^A$  и  $C_i^B$  изменяются со временем согласно уравнениям

$$\frac{\partial C_i^A}{\partial t} = K_A - \alpha_R d_{Ai} C_i^A C_v + \alpha C_i^B C_A - \beta C_i^A C_B - \text{div} \mathbf{j}_i^A, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial C_i^B}{\partial t} = K_B - \alpha_R d_{Bi} C_i^B C_v - \alpha C_i^B C_A + \beta C_i^A C_B - \text{div} \mathbf{j}_i^B, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{j}_i^A = -d_{Ai} \nabla C_i^A \quad \mathbf{j}_i^B = -d_{Bi} \nabla C_i^B, \quad (2.3)$$

где  $K_{A,B}$  – скорости генерации междоузельных атомов А и В,  $C_v$  – концентрация вакансий,  $C_{A,B}$  – концентрации компонентов сплава (концентрации ТД малы по сравнению с единицей, поэтому с хорошей точностью  $C_A + C_B = 1$ ),  $\alpha_R$  – константа скорости рекомбинации,  $\mathbf{j}_i^{A,B}$  – потоки междоузельных атомов А и В.

Третье и четвертое слагаемые в правой части уравнений (2.1) и (2.2) описывают взаимные превращения в системе МА. Здесь рассматриваются достаточно концентрированные сплавы ( $\min(C_A, C_B) > 10^{-3}$ ), в которых характерное время превращений в системе МА мало по сравнению со временем диффузии МА к стокам [53]. Это означает, что в системе МА локально устанавливается детальное равновесие

$$\alpha C_i^B C_A = \beta C_i^A C_B. \quad (2.4)$$

Вводя полную концентрацию междоузелий  $C_i = C_i^A + C_i^B$ , из условия равновесия получаем относительные доли МА типов А и В

$$\frac{C_i^A}{C_i} = \frac{\zeta C_A}{C_B + \zeta C_A}, \quad \frac{C_i^B}{C_i} = \frac{C_B}{C_B + \zeta C_A}, \quad (2.5)$$

где  $\zeta = \alpha/\beta$ .

Константы скоростей взаимных превращений  $\alpha$  и  $\beta$  выражаются через произведение геометрического множителя, который является одинаковым для обеих констант, и экспоненты Аррениуса. Следовательно, параметр  $\zeta$  имеет вид

$$\zeta = \exp(H_{B \rightarrow A}^i / k_B T), \quad (2.6)$$

где  $H_{B \rightarrow A}^i$  – энергия, получаемая при превращении МА типа В в МА типа А,  $k_B$  – константа Больцмана,  $T$  – температура. Очевидно, энергия превращения  $H_{B \rightarrow A}^i$  равняется разности между энергиями образования междоузельных атомов В и А. Вообще говоря,  $H_{B \rightarrow A}^i$  может зависеть от локальной концентрации примеси, но ниже эта зависимость не учитывается. Используя (2.5), уравнения (2.1)-(2.3) заменяем уравнением для полной концентрации междоузелий

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = K - \alpha_R D_i C_i C_v - \operatorname{div} \mathbf{j}_i, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{j}_i = -\nabla D_i C_i, \quad (2.8)$$

$$D_i = \frac{d_{Ai}\zeta}{C_B + \zeta C_A} C_A + \frac{d_{Bi}}{C_B + \zeta C_A} C_B \equiv \delta_{Ai} C_A + \delta_{Bi} C_B, \quad (2.9)$$

где  $K = K_A + K_B$ . Поток вакансий  $\mathbf{j}_v$  можно представить в виде суммы потоков вакансий за счет обмена положениями вакансий с атомами А и В

$$\mathbf{j}_v = \mathbf{j}_v^A + \mathbf{j}_v^B, \quad (2.10)$$

$$\mathbf{j}_v^A = -d_{Av} C_A \nabla C_v + d_{Av} C_v \nabla C_A, \quad (2.11)$$

$$\mathbf{j}_v^B = -d_{Bv} C_B \nabla C_v + d_{Bv} C_v \nabla C_B, \quad (2.12)$$

где  $d_{Av}, d_{Bv}$  – диффузионные коэффициенты вакансий. Ниже предполагается, что  $d_{Av}, d_{Bv}, d_{Ai}$  и  $d_{Bi}$  не зависят от состава сплава.

Выражения (2.10)-(2.12) могут быть получены из простой микроскопической модели вакансионного механизма случайных блужданий атомов без корреляций (например, при рассмотрении обмена атомами различного типа между двумя смежными атомными плоскостями).

Поток примеси  $\mathbf{j}_A$  состоит из междоузельного и вакансионного вкладов

$$\mathbf{j}_A = \mathbf{j}_i^A - \mathbf{j}_v^A. \quad (2.13)$$

Используя уравнения (2.5), (2.9) и (2.13), записываем уравнения непрерывности для концентраций вакансий и примеси

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = K - \alpha_R D_i C_i C_v - \text{div} \mathbf{j}_v, \quad (2.14)$$

$$\mathbf{j}_v = -D_v^2 \nabla \frac{C_v}{D_v} = -d_{Bv} \nabla C_v + (d_{Av} - d_{Bv}) C_v^2 \nabla \frac{C_A}{C_v}, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\text{div} \mathbf{j}_A, \quad (2.16)$$

$$\mathbf{j}_A = -d_{Av} C_v^2 \nabla \frac{C_A}{C_v} - \nabla \frac{\lambda C_A}{C_B + \lambda C_A} D_i C_i, \quad (2.17)$$

где  $D_v = d_{Av} C_A + d_{Bv} C_B$ ,  $\lambda = \zeta d_{Ai} / d_{Bi}$ .

В случае облучения ионами примеси соответствующий источник следует добавить в правую часть уравнения (2.16). Уравнения для компонента В подобны уравнениям (2.16) и (2.17). Но они не являются независимыми, так как потоки атомов и ТД связаны соотношением

$$\mathbf{j}_A + \mathbf{j}_B = \mathbf{j}_i - \mathbf{j}_v \quad (2.18)$$

и, кроме того,  $C_A + C_B = 1$ , если пренебречь малой концентрацией ТД ( $C_{i,v} \ll C_{A,B}$ ). Уравнения (2.7), (2.8), (2.14)-(2.17) с соответствующими начальными и граничными условиями образуют замкнутую систему, которая описывает поведение концентрированного сплава под облучением.

Для простоты здесь не учитываются неидеальность твердого раствора и корреляционные эффекты диффузии. Выражения для потоков примеси и ТД с учетом корреляционных и термодинамических факторов приведены в работах [35-37]. В отличие от других моделей [32, 33, 37], предлагаемая в этом разделе модель содержит параметр  $\zeta$ , описывающий отклонение распределений МА типов А и В от случайного распределения  $C_i^{A,B} = C_i C_{A,B}$ . Обратим внимание, что в работе [33] было предложено включить коэффициенты  $\zeta(C_B + \zeta C_A)^{-1}$  и  $(C_B + \zeta C_A)^{-1}$  (см. уравнения (2.5)) в диффузионные коэффициенты  $d_{Ai}$  и  $d_{Bi}$ , соответственно, чтобы учесть неслучайное размещение атомов А и В по междоузельным полостям. По нашему мнению, такой подход не является корректным. Выражения для потоков, записанные таким образом в работе [33], отличаются от выражений, полученных в этом разделе. Однако при  $\zeta = 1$  наши уравнения переходят в уравнения работы [33].

Выше предполагалось, что конфигурация МА является нерасщепленной. Тем не менее, модель сегрегации может быть обобщена на случай гантельных конфигураций МА (по крайней мере, качественно) [53]. Конечно, это влечет за собой определенные предположения относительно свойств междоузлий. Например, отождествление А и В междоузельных атомов с гантелями АВ и ВВ, соответственно, означает, что: а) гантели АА не участвуют в переносе примеси, то есть образование гантелей АА энергетически невыгодно; и б) диффузия смешанных гантелей АВ приводит к переносу на большие расстояния только атомов примеси. В случае расщепленных конфигураций энергия превращения,  $H_{B \rightarrow A}^i$ , равна энергии связи смешанной гантели. Детальное рассмотрение гантельного механизма миграции МА приведено в работах [30, 117, 118]. В модели, описанной выше, для упрощения используется минимальный набор кинетических коэффициентов. Преимущество такой модели в том, что она допускает аналитические решения, которые показывают важные следствия сегрегации примеси.

## 2.2. Подход эффективной среды для бинарных сплавов

Реальный кристаллический материал содержит микроструктурные дефекты различных типов (межфазные границы, дислокации, поры и т. д.), которые контролируют основные физические и механические свойства материала под облучением. Элементы микроструктуры эволюционируют благодаря поглощению ТД, при условии, что температура достаточно высока для их миграции. Чтобы вычислить радиационно-индуцированные потоки ТД к стокам, для чистого металла были разработаны различные варианты модели эффективной поглощающей среды [56-58]. Однако результаты, полученные для чистого металла, не могут быть непосредственно применены к бинарным сплавам замещения. Причина в том, что из-за связи между микроскопическими потоками вакансий, МА и элементов сплава невозможно решить диффузионную задачу для вакансий и МА отдельно.

В этом разделе формулировка подхода эффективной среды для бинарных сплавов начинается с вывода точных соотношений между стационарными локальными концентрациями примеси и ТД. Затем будут найдены потоки ТД к порам и дислокациям, а также получены уравнения сохранения для средних концентраций дефектов.

### 2.2.1. Точные соотношения

Вначале рассмотрим квазистационарную диффузию ТД в сплаве с полной растворимостью компонентов, который содержит неупорядоченное распределение пор и дислокаций [119, 120]. В квазистационарном состоянии локальные концентрации удовлетворяют уравнениям

$$K - \alpha_R D_i C_i C_v - \text{div} \mathbf{j}_n = 0, \quad n = i, v, \quad (2.19)$$

$$\text{div} \mathbf{j}_A = 0. \quad (2.20)$$

Предполагается, что граничные условия для ТД одинаковые на всех стоках, а именно концентрации вакансий и МА равны термически равновесным значениям

$$C_v|_s = C_v^e, \quad C_i|_s = 0, \quad s = V_k, D_k, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (2.21)$$

Здесь  $s$  обозначает поверхность поры или границу ядра дислокации; индексы  $V$  и  $D$  относятся к порам и дислокациям, соответственно.

Так как поры и дислокации не поглощают и не испускают А и В атомы, полные потоки на них  $J_n^s = \oint \mathbf{j}_n|_s ds$  (здесь  $ds$  – элемент поверхности) связаны соотношением

$$J_{A(B)}^s = C_{A(B)}^s (J_i^s - J_v^s), \quad (2.22)$$

где  $C_A^s$  – концентрация примеси на стоке, которая поддерживается благодаря радиационно-индуцированной сегрегации. В случае дислокаций потоки определены на единицу длины. Равенство (2.22) – это недостающее граничное условие для уравнений (2.19) и (2.20). Обратим внимание, что равенство (2.22) согласуется с условием сохранения вещества (2.18).

Используя выражения для потоков (2.8), (2.15) и (2.17), можно показать, что в любой точке сплава, не занятой стоком, разность потоков вакансией и МА имеет вид

$$\mathbf{j}_v - \mathbf{j}_i = -d_{Bv} \nabla C_v + \nabla \frac{C_B + \kappa C_A}{C_B + \lambda C_A} D_i C_i - \left(1 - \frac{d_{Bv}}{d_{Av}}\right) \mathbf{j}_A, \quad (2.23)$$

где  $\kappa = \frac{d_{Ai} d_{Bv}}{d_{Bi} d_{Av}} \zeta$ .

Из уравнений (2.22) и (2.23) получаем

$$J_i^s - J_v^s = \frac{d_{Av}}{d_{Av} C_B^s + d_{Bv} C_A^s} \oint \nabla W|_s ds, \quad (2.24)$$

где

$$W(r) = -d_{Bv} C_v + \frac{C_B + \kappa C_A}{C_B + \lambda C_A} D_i C_i. \quad (2.25)$$

В силу уравнений (2.19) и (2.20)  $W(r)$  удовлетворяет уравнению

$$\operatorname{div}(\mathbf{j}_v - \mathbf{j}_i) = \Delta W = 0. \quad (2.26)$$

$W(r)$  принимает одинаковые значения на всех стоках (см. (2.21)). Следовательно, согласно теореме о гармонических функциях [121],  $W(r)$  не зависит от пространственных координат

$$W(r) = -d_{Bv} C_v^e. \quad (2.27)$$

Поэтому каждый сток поглощает равное количество вакансий и МА

$$J_i^s - J_v^s = 0, \quad s = V_k, D_k, \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (2.28)$$

Таким образом, в модели сегрегации, построенной здесь, не возникает эффекта предпочтительного поглощения ТД определенного типа. Записывая (2.27) в явном виде, получаем соотношение между концентрациями МА и вакансий.

$$D_i C_i = d_{Bv} \frac{C_B + \lambda C_A}{C_B + \kappa C_A} (C_v - C_v^e). \quad (2.29)$$

Соотношения (2.24)-(2.29) аналогичны соотношениям для чистого металла и переходят в них, если концентрация одного из компонентов сплава мала ( $C_A \ll C_B$  или  $C_A \gg C_B$ ). Например, аналогом (2.29) является соотношение  $D_i C_i = D_v (C_v - C_v^e)$ .

Так как на стоках  $J_A^s = 0$  (см. (2.22) и (2.28)), то распределение компонентов сплава удовлетворяет уравнению  $\mathbf{j}_A = 0$ . Используя это уравнение совместно с (2.23) и (2.29), можно показать, что

$$\mathbf{j}_v = -\nabla d_{Bv} \frac{C_B + \lambda C_A}{C_B + \kappa C_A} (C_v - C_v^e) = -\nabla D_v^{eff} (C_v - C_v^e). \quad (2.30)$$

Здесь  $D_v^{eff}$  – эффективный коэффициент диффузии вакансий

$$D_v^{eff} = d_{Bv} \frac{C_B + \lambda C_A}{C_B + \kappa C_A}. \quad (2.31)$$

Еще одно важное соотношение между пространственными распределениями примеси и вакансий может быть получено из уравнения  $\mathbf{j}_A = 0$  [122]. Для решения этого уравнения удобно с помощью (2.29) исключить из него  $D_i C_i$  и перейти к производным по  $C_A$ . В результате преобразований получаем уравнение, линейное относительно  $C_v$ :

$$\frac{1}{C_v^e} \frac{dC_v}{dC_A} = \frac{C_B + \kappa C_A}{C_A C_B (1 - \kappa)} \left[ \left( 1 + \frac{\kappa}{(C_B + \kappa C_A)^2} \right) \left( \frac{C_v}{C_v^e} - 1 \right) + 1 \right], \quad (2.32)$$

решение которого представимо в виде

$$\frac{C_A}{C_B} \left[ 1 + \left( \frac{C_v}{C_v^e} - 1 \right) \frac{1 + \kappa}{C_B + \kappa C_A} \right]^{\kappa-1} = const = \frac{C_A^s}{C_B^s}. \quad (2.33)$$

Важно отметить, что соотношение (2.33) выполняется в любой точке сплава, а граничная концентрация  $C_A^s$  не зависит от типа стока. Если объемная доля стоков мала (это обычно выполняется), то значения концентраций вакансий и примеси вдали от стоков практически не отличаются от средних значений, следовательно,

$$\frac{C_A^s}{C_B^s} = \frac{\bar{C}_A}{\bar{C}_B} \left[ 1 + \left( \frac{\bar{C}_v}{C_v^e} - 1 \right) \frac{1 + \kappa}{\bar{C}_B + \kappa \bar{C}_A} \right]^{\kappa-1}. \quad (2.34)$$

Здесь и далее черта обозначает средние величины.

Согласно (2.34) при  $\kappa < 1$  наблюдается обеднение примеси на стоках,  $C_A^s < \bar{C}_A$ , то есть преобладает вакансионный механизм переноса примеси. Напротив, обогащение примеси на стоках происходит, когда  $\kappa > 1$ .

Соотношения (2.28), (2.29) и (2.33) являются своеобразными «законами сохранения». Любое приближенное решение сегрегационной задачи должно удовлетворять им. Вывод уравнений скоростей реакций, приведенный ниже, удовлетворяет этому требованию.

### 2.2.2. Уравнения скоростей реакций

Ниже понадобятся выражения для средних концентраций ТД как функции скорости создания смещений и параметров микроструктуры сплава. Чтобы найти их, в этом разделе формулируются уравнения баланса ТД.

Усреднение уравнения (2.19) по всевозможным конфигурациям стоков и объему, содержащему большое количество стоков, приводит к уравнению

$$K - \alpha_R \bar{D}_i \bar{C}_i \bar{C}_v - \int J_n^v f(r) dr - \rho J_n^D = 0, \quad n = i, v, \quad (2.35)$$

где  $f(r)$  – функция распределения пор по размерам,  $r$  – радиус поры,  $\rho$  – плотность краевых дислокаций. Процедура усреднения подробно описана в работах [57, 58].

Для нахождения полных потоков ТД к данному стоку используется метод, подобный методу, предложенному в [56]. Уравнения (2.19) и (2.20) решаются в области влияния выбранного стока, свободной от других стоков. Вне этой области реальная система заменяется гомогенной эффективной

поглощающей средой. Внешний радиус области влияния  $R_{inf}^s$  порядка среднего расстояния между стоками. Чтобы сделать выбор радиуса влияния однозначным, так же, как и в работе [58], потребуем, чтобы все ТД, создаваемые внутри области влияния, поглощались внутри этой же самой области, то есть  $\mathbf{j}_{i,v}(r = R_{inf}^s) = 0$  (где  $r$  – расстояние от центра стока).

Обратим внимание, что в рассматриваемой задаче  $R_{inf}^s$  не зависит от типа ТД, так как  $J_i^s = J_v^s$ <sup>2</sup>.

В случае малой объемной доли стоков основные изменения концентрации диффузантов происходят на расстояниях порядка размера стока. Следовательно, на сфере  $r = R_{inf}^s$  концентрации ТД и примеси с хорошей точностью равняются их средним значениям в эффективной среде,  $\bar{C}_n$  ( $n = i, v, A$ ).

Таким образом, пренебрегая рекомбинацией ТД внутри области влияния, из (2.19) и (2.20) получаем диффузионную задачу

$$\text{div} \mathbf{j}_{i,v} = K, \quad (2.36)$$

$$\text{div} \mathbf{j}_A = 0, \quad (2.37)$$

$$C_n|_{r=R_{inf}^s} = \bar{C}_n. \quad (2.38)$$

Граничные условия на стоке заданы соотношениями (2.21) и (2.22). Можно показать [53], что в нулевом порядке по параметру  $r_s/R_{inf}^s$  (где  $r_s$  – радиус стока) решение этой задачи совпадает с решением уравнений

$$\text{div} \mathbf{j}_n = 0, \quad n = i, v, A, \quad (2.39)$$

с граничными условиями (2.21), (2.22) и

$$C_n|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \bar{C}_n, \quad n = i, v, A. \quad (2.40)$$

---

<sup>2</sup> Вообще говоря,  $R_{inf}^s$  зависит от типа ТД, что необходимо учитывать при рассмотрении эффектов преференса, вызванных упругим взаимодействием ТД со стоками или другими причинами. В задачах о фазовой стабильности эти эффекты обычно несущественны, поскольку сегрегационные процессы в основном определяются величиной потоков  $J_i$  и  $J_v$ , а не их разностью, которая мала.

Из уравнений (2.21), (2.39) и (2.40) находим полный поток МА на сток

$$J_i^s = Z_s \bar{D}_i \bar{C}_i, \quad Z_v = 4\pi r_v, \quad Z_D = 2\pi(\ln L/r_D)^{-1}, \quad (2.41)$$

где  $Z_s$  – эффективность захвата ТД стоком типа  $s$ ,  $L$  – среднее расстояние между стоками,  $r_D$  – радиус захвата дислокации.

Полные потоки вакансий и примеси, нормированные на поток МА,  $Q_{v,A}^s = J_{v,A}^s/J_i^s$ , удовлетворяют уравнениям [53, 54]

$$1 + \bar{D}_i \bar{C}_i \frac{\lambda + \mu Q_v^s + (\mu - \lambda) Q_A^s}{d_{Av} C_v^e (\bar{C}_B + \lambda \bar{C}_A)} = \exp \left\{ \left[ \lambda + \mu Q_v^s + (\mu - \lambda) Q_A^s \right] \int_{C_A^s}^{\bar{C}_A} \frac{dC_A}{G(C_A)} \right\}, \quad (2.42)$$

$$G(C_A) = Q_A^s (C_B + \lambda C_A) (C_B + \mu C_A) + [\mu Q_v^s (C_B + \lambda C_A) - \lambda (C_B + \mu C_A)] C_A,$$

$$d_{Av} \left( \bar{C}_v - \bar{C}_v^e \right) = \bar{D}_i \bar{C}_i \left[ Q_A^s (\mu - 1) + (Q_v^s - 1) \mu + \frac{\mu \bar{C}_B + \lambda \bar{C}_A}{C_B + \lambda C_A} \right], \quad (2.43)$$

где  $\mu = d_{Av}/d_{Bv}$ .

В этих уравнениях концентрация примеси на стоке  $C_A^s$  также неизвестна. Исключая  $Q_A^s$  и  $Q_v^s$  из (2.42) с помощью (2.22) и (2.43), можно получить замкнутое уравнение для  $C_A^s$ , вид которого не зависит от типа стока. Следовательно, на всех стоках поддерживается одинаковая концентрация примеси, что согласуется с соотношением (2.33). Используя этот результат совместно с уравнениями (2.22), (2.43) и (2.35), можно легко показать, что средние концентрации дефектов связаны соотношением

$$\bar{D}_i \bar{C}_i = d_{Bv} \frac{\bar{C}_B + \lambda \bar{C}_A}{C_B + \lambda C_A} (\bar{C}_v - C_v^e) \equiv \bar{D}_v^{eff} (\bar{C}_v - C_v^e) \quad (2.44)$$

и поток вакансий равен потоку МА

$$J_v^s = Z_s \bar{D}_v^{eff} (\bar{C}_v - C_v^e) = J_i^s. \quad (2.45)$$

Отметим, что здесь эффективности захвата не зависят от типа дефектов. Уравнения (2.44) и (2.45) не противоречат точным соотношениям. Подставляя выражения для потоков ТД в (2.35), получаем уравнения баланса для средних концентраций ТД

$$K - \alpha_R \bar{D}_i \bar{C}_i \bar{C}_v - k^2 \bar{D}_i \bar{C}_i = 0, \quad (2.46)$$

$$K - \alpha_R \bar{D}_i \bar{C}_i \bar{C}_v - k^2 \bar{D}_v^{eff} (\bar{C}_v - C_v^e) = 0, \quad (2.47)$$

где полная мощность стоков определена как обычно:  $k^2 = \int Z_v f(r_v) dr_v + Z_D \rho$ .

Эти уравнения подобны общеизвестным уравнениям скоростей реакций для чистых металлов, но имеется существенное отличие. Как показывают уравнения (2.30), (2.31), (2.45) и (2.47), миграция вакансий в поглощающей среде описывается эффективным коэффициентом диффузии  $\bar{D}_v^{eff}$ , который зависит от кинетических коэффициентов МА. Причина такой зависимости в том, что микроскопические потоки вакансий и МА связаны через концентрацию примеси (см. уравнения (2.8), (2.9) и (2.15)).

Решение уравнений (2.46) и (2.47) для  $\bar{C}_v$  имеет вид

$$\bar{C}_v = C_v^e + \frac{1}{2} \left( C_v^e + \frac{k^2}{\alpha_R} \right) \left( \sqrt{1 + \frac{4K}{\alpha_R \bar{D}_v^{eff}} \left( C_v^e + \frac{k^2}{\alpha_R} \right)^{-2}} - 1 \right). \quad (2.48)$$

Проведенное выше рассмотрение справедливо в нулевом порядке по параметру разложения  $r_s/R_{inf}^s$  (или  $r_s/L$ ). Укажем путь, как оценить поправку более высокого порядка к эффективности захвата стоков.

Для этой цели в случае чистых металлов было разработано два подхода – модель эффективной поглощающей среды [57] и метод областей влияния [58]. В первом случае для нахождения потока дефектов к стоку заданного типа и, следовательно, эффективности захвата реальное распределение дискретных стоков, окружающих выбранный сток, заменяется однородной поглощающей средой. Математически такое размазывание соответствует введению дополнительных членов  $K_n^e$  и  $-k_n^2 D_n C_n$  в уравнение (2.19) в качестве замены граничных условий на всех других стоках за исключением рассматриваемого стока. После того как потоки на каждый сток будут найдены, полная скорость тепловой генерации дефектов  $K_n^e$  и полная мощность стоков  $k_n^2$ , могут быть связаны свойствами реальной системы.

Чтобы обобщить этот подход на сплавы, необходимо задать зависимость свойств эффективной среды от состава сплава. Здесь предлагается следующий регулярный способ. Слагаемые, описывающие кинетику дефектов в эффективной среде, могут быть получены однозначно только из

уравнений приближения нулевого порядка. Согласно (2.46) и (2.47), профили концентраций ТД около стока, вложенного непосредственно в эффективную поглощающую среду, определяются из решения уравнений

$$K - \alpha_R D_i C_i C_v - \operatorname{div} \mathbf{j}_i - k_i^2 D_i C_i = 0, \quad (2.49)$$

$$K - \alpha_R D_i C_i C_v - \operatorname{div} \mathbf{j}_v - k_v^2 D_v^{\text{eff}} (C_v - C_v^e) = 0, \quad (2.50)$$

$$\mathbf{j}_i = -\nabla D_i C_i, \quad \mathbf{j}_v = -\nabla D_v^{\text{eff}} (C_v - C_v^e) \quad (2.51)$$

с граничными условиями (2.21) и (2.40).  $k^2 = \sum Z_{sn} N_s$  – полная мощность стоков, выраженная через эффективности захвата  $Z_{sn}$ , и плотности стоков  $N_s$ . Эффективности захвата  $Z_{sn}$  определяются самосогласованно.

В предыдущем разделе было показано, что в пространстве между стоками  $\mathbf{j}_i = \mathbf{j}_v$  и  $\mathbf{j}_A = 0$ . Очевидно, такие же соотношения должны выполняться в эффективной среде. Кроме того, соотношение (2.29) также должно выполняться (по крайней мере, в среднем, то есть вдали от стока). Из этих требований с необходимостью следует, что  $k_i^2 = k_v^2$ . Благодаря специфическому виду потоков дефектов, уравнения (2.46) и (2.47) могут быть решены отдельно, если пренебречь объемной рекомбинацией. Очевидно, что решения для  $D_i C_i$  и  $D_v^{\text{eff}} (C_v - C_v^e)$  (зависимости от пространственных координат), полученные таким образом, совпадают друг с другом, а также с решениями для чистых металлов. Следовательно, все выражения для эффективностей захвата стоков в чистых металлах справедливы также в случае сплавов (если, конечно, взаимодействие между стоками и ТД отсутствует).

Важно отметить, что результаты двух предыдущих разделов также применимы к сплаву с ограниченной растворимостью, если частицы второй фазы не образуются на стоках, то есть если  $C_A^s < C_A^e$  (где  $C_A^e$  – растворимость примеси).

### 2.3. Устойчивость

#### к в а з и с т а ц и о н а р н о г о с о с т о я н и я

Результаты, полученные в предыдущих разделах, справедливы для стационарного (или квазистационарного) состояния сплава под облучением. Возникает вопрос: являются ли найденные решения устойчивыми, и если да, то за какое время достигается стационарное состояние? Для ответа на этот вопрос рассмотрим сплав с неограниченной растворимостью компо-

нентов (без выделений новой фазы) и исследуем устойчивость стационарного решения уравнений (2.7), (2.8), (2.14)-(2.17) относительно малых пространственно-периодических возмущений состава сплава и концентрации ТД. Выберем возмущения в виде

$$\tilde{C}_{i,v,A} \sim \exp(i\mathbf{qr} + vt), \quad (2.52)$$

где  $q^{-1}$  много меньше характерного масштаба изменения стационарных концентраций. Линеаризуя уравнения (2.7), (2.8), (2.14)-(2.17) по этим возмущениям, получаем систему уравнений для амплитуд возмущений, условие разрешимости которой дает следующее характеристическое уравнение:

$$\det[\Omega_{ik} - v\delta_{ik}] = -v^3 + v^2 \text{Tr}(\Omega) - v \text{Tr}(M) + \det[\Omega_{ik}] = 0, \quad (2.53)$$

где  $\Omega_{ik}$  – действительная матрица:

$$\begin{pmatrix} -(q^2 + \alpha_R C_v) D_i & -\alpha_R D_i C_i & -(q^2 + \alpha_R C_v) \frac{dD_i}{dC_A} C_i \\ -\alpha_R D_i C_i & -(q^2 D_v + \alpha_R D_i C_i) & \left( q^2 \alpha_R C_v \frac{dD_v}{dC_A} - \alpha_R C_i C_v \frac{dD_i}{dC_A} \right) \\ -\delta_{Ai} C_A q^2 & D_{Av} C_A q^2 & -\left( d_{Av} C_v + \frac{d\delta_{Ai} C_A}{dC_A} C_i \right) q^2 \end{pmatrix}, \quad (2.54)$$

$\text{Tr}(\Omega)$  – след матрицы  $\Omega_{ik}$ ,  $\text{Tr}(M)$  – след матрицы миноров первого порядка,  $C_{i,v}$  – стационарные локальные значения концентраций ТД, которые удовлетворяют соотношению (2.29) [122].

Коэффициенты характеристического уравнения (2.53) являются инвариантами матрицы  $\Omega_{ik}$ . С точностью до слагаемых, пропорциональных малым параметрам  $C_{i,v}/C_A \ll 1$  и  $D_v/D_i \ll 1$ , они имеют вид:

$$\text{Tr}(\Omega) = v_i + v_v + v_A \approx -(q^2 + \alpha_R C_v) D_i, \quad (2.55)$$

$$\text{Tr}(M) = v_i v_v + v_v v_A + v_i v_A \approx M_{33} = q^2 D_i (q^2 D_v + \alpha_R (D_i C_i + D_v C_v)), \quad (2.56)$$

$$\begin{aligned}
\det(\Omega) = v_i v_v v_A = -q^4 & \left[ (q^2 + \alpha_R C_v) (D_i d_{Av} d_{Bv} C_v + D_v \delta_{Ai} \delta_{Bi} C_i) + \right. \\
& \left. \alpha_R D_i C_i (\delta_{Ai} \delta_{Bi} C_i + C_v (d_{Av} \delta_{Bi} C_B + d_{Bv} \delta_{Ai} C_A)) \right] = \\
& -q^2 \left[ \left( \frac{d_{Av} d_{Bv} C_v}{D_v} + \frac{\delta_{Ai} \delta_{Bi} C_i}{D_i} \right) M_{33} + \right. \\
& \left. \alpha_R q^2 C_i C_v C_A C_B \frac{D_i}{D_v} (d_{Bv} \delta_{Ai} - d_{Av} \delta_{Bi}) (d_{Bv} - d_{Av}) \right]
\end{aligned} \quad (2.57)$$

Здесь  $v_i, v_v, v_A$  – корни уравнения (2.53) ( $|v_i| > |v_v| > |v_A|$ ).

Нетрудно убедиться, что коэффициенты характеристического уравнения удовлетворяют критерию Рауса–Гурвица [123]

$$Tr(\Omega) < 0, \quad Tr(\Omega)Tr(M) < \det(\Omega), \quad \det(\Omega) < 0. \quad (2.58)$$

Поэтому все корни уравнения (2.53) являются отрицательными и действительными. Это означает, что стационарное состояние асимптотически устойчиво.

Найдем характерные времена релаксации возмущений концентраций ТД  $\tau_{i,v}$  и атомов примеси  $\tau_A$ . Так как диффузионные подвижности МА, вакансий и атомов примеси сильно отличаются, то  $\tau_i \ll \tau_v \ll \tau_A$ , причем  $\tau_i$  определяется максимальным (по абсолютной величине) собственным значением матрицы  $\Omega$ , ( $\tau_i = -v_i^{-1}$ ), а  $\tau_A$  – минимальным собственным значением ( $\tau_A = -v_A^{-1}$ ). Следовательно, с помощью (2.55)–(2.57) получаем:

$$\tau_i^{-1} = -Tr(\Omega) = (q^2 + \alpha_R C_v) D_i, \quad (2.59)$$

$$\tau_v^{-1} = -\frac{Tr(M)}{Tr(\Omega)} = -q^2 D_v + \frac{\alpha_R q^2 D_i C_i}{q^2 + \alpha_R C_v}, \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned}
\tau_A^{-1} = \frac{\det(\Omega)}{Tr(M)} = q^2 & \left( \frac{d_{Av} d_{Bv} C_v}{D_v} + \frac{\delta_{Ai} \delta_{Bi} C_i}{D_i} \right) + \\
& \frac{\alpha_R q^2 C_i C_v C_A C_B (d_{Av} \delta_{Bi} - d_{Bv} \delta_{Ai}) (d_{Av} - d_{Bv})}{D_v (q^2 D_v + \alpha_R (D_v C_v + D_i C_i))}.
\end{aligned} \quad (2.61)$$

Возмущения концентраций представимы в виде:

$$\tilde{C}_n = \sum_k C_{nk}(\mathbf{r}) \exp(-t/\tau_k), \quad n, k = i, v, A. \quad (2.62)$$

Эволюция возмущений происходит следующим образом: сначала за времена  $\tau_i$  и  $\tau_v$  затухают быстроменяющиеся моды (первое и второе слагаемые в (2.62)), то есть возмущения концентраций ТД подстраиваются под локальные значения концентрации примеси. Затем все возмущения релаксируют с характерным временем  $\tau_A$ .

Множитель при  $q^2$  в выражении для времени релаксации совпадает с коэффициентом радиационно-ускоренной диффузии примеси в окрестности когерентного выделения при дополнительных условиях  $\mathbf{j}_i = \mathbf{j}_v = 0$  (см. (3.7)). Второе слагаемое в (2.61) описывает влияние рекомбинации на релаксационные процессы. Хотя это слагаемое может быть отрицательным, оно по абсолютной величине меньше первого. Заметим, что при  $\zeta \rightarrow 1$  соотношение (2.61) переходит в аналогичное соотношение, полученное в работе [37] в адиабатическом приближении, то есть при  $\tau_{i,v} = 0$ .

Очевидно, что для достижения стационарного состояния время облучения должно быть больше времени релаксации малых возмущений состава сплава. С понижением температуры  $\tau_A$  растет, поэтому при низких температурах стационарное состояние не достигается за разумное время облучения. Как будет показано ниже в разделе 4.3, именно по этой причине наблюдается низкотемпературная граница радиационно-индуцированной сегрегации в бинарном сплаве при бескаскадном электронном облучении.

В заключение этого раздела необходимо указать на работы [61, 62], в которых обсуждается устойчивость однородного распределения компонентов сплава, описываемых системами уравнений общего вида. Однако в этих работах механизмы переноса атомов не конкретизируются, а выясняются лишь свойства матрицы коэффициентов диффузии, выполнение которых необходимо для устойчивости сплава.

## 2.4. В ы в о д ы

1. Сформулирована модель радиационно-индуцированной сегрегации в концентрированных бинарных сплавах.
2. Если отсутствуют упругое взаимодействие ТД со стоками и асимметрия граничных условий для ТД на стоках разного типа, то на любом стоке поток вакансий равен потоку МА. Радиационно-индуцированная сегрегация не приводит к возникновению эффектов предпочтения в сплаве без выделений на стоках.

3. Построены уравнения баланса для средних концентраций радиационных ТД. Показано, что в бинарных сплавах поглощение МА и вакансий в эффективной среде описывается слагаемыми

$$-k^2 D_i C_i, \quad -k^2 d_{Bv} \frac{C_B + \lambda C_A}{C_B + \kappa C_A} (C_v - C_v^e),$$

где  $k^2$  задается выражением, полученным для чистых металлов (если пренебречь взаимодействием между ТД и стоками). Указан путь построения модели эффективной среды с учетом конечности объемной доли стоков ТД.

4. Проведен анализ устойчивости стационарного распределения компонентов в облучаемом сплаве относительно пространственных флуктуаций состава сплава и показано, что стационарное состояние асимптотически устойчиво. Найдено характерное время релаксации малых возмущений состава сплава, которое можно использовать для оценки времени формирования сегрегационного профиля концентрации вблизи стока ТД.

Результаты данного раздела опубликованы в работах [52-54, 119, 120, 122].

### 3. ФАЗОВАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ПРИ БЕСКАСКАДНОМ ОБЛУЧЕНИИ

В этом разделе рассмотрено влияние сегрегации на рост выделений второй фазы в концентрированном бинарном сплаве с учетом структуры межфазной границы. Найдены условия устойчивости когерентных и некогерентных выделений новой фазы и сформулирован метод построения структурно-фазовых диаграмм облучаемых сплавов.

#### 3.1. Рост выделений под облучением

Предположим, что сплав содержит выделения второй фазы с концентрацией примеси больше, чем средняя концентрация примеси в матрице,  $C_A^P > \bar{C}_A$ . В этом случае эволюция выделения контролируется диффузией примеси. Скорость роста выделения радиуса  $R$  и полный поток примеси к выделению  $J_A$  связаны соотношением

$$4\pi R^2 \frac{dR}{dt} = \frac{J_A}{C_A^P - C_A|_{r=R}}. \quad (3.1)$$

Благодаря связи между потоком примеси и потоками ТД скорость роста выделения сильно зависит от структурного состояния выделения, то есть содержит межфазная граница (или само выделение) сток для ТД или нет. Здесь будет рассмотрено два предельных случая межфазной границы выделение-матрица, а именно полностью когерентные и полностью некогерентные границы.

### **3.1.1. Когерентное выделение**

Будем считать, что выделение имеет полностью упорядоченную идеальную когерентную границу. Такая граница является прозрачной для ТД, так как не имеет дефектных участков, которые могли бы поглощать ТД. По этой причине в окрестности изолированного когерентного выделения, расположенного вдали от стоков, потоки ТД малы по сравнению с потоками ТД на сток. Миграция ТД через границу когерентного выделения и вблизи него может быть обусловлена разными причинами: отклонением концентрации от квазистационарных значений; движением самой границы; наличием стоков вокруг выделения, которые формируют диффузионные поля ТД.

Рассмотрим каждую из этих причин. За время много меньшее времен диффузии атомов примеси и смещения межфазной границы концентрации ТД подстраиваются под значения, соответствующие локальному составу сплава [53]. В общем случае квазистационарные концентрации ТД внутри и снаружи выделения отличаются, из-за этого появляются потоки ТД через движущуюся межфазную границу. Однако эти потоки малы по сравнению с потоком атомов примеси (в меру малости  $C_{i,v}/C_A$ ) и слабо влияют на условие устойчивости когерентного выделения [53]. Что касается потоков ТД на далекие стоки, окружающие выделение, то вносимые ими относительные искажения диффузионного профиля примеси вблизи когерентного выделения порядка  $r^2/L^2 \ll 1$  (здесь  $r$  – расстояние от центра выделения,  $L$  – среднее расстояние между стоками). Эти искажения приводят к диффузионному взаимодействию выделения со стоками, в результате которого происходит перекачка примеси либо из окрестности выделения к стоку (если примесь сегрегирует к стокам, например, Si в Ni), либо от стока к выделению (например, Al в Ni). Очевидно, что относительное изменение средней концентрации примеси в окрестности выделения, вызванное диффузионным взаимодействием, порядка относительного объема обедненных (или обогащенных) зон вблизи стоков, который при малой объемной доле макродефектов также мал.

Таким образом, с точностью до поправок, пропорциональных  $R/L$ , в приближении малой объемной доли стоков, квазистационарные профили концентраций диффузантов вблизи когерентного выделения удовлетворяют уравнениям [124]:

$$\mathbf{j}_i = \mathbf{j}_v = 0, \quad (3.2)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_A = 0. \quad (3.3)$$

При малой объемной доле макродефектов основное изменение концентраций происходит вблизи выделения на расстояниях порядка нескольких  $R$ , поэтому вдали от выделения концентрации ТД и примеси с хорошей точностью равны их средним значениям

$$C_n|_{r \gg R} = \bar{C}_n, \quad n = A, i, v. \quad (3.4)$$

Будем рассматривать диффузионно-лимитируемый случай, считая, что вблизи границы выделения поддерживается равновесное значение концентрации атомов примеси  $C_A^R$

$$C_A|_{r=R} = C_A^R. \quad (3.5)$$

Из уравнений (3.2) следуют соотношения

$$D_i C_i = \bar{D}_i \bar{C}_i, \quad C_v / D_v = \bar{C}_v / \bar{D}_v, \quad (3.6)$$

используя которые записываем  $\mathbf{j}_A$  в виде

$$\mathbf{j}_A = - \left( \frac{d_{Av} d_{Bv} C_v}{D_v} + \frac{\delta_{Bi} \delta_{Ai} C_i}{D_i} \right) \nabla C_A. \quad (3.7)$$

Из решения диффузионной задачи (3.3)-(3.7) получаем полный поток примеси к границе когерентного выделения

$$J_A = 4\pi R D_{A \text{ coh}}^{irr} (\bar{C}_A - C_A^R), \quad (3.8)$$

где

$$D_{A \text{ coh}}^{irr} = \frac{d_{Av} d_{Bv} \bar{C}_v}{\bar{D}_v} + \frac{\bar{\delta}_{Bi} \delta_{Ai}^R \bar{C}_i}{D_i^R} \quad (3.9)$$

является эффективным коэффициентом радиационно-ускоренной диффузии примеси вблизи когерентного выделения (верхний индекс  $R$  относится к величинам на межфазной границе выделение-матрица).

Как показывает уравнение (3.8), облучение ускоряет диффузию примеси, в то время как зависимость потока от пересыщенности примеси не изменяется. Следовательно, критерий стабильности твердого раствора

относительно зарождения когерентных выделений остается таким же, как без облучения, а именно средняя концентрация примеси должна быть ниже, чем предел растворимости примеси  $C_A^e = \lim_{R \rightarrow \infty} C_A^R$ .

Уравнение (3.8) объясняет, почему и тепловая [125], и радиационно-ускоренная коалесценция [126] когерентных выделений  $\gamma'$ -фазы в сплавах на основе Ni подчиняется одному и тому же кинетическому закону  $\bar{R} \propto t^{1/3}$ , предсказываемому теорией Лифшица–Слёзова для тепловой коалесценции [113] ( $\bar{R}$  – средний радиус когерентных выделений).

Без облучения коэффициент взаимной диффузии примеси в окрестности когерентного выделения имеет вид:

$$D_{A\text{ coh}}^e = \frac{d_{Av}d_{Bv}C_v^e}{d_{Av}C_A + d_{Bv}C_B}. \quad (3.10)$$

Следует отметить, что в работе [127] при рассмотрении тепловой коалесценции когерентных выделений с учетом сохранения объема было получено подобное выражение. Кроме того, в работе [128], используя уравнение (3.10), было получено хорошее согласие между расчетными величинами эффективной диффузионной подвижности и величинами, полученными из экспериментального исследования тепловой коалесценции.

Для описания взаимной диффузии в бинарных сплавах часто используется коэффициент диффузии в форме Даркена [129]

$$\tilde{D} = (C_A D_B^* + C_B D_A^*)\varphi, \quad \varphi = \frac{C_A}{k_B T} \frac{\partial \mu_A}{\partial C_A}, \quad (3.11)$$

где  $D_A^*$  и  $D_B^*$  – коэффициенты самодиффузии компонентов,  $\varphi$  – термодинамический фактор и  $\mu_A$  – химический потенциал.

Феноменологическая теория Даркена основана на предположении о локальном равновесии вакансий [130, 131]. Это предположение не всегда выполняется, хотя бы потому, что в диффузионной зоне часто наблюдается образование пор при конденсации неравновесных вакансий (прямой эффект Киркендалла [132, 133]). Кроме того, коэффициент диффузии Даркена соответствует «макроскопической» диффузии на расстояния больше расстояния между стоками [131]. Взаимная диффузия в пространстве между стоками с учетом неравновесных вакансий (без облучения) рассматривалась в работах Назарова и Гурова [134-136]. Ими было предложено следующее выражение для коэффициента взаимной диффузии:

$$D_{NG} = \frac{D_A^* D_B^*}{C_A D_A^* + C_B D_B^*} \varphi. \quad (3.12)$$

В дальнейшем подход Назарова–Гурова получил развитие в работах Гусака (см. например [131, 137, 138]).

Видно, что коэффициенты диффузии (3.10) и (3.12) фактически имеют одинаковый вид, хотя были получены разными способами.

### 3.1.2. Некогерентное выделение

В отличие от когерентного выделения, граница некогерентного выделения, аналогично границам зерен, является хорошим стоком для ТД, следовательно, в диффузионно-контролируемом случае термически равновесные концентрации вакансий и МА поддерживаются на некогерентной границе. В нулевом порядке по параметру  $R/L$  профили концентраций ТД и примеси вблизи некогерентного выделения радиуса  $R$  могут быть найдены из решения диффузионной задачи, подобной задаче, рассмотренной выше для поры

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_n = 0, \quad n = A, i, v, \quad (3.13)$$

$$C_n|_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \bar{C}_n, \quad (3.14)$$

$$C_A|_{r=R} = C_A^R, \quad C_v|_{r=R} = C_v^e, \quad C_i|_{r=R} = 0. \quad (3.15)$$

Как следует из уравнений (3.13)–(3.15), полный поток МА к некогерентному выделению имеет вид

$$J_i = 4\pi R \bar{D}_i \bar{C}_i. \quad (3.16)$$

Полные потоки вакансий  $J_v$  и примеси  $J_A$  удовлетворяют системе уравнений [53, 54]

$$1 + J_v \frac{\lambda + \mu + (\mu - \lambda) J_A / J_v}{4\pi R d_{Av} C_B^e (\bar{C}_B + \lambda \bar{C}_A)} = \exp \left\{ \left[ \lambda + \mu + (\mu - \lambda) \frac{J_A}{J_v} \right] \int_{C_A^R}^{\bar{C}_A} \frac{dC}{g(C)} \right\}, \quad (3.17)$$

$$g(C) = (\mu - \lambda)C(1 - C) + [1 + (\mu - 1)C] \frac{J_A}{J_v},$$

$$J_v = \left[ 4\pi R d_{Av} (\bar{C}_v - C_v^e) - (\mu - 1) J_A \right] \frac{\bar{C}_B + \lambda \bar{C}_A}{\mu \bar{C}_B + \lambda \bar{C}_A}. \quad (3.18)$$

Заметим, что замена  $4\pi R \rightarrow 2\pi \left(\ln \frac{L}{R}\right)^{-1}$  и  $J_n \rightarrow I_n$  ( $n = A, v, i$ )

в уравнениях (3.16)-(3.18) дает уравнения для потоков на единицу длины цилиндрического некогерентного выделения (или выделения на краевой дислокации) [53].

Решения уравнений (3.17) и (3.18) были проанализированы в различных предельных случаях в работах [53, 124]. Например, если  $C_A \ll 1$  и  $\mu C_A, \lambda C_A \ll 1$ , из уравнений (3.17) и (3.18) получаем

$$J_v = 4\pi R d_{Bv} (\bar{C}_v - C_v^e), \quad (3.19)$$

$$J_A = J_v \frac{\lambda - \mu}{1 - \varphi} (\bar{C}_A - \varphi C_A^R), \quad \varphi = \left[ 1 + \left( \frac{\bar{C}_v}{C_v^e} - 1 \right) (1 + \kappa) \right]^{\frac{1-\kappa}{1+\kappa}}. \quad (3.20)$$

Сравнение уравнения (3.8) с уравнением (3.20) показывает, что условие равновесия некогерентного выделения с твердым раствором изменяется под облучением. Радиационно-индуцированные потоки ТД к некогерентному выделению приводят к предпочтительному переносу одного из элементов сплава к выделению, но обратной диффузии этого элемента препятствует взаимная рекомбинация вакансий и МА на некогерентной межфазной границе. Видно, что роль предела растворимости примеси относительно некогерентных выделений играет величина  $C_A^{irr} = \lim_{R \rightarrow \infty} \varphi C_A^R$ . По аналогии с термически равновесной концентрацией,  $C_A^{irr}$  может быть названа кинетически равновесной концентрацией примеси. Подставляя  $J_A = 0$  и  $R \rightarrow \infty$  в уравнения (3.17) и (3.18), получаем соотношение между тепловой и радиационно-модифицированной растворимостями при произвольных величинах диффузионных коэффициентов

$$\frac{C_A^{irr}}{1 - C_A^{irr}} = \frac{C_A^e}{1 - C_A^e} \left[ 1 + \left( \frac{\bar{C}_v}{C_v^e} - 1 \right) \frac{1 + \kappa}{1 + (\kappa - 1) C_A^{irr}} \right]^{\frac{1-\kappa}{1+\kappa}}. \quad (3.21)$$

Если  $\bar{C}_A < C_A^{irr}$ , некогерентные выделения и выделения, связанные со стоками, растворяются под облучением. Как и следовало ожидать, уравнение (3.21) согласуется с точным соотношением (2.33).

Чтобы найти  $C_A^{irr}$  как функцию условий облучения, нужно выразить среднюю концентрацию вакансий, входящую в уравнение (3.21) через скорость создания смещений и параметры микроструктуры сплава. Для этой цели используем уравнения скоростей реакций, полученные выше.

При  $\bar{C}_A = C_A^{irr}$  сплав не содержит некогерентные выделения. Единственными стоками для ТД являются поры и дислокации, причем потоки примеси на них отсутствуют. Следовательно, требуемая средняя концентрация вакансий определена соотношением (2.48), если  $\bar{C}_A$  заменить на  $C_A^{irr}$ .

### 3.1.3. Рост слоя новой фазы на поре

Важно отметить, что основные результаты предыдущего раздела, касающиеся особенностей роста некогерентных выделений в облучаемом сплаве, качественно справедливы также для когерентных выделений, расположенных на стоках ТД (или в непосредственной близости от них). Отличие состоит в том, что вакансии и МА рекомбинируют не на границе выделения с матрицей, а на стоке ТД, который содержится в этом выделении. Кроме того, скорость изменения объема выделения может зависеть от нескомпенсированного потока ТД одного из сортов (от разности  $J_i - J_v$ ).

Рассмотрим рост выделения, представляющего собой слой новой фазы, окружающий пору радиуса  $r_V$ . Внешняя когерентная межфазная граница расположена на расстоянии  $R$  от центра поры. Учитывая связь между потоками компонентов сплава и потоками ТД  $\mathbf{j}_A + \mathbf{j}_B = \mathbf{j}_i - \mathbf{j}_v$ , нетрудно выразить скорости изменения объема поры и объема выделения  $V_P$  через полные потоки примеси и ТД при  $r = R$ :

$$4\pi r_V^2 \frac{dr_V}{dt} = J_v - J_i, \quad (3.22)$$

$$\frac{dV_P}{dt} = \frac{J_A + C_A^R (J_v - J_i)}{C_A^P - C_A^R}. \quad (3.23)$$

Для нахождения потоков  $J_A$ ,  $J_v$  и  $J_i$  в диффузионно-лимитируемом случае уравнения (3.13) необходимо дополнить уравнениями диффузии ТД внутри выделения и условиями сшивки концентраций и потоков ТД внутри и снаружи выделения. В некоторых сплавах достаточно решить внешнюю диффузионную задачу в области  $R < r < R_{inf}$ . Так, если коэффициенты диффузии ТД внутри выделения такого же порядка или больше, чем в окружающем материале, а толщина слоя новой фазы мала  $R - r_V \ll r_V$ , то значения концентраций ТД на когерентной границе при  $r = R$  мало отличаются от равновесных значений на границе поры при  $r = r_V$ . Следовательно, для определения потоков примеси, вакансий и МА можно воспользоваться уравнениями (2.22) и (2.43). В этом случае слой новой фазы не влияет на рост поры. Для поры критического радиуса, который определяется условием  $J_v = J_i$ , выражения для потоков  $J_A$  и  $J_v$  на

границу выделения совпадают с выражениями, полученными в предыдущем разделе. Для иллюстрации влияния процессов роста поры на скорость изменения объема выделения рассмотрим предельный случай  $\lambda = \mu$ . Используя (2.22), можно показать, что

$$J_A = \frac{J_v - J_i}{\psi - 1} \frac{d_{Av} d_{Bv}}{D_v D_v^R} (\bar{C}_A - C_A^R) + (J_v - J_i) \frac{d_{Av} C_A^R}{D_v^R}, \quad (3.24)$$

где

$$\psi = \left( 1 + \frac{J_i + J_v}{4\pi R D_v C_v^R} \right)^{\frac{J_v - J_i}{J_v + J_i}}, \quad D_v^R = d_{Av} C_A^R + d_{Bv} C_B^R.$$

Второе слагаемое в (3.24), как и следовало ожидать, является несущественным, если  $J_A \gg |J_v - J_i|$ . При условии  $|J_v - J_i| \ll J_v, J_i$ , которое в облучаемом сплаве выполняется практически всегда, первое слагаемое в (3.24) имеет вид потока примеси на границу некогерентного выделения

$$J_A = 4\pi R D_{A \text{ inc}}^{irr} (\bar{C}_A - C_A^R), \quad (3.25)$$

где коэффициент радиационно-стимулированной диффузии примеси имеет вид

$$D_{A \text{ inc}}^{irr} = \frac{J_v}{2\pi R} \frac{d_{Av} d_{Bv}}{D_v D_v^R} \left[ \ln \left( 1 + \frac{J_v}{2\pi R D_v C_v^R} \right) \right]^{-1}, \quad (3.26)$$

а поток вакансий удовлетворяет уравнению.

$$J_v = 4\pi R \bar{D}_v (\bar{C}_v - C_v^R) \left[ 1 + \frac{2(d_{Av} - d_{Bv})(\bar{C}_A - C_A^R)}{D_v^R \ln(1 + J_v/2\pi R \bar{D}_v C_v^R)} \right]^{-1}. \quad (3.27)$$

Подставляя (3.24) в (3.23), получаем

$$\frac{dV_P}{dt} = \frac{J_v - J_i}{\psi - 1} \frac{d_{Av} d_{Bv}}{D_v D_v^R} \frac{\bar{C}_A - C_A^R}{C_A^P - C_A^R} + (J_i - J_v) \frac{d_{Av} - d_{Bv}}{D_v^R} \frac{C_A^P \cdot C_B^R}{C_A^P - C_A^R}. \quad (3.28)$$

Второе слагаемое в этом выражении описывает влияние поры на рост слоя новой фазы, его знак при фиксированном значении  $\mu$  зависит от знака скорости роста поры. Например, в случае растущей поры ( $J_v > J_i$ ) миграция избыточных вакансий преимущественно по позициям атомов сорта А ( $d_{Av} > d_{Bv}$ ) приводит к обеднению твердого раствора примеси

вблизи выделения, и поэтому дает отрицательный вклад в скорость изменения объема выделения. Как показывает (3.28), рост поры может существенно влиять на рост выделения, если  $\bar{C}_A \sim C_A^R$ , то есть вблизи границы устойчивости выделения.

### 3.1.4. Выделение на дислокации

Рассмотрим рост когерентного цилиндрического выделения радиуса  $r_p$ , которое содержит внутри себя краевую дислокацию. За счет преимущественного поглощения МА дислокация в облучаемом сплаве перемещается. Предполагая, что взаимное расположение дислокации и выделения при этом не изменяется, и используя связь между потоками ТД и компонентов сплава, можно найти скорость перемещения дислокации

$$v = (I_i - I_v)b^{-1} \quad (3.29)$$

(здесь  $b$  – вектор Бюргерса) и скорость изменения площади поперечного сечения выделения

$$\frac{dS_p}{dt} = \frac{I_A + C_A^{rp}(I_v - I_i)}{C_A^P - C_A^{rp}}. \quad (3.30)$$

Для определения полных потоков  $I_A, I_v, I_i$  на единицу длины выделения необходимо решить диффузионные уравнения в цилиндрической области радиуса  $R_{inf}$  вокруг выделения, которая не содержит другие дефекты структуры кристалла. Постановка задачи аналогична постановке задачи о росте сферического слоя новой фазы на поре.

Для достаточно больших  $r_p$ , когда можно пренебречь упругим взаимодействием ТД с ядром дислокации и при тех же предположениях о диффузии ТД внутри выделения, что и в предыдущем разделе, потоки дефектов и примеси на когерентное выделение, расположенное на дислокации, мало отличаются от потоков на некогерентное цилиндрическое выделение. Можно показать [53], что в нулевом приближении по малому параметру  $r_p/R_{inf}$  для когерентного выделения, расположенного на дислокации, после замены

$$J_n \rightarrow I_n, \quad n = A, i, v, \quad 4\pi R \rightarrow 2\pi(\ln r_{ex}/r_p)^{-1} \quad (3.31)$$

справедливы все результаты предыдущего раздела.

Конечно, приведенные здесь рассуждения не могут претендовать на полноту и в основном носят качественный характер. При последовательном решении задачи о росте выделения на краевой дислокации необходимо

учитывать упругое взаимодействие ТД с ядром дислокации, зависимость упругих модулей материала от концентрации примеси, различие дилатационных объемов МА различных сортов.

### 3.2. Структурно-фазовые диаграммы

Устойчивость сплава под облучением существенно зависит от типа границ выделений и определяется не только термодинамическими, но и кинетическими факторами, такими как диффузионные константы компонентов сплава, средние концентрации неравновесных ТД. Результаты исследования фазовой стабильности удобно представить на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме [139], которую будем также называть структурно-фазовой диаграммой, чтобы подчеркнуть зависимость стабильности сплава как от структуры межфазных границ, так и от микроструктуры матрицы.

Расчеты были проведены для двух типов сплавов – Ni-Si и Ni-Al, поведение которых под облучением качественно отличается (см. [3, 4]). В сплаве типа Ni-Si примесь накапливается у стоков ТД, что соответствует значениям  $\kappa > 1$  (отрицательный показатель степени в соотношении (3.21)). При  $\kappa < 1$  (сплав типа Ni-Al) потоки ТД и примеси направлены в противоположные стороны, поэтому в окрестности стоков образуются обедненные зоны. На рис. 3.1 показаны диаграммы для сплава Ni-Si ( $\kappa > 1$ , атомы примеси предпочтительно мигрируют по междуузельному механизму) и сплава Ni-Al ( $\kappa < 1$ , примесь переносится преимущественно по вакансионному механизму).

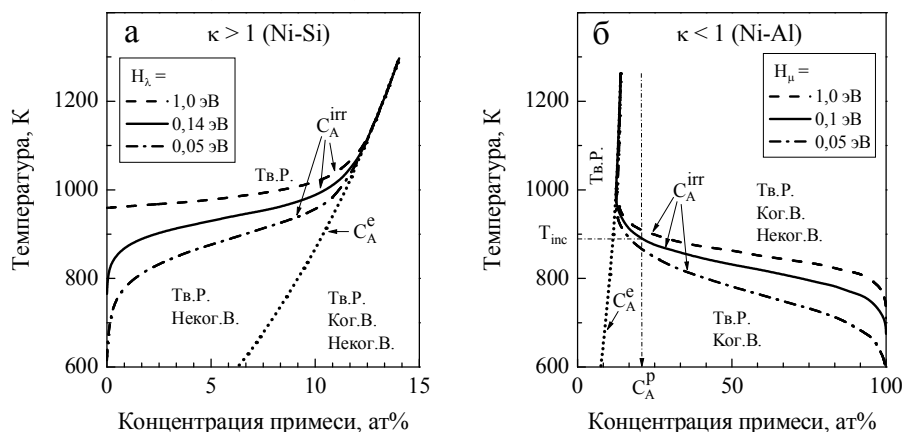


Рис. 3.1. Радиационно-модифицированные фазовые диаграммы бинарных сплавов: а)  $H_\mu = 0$ , б)  $H_\lambda = 0$ . Пунктирной линией показана термическая когерентная растворимость, измеренная в работе [125]. Сокращения Тв. Р., Коог. В. и Неког. В. означают «твердый раствор», «когерентные выделения» и «некогерентные выделения», соответственно

Видно, что существует два типа диаграмм, в зависимости от направления сегрегации примеси. Кривая растворимости расщепляется на две кривые. Новая кривая представляет собой зависимость  $C_A^{irr}$  от температуры. Для построения этой кривой уравнения (2.48) и (3.21) были решены численно при  $K = 10^{-6}$  сна/с и  $k^2 = 10^{14}$  м<sup>2</sup>. Параметры, общие для обоих сплавов, такие же, как и для чистого никеля (табл. 3.1). Диффузионные коэффициенты задавались в обычном виде:

$$d_{Mn} = d_{n0} \exp(-H_{Mn}^m/k_B T), \quad M = A, B; \quad n = i, v, \quad (3.32)$$

где  $H_{Mn}^m$  – энергия миграции соответствующего дефекта. Чтобы показать чувствительность  $C_A^{irr}$  к изменению энергий активации, вычисления были выполнены для нескольких величин параметров  $H_\lambda = H_{B \rightarrow A}^i - H_{Ai}^m + H_{Bi}^m$  и  $H_\mu = H_{Bv} - H_{Av}$ .

Таблица 3.1

**Значение физических параметров, использованных для модельных расчетов структурно-фазовых диаграмм сплавов Ni-Si и Ni-Al**

Параметр	Численное значение	
	Ni-Si ( $\kappa > 1$ )	Ni-Al ( $\kappa < 1$ )
Скорость создания смещений $K$ , сна/с	$10^{-10} \dots 10^{-2}$	
Мощность стоков $k^2$ , м <sup>2</sup>	$10^{14}$	
Константа рекомбинации $\alpha_R$ , м <sup>2</sup>	$10^{21}$	
Коэффициент диффузии вакансий по атомам В $d_{Bv}$ , м <sup>2</sup> /с	а) $1,3 \times 10^{-5} \exp(-1,18 \text{ эВ}/k_B T)$	
Равновесная концентрация вакансий $C_v^e$ , ат. доли	а) $\exp(2 - 1,7 \text{ эВ}/k_B T)$	
Энергия активации миграции МА сорта В $H_{Bi}^m$ , эВ	б) 0,15	
Предел растворимости примеси $C_A^e = C_{A0}^e \exp(-E_A/k_B T)$ , ат. доли	$C_{A0}^e = 0,283$ б) $E_A = 0,077$ эВ	$C_{A0}^e = 0,255$ б) $E_A = 0,062$ эВ
$H_\lambda = H_{B \rightarrow A}^i - H_{Ai}^m + H_{Bi}^m$ , эВ	$0,14$ в); 0,05; 1	0
$H_\mu = H_{Bv} - H_{Av}$ , эВ	0	0,05; 0,1; 1

а) Сопласуется с данными по самодиффузии в чистом Ni [140].

б) Значения для чистого Ni [141].

в) Измерения для сплавов Ni-Si и Ni-Al [125].

г) Получено подстановкой в соотношение для  $H_\lambda$  экспериментальных значений энергии связи  $H_{B \rightarrow A}^i = 0,23$  эВ и энергии миграции  $H_{Ai}^m$  смешанной гантели Ni-Si в разбавленном сплаве [142].

Тепловой и радиационно-модифицированный предел растворимости делит структурно-фазовую диаграмму на три области (рис. 3.1). Однофазная область расположена слева от обеих кривых. В зависимости от величины отношения кинетических коэффициентов  $\kappa$ , между кривыми твердый раствор сосуществует либо с некогерентными выделениями, либо с когерентными выделениями. Правее двух кривых все выделения устойчивы независимо от структуры их границы и связи со стоками.

В случае сплава Ni-Al рассмотрение роста выделения имеет смысл при концентрациях примеси меньше, чем концентрация примеси в  $\gamma'$ -выделении ( $\text{Ni}_3\text{Al}$ ), то есть при  $C_{\text{Al}} < 0,25$ . Это означает, что в сплаве типа Ni-Al при температурах ниже критической  $T_{\text{inc}}$  некогерентные выделения и выделения на стоках являются неустойчивыми под облучением (рис. 3.1б).

Как показано на трехмерных диаграммах (рис. 3.2), расположение радиационно-модифицированного предела растворимости зависит от скорости создания смещений. В плоскости нулевой скорости создания смещений схематично показаны равновесные фазовые диаграммы сплавов Ni-Si и Ni-Al.

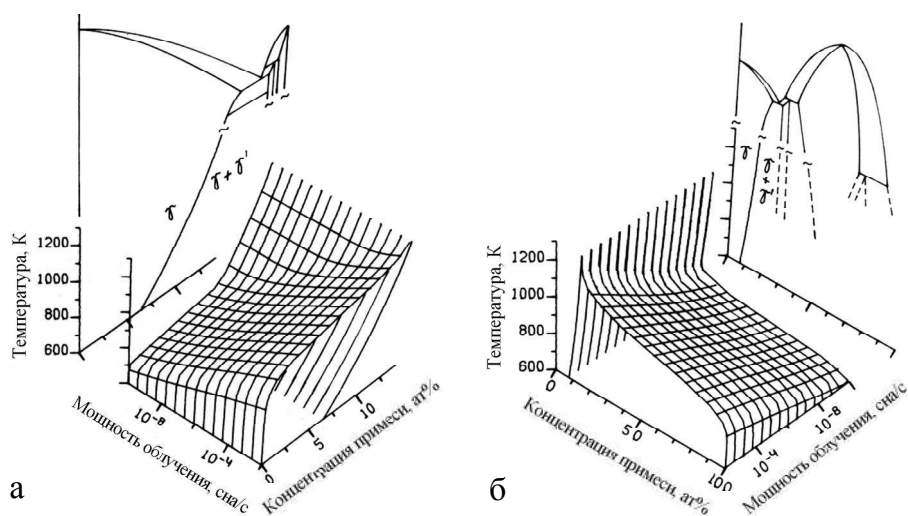


Рис. 3.2. Трехмерные структурно-фазовые диаграммы сплавов Ni-Si (а) и Ni-Al (б)

Сечение трехмерной диаграммы плоскостью постоянной концентрации примеси представляет собой диаграмму устойчивости для сплава данного состава (рис. 3.3). Как показывает рис. 3.3а, в случае сплава типа Ni-Si ( $\kappa > 1$ ) некогерентные выделения и выделения на стоках могут формироваться даже в недосыщенном твердом растворе, если скорость создания смещений выше, чем пороговая скорость создания смещений.

Напротив, при  $\kappa < 1$  термически устойчивые выделения, содержащие стоки дефектов, растворяются при достаточно высокой скорости создания смещений (рис. 3.3б). Пороговая скорость создания смещений как функция температуры может быть найдена из уравнений (2.48) и (3.21)

$$K^*(T) = k^2 d_{Bv} C_v^e U \frac{1 + (\lambda - 1) C_A}{1 + \kappa} \left[ 1 + \frac{\alpha_R C_v^e}{k^2} \left( U \frac{1 + (\kappa - 1) C_A}{1 + \kappa} + 1 \right) \right], \quad (3.33)$$

где  $U = \left[ \frac{C_A^e (1 - C_A)}{C_A (1 - C_A^e)} \right]^{\frac{\kappa + 1}{\kappa - 1}} - 1$ .

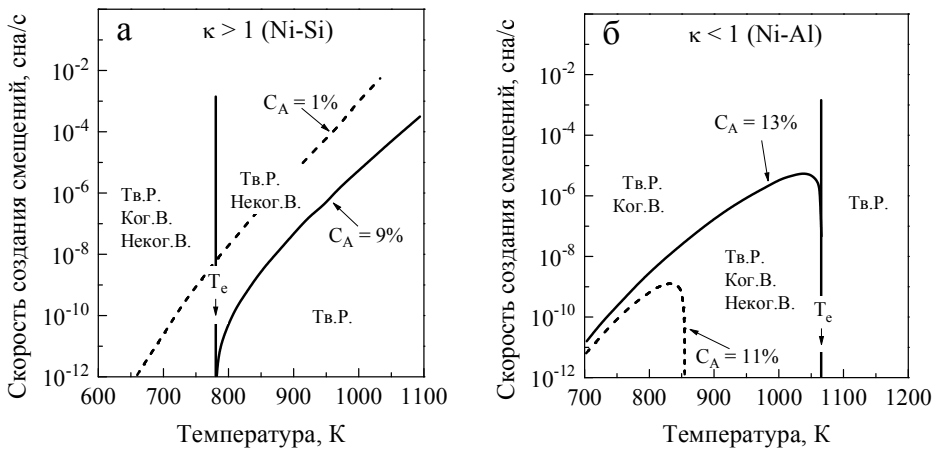


Рис. 3.3. Диаграммы устойчивости сплавов заданного состава. Вблизи кривых указана соответствующая концентрация примеси.  $T_c$  – температура когерентной растворимости

### 3.3. Сравнение с экспериментальными наблюдениями

Автору не известны работы, в которых были бы построены экспериментальные или теоретические диаграммы для сплавов типа Ni-Al ( $\kappa < 1$ ). Что касается сплавов с  $\kappa > 1$ , диаграмма устойчивости, представленная на рис. 3.3а подобна экспериментальным диаграммам сплавов Ni-Si и Al-Zn [14, 50]. Экспериментальные исследования сплава Al-Zn показывают, что полукогерентная гексагональная  $\beta$ -фаза выпадает под облучением при температурах значительно выше температуры растворения цинка [50]. Экспериментальная радиационно-модифицированная фазовая диаграмма сходна с диаграммой, показанной на рис. 3.1а.

Результаты расчетов для сплава Al-Zn показаны на рис. 3.4 и 3.5. Чтобы использовать подход, предложенный в этом разделе, предполагалось, что полугогерентная межфазная граница между частицей  $\beta$ -фазы и матрицей является хорошим стоком для ТД. Тепловая концентрация вакансий и диффузионный коэффициент  $d_{Al,v} \equiv d_{Bv}$  были выбраны такими же, как и для чистого Al, мощность стоков  $k^2 = 10^{15} \text{ м}^2$ . Параметры  $H_\lambda$  и  $H_\mu$  систематически варьировались, чтобы получить хорошее согласие расчетных кривых с экспериментальными данными. Кривые на рис. 3.4 и 3.5 построены для  $H_\lambda = 0,3 \text{ эВ}$  и  $H_\mu = 0,2 \text{ эВ}$ .

Для сравнения на рис. 3.4 также показан предел растворимости, вычисленный в работе [50]. В отличие от подхода, описанного в этом разделе, авторы работы [50] рассматривали кинетику зарождения когерентных выделений в разбавленных твердых растворах; предполагалось, что на межфазной границе зародышей содержатся центры захвата для ТД. Однако оба подхода имеют общую черту, а именно необратимость рекомбинации МА и вакансий на некогерентной межфазной границе или на ловушках ТД, что и является причиной изменения предела растворимости.

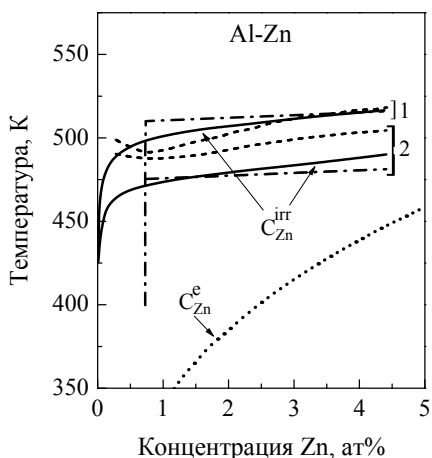


Рис. 3.4. Радиационно-модифицированная фазовая диаграмма сплава Al-Zn. 1 –  $K = 1,5 \times 10^{-2} \text{ сна/с}$ , 2 –  $K = 1,5 \times 10^{-3} \text{ сна/с}$ . Сплошной линией показана некогерентная растворимость согласно уравнениям (2.48) и (3.21). Штрихпунктирная линия – предел растворимости, измеренный в работе [50]. Штриховая линия – результаты расчетов работы [50]

На рис. 3.5 показаны условия облучения, необходимые для выпадения выделений Zn. Без облучения твердый раствор неустойчив при температурах ниже температуры растворения Zn,  $T_e$ . При увеличении скорости создания смещений температурный диапазон неустойчивости расширяется.

В соответствии с уравнением (3.33), положение границы раздела между однофазной и двухфазной областями зависит от концентрации примеси. Согласие между расчетными кривыми и экспериментальными данными является хорошим, особенно принимая во внимание неопределенность в параметрах материала. На рис. 3.5 также показана граница устойчивости (пунктирная кривая), рассчитанная в работе [143]. Согласно [143], выше этой кривой однородный твердый раствор неустойчив относительно пространственных флуктуаций состава сплава.

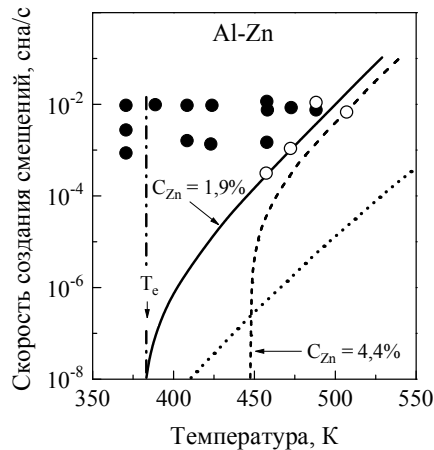


Рис. 3.5. Условия облучения для образования выделений Zn в сплаве Al-Zn. Сплошная и штриховая линии представляют собой пороговую скорость создания смещений согласно уравнению (3.33). Пунктирная линия – расчеты работы [143]. Экспериментальные точки относятся к сплаву Al-1,9at%Zn [15], (●) выпадение  $\beta$ -фазы, (○) частицы  $\beta$ -фазы не наблюдаются

### 3.4. О б с у ж д е н и е

В этом разделе когерентная и некогерентная межфазные границы рассматривались как предельные случаи полностью упорядоченной и полностью разупорядоченной межфазной границы, соответственно. Существует широкий спектр полукogerентных межфазных границ с промежуточной степенью упорядочения. Очевидно, по мере уменьшения несовершенства полукogerентной границы влияние радиационно-индуцированной сегрегации на рост выделения также уменьшается. Соответственно, на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме область стабильности полукogerентных выделений должна быть ограничена кривой, находящейся между тепловым и радиационно-модифицированным некогерентным пределом растворимости.

При построении фазовых диаграмм неявно предполагалось, что тепловые растворимости примеси по отношению к когерентным и некоге-

рентным выделениям являются одинаковыми. В том случае, если они заметно отличаются, это может быть легко включено в описанный подход.

При каскадообразующем облучении при достаточно низких температурах каскады, пересекающие межфазную границу выделение-матрица, растворяют выделение. Каскадное растворение приводит к сдвигу и когерентной и некогерентной растворимостей в область более высоких концентраций. Существующие модели каскадного растворения (или растворения атомами отдачи) не учитывают радиационно-индуцированную сегрегацию примеси (см. [17], а также ссылки, цитируемые в этой работе). Очевидно, в случае некогерентного выделения сегрегация либо способствует каскадному растворению, либо конкурирует с ним, в зависимости от направления сегрегации примеси. Модель диффузии ТД и примеси, использованная здесь, хорошо подходит для описания совместного влияния сегрегации и каскадного растворения на растворимость примеси. Рассмотрение этой проблемы проводится в разделе 4 (см. также работы [64, 144-146]).

### 3.5. В ы в о д ы

1. Бескаскадное облучение приводит к ускорению роста когерентных выделений; при этом критерий стабильности твердого раствора относительно образования когерентных выделений остается таким же, как без облучения, а именно средняя концентрация примеси должна быть ниже, чем термический предел растворимости примеси.
2. Радиационно-индуцированная сегрегация значительно влияет на рост некогерентных выделений. Выделения, расположенные на стоках ТД, ведут себя подобно некогерентным изолированным выделениям.
3. Для описания устойчивости некогерентных выделений найден аналог термического предела растворимости примеси – кинетически равновесная концентрация примеси, которая зависит от условий облучения и диффузионных коэффициентов ТД.
4. Результаты исследования фазовой стабильности представлены на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме, которую также следует называть структурно-фазовой диаграммой, чтобы подчеркнуть зависимость стабильности сплава от структуры межфазных границ выделений. На этой диаграмме относительное положение теплового и радиационно-модифицированного предела растворимости зависит от соотношения между кинетическими коэффициентами сплава  $\kappa = \zeta d_{A_i} d_{B_v} / d_{B_i} D_{A_v}$ .
5. На диаграмме температура-скорость создания смещений область стабильности некогерентных выделений и выделений на стоках ограничена хорошо определенной кривой. Форма кривой зависит от типа сплава, который в данной модели определяется кинетическим параметром  $\kappa$ .

6. Построены радиационно-модифицированные фазовые диаграммы сплавов Ni-Si, Ni-Al и Al-Zn. Для сплава Al-Zn проведено сравнение с экспериментальными диаграммами.

Результаты данного раздела опубликованы в работах [53, 54, 124, 139, 147].

#### 4. ВЛИЯНИЕ СЕГРЕГАЦИИ И КАСКАДНОГО РАЗУПОРЯДОЧЕНИЯ НА РАВНОВЕСИЕ ФАЗ

В этом разделе исследовано совместное влияние радиационно-индуцированной сегрегации и каскадного растворения на рост и устойчивость когерентных и некогерентных выделений новой фазы в неупорядоченном сплаве замещения. Найдены радиационно-модифицированные когерентная и некогерентная растворимости. Для сплавов Ni-Si и Ni-Al рассчитаны структурно-фазовые диаграммы в зависимости от условий облучения. Дано сравнение с экспериментальными данными.

##### 4.1. Формулировка модели

Пусть неупорядоченный двухкомпонентный сплав элементов A-B содержит когерентные или некогерентные выделения упорядоченной фазы, концентрация  $C_A^P$  компонента A в которых больше, чем в матрице. Рассмотрим диффузионно-контролируемый рост этих выделений при каскадообразующем облучении.

Для описания радиационно-индуцированной сегрегации будем использовать систему диффузионных уравнений, полученную в разделе 2:

$$\frac{\partial C_{i,v}}{\partial t} = K - \alpha_R D_i C_i C_v - \text{div} \mathbf{j}_{i,v}, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\text{div} \mathbf{j}_A + g(\mathbf{r}), \quad (4.2)$$

$$\mathbf{j}_i = -\nabla D_i C_i, \quad D_i = \frac{d_{Ai} \zeta C_A}{C_B + \zeta C_A} + \frac{d_{Bi} C_B}{C_B + \zeta C_A}, \quad (4.3)$$

$$\mathbf{j}_v = -D_v^2 \nabla \frac{C_v}{D_v}, \quad D_v = d_{Av} C_A + d_{Bv} C_B, \quad (4.4)$$

$$\mathbf{j}_A = -d_{Av}C_v\nabla C_A + d_{Av}C_A\nabla C_v - \nabla D_i C_i \frac{\lambda C_A}{C_B + \lambda C_A}, \quad \lambda = \frac{d_{Ai}}{d_{Bi}} \zeta. \quad (4.5)$$

Уравнение диффузии примеси содержит источник  $g(\mathbf{r})$ , который появляется вследствие каскадного растворения выделений. Для описания разупорядочивающего действия каскадов на выделение используется модель каскадного источника, аналогичная модели, описанной в работах [148, 149]. Предположим, что каскады разупорядочивают приповерхностный слой выделения на глубину  $l_1$  и частично выбрасывают примесь в матрицу, порождая в приповерхностном слое выделения неоднородность концентрации примеси с характерным пространственным масштабом  $l$  порядка или меньше размера каскада (рис. 4.1). Затем наступает стадия диффузионного расплывания этой неоднородности, что приводит к частичному восстановлению выделения, продолжающемуся до следующего попадания каскада.

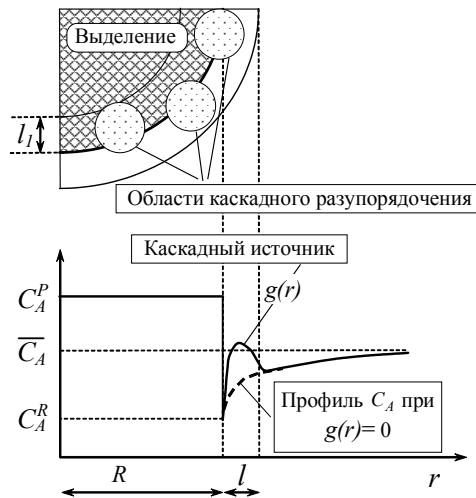


Рис. 4.1. Модель каскадного источника

Если рассматривать этот процесс на временных интервалах, превышающих среднее время повторного попадания каскада в одну и ту же область поверхности выделения, то можно считать, что разрушение приповерхностного слоя выделения приводит к формированию квазистационарного слоя, обогащенного примесью. В этом приповерхностном слое толщиной  $l$  действует источник примеси интенсивностью  $g(\mathbf{r})$ . Что касается повреждений, вызываемых каскадами внутри выделений упорядоченной фазы, предполагается, что они отжигаются достаточно быстро и не оказывают заметного влияния на эволюцию выделений (здесь не рассматривается образование разупорядоченных областей при закалке

термических пиков, которое может быть существенным при достаточно низких температурах облучения [150]). Очевидно, что  $I_1$  и  $I$  не превышают размер каскада. Описанная модель применима для выделений с размерами значительно больше размера каскада ( $R \gg l$ ). Скорость изменения объема выделения имеет вид:

$$4\pi R^2 \frac{dR}{dt} = \frac{J_A}{C_A^P - C_A|_{r=R}} - 4\pi R^2 I_1 \gamma K, \quad (4.6)$$

где  $J_A$  – полный поток примеси на выделение,  $C_A|_{r=R}$  – концентрация примеси на границе выделения,  $\gamma$  – эффективность разупорядочения (отношение количества разупорядоченных атомов на одну неравновесную пару Френкеля после окончания релаксации каскада).

Интеграл по объему, занимаемому источниками примеси, равен количеству атомов примеси, выносимому каскадами из выделения:

$$4\pi \int_R^{R+l} g(r) r^2 dr = 4\pi R^2 I_1 \gamma K (C_A^P - C_A|_{r=R}). \quad (4.7)$$

Для определения потока примеси  $J_A$  решение уравнений сегрегационной модели (4.1)-(4.5), как и в предыдущем разделе, будем искать в области вокруг выделения, свободной от других макродефектов с граничными условиями для примеси (3.4) и (3.5).

Вид граничных условий для ТД на поверхности выделения зависит от структуры межфазной границы, поэтому дальнейшее рассмотрение проведем отдельно для когерентных и некогерентных выделений.

#### 4.1.1. Когерентные выделения

Идеальная когерентная межфазная граница является прозрачной для ТД, потому что не содержит дефектных мест и не поглощает вакансии и МА. В приближении малой объемной доли стоков квазистационарное распределение примеси вокруг когерентного выделения описывается уравнениями:

$$\mathbf{j}_i = \mathbf{j}_v = 0, \quad (4.8)$$

$$\text{div} \mathbf{j}_A = g(\mathbf{r}) \quad (4.9)$$

с граничными условиями (3.4), (3.5). Из решения этой краевой задачи, которое аналогично решению, проведенному в разделе 3, находим полный поток примеси на когерентное выделение:

$$J_A = 4\pi R D_{A\text{ coh}}^{irr} (\bar{C}_A - C_A^R) + 4\pi R \int_R^{R+1} r g(r) dr, \quad (4.10)$$

где величина  $D_{A\text{ coh}}^{irr}$  совпадает с коэффициентом радиационно-стимулированной диффузии (3.9) в случае бескаскадного облучения.

Подставляя (4.10) в (4.6), получаем скорость роста когерентного выделения:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{D_{A\text{ coh}}^{irr}}{R(C_A^P - C_A^R)} \left\{ \bar{C}_A - C_A^R - \frac{1}{D_{A\text{ coh}}^{irr}} \int_R^{R+1} g(r) \left( \frac{r^2}{R} - r \right) dr \right\}. \quad (4.11)$$

Видно, что каскадное растворение приводит к появлению в выражении для скорости роста отрицательной добавки, вклад которой с понижением температуры растёт. В отличие от бескаскадного облучения ( $g(r) = 0$ ) при каскадообразующем облучении изменяется условие равновесия когерентного выделения. Средняя концентрация примесей  $C_{A\text{ coh}}^{irr}$ , при которой  $dR/dt = 0$ , является аналогом равновесной концентрации примеси в твердом растворе вблизи выделения радиуса  $R$ . В нулевом приближении по параметру  $1/R$  (для крупных выделений) радиационно-модифицированная когерентная растворимость имеет вид

$$C_{A\text{ coh}}^{irr} = \lim_{R \rightarrow \infty} \left( C_A^R + \frac{1}{D_{A\text{ coh}}^{irr}} \int_R^{R+1} g(r) \left( \frac{r^2}{R} - r \right) dr \right) = C_A^e + \frac{D_{mix}}{D_{A\text{ coh}}^{irr}} (C_A^P - C_A^e), \quad (4.12)$$

где  $D_{mix} = 0,5l_1 l_2 K \equiv d_{mix} K$  – имеет смысл коэффициента диффузии вследствие радиационного перемешивания. Каскадные параметры объединены в один параметр  $d_{mix}$ , который будем называть эффективностью каскадного перемешивания.

Хотя соотношение (4.12) является уравнением для определения  $C_{A\text{ coh}}^{irr}$  ( $D_{A\text{ coh}}^{irr}$  зависит от  $C_{A\text{ coh}}^{irr}$ , см. (3.9)), оно, тем не менее, показывает, что каскадное растворение повышает предел растворимости примеси. Если пренебречь зависимостью  $D_{A\text{ coh}}^{irr}$  от состава сплава, то (4.12) переходит в выражение, полученное ранее без учета двухкомпонентности сплава в явном виде [46, 148].

#### 4.1.2. Некогерентные выделения

Найдем скорость роста и условие устойчивости некогерентного выделения. Неупорядоченная граница некогерентного выделения является

стоком ТД и в диффузионно-лимитируемом случае на ней поддерживаются равновесные значения концентраций ТД, то есть выполняется граничное условие (3.15). Пренебрегая рекомбинацией ТД внутри области влияния (считая, что длина рекомбинации  $L_R \propto a/(4\pi C_v)^{1/2} \gg R$ ,  $a$  – среднее межатомное расстояние)<sup>3</sup> из (4.1)-(4.5) с учетом каскадного распыления получаем уравнения, которым удовлетворяют квазистационарные профили концентраций примеси и ТД в окрестности некогерентного выделения:

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_n = K, \quad n = i, v, \quad (4.13)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{j}_A = g(r). \quad (4.14)$$

Эта задача с граничными условиями (3.4), (3.5) и (3.15) решается аналогично задаче раздела 3.1.2. В предельном случае  $d_{Av} = d_{Bv}$ ,  $\lambda C_A \ll 1$ ,  $C_A \ll 1$ , можно получить аналитическое выражение для скорости роста выделения, которое имеет ясную физическую интерпретацию

$$4\pi R^2 \frac{dR}{dt} = \frac{J_v}{C_A^P - C_A^R} \frac{\lambda - 1}{1 - \varphi} (\bar{C}_A - C_{A inc}^{irr}(R)), \quad (4.15)$$

$$J_v = 4\pi R d_{Av} (\bar{C}_v - C_v^e), \quad (4.16)$$

$$C_{A inc}^{irr}(R) = \varphi \left\{ C_A^R + \frac{R^2}{d_{Av} (\bar{C}_v - C_v^e) (\lambda - 1)} \int_0^{1/R} \left[ 1 + \left( \frac{\bar{C}_v}{C_v^e} - 1 \right) (\lambda + 1) x \right]^{\frac{1-\lambda}{1+\lambda}} - 1 \right\} \frac{g(x) dx}{(1-x)^4}. \quad (4.17)$$

Здесь множитель  $\varphi$  описывает влияние сегрегационных процессов на рост выделения и имеет такой же вид, как и при бескаскадном облучении (3.20).

Из соотношения (4.15) следует, что  $C_{A inc}^{irr}(R)$  является радиационно-модифицированной некогерентной растворимостью, выражение для которой в случае крупных выделений (в нулевом приближении по параметру  $1/R$ ) имеет следующий вид:

<sup>3</sup> Рекомбинация будет учтена при нахождении средних концентраций ТД, от которых зависит скорость роста и условие устойчивости выделения.

$$C_{A\ inc}^{irr} = \lim_{R \rightarrow \infty} (C_{A\ inc}^{irr}(R)) = \varphi \left[ C_A^e + \frac{D_{mix}}{d_{Av} C_v^e} (C_A^P - C_A^e) \right]. \quad (4.18)$$

При  $\lambda > 1$  примесь переносится к стоку (поверхности выделения). В этом случае  $\varphi < 1$ , что согласно (4.18) соответствует уменьшению растворимости. Каскадное перемешивание описывается слагаемым  $D_{mix} (C_A^P - C_A^e) / d_{Av} C_v^e$  и, напротив, приводит к увеличению растворимости. При  $\lambda < 1$  и сегрегация, и каскадное перемешивание увеличивают растворимость примеси, так что даже в пересыщенном растворе ( $\bar{C}_A > C_A^e$ ) некогерентное выделение может оказаться неустойчивым, если  $\bar{C}_A < C_{A\ inc}^{irr}$ .

Как показано в работах [64, 144-146], в общем случае радиационно-модифицированная некогерентная растворимость удовлетворяет соотношению

$$\frac{C_{A\ inc}^{irr}}{1 - C_{A\ inc}^{irr}} = \frac{\tilde{C}_A}{1 - \tilde{C}_A} \left[ 1 + \left( \frac{\bar{C}_v}{\tilde{C}_v^e} - 1 \right) \frac{1 + \kappa}{1 + (\kappa - 1) C_{A\ inc}^{irr}} \right]^{\frac{1-\kappa}{1+\kappa}}, \quad (4.19)$$

где

$$\tilde{C}_A = C_A^e + \frac{D_{mix}}{D_{A\ inc}^{irr}} (C_A^P - C_A^e), \quad (4.20)$$

$$\tilde{C}_v^e = C_v^e + \frac{d_{Av} - d_{Bv}}{d_{Av} d_{Bv}} D_{mix} (C_A^P - C_A^e), \quad (4.21)$$

$$D_{A\ inc}^{irr} = \frac{d_{Av} d_{Bv} C_v^e}{d_{Av} C_A^e + d_{Bv} C_B^e}. \quad (4.22)$$

Отметим, что  $\tilde{C}_A \rightarrow C_A^e$  и  $\tilde{C}_v^e \rightarrow C_v^e$  при  $D_{mix} \rightarrow 0$ , то есть соотношение (4.19) переходит в соотношение (3.21), полученное для бескасадного облучения. Таким образом, каскадное разупорядочение выделений формально эквивалентно перенормировке граничных концентраций (см. (4.20), (4.21)). В предельном случае  $\mu = 1$ ,  $C_A \ll 1$ , из (4.19) получаем соотношение (4.18).

Результаты этого раздела справедливы также для когерентных выделений, расположенных на стоках ТД. Отличие состоит в том, что вакансии и МА рекомбинируют не на границе выделения с матрицей, а на стоке ТД, который содержится в этом выделении.

## 4.2. Структурно-фазовые диаграммы при каскадообразующем облучении

Уравнения (4.12), (4.19) для  $C_{A\text{coh},inc}^{irr}$  являются незамкнутыми, так как содержат среднюю концентрацию вакансий  $\bar{C}_v$ , которая, в свою очередь, зависит от радиационно-модифицированной растворимости. Средние концентрации ТД можно выразить через скорость создания смещений, параметры микроструктуры сплава и среднюю концентрацию примеси с помощью уравнений баланса, процедура получения которых описана в разделе 2.2, а сами уравнения построены в работах [64, 144]. Если  $\bar{C}_A \leq C_{A\text{inc}}^{irr}$ , то некогерентные выделения и выделения на стоках не образуются и не вносят вклад в полную мощность стоков, поэтому концентрация вакансий определена соотношением (2.48).

Представляет интерес получить зависимость радиационно-модифицированных растворимостей  $C_{A\text{coh}}^{irr}$  и  $C_{A\text{inc}}^{irr}$  от температуры и мощности облучения, построить структурно-фазовые диаграммы и сравнить их с диаграммами для бескасадного облучения (раздел 3.2). Для этого уравнения (4.12), (4.19) следует решить совместно с уравнением (2.48), заменяя в последних  $\bar{C}_A$  на  $C_{A\text{coh}}^{irr}$  и  $C_{A\text{inc}}^{irr}$ , соответственно.

Расчеты были проведены для двух типов сплавов – Ni-Si и Ni-Al, поведение которых под облучением качественно отличается. Значения диффузионных коэффициентов и энергетических параметров сплавов взяты такими же, как и для бескасадного облучения (см. табл. 3.1). Параметр  $d_{mix}$  – эффективность каскадного перемешивания – выбран равным  $2,5 \text{ nm}^2$ .

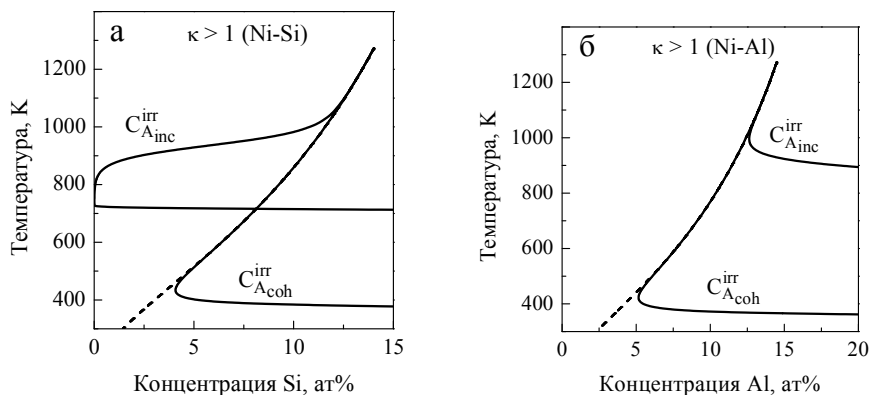


Рис. 4.2. Радиационно-модифицированные фазовые диаграммы при каскадообразующем облучении: а) сплав Ni-Si,  $H_\lambda = 0,14 \text{ эВ}$  и  $H_\mu = 0$ ; б) сплав Ni-Al.  $H_\lambda = 0$  и  $H_\mu = 0,1 \text{ эВ}$ . Скорость создания смещений  $K=10^6 \text{ сна/с}$ , остальные параметры указаны в табл. 3.1.

Пунктирной кривой показан предел растворимости без облучения

На рис. 4.2 представлены результаты расчетов радиационно-модифицированных фазовых диаграмм. В области высоких температур положение кривых не зависит от типа облучения и определяется сегрегационными процессами. С понижением температуры растворимость увеличивается за счет каскадного разупорядочения. Причем разупорядочение сильнее влияет на некогерентную растворимость, чем на когерентную. Это объясняется тем, что в случае некогерентной растворимости вклад каскадного разупорядочения пропорционален  $1/C_v^e$ , а в случае когерентной растворимости –  $1/\bar{C}_v$  (см. (4.18) и (4.12)).

### 4.3. Сравнение с экспериментальными данными

Для случая бескаскадного облучения на примере бинарного сплава Al-Zn (раздел 3) было показано, что подбирая энергетические параметры ТД можно добиться удовлетворительного согласия расчетных диаграмм с экспериментальными данными. Это же удается сделать и для каскадообразующего облучения. На рис. 4.3 для сплава Ni-6ат%Si построена область устойчивости некогерентных выделений на стоках ТД. Горизонтальными отрезками показаны экспериментальные температурные интервалы, в которых наблюдалось выпадение неравновесных выделений  $\gamma'$ -фазы на дислокациях и свободных поверхностях при ионном облучении.

Для сравнения нанесены экспериментальные данные по электронному облучению [151]. Сначала, чтобы подобрать положение высокотемпературной границы, изменялась энергия образования вакансий  $H_v^f$ . Затем вариацией параметра  $d_{mix}$  выбиралось положение низкотемпературной границы. Заметим, что значение  $H_v^f = 1,4$  эВ, использованное для построения рис. 4.3, близко к значению  $H_v^f = 1,5$  эВ, которое хорошо согласуется с температурной зависимостью скорости роста слоя  $\gamma'$ -фазы на поверхности образца сплава Ni-Si [152, 153]. Значение параметра  $d_{mix} = 2,5$  нм<sup>2</sup> соответствует экспериментально измеряемым значениям коэффициента диффузии компонентов сплава при низкотемпературном облучении (см. раздел 6).

Еще одним доказательством существования эффекта каскадного распыления является экспериментальное обнаружение низкотемпературной границы устойчивости периодической двухфазной структуры в сплаве Cu-Ni-Fe при каскадообразующем облучении [156, 157]. В сплавах Fe-Ni-Cr с различным содержанием кремния при нейтронном облучении в реакторе ЕВР-II было обнаружено образование выделений  $\gamma'$ -фазы при температурах выше некоторой пороговой температуры [158].

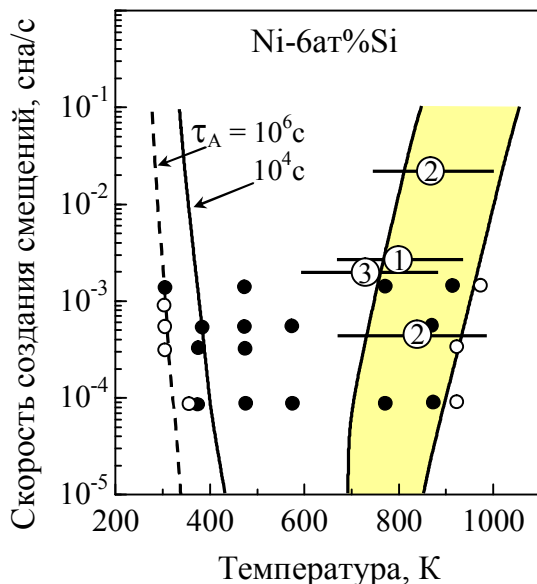


Рис. 4.3. Условия облучения для радиационно-индуцированного распада твердого раствора Ni-6ат%Si. Границы области существования некогерентных выделений, показанной затенением, рассчитаны при  $k^2 = 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ,

$H_v^f = 1,4 \text{ эВ}$ , остальные параметры взяты из таблицы 3.1.

- 1, 2 — температурный интервал радиационно-индуцированного распада сплавов Ni-1ат%Si и Ni-6ат%Si соответственно, облученных ионами Ni<sup>+</sup> с энергией 3,5МэВ [154]; 3 — температурный интервал радиационно-индуцированного распада сплава Ni-6ат%Si, облученного ионами Ni<sup>+</sup> с энергией 500 кэВ [155]. Точки относятся к электронному облучению (1 МэВ, 0,1-1сна/с [151]),  
 ● —  $\gamma'$ -фаза образуется, ○ — выделения отсутствуют

В сплаве Ni-Si низкотемпературный порог образования выделений  $\gamma'$ -фазы на стоках ТД наблюдается при электронном (бескаскадном) облучении, причем низкотемпературная граница на диаграмме (Т, К) лежит примерно на 300 градусов левее границы для ионного облучения [155] (см. также [4]). Естественно предположить, что ее возникновение связано с тем, что за набираемую дозу облучения не было достигнуто стационарное состояние, при котором на стоках выпадает  $\gamma'$ -фаза. Чтобы убедиться в этом, необходимо найти время выхода на стационарную стадию. Очевидно, что время образования частиц новой фазы на стоках (в сплаве с  $\kappa > 1$ ) так же, как и времена формирования сегрегационных профилей вблизи стоков, порядка или больше времени релаксации малых возмущений состава сплава. Поэтому для оценки времени выхода на стационарную стадию воспользуемся выражением (2.61), в которое вместо локальных концентраций ТД подставим средние значения (средние

концентрации ТД определены соотношениями (2.44) и (2.48)). Причем из всех времен необходимо выбрать максимальное ( $\tau_A(L_{max})$ ), которое соответствует максимально допустимой длине волны возмущения  $L_{max}$  ( $L_{max} < k^{-1}$ , здесь  $k^2$  – полная мощность стоков). Для наблюдения распада твердого раствора, вызываемого радиационно-индуцированной сегрегацией, время облучения  $\tau_{exp}$  должно быть больше времени релаксации,  $\tau_{exp} > \tau_A(L_{max})$ . Это означает, что при бескаскадном облучении на диаграмме (Т, К) низкотемпературную границу устойчивости сплава заданного состава можно аппроксимировать изолинией  $\tau_A(T, K)|_{L=L_{max}} = \tau_{exp}$ . На рис. 4.3 построены изолинии  $\tau_A = 10^4, 10^6$  с при  $L_{max} = 0,1/k$ . Положение изолиний удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными и слабо зависит от времени облучения вследствие экспоненциальной зависимости времени релаксации от температуры.

Согласно представлениям, развитым в этом разделе, а также в разделе 3, условия устойчивости когерентных и некогерентных выделений в облучаемом бинарном сплаве существенно различаются. Этот вывод справедлив также в случае многокомпонентных сплавов. Для установления закономерностей поведения выделений вторых фаз в зависимости от типа межфазной границы в работах [159, 160] был проведен анализ результатов исследования эволюции фазового состава нержавеющей стали типа X16H15M3B, X18H10T, легированных Sc; X13H13T3 и X10M6, облученных в ускорителе ЭСУВИ и в реакторе БОР-60. Оказывается, что выделения, имеющие некогерентные границы (например, фаза Лавеса, МХ,  $\eta$ -фаза ( $Ni_3Ti$ ), фосфиды в аустените и фаза Лавеса в феррите), либо растворяются в процессе облучения, либо превращаются в выделения другого состава. Фазы, имеющие когерентную границу или границу с малой степенью некогерентности, медленно эволюционируют и являются наиболее устойчивыми под облучением (например, карбиды  $M_{23}C_6$ ,  $M_6X$ ,  $\gamma'$  и G-фаза в аустените,  $\alpha'$  - и  $\kappa$ -фаза в феррите). Интересно проследить за эволюцией выделений, которые на начальном этапе имеют малую степень некогерентности (например,  $\eta$ -фаза в стали X13H13G3T3 до доз 130 сна, МХ в стали X16H15M3T). До тех пор, пока когерентность сохраняется, состав фаз не изменяется. При потере когерентности поток сегрегирующих элементов резко увеличивается, происходит их инфильтрация в выделение, что приводит к трансформации исходного выделения в выделение другого состава с решеткой, изоморфной матричной [159].

#### 4.4. В ы в о д ы

1. Рассмотрен рост выделений новой фазы в бинарном сплаве замещения с учетом двух факторов: радиационно-индуцированной сегрегации и каскадного разупорядочения приповерхностного слоя выделения. Показано, что условия устойчивости выделений зависит от типа

- межфазной границы. Эти условия формулируются в терминах радиационно-модифицированных растворимостей примеси по отношению к когерентным и некогерентным выделениям.
2. Результаты исследования фазовой стабильности представлены на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме. Каскадное разупорядочение увеличивает предел растворимости независимо от типа межфазной границы между матрицей и выделением. С понижением температуры взаимная диффузия и сегрегация, устраняющие беспорядок, вносимый атермическим каскадным перемешиванием, замедляются. По этой причине на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме существует низкотемпературная граница устойчивости крупных выделений. Граница устойчивости когерентных выделений расположена в области более низких температур по сравнению с границей устойчивости некогерентных выделений. Положение обеих границ зависит от скорости создания смещений.
  3. На диаграмме (Т, К) сплава типа Ni-Si ( $\kappa > 1$ ) наряду с высокотемпературной границей существует низкотемпературная граница устойчивости твердого раствора, положение которой зависит от вида облучения. При электронном облучении она возникает из-за того, что дозы облучения недостаточно, чтобы сегрегация привела к образованию выделений на стоках ТД. При ионном облучении причина возникновения низкотемпературной границы – каскадное растворение выделений.

Результаты данного раздела опубликованы в работах [64, 144-146, 159-162].

## 5. ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ КАСКАДООБРАЗУЮЩЕМ ОБЛУЧЕНИИ

В этом разделе рассмотрены фазовые превращения при низкотемпературном каскадообразующем облучении. В разделе 5.1 изучена эволюция функции распределения пластинчатых выделений при низкотемпературном ионном облучении, сформулирована аналитическая модель каскадного растворения выделений, а также проведено компьютерное моделирование по методу Монте-Карло. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

В разделе 5.2 сформулирована модель низкотемпературного переноса атомов благодаря атомному перемешиванию в каскадах смещений. Предположения о свойствах отдельных каскадов основаны на результатах молекулярно-динамических расчетов. Для моделирования атомного перемешивания используется решеточный метод Монте-Карло. Показано,

что перенос атомов на большие расстояния происходит из-за повторяющихся перекрытий каскадов. Найдена зависимость эффективности перемешивания от размера каскада и размера области термического пика. Рассмотрено несколько примеров растворения двухфазных структур.

## 5.1. Эволюция функции распределения пластинчатых выделений

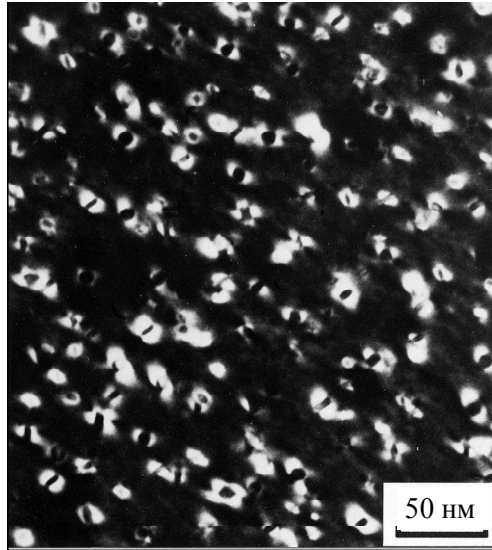
Сплавы на основе меди с высоким пределом текучести и высокой теплопроводностью имеют ряд потенциальных применений в термоядерных установках. Высокая прочность этих сплавов достигается путем создания большой плотности мелких выделений. В сплаве Cu-Cr-Zr-Si такими выделениями являются когерентные выделения Cr в форме мелких дисков (пластин) с ГЦК решеткой [65]. Чтобы исследовать возможную техническую применимость, например как охлаждающих труб для пластин дивертора, в работе [66] изучалась стабильность этого сплава под облучением. Оказалось, что даже при комнатной температуре после малой дозы ионного облучения (~0,1 сна) деформационный контраст выделений хрома в просвечивающем электронном микроскопе полностью исчезал. При низких температурах облучения, когда термоактивированные диффузионные процессы заморожены, исчезновение деформационного контраста должно быть связано с каскадным перемешиванием [163], то есть прямым разрушением выделений каскадами смещений. Попытки объяснить экспериментальные наблюдения в терминах средней эффективности ионного перемешивания [66] оказались неуспешными, поскольку оцененная скорость растворения оказалась на порядок ниже, чем наблюдаемая. В данном разделе проведены модельные расчеты каскадного растворения выделений, используя минимум предположений о механизме растворения и структуре каскада. Одно из ключевых предположений: часть выделения, в которую попал каскад, растворяется и больше не вносит вклад в экспериментально определяемый размер выделения. Очевидно, что процесс растворения особенно эффективен при пересечении сферической каскадной области и пластинчатого выделения.

В следующем разделе описаны экспериментальные результаты. Затем сформулирована модель каскадно-индуцированного уменьшения размеров пластинчатых выделений. Дано сравнение аналитических результатов с результатами моделирования по методу Монте-Карло и с экспериментальными данными.

### 5.1.1. Экспериментальные результаты

В работе [66] исследовался сплав Cu-1,15ат%Cr-0,03ат%Zr-0,14ат%Si. После старения отожженных образцов при 753 К в течение 300 часов в них образовались обогащенные хромом пластинчатые коге-

рентные выделения овальной формы с ГЦК структурой [65]. При двухлучевой темнопольной электронной микроскопии эти выделения дают сильный деформационный контраст в форме двух лепестков, симметричных относительно линии без контраста (рис. 5.1). Длина этой линии эквивалентна длине большой оси пластинчатого выделения хрома [65]. Средний размер большой оси пластинчатых выделений  $12 \pm 4$  нм, и их плотность приблизительно  $10^{22} \text{ м}^{-3}$  [66]. Толщина выделений составляет несколько атомных слоев [65].



*Рис. 5.1. Темнопольный электронно-микроскопический снимок сплава Cu-Cr-Zr-Si, состаренного при 753 K в течение 300 часов, который показывает когерентные ГЦК выделения Cr с сильным деформационным контрастом в форме пары лепестков, симметричных относительно линии без контраста*

Кроме этих выделений, также наблюдались некогерентные выделения  $\text{Cr}_3\text{Si}$  с меньшей плотностью. Выделения  $\text{Cr}_3\text{Si}$  не будут рассматриваться далее. Образцы облучались при комнатной температуре ионами  $\text{Cu}^+$  с энергией 300 кэВ со скоростью создания смещений  $2,3 \times 10^{-5}$  сна/с до дозы 0,1 сна. Распределение выделений хрома по размерам после облучения при комнатной температуре приведено на рис. 5.2. После облучения при 80 K распределение имеет аналогичный вид [66]. Видно, что при увеличении дозы облучения средний размер выделений уменьшается, а распределение становится уже. В то же самое время количество выделений остается приблизительно постоянным. При дозах выше 0,1 сна контраст от выделений полностью исчезал.

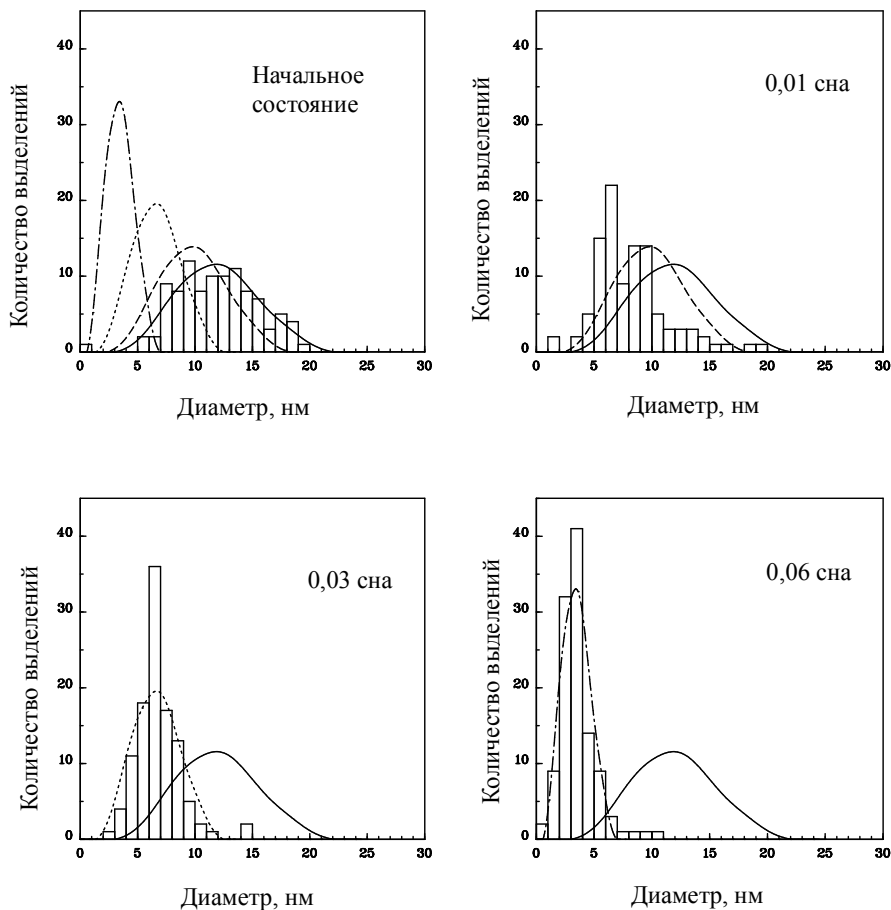


Рис. 5.2. Зависимость функции распределения дискообразных (пластинчатых) выделений хрома от дозы после облучения при комнатной температуре. Гистограммы показывают экспериментальные распределения. Сплошная линия соответствует начальной функции распределения, использованной в расчетах. Другие линии показывают результат моделирования по методу Монте-Карло (500 прогонов; каскадная эффективность  $\eta = 35$ , см. ниже раздел 5.1.3)

### 5.1.2. Аналитическая модель растворения выделений

Рассмотрим ансамбль пластинчатых выделений с заданной начальной функцией распределения диаметров. Облучение тяжелыми ионами производит каскады смещения, которые происходят случайно в пространстве и во времени. Каскады, развивающиеся около выделения, приводят к растворению выделений из-за значительных перестановок атомов в каскадной области. Толщина пластинчатого выделения считается малой по сравнению с его диаметром  $d$  и радиусом каскада  $r$ . Поэтому атомное перемешивание в каскадной области, которая пересекает выде-

ление, приводит к частичному разрушению выделения. Здесь радиус каскада – это некоторая эффективная величина, поскольку рассматривается только центральная область каскада, где происходит большая часть замещающих столкновений. Это означает, что эффективное количество замещений в пределах такого каскадного объема равно  $n_r = 4\pi r^3/3\omega$ , где  $\omega$  – атомный объем ( $\omega_{Cu} = 1,2 \times 10^{-2}$  нм<sup>3</sup>). Считается, что все каскады имеют одинаковый эффективный радиус. Восстановление выделения происходит посредством термически активированной диффузии свободно-мигрирующих ТД, которые остаются после спонтанной и коррелированной рекомбинации в каскадной области. Однако в этом разделе рассматривается только низкотемпературный случай, когда отсутствует диффузия вакансий. Очевидно, что диффузия одних только МА не может приводить к восстановлению выделения после попадания в него каскада.

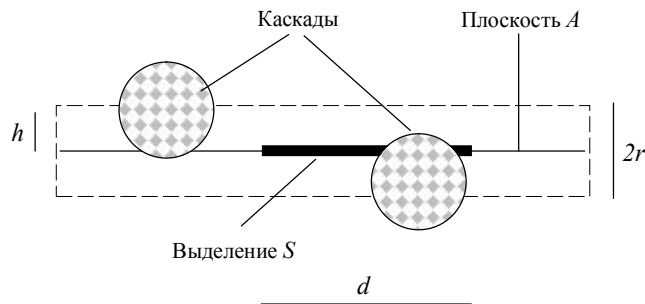


Рис. 5.3. Схематическое изображение разрушения выделения каскадами

Так как выделения не взаимодействуют друг с другом – ни прямо, ни посредством диффузионных полей, – эволюция каждого выделения может быть рассмотрена отдельно. Рассмотрим площадку  $A$ , которая содержит пластинчатое выделение площадью  $S$  ( $A > S$  и  $A > \pi r^2$ , рис. 5.3). Каждый каскад, появляющийся в объеме  $2rA$ , в среднем разрушает площадь пластины

$$\Delta S = S_i \frac{S}{A}, \quad (5.1)$$

где  $S_i$  – средняя площадь пересечения сферы радиуса  $r$  с плоскостью

$$S_i = \frac{1}{2r} \int_{-r}^r \pi(r^2 - h^2) dh = \frac{2}{3} \pi r^2. \quad (5.2)$$

Средний дозовый интервал  $\Delta\phi$  между последовательными пересечениями каскадов с плоскостью

$$\Delta\phi = K\Delta t = \frac{K}{2rAG}, \quad (5.3)$$

где скорость генерации каскадов в единицу объема  $G$  связана со скоростью создания смещений  $K$  и количеством смещений в каскаде  $n_d$

$$G = \frac{K}{\omega n_d}. \quad (5.4)$$

Следовательно, скорость уменьшения площади выделения имеет вид

$$S'(\phi) = -\frac{\Delta S}{\Delta\phi} = -\frac{4\pi r^3}{3\omega n_d} S. \quad (5.5)$$

Из этого уравнения получаем дозную зависимость площади пластины.

$$S(\phi) = S_0 \exp(-\eta\phi), \quad \eta = \frac{4\pi r^3}{3\omega n_d}, \quad (5.6)$$

где  $S_0 = \pi d_0^2/4$  – начальная площадь выделения.

Заметим, что уравнение (5.6) содержит только один физический параметр  $\eta$ , который будем называть каскадной эффективностью. По порядку величины этот параметр равен отношению количества замещающих столкновений к количеству смещенных атомов в каскаде.

При попадании каскадов выделение изменяет свою начальную дискообразную форму. Кроме того, возможна фрагментация выделения. Здесь эти процессы не учитываются, и выделениям приписывается эффективный диаметр

$$d(\phi) = (4S(\phi)/\pi)^{1/2} = d_0 \exp(-\eta\phi/2). \quad (5.7)$$

Рассмотрим эволюцию функции распределения выделений по размерам. Каждое выделение эволюционирует независимо и «движется» вдоль собственной кривой растворения  $d(\phi)$ . Кривые растворения монотонно убывают и не пересекаются. Это позволяет определить трубку тока на плоскости (доза, диаметр), которая ограничена двумя кривыми растворения, начинающимися в точках  $d_0$  и  $d_0 - \Delta_0$ , где  $\Delta_0$  – начальная ширина трубки,  $\Delta_0 \ll d_0$  (рис. 5.4).

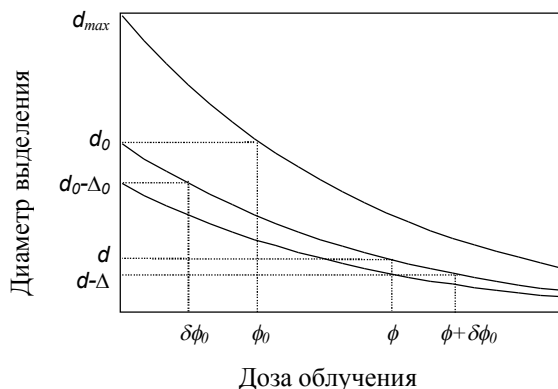


Рис. 5.4. Кривые растворения.  $\delta\phi_0$  – расстояние между кривыми,  $\Delta$  – ширина трубки тока

Число частиц (выделений), текущих по каждой трубке, сохраняется, поэтому функция распределения по размерам,  $F$ , при дозе  $\phi$  в точке  $d(\phi)$  связана с начальной функцией распределения  $F(d_0, 0)$  соотношением

$$F(d(\phi), \phi)\Delta(\phi) = F(d_0, 0)\Delta_0 = \Delta N_0, \quad (5.8)$$

где  $\Delta(\phi)$  – ширина трубки тока при дозе  $\phi$  и  $\Delta N_0$  – число частиц в трубке тока (рис. 5.4). Расстояние между двумя кривыми растворения вдоль горизонтальной оси не зависит от дозы, так как все выделения эволюционируют независимо друг от друга, поэтому каждая кривая растворения может быть получена из произвольно выбранной  $f(\phi)$  сдвигом вдоль оси дозы. Следовательно, отношение  $\Delta_0/\Delta(\phi)$  заменяется отношением производных

$$\frac{\Delta_0}{\Delta(\phi)} = \frac{d'(0)}{d'(\phi)}. \quad (5.9)$$

Из уравнений (5.8) и (5.9) следует, что эволюция функции распределения по размерам полностью определена дозной зависимостью диаметра выделения

$$F(d(\phi), \phi) = F(d_0, 0) \frac{d'(0)}{d'(\phi)}. \quad (5.10)$$

Заметим, что функция распределения выделений по их площади  $\Sigma(S)$  подчиняется такому же уравнению после замены  $F(d) \rightarrow \Sigma(S)$  и  $d \rightarrow S$ . Используя уравнение (5.7), находим функцию распределения в явной форме

$$F(d, \phi) = F(d \exp(\eta\phi/2), 0) \exp(\eta\phi/2). \quad (5.11)$$

Средний диаметр выделений экспоненциально уменьшается с дозой

$$\langle d \rangle = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} d F(d, \phi) dd = \langle d_0 \rangle \exp(-\eta\phi/2), \quad (5.12)$$

где  $N = \int_0^{\infty} F(d, \phi) dd$  – общее количество выделений.

Дисперсия  $\sigma(\phi) = \sqrt{\langle (d - \langle d \rangle)^2 \rangle}$  характеризует ширину функции распределения по размерам и описывается такой же дозой зависимостью

$$\sigma(\phi) = \sigma(0) \exp(-\eta\phi/2). \quad (5.13)$$

Чтобы проверить эту аналитическую модель, перейдем к компьютерному моделированию каскадно-индуцированного разрушения выделений.

### 5.1.3. Моделирование Монте-Карло

В принципе, можно провести моделирование эволюции функции распределения по размерам прямо, то есть разместить выделения в кубе заданного размера, разыграть каскады в этом кубе и проследить за уменьшением размеров каждого выделения. Вместо этого мы используем одночастичный подход, который требует значительно меньше компьютерного времени. Выделение наибольшего начального диаметра  $d_{0max}$  помещается в центре кубического объема  $l^3$ . Размер  $l$  этого куба в значительной степени произволен, потому что среднее количество каскадов, пересекающих выделение в течение заданного времени, не зависит от  $l$ . Однако размер куба должен быть больше, чем  $d_{0max} + 2r$ , и может быть выбран равным  $N_p^{-1/3}$ , где  $N_p$  – плотность выделений. Координаты центра каскада генерируются стандартным генератором случайных чисел с однородным распределением вероятности. Затем проверяется, попал ли каскад в выделение, то есть пересекает ли сфера радиуса  $r$  диск. В противном случае генерируется новый каскад. В случае пересечения часть выделения, лежащая в сфере, удаляется и выделению снова придается дискообразная форма. Это приводит к некоторому завышению каскадно-индуцированного уменьшения размеров, потому что каскады, пересекающие центральную часть диска, не могут привести к уменьшению электронно-микроскопического размера выделения. Такой прием используется, чтобы упростить процедуру вычислений. Как будет показано ниже, это не влияет существенно на результаты. Генерация каскадов повторяется до полного растворения выделения. Дозовый

интервал  $\delta\phi$  между последовательными каскадами – это пуассоновская случайная величина, распределенная с плотностью вероятности [121]

$$p(\delta\phi) = (K\tau)^{-1} \exp(-\delta\phi/K\tau), \quad (5.14)$$

где  $\tau$  – средний временной интервал между каскадными событиями

$$K\tau = K/GI^3 = \omega n_d / I^3. \quad (5.15)$$

В результате моделирования разрушения выделения получаем дозную зависимость его диаметра. Диаметр уменьшается ступенчато, причем высота и ширина ступенек являются случайными величинами. Чтобы получить гладкую кривую растворения  $f(\phi)$ , дозная зависимость усреднена по множеству реализаций компьютерного счета для частиц одинакового начального диаметра. Поскольку каждое выделение эволюционирует независимо, кривая растворения для меньших начальных диаметров находится сдвигом функции  $f(\phi)$  вдоль оси дозы

$$d(\phi) = f(\phi + \phi_0), \quad (5.16)$$

где доза  $\phi_0$  связана с начальным диаметром  $d_0 = f(\phi_0)$ .

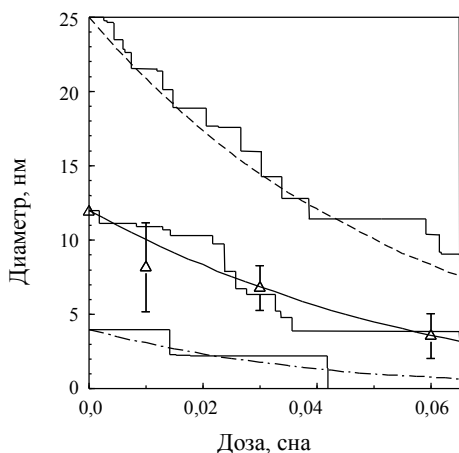
Очевидно, чтобы найти дозную зависимость функции распределения по размерам, можно использовать уравнение (5.10), так как рассуждения предыдущего раздела справедливы и здесь. Таким образом, задача решена, как только функция  $f(\phi)$  найдена. Кривая растворения  $d(\phi)$  очень нерегулярна, даже после усреднения по большому количеству вычислительных прогонов. Дифференцирование  $d(\phi)$  приводит к усилению этого шума и влияет на расчет функции распределения по размерам. Чтобы устранить эту трудность, используя метод регуляризации Тихонова [164], кривая растворения была аппроксимирована функцией, гладкой до второй производной.

По существу, как показало компьютерное моделирование, модель содержит только один подгоночный параметр  $\eta$ , в соответствии с уравнениями (5.7), (5.11)-(5.13). Хорошее согласие с экспериментальными данными было получено при  $\eta = 35$  (для сравнения, в меди  $\eta \leq 100$  [165, 166]). Для этого значения при  $n_d = 300$ , эффективный радиус каскада 3,1 нм.

Усредненные кривые растворения, показанные на рис. 5.5, слабо зависят от параметра  $n_d$ . Для значений  $n_d$  в диапазоне 50-5000 кривые растворимости  $d(\phi)$ , стартующие из одного и того же начального диаметра,

отличаются друг от друга не более чем на 2 нм. Это указывает на то, что растворение пластинчатых выделений слабо зависит от энергетического спектра ПВА, если каскадная эффективность  $\eta$  не зависит от размера субкаскадов. В то же время среднее количество каскадов, необходимых для растворения выделения, зависит от  $n_d$ , то есть от размера каскада.

На рис. 5.2 дано сравнение расчетной функции распределения выделений с экспериментальными данными. Начальная функция распределения была получена из начальной гистограммы путем сглаживания. Согласно модели, общее количество выделений сохраняется, в то время как средний диаметр уменьшается. Функция распределения сужается с дозой облучения, потому что в большое выделение каскад попадает с большей вероятностью. Рис. 5.6 показывает, что эволюция распределения выделений может быть с хорошей точностью описана уравнением (5.11).



*Рис. 5.5. Дозная зависимость размера выделений с начальными диаметрами 4, 12 и 25 нм. Гладкие кривые – результат усреднения по 500 прогонам Монте-Карло моделирования ( $\eta = 35$ ). Ступенчатые кривые – одна реализация Монте-Карло моделирования. Каждая ступенька соответствует соударению каскада с выделением. Треугольными маркерами показаны экспериментальные значения среднего диаметра при комнатной температуре*

Дозные зависимости среднего диаметра и дисперсии показаны на рис. 5.7 и 5.8. Видно, что аналитические зависимости (5.12) и (5.13) очень близки к полученным с помощью моделирования по методу Монте-Карло. На рис. 5.7 и 5.8 также показаны результаты моделирования, полученные при предположении, что каскады, попадающие в центральную часть пластинчатого выделения, не влияют на видимый размер выделения. Как показывает рис. 5.7, это предположение приводит к уменьшению скорости растворения при малых дозах. По этой причине ширина функции распределения (то есть дисперсия) уменьшается более медленно по сравнению со случаем, когда все каскады вносят вклад в уменьшение размеров

выделений (рис. 5.8). Однако хорошее соответствие с экспериментальными данными может быть получено при  $\eta = 45$  вместо  $\eta = 35$ . Небольшое различие каскадной эффективности в обоих случаях объясняется тем, что каскады растворяют выделение главным образом на периферии, поскольку размер выделений по порядку величины равен размеру каскада.

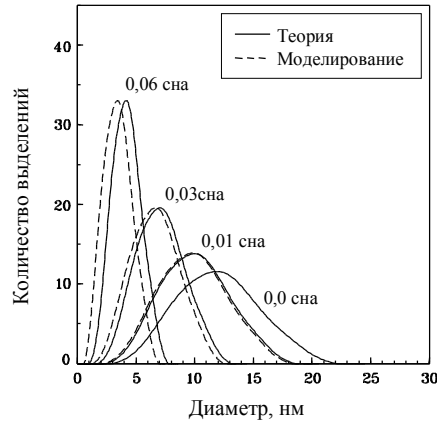


Рис. 5.6. Эволюция функции распределения по размерам при низкотемпературном облучении. Сплошные линии соответствуют уравнению (5.11). Пунктирные линии – результат моделирования Монте-Карло. Каскадная эффективность  $\eta = 35$

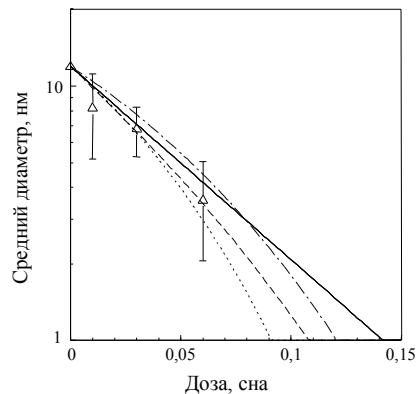


Рис. 5.7. Зависимость среднего диаметра пластинчатых выделений от дозы. Сравнение результатов моделирования с аналитическим приближением (уравнение (5.12), сплошная линия),  $\eta = 35$ . Штриховая линия – все соударения каскадов с выделением приводят к уменьшению диаметра,  $\eta = 35$ .

Штрихпунктирная линия – уменьшение размеров происходит только на периферии выделения,  $\eta = 35$ . Пунктирная линия – уменьшение размеров происходит только на периферии выделения,  $\eta = 45$ . Треугольные маркеры – экспериментальные точки после облучения при комнатной температуре

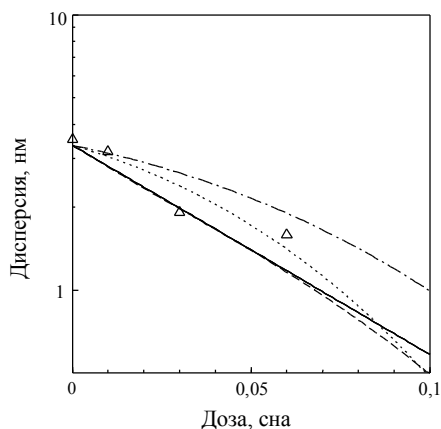


Рис. 5.8. Сравнение дисперсии функции распределения (уравнение (5.13),  $\eta = 35$ , сплошная линия) с дисперсией, полученной посредством моделирования Монте-Карло. Штриховая линия – все соударения каскадов с выделением приводят к уменьшению диаметра,  $\eta = 35$ . Штрихпунктирная линия – уменьшение размеров происходит только на периферии выделения,  $\eta = 35$ . Пунктирная линия – уменьшение размеров происходит только на периферии выделения,  $\eta = 45$ . Треугольные маркеры – экспериментальные точки при комнатной температуре

## 5.2. Моделирование низкотемпературного радиационно-индуцированного атомного перемешивания в двухфазных системах

При облучении высокоэнергетичными частицами во многокомпонентных кристаллических материалах часто наблюдается значительное атомное перемешивание, которое приводит к изменению фазовой стабильности [163, 167-169]. Два механизма контролируют процессы переноса атомов: термически активизированная диффузия радиационно-индуцированных ТД и прямое смещение атомов налетающей частицей или в каскаде, производимом этой частицей (см., например, [67, 68] и цитированные там работы). Последний процесс доминирует при низких температурах, когда термически активированные перескоки атомов заморожены. Так как низкотемпературный перенос посредством атомных столкновений – вероятностный процесс, подобный диффузии, то он приводит к сглаживанию градиентов концентрации компонентов сплава. Этот эффект должен наблюдаться при любом виде облучения, но он особенно выражен при каскадообразующем облучении.

Два механизма дают вклад в атомное перемешивание под облучением – баллистическое перемешивание и перемешивание в области термического пика [68, 69]. Баллистическое перемешивание происходит за счет первично-выбитых атомов (primary recoil mixing) и каскадного перемешивания. В первом случае перераспределение атомов происходит благодаря повторяющимся столкновениям между налетающим ионом и атомами мишени. ПВА может продолжить процесс выбивания атомов, производя каскад столкновений, замещений и смещений в пространственно ограниченной области. Атомы в области каскада столкновений подвергаются многократным некоррелированным смещениям и перестановкам. Такое изотропное перемешивание называют каскадным перемешиванием. Самые низкие значения эффективности перемешивания  $D_{mix}/K = 0,1 - 0,2 \text{ nm}^2/\text{сна}$  (где  $D_{mix}$  – коэффициент диффузии меченых атомов,  $K$  – скорость создания смещений), измеряемые в тугоплавких металлах, связаны с баллистическим перемешиванием [67].

МД расчеты показывают, что баллистическая фаза эволюции каскада длится несколько десятых пикосекунды [70, 71]. Однако коллективное движение атомов в каскаде продолжается значительно дольше, чем баллистическая фаза, – в течение нескольких десятков пикосекунд. На этой стадии эволюции каскад может проявлять жидкоподобные свойства. Температура в каскадной области, найденная путем оценки плотности энергии, может быть намного выше точки плавления материала. По этой причине эта фаза эволюции каскада называется фазой термического пика. Считается, что атомное перемешивание благодаря жидкоподобной диффузии в течение фазы термического пика отвечает за эффективность перемешивания, превышающую баллистическое перемешивание. МД расчеты атомного перемешивания свидетельствуют в пользу концепции термического пика [72].

Перенос атомов на большие расстояния при низкотемпературном облучении возникает из-за атомного перемешивания в каскадах и многократных наложений каскадов. Развитие соответствующей модели переноса наталкивается на серьезные трудности из-за неоднородного и многочастичного характера каскадов. В настоящее время только МД моделирование на ЭВМ может дать детальную картину динамики каскада смещений. Однако, в силу пространственно-временных ограничений, связанных с производительностью ЭВМ, МД моделирование не способно, даже в обозримом будущем [70], описать эволюцию каскадов и перекрытие каскадов в течение времен достаточно длительных для типичного диффузионного процесса. Несмотря на это, МД моделирование одиночных каскадных событий представляет собой хорошую отправную точку для дальнейших расчетов эволюции микроструктуры в сплавах под облучением. Результаты МД исследований могут использоваться как входные параметры для других методов моделирования на атомном уровне или в теории скоростей реакций.

В этом разделе используется решеточный метод Монте-Карло (РМК) для описания сглаживания неоднородностей концентрации и разрушения двухфазных структур благодаря атомному перемешиванию в каскадах смещений. РМК метод особенно эффективен при моделировании диффузии на большие расстояния. В методе РМК считается, что все атомы занимают узлы решетки, то есть рассматриваются только события, которые приводят к перестановкам атомов по узлам решетки [73]. Другие процессы, которые не приводят к изменению структуры (типа атомных колебаний), игнорируются. Это значительно уменьшает число процессов, которые должны быть рассмотрены.

В разделе 5.2.1 сформулирована решеточная модель атомного перемешивания в каскаде. Свойства каскадов выбираются таким образом, чтобы они соответствовали МД расчетам. Исследуется чувствительность построенной модели по отношению к каскадным параметрам. Представлены некоторые примеры растворения двухфазных структур. Также рассмотрено применение модели к описанию низкотемпературной эволюции выделений в облучаемых сплавах. Показано, что результаты модели находятся в соответствии с предположениями работы [74], в которой рассмотрено растворение пластинчатых выделений хрома в медном сплаве при низкотемпературном ионном облучении (см. раздел 5.1).

### 5.2.1. Описание модели

Для моделирования радиационно-индуцированного перемешивания в бинарном сплаве замещения рассмотрим объем  $V$ , в котором матричные и меченные атомы размещены по узлам простой кубической решетки,  $\mathbf{r} = l\mathbf{e}_x + m\mathbf{e}_y + n\mathbf{e}_z$ , где  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  – единичные векторы вдоль осей декартовой системы координаты,  $l, m, n$  – целые числа. В этом объеме с постоянной скоростью разыгрываются каскады столкновений. Предполагается, что все каскады имеют сферическую форму и одинаковый диаметр  $d_c$ . Координаты центра каскада генерируются генератором случайных чисел с однородным распределением вероятностей. Доза облучения рассчитывается как сумма дозовых интервалов,  $\delta\phi$ , между последовательными каскадами. Каждый интервал является пуассоновской случайной величиной, распределенной с плотностью вероятности (5.14)  $p(\delta\phi) = (K\tau)^{-1} \exp(-\delta\phi/K\tau)$ . Здесь  $\tau$  – средний временной интервал между каскадными событиями

$$K\tau = K/GV = \omega n_d/V. \quad (5.17)$$

Скорость создания смещений  $K$  связана со скоростью генерации каскадов в единице объема  $G$  и средним числом смещений в каскаде  $n_d$  соотношением (5.4).

Так как временной интервал между перекрытием двух каскадов намного больше, чем время существования каскада, то можно считать, что атомные перестановки в пределах объема каскада происходят мгновенно. В дальнейшем мы пренебрегаем любыми термически активируемыми прыжками радиационно-индуцированных ТД. В соответствии с результатами МД моделирования каскадов в меди и никеле [72] предполагается, что перемешивание происходит неоднородно внутри каскадной области (рис. 5.9). Например, моделирование каскадов с энергией 5 кэВ [72] показало, что в меди среднее квадратичное смещение атомов составляет приблизительно  $6,3 \text{ \AA}$  в центре каскада, в то время как на расстоянии приблизительно  $25 \text{ \AA}$  падает до нуля. В рассматриваемой модели будем предполагать, что атомное перемешивание на периферии каскада происходит благодаря баллистическому перемешиванию. Чтобы не было больших скачков на периферии каскада, каскадный объем разделяется на ячейки. В каждой ячейке атомы перемешиваются отдельно путем случайной генерации новых положений меченых атомов. В сферическом ядре каскада диаметром  $d_{ThS}$  атомы перемешиваются равномерно, то есть они могут перемещаться на расстояния, сопоставимые с размером ядра. Вне ядра используется разбиение на кубические ячейки с длиной стороны  $l_{SV}$ , которая меньше диаметра ядра,  $l_{SV} < d_{ThS}$ . С физической точки зрения, ядро модельного каскада соответствует области термического пика, в которой вследствие жидкоподобной диффузии атомы могут мигрировать на большие расстояния.

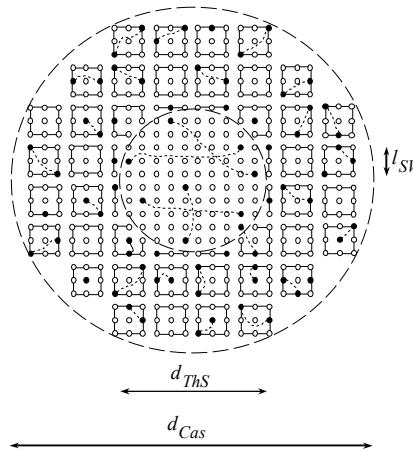


Рис. 5.9. Схематическое изображение атомного перемешивания в каскаде. Пунктиром показаны допустимые перестановки меченых атомов

Каскадная модель содержит следующие параметры:

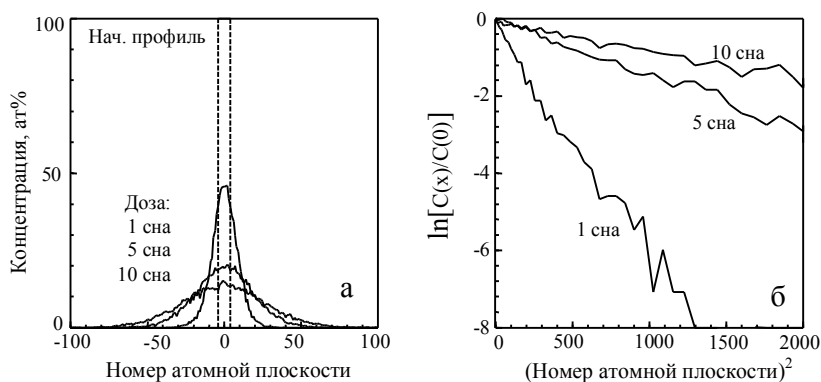
- диаметр каскада  $d_c$  ;
- диаметр термического пика  $d_{ThS}$  ;

- размер стороны кубической ячейки,  $l_{SV}$ ;
- среднее количество смещенных атомов в каскаде  $n_d$ .

Ниже будут использоваться следующие численные значения  $d_c = 7,13$  нм и  $l_{SV} = a = 0,23$  нм ( $a$  – межатомное расстояние). Величина параметра  $n_d = 260$  соответствует NRT-модели генерации дефектов [170] для каскада с энергией 20 кэВ (энергия ПВА приблизительно 27 кэВ [171]; пороговая энергия смещения в меди 30 эВ рекомендована Американским обществом по испытанию материалов (ASTM)). Параметры, выбранные в этом разделе, представляют типичные параметры каскадов в меди для энергий ПВА около порога формирования субкаскадов.

### 5.2.2. Атомное перемешивание при больших дозах облучения

Рассмотрим расплывание плоского слоя меченых атомов, вставленного в матрицу перпендикулярно оси  $z$ , при высокодозном облучении, и сравним результаты моделирования с аналитическим подходом, основанным на уравнении диффузии. Затем покажем чувствительность модели перемешивания к каскадным параметрам.



*Рис. 5.10. Моделирование перемешивания слоя меченых атомов. Объем моделирования содержит  $40 \times 40 \times 200$  узлов решетки. Начальный профиль – 9 атомных плоскостей. Диаметр каскада  $d_c = 7,13$  нм (31 межатомное расстояние),  $l_{SV} = 0,23$  нм (1 межатомное расстояние),  $d_{ThS} = 2,76$  нм (12 межатомных расстояний),  $n_d = 260$  и  $\omega = 0,012$  нм<sup>3</sup>. Концентрационный профиль получен усреднением распределения меченых атомов по поперечным сечениям объема моделирования: а) концентрационные профили и б) концентрационные профили в координатах  $\ln(C(z,t)/C(0,t))$  и  $z^2$*

На рис. 5.10 приведены результаты моделирования. Вследствие перекрытия каскадов начальный профиль меченых атомов сглаживается со временем (рис. 5.10а). Видно, что при достаточно больших дозах облучения

профиль концентрации, усредненный по поперечным координатам, хорошо аппроксимируется распределением Гаусса

$$C(z, t) = (4\pi D_{mix} t)^{-1/2} \exp(-z^2/4D_{mix} t). \quad (5.18)$$

Наклон  $(4D_{mix} t)^{-1}$  зависимости  $\ln C$  от квадрата глубины проникновения (рис. 5.10б) дает значение коэффициента диффузии перемешивания  $D_{mix} \cong 1,8 \text{ нм}^2 \text{ К}$ .

Коэффициент диффузии перемешивания может быть оценен аналитически. Меченый атом испытывает случайный скачок, если попадает в область каскада. Средний временной интервал между последовательными каскадами, которые «перемещают» заданный меченый атом, зависит от объема каскада  $V_{Cas}$

$$\tau_{jump} = \frac{1}{GV_{Cas}} = \frac{\omega n_d}{KV_{Cas}}. \quad (5.19)$$

Среднеквадратичная длина скачка атома в области термического пика –  $L_{ThS}^2 = 0,3d_{ThS}^2$ , и на периферии  $L_{SV}^2 = l_{SV}(a + l_{SV}/2)$ . Полная среднеквадратичная длина скачка в каскаде – это взвешенная сумма этих вкладов (весовыми множителями являются объемы соответствующих частей каскада)

$$L^2 = \left[ 1 - \left( \frac{d_{ThS}}{d_{Cas}} \right)^3 \right] L_{SV}^2 + \left( \frac{d_{ThS}}{d_{Cas}} \right)^3 L_{ThS}^2. \quad (5.20)$$

Поэтому коэффициент диффузии за счет каскадного перемешивания имеет вид

$$D_{mix} = \frac{L^2}{6\tau_{jump}} = \frac{V_{Cas}K}{6n_d\omega} \left[ \left( 1 - \frac{d_{ThS}^3}{d_{Cas}^3} \right) L_{SV}^2 + 0,3 \frac{d_{ThS}^5}{d_{Cas}^3} \right]. \quad (5.21)$$

На рис. 5.11 приведено сравнение аналитической зависимости (5.21) с соответствующими результатами моделирования для различных диаметров зоны термического пика. Как и ожидалось, эффективность перемешивания  $D_{mix}/K$  сильно увеличивается с ростом диаметра термического пика, если  $d_{ThS} > l_{SV}$ . Рис. 5.12 показывает результаты моделирования случайных блужданий одного меченого атома, благодаря перекрытиям каскадов. «Диффузионный путь» одного атома очень нерегулярный (пунктирная линия). Однако квадрат смещения, усредненный по 200 реализациям (сплошная линия), линеен по дозе и соответствует броуновскому случайному блужданию:  $\langle r^2(t) \rangle = 6Dt$ .

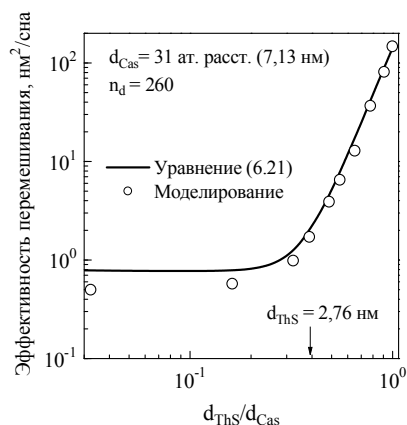


Рис. 5.11. Зависимость эффективности перемешивания от диаметра термического пика. Параметры указаны в подписи к рис. 5.10. Сплошная линия соответствует уравнению (5.21), символами показан результат РМК моделирования. Стрелкой показано значение  $d_{ThS}$ , использованное при получении результатов, представленных на рис. 5.10, 5.12-5.14

Оценка коэффициента диффузии перемешивания по результатам моделирования, представленного на рис. 5.12, дает величину  $D_{mix}/K \cong 2 \text{ нм}^2/\text{сна}$ , которая немного больше, чем полученная из моделирования перемешивания слоя меченых атомов (рис. 5.10). Возможная причина различия состоит в том, что для одного меченого атома все соседние узлы решетки являются доступными, в отличие от моделирования сглаживания неоднородности с высокой концентрацией меченых атомов.

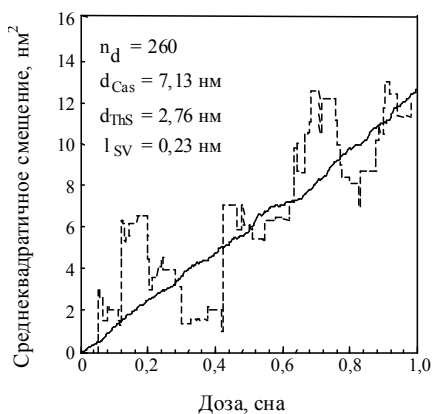


Рис. 5.12. Среднеквадратичное смещение меченого атома в зависимости от дозы облучения. Среднее количество скачков меченого атома равно 60. Пунктирная линия – одна реализация. Сплошная линия – усреднение по 200 реализациям. Параметры каскада такие же, как и для рис. 5.10

Коэффициент диффузии вследствие баллистического перемешивания может быть получен путем моделирования бинарных столкновений атомов (программы, подобные TRIM [172]). Такие расчеты обычно дают величину коэффициента перемешивания, которая значительно ниже, чем наблюдаемая в том же самом материале экспериментально [69]. Это означает, что расчеты бинарных столкновений не учитывают вклад термического пика в эволюции каскада.

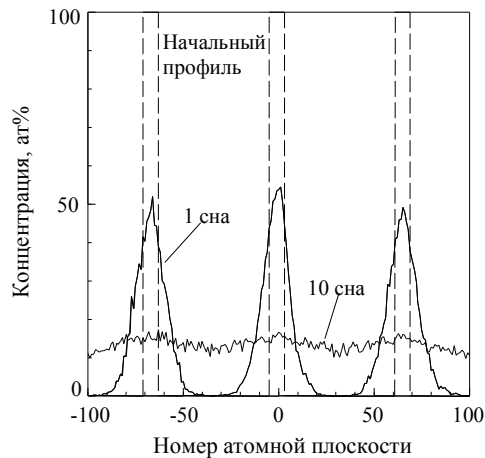


Рис. 5.13. Перемешивание многослойного образца при каскадообразующем облучении

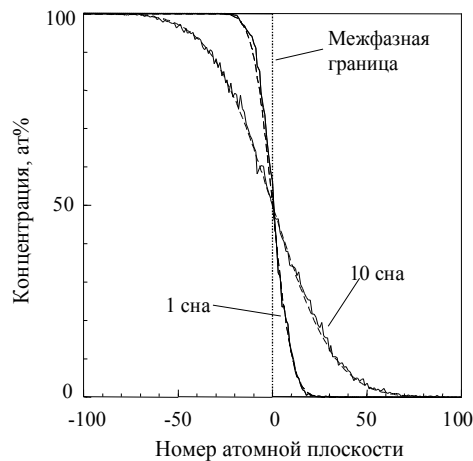


Рис. 5.14. Каскадно-индуцированное перемешивание на межфазной границе (растворение большого выделения). Пунктирные линии – решения уравнения диффузии с  $D_{mix} \cong 1,8 \text{ нм}^2\text{К}$ , которые описываются функцией ошибок

Рис. 5.13 и 5.14 показывают применение модели к двум другим начальным концентрационным профилям.

Выше предполагалось, что свойства каскадов одинаковы в матричной фазе и в слое меченых атомов. Это предположение соответствует действительности в случае тонкого слоя меченых атомов (меньше, чем размер термического пика в матрице). Интересные эффекты наблюдались экспериментально во время процесса перемешивания на межфазной границе, разделяющей два различных материала (см. обзорную работу [68]). Эксперименты показали, что атомы разных типов не всегда мигрируют в противоположные слои с равной скоростью даже в температурно-независимом случае. Чтобы оценить влияние энергии когезии, в работе [173] исследовались двойные слои, составленные из элементов с разной энергией когезии. Было установлено, что, независимо от взаимного положения слоев (А-В или В-А) относительно налетающих частиц, атомы металла с более высокой энергией когезии предпочтительно смещаются в металл с более низкой энергией когезии.

Эти наблюдения не могут быть объяснены с помощью механизма баллистического перемешивания, согласно которому более легкие атомы должны смещаться вдоль направления облучения более эффективно. Поэтому в работе [173] был сделан вывод, что предпочтительная миграция атомов в материал с низкой энергией когезии объясняется перемешиванием в области термического пика. Известно, что энергия когезии связана с температурой плавления, поэтому время жизни расплава в материале с большой энергией когезии будет меньше, чем время жизни расплава в материале с низкой энергией когезии. В области термических пиков, которые развиваются на межфазной границе между двумя материалами, материал с высокой температурой плавления будет затвердевать первым, но атомы этого материала будут продолжать быстро диффундировать в жидкоподобном объеме материала с низкой температурой плавления.

Моделирование перемешивания двухслойных систем, составленных из материалов с подобными (рис. 5.15а) и различающимися (рис. 5.15б) свойствами каскадов, воспроизводит экспериментально наблюдаемые тенденции. На рис. 5.15б, в материале слева от межфазной границы, перемешивание в области термического пика запрещено при атомных концентрациях компонента А в термическом пике выше, чем 30 ат%. Видно, что в этом случае концентрационный профиль асимметричен относительно начального положения межфазной границы, то есть перемешивание в термических пиках ускоряет перенос атомов. Концентрационные профили, представленные на рис. 5.15а, хорошо описываются решением уравнения диффузии и соответствуют функции ошибок с  $D_{mix}/K \cong 3 \text{ нм}^2/\text{сна}$ .

В разделе 5.1 (см. также [74]) было рассмотрено уменьшение размеров ансамбля пластинчатых выделений хрома в сплаве меди при ионном облучении. Оказалось, что даже при очень малых дозах облучения (приблизительно 0,1 сна при комнатной температуре) электронно-

микроскопический деформационный контраст выделений хрома исчезает полностью [66]. При низких температурах облучения, когда термоактивированные диффузионные процессы заморожены, это исчезновение деформационного контраста должно быть связано с каскадным перемешиванием, то есть с прямым разрушением выделений каскадами смещений. Попытки объяснить экспериментальные наблюдения в терминах средней эффективности ионного перемешивания, используя уравнение диффузионного растворения [66], оказались unsuccessful, поскольку оцененная скорость растворения оказалась на порядок ниже, чем наблюдаемая. Причина состоит в том, что уравнение диффузии применимо только на временах больше, чем время одного атомного скачка, то есть при дозах облучения больше, чем  $K\tau_{jump}$ . Для параметров, использованных в этом разделе,  $K\tau_{jump} = 1,8 \times 10^{-2}$  сна.

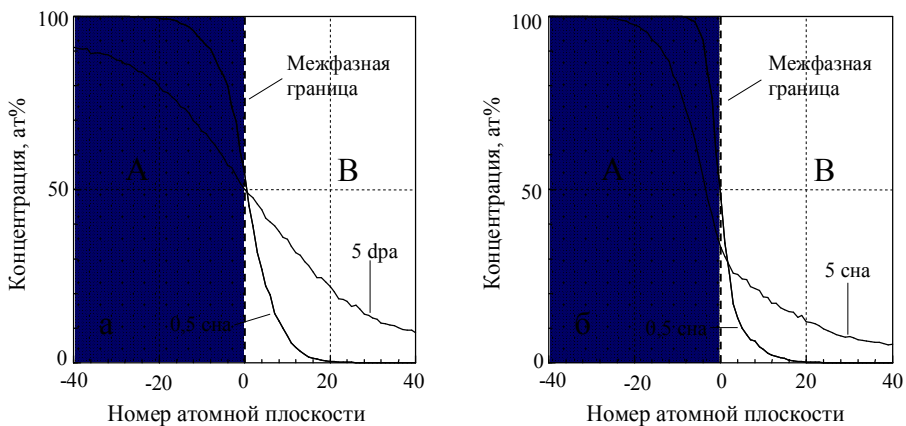
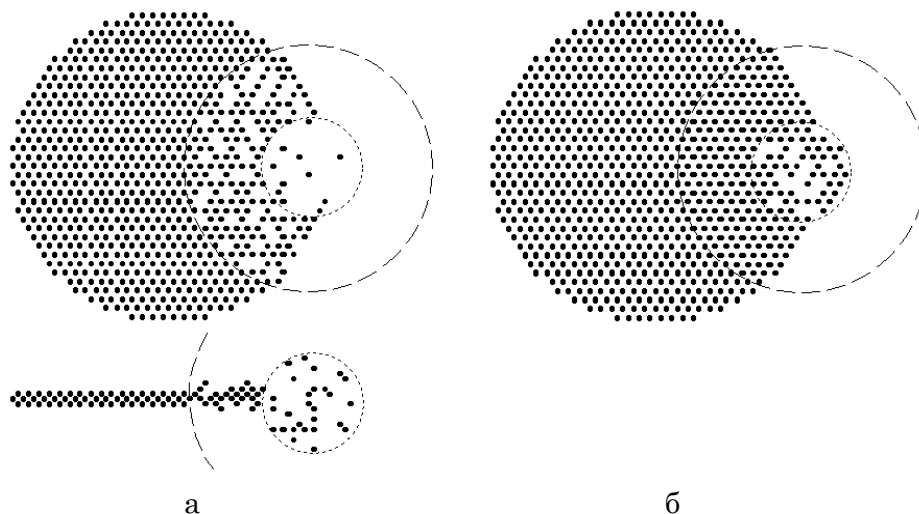


Рис. 5.15. Каскадно-индуцированное перемешивание двухслойных систем. Кривые показывают концентрацию компонента А. Каскадные параметры:  $n_d = 260$ ,  $d_c = 6,21$  нм,  $l_{SV} = 0,23$  нм. Концентрационные профили получены путем усреднения распределения меченых атомов по поперечным сечениям объема моделирования ( $100 \times 100$  узлов решетки). Эффективность баллистического перемешивания одинакова для обеих систем. а) Межфазная граница между двумя подобными материалами. Диаметр термического пика не зависит от точки моделируемого объема,  $d_{ThS} = 3,22$  нм (14 межатомных расстояний). б) Межфазная граница между двумя различными материалами. Перемешивание в области термического пика не происходит ( $d_{ThS} = 0$ ) при концентрациях компонента А выше, чем 30 at%

Модельные расчеты раздела 5.1 показали, что разумное согласие с экспериментальными данными [66] может быть получено, используя минимум предположений о механизме растворения и структуре каскада. В разделе 5.1 структура каскада не была задана. Модель была чисто

геометрической – в ней рассматривались только пересечения дискообразного выделения и сферы эффективного радиуса, которая представляла собой каскад. Ключевым предположением было то, что любая часть выделения, пересекаемая каскадом, растворяется и больше не вносит вклад в экспериментально определяемый размер выделения. Модель данного раздела дает наглядное представление о деталях каскадно-индуцированного растворения выделения (рис. 5.16).



*Рис. 5.16. Частичное разрушение выделений одним каскадом. Матричные атомы не показаны. Каскадная область и область термического пика окружены штриховой и пунктирной линиями, соответственно (каскадные параметры указаны на рис. 5.10). Диаметр выделения – 43 межатомных расстояния (10 нм). а) Пластинчатое выделение, толщиной 3 атомных слоя, лежащее перпендикулярно направлению [111]. Сечения взяты вдоль плотноупакованных плоскостей. б) Сферическое выделение. Сечение перпендикулярно направлению [111]*

На рис. 5.16 дано сравнение распределения атомов выделения после прямого столкновения одного каскада с пластинчатым (рис. 5.16а) и сферическим выделениями (рис. 5.16б). Видно, что процесс растворения намного эффективнее в случае пластинчатого выделения, главным образом из-за перемешивания в области термического пика.

### 5.3. Выводы

1. Построена модель каскадного растворения пластинчатых выделений, которая качественно и количественно воспроизводит поведение выделений Cr в сплаве Cu-Cr-Zr-Si при облучении ионами Cu<sup>+</sup> с энергией 300 кэВ при комнатной температуре. Процесс каскадного

- растворения особенно эффективен в случае дискообразных выделений толщиной меньше, чем размер каскада.
2. Каскадная эффективность  $\eta = n_r/n_d = 35 \div 45$  при использовании в моделировании Монте-Карло дает результаты, которые хорошо согласуются с экспериментальными данными. При фиксированной каскадной эффективности функция распределения выделений слабо зависит от количества смещенных атомов в каскаде. Это может указывать на то, что уменьшение размеров пластинчатых выделений слабо зависит от энергетического спектра ПВА.
  3. Сформулирована модель переноса атомов вследствие перемешивания в каскадах смещений, которая учитывает неоднородность пространственной структуры каскада. Входными параметрами модели служат параметры каскада, полученные при помощи МД моделирования. Модель используется для нахождения эффективности атомного перемешивания при помощи метода Монте-Карло, а также для аналитической оценки коэффициента диффузии. Показано, что диффузия носит гауссов характер. На больших временах при каскадообразующем облучении меченые атомы испытывают броуновское движение  $\langle r^2(t) \rangle \propto t$ .
  4. Проведено моделирование эволюции различных начальных концентрационных профилей при низкотемпературном каскадообразующем облучении. Показано, что доминирующий вклад вносит атомное перемешивание в области термического пика. Свойства материала, такие как энергия когезии и температура плавления, влияют на параметры каскада и, следовательно, на процесс атомного перемешивания. Результаты данного раздела опубликованы в работах [74, 174-176].

## 6. ФОРМИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЫДЕЛЕНИЙ ВТОРЫХ ФАЗ В СПЛАВАХ ПРИ КАСКАДООБРАЗУЮЩЕМ ОБЛУЧЕНИИ

В данном разделе, на основании представлений, развитых в предыдущих разделах, рассмотрено влияние потери когерентности на формирование распределения по размерам выделений вторых фаз при каскадообразующем облучении. Зарождение когерентных выделений, их рост с последующей потерей когерентности, а также каскадное растворение больших некогерентных выделений могут происходить одновременно, что приводит к формированию квазистационарного распределения по размерам полукogerентных выделений. Для описания этого процесса

рассмотрена эволюция смешанного ансамбля когерентных, полукogerентных и некогерентных выделений. Математически задача сформулирована в виде системы дискретных уравнений кинетики зарождения (Master equation approach), которая также используется для более поздних стадий эволюции. Для решения соответствующей большой системы уравнений (в типичном случае, больше чем  $10^5$  уравнений) развит эффективный численный метод. Результаты моделирования, полученные для параметров материалов и условий облучения, характерных для ядерных реакторов, показывают, что потеря когерентности в значительной степени воздействует на эволюцию совокупности выделения. При определенных условиях в течение длительного облучения, и в отожженных на твердый раствор сплавах и в состаренных сплавах, средний размер выделений и их плотность стремятся к стационарным значениям, а функция распределения больших выделений сужается. Обнаружено, что асимптотическое квазистационарное состояние ансамбля выделений может зависеть от исходного состояния сплава.

## 6.1. В в е д е н и е

Современные многокомпонентные сплавы, используемые в ядерной энергетике, содержат выделения неравновесных фаз или фазы, пересыщенные одним из компонентов. Во время работы в реакторных условиях состав сплава и его фазовая микроструктура эволюционируют, приводя к изменению механических свойств и размерной нестабильности материала. Несколько примеров, представленных ниже, показывают, что выпадение вторых фаз играет важную роль в поведении материалов под облучением.

Часто оказывается, что материалы, содержащие когерентные выделения, обладают повышенной радиационной стойкостью. Например, сопротивление распуханию нержавеющей стали РЕ16 [177] и других высоко-никелевых сплавов [178, 179] обычно связывают с наличием мелко-дисперсных выделений  $\gamma'$ -фазы, однородно распределенных в матрице.

Другой пример – формирование высокой плотности нанометровых выделений, обогащенных медью, в ферритных сталях, что является основной причиной упрочнения стали и охрупчивания корпусов реакторов [108, 180]. Большое количество исследований было посвящено изучению распада модельных бинарных сплавов Fe-Cu в условиях термического старения. Было установлено, что обогащенные медью мелкие выделения на начальных стадиях распада обладают когерентной ОЦК решеткой, в то время как большие выделения имеют ГЦК решетку. С увеличением времени старения структура выделения претерпевает сложную последовательность превращений из когерентного состояния в некогерентное ОЦК  $\rightarrow$  9R  $\rightarrow$  3R  $\rightarrow$  ГЦК [181, 182]. Размер, при котором происходит первое превращение ОЦК  $\rightarrow$  9R, зависит от температуры окружающей матрицы и составляет приблизительно 12 нм при 550 °С и 5 нм при комнатной

температуре [182]. Подобная последовательность распада наблюдалась в сплаве Fe-1,5at%Cu, облученном при 295 °С электронами с энергией 2,5 МэВ до дозы  $3,1 \times 10^{23}$  м<sup>-2</sup>. Максимальный размер 9R-выделений был приблизительно 8 нм, более крупные выделения (приблизительно до 20 нм) полностью или частично превратились в выделения со структурой 3R или ГЦК [183]. Это означает, что основным эффектом электронного облучения является увеличение скорости диффузии меди и, следовательно, ускорение кинетики распада. При нейтронном и ионном облучении эволюция выделений отличается. Присутствие мелких 9R-выделений было подтверждено в модельном сплаве Fe-1,3at%Cu, облученном нейтронами до доз  $8,61 \times 10^3$  сна и  $6,3 \times 10^2$  сна при температуре приблизительно 270 °С [184]. Однако данные работы [184], более ранние данные по малоугловому рассеянию нейтронов (SANS), просвечивающая электронная микроскопия [185], а также последние данные атомной зондирующей томографии (atomic probe tomography) и SANS [186] указывают на то, что и в сталях, и в модельных сплавах размеры выделений меньше (приблизительно 2-4 нм), а их плотность больше после нейтронного облучения, чем для эквивалентного термически состаренного сплава. Уменьшение размера выделения меди в состаренном сплаве Fe-1,3at%Cu наблюдалось в температурном интервале между комнатной температурой и 550 °С после облучения до 30 сна ионами Fe<sup>+</sup> (300 кэВ) со скоростью создания смещений от  $10^{-3}$  до  $10^{-2}$  сна/с [187]. Выделения меди сохраняли свою форму, но уменьшались в размерах при всех условиях облучения. Согласно [184, 187], отсутствие коалесценции, наблюдаемое при облучении нейтронами и тяжелыми ионами, может быть связано с каскадно-индуцированным растворением выделений.

Известно, что сплавы Zr-Nb обычно изготавливаются с двойной фазовой структурой  $\alpha$ -Zr +  $\beta$ -Zr. Обе фазы метастабильны при рабочей температуре реакторов на тепловых нейтронах (приблизительно 520 – 570 К). Гексагональная  $\alpha$ -фаза пересыщена ниобием. Выпадение выделений  $\beta$ -Nb фазы в  $\alpha$ -фазе коррелирует с улучшением под облучением коррозионной стойкости напорных труб, изготовленных из сплава Zr-2,5%Nb, (см., например, [188] и работы, цитируемые там). Радиационно-ускоренное выпадение игольчатых и дискообразных выделений  $\beta$ -Nb фазы наблюдалось при всех типах облучения: электронном [189], протонном [190] и нейтронном [6, 188, 191-194] (см. раздел 5). В облучаемых образцах средний размер выделений  $\beta$ -Nb фазы обычно мал и составляет 5-40 нм в длину. Плотность выделений высока, и обычно они распределены равномерно в зернах фазы  $\alpha$ -Zr. При облучении в реакторных условиях при температурах ниже 600 К не наблюдается образование больших некогерентных выделений  $\beta$ -Nb или выделений  $\beta$ -Nb на границах зерен в  $\alpha$ -Zr фазе. Согласно расчетам [64], некогерентные выделения являются неустойчивыми под облучением и поэтому не могут образовываться. В то же самое время стабильность мелких пластинчатых или игольчатых

выделений под облучением может быть объяснена тем, что эти выделения находятся в более когерентном состоянии с матрицей  $\alpha$ -Zr [64]. В действительности, частицы  $\beta$ -Nb не могут быть полностью когерентными с  $\alpha$  матрицей из-за различия кристаллических решеток. Однако большая часть межфазной границы игольчатых или пластинчатых выделений является когерентной, в то время как несоответствие решеток наблюдается на некогерентной части межфазной границы. Это означает, что в среднем мелкие выделения  $\beta$ -Nb могут считаться когерентными (или полукогерентными). *По-видимому, в сплавах при некоторых условиях облучения когерентные выделения не могут расти до больших размеров из-за потери когерентности.*

В разделе 4 было описано совместное действие радиационно-индуцированной сегрегации и каскадного перемешивания на стабильность когерентных и некогерентных выделений в неупорядоченных сплавах замещения. Результаты исследования фазовой стабильности были представлены в виде радиационно-модифицированных фазовых диаграмм. Эти диаграммы содержат низкотемпературную границу устойчивости выделений, расположение которой зависит от скорости создания смещений, эффективности радиационного перемешивания и типа межфазной границы. Низкотемпературная граница устойчивости некогерентных выделений расположена в области более высоких температур, чем соответствующая граница для когерентных выделений,  $T_{coh} < T_{inc}$  [64].

Существование двух порогов устойчивости выделений означает, что в облучаемых сплавах при температурах  $T_{coh} < T < T_{inc}$  может формироваться квазистационарное распределение полукогерентных выделений [64]. Механизм этого явления связан с конкуренцией процессов: а) зарождения и роста когерентных выделений в пересыщенном твердом растворе и б) каскадно-индуцированного растворения больших выделений, которые теряют когерентность после достижения некоторого критического размера. Пересыщенность в сплаве может создаваться и поддерживаться вследствие каскадно-индуцированного растворения некогерентных выделений, существовавших в сплаве до облучения. Механизм образования стационарного распределения полукогерентных выделений схематически показан на рис. 6.1 (см. также рис. 6.2).

Цель данного раздела состоит в том, чтобы исследовать влияние потери когерентности на формирование и эволюцию распределения выделений по размерам при каскадообразующем облучении. В разделе 6.2 построена скорость роста выделения как функция степени когерентности. Затем, для описания эволюции смешанной совокупности когерентных, полукогерентных и некогерентных выделений, формулируется система конечно-разностных уравнений (Master equation), то есть система кинетических уравнений для подвижных мономеров примеси, ТД и кластеров примеси всех размеров. Влияние потери когерентности на мощность стоков, концентрацию ТД и скорость роста выделений учитывается самосогласованно. Для решения системы кинетических

уравнений развит эффективный численный метод. Используя параметры, типичные для реакторных материалов, проведено моделирование и показано, что под облучением квазистационарное распределение выделений может формироваться как в отожженных на твердый раствор сплавах, так и в состаренных сплавах.

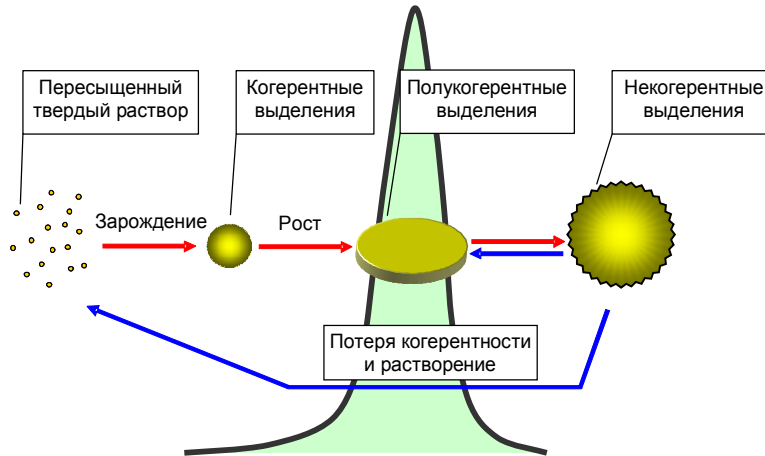


Рис. 6.1. Схематическая иллюстрация образования стационарного распределения полукогерентных выделений в пересыщенном твердом растворе

## 6.2. Описание модели

Рассмотрим бинарный сплав замещения А-В с концентрациями компонентов  $C_A$  и  $C_B$  ( $C_A + C_B = 1$ ,  $C_B > C_A$ , в дальнейшем компонент А будем называть примесью). Концентрации определены в атомных долях. Сплав может содержать когерентные и некогерентные выделения упорядоченной фазы, которые состоят из чистого компонента А. Для простоты и для того, чтобы продемонстрировать влияние потери когерентности, рассматривается только каскадно-индуцированное растворение как механизм потери фазовой стабильности (радиационно-индуцированная сегрегация не рассматривается). Выделения считаются сферическими. Скорость роста выделения может быть представлена как сумма двух вкладов, а именно диффузионного роста и каскадно-индуцированного растворения вследствие атомного перемешивания в каскадных областях

$$\frac{dR}{dt} = \left( \frac{dR}{dt} \right)_{dif} + \left( \frac{dR}{dt} \right)_{mix}, \quad (6.1)$$

где  $R$  – радиус выделения. Используя результаты [64, 146], можно показать, что в отсутствии сегрегационных эффектов диффузионно-контро-

лируемая скорость роста когерентного и некогерентного выделения имеет вид

$$\left(\frac{dR}{dt}\right)_{dif}^{\alpha} = \frac{D_A^{\alpha}}{R} (C_A - C_A^{R,\alpha}), \quad \alpha = coh, inc, \quad (6.2)$$

где верхние индексы *coh* и *inc* относятся к когерентному и некогерентному выделению, соответственно;  $C_A$  – средняя концентрация подвижных мономеров примеси в матрице;  $C_A^{R,\alpha}$  – термически равновесная концентрация мономеров примеси на границе выделения, задаваемая соотношением Гиббса–Томсона

$$C_A^{R,\alpha} = C_A^{e,\alpha} \exp\left(\frac{2\sigma_{\alpha} \omega}{R k_B T}\right), \quad (6.3)$$

$C_A^{e,\alpha}$  – концентрация мономеров примеси в равновесии с объемной фазой А,  $\sigma_{\alpha}$  – энергия межфазной границы выделение-матрица. В общем случае  $C_A^{e,\alpha}$  и  $\sigma_{\alpha}$  зависят от типа межфазной границы. Обычно межфазная энергия когерентных границ значительно ниже энергии некогерентных границ,  $\sigma_{coh} < \sigma_{inc}$  [195]. Коэффициент радиационно-ускоренной взаимной диффузии  $D_A^{\alpha}$  зависит от типа межфазной границы [54]

$$D_A^{coh} = D_v (2C_v - C_v^e), \quad D_A^{inc} = \frac{2D_v (C_v - C_v^e)}{\ln(2C_v/C_v^e - 1)}, \quad (6.4)$$

где  $D_v$  – коэффициент диффузии вакансий,  $C_v$  – средняя концентрация вакансий и  $C_v^e$  – термически равновесная концентрация вакансий на некогерентной границе. Под облучением вакансионная пересыщенность  $C_v/C_v^e \gg 1$ , поэтому, согласно уравнениям (6.2) и (6.4), скорость диффузионного роста некогерентных выделений меньше, чем скорость диффузионного роста когерентных выделений. Физическая причина состоит в том, что граница некогерентного выделения является стоком для ТД. Поэтому вблизи некогерентного выделения концентрации ТД меньше, чем вблизи когерентного выделения, следовательно, диффузия примеси замедлена.

Разумно предположить, что скорость атермического каскадного растворения является одинаковой для когерентных и некогерентных выделений

$$\left(\frac{dR}{dt}\right)_{mix} = -\frac{D_{mix}}{R}, \quad (6.5)$$

где  $D_{mix}$  – коэффициент диффузии вследствие каскадного перемешивания, который пропорционален эффективности радиационного перемешивания  $d_{mix}$  и скорости генерации  $K$  свободно-мигрирующих ТД [64, 174].

$$D_{mix} = d_{mix} K . \quad (6.6)$$

Найдем скорость роста полукогерентного выделения. Чтобы учесть потерю когерентности, введем понятие степени когерентности. Предположим, что превращение из когерентного в некогерентное состояние происходит постепенно в некотором интервале размеров. Степень когерентности выделения, содержащего  $n$  атомов примеси, будем задавать ступенчатой функцией

$$p = \begin{cases} 1, & n \leq n^* \\ \left[ 1 + \exp\left(\frac{n - n_{loss}}{\Delta n}\right) \right]^{-1}, & n > n^* \end{cases}, \quad n = \frac{4\pi}{3\omega} R^3, \quad (6.7)$$

где  $n_{loss} = \frac{4\pi}{3\omega} R_{loss}^3$  – размер выделения, для которого  $p = 0,5$ ,  $\Delta n$  – ширина области превращения и  $\omega$  – атомный объем. Малые выделения (кластеры примеси), содержащие меньше, чем  $n^*$  атомов ( $n^* < n_{loss}$ ), считаются когерентными.

Используя степень когерентности как весовой множитель, запишем скорость роста полукогерентного выделения в виде интерполяционной формулы

$$\frac{dR}{dt} = \left(\frac{dR}{dt}\right)_{dif}^{coh} p + \left(\frac{dR}{dt}\right)_{dif}^{inc} (1 - p) + \left(\frac{dR}{dt}\right)_{mix}. \quad (6.8)$$

Рассмотрим эволюцию функции распределения выделений  $f(n, t)$ , которая определена концентрациями кластеров примеси всех размеров  $n$ , от димеров примеси до больших некогерентных выделений. Используем уравнения скоростей реакций или систему дискретных кинетических уравнений

$$\frac{\partial f(2, t)}{\partial t} = 2W^+(1)C_A - (W^+(2) + W^-(2))f(2, t) + W^-(3)f(3, t), \quad (6.9)$$

$$\frac{\partial f(n, t)}{\partial t} = J_{n-1, n} - J_{n, n+1}, \quad n = 3, 4, \dots, \quad (6.10)$$

$$J_{n-1, n} = W^+(n-1)f(n-1) - W^-(n)f(n), \quad (6.11)$$

где  $W^+(n)$  – скорость поглощения атомов примеси кластерами и  $W^-(n)$  – скорость испускания атомов вследствие термического испарения и каскадного разрушения. Все концентрации определены в атомных долях. Используя уравнение (6.8), сконструируем скорости поглощения и испускания мономеров примеси. Вероятности поглощения и испускания атомов примеси включают когерентные и некогерентные вклады; вероятность испускания атома примеси содержит также член, ответственный за каскадное растворение:

$$W^+(n) = W_{coh}^+(n)p(n) + W_{inc}^+(n)(1 - p(n)), \quad (6.12)$$

$$W^-(n) = W_{coh}^-(n)p(n) + W_{inc}^-(n)(1 - p(n)) + \frac{4\pi R(n)}{\omega} D_{mix}, \quad (6.13)$$

где  $W_{\alpha}^+(n)$  и  $W_{\alpha}^-(n)$  – скорости поглощения и испускания для когерентного и некогерентного выделений

$$W_{\alpha}^+(n) = \frac{4\pi}{\omega} R(n) D_A^{\alpha} C_A, \quad (6.14)$$

$$W_{\alpha}^-(n) = \frac{4\pi}{\omega} R(n) D_A^{\alpha} C_A^{R,\alpha}, \quad \alpha = coh, inc. \quad (6.15)$$

Первое слагаемое в уравнении (6.9) для димеров учитывает, что относительная диффузионная подвижность пары мономеров вдвое больше, чем диффузионная подвижность одиночного мономера.

Здесь совокупность когерентных и некогерентных выделений не рассматривается отдельно. Вместо этого вводятся различные вероятности поглощения атомов примеси когерентными и некогерентными выделениями. Преимущество такого подхода состоит в том, что в модель могут быть включены также и полукogerентные выделения (по крайней мере, качественно). Как показывают уравнения (6.12) и (6.13),  $p(n)$  имеет смысл вероятности когерентного сопряжения решеток выделения и матрицы.

Если не рассматривать облечение ионами А или В, то полное количество подвижных мономеров и атомов примеси во всех кластерах сохраняется

$$C_A + \sum_{n=2}^{\infty} n f(n, t) = Q, \quad (6.16)$$

где  $Q$  – объемная доля атомов примеси. Ниже этот закон сохранения будет использоваться в дифференциальной форме

$$\frac{dC_A}{dt} = - \sum_{n=2}^{\infty} n \frac{\partial f(n,t)}{\partial t} . \quad (6.17)$$

Подвижность примеси зависит от концентрации вакансий, которая удовлетворяет квазистационарному уравнению

$$K - \alpha_R D_i C_i C_v - k^2 D_v (C_v - C_v^e) = 0 , \quad (6.18)$$

где  $D_i$  – коэффициент диффузии МА,  $C_i$  – средняя концентрация междоузельных атомов МА,  $\alpha_R$  – константа скорости рекомбинации и  $k^2$  – полная мощность стоков. В рассматриваемой задаче эффекты предпочтения не существенны, поэтому используем обычное соотношение

$$D_i C_i = D_v (C_v - C_v^e) . \quad (6.19)$$

В этом случае вакансионная пересыщенность имеет вид

$$\frac{C_v}{C_v^e} = 1 + \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k^2}{C_v^e \alpha_R} \right) \left\{ \sqrt{1 + \frac{4K}{\alpha_R D_v} \left( C_v^e + \frac{k^2}{\alpha_R} \right)^{-2}} - 1 \right\} . \quad (6.20)$$

Полная мощность стоков содержит вклады от полукогерентных и некогерентных выделений, которые являются стоками для ТД

$$k^2 = k_0^2 + \frac{4\pi}{\omega} \sum_{n=2}^{\infty} R(n) f(n,t) (1 - p(n)) , \quad (6.21)$$

где  $k_0^2$  – «фоновая» мощность стоков всех других стоков, кроме выделений.

### 6.3. Ч и с л е н н ы й м е т о д р е ш е н и я э в о л ю ц и о н н ы х у р а в н е н и й д л я ф у н к ц и и р а с п р е д е л е н и я в ы д е л е н и й

Из-за нелинейности и сложности система кинетических уравнений, сформулированных выше, может быть решена только численно. Однако эту задачу невозможно решить прямо, даже численно, так как количество связанных уравнений равно количеству атомов примеси в наибольшем выделении, присутствующем в системе, что предъявляет невыполнимые требования к компьютерным ресурсам (для системы с размерами выде-

лений  $R \leq 10$  нм количество уравнений больше, чем  $10^5$ ). Эта трудность является характерной для задач неравновесной эволюции распределения кластеров. Обзор ранних усилий [75-85] в описании зарождения кластеров ТД и их роста в металлах под облучением приведен в [86-89]. Общая стратегия решения иерархии уравнений скоростей реакций для всех размеров кластеров состоит в том, чтобы свести дискретную формулировку к непрерывному описанию и к численной схеме с контролируемым количеством уравнений.

Киритани [78] развил групповой метод для анализа процесса кластеризации избыточных вакансий в решетке. В групповом методе первые  $N = 100$  уравнений являются уравнениями скоростей реакций для одиночных размеров кластеров, в то время как кластеры большего размера группируются и им приписываются одинаковые константы скоростей реакций (ширина группы была меньше пяти процентов размера кластеров в этой группе). Так как величина  $N = 100$  достаточно большая, то, по видимому, группировка мало или вообще не влияет на стадию зарождения. Групповой метод оказался полезной приближенной схемой. В работе [80] групповой метод применялся для изучения зарождения и роста междоузельных петель под облучением; было показано, что при надлежащем выборе ширины групп разрывы функции распределения петель по размерам, найденные в [90], могут быть минимизированы. Дальнейшее развитие и усовершенствование группового метода описано в [91, 92].

Самый известный, традиционный метод борьбы с численными трудностями дискретного подхода – это аппроксимировать дискретное распределение по размерам непрерывным распределением. Дискретные уравнения скоростей реакций (6.9)-(6.11) преобразуются путем разложения в ряд Тейлора до членов второго порядка в дифференциальное уравнение в частных производных типа уравнения Фоккера–Планка для распределения кластеров по непрерывной переменной. Вообще говоря, усечение ряда Тейлора до второй производной неправомерно для малых кластеров, то есть в области размеров, где константы скоростей реакций и функции распределения быстро изменяются. Поэтому в работе [87] был предложен гибридный метод. В этом методе, чтобы сохранить детали процесса кластеризации, в области малых размеров используются отдельные уравнения скоростей реакций для вакансионных и междоузельных кластеров вплоть до  $N = 4$ ; дефекты большего размера моделируются при помощи уравнения Фоккера–Планка. Чтобы решить численно уравнение Фоккера–Планка для высокодозного облучения (большие размеры кластеров), в работе [87] вводится новая переменная, которая связана с радиусом кластера  $r$  логарифмическим преобразованием  $u = \ln(2r/b)$  (где  $b$  – вектор Бюргерса); затем в непрерывной области вводится равномерная сетка, и преобразованное уравнение Фоккера–Планка приводится к дискретному виду. Эффективность вычислительной схемы может быть повышена далее, если использовать принцип сохранения количества атомов для динамического определения количества уравнений, которые необходимо решать одновременно [85].

Гибридный метод, аналогичный описанному в [87], был применен в [93] для моделирования зарождения и созревания Оствальда в кремнеземе, который кристаллизуется в различных полиморфных модификациях. В этом методе область размеров кластеров разделена на две части: для малых кластеров ( $n < N \sim 100$ ) используются дискретные кинетические уравнения, в то время как для больших кластеров непрерывное кинетическое уравнение записывается относительно переменной  $\ln(n)$ . Граничные условия между дискретными и непрерывными формулировками получены из условий непрерывности решения [93].

Дальнейшая модификация гибридного метода [87] упоминается в работе [94], однако подробности вычислительной схемы не приведены.

В методологии работ [95, 96] кинетика мелких кластеров не рассматривается; вместо этого используется классическая теория зарождения, чтобы записать выражение для скорости зарождения как функции концентрации примеси и времени. Для моделирования кинетики распада непрерывная временная эволюция разделена на дискретное количество малых шагов по времени. На каждом шаге новые частицы могут зарождаться, а существующие частицы растут либо растворяются. Начальный радиус только что зародившихся частиц выбирается немного большим, чем критический радиус, чтобы позволить этим частицам расти. Распределение частиц по размерам обновляется соответствующим образом и используется для вычисления объемной доли частиц и, следовательно, мгновенной средней концентрации примеси в матрице. Обновленная средняя концентрация примеси используется в вычислении скоростей зарождения и роста на следующем шаге по времени. Таким образом может быть смоделирован переход от зарождения к росту и коалесценции выделений [97].

Недавно, для описания зарождения и роста пор под облучением был предложен новый комбинированный метод [98], основанный на дискретных уравнениях для малых размеров и на континуальной Ланджевенновской схеме Монте-Карло, которая применяется, чтобы решить уравнение Фоккера–Планка в области больших размеров. Дискретные уравнения используются для малых пор до размера  $N = 2000$ . Во время расчетов кластеры, которые подходят к этой верхней границе, удаляются. Потеря компенсируется путем создания новой Ланджевенновской частицы в точке  $n = N$  с весом, равным плотности удаляемых кластеров. Случайные блуждания Ланджевенновских частиц с дрейфом аппроксимируют уравнение Фоккера–Планка. Кластеры в выбранной Ланджевенновской частице имеют один и тот же размер во время эволюции, а вес самой частицы остается постоянным [98].

Чтобы значительно уменьшить количество уравнений, в данном разделе сформулирована новая реализация гибридного (или комбинированного) подхода, которая методологически является довольно простой и прямой по сравнению с методами, упомянутыми выше. Подобно [87, 93] первоначальная конечно-разностная система уравнений сохраняется до некоторого количества атомов в кластерах  $N \gg 1$ . Для больших размеров

система конечно-разностных уравнений преобразуется путем разложения в ряд Тейлора до членов второго порядка в дифференциальное уравнение в частных производных типа уравнения Фоккера–Планка для распределения с непрерывной переменной

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( -A(x)f(x,t) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} B(x)f(x,t) \right), \quad x > N, \quad (6.22)$$

где  $A(x)$  – дрейфовая скорость, пропорциональная скорости роста выделений (6.8)

$$A(x) = W^+(x) - W^-(x) = A_0(x) - \frac{4\pi R(x)}{\omega} D_{mix}, \quad (6.23)$$

$B(x)$  описывает диффузию в пространстве размеров

$$B(x) = W^+(x) + W^-(x) = B_0(x) + \frac{4\pi R(x)}{\omega} D_{mix}, \quad (6.24)$$

где  $A_0(x)$  и  $B_0(x)$  соответствуют эволюции без каскадных эффектов, то есть при  $D_{mix} = 0$ .

Комбинированная система конечно-разностных уравнений и непрерывное уравнение Фоккера–Планка решаются численно с помощью метода линий (МЛ) [99, 100]. В методе линий пространственная и временная дискретизация уравнения в частных производных производятся и анализируются независимо. Сначала пространственные производные аппроксимируются алгебраическими выражениями на пространственной сетке, сохраняя непрерывные производные по времени. Затем возникающая система ОДУ интегрируется численно, используя подходящий численный пакет.

Как будет видно ниже, в рассматриваемой задаче желательно построить некую неравномерную сетку для того, чтобы понизить количество ОДУ и, в то же самое время, правильно описать быстрые изменения функции распределения в области малых размеров кластеров на движущемся фронте и в окрестности устойчивого размера. По-видимому, наиболее эффективным способом сделать это является адаптивная схема, которая автоматически подстраивает сетку в областях быстрого пространственного изменения функции распределения (см., например, [196]). Однако вместо этого для целей данного раздела была выбрана более простая неадаптивная неравномерная сетка, шаг которой изменяется по заданному закону в области изменения пространственной переменной. Для создания неоднородной сетки используются следующие соотношения для точек сетки  $x_i$  и шагов сетки  $\Delta x_i$ :

$$x_1 = 1, \quad x_i = x_{i-1} + \Delta x_i, \quad 2 \leq i \leq M, \\ \Delta x_i = \begin{cases} 1, & 2 \leq i \leq N \\ \Delta x_{i-1} \exp(\varepsilon), & N < i \leq M \end{cases}, \quad (6.25)$$

где  $M$  достаточно велико, так что с хорошей точностью выполняется граничное условие  $f(x_M) = 0$ . Изменение шага сетки контролируется параметром  $\varepsilon$ , который должен быть мал  $|\varepsilon| \ll 1$ . Для положительного  $\varepsilon$  шаг между точками сетки увеличивается экспоненциально с ростом номера точки  $i$ , поэтому количество уравнений можно значительно уменьшить вследствие огрубления численной сетки. Увеличивающийся шаг сетки особенно полезен, например, в задаче коалесценции (созревание Оствальда), когда средний размер кластеров и ширина распределения по размерам растут со временем. Для постоянного и положительного параметра  $\varepsilon$  из уравнения (6.25) легко найти явное соотношение между точкой сетки  $x_i$  и ее номером

$$i = N + \frac{1}{\varepsilon} \ln \left( 1 + \frac{\exp(\varepsilon) - 1}{\exp(\varepsilon)} (x_i - N) \right), \quad x \geq N, \quad \varepsilon = \text{const} > 0. \quad (6.26)$$

Асимптотически, при  $i \gg N$  и  $\varepsilon x_i \gg 1$ , из (6.26) получаем

$$i = \frac{1}{\varepsilon} \ln(\varepsilon x_i). \quad (6.27)$$

Это соотношение имеет ту же самую природу, как и логарифмическое преобразование  $u \sim \ln(x)$ , использованное в [87, 93]. Определение сетки (6.25) позволяет изменять шаг между точками сетки более сложным образом. Например, вводя немонотонную зависимость  $\varepsilon$  от номера точки на сетке, можно подстраивать сетку к ожидаемому поведению решения после тестового прогона алгоритма (см. раздел 6.4).

Уравнение в частных производных (6.22) преобразуется в конечно-разностные уравнения на неравномерной сетке, сохраняя консервативность исходного уравнения. Правая часть дифференциального уравнения, содержащая переменный размер кластера, приводится к дискретному виду, используя центральные конечные разности. В результате получаем систему ОДУ относительно производной по времени

$$\frac{df_i}{dt} = \frac{1}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} \left[ - (A_{i+1} f_{i+1} - A_{i-1} f_{i-1}) + \right. \\ \left. + \left( \frac{B_{i+1} f_{i+1} - B_i f_i}{\Delta x_{i+1}} - \frac{B_i f_i - B_{i-1} f_{i-1}}{\Delta x_i} \right) \right]. \quad (6.28)$$

Здесь и ниже нижний индекс  $i$  относится к значениям функций в точках сетки,  $f_i = f(x_i, t)$  и т. д. Замечательным свойством уравнения (6.28) является то, что на сетке с равноотстоящими точками  $\Delta x_i = 1$  оно переходит в начальное конечно-разностное уравнение (6.10). Поэтому уравнение (6.28) можно использовать во всей области размеров кластеров  $n \geq 3$ , то есть переход от дискретных уравнений в области  $x_i \leq N$  к конечно-разностным уравнениям в области  $x_i > N$  является гладким. Другими словами, в предлагаемом подходе, чтобы обеспечить сшивку уравнений скоростной теории и уравнения Фоккера–Планка, нет необходимости в специальной модификации первого конечно-разностного уравнения, либо в граничных условиях между дискретной и непрерывной формулировками, в отличие от численных методов работ [87] и [93], соответственно.

Суммирование в уравнениях (6.17) и (6.21) заменяется численным интегрированием, используя формулу трапеций

$$\frac{dC_A}{dt} = - \sum_{i=2}^{M-1} x_i \frac{df_i}{dt} \Delta z_i, \quad \Delta z_i = 0,5(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}), \quad (6.29)$$

$$k^2 = k_0^2 + \frac{4\pi}{\omega} \sum_{i=2}^{M-1} R_i f_i (1 - p_i) \Delta z_i. \quad (6.30)$$

Задача Коши для системы ОДУ (6.28) и (6.29) может быть решена с помощью стандартного численного пакета. Трудность, с которой приходится сталкиваться на практике, состоит в том, что система является жесткой. Это характерная черта такого типа уравнений эволюции. Дело в том, что совокупность мелких кластеров примеси и концентрация вакансий очень быстро подстраиваются к медленным изменениям параметров системы, которые контролируются большими кластерами и выделениями. В этом разделе используется пакет RADAU, который был создан для жестких и дифференциально-алгебраических задач [101]. Этот пакет основан на неявном методе Рунге–Кутты переменного порядка с адаптивным шагом по времени. Стабильность и высокий порядок делают этот метод пригодным для больших систем жестких ОДУ.

Необходимо сделать несколько замечаний о выборе размера  $N$  кластеров, для которых используются исходные кинетические уравнения (6.9)-(6.11). Как будет видно из результатов моделирования, представленных ниже, в области малых размеров быстро формируется квазистационарное распределение кластеров примеси. Это распределение, как функция размера кластера, резко уменьшается от значения концентрации димеров до величин на несколько порядков меньше. Существует щель в распределении кластеров примеси, которая отделяет распределение мелких кластеров и распределение больших выделений. Следуя Френкелю [110, 197], будем называть распределение мелкодисперсных кластеров,

которые непрерывно зарождаются и распадаются, гетерофазными флуктуациями (ГФ) [64, 161]. Ширина размера области ГФ зависит от параметров материала и температуры. В частности, она увеличивается с уменьшением энергии поверхности раздела фаз [161]; и этот эффект особенно явно выражен в случае когерентных выделений, которые обладают низкой энергией поверхности раздела фаз. Это означает, что ГФ могут вносить значительный вклад в полный баланс атомов примеси и влиять на кинетику больших выделений. Очевидно, для корректного описания стадии зарождения и кинетики ГФ значение  $N$  должно быть выбрано вне области ГФ. Именно в области ГФ разложение функции распределения в ряд Тейлора по размеру кластера не справедливо; следовательно, в этой области будем использовать дискретные уравнения (6.9)-(6.11) или уравнение (6.28) на равномерной сетке с шагом  $\Delta x_i = 1$ . Так как кинетика ГФ является быстрой, оптимальное количество  $N$  равноотстоящих точек сетки ( $\Delta x_i = 1, i \leq N$ ) может быть оценено при помощи быстрого моделирования низкодозного облучения, используя завышенное прикидочное значение  $N$ .

#### 6.4. Результаты моделирования

При моделировании условия облучения и содержание примеси были выбраны таким образом, что когерентные выделения являются устойчивыми, а некогерентные – неустойчивыми (см. рис. 6.2). Поэтому ожидается, что в этой области фазовой диаграммы после длительного облучения сформируется распределение полукogerентных выделений.

Параметры материала, использованные для моделирования, перечислены в табл. 6.1. Для простоты энергия некогерентной межфазной границы считается такой же, как и для когерентной межфазной границы. Этот набор параметров уже использовался для модельных расчетов радиационно-модифицированной фазовой диаграммы Zr-Nb сплава [64].

На рис. 6.3 показана скорость роста выделения (6.8) в зависимости от радиуса выделения. Видно, что малое выделение не может вырасти до размеров бóльших, чем устойчивый размер, в то время как большое некогерентное выделение должно раствориться до размера устойчивого выделения.

Таблица 6.1

**Параметры материала, использованные в расчетах эволюции функции распределения выделений**

Параметр	Величина
Температура, К	600
Скорость генерации свободно-мигрирующих ТД $K, \text{сна}/\text{с}$	$10^{-7}$
Эффективность каскадного перемешивания $d_{mix}, \text{нм}^2$	4

Параметр	Величина
Атомный объем $\omega$ , м <sup>3</sup>	$2,4 \times 10^{-29}$
Константа скорости рекомбинации $\alpha_R$ , м <sup>2</sup>	$3 \times 10^{20}$
Начальная мощность стоков $k_0^2$ , м <sup>-2</sup>	$5 \times 10^{14}$
Равновесная концентрация вакансий $C_v^e$ , ат. доли	$0,54 \exp(-1,8 \text{эВ}/k_B T)$
Коэффициент диффузии вакансий $D_v$ , м <sup>2</sup> /с	$1,67 \times 10^{-4} \exp(-1,37 \text{эВ}/k_B T)$
Равновесная концентрация мономеров $C_A^R$ , ат%	0,5
Полное содержание примеси $Q$ , ат%	2,5
Межфазная энергия $\gamma$ , Дж/м <sup>2</sup>	0,1
Параметр потери когерентности (см. (6.7)) $n^*$	75
Радиус потери когерентности $R_{loss}$ , нм	7
Ширина области потери когерентности $\Delta n$	$10^4$

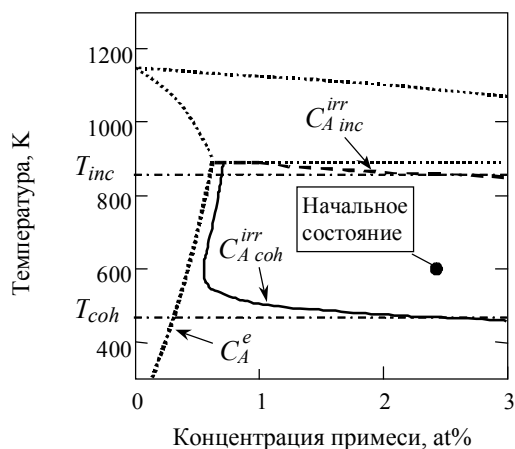


Рис. 6.2. Радиационно-модифицированная фазовая диаграмма модельного сплава, рассчитанная для случая каскадообразующего облучения без сегрегационных эффектов [64] (параметры материала указаны в табл. 6.1). Равновесная фазовая диаграмма реального Zr-Nb сплава показана пунктиром.

Начальное состояние сплава, указанное на диаграмме, соответствует устойчивому когерентному выделению и неустойчивому некогерентному выделению. Равновесная концентрация подвижных мономеров и радиационно-модифицированные растворимости (когерентная и некогерентная) обозначены  $C_A^e$ ,  $(C_A^{irr})_{coh}$  и  $(C_A^{irr})_{inc}$ , соответственно

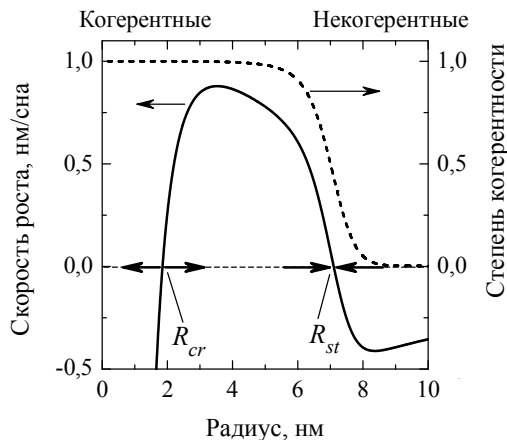


Рис. 6.3. Зависимость от радиуса скорости роста (сплошная линия) и степени когерентности (6.7) (пунктирная линия). Скорость роста некогерентного выделения является отрицательной. Концентрация мономеров примеси  $C_A = 0,8at\%$ .  $R_{cr}$  и  $R_{st}$  — критический и устойчивый радиусы, соответственно

#### 6.4.1. Сплав, отожженный на твердый раствор

Рассмотрим гомогенное зарождение выделений и эволюцию их распределения по размерам в отожженном на твердый раствор сплаве при каскадообразующем облучении. В исходном состоянии матрица содержит только мономеры примеси с концентрацией  $C_A = Q = 2,5at\%$ . Задача Коши для системы ОДУ (6.28) была решена в области размеров от димеров до выделений, содержащих  $8,5 \times 10^4$  атомов примеси (радиус  $\sim 7,8$  нм). Сетка (6.25) с увеличивающимся шагом ( $N = 50$  и  $\varepsilon = 5 \times 10^{-3}$ ) использовалась вплоть до радиуса кластера  $0,7R_{loss}$ , при котором  $\Delta x = 105,11$ . Для размеров кластеров  $R > 0,7R_{loss}$  использовался уменьшающийся шаг сетки с  $\varepsilon = -10^{-3}$ , потому что в этой области размеров ожидалось формирование узкой функции распределения. Выбранная сетка позволила уменьшить общее количество ОДУ, решаемых одновременно, до 1923.

На рис. 6.4 показана функция распределения кластеров и выделений примеси, которая определена через радиус кластера:

$$F(R, t) = \frac{3}{\omega} \left( \frac{4\pi}{3\omega} \right)^{1/3} n^{2/3} f(n, t). \quad (6.31)$$

Видно, что стадия зарождения заканчивается очень быстро и после короткого переходного периода формируется квазистационарное распределение малых кластеров ( $R < 1$  нм). Передний фронт распределения

движется со временем, но он не может оказаться в области некогерентных выделений, где дрейфовая скорость  $A(x)$  отрицательна. В результате образуется узкое распределение полугогерентных выделений в окрестности радиуса 6 нм.

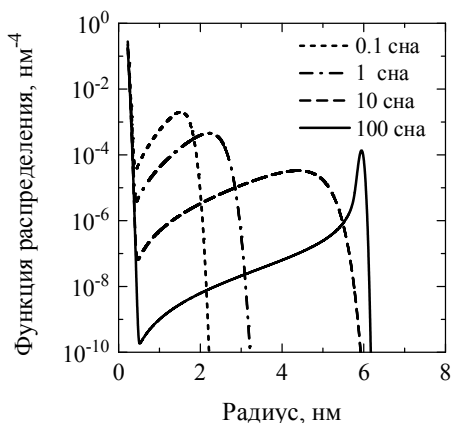


Рис. 6.4. Функция распределения кластеров и выделений примеси, которые формируются в твердом растворе при облучении до 100 сна. Доза определена как  $Kt$

Для анализа результатов моделирования вся совокупность выделений была разделена на две группы: а) малые кластеры (ГФ), которые содержат меньше чем  $n^* = 75$  атомов ( $R < R^* = 0,75$  нм); и б) большие выделения.

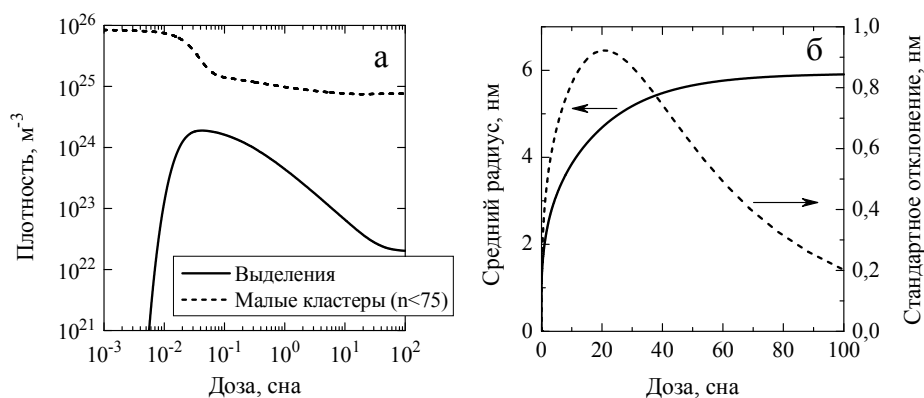


Рис. 6.5. Дозная зависимость средних параметров кластеров примеси в твердом растворе под облучением: а) плотность выделений (сплошная линия) и ГФ (пунктирная линия); б) средний радиус выделений и стандартное (среднеквадратичное) отклонение распределения выделений

На рис. 6.5а показана дозная зависимость плотности ГФ  $N_{hf}$  и плотность выделений  $N_p$ .

$$N_{hf} = \frac{1}{\omega} \sum_{i=2}^{j^*} f(x_i, t) \Delta z_i \approx \int_{R_2}^{R^*} F(R, t) dR, \quad (6.32)$$

$$N_p = \frac{1}{\omega} \sum_{i=i^*}^M f(x_i, t) \Delta z_i \approx \int_{R^*}^{\infty} F(R, t) dR, \quad (6.33)$$

где  $R_2$  – радиус димера.

Плотность ГФ слабо зависит от дозы, в то время как совокупность больших выделений участвует в процессе, похожем на созревание Оствальда, то есть плотность выделений уменьшается (рис. 6.5а).

Приблизительно при 40 сна сплав достигает медленно-эволюционирующего состояния: плотность выделений и их средний радиус стремятся к стационарным значениям (рис. 6.5). Средний радиус выделения определен как

$$R_{mean} = \frac{1}{\omega N_p} \sum_{i=i^*}^M f(x_i, t) R(x_i) \Delta z_i \approx \frac{1}{N_p} \int_{R^*}^{\infty} F(R, t) R dR. \quad (6.34)$$

Рис. 6.5б показывает также дозную зависимость среднеквадратичного отклонения  $\sigma$

$$\sigma^2 = \frac{1}{\omega N_p} \sum_{i=i^*}^M f(x_i, t) (R(x_i) - R_{mean})^2 \Delta z_i \approx \frac{1}{N_p} \int_{R^*}^{\infty} F(R, t) (R - R_{mean})^2 dR, \quad (6.35)$$

которая связана с шириной распределения выделений. Видно, что распределение сужается без признаков насыщения при 100 сна.

Объемные доли выделений, ГФ и мономеров примеси после 10 сна фактически не изменяются (рис. 6.6). Для параметров материала, использованных здесь, после окончания стадии зарождения объемная доля ГФ мала и составляет 0,04 ат%. В конечном состоянии твердый раствор остается пересыщенным, то есть концентрация мономеров примеси  $C_A = 1,4$   $C_A^e = 0,7$  ат%.

Было обнаружено, что с уменьшением межфазной энергии кластеров объемная доля ГФ увеличивается, в то время как скорость распада твердого раствора уменьшается. Причина состоит в том, что при  $T = 600$  К в рассматриваемом модельном материале главная движущая сила перераспределения примеси между когерентными кластерами – это тепловое испусканием атомов примеси, которое контролируется межфазной энергией (см. уравнение (6.3)). При меньших величинах межфазной

энергии малые кластеры более устойчивы термически, и их объемная доля выше. Полная мощность стоков увеличивается с дозой из-за роста полукогерентных выделений, которые являются стоками для ТД (рис. 6.7).

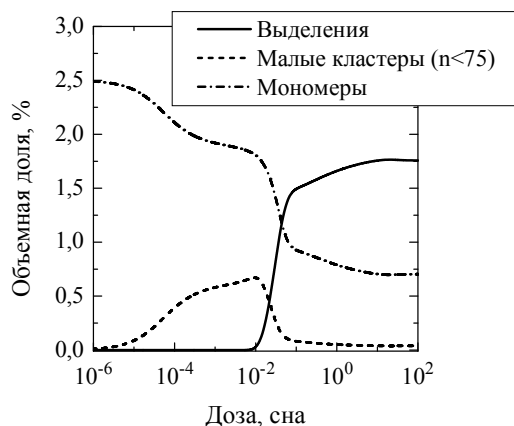


Рис. 6.6. Дозные зависимости объемных долей выделений, ГФ (малые кластеры,  $n < 75$ ) и мономеров примеси

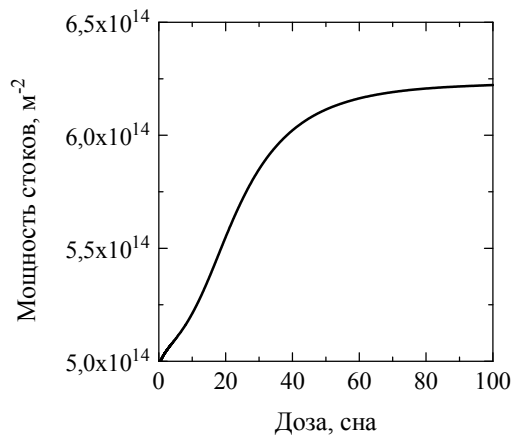


Рис. 6.7. Дозная зависимость полной мощности стоков в облучаемом твердом растворе

#### 6.4.2. Состаренный сплав

В этом разделе приводятся результаты моделирования каскадно-индуцированного уменьшения размеров термически устойчивых некогерентных выделений, существующих в сплаве без облучения.

Пусть в исходном состоянии сплав пересыщен  $C_A = 1,25C_A^e$ , содержит некогерентные выделения среднего радиуса  $R_0 = 11$  нм

и плотностью  $N_0 = 3 \times 10^{21} \text{ м}^{-3}$ . Полное содержание примеси в сплаве –  $Q = 2,5 \%$ . Начальное распределение по размерам было выбрано в форме распределения Лифшица–Слэзова [113, 114], которое обычно наблюдается в термически состаренных сплавах

$$F_0(R) = \frac{N_0}{R_0} g\left(\frac{R}{R_0}\right) \quad (6.36)$$

$$g(u) = \frac{4}{9} u^2 \left(\frac{3}{3+u}\right)^{\frac{7}{3}} \left(\frac{1,5}{1,5-u}\right)^{\frac{11}{3}} \exp\left(-\frac{u}{1,5-u}\right).$$

Рис. 6.8 показывает функцию распределения вместе с сеткой, использованной в расчетах. Из-за каскадно-индуцированного растворения некогерентных выделений распределение по размерам сдвигается в область меньших размеров. В то же время концентрация мономеров увеличивается намного выше равновесной концентрации мономеров (см. рис. 6.9), что вызывает зарождение и рост когерентных выделений. В результате образуется бимодальная функция распределения. В конечном итоге ансамбль выделений эволюционирует к очень узкому распределению полукogerентных выделений (рис. 6.8).

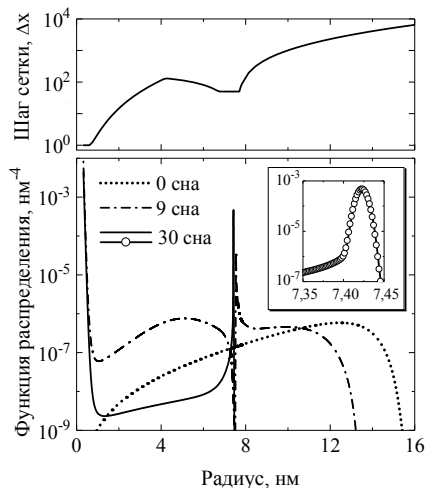


Рис. 6.8. Эволюция функции распределения выделений и кластеров примеси в состаренном сплаве при облучении до 30 нА. В верхней части рисунка показана сетка, использованная в расчетах. Увеличивающийся шаг сетки ( $\varepsilon = 10^{-2}$ ) использовался для радиусов кластеров  $R < 0,6R_{loss}$  и  $R > 1,1R_{loss}$ .

Мелкая сетка с равноотстоящими точками использовалась в окрестности устойчивого радиуса, чтобы правильно смоделировать пик распределения по размерам, который показан на вставке

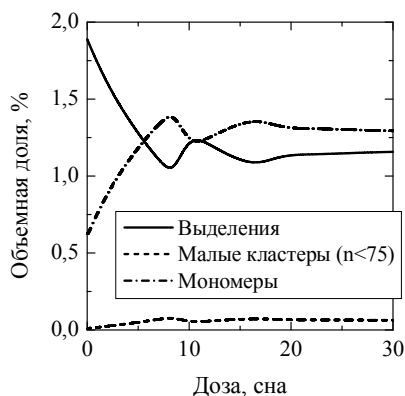


Рис. 6.9. Дозная зависимость объемной доли выделений, ГФ и мономеров примеси

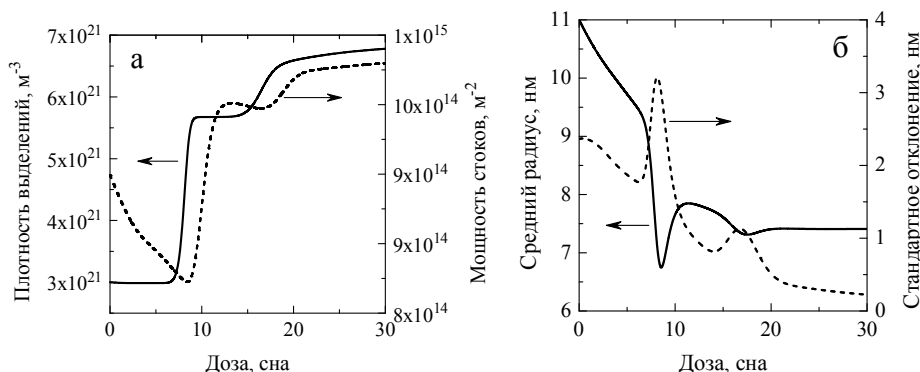


Рис. 6.10. Эволюция средних параметров кластеров примеси в состаренном сплаве под облучением: а) плотность выделений (сплошная линия) и полная мощность стоков (пунктирная линия); б) средний радиус выделений (сплошная линия) и среднее квадратичное отклонение (пунктирная линия). Среднее квадратичное отклонение увеличивается, когда зарождаются новые кластеры

Дозные зависимости плотности выделений и их среднего радиуса показаны на рис. 6.10. Приблизительно при 6 сна плотность выделений быстро увеличивается из-за зарождения мелких когерентных выделений. Интересно, что вторая, более гладкая, волна зарождения новых когерентных частиц наблюдается приблизительно при 15 сна. Причина состоит в том, что гомогенное зарождение является лавинообразным процессом, который начинается, когда в материале создается достаточно высокая пересыщенность примеси вследствие каскадного растворения неустойчивых выделений. Дозные зависимости мощности стоков и среднее квадратичное отклонение являются немонотонными из-за растворения больших выделений и зарождения мелких выделений (кластеров) (рис. 6.10). Начало зарождения и увеличение объемной доли выделений коррелирует с поведением концентрации мономеров примеси (рис. 6.10). В конечном

состоянии объемная доля подвижных мономеров примеси выше, чем объемная доля выделений.

Здесь для моделирования было выбрано начальное распределение в форме Лифшица–Слэзова. Было проверено, что для сходных значений начального среднего радиуса и плотности выделений конечные параметры распределения выделений нечувствительны к изменениям формы начального распределения выделений.

### 6.4.3. Влияние исходного состояния на асимптотическое поведение облучаемого сплава

Численные результаты, представленные выше, показывают, что и в отожженном на твердый раствор сплаве, и в состаренном сплаве под облучением формируются узкие медленно-эволюционирующие распределения полукогерентных выделений. Однако квазистационарные состояния в этих двух сплавах отличаются, то есть отличаются значения среднего радиуса выделений и их плотности. На первый взгляд, конечное асимптотическое состояние не должно зависеть от исходного состояния сплава. Чтобы объяснить эту зависимость, рассмотрим рис. 6.11. Видно, что все выделения накопились в точке устойчивого размера, где скорость роста выделения обращается в ноль. В случае твердого раствора критический и устойчивый радиус расположены близко друг к другу; в случае состаренного сплава эти два радиуса значительно отличаются.

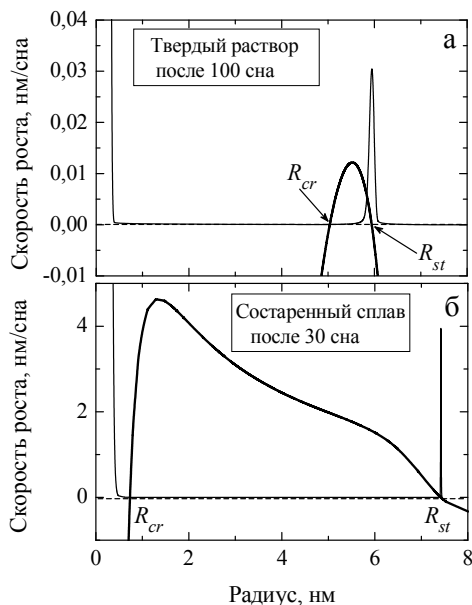


Рис. 6.11. Зависимость скорости роста выделения (толстая сплошная линия) от размера и функции распределения выделений (тонкие сплошные линии) в отожженном на твердый раствор сплаве (а) и в состаренном сплаве (б).

Функции распределения нормированы на произвольные значения

Критический и устойчивый радиусы  $R_{cr}$  и  $R_{st}$  приближаются друг к другу, если концентрация мономеров примеси уменьшается вследствие зарождения и роста кластеров примеси. В случае состаренного сплава вначале каскады растворяют большие выделения, что приводит к увеличению пересыщенности примеси. Приблизительно после 7 сна, при достаточно высокой пересыщенности, начинается процесс зарождения, который длится 2 сна, после чего скорость зарождения значительно падает (рис. 6.10а), несмотря на то, что раствор остается пересыщенным (рис. 6.9). В то же время, вновь зародившиеся растущие кластеры ( $R_{cr} < R < R_{st}$ ) поглощают только малую долю мономеров примеси. Это означает, что пересыщенность не уменьшается существенно в течение эволюции, то есть  $R_{cr}$  и  $R_{st}$  остаются разделенными даже после второй волны зарождения, которая наблюдается после 15 сна (рис. 6.10а).

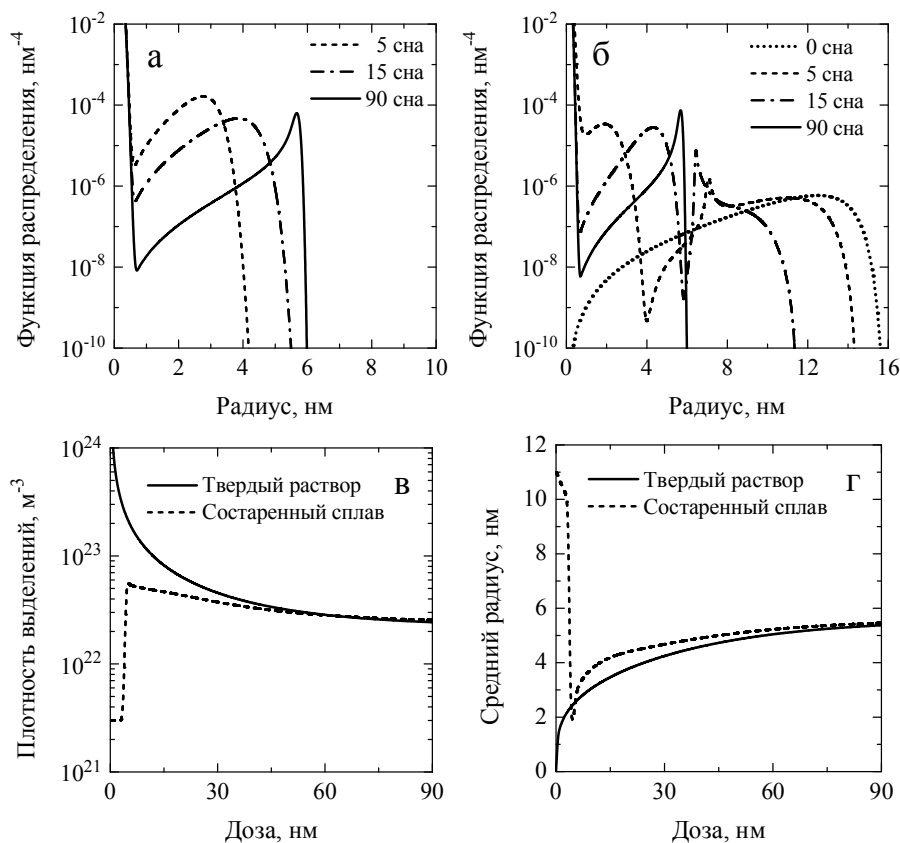


Рис. 6.12. Эволюция ансамбля выделений для различных исходных состояний сплава, межфазная энергия  $\sigma = 5 \times 10^{-2} \text{ Дж/м}^2$ . Эволюция функций распределения выделений и кластеров примеси в твердом растворе (а) и в состаренном сплаве (б). Высокодозные значения плотности выделений (в) и среднего радиуса (г) не зависят от исходного состояния сплава

Таким образом, из-за сильной зависимости скорости зарождения от пересыщенности примеси асимптотическое поведение облучаемого сплава зависит от исходного состояния сплава: начинается ли моделирование с состояния твердого раствора или с состояния состаренного сплава.

Другими словами, в зависимости от степени конкуренции между зарождением, ростом выделений и каскадным растворением, система оказывается кинетически арестованной в различных квазистационарных асимптотических состояниях. С практической точки зрения, готовя определенное исходное состояние сплава, можно выбрать нужное квазистационарное асимптотическое состояние и время достижения этого состояния.

Для проверки этого объяснения было проведено моделирование эволюции сплава при более высокой скорости зарождения, то есть для меньшей величины межфазной энергии,  $\sigma = 5 \times 10^{-2}$  Дж/м<sup>2</sup>. Рис. 6.12 показывает, что в этом случае асимптотическое состояние сплава не зависит от исходного состояния сплава.

### 6.5. З а в и с и м о с т ь ш и р и н ы с т а ц и о н а р н о й ф у н к ц и и р а с п р е д е л е н и я о т п а р а м е т р о в к а с к а д о в

Так как в устойчивой точке, где накапливаются все выделения, дрейфовая скорость  $A(x)$  обращается в ноль (см. уравнение (6.22)), на поздней стадии эволюции диффузия в пространстве размеров определяет ширину распределения по размерам и время достижения квазистационарного состояния. Выше использовалась упрощенная модель каскадного растворения. Предполагалось, что вследствие каскадов соударений атомы примеси испускаются из выделения поодиночке, подобного термическому испарению. В действительности, каскад может удалить одновременно несколько атомов примеси из выделения или даже может полностью растворить малое выделение/кластер [198]. То есть количество атомов, удаляемых каскадами из выделения, подвержено большим флуктуациям. Обсудим схематически влияние этого эффекта на эволюцию распределения выделений по размерам. Чтобы учесть стохастическую природу каскадно-индуцированного растворения, уравнения (6.10) и (6.11) для больших выделений должны быть переписаны в виде

$$\frac{\partial f(n,t)}{\partial t} = J_{n-1,n}^0 - J_{n,n+1}^0 - f(n,t) \sum_{k=1}^{k_m} W_C(k,n) + \sum_{k=1}^{k_m} W_C(k,n+k) f(n+k,t), \quad (6.37)$$

где  $J_{n-1,n}^0$  – поток кластера в пространстве размеров без каскадных эффектов (см. уравнения (6.11)-(6.13), в которых  $D_{mix}$  нужно положить равным нулю). Другие слагаемые соответствуют каскадному растворению:

$W_C(k, n)$  пропорционально вероятности того, что один каскад удаляет  $k$  атомов примеси из выделения, содержащего  $n$  атомов примеси;  $k_m$  – максимальное число атомов примеси, которые могут быть удалены из выделения одним каскадом. Для большого выделения ( $n \gg k_m$ ) уравнение (6.37) преобразуется путем разложения в ряд Тейлора в уравнение Фоккера–Планка, сходное с (6.22), но с другой дрейфовой скоростью и коэффициентом диффузии в пространстве размеров

$$A(x) = A_0(x) - \sum_{k=1}^{k_m} k W_C(k, n) , \quad (6.38)$$

$$B(x) = B_0(x) + \sum_{k=1}^{k_m} k^2 W_C(k, n) . \quad (6.39)$$

Чтобы правильно описать растворение больших выделений, дрейфовая скорость (6.38) должна быть приблизительно такой же, как и скорость, определенная уравнением (6.23), то есть

$$\sum_{k=1}^{k_m} k W_C(k, n) \cong \frac{4\pi R(n)}{\omega} D_{mix} . \quad (6.40)$$

Что касается вклада каскадов в коэффициент диффузии в пространстве размеров, то его можно оценить следующим образом:

$$\sum_{k=1}^{k_m} k^2 W_C(k, n) \geq \left( \sum_{k=1}^{k_m} W_C(k, n) \right)^{-1} \left( \sum_{k=1}^{k_m} k W_C(k, n) \right)^2 = \bar{k} \frac{4\pi R(n)}{\omega} D_{mix} , \quad (6.41)$$

где

$$\bar{k} = \left( \sum_{k=1}^{k_m} W_C(k, n) \right)^{-1} \left( \sum_{k=1}^{k_m} k W_C(k, n) \right) \quad (6.42)$$

является средним числом атомов примеси, удаляемых одним каскадом из выделения. Согласно уравнению (6.41), каскадный вклад в коэффициент диффузии  $B(x)$  по крайней мере в  $\bar{k}$  раз больше, чем в модели, которая была описана выше. Это означает, что ширина распределения выделений в конечном состоянии должна быть больше. Действительно, в квазистационарном состоянии все выделения накапливаются в окрестности устойчивого размера  $x_{st}$ , где дрейфовая скорость имеет вид

$$A(x) = -a(x - x_{st}) , a = \left| \frac{dA(x_{st})}{dx_{st}} \right| . \quad (6.43)$$

Стационарное решение уравнения Фоккера–Планка в окрестности устойчивой точки имеет вид

$$f(x) = N_p \omega \sqrt{\frac{a}{\pi B(x_{st})}} \exp\left(-\frac{a(x-x_{st})^2}{B(x_{st})}\right). \quad (6.44)$$

Отсюда находим среднеквадратичное отклонение распределения, которое приблизительно соответствует полуширине на половине максимума

$$\sigma = \sqrt{\frac{B(x_{st})}{2a}}. \quad (6.45)$$

Так как в устойчивой точке  $C_A^R \approx C_A^e$ , получаем

$$B(x_{st}) = \frac{4\pi R_{st}}{\omega} D_{mix} \frac{2 + (\bar{k} + 1)\Delta}{\Delta}, \quad (6.46)$$

где  $\Delta = (C_A - C_A^e)/C_A^e$  – пересыщенность. Согласно уравнению (6.46), ширина распределения выделений по размерам увеличивается при учете больших флуктуаций во время каскадного растворения. Соответствующий коэффициент увеличения имеет вид

$$\frac{\sigma_{\bar{k}}}{\sigma_1} = \sqrt{\frac{2 + (\bar{k} + 1)\Delta}{2(1 + \Delta)}} < \sqrt{\frac{\bar{k} + 1}{2}}. \quad (6.47)$$

Предположив, что  $\bar{k} = 100$ , для состаренного сплава (см. раздел 6.4.2) находим, что распределение остается достаточно узким  $\sigma_{100} = 5.6\sigma_1 \approx 1.3 \text{ nm}$ .

## 6.6. В ы в о д ы

В данном разделе показаны важные следствия потери когерентности и продемонстрирован новый численный метод для решения кинетических уравнений эволюции распределения кластеров, начиная с ранней стадии зарождения до поздней асимптотической или квазистационарной стадии.

Получены следующие результаты:

1. Сформулирована модель эволюции смешанной совокупности когерентных, полукогерентных и некогерентных выделений.
2. Предложена новая численная реализация гибридного подхода для моделирования кинетики зарождения и роста кластеров и выделений

новой фазы. В развитом методе гибридный подход используется в комбинации с гибкой сеточной схемой, которая имеет следующие преимущества:

- расстояние между точками сетки можно выбирать в зависимости от особенностей поведения решения;
- в зависимости от задачи, переход от дискретного к непрерывному описанию может быть выбран при произвольном размере кластера;
- дискретное уравнение Фоккера–Планка может быть использовано для размеров кластеров  $n \geq 3$ , то есть сшивка дискретной и непрерывной частей решения достигается автоматически.

3. Потеря когерентности значительно влияет на характер эволюции ансамбля выделений при каскадообразующем облучении. В пересыщенном сплаве превращение выделений в менее когерентное состояние уменьшает скорость диффузионного восстановления, то есть каскадно-индуцированное растворение полукогерентных и некогерентных выделений более эффективно. При температурах, которые могут быть определены из радиационно-модифицированной фазовой диаграммы, конкуренция между зарождением и ростом когерентных выделений, потерей когерентности и каскадно-индуцированным растворением некогерентных выделений приводит к формированию узкого медленно-эволюционирующего распределения полукогерентных выделений.

4. Квазистационарное состояние ансамбля выделений, которое формируется в сплаве после длительного облучения, может зависеть от исходного состояния сплава.

5. Модель этого раздела объясняет следующие экспериментальные наблюдения:

- отсутствие коалесценции и уменьшение размеров выделений меди в сплавах Fe-Cu, облучаемых нейтронами и ионами при низких температурах;
- отсутствие больших некогерентных выделений в Zr-Nb сплавах при реакторном облучении.

Проведенный анализ показывает, что, управляя процессами образования и эволюции ансамбля выделений вторых фаз, можно добиться стабилизации микроструктуры сплава, а следовательно, и его свойств. Такой материал должен обладать повышенной радиационной стойкостью и представляет собой пример материала, обладающего самовозобновляющейся структурой.

Результаты раздела опубликованы в работах [102, 199-204].

## 7. КИНЕТИКА ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СИСТЕМАХ С СИЛЬНЫМИ ГЕТЕРОФАЗНЫМИ ФЛУКТУАЦИЯМИ

Традиционно при рассмотрении кинетики распада пересыщенных метастабильных твердых растворов выделяют три стадии: а) зарождение устойчивых кластеров новой фазы, б) независимый диффузионный рост этих кластеров, в) коалесценция (созревание Оствальда) – рост больших выделений за счет растворения мелких выделений – процесс, который приводит к понижению полной энергии межфазных границ. Существует важная группа сплавов, в которых энергия межфазной границы выделение-матрица является низкой. Обычно такие выделения являются когерентными и достаточно устойчивыми по отношению к коалесценции. Такими сплавами являются суперсплавы на основе никеля [103]; высокопрочные низколегированные стали с добавками меди (HSLA) [104, 105]; сплавы алюминия, легированные скандием [106, 107], и т. д. Вследствие выпадения высокой плотности когерентных, нанометровых частиц эти сплавы обладают высокой прочностью. В зависимости от применения сплава, эффект упрочнения может быть полезным или вредным. Например, выпадение в ферритных сталях корпусов атомных реакторов частиц, обогащенных медью, приводит к упрочнению и охрупчиванию стали [108, 109].

Межфазная энергия выделений влияет на скорость зарождения, рост и коалесценцию выделений. В системе когерентных выделений с низкой межфазной энергией процессы зарождения, роста и коалесценции могут происходить одновременно, что затрудняет интерпретацию поведения сплава. Существующие модели поздней стадии распада рассматривают только крупные выделения и мономеры примеси, в то время как совокупность докритических кластеров игнорируется. Однако даже в пересыщенных твердых растворах, вследствие непрерывного зарождения и распада неустойчивых кластеров, образуется стационарное распределение мелких кластеров. В 1939 г. Френкель назвал это распределение гетерофазными флуктуациями [110, 111]. В разделе 7.1 рассмотрено влияние ГФ на кинетику диффузионно-лимитируемого распада пересыщенных твердых растворов в отсутствие облучения. При низкой межфазной энергии и/или высоких температурах ГФ могут вносить значительный вклад в полный баланс атомов примеси и влиять и на процессы зарождения, и коалесценции.

Основным назначением фазовых диаграмм является предсказание фазовых изменений, которые происходят в сплаве во время эксплуатации при заданных значениях внешних параметров (температуры и мощности облучения). В разделе 7.2 на основании результатов, полученных в предыдущих разделах, рассмотрены пути эволюции фазового состава

облучаемого сплава в различных температурных областях. Показано, что в облучаемом сплаве существует два типа выделений упорядоченной фазы: мелкие недавно зародившиеся выделения (меньше или сравнимые с размерами каскада), которые разрушаются после нескольких попаданий каскадообразующей частицы, и крупные выделения (по сравнению с размером каскада), существующие в сплаве длительное время.

Каждый тип выделений характеризуется своими законами эволюции. Мелкие выделения являются аналогом равновесных ГФ и эффективно увеличивают растворимость примеси, тем самым сужая область устойчивости крупных выделений. Кинетика ГФ в облучаемом сплаве рассмотрена в разделе 7.2.3. Радиационно-ускоренная коалесценция крупных выделений рассмотрена в разделе 7.2.4.

### 7.1. Моделирование кинетики диффузионного распада в системах с сильными гетерофазными флуктуациями (без облучения)

В этом разделе, на основе работы [205], рассмотрено влияние ГФ на кинетику диффузионно-лимитируемого распада пересыщенных твердых растворов в отсутствие облучения. Иерархия уравнений скоростей реакций Беккера–Деринга и численный метод, описанный в разделе 6.3, используются для изучения зарождения и перехода к конечному режиму созревания Оствальда. Согласно результатам моделирования, в пересыщенном твердом растворе в области малых размеров кластеров быстро формируется квазистационарное распределение кластеров. В конце стадии зарождения в распределении кластеров примеси появляется щель, которая отделяет совокупность малых кластеров (ГФ) от распределения крупных выделений. Объемная доля ГФ зависит от параметров материала и температуры. Показано, что ГФ влияют на кинетику зарождения крупных выделений. Однако на поздней стадии распада распределение по размерам демонстрирует скейлинговое поведение, как предсказывает теория коалесценции Лифшица–Слэзова. Рассмотрены некоторые следствия модели, важные для интерпретации экспериментальных данных и оценки параметров сплава.

#### 7.1.1. Описание модели

Пусть бинарный сплав пересыщен по одному из компонентов, который будем называть примесью. Атомы другого типа будем называть матричными. Примесь может образовывать выделения новой фазы, которые будем считать однокомпонентными и сферическими. Рассмотрим гомогенное зарождение выделений новой фазы в рамках модели Беккера–Деринга [112]. Согласно этой модели кинетические уравнения для концент-

раций кластеров  $f(n, t)$  ( $n \geq 2$ ) полностью определены скоростями поглощения атомов примеси кластерами и их испусканием вследствие термического испарения. Предполагается, что подвижны только мономеры примеси. Прямые столкновения кластеров не рассматриваются. Функции распределения кластеров новой фазы удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial f(n, t)}{\partial t} = J_{n-1, n} - J_{n, n+1}, \quad n = 2, 3, \dots, \quad (7.1)$$

$$J_{n-1, n} = W^+(n-1)f(n-1) - W^-(n)f(n), \quad (7.2)$$

где  $f(1, t) \equiv C_1$  – концентрация подвижных мономеров. В диффузионно-лимитируемом случае скорости поглощения мономеров  $W^+(n)$  и  $W^-(n)$  имеют вид

$$W^+(1) = 2 \frac{4\pi}{\omega} R(1)DC_1, \quad (7.3)$$

$$W^+(n) = \frac{4\pi}{\omega} R(n)DC_1, \quad n > 1, \quad (7.4)$$

где  $\omega$  – атомный объем,  $R(n)$  – радиус  $n$ -атомного кластера,  $D$  – коэффициент диффузии атомов примеси. Скорость испускания мономеров  $W^-(n)$  запишем в капиллярном приближении

$$W^-(n) = \frac{4\pi}{\omega} R(n)DC_1^R, \quad n > 1, \quad (7.5)$$

где  $C_1^R$  – термически равновесная концентрация мономеров примеси на границе выделения

$$C_1^R = C_1^e \exp\left(\frac{2\sigma\omega}{Rk_B T}\right), \quad (7.6)$$

где  $C_1^e$  – концентрация мономеров примеси в равновесии с объемной фазой примеси,  $\sigma$  – энергия межфазной границы выделение-матрица. Общее количество атомов примеси сохраняется

$$C_1 + \sum_{n=2}^{\infty} n f(n, t) = Q, \quad (7.7)$$

где  $Q$  – атомная доля атомов примеси.

Твердый раствор пересыщен, если  $C_1 > C_1^e$ . Избыточное количество атомов примеси образует кластеры новой фазы. Из уравнений (7.1) и (7.2) для стационарной скорости зарождения устойчивых кластеров можно получить известное выражение

$$J_{n-1,n} = J = \left[ \sum_{n=1}^{\infty} (W^+(n) f_e(n))^{-1} \right]^{-1}, \quad (7.8)$$

где

$$f_e(n) = \frac{W^+(1) f(1)}{W^+(n)} \prod_{i=2}^n \frac{W^+(i)}{W^-(i)} \quad (7.9)$$

функция распределения, соответствующая вынужденному равновесию  $J_{n-1,n} = 0$ . Функция  $f_e(n)$  имеет минимум в точке критического размера  $n = n_{cr}$ , который удовлетворяет соотношению

$$W^+(n_{cr}) = W^-(n_{cr}). \quad (7.10)$$

Все кластеры, меньшие, чем критический кластер, играют важную роль в зарождении устойчивых растущих выделений. Как известно, в классической теории гомогенного зарождения [195, 206] скорость зарождения зависит, в основном, от значения функции  $f_e(n_{cr})$  в критической точке. В свою очередь, это значение зависит от скоростей образования и распада всех докритических кластеров (см. (7.8)). Это означает, что мелкие кластеры служат «дорогой» для зарождения крупных выделений.

Согласно (7.9), даже устойчивый по отношению к распаду насыщенный раствор ( $n_{cr} = \infty$ ) содержит некоторое равновесное распределение кластеров, которое называют *гетерофазными флуктуациями* [110, 111]. Это означает, что полное количество растворенной примеси больше, чем растворимость мономеров. Следовательно, справедливо следующее определение: *растворимость примеси – это полное равновесное содержание атомов примеси в насыщенном растворе, включая атомы примеси в докритических кластерах, которые образуются и распадаются вследствие флуктуаций*. Именно такое количество примеси переходит в матрицу при контакте с массивной фазой примеси при достижении термодинамического равновесия. Очевидно, сформулированное определение растворимости соответствует линии растворимости на экспериментально построенных фазовых диаграммах сплавов. В капиллярном приближении, которое используется здесь, растворимость примеси имеет вид

$$C^e = C_1^e + \sum_{n=2}^{\infty} n f_e(n) = C_1^e \left[ 1 + 2 \sum_{n=2}^{\infty} n^{2/3} \exp \left( -\beta \sum_{i=2}^n i^{-1/3} \right) \right], \quad (7.11)$$

где  $\beta = \frac{2\omega}{R(1)k_B T} \sigma$  – безразмерная межфазная энергия.

Рис. 7.1 показывает относительные вклады мономеров и ГФ (второе слагаемое в уравнении (7.11)) в растворимость примеси. Видно, что при малых величинах параметра  $\beta$  концентрация мономеров низка. В сплавах с малыми величинами параметра  $\beta$  большая часть атомов примеси принадлежит неподвижным кластерам и непосредственно не участвует в диффузионном распаде. Это означает, что стандартные модели зарождения и коалесценции справедливы для систем с  $\beta \gg 1$ ; их применение к системам с малыми величинами  $\beta$  может привести к ошибочной интерпретации экспериментальных данных.

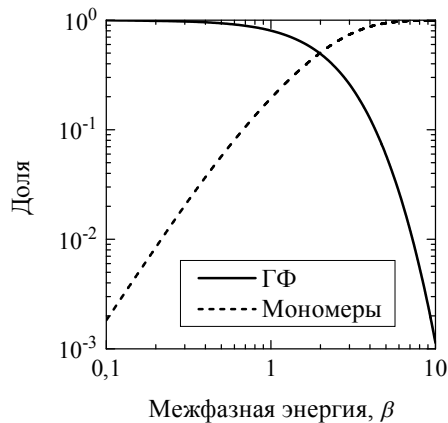


Рис. 7.1. Зависимость относительных вкладов мономеров и ГФ в растворимости примеси от безразмерной межфазной энергии

Чтобы исследовать влияние ГФ на гомогенное зарождение выделений и коалесценцию, рассмотрим эволюцию функции распределения частиц новой фазы на всех временах фазового превращения с помощью численного метода, описанного в [200] (раздел 6.3). Для уменьшения количества уравнений, решаемых одновременно, исходная конечно-разностная система уравнений (7.1) и (7.2) используется до 200 атомов в кластерах; для больших размеров уравнения (7.1) и (7.2) преобразуются к дифференциальному уравнению в частных производных типа Фоккера–Планка, так же, как это было сделано в разделе 6.3. Комбинированная система – дискретные уравнения и непрерывное уравнение – решаются численно с помощью МЛ [100] на пространственной сетке с нарастающим шагом.

### 7.1.2. Результаты моделирования

При моделировании удобно использовать безразмерное время

$$\tau = 4\pi R(1)\omega^{-1}D t. \quad (7.12)$$

При такой замене уравнения (7.1), (7.2) сохраняют свой вид, а скорости поглощения и испарения мономеров приобретают вид

$$W^+(n) = n^{1/3} C_1, \quad W^-(n) = n^{1/3} C_1^e \exp(\beta n^{-1/3}). \quad (7.13)$$

Полная растворимость примеси была зафиксирована  $C^e = 0,2$  ат%, затем, используя уравнение (7.11), рассчитывалась равновесная концентрация мономеров  $C_1^e$  примеси как функция параметра  $\beta$ . В исходном состоянии матрица содержит только мономеры примеси с концентрацией  $Q = 2$  ат%. Рис. 7.2 показывает формирование функции распределения по размерам в пересыщенном твердом растворе в процессе старения. Для удобства функция распределения определена через радиус частиц новой фазы.

$$F(R, \tau) = \frac{3}{\omega} \left( \frac{4\pi}{3\omega} \right)^{1/3} n^{2/3} f(n, \tau), \quad (7.14)$$

где  $\omega = 1,2 \times 10^{29} \text{ м}^{-3}$ .

Для анализа результатов моделирования совокупность частиц разделена на две группы: а) малые кластеры (ГФ,  $R < R^* = 1$  нм); б) большие выделения. Плотность ГФ  $N_{hf}$ , плотность выделений  $N_p$  и средний радиус  $R_p$  выделений определены соотношениями

$$N_{hf} = \int_{R_2}^{R^*} F(R, \tau) dR, \quad N_p = \int_{R^*}^{\infty} F(R, \tau) dR, \quad R_p = \frac{1}{N_p} \int_{R^*}^{\infty} R F(R, \tau) dR, \quad (7.15)$$

где  $R_2$  – радиус димера.

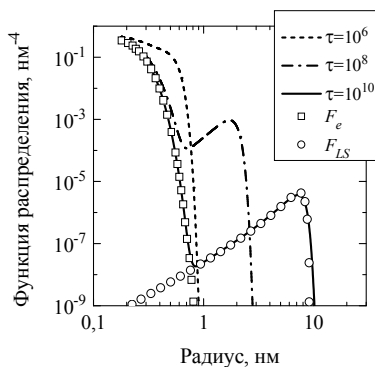


Рис. 7.2. Эволюция функции распределения при  $\beta = 0,5$  в зависимости от времени старения. Результаты численного моделирования показаны линиями.  $\square$  – квазистационарное распределение ГФ (см. уравнения (7.9), (7.14)) при  $\tau = 10^{10}$ ;  $\circ$  – распределение Лифшица–Слёзова (7.16) при  $\tau = 10^{10}$

Видно, что в области малых размеров формируется квазистационарное распределение кластеров примеси (рис. 7.2). В конце стадии зарождения образуется щель в распределении частиц примеси, которая отделяет совокупность малых кластеров (ГФ) от распределения больших растущих выделений. Ширина области ГФ зависит от межфазной энергии и температуры; она увеличивается с уменьшением параметра  $\beta$ .

Функция распределения малых кластеров, полученная с помощью численного моделирования, хорошо согласуется с уравнениями (7.9) и (7.14). Передний фронт распределения движется в область больших размеров, большие выделения участвуют в коалесценции. На поздней стадии старения форма функции распределения выделений близка к асимптотическому решению Лифшица–Слёзова в теории коалесценции [113]

$$F_{LS}(R, \tau) = \frac{N_p(\tau)}{R_p(\tau)} g\left(\frac{R}{R_p(\tau)}\right), \quad (7.16)$$

$$g(u) = \frac{4}{9} u^2 \left(\frac{3}{3+u}\right)^{\frac{7}{3}} \left(\frac{1,5}{1,5-u}\right)^{\frac{11}{3}} \exp\left(-\frac{u}{1,5-u}\right), \quad u < 1,5. \quad (7.17)$$

На рис. 7.3 показаны временные зависимости среднего радиуса и плотности выделений, рассчитанные для нескольких значений параметра  $\beta$ , который пропорционален межфазной энергии. Видно, что изменение параметра  $\beta$  сильно влияет на начальную стадию диффузионного распада (зарождение) и переход к более поздней стадии коалесценции.

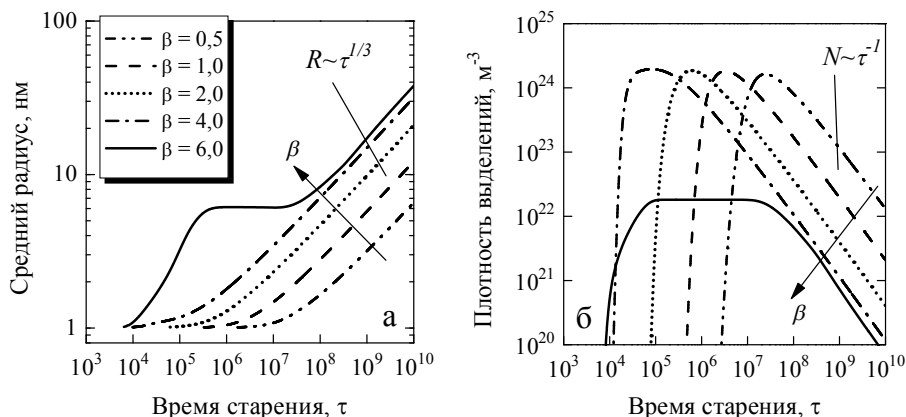


Рис. 7.3. Временная зависимость среднего радиуса выделений (а) и плотности выделений (б). Стрелками показано направление увеличения межфазной энергии

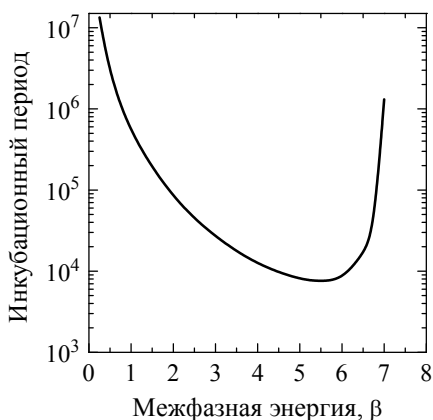


Рис. 7.4. Зависимость инкубационного периода зарождения от межфазной энергии. Инкубационный период определен как момент времени, когда плотность выделений достигает значения  $\sim 10^{20} \text{м}^{-3}$  и идет интенсивное зарождение выделений (см. рис. 7.3)

Интенсивное зарождение выделений начинается после некоторого инкубационного периода. Инкубационный период зарождения немонотонно зависит от межфазной энергии (рис. 7.4). При  $\beta > 6$  инкубационный период резко возрастает, что соответствует представлениям классической теории зарождения [195, 206], согласно которой критический размер для зарождения линейно растет с ростом межфазной энергии, а инкубационный период растет как  $\beta^3$ .

Важным результатом моделирования является то, что при  $\beta < 5$  инкубационный период для зарождения увеличивается с уменьшением межфазной энергии; другими словами, несмотря на низкие значения критического размера, система эволюционирует очень медленно. Классическая теория гомогенного зарождения предсказывает полностью противоположное поведение, и ее использование может привести к ошибочным заключениям. Чтобы понять, в чем здесь дело, в качестве примера обсудим некоторые результаты работы [97]. В этой работе численная модель распада Кампманна и Вагнера [95] (КВН-модель) использовалась для исследования влияния межфазной энергии, пересыщенности примеси и диффузионной подвижности на кинетику распада в бинарных сплавах. В КВН-модели кинетика ГФ не рассматривается. Вместо этого, чтобы найти скорость зарождения как функцию времени и концентрации примеси, используется классическая теория зарождения. Для моделирования кинетики распада непрерывная эволюция во времени рассматривается на множестве малых шагов по времени. На каждом шаге новые устойчивые кластеры зарождаются в соответствии с классической скоростью зарождения; для существующих выделений используется детерминистическое описание. Радиус недавно зародившейся группы выделений полагается немного большим,

чем критический радиус, чтобы позволить этим выделениям расти. Затем текущее распределение по размерам используется для вычисления объемной доли выделений и мгновенной средней концентрации мономеров примеси. На следующем шаге обновленная концентрация мономеров используется для вычисления скорости зарождения и детерминированных скоростей роста групп выделений. Следует подчеркнуть, что и модель этого раздела, и КВН-модель основана на одних и тех же физических предположениях. Однако, в отличие от результатов, изображенных на рис. 7.3 и 7.4, в работе [97] в рамках КВН-модели было получено, что инкубационный период распада значительно уменьшается, когда параметр  $\beta$  уменьшается от 5 до 0,8. Причина несоответствия с результатами численного моделирования этого раздела состоит в том, что КВН-модель физически не оправдана для систем, в которых  $\beta \lesssim 1$ , то есть для систем с большой объемной долей ГФ. Одно из главных допущений КВН-модели было сформулировано самими авторами этой модели: те флуктуации, что сформировались на стадии зарождения и которые не растут больше критического размера, не влияют существенно на кинетику распада; то есть количество флуктуаций с докритическими размерами и, следовательно, доля атомов примеси, содержащихся в них, — пренебрежимо малая величина [95].

Согласно рис. 7.3, независимо от межфазной энергии на больших временах асимптотическое поведение функции распределения по размерам согласуется с теорией коалесценции Лифшица–Слэзова [113], то есть  $R_p \propto \tau^{1/3}$  и  $N_p \propto \tau^{-1}$ .

В случае сильных ГФ ( $\beta = 0,5$ ) атомная доля ГФ остается постоянной длительное время — на временах от  $10^2$  до времен  $10^7$  и падает на временах порядка  $10^8$ , когда стадия зарождения заканчивается (при этом объемная доля выделений близка к максимальной, рис. 7.5б). В системе с малым вкладом ГФ ( $\beta = 6$ ) стадия зарождения заканчивается значительно раньше — на временах порядка  $10^6$  (рис. 7.5а). Причина состоит в том, что при низкой межфазной энергии движущая сила для эволюции системы является низкой, так как большое количество мелких выделений с большой суммарной межфазной поверхностью не сильно увеличивает общую энергию системы.

Заметим, что в конечном состоянии при  $\tau = 10^{10}$  в системе с сильными ГФ концентрация подвижных мономеров меньше, чем объемная доля ГФ (рис. 7.5б). Это следует учитывать при использовании формул теории Лифшица–Слэзова для экспериментальной оценки параметров материала, например межфазной энергии. На больших временах средний радиус выделения удовлетворяет асимптотическому соотношению [113]

$$R_p^3 \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} \frac{8}{9} \frac{\sigma \omega}{k_B T} D C_1^e t, \quad (7.18)$$

которое хорошо согласуется с результатами моделирования этого раздела.

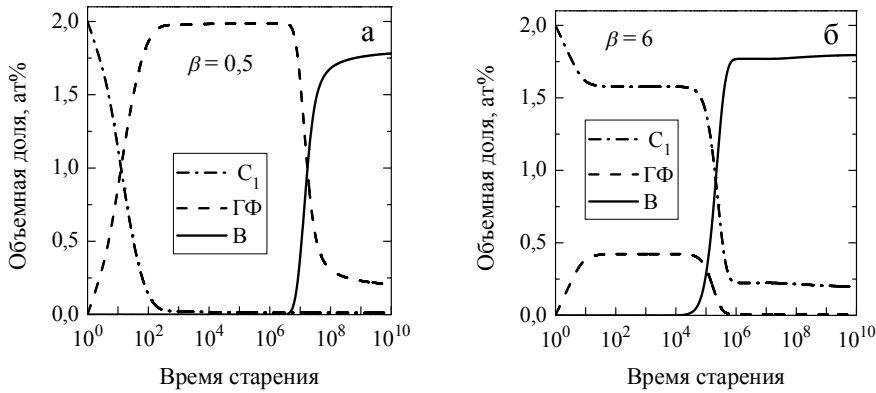


Рис. 7.5. Временная зависимость атомных долей мономеров ( $C_1$ ),  $\Gamma\Phi$  и выделений ( $V$ ) в системе с сильными  $\Gamma\Phi$  при  $\beta = 0,5$  (а) и в системе без  $\Gamma\Phi$  при  $\beta = 6$  (б)

Следует иметь в виду, что соотношение (7.18) содержит равновесную концентрацию мономеров, но не полную растворимость примеси, которые могут значительно отличаться в системах с сильными  $\Gamma\Phi$ . Автору не удалось найти в литературе обсуждение этого вопроса.

Закон сохранения вещества (7.7) можно переписать в виде

$$C_1 + \sum_{n=2}^{\infty} n f(n, t) = C_1 + 2C_1^e \sum_{n=2}^{n^*} n^{2/3} \left( \frac{C_1}{C_1^e} \right)^n \exp \left( -\beta \sum_{i=2}^n i^{-1/3} \right) + \frac{4\pi}{3} \int_{R^*}^{\infty} R^3 F(R, \tau) dR, \quad (7.19)$$

где  $n^* = \frac{4\pi}{3\omega} R^{*3}$  выбирается в области, которая разделяет  $\Gamma\Phi$  и большие выделения. Второе слагаемое в правой части описывает вклад  $\Gamma\Phi$  и не учитывается в теории коалесценции Лифшица–Слэзова. На асимптотической стадии

$$C_1 + \sum_{n=2}^{\infty} n f(n, t) \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} C^e + \frac{4\pi}{3} \int_{R^*}^{\infty} R^3 F(R, \tau) dR, \quad (7.20)$$

а функция распределения с хорошей точностью описывается уравнением непрерывности

$$\frac{\partial F(R, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial R} (\dot{R} F(R, t)) = 0, \quad (7.21)$$

$$\dot{R} = \frac{D}{R} \left[ C_1 - C_1^e \left( 1 + \frac{2\sigma\omega}{Rk_B T} \right) \right]. \quad (7.22)$$

Было проведено также моделирование кинетики распада в системе с межфазной энергией, которая зависит от размера частицы новой фазы. Известно, что по мере роста частиц новой фазы межфазная энергия обычно увеличивается. Межфазная энергия увеличивается также, когда выделение теряет когерентность в процессе роста [207]. Это означает, что в реальных системах малые кластеры могут иметь низкую межфазную энергию, от которой зависит доля ГФ, инкубационный период и скорость зарождения, в то время как большие наблюдаемые выделения имеют большее значение межфазной энергии, которое контролирует коалесценцию.

На рис. 7.6 показана зависимость межфазной энергии, использованная для моделирования кинетики распада. На рис. 7.7 показаны зависимости среднего радиуса и плотности выделений от времени, рассчитанные для нескольких значений параметра  $\beta_{HF}$  при фиксированном значении межфазной энергии крупных выделений  $\beta_p$ . Межфазная энергия ГФ контролирует процесс зарождения, поэтому в области значений межфазной энергии  $\beta < 4$  зависимость инкубационного периода от  $\beta_{HF}$  такая же, как и зависимость, изображенная на рис. 7.4.

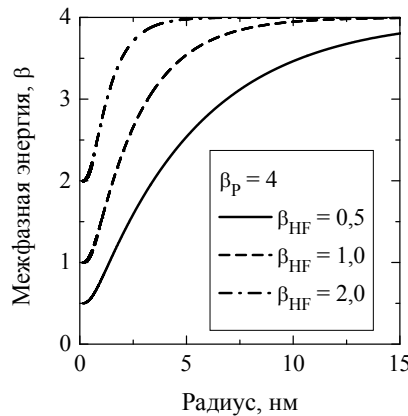


Рис. 7.6. Модельная зависимость межфазной энергии от радиуса частиц новой

$$\text{фазы } \beta = \beta_p - (\beta_p - \beta_{HF}) \sqrt[3]{\frac{102}{n+100}}. \quad \beta_{HF} - \text{ межфазная энергия ГФ}$$

в пределе  $n = 2$ ,  $\beta_p$  – межфазная энергия крупных выделений

На больших временах поведение среднего радиуса и плотности выделений согласуется с теорией коалесценции Лифшица–Слэзова. Однако на переходной стадии к асимптотическому поведению при низких

значениях межфазной энергии ГФ (сплошная кривая на рис. 7.7) плотность выделений стремится к асимптоте  $\tau^{-1}$  сверху, то есть коалесценция выделений происходит быстрее, чем  $\tau^{-1}$ . На этой стадии функция распределения, построенная в переменных  $u = R/R_p$  шире, чем функция распределения Лифшица–Слэзова (7.17) (см. рис. 7.8а).

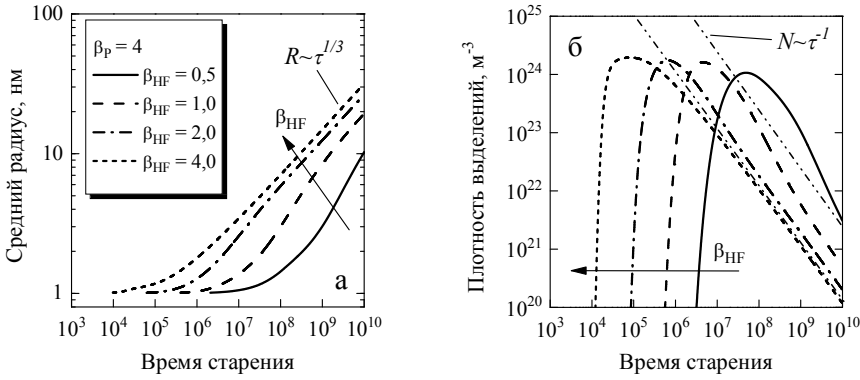


Рис. 7.7. Временная зависимость среднего радиуса выделений (а) и плотности выделений (б) в сплаве, в котором межфазная энергия зависит от размера выделения. Стрелками показано направление увеличения межфазной энергии ГФ  $\beta_{HF}$

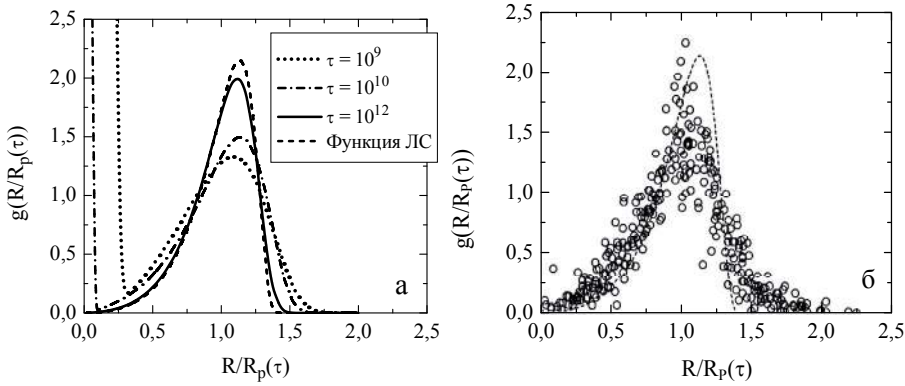


Рис. 7.8. Функция распределения  $g\left(\frac{R}{R_p(\tau)}\right) = \frac{R_p(\tau)}{N_p(\tau)} F(R, \tau)$ , где  $F(R, \tau)$  – функция распределения (7.14): а) результаты моделирования при  $\beta_{HF} = 0,5$  и  $\beta_p = 4$ , на больших временах  $\tau \geq 10^{12}$  функция распределения не изменяется и несколько отличается от функции распределения Лифшица–Слэзова; б) рисунок из работы [209], на котором собраны экспериментальные данные работ [128, 210-217], полученные за 20 лет; пунктиром показано распределение Лифшица–Слэзова (7.17)

Здесь интересно заметить, что вопрос о ширине функции распределения на стадии коалесценции широко обсуждался в литературе. Среди различных причин уширения функции распределения по сравнению со среднеполевым асимптотическим решением Лифшица–Слэзова указывались различные факторы, такие как: влияние объемной доли выделений; корреляционные эффекты, вызванные диффузионным взаимодействием и экранировкой; столкновение растущих выделений [208]. Результаты моделирования этого раздела указывают на еще одну причину, найденную нами впервые, – это влияние ГФ, которые замедляют процесс перехода к настоящему асимптотическому поведению. При этом временная зависимость средних характеристик качественно соответствует развитому коалесцентному режиму (рис. 7.7) и, экспериментально, при наличии ошибок измерений, может неверно трактоваться как асимптотический режим коалесценции. Рис. 7.8 показывает, что на переходной стадии функция распределения, полученная при моделировании (рис. 7.8а), близка по форме к экспериментально наблюдаемому распределению (рис. 7.8б).

## 7.2. Эволюция ансамбля выделений в бинарных сплавах при каскадообразующем облучении

Рассмотрим вопрос о влиянии ГФ на фазовую стабильность под облучением. В разделе 4 был рассмотрен рост больших (по сравнению с размерами каскадов,  $R \gg l$ ) когерентных и некогерентных выделений в бинарном сплаве при каскадообразующем облучении. Предполагалось, что все атомы примеси находятся в твердом растворе в виде подвижных мономеров и в крупных выделениях. Концентрацию подвижных мономеров будем обозначать  $C_{A1}$ . Схематически скорость роста выделения имеет вид

$$\frac{dR_{coh,inc}}{dt} = \frac{D_A^{irr}}{R(C_A^P - C_{A1}^R)} (C_{A1} - C_{A1}^{irr,coh,inc}(R)), \quad (7.23)$$

где  $C_A^P$  – концентрация компонента А в выделении,  $C_{A1}^R$  – термически равновесная концентрация мономеров на границе выделения,  $C_{A1}$  – средняя концентрация мономеров примеси в матрице,  $D_A^{irr}$  – коэффициент радиационно-стимулированной взаимной диффузии с учетом сегрегации компонентов сплава в окрестности выделения, различный для когерентных и некогерентных выделений [54, 124]. Значения средней концентрации, равные  $C_{A1}^{irr,coh,inc}$ , при которых скорости роста когерентных или некогерентных выделений, соответственно, обращаются в ноль, разделяют на

фазовой диаграмме области, в которых эти выделения растут или растворяются. По аналогии с термически равновесной концентрацией мономеров  $C_{A1}^e$  в сплаве без облучения, концентрации  $C_{A1\ coh}^{irr}$  и  $C_{A1\ inc}^{irr}$  были названы кинетически равновесными когерентными и некогерентными концентрациями. Величины  $C_{A1}^e$ ,  $C_{A1\ coh}^{irr}$  и  $C_{A1\ inc}^{irr}$ , вообще говоря, не совпадают с пределами растворимости примеси. Как было показано в [205] (см. раздел 7.1), равновесной растворимостью компонента А является полное содержание атомов А в растворе, включая атомы А в кластерах новой фазы докритического размера, которые образуются флуктуационным образом, при этом критический радиус стремится к бесконечности. В работах [53, 54, 124, 139, 145, 146] не учитывались ГФ, что формально справедливо при больших энергиях  $\sigma$  межфазной границы (см. раздел 7.1). В этом случае радиационно-модифицированными растворимостями являются следующие величины:

$$C_{A1\ coh,inc}^{irr} = \lim_{R \rightarrow \infty} [C_{A1\ coh,inc}^{irr}(R)] . \quad (7.24)$$

На рис. 7.9 показаны радиационно-модифицированные фазовые диаграммы, которые были построены в разделе 4.2 для двух типов сплавов. Пользуясь этими диаграммами, можно качественно описать эволюцию фазового состава сплава в различных температурных интервалах.

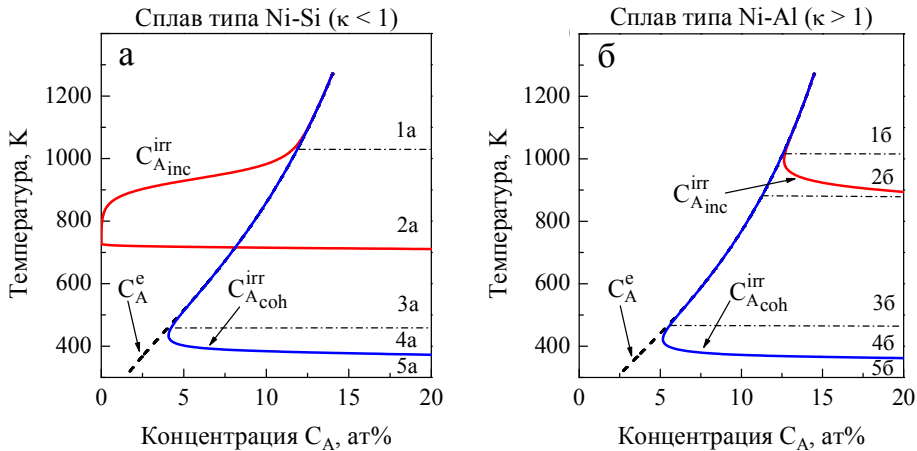


Рис. 7.9. Радиационно-модифицированные диаграммы двух типов сплавов, различающихся направлением сегрегации примеси: а) примесь накапливается вблизи стоков ТД; б) диаграмма сплава, в котором вблизи стоков ТД образуются обедненные зоны. Скорость создания смещений  $K = 10^6$  сна/с, остальные параметры указаны в табл. 3.1. Пунктирной кривой показан предел растворимости без облучения

В области 1 при высоких температурах радиационные ТД быстро уходят на стоки; средняя концентрация ТД близка к тепловой концентрации и кинетически равновесная концентрация мало отличается от термически равновесной  $C_{A1}^e$ . То есть облучение практически не влияет на состояние сплава, поэтому должна наблюдаться обычная коалесценция выделений второй фазы, описываемая теорией Лифшица–Слёзова [113]. При этом средняя концентрация примеси в матрице стремится к термически равновесной.

В области 2 концентрация неравновесных ТД заметно выше термически равновесной, и на некогерентные выделения и выделения на стоках влияет радиационно-индуцированная сегрегация. В сплавах, в которых диффузионные параметры удовлетворяют соотношению  $\kappa = \xi d_{A_i} d_{B_v} / d_{B_i} d_{A_v} < 1$ , вблизи стоков накапливаются матричные атомы, а примесь уходит от стоков (типичным примером такого сплава является сплав Ni-Al [4, 38]). Это приводит к растворению некогерентных выделений и выделений на стоках ТД и повышению средней концентрации примеси в матрице. Наоборот, в сплавах с  $\kappa = \xi d_{A_i} d_{B_v} / d_{B_i} d_{A_v} > 1$  (типичный представитель этого семейства сплавов – сплав Ni-Si) примесь сегрегирует к стокам [4, 38], поэтому некогерентные выделения растут, а матрица обедняется примесью. Каскадное разупорядочение при этих температурах слабо влияет на рост выделений. В области 2б, при начальной концентрации примеси в матрице, превышающей кинетически равновесную, устойчивы как некогерентные, так и когерентные выделения. Однако для когерентных выделений эффективная пересыщенность выше, чем для некогерентных. Когерентные выделения зарождаются и растут быстрее, чем некогерентные выделения. Это приводит к понижению концентрации примеси в матрице до термически равновесной и растворению некогерентных выделений. На конечной стадии происходит коалесценция когерентных выделений.

В случае сплава типа Ni-Si в области 2а, наоборот, эффективная пересыщенность выше для некогерентных выделений. В сплавах этого типа примесь переносится потоками ТД к поверхности стоков ТД (порам, дислокациям и границам зерен), что приводит к образованию на поверхности стоков выделений или пленок упорядоченной фазы, которые ведут себя подобно некогерентным выделениям. Из-за того, что некогерентные выделения растут, концентрация примеси в матрице падает ниже кинетически равновесной когерентной растворимости, и существовавшие в растворе когерентные выделения начинают растворяться. После их полного растворения начинается конкуренция некогерентных выделений и выделений на стоках ТД между собой.

При температурах порядка 500-800 К, то есть в области 3, некогерентные выделения растворяются, а система когерентных выделений радиационно-ускоренно коалесцирует. Причем для сплавов типа Ni-Si растворение крупных некогерентных выделений должно сопровождаться образованием «галло» из вновь зародившихся мелких когерентных выде-

лений, поскольку сегрегация в этом случае повышает концентрацию примеси в окрестности выделения, увеличивая вероятность зарождения новых выделений. Для сплавов типа Ni-Al зарождение, наоборот, более вероятно вдали от стоков ТД. При достижении выделением определенного радиуса может происходить потеря когерентности (например, в сплаве Ni-Al радиус потери когерентности с матрицей для выделения упорядоченной фазы Ni<sub>3</sub>Al порядка 25 нм [115]). В этом случае может происходить образование стационарной функции распределения (см. раздел 6).

При дальнейшем понижении температуры система оказывается в областях 4-5. Обсудим эволюцию функции распределения при температурах, соответствующих этим областям фазовой диаграммы, более подробно. Некогерентные выделения полностью растворяются, и сегрегация в рассматриваемой модели перестает играть существенную роль. Качественное различие между сплавами типа Ni-Si и Ni-Al пропадает.

Используя выражение для скорости роста когерентного выделения (4.11), запишем радиационно-модифицированную когерентную растворимость (последние два слагаемых в скобках выражения (4.11)) с точностью до членов второго порядка малости по отношению  $l/R$  [139, 146]:

$$C_{Al\ coh}^{irr}(R) = C_{Al\ coh}^{irr} + \frac{\alpha^*}{R}, \quad (7.25)$$

$$C_{Al\ coh}^{irr} = C_{Al}^e + \frac{D_{mix}}{D_{A\ coh}^{irr}}(C_A^p - C_{Al}^e), \quad (7.26)$$

$$\alpha^* = \alpha C_{Al}^e + \frac{D_{mix}}{D_{A\ coh}^{irr}}(C_A^p - C_{Al}^e)nl. \quad (7.27)$$

Здесь было использовано соотношение Гиббса–Томпсона [207]

$$C_{Al}^R = C_{Al}^e \exp\left(\frac{1 - C_{Al}^e}{C_A^p - C_{Al}^e} \frac{2\sigma\omega}{kTR}\right) = C_{Al}^e \exp\left(\frac{\alpha}{R}\right) \approx C_{Al}^e \left(1 + \frac{\alpha}{R}\right). \quad (7.28)$$

В уравнении (7.27)  $n$  – это численный параметр, величина и знак которого зависят от формы каскадного источника  $g(r)$  (например, для прямоугольного источника,  $n = -1/3$  [198]). Второе слагаемое в выражении для радиационно-модифицированной растворимости мономеров (7.26) описывает конкуренцию процессов атермического каскадного перемешивания и взаимной диффузии.

Соотношения (7.23)-(7.27) справедливы только для крупных выделений ( $R \gg l$ ), существующих в растворе достаточно длительное время, так как при их получении предполагалось, что в окрестности выделения

действует квазистационарный каскадный источник примеси  $g(r)$ , а это имеет смысл, как уже отмечалось, при характерных временах изменения размера выделения, превышающих время повторного попадания каскада в одну и ту же область поверхности выделения. При  $\alpha^* > 0$  соотношения (7.23) и (7.25) с точностью до обозначений совпадают с соотношениями, описывающими рост выделений без облучения, поэтому в рассматриваемой температурной области крупные когерентные выделения должны радиационно-ускоренно коалесцировать.

Что касается мелких выделений, то они эволюционируют по другим законам. Там, где кинетически равновесная концентрация отличается от термически равновесной растворимости, сплав сильно пересыщен относительно зарождения когерентных выделений, термически устойчивых в отсутствие облучения:  $C_{A1\text{ coh}}^{irr} \gg C_A^e$ . Следовательно, в рассматриваемой области температур при концентрации примеси в матрице, близкой к кинетически равновесной или выше, идет интенсивное термическое зарождение мелких выделений, которые растут до тех пор, пока не будут разрушены каскадом. Понятно, что в области малых размеров формируется функция распределения, эволюция которой существенно отличается от эволюции функции распределения крупных выделений. Образование ансамбля мелких выделений (кластеров) уменьшает концентрацию подвижных мономеров в матрице и, следовательно, влияет на устойчивость крупных выделений. Однако полная растворимость по отношению к крупным когерентным выделениям при этом увеличивается

$$C_{A\text{ coh}}^{irr} = C_{A1\text{ coh}}^{irr} + Q_A^{irr} \quad , \quad (7.29)$$

где  $Q_A^{irr}$  – содержание атомов А в мелких выделениях в расчете на один узел решетки, которое зависит от термодинамических характеристик выделений, температуры и интенсивности облучения. Зависимость  $C_{A\text{ coh}}^{irr}$  от температуры ограничивает на фазовой диаграмме область существования крупных выделений, то есть является аналогом термической растворимости. Сами же мелкие выделения аналогичны термодинамически равновесным гетерофазным флуктуациям [161].

### 7.2.1. Кинетика ГФ при каскадообразующем облучении

Найдем радиационно-модифицированную когерентную растворимость с учетом вклада ГФ. Разобьем все выделения и кластеры новой фазы, находящиеся в сплаве, на два типа. Первый тип – это мелкие выделения, появляющиеся в твердом растворе флуктуационным образом и в которые еще не попал ни один каскад. Выделения второго типа – это достаточно крупные выделения, окруженные примесной шубой, которая образуется при попадании в выделение каскадообразующих частиц. Зарождение мелких когерентных выделений будем описывать в рамках гомогенной

теории зарождения, считая, что подвижны только мономеры. Чтобы не усложнять рассмотрение, здесь не учитываются другие механизмы зарождения, такие как зарождение в каскадной области [218] или зарождение новых частиц на месте выделения, разрушенного каскадом. Итак, функция распределения выделений первого типа подчиняется уравнению

$$\frac{\partial f_s}{\partial t} = J_{x-1,x} - J_{x,x+1} - W_d f_s(x) , \quad (7.30)$$

$$J_{x-1,x} = W^+(x-1)f_s(x-1) - W^-(x)f_s(x) ,$$

где  $x$  – количество атомов А в выделении,  $W^+(x)$  и  $W^-(x)$  – вероятности присоединения и отрыва одиночного атома к выделению, содержащему  $x$  атомов А, соответственно,  $W_d$  – вероятность попадания каскадообразующей частицы в кластер размера  $x$ . Последнее слагаемое описывает убыль выделений первого типа вследствие их разрушения каскадами или превращения в выделения второго типа.

Функция распределения  $f_s$  удовлетворяет следующим граничным условиям

$$f_s(1) = C_{A1} , \quad f_s(\infty) = 0 . \quad (7.31)$$

Вероятности присоединения и отрыва атомов А от кластера радиуса  $R$  имеют вид (см. раздел 6.2)

$$\begin{aligned} W^+(1) &= 2 \frac{4\pi}{\omega} R(1) D_A^{irr} C_{A1} , & W^+(x) &= \frac{4\pi}{\omega} R D_A^{irr} C_{A1} , \\ W^-(x) &= \frac{4\pi}{\omega} R D_A^{irr} C_{A1}^R , & x &= \frac{4\pi}{3\omega} R^3 C_A^p . \end{aligned} \quad (7.32)$$

Вероятность попадания каскада в выделение, меньшее, чем размер каскада, определяется соотношением

$$W_d(x) = 4\pi(R+l)^3 G / 3 \equiv K\gamma \frac{(R+l)^3}{l^3} , \quad (7.33)$$

где  $G$  – скорость создания каскадов в единице объема (см. (6.0)),  $\gamma$  – эффективность разупорядочения определена в разделе 4. Если радиус выделения больше размера каскада, то учитываются только попадания в его приповерхностный слой

$$W_d = \frac{4\pi}{3} G \left( (R+l)^3 - (R-l)^3 \right) . \quad (7.34)$$

Каскадобразующее облучение, растворяя когерентные выделения, эффективно увеличивает растворимость мономеров. То есть крупные когерентные выделения устойчивы при концентрации мономеров, превышающих их термическую растворимость. Но это означает, что в системе должны зарождаться когерентные выделения. В твердом растворе мономеров, недосыщенном относительно крупных выделений,  $C_{A1}^e < C_{A1} < C_{A1}^{irr}$ , вновь зарождающиеся когерентные выделения неустойчивы, поскольку они растворяются после попадания в них каскадов смещений. Таким образом, формируется стационарная функция распределения мелких когерентных выделений, максимальный размер которых порядка размера каскада.

Радиационно-модифицированная когерентная растворимость, определяющая границу устойчивости крупных выделений, является суммой кинетически равновесной концентрации мономеров и содержания вещества в радиационно-индуцированных ГФ

$$C_{A\text{ coh}}^{irr} = C_{A1\text{ coh}}^{irr} + \sum_{n=2}^{\infty} n f_s(n) . \quad (7.35)$$

Здесь  $f_s(n)$  – стационарное решение уравнения (7.30). Это соотношение аналогично выражению (7.11) для равновесной растворимости примеси, поэтому следует ожидать, что ГФ будут давать вклад в растворимость при

$$\beta = 2 \left( \frac{4\pi C_A^p}{3} \right)^{1/3} \frac{1 - C_{A1}^e}{C_A^p - C_{A1}^e} \frac{\sigma \omega^{2/3}}{kT} \lesssim 1 . \quad (7.36)$$

Параметр  $\beta$  имеет такой же смысл, что и параметр, определенный в разделе 7.1.1, отличие состоит в том, что в разделе 7.1.1 рассматривались однокомпонентные выделения  $C_A^p = 1$ . В качестве примера, значение межфазной энергии когерентных выделений  $\text{Ni}_3\text{Al}$  в сплаве  $\text{Ni-Al}$  по измерениям работы [219] составляет  $14 \text{ мДж/м}^2$ , то есть параметр  $\beta$  оценивается как  $\beta \approx 400/T$ .

В аналитическом виде вклад флуктуаций в растворимость найти не удается. На рис. 7.10 приведены расчеты радиационно-модифицированной растворимости. Для расчетов использовались параметры, указанные в табл. 3.1. Равновесная растворимость мономеров  $C_{A1}^e$  была рассчитана с помощью соотношения (7.11), используя полную растворимость, указанную в табл. 3.1. Вклад ГФ  $Q_A^{irr}$  сильно зависит от энергии межфазной границы. Для типичных значений энергии межфазной границы  $\gamma'$ -фазы в бинарных сплавах (порядка десятков  $\text{мДж/м}^2$  [115]) учет ГФ приводит к заметному смещению низкотемпературной границы устойчивости когерентных выделений.

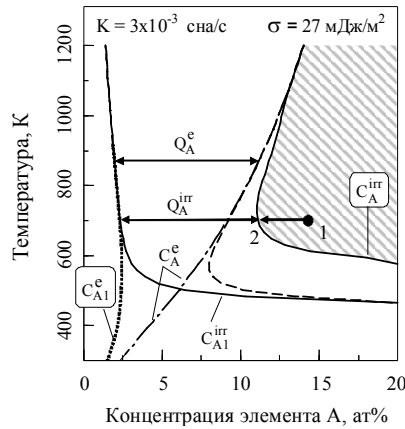


Рис. 7.10. Фазовая диаграмма сплава Ni-Al, построенная с учетом ГФ. Штриховкой показана область устойчивости крупных когерентных выделений.

Пунктирная линия соответствует радиационно-модифицированной растворимости, рассчитанной без учета ГФ в пределе большой межфазной энергии.  $Q_A^e$  – вклад равновесных ГФ в равновесную растворимость (7.11).

$$\text{Параметр } \beta = 786/T$$

### 7.2.2. Эволюция крупных выделений (радиационно-ускоренная коалесценция)

Рассмотрим эволюцию фазового состава при температурах в окрестности низкотемпературного порога устойчивости когерентных выделений (состояние 1 на рис. 7.10). Так как исходное содержание атомов А в сплаве превышает радиационно-модифицированный предел растворимости  $Q_0 > C_{A1\text{ coh}}^{irr}$ , то избыток атомов А должен выпасть в виде выделений второго типа (окруженных каскадным источником атомов А). На начальной стадии облучения идут следующие переходные процессы. Из-за растворения каскадами смещений существующих крупных выделений и перестройки системы ГФ в сплаве устанавливается средняя концентрация мономеров, близкая к кинетически равновесной  $C_{A1}^{irr}$ , одновременно происходит формирование функции распределения мелких выделений первого типа. Затем начинается более медленная стадия эволюции крупных выделений, которая описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{D_{A\text{ coh}}^{irr}}{R(C_A^P - C_{A1}^R)} \left( C_{A1} - C_{A1\text{ coh}}^{irr} - \frac{\alpha^*}{R} \right), \quad (7.37)$$

$$\frac{\partial F_L}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial R} \left( \frac{dR}{dt} F_L(R, t) \right) = 0, \quad (7.38)$$

$$C_{A1} + Q_A^{irr} + Q_L = Q_0, \quad (7.39)$$

где  $Q_L = \frac{4\pi}{3} C_A^p \int_1^\infty R^3 F_L(R, t) dR$  – объемная доля крупных выделений,  $Q_0$  –

полное содержание атомов А в сплаве. Функция распределения по размерам  $F_L$  нормирована на количество выделений в единице объема.

Уравнения (7.37)-(7.39) аналогичны уравнениям теории Лифшица–Слэзова [113], описывающей тепловую коалесценцию выделений вторых фаз. Но уравнение сохранения вещества (7.39) учитывает содержание примеси в ГФ. Кроме того, в отличие от тепловой коалесценции, параметр  $\alpha^*$  может быть отрицательным в зависимости от величины и знака параметра  $n$  (см. (7.27)), который определяется формой каскадного источника. Здесь мы не рассматриваем задачу о формировании каскадного источника. Вероятнее всего, что функция  $g(r)$  является убывающей функцией  $r$ , для которой  $n > 0$ .

В случае нормальной коалесценции при  $\alpha^* > 0$  (особенности эволюции фазового состава в случае «обратной коалесценции» рассмотрены в [220]) с течением времени средняя концентрация мономеров  $C_{A1}$  вместе с долей вещества, сосредоточенного в ГФ, стремится к кинетически равновесному значению, которое обозначено как состояние 2 на рис. 7.10. Поэтому для описания асимптотического поведения первых моментов функции распределения выделений по размерам (среднего радиуса  $R_p$  и плотности выделений  $N_p$ ) можно воспользоваться результатами, полученными для тепловой коалесценции:

$$R_p^3 \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{4}{9} \alpha^* \frac{D_A^{irr}}{C_A^p - C_{A1}^R} t \equiv \frac{4}{9} (\alpha_{th} D_A^{irr} + n l D_{mix}) t, \quad (7.40)$$

$$N_p \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{Q_0 - C_{A1}^{coh}}{2(\alpha_{th} D_A^{irr} + n l D_{mix}) t}, \quad (7.41)$$

где параметр  $\alpha_{th}$  содержит только термодинамические характеристики выделения

$$\alpha_{th} = C_{A1}^e \frac{1 - C_{A1}^e}{(C_A^p - C_{A1}^e)^2} \frac{2\sigma\omega}{kT} \approx \frac{C_{A1}^e}{(C_A^p)^2} \frac{2\sigma\omega}{kT}. \quad (7.42)$$

Как показывают соотношения (7.40) и (7.41), два механизма определяют скорость эволюции ансамбля крупных выделений. Первый – это термическое испарение атомов примеси совместно с радиационно-уско-

ренной взаимной диффузией (слагаемое  $\alpha_{th} D_A^{irr}$  в скобках выражения (7.40)); второй механизм имеет чисто каскадное происхождение и описывается слагаемым  $nID_{mix}$ . Из-за того, что оба механизма входят в соотношения (7.40) и (7.41) аддитивно, полученные выражения являются удобными для экспериментальной проверки развитых представлений, так как по измерениям температурной зависимости константы скорости коалесценции легко выделить температурно-зависимую и каскадную части.

На рис. 7.11 приведена температурная зависимость функции распределения когерентных выделений упорядоченной фазы, соответствующая фазовой диаграмме, приведенной на рис. 7.10. Расчет проводился при одинаковом исходном состоянии (твердый раствор) и различных температурах. Видно, что при уменьшении температуры происходит перераспределение вещества между крупными и мелкими выделениями. При температуре около 650 К крупные выделения оказываются на границе устойчивости и не могут образовываться, в сплаве присутствуют только ГФ (мелкие выделения). При дальнейшем понижении температуры диффузионные процессы замедляются, и поэтому мелкие выделения также не могут образовываться, поскольку каскадное растворение доминирует. При этом подавляющая часть атомов А находится в твердом растворе в виде мономеров.

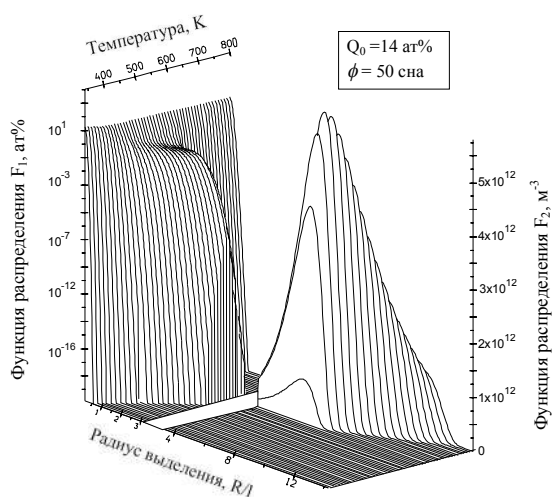


Рис. 7.11. Температурная зависимость функции распределения крупных выделений  $F_2$  и гетерофазных флуктуаций  $F_1$ . Параметры соответствуют структурно-фазовой диаграмме, приведенной на рис. 7.10.

Объемная доля атомов примеси 14 ат%. Доза облучения 50 сна при скорости создания смещений  $2,7 \times 10^{-3}$  сна/с. Вдоль оси абсцисс отложено отношение радиуса выделения к радиусу каскада

## 7.3. В ы в о д ы

1. Растворимость примеси – это полное равновесное содержание атомов примеси в насыщенном растворе, включая атомы примеси в докритических кластерах (ГФ), которые образуются и распадаются вследствие флуктуаций.
2. Проведено моделирование кинетики распада в сплавах с сильными ГФ ( $\beta = \frac{2\omega}{R_1 k_B T} \sigma \lesssim 1$ ). В таких сплавах большая часть атомов примеси принадлежит неподвижным кластерам и непосредственно не участвует в диффузионном распаде. Это означает, что стандартные модели зарождения и коалесценции не применимы для систем с  $\beta \lesssim 1$ .
3. Гетерофазные флуктуации замедляют гомогенное зарождение даже в сильно пересыщенных твердых растворах. ГФ влияют на форму функции распределения выделений на стадии перехода к асимптотическому режиму. На больших временах распределение выделений по размерам стремится к устойчивому распределению, близкому к автомодельному решению Лифшица–Слэзова [113, 114, 208].
4. Рассмотрена эволюция фазового состава бинарного сплава при каскадообразующем облучении. Крупные (по сравнению с размером каскада смещений) и мелкие выделения вторых фаз эволюционируют по разным законам.
5. При каскадообразующем облучении в окрестности низкотемпературного порога устойчивости когерентных выделений сплав находится в состоянии пересыщенного твердого раствора в динамическом равновесии с мелкодисперсными выделениями, которые непрерывно зарождаются и растут до тех пор, пока не будут разрушены каскадом смещений. Хотя эти выделения и разрушаются каскадами, их объемная доля может быть достаточно велика. Такие образования неподвижны, и, следовательно, часть примеси исключается из процесса диффузии, что приводит к дополнительному увеличению растворимости устойчивых выделений упорядоченной фазы. Вклад мелких выделений в радиационно-модифицированную растворимость растет с уменьшением межфазной энергии. Мелкие выделения являются прямым аналогом ГФ в твердом растворе без облучения и играют важную роль в балансе вещества и кинетике роста крупных (по сравнению с размерами каскада) выделений.
6. Выше низкотемпературного порога когерентные выделения коалесцируют с радиационно-ускоренной скоростью.

Развитые представления находят качественное, а в ряде случаев и количественное подтверждение при сравнении с экспериментальными данными, которое было детально проведено в работах [53, 54, 145, 146, 198, 220]. Результаты данного раздела опубликованы в работах [161, 198, 205, 220-223].

## 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе работ авторов построена теория фазовых превращений в неупорядоченных бинарных сплавах замещения под облучением.

Сформулирована модель радиационно-индуцированной сегрегации в концентрированных бинарных сплавах. Проведен анализ устойчивости стационарного распределения компонентов в облучаемом сплаве относительно пространственных флуктуаций состава сплава и показано, что стационарное состояние асимптотически устойчиво. Для нахождения средних концентраций радиационных точечных дефектов (ТД) построена модель эффективной среды для сплавов.

Исследован рост выделений новой фазы в концентрированных сплавах замещения с учетом основных механизмов потери фазовой стабильности: радиационно-индуцированной сегрегации и каскадного разупорядочения. Показано, что условия устойчивости выделений зависят от типа межфазной границы. Радиационно-индуцированная сегрегация значительно влияет на рост некогерентных выделений и выделений, расположенных на стоках ТД. Условия стабильности фаз сформулированы в терминах радиационно-модифицированных растворимостей примеси по отношению к когерентным и некогерентным выделениям. Разработан метод построения радиационно-модифицированных фазовых диаграмм. В зависимости от направления радиационно-индуцированной сегрегации примеси (к стокам ТД или от них) и типа облучения (бескаскадное или каскадообразующее) существует четыре типа диаграмм с разной топологией. Каскадное разупорядочение увеличивает предел растворимости независимо от типа межфазной границы. С понижением температуры взаимная диффузия и сегрегация, устраняющие беспорядок, вносимый атермическим каскадным перемешиванием, замедляются. По этой причине на радиационно-модифицированной фазовой диаграмме существует низкотемпературная граница устойчивости крупных выделений. Граница устойчивости когерентных выделений расположена в области более низких температур по сравнению с границей устойчивости некогерентных выделений. Построены радиационно-модифицированные фазовые диаграммы модельных сплавов Ni-Si, Ni-Al, Al-Zn.

Построена модель низкотемпературного растворения пластинчатых выделений каскадами атомных соударений, которая согласуется с экспериментальными данными. Показано, что процесс каскадного растворения особенно эффективен в случае дискообразных выделений с толщиной меньше, чем размер каскада. Сформулирована модель низкотемпературного переноса атомов вследствие перемешивания в каскадах смещений, которая учитывает неоднородность пространственной структуры каскада. Показано, что доминирующий вклад вносит атомное перемешивание в области термического пика. С помощью моделирования по методу Монте-Карло установлено, что диффузия носит гауссов характер.

Исследовано влияние потери когерентности на характер эволюции выделений при каскадообразующем облучении. Сформулирована модель эволюции смешанного ансамбля когерентных, полукогерентных и некогерентных выделений. Показано, что зарождение когерентных выделений, их рост, с последующей потерей когерентности, а также каскадное растворение больших некогерентных выделений могут происходить одновременно, что приводит к формированию узкого квазистационарного распределения по размерам полукогерентных выделений.

Предложен новый численный метод для моделирования кинетики зарождения, роста и поздней стадии эволюции выделений новой фазы. В развитом методе гибридный подход (конечно-разностная система уравнений в области малых размеров и континуальное описание в области больших размеров) используется в комбинации с методом линий по временной переменной и неравномерной сеткой по пространственной переменной.

Проведено моделирование кинетики распада в сплавах с сильными гетерофазными флуктуациями, в которых стандартные модели зарождения и коалесценции не применимы. Показано, что гетерофазные флуктуации замедляют гомогенное зарождение даже в сильно пересыщенных твердых растворах. Гетерофазные флуктуации влияют на форму функции распределения выделений на стадии перехода к асимптотическому режиму коалесценции. В сплавах без облучения на больших временах распределение выделений по размерам стремится к устойчивому распределению, близкому к автомоделльному решению Лифшица–Слэзова.

Описанные результаты и представления могут быть использованы, в первую очередь, для решения актуальных задач реакторного материаловедения – прогнозирования стабильности материалов в условиях облучения и разработки рекомендаций по оптимизации состава конструкционных материалов для использования в ядерных энергетических установках. На практике для изучения радиационной стойкости и свойств материалов реальное облучение в ядерном реакторе часто моделируется с помощью ускорителей заряженных частиц (электронов и ионов). Поскольку условия облучения в ускорителях всегда существенно отличаются от реакторных условий нейтронного облучения, правильная интерпретация результатов имитационных экспериментов и их использование для предсказания поведения материалов в реальных ядерных установках при высокодозном облучении нуждается в соответствующих теоретических моделях. Описанные выше результаты могут служить основой для более детального описания эволюции материалов и предсказания поведения промышленных сплавов в реакторных условиях.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Воеводин В. Н., Неклюдов И. М. Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов – Киев: Наукова думка, 2006. – 375 с.
2. Блюм Е. Е., Штиглер Дж. О. Использование явления радиационно-стимулированной сегрегации и фазовой нестабильности при разработке сплавов // Фазовые превращения при об-

лучении; под ред. Ф. В. Нолфи; пер. с англ. под ред. Л. Н. Быстрова. – Челябинск: Металлургия, 1989. – С. 255–274.

3. Russell K. C. Phase stability under irradiation // *Prog. Mat. Sci.* – 1984. – Vol. 28. – P. 229–434.

4. Фазовые превращения при облучении / под ред. Ф. В. Нолфи / пер. с англ. под ред. Л. Н. Быстрова. – Челябинск: Металлургия, 1989. – 312 с.

5. *Materials for Nuclear Reactor Core Application.* – London: British Nuclear Energy Society, 1987.

6. Griffiths M., Mecke J. F., Winegar J. E. Evolution of microstructure in zirconium alloys during irradiation // *Zirconium in the Nuclear Industry: 11th Int. Symp., ASTM STP 1295 / Eds. E. R. Bradley, G. P. Sabol.* – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1996. – P. 580–602.

7. Lefebvre F., Lemaignan C. Heavy ion-induced amorphisation of Zr(Fe,Cr)<sub>2</sub> precipitates in Zircaloy-4 // *J. Nucl. Mater.* – 1989. – Vol. 165. – P. 122–127.

8. Etoh Y., Shimada S. Neutron irradiation effects on intermetallic precipitates in Zircaloy as a function of fluence // *J. Nucl. Mater.* – 1993 – Vol. 200. – P. 59–69.

9. Motta A. T., Olander D. R. Theory of amorphization under electron irradiation // *Acta Metall. Mater.* – 1990. – Vol. 38. – P. 2175–2185.

10. Motta A. T., Lemaignan C. A ballistic mixing model for the amorphization of precipitates in Zircaloy under neutron irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1992. – Vol. 195. – P. 277–285.

11. Bakai A. S., Borisenko A. A., Russell K. C. Amorphization kinetics under electron irradiation // *ВАНТ. Сер. ФРИП и РМ.* – 2005. – №4. – С. 108–113.

12. Liou K. Y., Wilkes P. The radiation disorder model of phase stability // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 87. – P. 317–330.

13. Бакай А. С., Фатеев М. П. Влияние каскадообразующего облучения на упорядочивающиеся сплавы // *ФММ.* – 1988. – Т. 66. – С. 239–246.

14. Barbu A., Martin G., Chamberod A. Low flux radiation-induced precipitation // *J. Appl. Phys.* – 1980. – Vol. 51. – P. 6192–6196.

15. Cauvin R., Martin G. Radiation induced homogeneous precipitation in undersaturated solid solutions // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 83. – P. 67–78.

16. Мартэн Ж., Ковзн Р., Барбю А. Стабильность твердого раствора под облучением // *Фазовые превращения при облучении / под ред. Ф. В. Нолфи; пер. с англ. под ред. Л. Н. Быстрова.* – Челябинск: Металлургия, 1989. – С. 45–65.

17. Фрост Г. Дж., Рассел К. К. Стабильность выделений при облучении // *Фазовые превращения при облучении / под ред. Ф. В. Нолфи; пер. с англ. под ред. Л. Н. Быстрова.* – Челябинск: Металлургия, 1989. – С. 65–94.

18. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика. Часть 1. – Москва: Наука, 1976.

19. Kaufman L., Berstein H. Computer calculation of phase diagrams. – New York: Academic Press, 1970. – 210 p.

20. Vocquet J. L. Statistical models of Solid solutions // *Solid State Phase Transformations in Metals and Alloys.* – Orsay: Les Editions de Physique, 1980. – P. 1–50.

21. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 160 с.

22. Cahn J. N., Mullins W. W. Discussion of a paper by J. W. Kinkaldy // *Decomposition of austenite by diffusional process*, eds. V. Zackay, H. Aaronson. – New York: Interscience, 1962. – P. 123–130.

23. Stiegler J. O., Bloom E. E., Loh B. T. M. The development of concentration gradients around voids in irradiated stainless steel // *Fuels and materials development program quarterly progress report for period ending march 31 1970.* – Oak Ridge National Laboratory: Report ORNL-4560, 92 p.

24. Anthony T. R. Solute segregation and stresses generated around growing voids in metals // *Radiation-induced voids in metals*, eds. J. W. Corbett, L. C. Ianniello. – CONF-710601 (Proc. Int. Conf., Albany, N. Y., June 9–11, 1971), USAEC, 1972. – P. 630–646.

25. Okamoto P. R., Harkness S. D., Laidler J. J. Solute segregation to voids during electron irradiation // *ANS Trans.* – 1973. – Vol. 16. – P. 70.

26. Okamoto P. R., Wiedersich H. Segregation of alloying elements to free surfaces during irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1974. – Vol. 53. – P. 336–345.

27. Brager H. R., Garner F. A. Dependence of void formation on phase stability in neutron-irradiated type 316 stainless steel // *Effects of Radiation on Structural Materials, ASTM STP 683 / Eds. A. Sprague, D. Kramer.* – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1979. – P. 207–232.

28. Johnson R. A., Lam N. Q. Solute segregation in metals under irradiation // *Phys. Rev.* – 1976. – Vol. B13. – P. 4364–4375.

29. Averback R. S., Rehn L. E., Wagner W., Wiedersich H., Okamoto P. R. Kinetics of radiation-induced segregation in Ni-12.7at%Si // *Phys. Rev.* – 1983. – Vol. B28. – P. 3100–3109.
30. Allnatt A. R., Barbu A., Franklin A. D., Lidiard A. B. Atomic transport in dilute alloys containing interstitial defects // *Acta Metallurgica.* – 1983. – Vol. 31. – P. 1307–1313.
31. Murphy S. M., Perks J. M. Analysis of phosphorus segregation in ion-irradiated nickel // *J. Nucl. Mater.* – 1990. – Vol. 171. – P. 360–372.
32. Marwick A. D. Segregation in irradiated alloys: The inverse Kirkendall effect and the effect of constitution on void swelling // *J. Phys. F: Metal Physics.* – 1978. – Vol. 8. – P. 1849–1861.
33. Wiedersich H., Okamoto P. R., Lam N. Q. A theory of radiation-induced segregation in concentrated alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 83. – P. 98–108.
34. Маннинг Дж. Кинетика диффузии атомов в кристаллах. – Москва: Мир, 1971. – 280 с.
35. Wolfer W. G. Drift forces on vacancies and interstitials in alloy with radiation-induced segregation // *J. Nucl. Mater.* – 1983. – Vol. 114. – P. 292–304.
36. Lidiard A. B. A note on Manning's relations for concentrated multicomponent alloys // *Acta Metallurgica.* – 1986. – Vol. 34. – P. 1487–1490.
37. Murphy S. M. Instabilities in concentrated alloys under irradiation // *Phil. Mag.* – 1988. – Vol. A58. – N 2. – P. 417–433.
38. Wiedersich H. Phase stability and solute segregation during irradiation // *Physics of radiation effects in crystals* / Eds R. A. Johnson, A. N. Orlov. – Amsterdam: North-Holland, 1986. – P. 225–280.
39. Stiegler J. O. (Ed.) Workshop on Solute Segregation and Phase Stability During Irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 83. – P. 1–283.
40. Lam N. Q., Janghorban K., Ardell A. J. On the modelling of irradiation-induced homogeneous precipitation in proton-bombarded Ni-Si solid solutions // *J. Nucl. Mater.* 1981. – Vol. 101. – P. 314–329.
41. Perks J. M., Murphy S. M. Modelling the major element radiation-induced segregation in concentrated Fe-Cr-Ni alloys // *Materials for Nuclear Reactor Core Applications.* – London: British Nuclear Energy Society, 1987. – P. 165–169.
42. Pechenkin V. A., Stepanov I. A. Modeling the radiation-induced segregation of undersized solutes near grain boundaries // *Mater. Sci. Forum.* – 1999. – Vol. 294–296. – P. 771–774.
43. Pechenkin V. A., Stepanov I. A., Konobeev Yu. V. Modeling of phosphorus accumulation on grain boundaries in iron alloys under irradiation // *Effects of Radiation on Materials: 20th Int. Symp. ASTM STP 1405* / Eds. S. T. Rosinski, M. L. Grossbeck, T. R. Allen, A. S. Kumar. – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 2001. – P. 174–188.
44. Orlov A. N., Samsonidze G. G., Trushin Yu. V. Theory of precipitate growth under irradiation // *Rad. Eff.* – 1986. – Vol. 97. – P. 45–66.
45. Nelson R. S., Hudson J. A., Mazey D. J. The stability of precipitates in an irradiation environment // *J. Nucl. Mater.* – 1972. – Vol. 44. – P. 318–330.
46. Brailsford A. D. Precipitate re-resolution in low dose irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1980. – Vol. 91. – P. 221–222.
47. Frost H. J., Russell K. C. Recoil resolution and particle stability under irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1981. – Vol. 103, 104. – P. 1427–1432.
48. Frost H. J., Russell K. C. Particle stability with recoil resolution // *Acta Metall.* – 1982. – Vol. 30. – P. 953–960.
49. Martin G. Phase stability under irradiation: Ballistic effects // *Phys. Rev.* – 1984. – Vol. B30. – P. 1424–1436.
50. Cauvin R., Martin G. Solid solution under irradiation. I. A model for radiation-induced metastability // *Phys. Rev.* – 1981. – Vol. B23. – No 7. – P. 3323–3332; II. Radiation-induced precipitation in AlZn undersaturated solid solutions // *Phys. Rev.* – 1981. – Vol. B23. – No 7. – P. 3333–3348; III. Further comments on the computed solubility limit // *Phys. Rev.* – 1982. – Vol. B25. – No 5. – P. 3385–3388.
51. Marwick A. D. Calculation of bias due to solute redistribution in an irradiated binary alloy: surfaces of a thin foil // *J. Nucl. Mater.* – 1985. – Vol. 135. – P. 68–76.
52. Bakai A. S. and Turkin A. A. On the shift of a phase equilibrium curve in binary alloys under irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1988. – Vol. 152. – P. 331–333.
53. Бакай А. С., Туркин А. А. Радиационно-индуцированная модификация фазовой диаграммы бинарного сплава. – М.: ЦНИИАтоминформ, 1988. – 59 с.
54. Bakai A. S. and Turkin A. A. Radiation-modified phase diagrams of binary alloys // *Effects of Radiation on Materials: 15th Int. Symp., ASTM STP 1125* / Eds. R. E. Stoller, A. S. Kumar, D. S. Gelles. – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1992. – P. 709–730.
55. Manning J. R. Correlation factors for diffusion in nondilute alloys // *Phys. Rev.* – 1971. – Vol. B4. – P. 1111–1121.

56. Brailsford A. D., Bullough R. The rate theory of swelling due to void growth in irradiated metals // *J. Nucl. Mater.* – 1972. – Vol. 44. – P. 121–135.
57. Brailsford A. D., Bullough R. The theory of sink strengths // *Phil. Trans. Royal Soc. London.* – 1981. – Vol. 302. – No A1465. – P. 87–137.
58. Слёзов В. В. Диффузионная скорость роста макродефектов в ансамблях // *ФТТ.* – 1989. – Т. 31. – С. 20–30.
59. Маргвелашвили И. Г., Саралидзе З. К. Влияние упругого поля дислокаций на стационарные диффузионные потоки точечных дефектов // *ФТТ.* – 1973. – № 15. – С. 2665–2668.
60. Mansur L. K. Void swelling in metals and alloys under irradiation: an assessment of the theory // *Nuclear Technology* – 1978. – Vol. 40. – P. 5–34.
61. Martin G. Contribution of dissipative processes to radiation-induced solid-solution instability // *Phys. Rev.* – 1980. – Vol. B21. – No 6. – P. 2122–2130.
62. Abromeit C. Microstructural self-organization in irradiated systems // *Int. Journal of Mod. Phys. B.* – 1989. – Vol. 3, No 9. – P. 1301–1342.
63. Bakai A. S., Turkin A. A. Recombination mechanism of point defect loss to coherent precipitates in alloys under irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1999. – Vol. 270. – P. 349–356.
64. Turkin A. A., Buts A. V., Bakai A. S. Construction of radiation-modified phase diagrams under cascade-producing irradiation: application to Zr-Nb alloy // *J. Nucl. Mater.* – 2002. – Vol. 305. – P. 134–152.
65. Williams R. O. Precipitation process in copper-chromium alloys // *Trans. ASM.* – 1960. – Vol. 52. – P. 530–544.
66. Wanderka N., Ramachandra C., Wahi R. W., Wollenberger H. Radiation-altered phase stability of a precipitate-hardened copper alloy // *J. Nucl. Mater.* – 1992. – Vol. 189. – P. 9–13.
67. Naundorf V. Diffusion in metals and alloys under irradiation // *Int. J. Mod. Phys.* – 1992. – Vol. B6. – P. 2925–2986.
68. Nastasi N., Mayer J. W. Ion beam mixing in metallic and semiconductor materials // *Mat. Sci. and Eng.* – 1994. – Vol. R12. – P. 1–52.
69. Cheng Y. – T. Thermodynamic and fractal geometric aspects of ion-solid interactions // *Mater. Sci. Rep.* – 1990. – Vol. 5. – P. 45–97.
70. Bacon D. J., Diaz de la Rubia T. Molecular dynamics computer simulations of displacement cascades in metals // *J. Nucl. Mater.* – 1994. – Vol. 216. – P. 275–290.
71. Averback R. S. Atomic displacement processes in irradiated metals // *J. Nucl. Mater.* – 1994. – Vol. 216. – P. 49–62.
72. Hsieh Horngming, Diaz de la Rubia T., Averback R. S., Benedek R. Effect of temperature on the dynamics of energetic displacement cascades: A molecular dynamics study // *Phys. Rev. B.* – 1989. – Vol. 40. – P. 9986–9988.
73. Adams J. B., Rockett A., Kieffer J., Xu W., Nomura M., Kilian K. A., Richards P. F., Ramprasad R. Atomic-level computer simulation // *J. Nucl. Mater.* – 1994. – Vol. 216. – P. 265–274.
74. Turkin A. A., Turkin Yu. A., Bakai A. S., Abromeit C., Naundorf V., Wanderka N. Modeling of cascade-induced dissolution of coherent chromium precipitates in copper // *J. Nucl. Mater.* – 1995. – Vol. 223. – P. 143–150.
75. Brown L. M., Kelly A., Mayer R. M. The influence of boron on the clustering of radiation damage in graphite. II. Nucleation of interstitial loops // *Phil. Mag.* – 1969. – Vol. 19. – P. 721–741.
76. Katz J. L., Wiedersich H. Nucleation of voids in materials supersaturated with vacancies and interstitials // *J. Chem. Phys.* – 1971. – Vol. 55. – P. 1414–1425.
77. Hall B. O., Potter D. I. Microstructural development during low-dose irradiation // *Effects of Radiation on Structural Materials: 9th International Symposium, ASTM STP 683* / Eds. J. A. Sprague, D. Kramer. – Richland: American Society for Testing and Materials, 1979. – P. 789–802.
78. Kiritani M. Analysis of the clustering process of supersaturated lattice vacancies // *J. Phys. Soc. Japan.* – 1973. – Vol. 35. – P. 95–107.
79. Hayns M. R. The nucleation and early growth of interstitial dislocation loops in irradiated materials // *J. Nucl. Mater.* – 1975. – Vol. 56. – P. 267–274.
80. Hayns M. R. On the group method for the approximate solution of a hierarchy of rate equations describing nucleation and growth kinetics // *J. Nucl. Mater.* – 1976. – Vol. 59. – P. 175–182.
81. Bondarenko A. I., Konobeev Yu. V. Void growth kinetics in irradiated metals // *Phys. stat. sol. (a).* – 1976. – Vol. 34. – P. 195–205.
82. Wolfer W. G., Mansur L. K., Sprague J. A. Theory of swelling and irradiation creep // *Radiation Effects in Breeder Reactor Structural Materials: Proc. Int. Conf. Scottsdale, Arizona* / Eds. M. L. Bleiberg, J. W. Bennet. – New York: Metall. Soc. AIME, 1977. – P. 841–852.
83. Russell K. C. Nucleation of voids in irradiated metals // *Acta Metall.* – 1971. – Vol. 19. – P. 753–758.

84. Russell K. C. The theory of void nucleation in metals // *Acta Metall.* – 1978. – Vol. 26. – P. 1615–1630.
85. Ghoniem N. M., Cho D. D. The simultaneous clustering of point defects during irradiation // *Phys. stat. sol. (a)*. – 1979. – Vol. 54. – P. 171–178.
86. Hall B. O. Point-defect clustering during irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1980. – Vol. 91. – P. 63–72.
87. Ghoniem N. M., Sharafat S. A numerical solution to the Fokker-Planck equation describing the evolution of the interstitial loop microstructure during irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1980. – Vol. 92. – P. 121–135.
88. Ghoniem N. M. Stochastic theory of diffusional planar atomic clustering and its application to dislocation loops // *Phys. Rev. B*. – 1989. – Vol. 39. – P. 11810–11819.
89. Ghoniem N. M. Theory of microstructure evolution under fusion neutron irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1991. – Vol. 179. – P. 99–104.
90. Koizumi M. On the validity of the grouping method – Comments on “Analysis of the clustering process of supersaturated lattice vacancies” // *J. Phys. Soc. Japan*. – 1974. – Vol. 37. – P. 1532–1536.
91. Golubov S. I., Ovcharenko A. M., Barashev A. V., Singh B. N. Grouping method for the approximate solution of a kinetic equation describing the evolution of point-defect clusters // *Phil. Mag. A*. – 2001. – Vol. 81. – P. 643–658.
92. Ovcharenko A. M., Golubov S. I., Woo C. H., Huang H. GMIC++: Grouping method in C++: An efficient method to solve a large number of master equations // *Comp. Phys. Commun.* – 2003. – Vol. 152. – P. 208–226.
93. Ozkan G., Ortoleva P. A mesoscopic model of nucleation and Ostwald ripening/stepping: Application to the silica polymorph system // *J. Chem. Phys.* – 2000. – Vol. 112. – P. 10510–10525.
94. Hardouin-Duparc A., Moingeon C., Smetniansky-de-Grande N., Barbu A. Microstructure modelling of ferritic alloys under high flux 1 MeV electron irradiations // *J. Nucl. Mater.* – 2002. – Vol. 302. – P. 143–155.
95. Kampmann R., Wagner R. Kinetics of precipitation in metastable binary alloys – theory and application to Cu-1.9 at.% Ti and Ni-14 at.% Al // *Decomposition of Alloys: The Early Stages* / Eds. P. Haasen, V. Gerold, R. Wagner, M. F. Ashby. – Oxford: Pergamon Press, 1984. – P. 91–103.
96. Wagner R., Kampmann R. Homogeneous second phase precipitation // *Materials Science and Technology*, Vol. 5 / Eds. R. W. Cahn, P. Haasen. – Weinheim: VCH, 1991. – P. 213–303.
97. Robson J. D. Modelling the overlap of nucleation, growth and coarsening during precipitation // *Acta Mater.* – 2004. – Vol. 52. – P. 4669–4676.
98. Surh M. P., Sturgeon J. B., Wolfer W. G. Master equation and Fokker-Planck methods for void nucleation and growth in irradiation swelling // *J. Nucl. Mater.* – 2004. – Vol. 325. – P. 44–52.
99. Liskovets O. A. The method of lines (Review) // *Differential Equations*. – 1965. – Vol. 1. – P. 1308–1323.
100. Schiesser W. E. The numerical method of lines: Integration of partial differential equations. – New York: Academic Press, 1991. – 326 p.
101. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений: Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. – Москва: Мир, 1999. – 688 с.
102. Turkin A. A., Sugonyako A. V., Vainshtein D. I., den Hartog H. W. Radiolysis of NaCl at high and low temperatures: development of size distribution of bubbles and colloids // *J. Phys.: Condens. Matter*. – 2006. – Vol. 18. – P. 5655–5668.
103. Durand-Charre M. The microstructure of superalloys. – Amsterdam: Gordon and Breach, 1997. – 128 p.
104. Advances in low carbon high strength ferrous alloys / Eds. O. N. Mohanty, B. B. Rath, C. S. Sivaramakrishnan. – Switzerland: Trans. Tech. Pub., 1993. – Vol. 84–85. – 700 p.
105. Ghosha A., Mishra B., Das S., Chatterjee S. An ultra low carbon Cu bearing steel: influence of thermomechanical processing and aging heat treatment on structure and properties // *Mater. Sci. Eng. A*. – 2004. – Vol. 374. – P. 43–55.
106. Toporova L. S., Eskin D. G., Kharakterova M. L., Dobatkina T. B. Advanced aluminum alloys containing scandium. – Amsterdam: Gordon and Breach, 1998. – 192 p.
107. Seidman D. N., Marquis E. A., Dunand D. C. Precipitation strengthening at ambient and elevated temperatures of heat-treatable Al(Sc) alloys // *Acta Mater.* – 2002. – Vol. 50. – P. 4021–4035.
108. Odette G. R., Wirth B. D., Bacon D. J., Ghoneim N. M. Multiscale-multiphysics modeling of radiation-damaged materials: Embrittlement of pressure vessel steels // *MRS Bulletin*. – 2001. – Vol. 26. – P. 176–181.
109. Phythian W. J., Foreman A. J. E., English C. A., Buswell J. T., Hetherington M., Roberts K., Pizzini S. The structure and hardening mechanism of copper precipitation in thermally aged or irradiated Fe-Cu and Fe-Cu-Ni model alloys // *Effects of Radiation on Materials: 15th Int. Symp.*,

Nashville, Tennessee, 1990, ASTM STP 1125 / Eds. R. E. Stoller, A. S. Kumar, D. S. Gelles. – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1992. – P. 131–150.

110. Френкель Я. И. Общая теория гетерофазных флуктуаций и предпереходных явлений // ЖЭТФ. – 1939. – Т. 9. – № 8. – С. 952–962.

111. Frenkel J. I. A general theory of heterophase fluctuations and pretransition phenomena // J. Chem. Phys. – 1939. – Vol. 7. – P. 538–547.

112. Becker R., Döring W. Kinetische Behandlung der Keimbildung in übersättigten Dämpfen // Annalen der Physik. – 1935. – Vol. 24. – P. 719–752.

113. Лифшиц И. М., Слёзов В. В. О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов // ЖЭТФ. – 1958. – Т. 35, вып. 2. – С. 479–487.

114. Lifshitz I. M., Slyozov V. V. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions // J. Phys. Chem. Solids. – 1961. – Vol. 19. – P. 35–50.

115. Чунстов К. В. Старение металлических сплавов. – Киев: Наукова думка, 1985. – 232 с.

116. Chen I. W. Irradiation-induced segregation in multi-component alloys // J. Nucl. Mater. – 1983. – Vol. 116. – P. 249–259.

117. Dederichs P. H., Lehmann C., Schober H. R., Scholz A., Zeller R. Lattice theory of point defects // J. Nucl. Mater. – 1978. – Vol. 69,70. – P. 176–199.

118. Vocquet J. L. Diffusion of dumbbell interstitials in concentrated random alloys: an effective field approximation // Acta Metallurgica. – 1986. – Vol. 34, No 4. – P. 571–597.

119. Туркин А. А., Бакай А. С. Модель эффективной поглощающей среды для бинарного сплава замещения под облучением // ВАНТ. Сер.: ФРИ и РМ. – 2006. – № 4 (89). – С. 47–51.

120. Bakai A. S. and Turkin A. A. A model of the effective lossy medium for a binary alloy under irradiation // Радиационное материаловедение: междунар. конф., Алушта, 22–25 мая 1990 г.: труды. – Харьков: ХФТИ МАЭП СССР, 1990. – Т. 5. – С. 11–18.

121. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М: Наука, 1978. – 832 с.

122. Туркин А. А. Некоторые точные соотношения в теории радиационно-индуцированной сегрегации в бинарных сплавах // ВАНТ. Сер.: ФРИ и РМ. – 1991. – Вып. 3(57). – С. 17–19.

123. Гантмахер Ф. Р. Теория матрицы – М.: Наука, 1966. – 450 с.

124. Бакай А. С., Туркин А. А. Фазовая стабильность бинарных сплавов под облучением. I. Рост когерентных и некогерентных выделений новой фазы в концентрированных сплавах // ФММ. – 1991. – № 3. – С. 67–76.

125. Rastogi P. K., Ardell A. J. The coherent solubilities of  $\gamma'$  in Ni-Al, Ni-Si and Ni-Ti alloys // Acta Metallurgica. – 1969. – Vol. 17. – P. 595–602.

126. Поттер Д. И. Облучение сплавов, содержащих упорядоченные фазы // Фазовые превращения при облучении / под ред. Ф. В. Нолфи; пер. с англ. под ред. Л. Н. Быстрова. – Челябинск: Металлургия, 1989. – С. 168–194.

127. Li C. Y., Oriani R. A. Y. Solid-state coarsening of coherent precipitates // Oxide dispersion strengthening / Eds. G. S. Ansell, T. D. Cooper, F. V. Lenel. Metallurgical Society Conference. – Vol. 47. – New York: Gordon and Breach, 1968. – P. 431.

128. Rastogi P. K., Ardell A. J. The coarsening behavior of the  $\gamma'$  precipitates in nickel-silicon alloys // Acta Metallurgica. – 1971. – Vol. 19. – P. 321–330.

129. Darken L. S. Diffusion, mobility and their interrelation through free energy in binary metallic systems // Trans. Met. Soc. AIME. – 1948. – Vol. 175. – P. 184–201.

130. Bardeen J. Diffusion in binary alloys // Phys. Rev. – 1949. – Vol. 76. – P. 1403–1405.

131. Gusak A. M., Kornienko S. V., Lutsenko G. V. Nonequilibrium vacancies in nanosystems // Defect and Diffusion Forum. – 2007. – Vol. 264, P. 109–116.

132. Kirkendall E. O. Diffusion of zinc in alpha brass // Trans. AIME. – 1942. – Vol. 147. – P. 104–110.

133. Smigelkas A. D., Kirkendall E. O. Zinc diffusion in alpha brass // Trans. AIME. – 1947. – Vol. 171. – P. 130–142.

134. Назаров А. В., Гуров К. П. Кинетическая теория взаимной диффузии в бинарной системе. Концентрация вакансий при взаимной диффузии // ФММ. – 1974. – Т. 37, № 3. – С. 496–503.

135. Назаров А. В., Гуров К. П. Кинетическая теория взаимной диффузии в бинарной системе. Влияние концентрационной зависимости коэффициентов самодиффузии на процесс взаимной диффузии // ФММ. – 1974. – Т. 38, № 3. – С. 486–492.

136. Назаров А. В., Гуров К. П. Учет неравновесных вакансий в феноменологической теории взаимной диффузии // ФММ. – 1978. – Т. 45, № 4. – С. 885–887.

137. Gusak A., Lutsenko G., Tu K. Ostwald ripening with non-equilibrium vacancies // *Acta Materialia*. – 2006. – Vol. 54. – P. 785–791.
138. Gusak A. M., Zaporozhets T. V., Tu K. N., Goesele U. Kinetic analysis of the instability of hollow nanoparticles // *Phil. Mag.* – 2005. – Vol. 85. – P. 4445–4464.
139. Бакай А. С., Туркин А. А., Туркин Ю. А. Фазовая стабильность бинарных сплавов под облучением. II. Радиационно-модифицированные фазовые диаграммы // *ФММ*. – 1991. – № 3. – С. 77–85.
140. Mehrer H. Atomic jump processes in self-diffusion // *J. Nucl. Mater.* – 1978. – Vol. 69,70. – P. 38–52
141. Young F. W., Jr. Interstitial mobility and interactions // *J. Nucl. Mater.* – 1978. – Vol. 69&70. – P. 310–330.
142. Bartels A., Dworschak F., Weigert M. Kinetics of radiation-induced segregation in electron-irradiated dilute Ni-Si and Ni-Ge alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1988. – Vol. 152. – P. 82–89.
143. Abromeit C., Martin G. Adiabatic approximation for irradiation-induced instabilities in concentrated alloys // *Solid state phenomena*. – 1988. – Vol. 3&4. – P. 321–334.
144. Бакай А. С., Буц А. В., Туркин А. А. Равновесие фаз в бинарном сплаве при каскадообразующем облучении. – Харьков: ХФТИ, 1991. – 27 с. – (Препринт / Харьк. физ.-техн. ин-т; 91–19).
145. Бакай А. С., Буц А. В., Туркин А. А. О модификации фазовых диаграмм бинарных сплавов при каскадообразующем облучении // *Металлофизика*. – 1991. – Т. 13. – № 9. – С. 68–78.
146. Turkin A. A., Bakai A. S. and Buts A. V. Phase diagrams of binary alloys under cascade-producing irradiation // *Materials Sci. Forum*. – 1992. – Vol. 97-99. – P. 343–350.
147. Bakai A. S. and Turkin A. A. Phase diagrams of binary alloys under irradiation // *Proc. of 3rd Int. Conf. EPM'89 (Dresden, September, 1989.)*, *Phys. Research. Vol. 13 / Eds. K. Hohmuth and E. Richter*. – Berlin: Akademie-Verlag, 1990. – P. 555–557.
148. Бакай А. С., Кирюхин Н. М. Об эволюции выделений в состаренных сплавах под облучением // *ВАНТ. Сер.: ФПИ и РМ*. – 1983. – Вып. 5(28). – С. 33–40.
149. Brailsford A. D. An effect of solute segregation on void growth in irradiated dilute alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1975. – Vol. 56. – P. 7–17.
150. Abromeit C., Wollenberger H. Analytical description of disordering during cascade evolution in ordered intermetallics // *J. Nucl. Mater.* – 1992. – Vol. 191-194. – P. 1092–1095.
151. Barbu A., Martin G. Radiation-induced precipitation in Ni-Si solid solutions: II. Dose rate effects // *Scripta Met.* – 1977. – Vol. 11. – P. 771-775.
152. Рен Л. Е., Окамото П. Р. Неравновесная сегрегация в облученных сплавах // *Фазовые превращения при облучении / под ред. Ф. В. Нолфа; пер. с англ. под ред. Л. Н. Быстрова. – Челябинск: Металлургия, 1989. – С. 194–226.*
153. Averbach R. S., Rehn L. E., Wagner W., Wiedersich H., Okamoto P. R. Kinetics of radiation-induced segregation in Ni-12.7at%Si // *Phys. Rev.* – 1983. – Vol. B28. – P. 3100–3109.
154. Okamoto P. R., Rehn L. E. Radiation-induced segregation in binary and ternary alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1979. – Vol. 83. – P. 2–23.
155. Barbu A. Contribution a l'etude des changements de phase sous irradiation // *Rapport CEA-R-4936. – Gif-sur-Yvette, France, 1979.*
156. Scheuer U. Phase stability of Cu-Ni-Fe alloys under ion irradiation // *Rad. Eff.* – 1987. – Vol. 105. – P. 85–106.
157. Abromeit C., Naundorf V., Wollenberger H. Phase stability criteria for ion and neutron irradiated alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1988. – Vol. 155&157. – P. 1147–1178.
158. Sekimura N., Garner F. A., Newkirk J. W. Silicon's role in determining swelling in neutron-irradiated Fe-Ni-Cr-Si alloys // *J. Nucl. Mater.* – 1992. – Vol. 191-194. – P. 1244–1247.
159. Бакай А. С., Бородин О. В., Брык В. В., Воеводин В. Н., Неклюдов И. М., Платонов П. В., Туркин А. А. Стабильность выделений вторых фаз при высокодозном облучении // *Радиационное материаловедение: междунар. конф., Алушта, 22-25 мая 1990 г.: труды. – Харьков: ХФТИ МАЭП СССР, 1990. – Т. 2. – С. 156–163.*
160. Borodin O. V., Bryk V. V., Neklyudov I. M., Platonov P. V., Voyevodin V. N., Bakai A. S., Turkin A. A. Evolution of second-phase precipitates during irradiation with neutrons and charged particles // *Materials Sci. Forum*, 1992. – Vol. 97-99. – P. 299–306.
161. Turkin A. A., Bakai A. S., Buts A. V. Modification of two-phase equilibrium by radiation-induced mixing and segregation // *Proc. 3rd International Conference on Solid-to-Solid Phase Transformations / Eds. W. C. Johnson, J. M. Howe, B. E. Laughlin, W. A. Sofa. – Pittsburgh: Minerals Metals and Materials Society, 1994. – P. 987–992.*
162. Бакай А. С., Туркин А. А. Структурно-фазовые состояния бинарных сплавов под облучением // *Радиационная повреждаемость и работоспособность конструкционных материалов: VI межгосуд. конф., Белгород, 12-14 сентября 1995 г.: тезисы докл. – Белгород, 1995. – С. 23–24.*

163. Russell K. C. Phase instability under cascade damage irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1993. – Vol. 206. – P. 129–138.
164. Морозов В. А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. – Москва: Наука, 1987. – 360 с.
165. Zinkle S. J., Singh B. N. Analysis of displacement damage and defect production under cascade damage conditions // *J. Nucl. Mater.* – 1993. – Vol. 199. – P. 173–191.
166. Quan Z., Naundorf V., Wollenberger H. Diffusion and phase stability in ion irradiated Cu/Pd thin films // *J. Nucl. Mater.* – 1992. – Vol. 199. – P. 12–21.
167. Wollenberger H. Phase transformations under Irradiation // *J. Nucl. Mater.* – 1994. – Vol. 216. – P. 63–77.
168. Martin G., Bellon P., Soisson F. Driven alloys: stability and kinetics // *Solid to Solid Phase Transformations* / Eds. W. C. Johnson, J. M. Howe, W. A. Laughlin B. E. Sofa. – Pittsburgh: The Minerals, Metals & Materials Society, 1994. – P. 937–961.
169. Physics of Irradiation Effects in Metals / Ed. G. Szenes // *Mat. Sci. Forum.* – 1992. – Vol. 97–99.
170. Standard practice for neutron radiation damage simulation by charged particle irradiation, ASTM E521: Annual book of ASTM Standards. – Vol. 12.02. – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1994.
171. Phythian W. J., Stoller R. E., Foreman A. J. E., Calder A. F., Bacon D. J. A comparison of displacement cascades in copper and iron by molecular dynamics and its application to microstructural evolution // *J. Nucl. Mater.* – 1995. – Vol. 223. – P. 245–261.
172. Biersack J. P., Hagmark L. G. A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets // *Nucl. Instr. Meth.* – 1980. – Vol. 174. – P. 257–269.
173. Cheng Y. T., Auner G. W., Alkaisi M. H., Padmanabhan K. R., Karmarkar M. M. Thermodynamic and ballistic aspects of ion mixing // *Nucl. Instr. Meth.* – 1991. – Vol. B59 – 60. – P. 509–516.
174. Turkin A. A., Abromeit C., Naundorf V. Monte Carlo simulation of cascade-induced mixing in two-phase systems // *J. Nucl. Mater.* – 1996. – Vol. 233-237. – P. 979–984.
175. Turkin A. A., Abromeit C., Naundorf V. Modeling of low temperature transport due to radiation-induced atomic mixing // *Diffusion and Defect Data. Part A: Defect and Diffusion Forum.* – 1997. – Vol. 143-147. – P. 521–526.
176. Turkin A. A. Monte Carlo simulation of low temperature atomic transport under cascade-producing irradiation // *ВАНТ. Сер.: ФПИИМ.* – 1998. – В. 1(67), 2(68). – С. 12–14.
177. Hudson J. A., Mazey D. J., Nelson R. S. Voids formed by irradiation of reactor materials / Eds. S. E. Pugh, M. N. Loretto, D. I. R. Norris. – London, BNES, 1971. – P. 215-223.
178. Паршин А. М. Структура, прочность и радиационная повреждаемость коррозионно-стойких сталей и сплавов. – Челябинск: Металлургия, 1988. – 656 с.
179. Bryk V. V., Voyevodin V. N., Zeiinsky V. F., Neklyudov I. M., Parshin A. M. Irradiation-induced solid solution decomposition enhances point defect recombination // *Effects of Radiation on Materials: 14th Int. Symp., ASTM STP 1046. Vol. I* / Eds. N. M. Packan, R. E. Stoller, A. S. Kumar. – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1989. – P. 437–441.
180. Odette G. R., Lucas G. E. Recent progress in understanding reactor pressure vessel embrittlement // *Radiat. Eff. Defects Solids.* – 1998. – Vol. 144. – P. 189–231.
181. Othen P. J., Jenkins M. L., Smith G. D. W., Phythian W. J. Transmission electron microscope investigations of the structure of copper precipitates in thermally aged Fe-Cu and Fe-Cu-Ni // *Phil. Mag. Lett.* – 1991. – Vol. 64 (6). – P. 383–391.
182. Monzen R., Iguchi M., Jenkins M. L. Structural changes of 9R copper precipitates in an aged Fe-Cu alloy // *Phil. Mag. Lett.* – 2000. – Vol. 80. – P. 137–148.
183. Hardouin-Duparc H. A., Doole R. C., Jenkins M. L., Barbu A. An HREM study of copper precipitation in Fe 1.5wt.% Cu under electron irradiation // *Phil. Mag. Lett.* – 1995. – Vol. 71. – P. 325–333.
184. Nicol A. C., Jenkins M. L., Kirk M. A. High-resolution electron microscopy studies of the precipitation of copper under neutron irradiation in Fe-1.3%Cu // *Proc. Int. Symp. on the Microstructural Processes in Irradiated Materials, MRS Symposium Proceedings. Vol. 540* / Eds. S. J. Zinkle, G. Lucas, R. Ewing, J. Williams. – Pittsburgh: Materials Research Society, 1999. – P. 409–414.
185. Buswell J. T., English C. A., Hetherington M. G., Phythian W. J., Smith G. D. W., Worrall G. M. An analysis of small clusters formed in thermally aged and irradiated FeCu and FeCuNi model alloys // *Effects of Radiation on Materials: 14th Int. Symp. Vol. II, ASTM STP 1046* / Eds. N. M. Packan, R. E. Stoller, A. S. Kumar. – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1989. – P. 127 – 153.
186. Miller M. K., Wirth B. D., Odette G. R. Precipitation in neutron-irradiated Fe-Cu and Fe-Cu-Mn model alloys: a comparison of APT and SANS data // *Mater. Sci. and Eng.* – 2003. – Vol. A353. – P. 133–139.

187. Nicol A. C., Jenkins M. L., Wanderka N., Abromeit C. Dissolution of copper precipitates in an Fe-1.3wt%Cu alloy under Fe<sup>+</sup> ion irradiation // Proc. Int. Symp. on the Microstructural Processes in Irradiated Materials, MRS Symposium Proceedings, Vol. 540 / Eds. S. J. Zinkle, G. Lucas, R. Ewing, J. Williams. – Pittsburgh: Materials Research Society, 1999. – P. 457–462.
188. Urbanic V. F., Griffiths M. Corrosion response of pre-irradiated Zr-2.5Nb pressure tube material // Effects of Radiation on Materials: 17th Int. Symp. Vol. I, ASTM STP 1270 / Eds. D. S. Gelles, R. K. Nanstad, A. S. Kumar, E. A. Little. – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 1996. – P. 1088–1106.
189. Woo O. T., Hutcheon R. M., Coleman C. E. Precipitation in Zr-2.5Nb during 10 MeV electron irradiation // Mat. Res. Soc. Symp. Proc. – 1995. – Vol. 373. – P. 189–194.
190. Cann C. D., So C. B., Styles R. C., Coleman C. E. Precipitation in Zr-2.5Nb enhanced by proton irradiation // J. Nucl. Mater. – 1993. – Vol. 205. – P. 267–272.
191. Зеленский В. Ф., Стукалов А. И., Неклюдов И. М., Грицина В. М., Ожигов Л. С., Воеводин В. Н., Савченко В. И., Роечко Н. М., Шамардин В. К., Кобылянский Г. П. Воздействие облучения на деформацию и механические свойства СВЧ-обработанных циркониевых сплавов // ВАХТ. Сер.: ФРИ и РМ. – 1996. – Вып. 1(64). – С. 39–50.
192. Coleman C. E., Gilbert R. W., Carpenter C. J. C., Weatherly G. C. Precipitation in Zr-2.5wt%Nb during proton irradiation // Phase stability during irradiation / Eds. J. R. Holland, L. K. Mansur, D. I. Potter. – New York: AIME, 1981. – P. 587–599.
193. Perovic V., Perovic A., Weatherly G. C., Brown L. M., Purdy G. R., Fleck R. G., Holt R. A. Microstructural and microchemical studies of Zr-2.5Nb pressure tube alloy // J. Nucl. Mater. – 1993. – Vol. 205. – P. 251–257.
194. Averin S. A., Panshenko L. V., Kozlov A. V., Sinelnikov L. P., Shishov V. N., Nikulina A. V. Evolution of dislocation and precipitate structure in Zr alloys under long-term irradiation // Zirconium in the Nuclear Industry: 12th Int. Symp., ASTM STP 1354 / Eds. G. P. Sabol, G. D. Moan. – Philadelphia: American Society for Testing and Materials, 2000. – P. 105–121.
195. Russell K. C. Nucleation in solids: The induction and steady state effects // Adv. Colloid and Interface Sci. – 1980. – Vol. 13. – P. 205–318.
196. Adaptive method of lines / Eds. A. Vande Wouwer, P. Saucez, W. E. Schiesser. – Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2001. – 432 p.
197. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. – Л.: Наука, 1975. – 592 с.
198. Бакай А. С., Буд А. В., Туркин А. А. Эволюция ансамбля выделений упорядоченной фазы в бинарном сплаве при каскадообразующем облучении // ФММ. – 1995. – Т. 79, № 2. – С. 5–17.
199. Turkin A. A., Bakai A. S. Formation of steady state size distribution of precipitates in alloys under cascade-producing irradiation // XVI междунар. конф. по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению, Алушта, 6–11 сентября 2004 г.: труды. – Харьков, 2004. – С. 15–16.
200. Turkin A. A., Bakai A. S. Formation of steady state size distribution of precipitates in alloys under cascade-producing irradiation // J. Nucl. Mater. – 2006. – Vol. 358. – P. 10–25.
201. Turkin A. A., van Es H. J., Vainshtein D. I., den Hartog H. W. Thermoluminescence of zircon: A kinetic model // J. Phys.: Condens. Matter. – 2003. – Vol. 15. – P. 2875–2897.
202. Turkin A. A., van Es H. J., Vainshtein D. I., den Hartog H. W. Simulation of the effects of the dose rate and temperature on zircon thermoluminescence // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2005. – Vol. 38. – P. 156–171.
203. Turkin A. A., Vainshtein D. I., den Hartog H. W. Modelling of optically-stimulated luminescence of zircon: assessment of the suitability for dating // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2006. – Vol. 39. – P. 1367–1377.
204. Turkin A. A., Vainshtein D. I., den Hartog H. W. Simulation of optically-stimulated luminescence of zircon // phys. stat. sol. (c) – 2007. – Vol. 4. – P. 1036–1039.
205. Turkin A. A., Bakai A. S. Modeling the precipitation kinetics in systems with strong heterophase fluctuations // Problems of Atomic Science and Technology. – 2007. – N3 (2). – P. 394–398.
206. Зельдович Я. Б. К теории образования новой фазы. Кавитация // ЖЭТФ. – 1942. – Т. 12. – С. 525–538.
207. Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. Часть 1. Термодинамика и общая кинетика. – М.: Мир, 1978. – 806 с.
208. Слэзов В. В., Сагалович В. В. Диффузионный распад твердых растворов // УФН. – 1987. – Т. 151. – С. 67–104.
209. Marder M. Correlations and Ostwald ripening // Phys. Rev. – 1987. – Vol. A 36. – P. 858–874.
210. Bower E. N., Whiteman J. A. The mechanism of phase transformations in crystalline solids – London: Institute of Metals, 1969. – 119 p.

211. Jack D. H., Honeycombe R. W. K. Age hardening of an Fe-Ti-Si alloy // *Acta Metall.* – 1972. – Vol. 20. – P. 787–796.
212. Seno Y., Tomokiyo Y., Oki K., Eguchi T. Coarsening process of cobalt precipitates in copper-cobalt alloys // *Trans. Jpn. Inst. Metals.* – 1983. – Vol. 24. – P. 491–498.
213. Wirtz G. P., Fine M. E. Precipitation and coarsening of magnesioferrite in dilute solutions of iron in magnesium oxide // *J. Am. Ceram. Soc.* – 1968. – Vol. 51. – P. 402–406.
214. Hirata T., Kirkwood D. H. The prediction and measurement of precipitate number densities in a Ni-6.05 wt.% Al alloy // *Acta. Metall.* – 1977. – Vol. 25. – P. 1425–1434.
215. Chellman D. J., Ardell A. J. The coarsening of  $\gamma'$  precipitates at large volume fractions // *Acta. Metall.* – 1974. – Vol. 22. – P. 577–588.
216. Ardell A. J., Nicholson R. B. The coarsening of  $\gamma'$  in Ni-Al alloys // *J. Phys. Chem. Solids.* – 1966. – Vol. 27. – P. 1793–1794.
217. Chaturvedi M., Chung D. W. The coarsening behaviour of  $\gamma'$  particles in a 40Co-38Ni-17Cr-5Ti alloy // *J. Inst. Metals.* – 1973. – Vol. 101. – P. 253–257.
218. Бакай А. С., Туркин А. А. О влиянии каскадообразующего облучения на скорость зарождения выделений новой фазы в пересыщенных твердых растворах // *ВАНТ. Сер.:ФРП и РМ.* – 1987. – Вып. 1(39). – С. 12–24.
219. Xiao S. Q., Haasen P. HREM investigation of homogeneous decomposition in a Ni-12at.%Al alloy // *Acta Metall. Mater.* – 1991. – Vol. 39. – P. 651–659.
220. Бакай А. С., Буц А. В., Туркин А. А. Эволюция ансамбля выделений вторых фаз при каскадообразующем облучении. – Харьков: ХФТИ, 1993. – 38 с. – (Препринт / Харьк. физ.-техн. ин-т; 93–36).
221. Туркин А. А., Бакай А. С. Кинетика зарождения и коалесценции в системах с сильными гетерофазными флуктуациями // XVII междунар. конф. по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению, Алушта, 4-9 сентября 2006 г.: труды. – Харьков, 2006. – С. 27.
222. Бакай А. С., Буц А. В., Туркин А. А. Эволюция фазовой микроструктуры сплава при каскадообразующем облучении // *Научные ведомости Белгородского государственного университета.* – 1996. – Т. 1. – С. 64–84.
223. Бакай А. С., Буц А. В., Туркин А. А. Ранняя стадия эволюции микроструктуры сплава под облучением и ее диагностика по результатам измерения электросопротивления // *ВАНТ. Сер. ФРП и РМ.* – 1998. – Вып. 3(69)&4(70). – С. 9–10.

УДК 524.85, 530.12, 538.91

PACS numbers: 04.60.-m, 04.60.Bc, 98.80.Bp, 98.80.Cq

## ЧАСТЬ III

---

# ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СПОНТАННО НАРУШЕННЫЕ СИММЕТРИИ В РАННЕЙ ВСЕЛЕННОЙ

**Э. А. Папицкий**

*Институт физики НАН Украины  
проспект Науки, 46, г. Киев, 03028, Украина*

**В. И. Пенгегов**

*Институт физики НАН Украины  
проспект Науки, 46, г. Киев, 03028, Украина*

**В** данном обзоре обсуждаются некоторые наиболее актуальные проблемы современной космологии, включая вопросы происхождения и эволюции нашей Вселенной и природы гравитации. Не привлекая такие широко распространённые и популярные в настоящее время понятия и методы, как супергравитация и теория струн в многомерных антидеситтеровских пространствах, авторы старались показать, что большинство проблем гравитации и космологии могут быть решены в рамках обычной квантовой теории поля. Показано, что с помощью методов и представлений, хорошо развитых в физике конденсированного состояния для описания таких макроскопических квантовых явлений, как сверхпроводимость, сверхтекучесть и фазовые переходы со спонтанным нарушением различных скрытых симметрий, можно понять наиболее фундаментальные явления природы при сверхвысоких энергиях, сравнимых с энергией Планка. Это свидетельствует о единстве законов природы в чрезвычайно широком диапазоне энергий и температур, который охватывает 32 порядка, начиная с явлений сверхпроводимости и сверхтекучести квантовых ферми- и бозе-жидкостей при температурах порядка 1–100 К вплоть до планковских температур порядка

$10^{32}$  К в теории фундаментальных нелинейных бозонных полей, которая лежит в основе представлений о физическом вакууме. В работе рассматриваются механизмы возникновения нелинейных скалярных полей и обсуждаются вопросы формирования пространственно неоднородной крупномасштабной структуры современной Вселенной, а также происхождение «тёмной энергии» и «тёмной материи».

## ВВЕДЕНИЕ:

### К р а т к и й и с т о р и ч е с к и й э к с к у р с

Созданная более ста лет тому назад Альбертом Эйнштейном общая теория относительности (ОТО) [1, 2] заложила основы современной космологии – науки о происхождении и эволюции нашей Вселенной. Одной из главных космологических проблем на первом этапе применения ОТО была проблема устойчивости бесконечной и стационарной Вселенной. Согласно закону всемирного тяготения Ньютона, между массивными телами существует сила взаимного притяжения, которая пропорциональна гравитационной постоянной Ньютона  $G_N$  и обратно пропорциональна квадрату расстояния между гравитирующими массами. Под действием такого всеобщего дальнегодействующего притяжения возникает неустойчивость достаточно больших систем по отношению к сжатию – так называемая гравитационная неустойчивость Джинса [3], в результате которой образовались звезды, планеты и галактики.

Для устранения глобальной неустойчивости всей Вселенной Эйнштейн ввёл в уравнения ОТО космологическую постоянную [4], которая должна была скомпенсировать всеобщее гравитационное сжатие Вселенной и фактически играла роль «антигравитации». Однако полученное де Ситтером [5] точное решение уравнений ОТО в отсутствие вещества показало, что под действием космологической постоянной пустая Вселенная становится неустойчивой и экспоненциально быстро расширяется. Такой процесс ускоренного расширения Вселенной, когда рано или поздно достигается так называемый горизонт событий при скорости расширения, равной скорости света  $c = 3 \cdot 10^{10}$  см/сек, в дальнейшем был назван инфляцией.

В 1922 году Александр Фридман [6] получил точные нестационарные решения уравнений ОТО для изотропной и однородной Вселенной, заполненной веществом в отсутствие космологической постоянной. Решения Фридмана указывали на возможность самопроизвольного расширения Вселенной из начальной точки, которое затем замедлялось за счёт тяготения материи и при достаточно большой плотности вещества могло смениться сжатием. При этом возникла проблема сингулярностей в

начальной и конечной точках эволюции Вселенной, в которых плотность вещества формально стремилась к бесконечности.

Первоначально Эйнштейн [7] подверг критике работу Фридмана [6], считая её ошибочной. Однако позже, ознакомившись более детально с этой работой, Эйнштейн признал правильными результаты Фридмана о существовании нестационарных динамических решений уравнений ОТО [8].

В 1929 году Эдвин Хаббл [9] сообщил о полученных им сенсационных наблюдательных астрономических данных, которые свидетельствовали о «красном смещении» оптических спектров далёких галактик. Такое смещение спектральных линий в длинноволновую область могло быть связано только с эффектом Доплера и указывало на разбегание галактик со скоростями, которые нарастали пропорционально расстоянию до этих галактик. Таким образом, стало ясно, что наша Вселенная расширяется.

Следует подчеркнуть, что Жорж Леметр [10] ещё до опубликования астрономических данных Хаббла на основе уравнений Фридмана предсказал возможность разбегания галактик. Кстати, именно эффект «красного смещения» позволил объяснить ещё один старый парадокс космологии – существование тёмного ночного неба в бесконечной стационарной Вселенной, заполненной бесконечным числом неподвижных звёзд и галактик. Действительно, в быстро расширяющейся Вселенной благодаря доплеровскому смещению спектров далёких галактик, удаляющихся от нас со скоростями, близкими к скорости света, их излучение становится невидимым, поскольку спектр смещается из оптического диапазона в инфракрасный, а затем в радиодиапазон электромагнитных волн.

В результате анализа наблюдательных данных Хаббла и теоретических результатов Фридмана Эйнштейн вынужден был признать, что введение космологической постоянной было его «самой большой ошибкой». Но в дальнейшем оказалось, что это была отнюдь не ошибка гения, а гениальное предвидение существования физического вакуума, т. е. того самого неуловимого «мирового эфира», от которого Эйнштейн вынужден был отказаться при построении специальной теории относительности (СТО). Формулируя свой релятивистский принцип относительности [11], основанный на отрицательных результатах экспериментов Майкельсона–Морли [12] по обнаружению «эфирного ветра» при движении Земли вокруг Солнца, Эйнштейн исключил возможность существования эфира. Однако позже выяснилось, что все обстоит не так просто.

Как известно, в нелинейных тензорных уравнениях ОТО газообразная материя с определёнными уравнениями состояния вещества  $P = \nu \varepsilon$  (где  $P$  и  $\varepsilon$  – давление и плотность энергии вещества, а  $\nu$  – безразмерный коэффициент) описываются полученным в рамках СТО релятивистским 4-мерным (4D) тензором энергии – импульса  $T_{\mu\nu} = [P \cdot g_{\mu\nu} + (P + \varepsilon) \cdot U_{\mu} U_{\nu}]$ , где  $g_{\mu\nu}$  – метрический тензор 4D пространства – времени, а  $U_{\mu}$  и  $U_{\nu}$  –

компоненты 4D вектора скорости в релятивистской гидродинамике. Тензор  $T_{\mu\nu}$  входит в уравнения ОТО в виде произведения  $T_{\mu\nu}$  на гравитационную константу Эйнштейна  $\kappa = 8\pi G_N / c^4$ , имеющую размерность длины, делённой на энергию  $[\kappa] = [l / E]$ .

Космологическая постоянная  $\Lambda$  с размерностью обратного квадрата длины  $[\Lambda] = [1/l^2]$  была введена Эйнштейном в уравнения ОТО в виде дополнительного отрицательного члена  $-\Lambda \cdot g_{\mu\nu}$ , который не нарушает ковариантность этих уравнений (см. [4]). Поэтому величина  $\lambda \equiv \Lambda/\kappa$  может трактоваться как плотность энергии физического вакуума  $\varepsilon_{vac}$  с отрицательным давлением  $P_{vac} = -\varepsilon_{vac}$ . В связи с этим в тензоре энергии-импульса вакуума  $T_{\mu\nu}^{vac}$  отсутствует соответствующее кинематическое слагаемое,  $(P_{vac} + \varepsilon_{vac}) \cdot U_\mu U_\nu = 0$  (см. [13]), и поэтому вакуум нельзя обнаружить при движении тел с постоянной скоростью, что согласуется с отрицательными результатами экспериментов Майкельсона–Морли.

Однако при этом возникает новый парадокс, который заключается в том, что любая физическая система с отрицательным давлением  $P < 0$  и положительной плотностью  $\rho > 0$  является неустойчивой, поскольку её сжимаемость отрицательна, а скорость распространения в ней колебаний плотности, т. е. скорость адиабатического звука  $c_s = \sqrt{\gamma_A \cdot P/\rho}$  является мнимой (здесь  $\gamma_A$  – показатель адиабаты). Тем не менее, физический вакуум существует и реагирует на ускорение (или замедление) движения тел либо на их движение по искривлённой траектории, что проявляется как инерция, мерой которой является инерционная масса тела.

Согласно господствовавшему ранее принципу Маха [14], причиной инерции считалось совместное дальнедействующее гравитационное воздействие бесконечного числа звёзд в бесконечной, вечной и однородной Вселенной на движущиеся или покоящиеся тела. Сегодня мы знаем, что наша Вселенная не вечна, не бесконечна и не однородна. Поэтому проблема инерции требует более глубокого изучения природы физического вакуума, который остаётся инертным по отношению к прямолинейному движению с постоянной скоростью, но реагирует на любое ускорение или искривление траектории движения.

Существует также проблема эквивалентности (точного равенства) инерционной и гравитационной масс. Этот принцип эквивалентности позволил Эйнштейну построить ОТО на основе чисто геометрических представлений о гравитации как об искривлении 4-мерного пространства-времени. Решение этой проблемы, по-видимому, также сводится к изучению физики вакуума и природы гравитации.

В современной квантовой космологии в основе большинства инфляционных моделей эволюции нашей Вселенной лежит представление о существовании одного или нескольких нелинейных скалярных полей, плотность потенциальной энергии которых определяет положительную плотность энергии физического вакуума и космологическую постоянную. Однако вопрос о происхождении скалярных полей, как правило, не обсуждается, поскольку изначально эти поля предполагаются фундаментальными.

В данном обзоре предпринята попытка сформулировать основные проблемы современной квантовой космологии на основе стандартных теоретико-полевых методов, не прибегая к теории супергравитации и к представлениям о суперструнах в многомерных антидеситтеровских пространствах. Рассматривается происхождение нелинейных бозонных полей, их связь с квантовой природой гравитации и процессами рождения и эволюции ранней холодной Вселенной. Рассмотрены различные сценарии эволюции нашей Вселенной, процессы её нагрева и формирования в ней крупномасштабной неоднородной структуры. Обсуждается также вопрос о происхождении «тёмной энергии» и «тёмной материи» в современной Вселенной.

## 1. СКАЛЯРНЫЕ ПОЛЯ И ИНФЛЯЦИЯ РАННЕЙ ВСЕЛЕННОЙ ПРИ РАЗНЫХ УРАВНЕНИЯХ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

В ранних работах Глинера Э. Б. [15, 16] и Старобинского А. А. [17, 18] впервые была рассмотрена самая ранняя стадия эволюции холодной Вселенной до «Большого взрыва», информация о которой может быть получена только с помощью регистрации реликтового гравитационного излучения. В связи последними достижениями в обнаружении гравитационных волн [19, 20], которые свидетельствуют о рождении гравитационно-волновой астрономии, возможность наблюдения такого реликтового гравитационного излучения становится вполне реальной.

В работах Киржница Д. А. и Линде А. Д. [21–24], А. Х. Гута [25] и других (см., например, [26–28]) рассматривались различные инфляционные сценарии эволюции исходно горячей Вселенной, в процессе расширения и остывания которой происходят фазовые переходы первого и второго рода по температуре с восстановлением спонтанно нарушенных скрытых симметрий различных взаимодействий. В целом ряде работ рассматривались также фазовые переходы первого рода, возникающие при изменении плотности вещества [29–33] или под действием внешних гравитационных полей [34–36].

Для сценариев эволюции горячей Вселенной после «Большого взрыва» характерным является существование критических флуктуаций

при фазовых переходах второго рода либо образование доменов («пузырьков») новой фазы и доменных стенок в случае фазовых переходов первого рода, что должно было бы привести к сильной анизотропии реликтового излучения, что противоречит наблюдаемым данным.

В работах Линде (см. [37–40]) для объяснения отсутствия доменных стенок и монополей т'Хофта [41] – Полякова [42] в современной Вселенной был предложен сценарий «хаотической инфляции» ранней Вселенной, плотность энергии вакуума в которой определяется плотностью потенциальной энергии нелинейного скалярного поля  $U(\varphi)$ . При этом было показано, что для потенциалов  $U(\varphi)$ , зависящих степенным образом от  $\varphi$ , при достаточно малых константах связи и больших начальных значениях амплитуды скалярного поля  $\varphi(0)$  происходит расширение («раздувание») квантовых флуктуаций с начальными размерами порядка планковской длины  $l_p \sim 10^{-33}$  см до гигантских масштабов, которые могут на колоссальное число порядков ( $10^{110}$ !) превышать наблюдаемые размеры современной Вселенной  $L \sim 10^{28}$  см. Это позволило объяснить плоскую геометрию Вселенной и высокую степень изотропии реликтового излучения в пределах горизонта событий.

В то же время астрономические данные, полученные в последние годы, указывают на весьма сильную неоднородность в распределении галактик и их скоплений в нашей Вселенной.

В сценариях «хаотической инфляции» разогрев изначально холодной Вселенной до высоких температур согласно [43] происходит благодаря затуханию колебаний амплитуды скалярного поля вблизи минимума потенциала и аннигиляции первичного вещества и антивещества, рождающегося за счёт уменьшения потенциальной энергии скалярного поля по мере «скатывания» Вселенной в минимум потенциала.

В дальнейшем в [44] был предложен сценарий «гибридной инфляции», согласно которому в ранней Вселенной существовало два разных типа скалярных полей с сильно различающимися равновесными амплитудами и скоростями «скатывания», что позволило согласовать теорию инфляции с теорией супергравитации [37].

При этом следует иметь в виду, что в процессах зарождения и эволюции ранней Вселенной на малых масштабах в условиях большой кривизны 4-мерного пространства-времени весьма важную роль должно играть взаимодействие фундаментального скалярного поля с гравитационным полем, что не учитывалось явно в работах [37–40, 43, 44].

### 1.1. Взаимодействие скалярного и гравитационного полей

Как было показано в [45], лагранжиан нелинейного скалярного поля  $\varphi$  при условии сохранения конформной инвариантности теории в

пределе нулевой массы бозона  $\mu \rightarrow 0$  должен содержать квадратичное по  $\varphi$  слагаемое вида  $-R|\varphi|^2/6$ . В результате этого происходит перенормировка параметра нелинейности (самодействия) скалярного поля и гравитационной постоянной Эйнштейна  $\kappa = 8\pi G_N$  в уравнениях ОТО на безразмерную величину  $\kappa|\varphi|^2/3$ , которая для поля Хиггса [46, 47] с вакуумным средним  $\varphi_H \equiv v \approx 247$  ГэВ аномально мала, порядка  $3 \cdot 10^{-33}$ . Здесь и далее используется естественная система единиц, в которой постоянная Планка  $\hbar$  и скорость света  $c$  равны единице ( $\hbar = c = 1$ ).

В более общем случае при  $\mu \neq 0$  взаимодействие скалярного и гравитационного полей описывается дополнительным слагаемым  $-\xi R|\varphi|^2$  (см. [48–50]), где безразмерная величина  $\xi$  может рассматриваться как константа взаимодействия. Как отмечалось выше, для поля Хиггса такое взаимодействие может привести к заметной перенормировке гравитационной константы Эйнштейна  $\kappa$  и константы нелинейности скалярного поля  $g$  только при аномально большой величине константы связи  $\xi \geq 10^{32}$ .

В работе [51] для некоторого модифицированного экспоненциально плоского потенциала нелинейного скалярного поля в режиме «медленного скатывания» системы в основное состояние было получено следующее соотношение для определения константы  $\xi \approx 4 \cdot 10^4 \cdot m_H / \sqrt{2}v$ , где  $m_H$  – масса бозона Хиггса. Учитывая экспериментальное значение  $m_H \approx 125$  ГэВ [52, 53], получаем все ещё достаточно большую величину  $\xi \approx 1,44 \cdot 10^4$  для константы связи поля Хиггса с гравитационным полем.

В случае произвольного нелинейного комплексного скалярного поля, взаимодействующего с гравитационным полем, лагранжиан имеет следующий вид

$$L = g^{\mu\nu} (\partial_\mu \varphi) (\partial_\nu \varphi^*) + \frac{\mu^2}{2} |\varphi|^2 - \frac{g^2}{4} |\varphi|^4 - \xi R |\varphi|^2. \quad (1.1.)$$

При ненулевой скалярной кривизне 4-мерного пространства такое взаимодействие приводит к перенормировке параметра  $(\mu^2 - 2\xi R)$  вакуумного среднего  $\varphi_0(R) = \sqrt{(\mu^2 - 2\xi R)/g}$  и массы скалярного бозона  $m_B(R) = \sqrt{2(\mu^2 - \xi R)}$ .

В работе [54] предполагалось, что лагранжиан скалярного поля (1.1) может содержать дополнительное линейное по  $\varphi$  слагаемое  $\zeta R\varphi/\sqrt{\kappa}$ , которое обеспечивает фазовый переход первого рода в ранней

холодной Вселенной. Здесь  $\zeta$  – некоторая безразмерная константа, в общем случае не равная  $\xi$ , а множитель  $1/\sqrt{\kappa}$  выбирался из соображений размерности. Однако введение дополнительной константы  $\zeta \neq \xi$  представляется излишним.

В связи с этим в наших работах [55, 56] рассматривался модифицированный лагранжиан, в котором взаимодействие нелинейного скалярного поля с гравитационным полем задавалось в виде  $-\xi R|(\varphi - \varphi_0)|^2$ , что предполагает отсутствие взаимодействия между скалярным и гравитационным полями в основном состоянии при  $\varphi = \varphi_0$ .

В результате этого лагранжиан комплексного скалярного поля принимает следующий вид

$$\tilde{L} = \frac{1}{2} g^{\mu\nu} (\partial_\mu \varphi)(\partial_\nu \varphi^*) + \frac{1}{2} (\mu^2 - 2\xi R)|\varphi|^2 - \frac{1}{4} g^2 |\varphi|^4 + \xi R \varphi_0 (\varphi + \varphi^*) - \xi R \varphi_0^2. \quad (1.2)$$

Если представить амплитуду скалярного поля  $\varphi$  в виде  $\varphi = (\Phi + \varphi')$ , где  $\Phi(R)$  – вещественная (классическая) часть амплитуды, а  $\varphi'$  – её комплексная (квантованная) часть, то с помощью вариации лагранжиана (1.2) по величине  $\varphi'$  при условии  $|\varphi'| = |\Phi|$  в линейном приближении получаем уравнение Клейна–Гордона для бозонного поля  $\varphi'$  с зависящей от  $R$  массой скалярного бозона

$$m_b(R) = \sqrt{3g^2\Phi^2 - (\mu^2 - 2\xi R)}, \quad (1.3)$$

аналогичного бозону Хиггса.

В нулевом приближении по  $\varphi'$  из (1.2) следует выражение для плотности потенциальной энергии вещественной части скалярного поля

$$U(\Phi, R) = \frac{1}{4} g^2 \Phi^4 - \frac{1}{2} (\mu^2 - 2\xi R) \Phi^2 - 2\xi R \varphi_0 \Phi - \varphi_0/2 + U_0, \quad (1.4)$$

где  $U_0$  – некоторая произвольная константа, которая должна обеспечить нулевое минимальное значение потенциала (1.4).

Условие существования экстремумов потенциала (1.4) сводится к кубическому уравнению относительно амплитуды  $\Phi$

$$\frac{\partial U}{\partial \Phi} = g^2 \Phi^3 - (\mu^2 - 2\xi R) \Phi - 2\xi R \varphi_0 = 0. \quad (1.5)$$

Как будет видно из дальнейшего, уравнение (1.5) в определённой области параметров имеет три вещественных корня, так что при изменении скалярной кривизны возможен фазовый переход первого рода (см. [57]).

## 1.2. Фазовый переход первого рода в ранней холодной Вселенной

Для дальнейшего анализа уравнений (1.4) и (1.5) удобно перейти к безразмерным переменным  $x = \Phi/\varphi_0$  и  $V = U/\mu^2\varphi_0^2$

$$V(x, h) = \frac{x^4}{4} - (1-h)\frac{x^2}{2} - hx + \frac{h}{2} + V_0; \quad (1.6)$$

$$\frac{\partial V}{\partial x} = x^3 - (1-h)x - h = 0, \quad (1.7)$$

где  $h = 2\xi R/\mu^2$  – безразмерный параметр «внешнего поля», а  $V_0 = U_0/\mu^2\varphi_0^2$ .

На рис. 1 показаны зависимости потенциала (1.6) от  $x$  для разных значений параметра  $h$  при  $V_0 = 7$ . Как видим, в области  $h \geq 0,25$  потенциал (1.6) имеет только один минимум  $V_{\min} = 6,75$  в точке  $x = 1$ , в котором по предположению изначально находилась система – только что родившаяся в результате достаточно большой квантовой флуктуации ранняя Вселенная.

Глубина и положение этого минимума остаются постоянными при любых значениях параметра  $h$ , изменяющегося в области  $-2 < h < \infty$ . В области  $h < 0,25$  у потенциала (1.6) появляется второй минимум, отделённый от первого максимумом (потенциальным барьером).

При  $h = 0$  оба минимума имеют одинаковую глубину  $V_{\min}^{(1)} = V_{\min}^{(2)} = 6,75$  и располагаются симметрично в точках  $x = \pm 1$ , а максимальное значение потенциала в точке  $x = 0$  равно  $V_{\max} = 7$ . В области  $h < 0$  глубина левого минимума увеличивается с уменьшением параметра  $h$ . Наконец, при  $h = -2$  правый минимум и максимум потенциала (1.6) исчезают, превращаясь в точку перегиба при  $x = 1$ , в которой  $\partial V/\partial x = \partial^2 V/\partial x^2 = 0$ . При этом левый минимум достигает нулевого значения в точке  $x = -2$ .

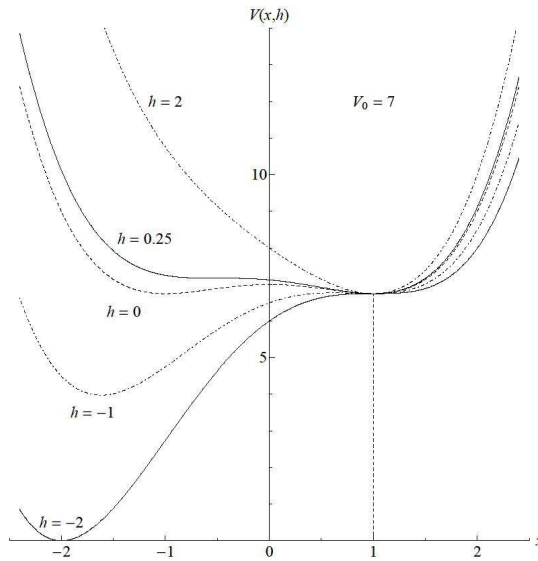


Рис. 1. Зависимости безразмерного потенциала нелинейного скалярного поля  $V(x, h)$  от безразмерной амплитуды  $x = \Phi/\varphi_0$  для разных значений параметра «внешнего поля»  $h$ . Сплошными линиями показаны зависимости  $V(x, h)$  для порогового значения  $h = 0, 25$ , ниже которого у потенциала появляется второй минимум, а также для критического значения  $h = h_c \equiv -2$ , когда потенциал  $V(x, -2)$  имеет две точки перегиба при  $x = \pm 1$  и только один минимум при  $x = -2$ , равный нулю при выборе константы  $V_0 = 7$

На рис. 2а показаны зависимости от параметра  $h$  трёх вещественных корней  $x_i(h)$  кубического уравнения (1.7) в области  $-2 \leq h \leq 0, 25$ . При этом в области  $h > -2$  существует независящий от  $h$  положительный корень  $x = 1$ , соответствующий значению амплитуды скалярного поля  $\Phi = \varphi_0 \equiv \mu/g$  (ветвь  $ABC$ ). Этот положительный корень определяет постоянное положение правого минимума потенциала (1.6), а отрицательный корень (ветвь  $DEF$ ) определяет положение левого минимума, тогда как знакопеременный корень (ветвь  $AOF$ ) соответствует положению максимума потенциала, т. е. является абсолютно неустойчивым. Отрезки  $AB$  и  $EF$  на положительной и отрицательной ветвях соответствуют метастабильным состояниям.

Заметим, что при  $\Phi = \varphi_0$  согласно (1.3) масса бозона равна

$$m_B(R) = \sqrt{2(\mu^2 + \xi R)} \equiv \mu\sqrt{2+h} \tag{1.8}$$

и при  $h = -2$  обращается в нуль.

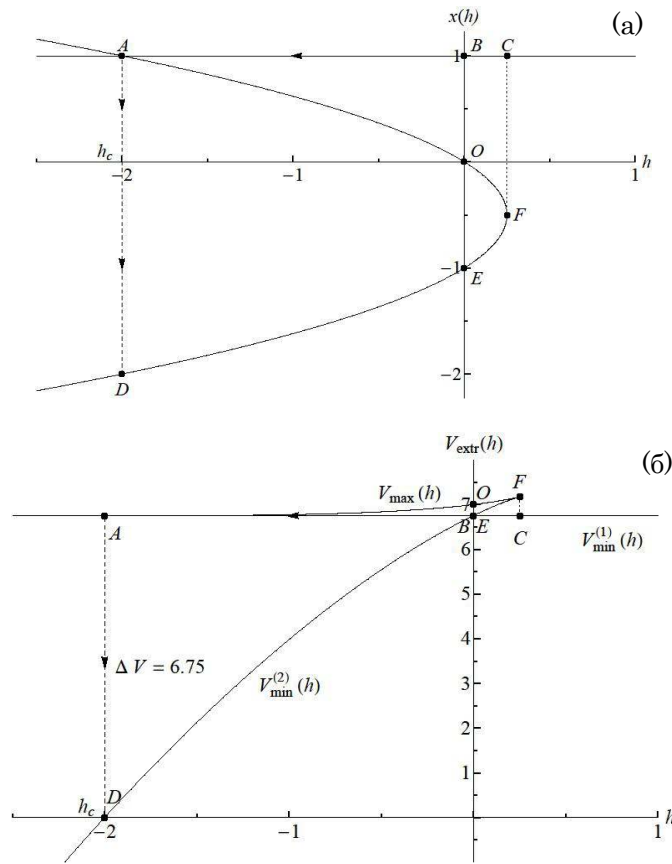


Рис. 2. Зависимости от  $h$  трёх вещественных корней  $x_i(h)$  кубического уравнения (1.7) в области  $-2 \leq h \leq 0,25$  (а) и соответствующих этим корням двух минимальных  $V_{\min}^{(1,2)}(h)$  и одного максимального  $V_{\max}(h)$  значений потенциала  $V_{\text{extr}}(h) = V(x_i(h), h)$  в той же области (б)

На рис. 2б показаны три экстремальных значения потенциала (1.6), которые соответствуют зависимостям от  $h$  трёх корней кубического уравнения (1.7) на рис. 2а и определяют положения двух минимумов  $V_{\min}^{(1)}(h)$  и  $V_{\min}^{(2)}(h)$  потенциала (1.6) и одного максимума  $V_{\max}(h)$ .

В отсутствие центров образования зародышей новой фазы (доменов) в области  $-2 < h < 0,25$  система по мере расширения Вселенной и уменьшения скалярной кривизны  $R$  движется по горизонтальной прямолинейной фазовой траектории  $ABC$  с постоянным значением потенциала  $V_{\min}^{(1)} = 6,75$  (при  $V_0 = 7$ ) из стабильного состояния в некоторой

начальной точке при  $h > 0,25$  в критическую точку при  $h = -2$ . После этого система скачком переходит из точки  $A$  в точку  $D$ , что соответствует фазовому переходу первого рода с уменьшением потенциала скалярного поля (1.6) на величину  $\Delta V = 6,75$ .

**1.3. Эволюция ранней Вселенной,  
заполненной веществом  
с уравнением состояния  $P > \varepsilon/3$ :  
сценарий «гиперинфляции»**

Предположим, что в некоторый (начальный) момент времени в однородном пространстве, заполненном нелинейным скалярным полем в основном состоянии с равновесной амплитудой  $\varphi_0$  и с минимальной плотностью потенциальной энергии  $U_{\min}^{(1)}(\varphi_0) = 6,75\mu^2\varphi_0^2$  при нулевой температуре  $T = 0$  возникает достаточно большая квантовая флуктуация скалярного поля с  $\delta\varphi = (\varphi - \varphi_0) \neq 0$ , в результате которой из вакуума спонтанно рождается нейтральное по всем зарядам холодное вещество с уравнением состояния  $P = \nu\varepsilon$ , где  $P$  и  $\varepsilon$  – давление и плотность энергии вещества, а  $\nu$  – безразмерный коэффициент, удовлетворяющий условию  $\nu > 1/3$ .

Предположим также, что в силу изотропности пространства форма квантовой флуктуации близка к сферической, а её начальный радиус  $a_0$  значительно превышает планковскую длину  $l_p = 1/M_p$ , так что можно пренебречь квантовыми эффектами, в частности туннелированием зародыша между минимумами потенциала через потенциальный барьер.

В связи с этим для описания дальнейшей эволюции такой большой (по сути, квазиклассической) флуктуации будем использовать классические уравнения ОТО, соответствующие модели однородной и изотропной замкнутой Вселенной с космологической постоянной Эйнштейна  $\Lambda = \tilde{\kappa}\lambda$  [4]

$$\dot{a}^2 + 1 = \frac{\tilde{\kappa}}{3}(\varepsilon + \lambda)a^2; \quad \ddot{a} = -\frac{\tilde{\kappa}}{6}(\varepsilon + 3P - 2\lambda)a, \quad (1.9)$$

где  $a$  – масштабный фактор (радиус) Вселенной,  $\dot{a}$  и  $\ddot{a}$  – его первая и вторая производные по собственному времени, а  $\tilde{\kappa} = \kappa / (1 + 2\xi\kappa\varphi_0^2)$  – гравитационная константа Эйнштейна, перенормированная за счёт взаимодействия скалярного и гравитационного полей (см. [45]). Параметр  $\lambda$  определяет плотность энергии физического вакуума (см. ниже).

Из уравнений (1.9) с учётом возможной зависимости  $\lambda$  от времени следует закон сохранения энергии

$$3\frac{\dot{a}}{a} + \frac{\dot{\varepsilon} + \dot{\lambda}}{\varepsilon + P} = 0, \quad (1.10)$$

а также выражение для скалярной кривизны 4D пространства-времени

$$R = -\frac{6}{a^2}(a\ddot{a} + \dot{a}^2 + 1) = \tilde{\kappa}[(3\nu - 1)\varepsilon - 4\lambda]. \quad (1.11)$$

Как видим, в отсутствие вещества, когда  $\varepsilon = 0$ , либо для ультрарелятивистского вещества и равновесного электромагнитного излучения с уравнением состояния  $P = \varepsilon/3$  скалярная кривизна равна  $R = -4\Lambda \equiv -4\tilde{\kappa}\lambda$ . Однако при условии  $\nu > 1/3$  и  $(3\nu - 1)\varepsilon > 4\lambda$  скалярная кривизна является положительной.

В отличие от сценария «хаотической инфляции» [38, 39], в рамках которого плотность энергии вакуума определяется как  $\lambda = U(\varphi) + \dot{\varphi}^2/2$ , в данной работе благодаря сохранению постоянных значений как амплитуды скалярного поля  $\varphi = \varphi_0$ , так и минимальной плотности потенциальной энергии  $U(\varphi) = U_{\min}^{(1)}(\varphi_0)$  на фазовой траектории  $ABC$  при изменении параметра «внешнего поля»  $h = 2\xi R/\mu^2$  во всей области  $h > -2$  будем предполагать, что величина  $\lambda$  определяется соотношением

$$\lambda_0 = U_{\min}^{(1)}(\varphi_0) = 6,75\mu^2\varphi_0^2 = const. \quad (1.12)$$

В качестве вещества, заполняющего раннюю холодную замкнутую Вселенную, рассмотрим вначале нерелятивистский вырожденный ферми-газ с уравнением состояния  $P = 2\varepsilon/3$ , состоящий из фермионов с массами  $m_F$ . Заметим, что в силу закона сохранения нулевого момента импульса в вакууме количество родившихся фермионов с противоположными направлениями спина  $S = \pm 1/2$  должно быть одинаковым, так что полное число фермионов  $N_0$  должно быть чётным.

Таким образом, полагая  $\lambda = \lambda_0 = const$ , согласно (1.10), при  $\nu = 2/3$  получаем

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \cdot [a_0/a(t)]^5. \quad (1.13)$$

Здесь  $\varepsilon_0$  и  $a_0$  – начальные значения плотности энергии вещества и радиуса зародыша Вселенной, которые удовлетворяют следующим условиям  $a_0/l_p$  и  $\varepsilon_0 \leq \varepsilon_p$ , где  $\varepsilon_p = M_p^4$  – предельная планковская плотность энергии. При этом из (1.11) следует

$$R(t) = \tilde{\kappa} [\varepsilon(t) - 4\lambda]. \quad (1.14)$$

Будем предполагать, что в начальный момент времени  $t = 0$  скалярная кривизна положительна и удовлетворяет условию  $2\xi R(0)/\mu^2 \equiv h(0) > 0,25$ , так что потенциал скалярного поля  $U(\Phi)$  имеет единственный минимум в точке  $\Phi = \varphi_0$  (см. рис. 1), в котором произошло рождение Вселенной.

В процессе расширения Вселенной скалярная кривизна (1.14) уменьшается во времени по мере уменьшения  $\varepsilon(t)$  согласно степенному закону (1.13). В рамках рассматриваемой модели нелинейного скалярного поля это соответствует уменьшению безразмерного параметра «внешнего поля»  $h(t) = 2\xi R(t)/\mu^2$ .

Благодаря этому происходит движение системы справа налево вдоль горизонтальной фазовой траектории  $ABC$  (см. рис. 2). При этом вплоть до точки  $h = -2$  сохраняются постоянными значение амплитуды скалярного поля  $\Phi = \varphi_0 \equiv \mu/g$  и минимальное значение потенциала  $U_{\min}^{(1)}(\varphi_0) = 6,75\mu^2\varphi_0^2$ .

Для дальнейшего рассмотрения удобно ввести безразмерные переменные  $\tilde{a}(\tau) = a(t)/l_p$  и  $\tau = t/t_p$  (где  $t_p = 1/M_p$  – планковское время). В этом случае скалярная кривизна (1.14) и безразмерный параметр «внешнего поля»  $h$  с учётом закона сохранения энергии (1.13) определяются следующими выражениями

$$R(\tau) = -\Lambda \cdot \left[ 4 - \frac{\varepsilon_0}{\lambda_0} \cdot \left( \frac{\tilde{a}_0}{\tilde{a}(\tau)} \right)^5 \right]; \quad (1.15)$$

$$h(\tau) \equiv \frac{2\xi R(\tau)}{\mu^2} = -\frac{\tilde{\xi} \cdot \beta}{(1 + \tilde{\xi})} \cdot \left[ 4 - \frac{\tilde{\varepsilon}_0}{\beta} \left( \frac{\tilde{a}_0}{\tilde{a}(\tau)} \right)^5 \right], \quad (1.16)$$

где  $\tilde{a}_0 = a_0/l_p$ ,  $\tilde{\xi} = 2\xi\kappa\varphi_0^2$ ,  $\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0/\mu^2\varphi_0^2$  и  $\beta = \lambda_0/\mu^2\varphi_0^2 = 6,75$  – безразмерные параметры данной модели.

Для описания динамики Вселенной воспользуемся уравнением (1.9) для скорости её расширения совместно с законом сохранения энергии

$$\frac{d\tilde{a}}{d\tau} = \left\{ b \left[ 1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_0}{\beta} \cdot \left( \frac{\tilde{a}_0}{\tilde{a}(\tau)} \right)^5 \right] \cdot \tilde{a}^2(\tau) - 1 \right\}^{1/2}. \quad (1.17)$$

Величина  $b = \tilde{\kappa} \lambda_0 l_p^2 / 3$  в силу перенормировки гравитационной константы Эйнштейна является функцией безразмерного параметра  $\tilde{\xi} = 2\xi \kappa \varphi_0^2$

$$b(\tilde{\xi}) = \frac{\beta \Omega_p}{3 \tilde{\varepsilon}_p} \frac{1}{1 + \tilde{\xi}}, \quad (1.18)$$

где  $\Omega_p = \kappa \varepsilon_p l_p^2 = 25.1327\dots$  – универсальная константа, которая при  $\hbar = c = 1$  выражается только через гравитационную постоянную  $G_N$ , а  $\tilde{\varepsilon}_p = \varepsilon_p / \mu^2 \varphi_0^2$  – дополнительный безразмерный параметр модели, зависящий от параметров скалярного поля  $\mu$  и  $\varphi_0 = \mu / g$ .

Требование вещественности скорости расширения ранней Вселенной эквивалентно условию положительности минимума подкоренного выражения в (1.17), которое с учётом (1.18) выполняется при следующих условиях

$$\begin{cases} \tilde{\varepsilon}_0 > \tilde{\varepsilon}_{0\min}(\xi) = \frac{1}{b(\tilde{\xi}) \tilde{a}_0^2} - \beta, & \text{если } \tilde{\xi} \leq \frac{5}{9} \beta \frac{\Omega_p}{\tilde{\varepsilon}_p} \tilde{a}_0^2 - 1; \\ \tilde{\varepsilon}_0 > \tilde{\varepsilon}_{0\min}(\xi) = \frac{2}{3} \beta \left( \frac{5}{3} \beta b(\tilde{\xi}) \tilde{a}_0^2 \right)^{-2/5}, & \text{если } \tilde{\xi} > \frac{5}{9} \beta \frac{\Omega_p}{\tilde{\varepsilon}_p} \tilde{a}_0^2 - 1. \end{cases} \quad (1.19)$$

В рамках данного сценария расширение ранней Вселенной может продолжаться только до того момента времени  $\tau_c$ , когда параметр  $h(\tau)$  достигает своего критического значения  $h_c \equiv h(\tau_c) = -2$  в точке  $A$  на фазовой траектории  $ABC$  (см. рис. 2), а безразмерный радиус равен своему предельному значению  $\tilde{a}_c \equiv \tilde{a}(\tau_c)$ .

Из выражения (1.16) при  $h = -2$  получаем следующее соотношение для определения зависимости отношения  $\tilde{a}_c / \tilde{a}_0$  от параметров модели  $\beta$ ,  $\tilde{\varepsilon}_0$  и  $\tilde{\xi}$

$$\frac{\tilde{a}_c}{\tilde{a}_0} = \left[ \frac{\tilde{\xi}}{2[(2\beta-1)\tilde{\xi}-1]} \tilde{\varepsilon}_0 \right]^{1/5}. \quad (1.20)$$

Необходимое условие расширения зародыша Вселенной  $\tilde{a}_c > \tilde{a}_0$  приводит к следующим ограничениям на параметры  $\tilde{\varepsilon}_0$  и  $\tilde{\xi}$

$$\tilde{\varepsilon}_0 > 2 \frac{(2\beta-1)\tilde{\xi}-1}{\tilde{\xi}}; \quad \tilde{\xi} \geq 1/(2\beta-1). \quad (1.21)$$

Согласно (1.20) при стремлении параметра  $\tilde{\xi}$  к своему предельно допустимому минимальному значению  $\tilde{\xi}^* \equiv 1/(2\beta-1)$  радиус ранней Вселенной в точке фазового перехода стремится к бесконечности  $\tilde{a}_c \rightarrow \infty$  по степенному закону  $(\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^*)^{-1/5}$ .

С другой стороны, следует учитывать, что начальная плотность энергии вещества  $\varepsilon_0$ , которое родилось в результате квантовой флуктуации вакуума, в силу соотношения неопределённости не может превышать планковскую плотность энергии  $\varepsilon_p$ . Поэтому полная начальная энергия вещества  $E_0 = \varepsilon_0 a_0^3$  должна быть ограничена сверху энергией Планка  $\varepsilon_p l_p^3$ , откуда следует неравенство

$$\tilde{\varepsilon}_0 \leq \tilde{\varepsilon}_p / \tilde{a}_0^3. \quad (1.22)$$

Условия (1.19), (1.20) и (1.22), совместно с неравенством  $\tilde{a}_0 > 1$ , представляют собой полный набор ограничений, налагаемых на параметры рассматриваемой модели. Как следует из соотношения (1.12) параметр  $\beta = 6,75$ , так что условия (1.21) принимают вид

$$\tilde{\varepsilon}_0 > 25 \frac{\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^*}{\tilde{\xi}}; \quad \tilde{\xi} \geq \tilde{\xi}^* = 0,08. \quad (1.23)$$

С другой стороны, полная потенциальная энергия скалярного поля, которая выделяется при фазовом переходе первого рода и определяется уменьшением потенциала скалярного поля на величину  $\Delta U = 6,75 \mu^2 \varphi_0^2$ , равна

$$E_c = 2\pi^2 a_c^3 \cdot \Delta U. \quad (1.24)$$

В этом случае соотношение (1.20) и отношение конечного  $E_c$  и начального  $E_0$  значений полной энергии можно представить в виде

$$\frac{\tilde{a}_c}{\tilde{a}_0} = \left( \frac{0.04\tilde{\xi}}{\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^*} \frac{\tilde{\xi}}{\tilde{\varepsilon}_0} \right)^{1/5}; \quad \frac{E_c}{E_0} = \frac{\beta}{\tilde{\varepsilon}_0} \cdot \left( \frac{\tilde{a}_c}{\tilde{a}_0} \right)^3 = \frac{6.75}{\tilde{\varepsilon}_0^{2/3}} \left\{ \frac{0.04\tilde{\xi}}{\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^*} \right\}^{3/5}. \quad (1.25)$$

Таким образом, если параметр  $\tilde{\xi} \rightarrow \tilde{\xi}^* = 0,08$ , то в точке фазового перехода первого рода как максимальный радиус ранней холодной Вселенной  $a_c$ , так и выделяющаяся полная энергия  $E_c$  стремятся к бесконечности при любых начальных значениях  $a_0$  и  $E_0$ .

Заметим, что значению  $\tilde{\xi}^* = 0,08$  при  $\beta = 6,75$  соответствует некоторое минимальное значение исходной константы взаимодействия скалярного и гравитационного полей  $\xi^* = \tilde{\xi}^*/2\kappa\varphi_0^2 = 0,04/\kappa\varphi_0^2$ , которое зависит от величины вакуумного среднего  $\varphi_0$ . Например, для поля Хиггса с вакуумным средним  $\varphi_H = \mu_H/g_H \approx 247$  ГэВ с хорошей точностью получаем  $\kappa\varphi_H^2 \approx 10^{-32}$ , откуда следует нереально большое значение  $\xi_{\min} \approx 4 \cdot 10^{30}$  (ср. с [49–51]). Это свидетельствует о невозможности непосредственного объединения стандартной модели элементарных частиц с теорией гравитации.

Однако если предположить, что вакуумное среднее для фундаментального скалярного поля в ранней Вселенной удовлетворяло условию  $\kappa\varphi_0^2 \approx 1$ , что соответствует отношению  $\varphi_0/\varphi_H \approx 10^{16}$ , то получим следующую оценку для константы  $\xi_{\min} \approx 0,04$ .

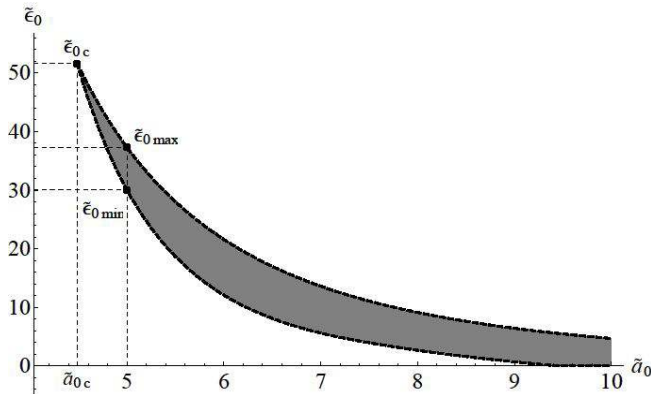


Рис. 3. Двумерная область существования эволюционных решений уравнения (1.17) в пространстве безразмерных параметров  $\tilde{a}_0 \equiv a_0/l_p$  и  $\tilde{\varepsilon}_0 \equiv \varepsilon_0/\varepsilon_p$

Отсюда следует в частности, что при  $\xi \rightarrow \xi^*$  полученные в [45] перенормировки константы самодействия нелинейного скалярного поля  $\tilde{g}^2 = g^2 \cdot (1 + \xi \kappa \varphi_0^2)$  и гравитационной константы Эйнштейна  $\tilde{\kappa} = \kappa / (1 + 2\xi \kappa \varphi_0^2)$  оказываются порядка 4 % и 8 %, соответственно.

На рис. 3 показана область существования эволюционных решений уравнения (1.17) на плоскости параметров  $\tilde{\varepsilon}_0$  и  $\tilde{a}_0$  при  $\tilde{\xi} = 0,0801$  и  $\tilde{\varepsilon}_p \equiv \varepsilon_p / \mu^2 \varphi_0^2 = 4660$ , полученная с учётом ограничений (1.19), (1.21) и (1.22). В данном случае верхняя граница области определяется условием (1.22), а нижняя соответствует условию  $\tilde{\varepsilon}_0 = \tilde{\varepsilon}_{0\min}(\tilde{\xi})$  в (1.19).

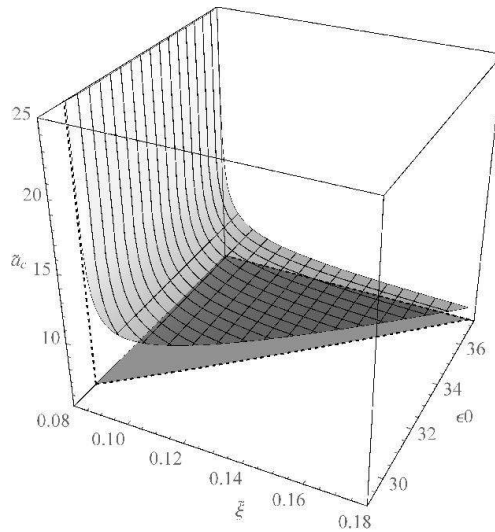


Рис. 4. Зависимость безразмерного радиуса Вселенной в момент фазового перехода  $\tilde{a}_c$  (см. (1.25)) от параметров  $\tilde{\xi}$  и  $\tilde{\varepsilon}_0$  при  $\tilde{a}_0 = 5$ ,  $\beta = 6.75$  и  $\tilde{\varepsilon}_p = 4660$ .

На плоскости  $\tilde{\xi} - \tilde{\varepsilon}_0$  выделена область допустимых значений параметров, определяемая условиями (1.19), (1.21) и (1.22)

Как видим, для данных параметров решения существуют только при достаточно больших начальных значениях радиуса зародыша Вселенной  $a_0 \geq 5l_p$ , т. е. для достаточно большой квантовой флуктуации. В связи с этим можно говорить о том, что проблема сингулярности в начальной точке устраняется наложением естественных ограничений на область существования решений ОТО.

На рис. 4 показана величина безразмерного радиуса Вселенной в момент фазового перехода  $\tilde{a}_c$  в зависимости от параметров  $\tilde{\xi}$  и  $\tilde{\varepsilon}_0$  при

$\tilde{a}_0 = 5$ ,  $\beta = 6,75$  и  $\tilde{\varepsilon}_p = 4660$ . Как видим,  $\tilde{a}_c \rightarrow \infty$  при  $\tilde{\xi} \rightarrow 0,08$ , в соответствии с (1.25). При этом достаточно большое расширение зародыша Вселенной, когда  $\tilde{a}_c \gg \tilde{a}_0$ , возможно только в очень узкой области значений параметра  $\tilde{\xi}$ , когда разность  $(\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^*) = 1$ .

На рис. 5 представлены временные зависимости безразмерного радиуса Вселенной  $\tilde{a}(\tau)$  до момента фазового перехода, которые определяются уравнением (1.17) для разных значений параметра  $\tilde{\varepsilon}_0$  вблизи его минимального значения  $\tilde{\varepsilon}_{0\min}(\tilde{\xi})$ , в соответствии с соотношениями (1.19).

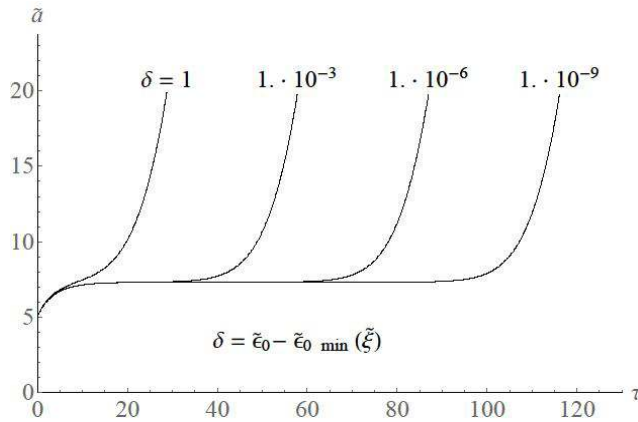


Рис. 5. Зависимости безразмерного радиуса  $\tilde{a}(\tau)$  расширяющейся ранней холодной Вселенной от безразмерного времени  $\tau = t/t_p$  вплоть до момента  $\tau_c$  в точке фазового перехода  $h = h_c$ . Решения уравнения (1.17) приведены для разных значений параметра  $\tilde{\varepsilon}_0$  вблизи минимального значения  $\tilde{\varepsilon}_{0\min}$ , определяемого неравенствами (1.19), при  $\tilde{a}_0 = 5$ ,  $\tilde{\xi} = 0,0801$ ,  $\beta = 6,75$  и  $\tilde{\varepsilon}_p = 4660$

Как видим, в данном случае максимальный радиус Вселенной, ограниченный точкой фазового перехода в момент времени  $t = t_c$ , практически не зависит от  $\tilde{\varepsilon}_0$  и равен  $a_c \approx 20l_p$ , тогда как время эволюции  $t_c$  может изменяться в достаточно широком интервале  $25t_p < t < 120t_p$  за счёт увеличения ширины «плато».

Однако во всех случаях на заключительной стадии, когда начиная с некоторого момента времени  $t = t_\lambda$ , выполняется условие  $\lambda_0 \gg \varepsilon(t_\lambda)$ , расширение Вселенной происходит по экспоненциальному закону, характерному для инфляционных решений де Ситтера

$$a(t) = a_\lambda \cdot \exp\{\gamma \cdot (t - t_\lambda)\}; \quad \gamma = l_p \cdot \sqrt{\Lambda_0/3}, \quad (1.26)$$

где  $a_\lambda = a(t_\lambda)$ , а  $\Lambda_0 = \tilde{\kappa}\lambda_0$ . Следует подчеркнуть, что в данном случае инфляция происходит под действием постоянной во времени плотности энергии вакуума  $\lambda_0 = const$ , в отличие от сценария «хаотической инфляции» [38–40], когда расширение Вселенной происходит на фоне убывающей плотности энергии скалярного поля.

В связи с экспоненциальным законом расширения (1.26) время достижения точки фазового перехода первого рода при  $\tilde{\xi} \rightarrow \tilde{\xi}^*$  стремится к бесконечности по логарифмическому закону  $t_c \propto \left| \ln(\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^*) \right|$ . Неограниченный рост времени  $\tau_c \rightarrow \infty$  происходит также при  $\tilde{\varepsilon}_0 \rightarrow \tilde{\varepsilon}_{0\min}$  благодаря тому, что минимальное значение скорости расширения  $\dot{a}$ , а также ускорение  $\ddot{a}$  и все высшие производные  $a$  по времени стремятся к нулю. Это приводит к тому, что плато на зависимости  $\tilde{a}(\tau)$  (см. рис. 5) по мере приближения  $\tilde{\varepsilon}_0$  к  $\tilde{\varepsilon}_{0\min}(\tilde{\xi})$  на нижней границе заштрихованной области на рис. 3 формально может затягиваться до бесконечности.

В заключение этого раздела рассмотрим случай, когда материя, заполняющая Вселенную, описывается предложенным в [58] уравнением состояния предельно сжатого вещества  $P = \varepsilon$ . Тогда закон сохранения энергии в расширяющейся Вселенной согласно уравнениям ОТО при  $\lambda = const$  принимает следующий вид

$$3\frac{\dot{a}}{a} + \frac{\dot{\varepsilon}}{2\varepsilon} = 0. \quad (1.27)$$

Отсюда следует, что уменьшение плотности энергии вещества в процессе расширения ранней холодной Вселенной происходит по степенному закону

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 \cdot a_0^6 / a^6(t). \quad (1.28)$$

В связи с этим безразмерный параметр «внешнего поля», пропорциональный скалярной кривизне, принимает вид

$$h(t) = -\frac{\tilde{\xi}}{1 + \tilde{\xi}} \cdot \left[ 4\tilde{\lambda}_0 - 2\tilde{\varepsilon}_0 \frac{a_0^6}{a^6(t)} \right], \quad (1.29)$$

где  $\tilde{\lambda}_0 \equiv \lambda_0 / \mu^2 \varphi_0^2 = 6,75$  и  $\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0 / \mu^2 \varphi_0^2$ . В точке фазового перехода первого рода, когда параметр  $h(t)$  достигает критического значения  $h_c = -2$ , радиус Вселенной, согласно (1.29) равен

$$a_c = a_0 \cdot \left[ \frac{\tilde{\xi}}{(2\tilde{\lambda}_0 - 1) \cdot \tilde{\xi} - 1} \cdot \tilde{\varepsilon}_0 \right]^{1/6}. \quad (1.30)$$

Отсюда следует, что критический радиус ранней Вселенной в точке фазового перехода при  $\tilde{\xi} \rightarrow \tilde{\xi}^* = 0,08$  расходится по закону  $a_c \propto (\tilde{\xi} - \tilde{\xi}^*)^{-1/6}$ .

Таким образом, сценарий «гиперинфляции» ранней Вселенной реализуется для любого уравнения состояния вещества  $P = \nu \varepsilon$  с  $\nu = const$ , если выполняются условия  $\nu > 1/3$ .

#### 1.4. Инфляция Вселенной, заполненной неидеальным релятивистским ферми-газом с короткодействующим отталкиванием между частицами

Ниже рассматривается сценарий эволюции ранней холодной Вселенной, заполненной неидеальным релятивистским вырожденным ферми-газом с короткодействующим отталкиванием между фермионами. В этом случае, как будет показано ниже, отношение давления к плотности энергии  $P/\varepsilon = \nu(n_F)$  зависит от концентрации фермионов и растёт от нуля при  $n_F = 0$  до предельного максимального значения  $\nu(n_F) = 1$  при  $n_F \rightarrow \infty$ .

Использование такого уравнения состояния с учётом уменьшения коэффициента  $\nu(n_F)$  при уменьшении концентрации фермионов  $n_F(t) = n_{F0} \cdot a_0^3 / a^3(t)$  в процессе расширения ранней Вселенной приводит к устранению расходимостей критического радиуса  $a_c$  и времени достижения точки перехода  $t_c$  при  $\xi \rightarrow \xi^*$ , характерных для «жёсткого» уравнения состояния вещества при  $\nu = const$  и  $\nu > 1/3$ .

Итак, предположим, что в некоторый начальный момент времени  $t = 0$  в результате достаточно большой сферически симметричной кван-

товой флуктуации вакуума с характерным размером  $a_0 \gg l_p$  рождается чётное число  $N_F$  массивных фермионов.

Начальная концентрация фермионов  $n_{F_0} = N_F / \nu_0$ , заполняющих объем  $\nu_0 = 2\pi^2 a_0^3$  замкнутого криволинейного 3-мерного пространства с положительной гауссовой кривизной, должна быть ограничена условием  $n_{F_0} \leq n_p = 1/3\pi^2 l_p^3$ , которое является следствием ограничения импульса Ферми  $p_{F_0} = (3\pi^2 n_{F_0})^{1/3} \leq M_p$ . В результате этого возникает ограничение на полное число частиц  $N_F \leq 2a_0^3/3l_p^3$  в родившейся Вселенной.

В дальнейшем будем предполагать, в соответствии с моделью Зельдовича [58], что между фермионами существует короткодействующее отталкивание в виде потенциала типа Юкава

$$V(r_{12}) = q \exp(-\chi r_{12}) / r_{12}. \quad (1.31)$$

Здесь  $\chi$  – обратный эффективный радиус взаимодействия, а  $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$  – расстояние между двумя частицами, так что полная потенциальная энергия взаимодействия частиц определяется выражением

$$E_{\text{int}} = q^2 \cdot \left[ \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{\exp(-\chi \cdot r_{ij})}{r_{ij}} \right], \quad (1.32)$$

где суммирование ведётся по всем  $i$  и  $j$  частицам. При условии, что среднее расстояние между частицами  $\bar{r} = n_F^{-1/3}$  меньше «радиуса экранирования»  $r_s = 1/\chi$ , суммирование в (1.32) с хорошей точностью можно заменить двукратным интегрированием по объёму  $V$  системы взаимодействующих частиц (см. [58])

$$E_{\text{int}} = \frac{1}{2} q^2 n_F^2 \cdot \iint_{VV} \frac{\exp(-\chi \cdot r_{12})}{r_{12}} dV_1 dV_2 = \frac{2\pi q^2 n_F^2 V}{\chi^2}. \quad (1.33)$$

В этом случае парциальные вклады в давление и плотность энергии вещества за счёт потенциальной энергии короткодействующего отталкивания между фермионами (1.31) равны друг другу и зависят квадратично от концентрации частиц

$$P_{\text{int}} = \varepsilon_{\text{int}} = 2\pi (q/\chi)^2 \cdot n_F^2. \quad (1.34)$$

В то же время давление и плотность энергии вырожденного идеального ферми-газа при любых значениях  $n_F$  во всем диапазоне от нерелятивистского приближения, когда энергия Ферми равна  $E_F = p_F^2/2m_F \ll m_F$ , до ультрарелятивистского предела, когда  $E_F = p_F \gg m_F$  согласно [57], определяются следующими выражениями

$$P_F = \frac{1}{4\pi^2} \left[ p_F \cdot \left( \frac{2}{3} p_F^2 - m_F^2 \right) \sqrt{p_F^2 + m_F^2} + m_F^4 \cdot \text{Arsh} \left( \frac{p_F}{m_F} \right) \right]; \quad (1.35)$$

$$\varepsilon_F = \frac{1}{4\pi^2} \left[ p_F \cdot (2p_F^2 + m_F^2) \sqrt{p_F^2 + m_F^2} - m_F^4 \cdot \text{Arsh} \left( \frac{p_F}{m_F} \right) \right]. \quad (1.36)$$

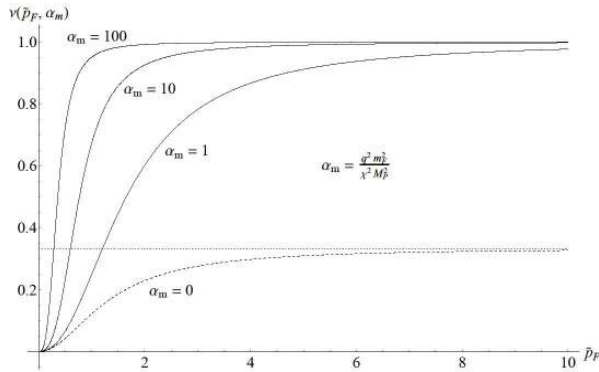


Рис. 6. Зависимости отношения полного давления неидеального релятивистского ферми-газа  $P = P_F + P_{\text{int}}$  к его полной плотности энергии  $\varepsilon = \varepsilon_F + \varepsilon_{\text{int}}$  от безразмерного ферми-импульса  $\tilde{p}_F = p_F/m_F$  для разных значений безразмерного параметра  $\alpha_m = q^2 m_F^2 / \chi^2 M_p^2$ . Штриховая кривая при  $q = 0$  соответствует отношению  $P_F/\varepsilon_F < 1/3$  для идеального релятивистского ферми-газа

На рис. 6 показано отношение суммарного давления неидеального вырожденного ферми-газа  $P = P_F + P_{\text{int}}$  к полной плотности его энергии  $\varepsilon = \varepsilon_F + \varepsilon_{\text{int}}$  с учётом выражений (1.34) – (1.36) в зависимости от безразмерной величины  $p_F/m_F$  для разных значений безразмерного параметра  $\alpha_F = q^2 m_F^2 / \chi^2 M_p^2$ . Как видим, при условии  $\alpha_F \gg 1$  в широкой области фермионных концентраций  $n_F$  безразмерная величина

$\nu(n_F) = P(n_F)/\varepsilon(n_F) \approx 1$ , т. е. уравнение состояния неидеального ферми-газа почти совпадает с уравнением состояния предельно сжатого вещества.

Однако при понижении концентрации параметр  $\nu(n_F)$  уменьшается от единицы до нуля. В то же время, для идеального релятивистского ферми-газа, согласно (1.35) и (1.36), отношение  $P_F/\varepsilon_F < 1/3$  при любых конечных значениях  $n_F$  (см. штриховую кривую на рис. 6).

Рассмотрим процесс расширения ранней холодной Вселенной с учётом точного уравнения состояния  $P(n_F) = \nu(n_F) \cdot \varepsilon(n_F)$  неидеально вырожденного релятивистского ферми-газа с короткодействующим отталкиванием между частицами. Для этой цели удобно перейти к безразмерным переменным  $\tilde{P} = P/\mu^2\varphi_0^2$  и  $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon/\mu^2\varphi_0^2$ .

Используя приведённую в [57] форму записи давления и плотности энергии релятивистского ферми-газа через переменную  $\zeta = 4 \operatorname{arsh}(p_F/m_F)$ , представим парциальные составляющие давления и плотности энергии в следующем виде

$$\tilde{P}_{\text{int}} = \tilde{\varepsilon}_{\text{int}} = \beta_{\text{int}} \cdot \operatorname{sh}^6 \frac{\zeta}{4}, \quad (1.37)$$

$$\tilde{P}_F = \beta_F \cdot \left[ \frac{1}{3} \operatorname{sh} \zeta - \frac{8}{3} \operatorname{sh} \frac{\zeta}{2} + \zeta \right], \quad (1.38)$$

$$\tilde{\varepsilon}_F = \beta_F \cdot [\operatorname{sh} \zeta - \zeta]. \quad (1.39)$$

Здесь

$$\beta_F = \frac{\tilde{\varepsilon}_P}{32\pi^2} \tilde{m}_F^4; \quad \beta_{\text{int}} = \frac{2\tilde{\varepsilon}_P}{9\pi^3} \alpha \tilde{m}_F^6; \quad \zeta = 4 \operatorname{arsh} \left( \frac{\tilde{p}_F}{\tilde{m}_F} \right), \quad (1.40)$$

где  $\tilde{\varepsilon}_P = \varepsilon_P/\mu^2\varphi_0^2$ ,  $\tilde{p}_F = p_F/M_P$  и  $\tilde{m}_F = m_F/M_P$ ,  $\varepsilon_P = M_P^4$  – планковская плотность энергии, а  $\alpha = q^2/\chi^2$  – безразмерная константа короткодействующего отталкивания между фермионами.

Если в явном виде выразить ферми-импульс  $p_F = (3N_F/\chi^2)^{1/3} \cdot a^{-1}$  через масштабный фактор  $a$  и полное число фермионов  $N_F = 2\pi^2 a^3 \cdot n_F$  и ввести безразмерные переменные  $\tilde{a} = a/l_P$  и  $\tau = t/t_P$ , то первое уравнение ОТО и безразмерная скалярная кривизна, которая играет роль эффективного «внешнего поля», с учётом соотношений (1.37) – (1.39) принимают следующий вид

$$\left(\frac{d\tilde{a}}{d\tau}\right)^2 = \frac{\Omega_p}{\tilde{\varepsilon}_p \cdot (1 + \tilde{\xi})} \left\{ \tilde{\lambda}_0 + \beta_F [\operatorname{sh} \zeta(\tilde{a}) - \zeta(\tilde{a})] + \beta_{\text{int}} \operatorname{sh}^6 \left( \frac{\zeta(\tilde{a})}{4} \right) \right\} \tilde{a}^2 - 1 \quad (1.41)$$

$$h(\tilde{a}) = -\frac{\tilde{\xi}}{1 + \tilde{\xi}} \left\{ 4\tilde{\lambda}_0 + \beta_F \left[ 8 \operatorname{sh} \left( \frac{\zeta(\tilde{a})}{2} \right) - 4\zeta(\tilde{a}) \right] - 2\beta_{\text{int}} \operatorname{sh}^6 \left( \frac{\zeta(\tilde{a})}{4} \right) \right\}, \quad (1.42)$$

где  $\Omega_p = \kappa \varepsilon_p l_p^2 / 3$  – безразмерная константа, а зависящая от  $\tilde{a}$  величина  $\zeta(\tilde{a})$  определена в (1.40) и может быть записана как  $\zeta(\tilde{a}) = 4 \operatorname{arsh} \left[ (3N_F/2)^{1/3} / \tilde{m}_F \tilde{a} \right]$ .

Таким образом, поведение холодной ранней Вселенной в рамках данного сценария эволюции определяется следующими безразмерными параметрами  $\tilde{a}_0$ ,  $\tilde{m}_F$ ,  $N_F$ ,  $\alpha$ ,  $\tilde{\varepsilon}_p$  и  $\tilde{\xi}$  при заданном значении величины  $\tilde{\lambda}_0 = 6,75$ .

При этом необходимо учитывать условие ограничения полного числа фермионов  $N_F \leq N_{F_{\text{max}}} = 2\tilde{a}_0^3/3$ , которое следует из ограничения сверху величины безразмерного ферми-импульса  $\tilde{p}_F \leq 1$ , а также условие положительности правой части уравнения (1.41) и условие  $h(\tilde{a}_0) > 0$ . В точке фазового перехода первого рода выполняется равенство  $h(\tilde{a}_c) \equiv h_c = -2$ , которое определяет конечное максимальное значение критического радиуса ранней Вселенной  $\tilde{a}_c$ .

Вместе с тем требование разрешимости уравнений в действительных переменных эффективно ограничивает снизу возможные значения  $\tilde{\xi} \geq \tilde{\xi}_{\text{min}}$ . Можно показать, что для величины  $\tilde{\xi}_{\text{min}}$  всегда выполняется условие  $\tilde{\xi}_{\text{min}} < 1/(2\beta - 1) = 0,08$ . Однако как следует из численных расчётов, зависимость  $\tilde{\xi}_{\text{min}}$  от параметров является весьма слабой, а её величина близка к полученному ранее предельному значению  $\tilde{\xi}^* = 0,08$ .

С другой стороны, зависимость величины  $\tilde{a}_c$  от  $\tilde{\xi}$ , как правило, имеет резкий максимум вблизи значения  $\tilde{\xi}_{\text{min}}$  (см. рис. 7). В рамках данной модели это соответствует обсуждавшемуся выше сценарию «гиперинфляции» в моделях с «жестким» уравнением состояния вещества  $P = \nu \varepsilon$  при  $\nu = \text{const}$  и  $\nu > 1/3$ , когда реализуется неограниченный рост  $\tilde{a}_c \rightarrow \infty$  при  $\tilde{\xi} \rightarrow \tilde{\xi}^*$ .

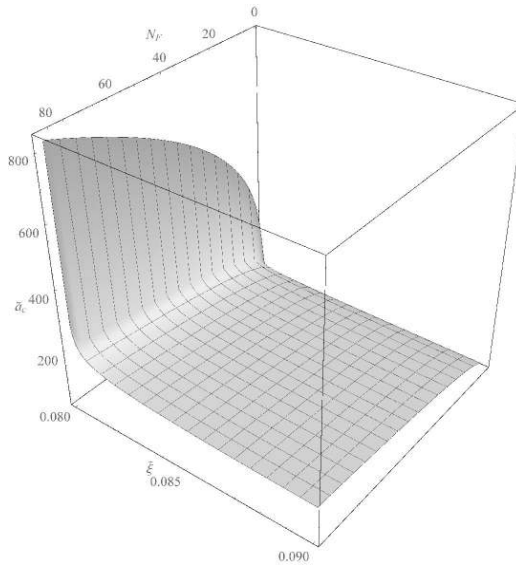


Рис. 7. Зависимость критического радиуса  $\tilde{a}_c$  от  $\tilde{\xi}$  и  $N_F$  при  $\tilde{a}_0 = 5$ ,  $\tilde{\lambda}_0 = 6,75$ . Для безразмерных параметров  $\tilde{m}_F = m_F/M_P$  и  $\alpha = q^2/\chi^2$  выбраны значения  $\tilde{m}_F = 0,01$  и  $\alpha = 10^5$  (такая величина константы короткодействующего отталкивания  $\alpha$  получается, если предположить, что масса бозона, переносящего взаимодействие (1.31), также равна  $\tilde{m}_B = \chi = 0,01$ , а константа взаимодействия  $q^2 = 10$ ). Кроме того, принято значение  $\tilde{\epsilon}_p = 4 \cdot 10^5$

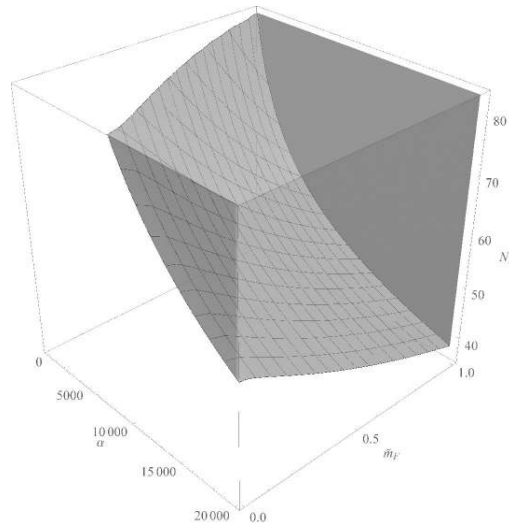


Рис. 8. Область существования инфляционных самосогласованных решений нелинейных уравнений (1.41) в пространстве трёх параметров  $\tilde{m}_F$ ,  $N_F$  и  $\alpha$

На рис. 8 показана область существования инфляционных самосогласованных решений нелинейного уравнения (1.41) с учётом всех ограничений в пространстве трёх параметров  $\tilde{m}_F$ ,  $N_F$  и  $\alpha$  при  $\tilde{a}_0 = 5$ ,  $\tilde{\xi} = 0,08$ ,  $\tilde{\lambda}_0 = 6,75$  и  $\tilde{\varepsilon}_p = 4 \cdot 10^5$ .

На рис. 9 показаны временные зависимости радиуса расширяющейся ранней Вселенной и соответствующие зависимости параметра  $\nu = P/\varepsilon$  для разных значений полного числа фермионов  $N_F$ . Как видим, происходит достаточно быстрое нарастание радиуса Вселенной, приближающееся к инфляционному (деситтеровскому) режиму эволюции, вплоть до конечного максимального радиуса  $a_c$  в точке фазового перехода первого рода.

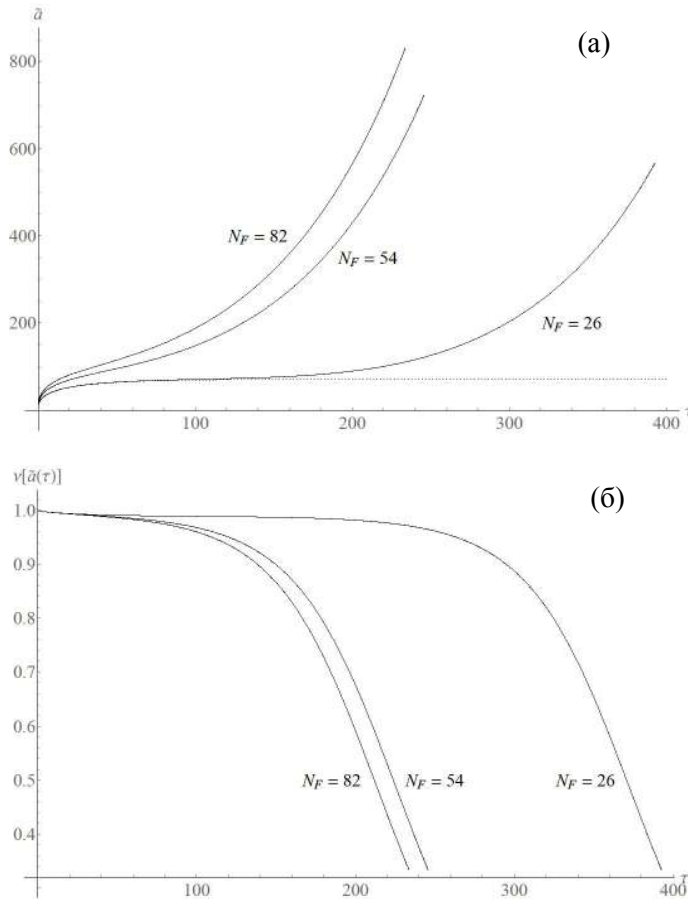


Рис. 9. Зависимости от времени радиуса  $\tilde{a}(\tau)$  расширяющейся Вселенной (а) и параметра  $\nu = P/\varepsilon$  (б) для разных значений  $N_F$  и  $\tilde{\xi} = 0,08$ .

Для остальных параметров  $\tilde{m}_F = 0,01$ ,  $\tilde{a}_0 = 5$ ,  $\tilde{\lambda}_0 = 6,75$ ,  $\alpha = 10^5$ ,  $\tilde{\varepsilon}_p = 4 \cdot 10^5$  выбраны те же значения, что и на рис. 7

### 1.5. Процесс «скатывания» Вселенной в минимум потенциала скалярного поля и проблема нагрева Вселенной

Потенциал скалярного поля в безразмерных переменных (1.6) в точке фазового перехода первого рода при  $h = h_c \equiv -2$  принимает вид

$$V(x) = \frac{x^4}{4} - \frac{3x^2}{2} + 2x + 6. \quad (1.43)$$

Для дальнейшего рассмотрения удобно перейти к новой переменной  $y = x + 2$

$$\tilde{V}(y) = y^2 \cdot \left( \frac{9}{2} - 2y + \frac{y^2}{4} \right); \quad \frac{\partial \tilde{V}}{\partial y} = y \cdot (3 - y)^2; \quad \frac{\partial^2 \tilde{V}}{\partial y^2} = 3(3 - y) \cdot (1 - y). \quad (1.44)$$

Как следует из (1.44), потенциал  $\tilde{V}(y)$  имеет нулевой минимум в точке  $y = 0$  и две точки перегиба при  $y = 1$  и при  $y = 3$ . При этом в точке  $y = 3$  выполняется условие

$$\left( \frac{\partial \tilde{V}}{\partial y} \right)_{y=3} = \left( \frac{\partial^2 \tilde{V}}{\partial y^2} \right)_{y=3} = 0, \quad (1.45)$$

которое, как было отмечено в [56], соответствует «абсолютно плоскому» потенциалу с горизонтальной асимптотой, в отличие от почти плоского потенциала в сценарии «гибридной» инфляции [44] или в модели «экспоненциально плоского» потенциала [51].

Динамические уравнения, описывающие самосогласованную эволюцию ранней Вселенной и нелинейного скалярного поля в системе единиц  $\hbar = c = 1$  имеют вид [40]

$$\ddot{y} + 3H \cdot \dot{y} = -\frac{\partial \tilde{V}}{\partial y}; \quad H^2 + \frac{1}{\tilde{a}^2} = \frac{1}{3} \cdot \left[ \tilde{\varepsilon} + \frac{\dot{y}^2}{2} + \tilde{V}(y) \right], \quad (1.46)$$

где  $H = \dot{\tilde{a}}/\tilde{a}$  – параметр Хаббла, а точка означает дифференцирование по безразмерному времени  $\tau$ .

При условии достаточно медленного «скатывания», когда выполняются сильные неравенства  $\dot{y}+ = 3H\dot{y}$ ;  $1/\tilde{a}^2 = H^2$ ;  $\dot{y}^2/2 = \tilde{V}(y)$ , система уравнений (1.46) существенно упрощается и приводится к виду

$$3H \cdot \dot{y} = -y \cdot (3-y)^2; \quad H^2 = \frac{y^2}{12} \cdot (18-8y+y^2). \quad (1.47)$$

Отсюда следует нелинейное дифференциальное уравнение первого порядка

$$\frac{\partial y}{\partial \tau} + \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{(3-y)^2}{\sqrt{18-8y+y^2}} = 0, \quad (1.48)$$

решение которого сводится к вычислению следующего интеграла для определения времени «скатывания» системы из точки перегиба при  $y = 3$  в точку минимума потенциала при  $y = 0$

$$\tau_{roll} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \cdot \int_0^3 dy \frac{\sqrt{18-8y+y^2}}{(3-y)^2}. \quad (1.49)$$

Как легко видеть, интеграл (1.49) расходится на верхнем пределе как  $(3-y)^{-1}$ , что обусловлено абсолютно плоской формой потенциала в точке перегиба при  $y = 3$ . Это означает, что даже в том случае, когда ранняя Вселенная за конечное время достигает точки фазового перехода первого рода  $R = R_c \equiv -\mu^2/\xi$ , время её нахождения в точке перегиба при  $y = 3$  с нулевым наклоном в классическом приближении оказывается бесконечно большим.

Однако следует учитывать, что между фермионным и скалярным полями может существовать взаимодействие с некоторой константой  $\tilde{g}$ . В результате этого возникает слабая неоднородность амплитуды скалярного поля в области локализации вещества.

Предположим для простоты, что такая неоднородность имеет вид гауссиана

$$\tilde{y}(\rho, \tau) = y(\tau) \cdot \left[ 1 + \zeta \cdot \exp\left\{-\rho^2/\tilde{a}_c^2\right\} \right], \quad (1.50)$$

где  $\rho = r/l_p$ , а  $\zeta$  – безразмерный параметр, пропорциональный константе  $\tilde{g}$ . В этом случае в уравнении Клейна–Гордона для амплитуды скаляр-

ного поля (1.46) следует учесть отличный от нуля за счёт радиальной неоднородности  $\tilde{y}(\rho, \tau)$  сферически симметричный оператор Лапласа

$$3H \frac{\partial \tilde{y}}{\partial \tau} - \left( \frac{\partial^2 \tilde{y}}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{\partial \tilde{y}}{\partial \rho} \right) = -\tilde{y} \cdot (3 - \tilde{y})^2. \quad (1.51)$$

Подставляя выражение (1.50) в уравнение (1.51), при условии  $\zeta = 1$  с точностью до главных членов получаем

$$\frac{dy}{d\tau} = \frac{2}{3} \cdot \left[ (3 - y)^2 + \delta^2 \right]; \quad \delta = \sqrt{6\zeta} / \tilde{a}_c. \quad (1.52)$$

В результате интегрирования уравнения (1.52) вблизи точки  $y = 3$  получаем выражение для оценки конечного времени «выкатывания» системы из плоской точки перегиба потенциала

$$\tau_{roll} = - \int_0^3 \frac{dy}{(3 - y)^2 + \delta^2} = \frac{3}{2\delta} \cdot \arctg \frac{3}{\delta}. \quad (1.53)$$

Безразмерное время  $\tau_{roll}$ , которое при слабой неоднородности ( $\delta = 1$ ) характеризует наиболее медленную фазу «выкатывания» Вселенной из точки  $y = 3$ , фактически определяет по порядку величины полное время «скатывания» системы в нулевой минимум потенциала, т. е. время фазового перехода первого рода.

Действительно, безразмерное время «скатывания» системы на параболическом участке потенциала  $V(y) = 9y^2/2$  с безразмерной «эффективной массой» скалярного поля  $m = 3$ , которое сопровождается уменьшением плотности потенциальной энергии скалярного поля от максимального значения  $V_{max} \approx 6,75$  при  $y_0 \approx 2$  до нуля в точке  $y = 0$  определяется как  $\tau_0 = y_0/\sqrt{6} \approx 0,5$ , так что за это время Вселенная практически не успевает заметно расширяться, в отличие от рассмотренного в [40] случая «хаотической» инфляции при  $y_0 = 1$  и  $m = 1$ .

Основной процесс расширения ранней Вселенной в данном случае после прохождения точки фазового перехода первого рода при  $R = R_c$ , т. е. при  $h = -2$ , происходит за время  $\tau_{roll}$ , когда потенциал (1.44) остаётся практически постоянным и равным  $V \approx \lambda_0 = 6,75$ . Тем самым потенциал вблизи точки  $y = 3$  обеспечивает режим медленного скатывания

(«slowroll»), необходимый для достаточно быстрого расширения Вселенной. Это означает, что за время  $\tau_{roll}$  безразмерный радиус Вселенной достигает своего максимального значения

$$\tilde{a}_{max} \equiv \tilde{a}(\tau_{roll}) = \tilde{a}_c \cdot \exp(\tilde{\gamma}\tau_{roll}); \quad \tilde{\gamma} = \sqrt{\Lambda_0/3}. \quad (1.54)$$

Однако следует подчеркнуть, что для полного описания эволюции ранней Вселенной после фазового перехода первого рода необходимо получить решение следующей системы нелинейных уравнений [43]

$$\begin{aligned} \ddot{y} + [3H(\tau) + \Gamma] \cdot \dot{y} + \Delta y &= -\frac{\partial V}{\partial y}; \\ H^2(\tau) + \frac{1}{\tilde{a}^2(\tau)} &= \frac{1}{3} \left[ \varepsilon(\tau) + \frac{\dot{y}^2}{2} + V(y) \right]. \end{aligned} \quad (1.55)$$

При этом затухание амплитуды колебаний скалярного поля определяется положительным параметром Хаббла  $H = \dot{a}/a$ , который характеризует скорость расширения Вселенной, но не обеспечивает реальную диссипацию энергии, а также декрементом  $\Gamma$ , который определяет скорость диссипации энергии скалярного поля за счёт множественного рождения пар массивных частиц и античастиц разного сорта.

Кроме того, поскольку энергия, выделяющаяся в результате аннигиляции первичного вещества и антивещества, расходуется на нагрев Вселенной, уравнения (1.55) должны быть дополнены уравнением, описывающим рост энтропии Вселенной.

Одновременно с этим следует учитывать температурную зависимость параметра «мнимой массы»  $\mu(T) = \mu(0) \cdot \sqrt{1 - T/T_c}$ , где  $T_c$  – критическая температура, при которой происходит фазовый переход второго рода, сопровождающийся исчезновением скалярного поля [21].

Таким образом, механизм нагрева ранней Вселенной требует более детального рассмотрения.

## 2. О КВАНТОВОЙ ПРИРОДЕ ГРАВИТАЦИИ

В этом разделе будет показано, что скалярные нелинейные поля могут играть решающую роль не только в процессах эволюции ранней Вселенной, но и в механизме возникновения гравитационного взаимодействия.

Как известно, одно из основных препятствий на пути построения перенормируемой квантово–полевой теории гравитации связано с тем, что соответствующая константа взаимодействия – гравитационная постоянная Ньютона  $G_N$  является размерной величиной и в системе единиц СИ равна  $G_N = 6.67384 \cdot 10^{-11} \text{ м}^3 \text{ кг}^{-1} \text{ сек}^{-2}$ .

Тем не менее аналогичная трудность с размерной константой Ферми для слабого взаимодействия  $G_F = 1.43583 \cdot 10^{-62} \text{ м}^5 \text{ кг сек}^{-2}$  была успешно преодолена при построении строгой квантово–полевой теории единого электрослабого взаимодействия Глэшоу – Салама – Вайнберга [59–61].

Соотношение между этими константами имеет вид  $G_F = \zeta \cdot (\hbar/c)^2 \cdot G_N$ , где  $\zeta$  – безразмерный коэффициент, равный  $\zeta = 1.73867 \cdot 10^{33}$ . Отсюда следует, что в естественной системе единиц при  $\hbar = c = 1$  размерности констант  $G_N$  и  $G_F$  совпадают  $[G_N] = [G_F] = [e^2/m^2]$ , а их отношение равно  $G_N/G_F \approx 5.75 \cdot 10^{-34}$ .

В связи с этим в работе [56] было высказано предположение о том, что несмотря на колоссальную разницу констант  $G_N$  и  $G_F$  по величине между гравитационным и слабым взаимодействиями существует определённое подобие («скейлинг») в структуре их квантово–полевой природы. Заметим, что ранее в [62, 63] также рассматривалась возможность некоторого подобия между гравитационным и слабым взаимодействиями, однако конкретный механизм для обоснования такого подобия в этих работах не рассматривался.

Как известно [64], слабое взаимодействие обусловлено обменом промежуточными массивными векторными бозонами  $W^\pm$  и  $Z^0$  со спином  $S = 1$ . Массы этих бозонов возникают в результате спонтанного нарушения калибровочной симметрии электромагнитного поля благодаря его взаимодействию с нелинейным скалярным полем Хиггса [46, 47] (см. также [65, 66]). При этом сохраняются безмассовые фотоны, ответственные за дальнедействующее электромагнитное взаимодействие между зарядами, которое в статическом пределе сводится к закону Кулона.

В данном разделе будет показано, что гравитационное взаимодействие на малых расстояниях, сравнимых с планковскими масштабами, также может быть связано с обменом виртуальными «сверхмассивными» тензорными бозонами со спином  $S = 2$ . Генерация массы таких бозонов обусловлена спонтанным нарушением калибровочной симметрии линейного тензорного поля гравитонов за счёт их взаимодействия с фундаментальным нелинейным скалярным полем. При этом сохраняются безмассовые гравитоны – кванты гравитационных волн, существование которых было предсказано Эйнштейном [4] и недавно подтверждено в экспериментах LIGO (Laser Interferometer Gravitational-Wave Observatory).

Безмассовые гравитоны переносят дальнедействующее гравитационное взаимодействие, которое в статическом пределе в приближении слабого поля сводится к закону всемирного тяготения Ньютона. Следует иметь в виду, что локальная калибровочная симметрия линейного гравитационного поля существует только в плоском 4-мерном (4D) пространстве-времени [67]. Однако согласно общим принципам ОТО само присутствие скалярного поля с конечной плотностью потенциальной энергии, которая определяет плотность энергии вакуума  $\lambda_0$  и космологическую постоянную  $\Lambda_0 = \kappa\lambda_0$ , должно создавать отрицательную скалярную кривизну  $R_0 = -4\Lambda_0$ , тогда как в искривлённом 4D пространстве-времени калибровочная симметрия гравитационного поля изначально нарушена. Ниже будет показано, как можно устранить такое противоречие при построении квантово-полевой теории гравитации, не используя теорию струн в многомерных антидеситтеровских пространствах [68–70].

Ранее предпринимались попытки (см., например, [71]) построения теоретико-полевых моделей квантовой гравитации в криволинейном 4D пространстве путём объединения нелинейных уравнений Янга–Миллса [72] в квантовой хромодинамике (КХД) с нелинейными уравнениями ОТО [73] или с её модифицированным вариантом, который характеризуется квадратичной зависимостью лагранжиана от скалярной кривизны [74].

В данном разделе предлагается иной подход, основанный на методе эффективного исключения гравитации и кривизны 4D пространства-времени в рамках возможного варианта теории гравитационного взаимодействия, интенсивность которого определяется двойной свёрткой запаздывающей функции Грина массивных тензорных бозонов с метрическим тензором  $g_{\mu\nu}$  пространства-времени. Такая свёртка имеет вид  $\tilde{G}_N(p) = G_N \cdot \left[ 1 - (\omega^2 - \vec{k}^2)/M_T^2 \right]$ , где  $\omega$  и  $\vec{k}$  – энергия и 3D импульс, а  $M_T$  – масса тензорного бозона. Функция  $\tilde{G}_N(p)$  сводится к гравитационной постоянной Ньютона  $G_N$  только в статическом длинноволновом пределе, когда  $\omega \rightarrow 0$  и  $|\vec{k}| \rightarrow 0$ , либо для безмассовых калибровочных полей с энергией квантов  $\omega(\vec{k}) = |\vec{k}|$ .

Однако для вакуума, заполненного нелинейным массивным скалярным полем с массой бозонов  $M_B$ , спектр квантовых флуктуаций при абсолютном нуле температуры имеет  $\delta$ -образный пик на частоте, которая соответствует энергии скалярных бозонов  $\Omega_B(\vec{k}) = \sqrt{M_B^2 + k^2}$ . При условии равенства масс скалярных  $M_B$  и тензорных  $M_T$  бозонов двойная свёртка функции Грина  $\tilde{G}_N(p)$  равна нулю, так что в данном слу-

чае гравитация выключается. В результате этого 4D пространство-время, усреднённое по квантовым флуктуациям вакуума, является эффективно плоским. При этом восстанавливается калибровочная симметрия гравитационного поля, что приводит к возможности механизма генерации конечной массы тензорных бозонов за счёт спонтанного нарушения калибровочной симметрии безмассовых гравитонов при их взаимодействии с ненулевым вакуумным средним нелинейного скалярного поля.

## 2.1. С п о н т а н н о е   н а р у ш е н и е к а л и б р о в о ч н о й   с и м м е т р и и   г р а в и т о н о в и   м е х а н и з м   г е н е р а ц и и м а с с ы   т е н з о р н ы х   б о з о н о в

Рассмотрим вопрос о спонтанном нарушении локальной калибровочной симметрии безмассовых гравитонов со спином  $S = 2$  за счёт их взаимодействия с фундаментальным нелинейным скалярным полем  $\Phi$ , лагранжиан которого имеет следующий вид

$$L_\Phi = \frac{g^{\mu\nu}}{2} \partial_\mu \Phi \cdot \partial_\nu \Phi + \frac{\mu^2}{2} \Phi^2 - \frac{g^2}{4} \Phi^4, \quad (2.1)$$

где  $\mu = im$  – параметр «мнимой массы», а  $g$  – параметр нелинейности скалярного поля. В основном состоянии скалярное поле характеризуется ненулевым вакуумным средним значением амплитуды  $\Phi_0 = \mu/g$  и плотностью потенциальной энергии  $U_0 = \mu^2 \Phi_0^2/4$ , которая определяет плотность энергии физического вакуума  $\lambda_0 = U_0$ , а возбуждениями такого поля являются скалярные бозоны с массой  $M_B = \mu\sqrt{2}$ .

Если предположить, что для такого фундаментального скалярного поля масса бозонов равна планковской массе,  $M_B = M_P = 1/\sqrt{G_N}$ , а плотность энергии равна предельной планковской величине  $U_0 = \mu^4/4g^2 = M_P^4$ , то для константы нелинейности и вакуумного среднего получим следующие значения  $g = 1/4$  и  $\Phi_0 = 2M_P\sqrt{2}$ .

Согласно ОТО, слабое гравитационное поле в линейном приближении по малым возмущениям  $h_{\mu\nu}$  метрического тензора  $g_{\mu\nu}$  описывается следующим тензорным уравнением (см. [67])

$$W^2 h_{\mu\nu} - \frac{\partial^2}{\partial x^\lambda \partial x^\mu} h_\nu^\lambda - \frac{\partial^2}{\partial x^\lambda \partial x^\nu} h_\mu^\lambda + \frac{\partial^2}{\partial x^\mu \partial x^\nu} h_\lambda^\lambda = 0. \quad (2.2)$$

Это уравнение описывает свободное тензорное поле безмассовых гравитонов со спином  $S = 2$  в отсутствие тяготеющих масс.

При инфинитезимальном преобразовании координат 4D пространства-времени  $x^\mu \rightarrow x^\mu + \varepsilon^\mu(x)$ , где малость смещения  $\varepsilon^\mu(x)$  определяется условием  $\partial\varepsilon^\mu/\partial x^\nu : |h_{\mu\nu}| = 1$ , амплитуда поля (2.2) принимает вид

$$h'^{\mu\nu} = h^{\mu\nu} - \frac{\partial\varepsilon^\mu}{\partial x^\lambda} g^{\lambda\nu} - \frac{\partial\varepsilon^\nu}{\partial x^\rho} g^{\rho\mu}. \quad (2.3)$$

Для плоского 4D пространства с метрическим тензором Минковского в силу соотношения  $\varepsilon_\mu = \varepsilon^\nu g_{\mu\nu}$  имеем

$$h'_{\mu\nu} = h_{\mu\nu} - \partial\varepsilon_\mu/\partial x^\nu - \partial\varepsilon_\nu/\partial x^\mu. \quad (2.4)$$

Путём подстановки (2.4) в (2.2), легко убедиться, что  $h'_{\mu\nu}$  так же, как и  $h_{\mu\nu}$  является решением уравнения (2.2). Это является следствием точной локальной калибровочной симметрии слабого гравитационного поля в плоском 4D пространстве-времени.

Воспользуемся приведённым в [64] методом описания спонтанного нарушения калибровочной симметрии «цветных» векторных полей  $A_\mu^\alpha(x)$ , где  $\alpha$  и  $\mu$  – цветовой и координатный индексы, когда взаимодействие полей  $A_\mu^\alpha$  с семейством скалярных полей  $\Phi_n$  описывается лагранжианом

$$L_{\phi A} = -\frac{1}{2} \sum_n \left( \partial_\mu \Phi_n - i \sum_{m,\alpha} t_{nm}^\alpha A_{\alpha\mu} \Phi_m \right)^2. \quad (2.5)$$

Введём аналогичный эффективный лагранжиан взаимодействия скалярных полей с тензорным линейным полем гравитонов в плоском 4D пространстве-времени

$$L_{\phi h} = -\frac{1}{2} \sum_n \left( \partial_\mu \Phi_n - i \sum_{m,\nu} t_{nm}^\nu \cdot h_{\mu\nu} \Phi_m \right)^2, \quad (2.6)$$

где матрицы  $t_{nm}^\nu$  играют роль констант взаимодействия скалярных полей с гравитонами, а  $\nu$  так же, как и  $\mu$ , является координатным индексом 4D пространства-времени.

Полагая  $\Phi_n = \upsilon_n + \phi_n$ , где  $\upsilon_n$  – вакуумные средние скалярных полей, при условии  $|\phi_n| = \upsilon_n$  в первом порядке по  $\phi_n$  и  $h_{\mu\nu}$  получим

$$L_{\phi h} = -\frac{1}{2} \sum_n \left( \partial_\mu \phi_n - i \sum_{m,v} t_{nm}^v h_{\mu\nu} \upsilon_m \right)^2. \quad (2.7)$$

Исключая перекрёстные члены  $(\phi \cdot h)$  в (2.7), приведём лагранжиан  $L_{\phi h}$  к следующему виду

$$L_{\phi h} = -\frac{1}{2} \sum_n \partial_\mu \phi_n \partial^\mu \phi_n - \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} M_{\mu\nu}^2 \cdot h_{\mu\nu} \cdot h^{\mu\nu}, \quad (2.8)$$

где

$$M_{\mu\nu}^2 = - \sum_{n,m,l} t_{nm}^\mu t_{nl}^\nu \cdot \upsilon_m \upsilon_l. \quad (2.9)$$

Поскольку генераторы  $t_{nm}^v$  являются чисто мнимыми и антисимметричными (см. [64]), то массовая матрица  $M_{\mu\nu}^2$  действительна, симметрична  $M_{\mu\nu}^2 = M_{\nu\mu}^2$  и положительна  $M_{\mu\nu}^2 \geq 0$ . В общем случае симметричный тензор (2.9) имеет 10 независимых вещественных компонент.

Если предположить, что матрицы  $t_{nm}^\mu$  и  $t_{nl}^\nu$  образуют пары взаимно ортогональных 4D векторов, то в этом случае отлично от нуля только их скалярное произведение, а тензор (2.9) является диагональным  $M_{\mu\nu}^2 = M_T^2 \cdot \delta_{\mu\nu}$ . При этом величина  $M_T^2 = \sum_{n,m,l} |t_{nm}^\mu| \cdot |t_{nl}^\mu| \cdot \upsilon_m \upsilon_l$  определяет квадрат массы тензорного бозона со спином  $S = 2$ , а остальные 6 недиагональных компонент тензора (2.9) равны нулю.

Это означает, что в данном случае наряду с генерацией конечной массы  $M_T$  тензорных бозонов сохраняется калибровочное безмассовое поле гравитонов, которые имеют 5 спиновых состояний  $(+2, +1, 0, -1, -2)$ , соответствующих компонентам  $M_{12}, M_{13}, M_{23}, M_{24}, M_{34}$ . Оставшееся одно состояние связано с компонентой  $M_{14} = 0$  и соответствует голдстоуновской моде с нулевыми значениями массы и спина, которая возникает в результате спонтанного нарушения калибровочной симметрии гравитонов.

В частном случае фундаментальное нелинейное вещественное скалярное поле  $\Phi$  с двумя минимумами потенциальной энергии при ненулевых вакуумных средних  $\pm\Phi_0$  можно рассматривать как два поля с одним

мнимым генератором массы  $t^\mu = it_0$ . По аналогии с механизмом Хиггса получаем значение массы  $M_T = g_T \Phi_0$ , где  $g_T = t_0^2$  – константа взаимодействия гравитонов со скалярным полем. Если положить массу тензорного бозона  $M_T$  равной массе Планка  $M_p$ , то с учётом приведённого выше значения вакуумного среднего нелинейного скалярного поля  $\Phi_0 = 2M_p \sqrt{2}$  для безразмерной константы взаимодействия этого поля с линейным тензорным полем безмассовых гравитонов получаем значение  $g_T = 1/2\sqrt{2}$ .

Таким образом, наряду с короткодействующим обменным взаимодействием, которое переносится массивными тензорными бозонами с массой  $M_T$ , в данном случае сохраняется дальнедействующее гравитационное взаимодействие, которое переносится безмассовыми гравитонами и в статическом пределе в случае слабых полей описывается законом всемирного тяготения Ньютона. В этом состоит ещё одна аналогия между предлагаемым вариантом квантовой теории гравитации и теорией единого электрослабого взаимодействия (см. ниже).

## 2.2. Подобие между слабыми и гравитационными силами и происхождение гравитационной постоянной Ньютона

В теории единого электрослабого взаимодействия [64] заряженные  $W^\pm$  и нейтральный  $Z^0$  промежуточные бозоны, несмотря на разницу их масс, представляют собой три компоненты массивного векторного калибровочного поля со спином  $S = 1$ .

Массы таких бозонов возникают в результате спонтанного нарушения калибровочной симметрии электромагнитного поля за счёт его взаимодействия с ненулевым вакуумным средним нелинейного скалярного поля Хиггса. Однако при этом сохраняется безмассовое поле фотонов, которое в классическом приближении при большом числе фотонов описывается уравнениями Максвелла и определяет дальнедействующий характер электромагнитного взаимодействия, сводящегося в статическом пределе к закону Кулона.

Для массивного векторного поля Фурье-представление функции Грина в сигнатуре метрического тензора  $g_{\mu\nu}$  с мнимым временем имеет вид (см., например, [75])

$$D_{\mu\nu}(p) = \frac{1}{p^2 + m^2} \left( g_{\mu\nu} + \frac{p_\mu p_\nu}{m^2} \right). \quad (2.10)$$

Здесь  $p_\mu$  – компоненты 4D вектора энергии–импульса,  $p^2 \equiv g^{\mu\nu} p_\mu p_\nu = (\bar{\omega}^2 + \vec{k}^2)$ ,  $\bar{\omega} = i\omega$  – мнимая энергия, а  $m$  – масса векторного бозона. В данном случае  $m$  равна массе  $m_Z \approx 92,5$  ГэВ нейтрального промежуточного  $Z^0$ -бозона. Сравнительно небольшое уменьшение массы заряженных  $W^\pm$ -бозонов  $m_W \approx 82,5$  ГэВ обусловлено их дополнительным взаимодействием с электромагнитным полем.

Заметим, что числитель функции Грина (2.10) определяет структуру приведённого в [76] матричного элемента вакуум-вакуумного перехода для массивных частиц со спином  $S = 1$  и с векторными (токовыми) источниками  $J^\mu(p)$

$$\langle 0_+ || 0_- \rangle^J = \exp \left\{ \frac{i}{2} \int d\omega_p J^\mu(p)^* \left( g_{\mu\nu} + \frac{p_\mu p_\nu}{m^2} \right) J^\nu(p) \right\}, \quad (2.11)$$

где  $d\omega_p$  – элемент фазового объёма 4D пространства энергии-импульса.

Для перехода от микроскопического теоретико-полевого описания запаздывающего слабого взаимодействия, обусловленного обменом виртуальными промежуточными бозонами, к феноменологической теории Ферми [77] используем свёртку функции Грина (2.10) с метрическим тензором  $g^{\mu\nu}$ , которая с учётом условия нормировки  $g^{\mu\nu} g_{\mu\nu} = 4$  равна

$$D_V \equiv g^{\mu\nu} D_{\mu\nu} = 4/m^2. \quad (2.12)$$

В соответствии с размерностью константы Ферми  $[G_F] = [e^2/m^2]$  введём некоторый эффективный «заряд» слабого взаимодействия  $e_w$  и представим эту константу в следующем виде

$$G_F = \tilde{e}_w^2 \cdot D_V \equiv e_w^2 / m_Z^2 \quad (\tilde{e}_w \equiv e_w / 2). \quad (2.13)$$

С учётом эмпирических значений константы  $G_F \approx 1.1664 \cdot 10^{-5}$  ГэВ<sup>-2</sup> и массы  $Z^0$ -бозона получаем оценку для безразмерной константы слабой связи  $e_w^2 \approx 10^{-1}$ , которая более чем на порядок превышает электромагнитную константу  $e^2 = 1/137$  и определяется в терминах теории электрослабого взаимодействия следующим соотношением  $e_w^2 = g^2 m_Z^2 / 4\sqrt{2} m_W^2$ , где  $g$  – одна из констант слабого взаимодействия, имеющая размерность электрического заряда (вторая константа равна  $g' = g \cdot \text{tg} \theta_W$ , где  $\theta_W$  – угол Вайнберга).

Заметим, что в соответствии с асимптотическим ренормализационно-групповым соотношением для констант связи на плавающем масштабе энергий (см. [64]), отношение констант слабого  $e_w^2$  и электромагнитного  $e^2$  взаимодействий приближённо удовлетворяет следующему условию  $e_w^2/e^2 \approx \ln(m_Z/m_e)$ , где  $m_e$  – масса электрона.

Таким образом, согласно соотношению (2.13) малость феноменологической константы Ферми  $G_F$  обусловлена большой массой промежуточных бозонов, обмен которыми экранирует взаимодействие и делает его слабым на расстояниях, превышающих длину волны де Бройля Z-бозона  $\lambda_Z = 1/m_Z$ .

Отмеченное в работе [56] подобие между гравитационным и слабым взаимодействиями заключается в том, что по аналогии со слабыми силами, которые обусловлены обменом виртуальными массивными промежуточными векторными бозонами, существуют «сверхслабые» короткодействующие гравитационные силы, обусловленные обменом «сверхмассивными» тензорными бозонами с массой  $M_T$ , которая на 17 порядков превышает массу  $m_Z$ . Наряду с этим должно существовать безмассовое тензорное калибровочное поле гравитонов, переносящих дальнодействующее гравитационное взаимодействие, которое в классическом статическом пределе для слабых полей описывается законом всемирного тяготения Ньютона.

Здесь, однако, следует учитывать существенную разницу между этими взаимодействиями. Поскольку фотоны не взаимодействуют друг с другом, то в классическом пределе при большом числе фотонов они описываются линейными уравнениями электродинамики Максвелла. В отличие от этого гравитоны взаимодействуют друг с другом. Именно поэтому в классическом пределе при большом числе гравитонов, в частности вблизи больших тяготеющих масс, гравитационное поле описывается нелинейными уравнениями Эйнштейна в рамках ОТО.

Рассмотрим более детально теоретико-полевою модель гравитационных сил. С этой целью будем исходить из приведённого в [75] выражения для вакуум-вакуумного матричного элемента массивного поля тензорных бозонов со спином  $S = 2$ , который определяется симметричными тензорными источниками  $T^{\mu\nu}(p) = T^{\nu\mu}(p)$  и имеет вид

$$\langle 0_+ || 0_- \rangle^T = \exp \left\{ \frac{i}{2} \int d\omega_p \bar{T}^{\mu\nu}(p)^* [\bar{g}_{\mu\kappa}(p) \cdot \bar{g}_{\nu\lambda}(p)] \bar{T}^{\kappa\lambda}(p) \right\}, \quad (2.14)$$

где

$$\bar{T}^{\mu\nu}(p) = T^{\mu\nu}(p) - \frac{1}{3} g^{\mu\nu} \cdot [\bar{g}_{\rho\sigma}(p) T^{\rho\sigma}(p)]; \quad (2.15)$$

$$\bar{g}_{\mu\nu}(p) = g_{\mu\nu} + \frac{P_\mu P_\nu}{m^2}. \quad (2.16)$$

Отсюда следует, что по аналогии с (2.10) и (2.11) Фурье-компонента функции Грина тензорных бозонов с массой  $m = M_T$  имеет следующий вид

$$D_{\mu\nu,\kappa\lambda}^T(p) = \frac{\bar{g}_{\mu\nu}(p) \cdot \bar{g}_{\kappa\lambda}(p)}{p^2 + M_T^2}. \quad (2.17)$$

Для упрощённого феноменологического описания запаздывающего гравитационного взаимодействия, обусловленного обменом виртуальными массивными тензорными бозонами со спином  $S = 2$ , рассмотрим двойную свёртку функции Грина (2.17) с метрическими тензорами  $g^{\mu\nu}$  и  $g^{\kappa\lambda}$  в пределе  $p \rightarrow 0$

$$D_T \equiv g^{\mu\nu} g^{\kappa\lambda} D_{\mu\nu,\kappa\lambda}^T(0) = \frac{16}{M_T^2}. \quad (2.18)$$

По аналогии с (2.13) определим гравитационную постоянную  $G_N$  и эффективный «гравитационный заряд»  $e_g$  как

$$G_N = \tilde{e}_g^2 \cdot D_T = e_g^2 / M_T^2 \left( \tilde{e}_g \equiv e_g / 4 \right). \quad (2.19)$$

Предположим, что константы связи  $e_g^2$  и  $e_w^2$  при условии  $M_T \gg m_Z$  связаны между собой асимптотическим логарифмическим ренормализационным соотношением [64]

$$e_g^2 = e_w^2 \cdot \ln(M_T / m_Z). \quad (2.20)$$

В результате с учётом соотношений (2.13), (2.19) и (2.20) получаем следующее трансцендентное уравнение для определения отношения масс тензорных  $M_T$  и промежуточных  $m_Z$  бозонов

$$\left( \frac{M_T}{m_Z} \right)^2 = \frac{G_F}{G_N} \cdot \ln \left( \frac{M_T}{m_Z} \right). \quad (2.21)$$

Уравнение (2.21) имеет два корня, меньший из которых с точностью порядка  $G_N / G_F \approx 6 \cdot 10^{-34}$  равен единице и соответствует области

энергий порядка 100 ГэВ, характерных для стандартной модели (СМ) в теории элементарных частиц.

Второй корень уравнения (2.21) равен  $M_T/m_Z \approx 2,6 \cdot 10^{17}$  и соответствует массе тензорных бозонов  $M_T \approx 2,4 \cdot 10^{19}$  ГэВ, что вдвое превышает планковскую массу  $M_P \equiv 1/\sqrt{G_N} \approx 1,2 \cdot 10^{19}$  ГэВ.

Поскольку асимптотическое соотношение (2.20) является точным только в пределе  $M_T/m_Z \rightarrow \infty$ , в дальнейшем будем полагать  $M_T = M_P$ . В этом случае из соотношения (2.19) с учётом тождества  $G_N \equiv 1/M_P^2$  следует, что безразмерная константа гравитационного взаимодействия равна  $e_g^2 = 1$ , т. е. более чем на два порядка превышает электромагнитную константу  $e^2 = 1/137$ .

Если предположить, что плотность потенциальной энергии скалярного поля равна предельной планковской плотности  $|U_{\min}| = M_P^4$ , то для вакуумного среднего и константы нелинейности поля получаем значения  $\Phi_0 = 2M_P\sqrt{2}$  и  $g = 1/4$ .

С другой стороны, из соотношений (2.18) и (2.19) следует, что интенсивность гравитационного взаимодействия в реальных частотах определяется зависящей от энергии  $\omega$  и импульса  $\vec{k}$  функцией

$$\tilde{G}_N(\omega, \vec{k}) = G_N \cdot \left( 1 - \frac{\omega^2 - \vec{k}^2}{M_T^2} \right). \quad (2.22)$$

В статическом длинноволновом пределе, когда  $\omega \rightarrow 0$  и  $|\vec{k}| \rightarrow 0$ , а также для любых безмассовых полей со спектром возбуждений  $\omega(\vec{k}) = |\vec{k}|$ , функция (2.22) сводится к гравитационной постоянной Ньютона  $G_N$ . Однако для массивных полей на малых пространственно-временных масштабах, сравнимых с планковскими масштабами длины и времени  $l_P = t_P = 1/M_P$ , величина  $\tilde{G}_N$  может существенно отличаться от  $G_N$ .

В частности для массивного тензорного поля со спектром

$$\Omega_T(\vec{k}) = \sqrt{M_T^2 + |\vec{k}|^2} \quad (2.23)$$

функция (2.22) тождественно обращается в нуль, т. е. гравитационное взаимодействие выключается. Это означает, что для массивных тензорных бозонов, которые переносят короткодействующую часть гравитационного взаимодействия, 4D пространство-время является плоским. Именно в таком пространстве, как было показано выше, возможен механизм спонтанного нарушения калибровочной симметрии безмассовых

гравитонов за счёт их взаимодействия с вакуумным средним нелинейного скалярного поля и генерация массы тензорных бозонов.

Как отмечалось выше, спектр квантовых флуктуаций вакуума, заполненного фундаментальным скалярным полем с массой скалярного бозона  $M_B$ , при абсолютном нуле температуры характеризуется  $\delta$ -образным пиком на частоте

$$\Omega_B(\vec{k}) = \sqrt{M_B^2 + |\vec{k}|^2}. \quad (2.24)$$

Для таких возбуждений при  $M_B \neq M_T$  функция (2.22) равна  $\tilde{G}_N = G_N \cdot (1 - M_B^2/M_T^2)$ , причём во избежание неустойчивости вакуума при  $\tilde{G}_N < 0$  необходимо, чтобы выполнялось неравенство  $M_B < M_T$ .

При условии равенства масс скалярных и тензорных бозонов  $M_B = M_T = M_P$  функция (2.22) тождественно равна нулю на любых масштабах, так что в этом случае гравитационное взаимодействие полностью исчезает. При этом 4D пространство-время становится плоским, что обеспечивает возможность генерации массы тензорных бозонов за счёт рассмотренного выше механизма спонтанного нарушения калибровочной симметрии безмассового поля гравитонов.

Отсюда следует, что тензорные нелинейные уравнения ОТО, основанные на принципе эквивалентности инерционной и гравитационной масс, представляют собой феноменологический способ описания гравитации в классическом приближении с размерной гравитационной константой Ньютона  $G_N$  на основе геометрических представлений об искривлении 4D пространства на больших масштабах, которые существенно превышают планковские масштабы длины и времени. Квантовые поправки к гравитационной постоянной и к уравнениям Эйнштейна становятся существенными только на планковских масштабах длины и времени  $l_p = t_p = 1/M_P$ .

Таким образом, согласно предложенной выше квантово-полевой модели гравитационного взаимодействия аномальная малость гравитационной константы Ньютона  $G_N = e_g^2/M_T^2$  по сравнению с константой слабого взаимодействия Ферми  $G_F = e_w^2/m_Z^2 \approx 1,67 \cdot 10^{33} G_N$  обусловлена аномально большой величиной массы промежуточных тензорных бозонов  $M_T \approx 10^{19}$  ГэВ, по сравнению с массой промежуточных векторных бозонов  $m_Z \approx 100$  ГэВ.

В то же время дальнедействующие гравитационные силы переносятся квантами безмассового тензорного поля – гравитонами со спином  $S = 2$  аналогично тому, как дальнедействующее электромагнитное взаимодействие переносится безмассовыми фотонами со спином  $S = 1$ .

При этом масса промежуточных тензорных бозонов генерируется за счёт спонтанного нарушения калибровочной симметрии поля гравитонов в результате его взаимодействия с фундаментальным нелинейным скалярным полем со спином  $S = 0$ , масса бозонов которого на 17 порядков превышает массу бозона Хиггса.

### 2.3. Фундаментальное скалярное поле как результат неустойчивости нейтрального фермионного вакуума, заполненного безмассовыми фермионами с разными знаками зарядов

В данном разделе обсуждается проблема происхождения фундаментального нелинейного скалярного поля  $\Phi$ , играющего ключевую роль как в процессах эволюции нашей Вселенной, так и в квантовой природе гравитации.

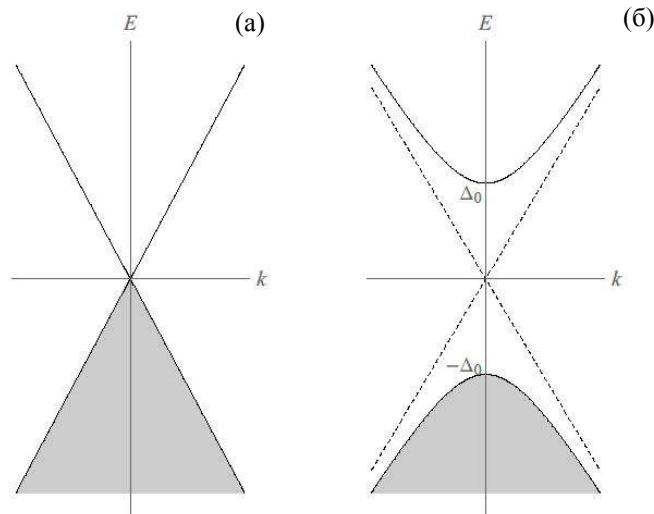


Рис. 10. Исходный дираковский спектр безмассовых фермионов и антифермионов (а) и перестроенный спектр с энергетической щелью  $2\Delta_0$ , когда заполнены все состояния с отрицательной массой  $M_F = -\Delta_0$  (б)

С этой целью рассматривается модель исходного фермионного вакуума, область отрицательных энергий которого в силу принципа Паули заполнена безмассовыми «правыми» и «левыми» фермионами

с противоположными знаками зарядов  $\pm q$  (рис. 10а). При этом предполагается, что заряд  $q$  значительно больше электрического заряда по абсолютной величине (например, равен приведённому выше гравитационному заряду  $e_g \approx 10e$ ).

Из условия нейтральности такого вакуума следует равенство концентраций фермионов с зарядами разных знаков, в отличие от Дираковского вакуума, для которого предполагается, что отрицательный электрический заряд электронов, заполняющих состояния с отрицательной энергией, компенсируется некоторыми неподвижными (бесконечно тяжёлыми) положительными зарядами по аналогии с ионной кристаллической решёткой в металлах.

Предположим также, что в вакууме существует безмассовое калибровочное векторное поле  $A_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) со спином  $S = 1$ , которое обеспечивает исходное взаимодействие между зарядами типа закона Кулона  $\pm q^2/r$ . Однако в нейтральной квантовой плазме, состоящей из равного числа заряженных фермионов с зарядами разного знака, происходит спонтанное нарушение калибровочной инвариантности векторного поля и связанное с этим экранирование взаимодействия между зарядами.

Как будет показано ниже, такой вакуум неустойчив по отношению к фазовому переходу второго рода, который обусловлен коллективным спариванием безмассовых заряженных фермионов с противоположными знаками их зарядов, спинов и спиральностей. В результате такого спаривания происходит спонтанное нарушение киральной симметрии фермионов за счёт образования в их спектре энергетической щели, которая определяет конечную массу фермионных возбуждений. При этом нейтральный когерентный квантовый конденсат связанных фермионных пар играет роль нелинейного скалярного поля  $\Phi$  с отличным от нуля вакуумным средним значением амплитуды  $\Phi_0 = \mu/g$  и с плотностью потенциальной энергии  $U_0 = \mu^2\Phi_0^2/4$  в основном состоянии.

Как отмечалось выше, в рамках современных представлений величина  $U_0$  определяет положительную плотность энергии вакуума  $\varepsilon_{vac} = U_0$  и его отрицательное давление  $P_{vac} = -U_0$ , что должно приводить к термодинамической неустойчивости вакуума. Ниже будет показано, что эта неустойчивость устраняется благодаря структуре перестроенного фермионного вакуума.

Для описания фазового перехода второго рода с перестройкой исходного фермионного вакуума удобно воспользоваться хорошо разработанными методами квантовой теории поля, которые применяются при изучении макроскопических квантовых состояний в таких конденсированных системах, как квантовые жидкости [78].

В связи с этим наряду с усреднёнными по перестроенному вакууму нормальными функциям Грина массивных фермионов разных знаков

$G(p-p') = \langle \psi_\alpha(p) \gamma^{\alpha\beta} \bar{\psi}_\beta(p') \rangle$ , где  $\psi_\alpha$  – волновые функции Дирака (биспиноры), а  $\gamma^{\alpha\beta}$  – 4D матрицы Дирака, введём аномальные функции Грина  $F(p-p') = \langle \psi_\alpha(p) \gamma^{\alpha\beta} \psi_\beta(p') \rangle$ . Здесь учтена идентичность исходных безмассовых спектров для фермионов разного знака  $E_+(\vec{k}) = E_-(\vec{k}) = |\vec{k}|$ .

По аналогии с переходом металла в сверхпроводящее состояние [78, 79] или полуметалла в состояние экситонного диэлектрика [80], нормальные и аномальные функции Грина частиц с разными знаками зарядов описываются следующей системой уравнений

$$G(p) = G_0(p) + G_0(p) \Sigma_1(p) G(p) + G_0(p) \Sigma_2(p) F(p); \quad (2.25)$$

$$F(p) = G_0(-p) \Sigma_1(p) F(p) + G_0(-p) \Sigma_2(p) G(p). \quad (2.26)$$

Здесь  $G_0(p) = [\omega - |\vec{k}| + i0]^{-1}$  – функции Грина невзаимодействующих частиц,  $\omega$  – передаваемая энергия,  $p$  – 4D вектор энергии-импульса, а  $\Sigma_1(p)$  и  $\Sigma_2(p)$  – нормальная и аномальная собственно-энергетические части, которые определяются следующими интегральными соотношениями

$$\Sigma_1(p) = i \int \frac{d^4 p'}{(2\pi)^4} \tilde{V}_+(p-p') G(p') \Gamma(p, p'); \quad (2.27)$$

$$\Sigma_2(p) = i \int \frac{d^4 p'}{(2\pi)^4} \tilde{V}_-(p-p') F(p') \Gamma(p, p').$$

Здесь  $\tilde{V}_\pm(p-p')$  – Фурье-компоненты экранированного потенциала кулоновского взаимодействия между частицами

$$\tilde{V}_\pm(p-p') = \frac{\pm 4\pi q^2}{(\vec{k} - \vec{k}')^2 \cdot \varepsilon(p-p')} \quad (2.28)$$

где  $\varepsilon(p) = 1 + 8\pi q^2 \Pi(p)/k^2$  – диэлектрическая проницаемость перестроенного вакуума с поляризуемостью частиц

$$\Pi(p) = 2 \int \frac{d^4 p''}{(2\pi)^4} [G(p'') G(p-p'') + F(p'') F(p-p'')] \cdot \Gamma(p, p'') \quad (2.29)$$

а  $\Gamma(p, p')$  – вершинная часть (трёхполюсник), которая описывает многочастичные кулоновские корреляции и определяется бесконечным рядом неприводимых диаграмм Фейнмана (см. [78]).

При этом следует иметь в виду, что обобщённая восприимчивость системы заряженных частиц в (2.28) удовлетворяет следующему дисперсионному соотношению Крамерса–Кронига

$$\frac{1}{\varepsilon(\vec{k}, \omega)} = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} z dz \cdot \text{Im} \left[ \frac{1}{\varepsilon(\vec{k}, z)} \right] \cdot \left[ \frac{1}{z^2 - \omega^2} + i\pi \cdot \delta(z^2 - \omega^2) \right]. \quad (2.30)$$

Из уравнений (2.25) и (2.26) следует, что перенормированные нормальные и аномальные функции Грина имеют следующий вид

$$G(p) = \frac{\omega + E(\vec{k}) - \Sigma(p)}{\omega^2 - [E(\vec{k}) - \Sigma(p)]^2 - [\tilde{\Sigma}(p)]^2 + i0}; \quad (2.31)$$

$$F(p) = \frac{\tilde{\Sigma}(p)}{\omega^2 - [E(\vec{k}) - \Sigma(p)]^2 - [\tilde{\Sigma}(p)]^2 + i0}.$$

Можно показать, что реальная часть нормальной собственной энергии может быть представлена в виде  $\Sigma(p) = \Sigma_1(p) - \omega \cdot \Sigma_2(p)$ , так что величина  $\Sigma_2(0)$  определяет сдвиг уровня Ферми относительно дираковской точки перестроенного спектра безмассовых фермионов при  $\vec{k} = 0$ , в которой плотность фермионных состояний равна нулю, тогда как  $\Sigma_1(p)$  и  $\tilde{\Sigma}(p)$  определяют энергию связи пар частиц с разными знаками зарядов.

Таким образом, в перестроенном фермионном спектре при  $\vec{k} = 0$  и  $\omega = 0$  в результате спонтанного нарушения киральной симметрии безмассовых частиц при фазовом переходе второго рода возникает энергетическая щель  $2\Delta_0 = (\Delta_+ + \Delta_-)$  (см. рис. 10б), причём величина  $\Delta_0$  определяет конечную массу фермионов  $M_F$

$$M_F \equiv \Delta_0 = \sqrt{[\Sigma_1(0)]^2 + [\tilde{\Sigma}(0)]^2}. \quad (2.32)$$

При абсолютном нуле температуры массивные фермионы, согласно принципу Паули, заполняют все состояния с отрицательной энергией  $E \leq -\Delta_0$  и характеризуются спектром  $E(k) = -\sqrt{M_F^2 + k^2}$  с отрица-

тельной эффективной массой  $M_F < 0$ . Это соответствует отрицательной плотности фермионов с разными знаками заряда  $\rho_F = 2M_F n_F$ .

С другой стороны, как отмечалось выше, для скалярного поля давление и плотность энергии связаны соотношением  $P_s = -\varepsilon_s = -\lambda$ , где  $\lambda = U_0$  – минимальная плотность энергии скалярного поля в основном состоянии. В результате давление и плотность энергии вакуума равны

$$P_{vac} = -(|\varepsilon_F| + \lambda) < 0; \quad \rho_{vac} = -|\rho_F| + \lambda. \quad (2.33)$$

При условии, что полная плотность вакуума отрицательна  $\rho_{vac} < 0$  скорость продольного акустического возбуждения («адиабатического звука») в перестроенном физическом вакууме вещественна

$$c_s = \sqrt{\Gamma_{vac} \cdot P_{vac} / \rho_{vac}} = \sqrt{\Gamma_{vac} \cdot \frac{(|\varepsilon_F| + \lambda)}{(|\varepsilon_F| - \lambda)}}, \quad (2.34)$$

где  $\Gamma_{vac}$  – показатель адиабаты физического вакуума. Полагая  $M_F = M_P$ ,  $n_F = M_P^3$ ,  $\rho_F = \varepsilon_F = 2M_F^4$  и  $\lambda = M_P^4$ , согласно (2.34) получаем, что скорость звука  $c_s$  совпадает со скоростью света при  $\Gamma_{vac} = 1/3$ . Поскольку физический вакуум в рамках данной модели представляет собой макроскопический (бесконечный) когерентный квантовый конденсат связанных нейтральных пар частиц с разными знаками зарядов, он может рассматриваться как сверхтекучая нейтральная квантовая бозе–жидкость, в которой возможно бездиссипативное прямолинейное и равномерное движение любых объектов со скоростями, не превышающими скорость звука.

### 3. АННИГИЛЯЦИОННЫЙ НАГРЕВ И ФОРМИРОВАНИЕ НЕОДНОРОДНОЙ СТРУКТУРЫ СОВРЕМЕННОЙ ВСЕЛЕННОЙ

В данном разделе будет показано, что по мере «скатывания» расширяющейся Вселенной в нулевой минимум потенциала скалярного поля (см. раздел 1) происходят процессы рождения и аннигиляции первичного вещества и антивещества, что приводит к сильному разогреву Вселенной (так называемому «рехитингу»), который играет роль «Большого взрыва». При этом однородный фон тепловых флуктуаций плотности энергии фундаментального скалярного поля может составлять зна-

чительную часть средней плотности энергии вакуума  $\bar{\lambda}$ , которая убывает по мере расширения и остывания Вселенной.

С другой стороны, предполагается, что пространственно неоднородное распределение тепловых флуктуаций скалярного поля благодаря малой теплопроводности вещества оказывается «замороженным» в процессе быстрого адиабатического расширения Вселенной и определяет наблюдаемую крупномасштабную неоднородную структуру современной Вселенной в виде скоплений и сверхскоплений галактик, чередующихся с космическими пустотами. При этом из областей с повышенной плотностью потенциальной энергии скалярного поля  $\lambda$ , которая играет роль «антигравитации», вещество выметается в области с пониженной плотностью  $\lambda$ , где и происходит образование галактик, а сами эти области на среднем однородном фоне  $\bar{\lambda}$  имитируют существование гравитирующей «темной материи» вокруг галактик.

### 3.1. «Большой взрыв» и нагрев Вселенной за счёт аннигиляции вещества и антивещества

В Разделе 1 был рассмотрен процесс «скатывания» Вселенной в минимум потенциала скалярного поля, сопровождающийся разогревом Вселенной. Механизм такого разогрева обеспечивается процессами рождения и аннигиляции вещества и антивещества. В рамках данной модели предполагается, что именно аннигиляция первичного вещества и антивещества играет роль «Большого взрыва» и приводит к возникновению горячей радиационной эры нашей Вселенной.

Для рассмотрения процесса нагрева ранней Вселенной за счёт аннигиляции массивных фермионов и антифермионов дифференциальные уравнения (1.55), описывающие динамику ранней холодной Вселенной и эволюцию скалярного поля, следует дополнить термодинамическими соотношениями и уравнением для скорости изменения числа частиц и античастиц.

При изменении потенциальной энергии фундаментального поля  $U(\Phi)$  (1.4) и расширении Вселенной скорость выделения тепла определяется уравнением

$$\frac{dQ}{dt} = -\frac{d(UV_U)}{dt} - P\frac{dV_U}{dt} = -(U+P)\frac{dV_U}{dt} - V_U\frac{dU}{dt}, \quad (3.1)$$

где  $V_U = 2\pi^2 a^3$  – объём замкнутой Вселенной с масштабным фактором (радиусом)  $a$ , а  $P$  – давление, связанное уравнением состояния с плотностью энергии вещества и фундаментального поля.

При этом скорость изменения температуры определяется выражением

$$C \frac{dT}{dt} = \frac{dQ}{dt}, \quad (3.2)$$

где  $C$  – теплоёмкость, зависящая от числа частиц и античастиц первичной материи. Например, если предположить, что вещество в ранней холодной Вселенной состоит из вырожденного нерелятивистского ферми-газа частиц и античастиц и равновесного электромагнитного излучения, теплоёмкость равна

$$C = C_F + C_{ph}, \quad (3.3)$$

где

$$C_F = 2 \left( \frac{\pi}{3} \right)^{2/3} \frac{M_F}{\hbar^2} N_F^{1/3} T V_U^{2/3}, \quad C_{ph} = \frac{4\pi^2}{60\hbar^3 c^3} V_U T^3. \quad (3.4)$$

Здесь  $M_F$  – масса фермионов, а  $N_F$  – число фермион-антифермионных пар.

В безразмерных переменных уравнение (3.2) с учётом (3.3) и (3.4) можно переписать в виде

$$\tilde{\varepsilon}_p \left[ \left( \frac{2}{3} \right)^{2/3} \tilde{M}_F N_F^{1/3} \tilde{a}^2 \tilde{T} + \frac{8\pi^2}{15} \tilde{a}^3 \tilde{T}^3 \right] \dot{\tilde{T}} = -6(V(x, h) + \tilde{P}) \tilde{a}^2 \dot{\tilde{a}} - 2\tilde{a}^3 \frac{d}{d\tau} V(x, h), \quad (3.5)$$

где безразмерное давление  $\tilde{P}$  нормировано на  $\mu^2 \phi_0^2$ , а температура  $\tilde{T}$  и масса  $\tilde{M}_F$  – на энергию  $E_p$  и массу Планка  $M_p$ .

Изменение числа фермионов и антифермионов в расширяющейся Вселенной можно описать уравнением

$$\frac{d}{dt} N_F = -\frac{\sigma_{ann}(v)v}{2\pi^2 a^3} \cdot N_F^2 + \Gamma \frac{\mu^2 \phi^2}{2M_F} \cdot 2\pi^2 a^3, \quad (3.6)$$

где первое слагаемое в правой части описывает процесс аннигиляции частиц и античастиц с сечением  $\sigma_{ann}$ , а второе – рождение пар фермионов и антифермионов за счёт распада фундаментального поля с декрементом  $\Gamma$ , введённым в уравнении (1.55). Сечение аннигиляции  $\sigma_{ann}$  определяется зависящим от скорости  $v = v_F = p_F / M_F$  выражением [75]

$$\sigma_{ann} = \pi r_F^2 \frac{(1-u^2)}{4u} \left[ \frac{3-u^2}{u} \ln \left| \frac{1+u}{1-u} \right| - 2(2-u^2) \right] \equiv \pi r_F^2 f(u), \quad (3.7)$$

где  $u = v/c$ , а классический радиус заряженных частиц и античастиц  $r_F = q^2/M_F$  в плотной электронейтральной плазме следует заменить радиусом экранирования  $r_s \equiv 1/\kappa_s = 1/\Omega_{pl}$ , где  $\Omega_{pl} = \sqrt{8\pi q^2 n_F/M_F}$  – частота коллективных плазменных колебаний, если выполняется условие  $r_s < r_F$ . Поскольку концентрация фермионов  $n_F(t) = N(t)/V(t)$  быстро убывает в процессе аннигиляции и по мере быстрого расширения ранней Вселенной, это условие может нарушаться.

В безразмерных переменных выражение (3.6) можно переписать как

$$\dot{N} = -\frac{\tilde{r}_F^2}{2\pi\tilde{a}^3} u f(u) \cdot N^2 + \frac{\pi^2}{2\tilde{M}_F \tilde{\epsilon}_P} \gamma \tilde{a}^3 x^2, \quad (3.8)$$

где  $\tilde{r}_F = \frac{r_F}{l_p} = \frac{\tilde{e}^2}{\tilde{M}_F}$ ,  $\tilde{\epsilon}_P = \frac{e_F}{q_P}$  ( $q_P = \sqrt{\hbar c}$  – планковский заряд) и  $\gamma = \Gamma t_p$ .

Следует помнить, что скорость частиц  $u$  изменяется по мере изменения концентрации и нагрева, а в ультрарелятивистском пределе сечение рассеяния стремится к нулю.

При высоких температурах необходимо учитывать температурную зависимость параметра «мнимой массы»  $\mu(T) = \mu(0) \cdot \sqrt{1 - T/T_c}$ , где  $T_c$  – критическая температура, при которой происходит фазовый переход второго рода, сопровождающийся исчезновением скалярного поля [21]. В рамках теории Гинзбурга–Ландау, аналогом которой является модель нелинейного скалярного поля с биквадратной нелинейностью типа  $g^2\Phi^4/4$  (модель Хиггса), возникает температурная зависимость щели  $\Delta(T)$  в спектре фермионов и их массы  $M_F(T)$ , которая вблизи критической температуры  $T_c$  имеет вид

$$\Delta(T) = M_F(T) \approx 3,06 \cdot \sqrt{T_c(T_c - T)}. \quad (3.9)$$

При этом, согласно модели Бардина – Купера – Шриффера (БКШ) в теории сверхпроводимости (см. [81]), критическая температура  $T_c$  связана с величиной щели при нулевой температуре  $\Delta_0 \equiv \Delta(0)$  соотношением  $T_c \approx 0,57\Delta_0$ . В дальнейшем для простоты будем предполагать, что температурная зависимость щели имеет вид (3.9) при всех температурах.

При этом плотность потенциальной энергии скалярного поля в основном состоянии как функция температуры имеет следующий вид

$$U_0(T) \equiv \frac{\mu^4(T)}{4g^2} = \frac{\mu^4(0)}{4g^2 T_c^2} \cdot (T_c - T)^2. \quad (3.10)$$

Таким образом, при  $T \rightarrow T_c$  в результате фазового перехода второго рода масса фермионов  $M_F(T) = \Delta(T)$ , а также вакуумное среднее  $\varphi_0(T) = \mu(T)/g$  и плотность потенциальной энергии  $U_0(T)$  нелинейного скалярного поля, обращаются в нуль.

### 3.2. Формирование крупномасштабной неоднородной структуры современной Вселенной: сценарий «стохастической инфляции»

Предположим, что максимальная температура  $T_{\max}$  разогрева замкнутой Вселенной в результате аннигиляции вещества и антивещества гораздо ниже той критической температуры фазового перехода второго рода  $T_c \approx 0,57M_p$ , при которой происходит распаривание фермионов и антифермионов и подавление скалярного поля.

При  $T \neq 0$  возникают неоднородные в пространстве и переменные во времени тепловые флуктуации амплитуды  $\delta\varphi(\vec{r}, t)$  и потенциальной энергии  $\delta U(\vec{r}, t)$  скалярного поля. В частности, согласно выражению (3.10) среднее значение флуктуаций плотности потенциальной энергии равно

$$\langle \delta U_0(T) \rangle = \frac{\mu^4(0)}{4g^2 T_c^2} \langle (\delta T)^2 \rangle \quad (3.11)$$

и выражается через среднеквадратичную флуктуацию температуры  $\langle (\delta T)^2 \rangle$ , которая согласно [57] определяется выражением

$$\langle (\delta T)^2 \rangle = T^2 / C_v(T), \quad (3.12)$$

где  $C_v(T)$  – полная теплоёмкость системы при постоянном объёме, связанная с теплоёмкостью при постоянном давлении соотношением  $C_p = C_v + N$ . В качестве теплоёмкости  $C_p(T)$  расширяющейся горячей

Вселенной в соотношение (3.12) следует подставить суммарную теплоёмкость ферми-газа и равновесного излучения  $[C_F(T) + C_R(T)]$  согласно соотношениям (3.4).

В рамках рассматриваемой модели эволюции ранней Вселенной, которая в процессе своего расширения и нагрева скатывается в минимум потенциала фундаментального скалярного поля, в соответствии с уравнениями (1.55), (3.5) и (3.8) при достижении нулевого потенциала именно величина  $\langle \delta U_0(T) \rangle$  начинает играть роль зависящей от температуры

эффективной средней плотности энергии вакуума  $\bar{\lambda}(T)$  и в современной Вселенной определяет плотность «тёмной энергии» (см. ниже).

В процессе быстрого неравновесного (адиабатического) охлаждения расширяющейся Вселенной пространственно неоднородные тепловые флуктуации скалярного поля не успевают релаксировать за счёт низкой теплопроводности разреженного вещества. Это может быть причиной сохранения «замороженной» (или «закалённой») пространственно неоднородной случайной (стохастической) структуры распределения плотности энергии скалярного поля в холодной Вселенной.

В предположении о малой амплитуде этих статических неоднородностей плотности энергии скалярного поля, т. е. плотности энергии вакуума  $\delta\lambda$  по сравнению с его средним значением  $\bar{\lambda}$ , пространственное распределение слабых статических возмущений гравитационного поля может быть описано неоднородным линеаризованным уравнением для малых возмущений метрического тензора  $h_{\mu\nu}$  (см. [67])

$$W^2 h_{\mu\nu} - \frac{\partial^2 h_\nu^\lambda}{\partial x^\lambda \partial x^\mu} - \frac{\partial^2 h_\mu^\lambda}{\partial x^\lambda \partial x^\nu} - \frac{\partial^2 h_\lambda^\lambda}{\partial x^\mu \partial x^\nu} = -16\pi G_N \cdot S_{\mu\nu}. \quad (3.13)$$

Здесь  $S_{\mu\nu} = (T_{\mu\nu} - g_{\mu\nu} \cdot T_\lambda^\lambda / 2)$ , а роль тензора энергии–импульса  $T_{\mu\nu}$  в данном случае играет малое пространственно-неоднородное статическое возмущение плотности энергии скалярного поля

$$\delta T_{\mu\nu} = -\delta\lambda(\vec{r}) \cdot g_{\mu\nu}, \quad (3.14)$$

где  $g_{\mu\nu}$  – тензор Минковского. Учитывая, что в данном случае  $\delta T_\lambda^\lambda = -4\delta\lambda(\vec{r})$ , и полагая  $h_{\mu\nu}(\vec{r}) = g_{\mu\nu} \cdot h(\vec{r})$ , получаем следующее уравнение для неоднородного распределения слабых статических возмущений гравитационного поля

$$\nabla^2 h(\vec{r}) = 16\pi G_N \cdot \delta\lambda(\vec{r}). \quad (3.15)$$

В силу неоднородности поля «замороженных» флуктуаций плотности энергии вакуума должен происходить процесс «стохастической» ин-

фляции, когда из областей с большей плотностью «тёмной энергии» происходит более быстрое «выметание» вещества в те области пространства, где плотность «тёмной энергии» понижена. Этот процесс может быть описан с помощью обобщённого уравнения ОТО для неоднородной замкнутой Вселенной

$$\ddot{a} - \nabla^2 a = -\frac{\tilde{\kappa}}{6} [\varepsilon + 3P - 2\bar{\lambda} - 2\delta\lambda(\vec{r})] \cdot a \quad (3.16)$$

Пренебрегая для простоты плотностью энергии и давлением вещества и реликтового излучения, в первом порядке по малым возмущениям  $\delta a = a$  и  $\delta\lambda = \bar{\lambda}$  получаем

$$\delta\ddot{a} - \nabla^2 \delta a = \frac{\tilde{\kappa}}{3} [\bar{\lambda} \cdot \delta a + \delta\lambda(\vec{r}) \cdot a(t)]. \quad (3.17)$$

Уравнение (3.17) описывает процесс «стохастической инфляции» неоднородной Вселенной, в результате которой в областях с минимумом «тёмной энергии», т. е. минимумом «антигравитации», за счёт преобладающей гравитации вещества под действием неустойчивости Джинса происходило формирование галактик и их скоплений, а между этими сгустками видимой светящейся материи в областях с максимальной плотностью «тёмной энергии» образовались космические пустоты.

При этом области «пониженной антигравитации» на фоне средней однородной плотности «тёмной энергии» выглядят как области «повышенной гравитации» и могут имитировать присутствие невидимой и, возможно, вообще реально не существующей «тёмной материи» вокруг галактик и их скоплений. Однако эта проблема требует более детального рассмотрения, которое выходит за рамки тематики данного обзора.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данный обзор отражает точку зрения авторов на ряд проблем современной космологии и теории гравитации, которые важны для понимания механизмов происхождения и эволюции нашей Вселенной. Следует учесть, что авторы являются «неофитами» в вопросах этой фундаментальной области науки и не претендуют на всестороннее и полное рассмотрение затронутых в этом обзоре проблем.

Тем не менее, являясь специалистами в области физики конденсированного состояния и фазовых переходов, авторы взяли на себя смелость применить представления и методы этих хорошо разработанных областей теоретической физики к описанию нашей Вселенной. Мы исходили из глубокого убеждения в том, что природа на всех масштабах

энергии построена на основе единых принципов подобия, базирующихся на существовании в структуре материи различных скрытых симметрий и их спонтанных нарушениях в результате фазовых переходов.

В качестве самого яркого примера такого подобия можно привести уравнение для скалярного нелинейного поля Хиггса [46, 47], на основе которого был предсказан бозон Хиггса, открытый в ЦЕРНе на Большом адронном коллайдере в 2012 году при энергии 125 ГэВ, что эквивалентно температуре порядка  $10^{15}$  К.

Уравнение для нелинейного поля Хиггса является фактически релятивистским аналогом хорошо известного в теории сверхпроводимости уравнения Гинзбурга–Ландау, сформулированного в 1950 году для феноменологического описания фазового перехода второго рода в сверхпроводниках вблизи критической температуры  $T_c$ , которая не превышает  $(1 \div 100)$  К, т. е. на 13–15 порядков ниже температуры, эквивалентной энергиям 100 ГэВ. Тем не менее, несмотря на такое огромное различие в масштабах энергий и температур имеет место формальное подобие между теориями Гинзбурга–Ландау и Хиггса.

В свете этого не должна казаться такой уж нереальной рассмотренная в разделе 2 данного обзора аналогия между квантовой теорией слабого взаимодействия [64], которое переносится массивными векторными бозонами с массами порядка 100 ГэВ, и предложенной нами моделью короткодействующего обменного гравитационного взаимодействия, которое переносится «сверхмассивными» тензорными бозонами с массой на 17 порядков больше, т. е. порядка массы Планка  $M_p \approx 10^{19}$  ГэВ, и существует только на малых масштабах порядка планковских длины и времени  $l_p = t_p = 1/\sqrt{M_p}$ .

В то же время на больших масштабах  $l \gg l_p$  и  $t \gg t_p$  сохраняется обычное дальнедействующее сверхслабое гравитационное взаимодействие, которое переносится безмассовыми гравитонами и в статическом пределе сводится к закону Ньютона аналогично тому, как в единой теории электрослабого взаимодействия Глэшоу – Салама – Вайнберга [59–61] сохраняется дальнедействующее электромагнитное взаимодействие, которое переносится безмассовыми фотонами и в статическом пределе сводится к закону Кулона.

Все это может указывать на единство законов природы на всём гигантском масштабе известных нам энергий протяжённостью более, чем в 32 порядка, начиная от физики сверхнизких температур для сверхтекучих квантовых ферми- и бозе-жидкостей вплоть до фундаментальных основ физики элементарных частиц и квантовой гравитации.

В рамках такого подхода нам удалось получить ряд принципиально новых результатов в области космологии, таких, например, как возможность фазового перехода первого рода в расширяющейся ранней холодной Вселенной за счёт изменения знака её скалярной кривизны,

играющей роль «внешнего поля». При учёте взаимодействия гравитационного и скалярного полей для разных уравнений состояния вещества с помощью самосогласованной модели взаимодействия скалярного и тензорного полей с массами бозонов, равными массе Планка, удалось также понять структуру гравитационного взаимодействия на малых расстояниях и происхождение гравитационной постоянной Ньютона.

Наконец, с помощью представления о тепловых флуктуациях плотности энергии скалярного поля в эпоху горячей Вселенной и о процессе «закалки» этих флуктуаций при быстром расширении и остывании Вселенной в период инфляции удалось объяснить неоднородную структуру пространственного распределения вещества, а также возможную природу «тёмной энергии» и «тёмной материи» в современной холодной Вселенной.

В заключение мы выражаем искреннюю благодарность В. П. Гусынину, А. И. Жуку, Г. М. Зиновьеву, И. В. Криве, В. А. Рубакову, С. М. Рябченко и Ю. А. Ситенко за полезные обсуждения отдельных вопросов, затронутых в настоящем обзоре.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A. Einstein, M. Grossmann, Entwurf einer verallgemeinerten Relativitätstheorie und eine Theorie der Gravitation. I. Physikalischer Teil von A. Einstein II. Mathematischer Teil von M. Grossmann, *Z. Math. Phys.*, v. 62, p. 225–244, 245–261 (1913).
2. A. Einstein, Zur allgemeinen Relativitätstheorie, *Preuss. Akad. Wiss.*, v. 1915 (2), p. 778–786 (1915).
3. J. H. Jeans, I. The stability of a spherical nebula, *Philos. Trans. Royal Soc. A*, v. 199, No. 312–320, p. 1–53 (1902).
4. A. Einstein, Kosmologische Betrachtungen zur allgemeinen Relativitätstheorie, *Preuss. Akad. Wiss.*, v. 1917 (1), p. 142–152 (1917).
5. W. de Sitter, On the relativity of inertia. Remarks concerning Einstein's latest hypothesis, *Proc. Roy. Acad. Sci. (Amsterdam)*, v. 19, No. 9–10, p. 1217–1225 (1917).
6. A. Friedmann, Über die Krümmung des Raumes, *Z. Phys.*, v. 10, No. 1, p. 377–386 (1922).
7. A. Einstein, Bemerkung zu der Arbeit von A. Friedmann: Über die Krümmung des Raumes, *Z. Phys.*, v. 11, p. 326 (1922).
8. A. Einstein, Notiz zu der Arbeit von A. Friedmann "Über die Krümmung des Raumes", *Z. Phys.*, v. 16, p. 228–228 (1923).
9. E. Hubble, A relation between distance and radial velocity among extra-galactic nebulae, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, v. 15, No. 3, p. 168–173 (1929).
10. G. Lemaitre, Un Univers homogène de masse constante et de rayon croissant rendant compte de la vitesse radiale des nébuleuses extra-galactiques, *Annales de la Société Scientifique de Bruxelles*, v. A47, p. 49–59 (1927).
11. A. Einstein, Zur Elektrodynamik bewegter Körper, *Ann. Phys.*, v. 17, No., p. 891–921 (1905).
12. A. A. Michelson, E. W. Morley, On the Relative Motion of the Earth and the Luminiferous Ether, *Amer. J. Sci.*, v. 34, No. 203, p. 333–345 (1887).
13. Зельдович Я. Б., Новиков И. Д., *Строение и эволюция Вселенной*, Наука, Москва, 1975, с. 736.
14. E. Mach, *Die Mechanik in ihrer Entwicklung: Historisch-kritisch dargestellt*, Brockhaus F. A., Leipzig, 1883, p. 518.
15. Глинер Э. Б., Алгебраические свойства тензора энергии-импульса и вакуумоподобные состояния вещества, *ЖЭТФ*, т. 49, № 2, с. 542–548 (1965).

16. Глинер Э. Б., Вакуумное состояние среды и фридмановская космология, ДАН СССР, т. 192, с. 771–774 (1970).
17. Старобинский А. А., Спектр реликтового гравитационного излучения и начальное состояние Вселенной, Письма в ЖЭТФ, т. 30, № 11, с. 719–723 (1979).
18. Starobinsky A. A., A new type of isotropic cosmological models without singularity, Phys. Lett. B, v. 91, p. 99–102 (1980).
19. Abbott B. P., et al. (LIGO Scientific Collaboration and Virgo Collaboration), Observation of Gravitational Waves from a Binary Black Hole Merger, Phys. Rev. Lett., v. 116, No. 6, p. 061102 (2016).
20. Abbott B. P., et al. (LIGO Scientific Collaboration and Virgo Collaboration), GW170817: Observation of Gravitational Waves from a Binary Neutron Star Inspiral, Phys. Rev. Lett., v. 119, No. 16, p. 161101 (2017).
21. Киржниц Д. А., Модель Вайнберга и "горячая вселенная", Письма в ЖЭТФ, т. 15, № 12, с. 745–748 (1972).
22. Kirzhnits D. A., A. D. Linde, Macroscopic consequences of the Weinberg model, Phys. Lett. B, v. 42, p. 471–474 (1972).
23. Киржниц Д. А., Линде А. Д., Релятивистский фазовый переход ЖЭТФ, т. 67, № 4(10), с. 1263 (1974).
24. Kirzhnits D. A., Linde A. D., Symmetry behavior in gauge theories, Annals of Physics (N.-Y.), v. 101, p. 195–238 (1976).
25. Guth A. H., Inflationary universe: A possible solution to the horizon and flatness problems, Phys. Rev. D, v. 23, p. 347–356 (1981).
26. D. Kazanas, Dynamics of the Universe and spontaneous symmetry breaking, The Astrophysical Journal, v. 241, p. L59–L63 (1980).
27. K. Sato, First-order phase transition of a vacuum and the expansion of the Universe, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, v. 195, p. 467–479 (1981).
28. Albrecht A., Steinhardt P. J., Cosmology for Grand Unified Theories with Radiatively Induced Symmetry Breaking, Phys. Rev. Lett., v. 48, p. 1220–1223 (1982).
29. T. Lee, G. Wick, Vacuum stability and vacuum excitation in a spin-0 field theory, Phys. Rev. D, v. 9, p. 2291–2316 (1974).
30. B. J. Harrington, A. Yildiz, High-Density Phase Transitions in Gauge Theories, Phys. Rev. Lett., v. 33, p. 324–327 (1974).
31. A. D. Linde, High-density and high-temperature symmetry behavior in gauge theories, Phys. Rev. D, v. 14, p. 3345–3349 (1976).
32. A. D. Linde, Classical Yang-Mills solutions, condensation of W mesons and symmetry of composition of superdense matter, Phys. Lett. B, v. 86, p. 39–42 (1979).
33. Криве И. В., Основное состояние сверхплотной кварк-глюонной материи, ЖЭТФ, т. 83, № 3, с. 849–858 (1982).
34. G. M. Shore, Radiatively induced spontaneous symmetry breaking and phase transitions in curved spacetime, Ann. Phys., v. 128, p. 376–424 (1980).
35. K. Ishikawa, Gravitational effect on effective potential, Phys. Rev. D, v. 28, p. 2445–2454 (1983).
36. Бухбиндер И. Л., Одинцов С. Д., Эффективный потенциал и фазовые переходы, индуцированные кривизной, в калибровочных теориях во внешнем гравитационном поле, ЯФ, т. 42, № 5(11), с. 1268–1278 (1985).
37. A. D. Linde, A new inflationary universe scenario: A possible solution of the horizon, flatness, homogeneity, isotropy and primordial monopole problems, Phys. Lett. B, v. 108, p. 389–393 (1982).
38. A. D. Linde, Chaotic inflation, Phys. Lett. B, v. 129, p. 177–181 (1983).
39. Линде А. Д., Хаотическая раздувающаяся Вселенная, Письма в ЖЭТФ, т. 38, с. 149–151 (1983).
40. Линде А. Д., Физика элементарных частиц и инфляционная космология, Наука, Москва, 1990, с. 280.
41. G. 't Hooft, Magnetic monopoles in unified gauge theories, Nucl. Phys. B, v. 79, p. 276–284 (1974).
42. Поляков А. М., Спектр частиц в квантовой теории поля, Письма в ЖЭТФ, т. 20, № 6, с. 430–433 (1974).
43. L. Kofman, A. Linde, A.A. Starobinsky, Towards the theory of reheating after inflation, Phys. Rev. D, v. 56, p. 3258–3295 (1997).
44. A. Linde, Hybrid inflation, Phys. Rev. D, v. 49, p. 748–754 (1994).

45. И. В. Криве, А. Д. Линде, Е. М. Чудновский, Спонтанное нарушение симметрии и эволюция Вселенной, *ЖЭТФ*, т. 71, № 3, с. 825–839 (1976).
46. P. W. Higgs, Broken symmetries, massless particles and gauge fields, *Phys. Lett.*, v. 12, p. 132–133 (1964).
47. P.W. Higgs, Broken Symmetries and the Masses of Gauge Bosons, *Phys. Rev. Lett.*, v.13, p. 508–509 (1964).
48. A. Zee, Broken-Symmetric Theory of Gravity, *Phys. Rev. Lett.*, v. 42, p. 417–421 (1979).
49. L. Smolin, Towards a theory of spacetime structure at very short distances, *Nucl. Phys. B*, v. 160, p. 253–268 (1979).
50. J. L. Cervantes-Cota, H. Dehnen, Induced gravity inflation in the standard model of particle physics, *Nucl. Phys. B*, v. 442, p. 391–409 (1995).
51. F. L. Bezrukov, M. E. Shaposhnikov, The Standard Model Higgs boson as the inflaton, *Phys. Lett. B*, v. 659, p. 703–706 (2008).
52. ATLAS Collaboration, Observation of a new particle in the search for the Standard Model Higgs boson with the ATLAS detector at the LHC, *Phys. Lett. B*, v. 716, p. 1–29 (2012).
53. CMS Collaboration, Observation of a new boson at a mass of 125 GeV with the CMS experiment at the LHC, *Phys. Lett. B*, v. 716, p. 30–61 (2012).
54. E. A. Pashitskii, "Big Bang" as a first-order phase transition in the early Universe, arXiv: 1405.4219 [hep-th] (2014).
55. Пашицкий Э. А., Пентегов В. И., Большой взрыв как результат фазового перехода первого рода, обусловленного изменением скалярной кривизны в расширяющейся ранней вселенной: сценарий «гиперинфляции», *ЖЭТФ*, т. 149, № 1, с. 63–75 (2016).
56. Пашицкий Э. А., Пентегов В. И., Инфляция ранней холодной Вселенной, заполненной нелинейным скалярным полем и неидеальным релятивистским ферми-газом, *ЖЭТФ*, т. 151, № 3, с. 508–522 (2017).
57. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Статистическая физика. Часть 1., Физматлит, Москва, 2002, с. 616.
58. Я. В. Зельдович, Уравнение состояния при ультравысоких плотностях и его релятивистские пределы, *ЖЭТФ*, т. 41, № 5, с. 1609–1615 (1961).
59. S. L. Glashow, The renormalizability of vector meson interactions, *Nucl. Phys.*, v. 10, Supplement C, p. 107–117 (1959).
60. A. Salam, J. C. Ward, Weak and electromagnetic interactions, *Il Nuovo Cimento* (1955–1965), v. 11, No. 4, p. 568–577 (1959).
61. S. Weinberg, A Model of Leptons, *Phys. Rev. Lett.*, v. 19, No. 21, p. 1264–1266 (1967).
62. R. Onofrio, On weak interactions as short-distance manifestations of gravity, *Modern Physics Letters A*, v. 28, No. 07, p. 1350022 (2013).
63. R. Onofrio, High-energy density implications of a gravitoweak unification scenario, *Modern Physics Letters A*, v. 29, No. 01, p. 1350187 (2014).
64. С. Вайнберг, Квантовая теория поля. Т. 2: Современные приложения, Физматлит, М., 2003, с. 528.
65. F. Englert, R. Brout, Broken Symmetry and the Mass of Gauge Vector Mesons, *Phys. Rev. Lett.*, v. 13, p. 321–323 (1964).
66. G. S. Guralnik, C. R. Hagen, T. W. B. Kibble, Global Conservation Laws and Massless Particles, *Phys. Rev. Lett.*, v. 13, p. 585–587 (1964).
67. Вайнберг С., Гравитация и космология, Мир, Москва, 1975, с. 696.
68. O. Aharony, O. Bergman, D. L. Jafferis, J. Maldacena, N = 6 superconformal Chern–Simons-matter theories, M2-branes and their gravity duals, *J. High En. Phys.*, v. 2008, No. 10, p. 091–091 (2008).
69. O. Aharony, Gubser S. S, J. Maldacena, H. Ooguri, Y. Oz, Large N field theories, string theory and gravity, *Phys. Rep.*, v. 323, No. 3–4, p. 183–386 (2000).
70. J. Maldacena, The large N limit of superconformal field theories and supergravity, *Advances in Theoretical and Mathematical Physics*, v. 2, No. 2, p. 231 – 252 (1998).
71. V. de Alfaro, S. Fubini, G. Furlan, A new approach to the theory of gravitation, *Il Nuovo Cimento B*, v. 57, No. 2, p. 227–252 (1980).
72. C. N. Yang, R. L. Mills, Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance, *Phys. Rev.*, v. 96, No. 1, p. 191–195 (1954).
73. H. Westman, T. Złośnik, Exploring Cartan gravity with dynamical symmetry breaking, *Classical and Quantum Gravity*, v. 31, No. 9, p. 095004 (2014).
74. B. Holdom, J. Ren, QCD analogy for quantum gravity, *Phys. Rev. D*, v. 93, No. 12, p. 124030 (2016).

75. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П., Квантовая электродинамика, 4, Физматлит, Москва, 2002, с. 720.
76. Ю. Швингер, Частицы, источники, поля, Мир, М., 1973, с. 504.
77. E. Fermi, Versuch einer Theorie der  $\beta$ -Strahlen. I, Z. Phys., v. 88, No. 3, p. 161–177 (1934).
78. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е., Методы квантовой теории поля в статистической физике, Физматгиз, М., 1962, с. 444.
79. Н. Н. Боголюбов, О новом методе в теории сверхпроводимости. I, ЖЭТФ 34, 58–65 (1958), ЖЭТФ, т. 34, № 1, с. 58–65 (1958).
80. Келдыш Л. В., Копаев Ю. В., Возможная неустойчивость полуметаллического состояния относительно кулоновского взаимодействия., ФТТ, т. 6, № 9, с. 2791–2798 (1964).
81. J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, Theory of superconductivity, Phys. Rev., v. 108, No. 5, p. 1175–1204 (1957).

УДК 530.1, 536-12

PACS numbers: 03. 65, 04. 20. Dw, 04. 70. Dy, 05. 20

## ЧАСТЬ IV

---

# ФИЗИКА ПЛАНКОВСКОГО МАСШТАБА В ТЕРМИНАХ ПРЕДЕЛЬНЫХ ВЕЛИЧИН

**Ю. Л. Болотин,**

*Институт теоретической физики им. А. И. Ахиезера Национальный научный центр  
«Харьковский физико-технический институт»  
ул. Академическая, 1; г. Харьков, 61108, Украина*

**А. В. Тур**

*Institut de Recherche en Astrophysique et Planetologie C.N.R.S.-U.P.S., 9, avenue  
Colonel-Roche 31028 Toulouse Cedex 4, France.*

**В. В. Яновский**

*Институт монокристаллов, Национальная Академия Наук Украины, п  
р. Ленина 60, 61001 Харьков, Украина  
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина, пл. Свободы 4,  
61022, г. Харьков, Украина*

**О**бзор посвящен предельно достижимым значениям физических величин в нашей Вселенной. По сути, это означает переход в область физики, которая может быть названа физической планковских масштабов. В момент появления планковских масштабов эти естественные масштабы природы выглядели удручающе нелепыми. Трудно было представить физику, стоящую за этими масштабами. Как обнаружилось довольно скоро такая физика еще не была создана. Сразу после появления планковских масштабов была создана специальная теория относительности, квантовая физика и чуть позже общая теория относительности. Однако для того, чтобы даже правильно сформулировать вопросы, потребовалось значительное время на развитие этих наук. Развитие квантовой теории полей и общей теории относительности привело к пониманию необходимости их синтеза. Прежде всего, был осознан грубый механизм возникновения нестационарной Вселенной. Были открыты новые объекты Вселенной – черные дыры, нейтронные звезды. Построена стандартная теория элементарных частиц. Успех сле-

довал за успехом, создавая огромное поле идей и экспериментов. На фоне огромных достижений камнем преткновения послужила честолюбивая идея создания квантовой гравитации. Эта идея не только столкнулась с большими и пока непреодолимыми проблемами, но даже сама возможность существования такой теории не является очевидной. Это послужило причиной, по которой физики испытывают непреодолимое желание заглянуть за «занавес» и понять явления, сопутствующие квантовой гравитации еще до создания такой теории. С этим связан ряд попыток усовершенствовать, изменить или радикально перестроить даже такие признанные теории, как ОТО, специальная теория относительности, квантовая механика и другие. В последнее время элементы таких изменений широко обсуждаются и некоторые из них затронуты в этом обзоре.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В центре нашего внимания будет физика планковского масштаба. Охарактеризуем более подробно объект исследования.

Три фундаментальные мировые константы постоянная Планка  $\hbar$ , скорость света  $c$  и гравитационная постоянная  $G$  позволяют построить так называемые планковские единицы массы, длины и времени

$$\begin{aligned} m_{Pl} &= \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} \approx 2,18 \times 10^{-8} \text{ kg}, \\ l_{Pl} &= \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} \approx 1,6 \times 10^{-35} \text{ m}, \\ t_{Pl} &= \sqrt{\frac{\hbar G}{c^5}} \approx 5,39 \times 10^{-44} \text{ sec}, \end{aligned} \tag{1.1}$$

В своём докладе в Прусской Академии наук в Берлине (1899 г.), представляя новые универсальные постоянные, Планк отметил, что «эти единицы сохраняют свое естественное значение до тех пор, пока справедливы законы тяготения и оба начала термодинамики (помимо  $\hbar$ ,  $c$ ,  $G$  Планк включил в число универсальных констант и постоянную Больцмана), и пока остается неизменной скорость распространения света в вакууме. Поэтому измеренные самыми разными интеллектами посредством самых разных методов, они будут иметь всегда одно и то же значение» [1].

Введение планковской системы единиц ещё до создания квантовой механики, специальной и общей теории относительности стало значительным событием в физике. Система «естественных единиц измерения» (так назвал систему М. Планк) поднимала вопросы, значительно опережающие состояние физики в момент её создания. Для ответа на эти вопросы требовался значительный прогресс в развитии физики. Спустя

более века мы только нащупываем подходы к поставленным проблемам, а окончательное понимание придет, возможно, только после создания квантовой теории гравитации. Системы единиц, базирующиеся на различных фундаментальных константах, не только отражают историю развития физики, но позволяют судить о перспективах её развития. В этом смысле значение планковских единиц как своеобразная возможность заглянуть в будущее сохраняется и сейчас.

Ясно, что планковское время настолько короткое, и длина Планка столь незначительная, а энергия Планка ( $E_{pl} = 1,22 \times 10^{19} \text{ GeV}$ ) настолько высока, что, на первый взгляд, кажется крайне сомнительным даже в отдалённом будущем обнаружить физику такого масштаба. «Таким числам нет места в физике. Они смехотворно противоестественны» – утверждал П. Бриджмен (нобелевский лауреат 1946 года). В подтверждение этой точки зрения заметим, что характерный размер человека ( $1 \text{ m}$ ) на много порядков ближе к размеру Вселенной ( $10^{26} \text{ m}$ ), чем к планковской длине. Поэтому ещё совсем недавно требовалась определенная степень безрассудства, чтобы даже упомянуть о возможности экспериментального изучения физики масштаба Планка (ФМП).

Однако вопреки «общественному мнению» ФМП оказалась в центре внимания как теоретиков, так и экспериментаторов [2–12]. Причина такого внимания в том, что на планковском масштабе гравитация (самое слабое из четырёх известных взаимодействий) становится конкурентно-способной. Это обстоятельство немедленно порождает задачу синтеза квантовой механики с общей теорией относительности.

Принято считать, что конечной целью такого синтеза является создание теории, получившей название квантовой гравитации. Однако даже сама необходимость построения такой теории вызывает сомнения. Аргументы, отрицающие квантовую гравитацию, в наиболее резкой форме сформулировал Ф. Дайсон [13]: «Квантовая гравитация физически бессмысленна. Любая теория квантовой гравитации предполагает частицу «гравитон» – квант гравитации, точно так же, как фотон – квант света. Наличие фотонов легко обнаружить по электронам, выбитым с поверхности металла под действием света. Но гравитационное взаимодействие невероятно слабее электромагнитного, поэтому характерные времена таких эффектов превосходят возраст Вселенной. Если отдельные гравитоны невозможно наблюдать в эксперименте, значит, они не имеют никакой физической реальности». Давайте придадим этому утверждению количественный смысл. Время жизни атома водорода в  $3d$  по отношению к распаду в  $1s$  состояние за счет механизма гравитационного излучения –  $\tau = \Gamma^{-1} = 2 \times 10^{38} \text{ sec}$ , время жизни Вселенной  $T_{\text{Universe}} \sim 10^{17} \text{ sec}$ . Для оптических переходов среднее время жизни  $\tau \sim 10^{-7} - 10^{-8} \text{ sec}$ . Отличие гравитонов от фотонов разительно! Такая ситуация допускает следующую прозрачную трактовку. В силу соотношения неопределённости  $\Delta E \Delta t \geq \hbar / 2$  любой квантовый уровень системы обладает естественной шириной  $\Delta E \geq \hbar / 2 \Delta t$ .

Если суммарная ширина двух соседних уровней больше расстояния между ними, то мы можем рассматривать спектр как сплошной, а систему как классическую. В гравитационных квантовых системах за счёт экстремальной слабости взаимодействия даже при относительно больших временах наблюдения мы будем сталкиваться именно с такой ситуацией.

В более общей формулировке трудность объединения квантовой механики и ОТО связана с дискретностью первой и непрерывностью пространства-времени второй. Физики не первый раз сталкиваются с такой проблемой, поэтому полезно обратиться к историческому опыту [14].

Как известно, спектр энергии любой квантовой системы, совершающей финитное движение, является всегда дискретным. Это следует из фундаментальных принципов квантовой механики – дискретной природы фазового пространства или, более формально, некоммутативности квантового фазового пространства. Действительно, согласно принципу неопределенности отдельное квантовое состояние не может занимать фазовый объем  $V_1 \leq \hbar^N$ , где  $N$  – размерность конфигурационного пространства. Таким образом, движение, ограниченное областью  $V$  будет содержать  $V/V_1$  собственных состояний. Согласно существующей эргодической теории такое движение считается регулярным в отличие от хаотического движения со сплошным спектром и экспоненциальной неустойчивостью.

Этот результат можно лаконично сформулировать в духе Боровской дополнительности: классическая эволюция детерминирована, но случайна, квантовая – недетерминирована и неслучайна. Другими словами, проблема состоит в том, что дискретная природа спектра никогда не допустит хаоса в любой квантовой системе с финитным движением. Между тем принцип соответствия требует наличия хаоса в квазиклассическом пределе.

Если стать на ту точку зрения, что хаос невозможен в квантовой механике, то логично будет просто отказаться от дальнейшего изучения этого вопроса. Но это будет означать, что мы уклоняемся от вызова, брошенного нам Природой в пределе малых  $\hbar$  и больших  $t$ , что эквивалентно игнорированию других сингулярных феноменов, таких как турбулентность или фазовые переходы. Альтернативная точка зрения состоит в том, что не дожидаясь окончательного решения этой проблемы (или скорее ее корректной формулировки), мы можем изучить ее ограниченный вариант: исследование специальных свойств квантовых систем, чьи классические аналоги являются хаотическими [15].

Аналогичная тактика была применена в последнее время к проблеме объединения квантовой механики и ОТО. Вместо попыток построения теории квантовой гравитации центр тяжести исследований сместился в сторону поисков квантовых проявлений классической гравитации. Это направление часто называют феноменологией ФПМ.

Вопреки широко распространённому мнению проблема не в том, что гравитация не может быть проквантована, а в том, что существует слишком много способов квантования, и ни один из них не является

удовлетворительным. Расширяя базу феноменологии мы можем облегчить выбор адекватной квантовой модели.

Основная трудность ФПМ – экстремальные параметры объекта исследования, на много порядков отстающие от достигнутых в настоящее время рекордов. Так для протонов, ускоренных на ЛНС,  $E \sim 10^4 GeV$  и следовательно

$$\frac{E}{E_{Pl}} = \frac{10^4}{10^{19}} = 10^{-15}. \quad (1.2)$$

Линейный ускоритель, на котором могут быть достигнуты планковские энергии, должен по размеру превосходить галактику. Столь же далеки мы и в точности измерения длин от планковской длины. Интерферометры, сконструированные для регистрации гравитационных волн, обладают рекордной точностью  $\Delta \sim 10^{-16} cm$ . Поэтому

$$\frac{\Delta}{l_{Pl}} = \frac{10^{-16}}{10^{-33}} = 10^{17}. \quad (1.3)$$

Однако эти цифры не должны вызывать пессимизма. Первые шаги делаются в целом ряде направлений экспериментальных исследований:

1. Ранняя Вселенная [16];
2. Катастрофы космологических масштабов [17];
3. Квантовая оптика [18];
4. Аналоговые системы [19].

Заметим, что аналоговая гравитация – это исследовательская программа, которая исследует аналоги ОТО в других физических системах (как правило, но не исключительно в конденсированных телах) с целью получения нового понимания квантовых проявлений классической гравитации. В последней главе мы кратко обсудим ниже первые полученные результаты и планируемые эксперименты в перечисленных выше направлениях исследований.

Легко заметить, что функциональная роль констант  $\hbar$ ,  $c$  и  $G$ , использованных для построения планковских единиц, различна. Если первые две представляют собой предельные величины (минимальный квант действия и максимальную скорость распространения взаимодействия) и лежат в основе квантовой механики ( $\hbar$ ) и СТО ( $c$ ), то ньютоновская константа  $G$  «всего лишь» фиксирует силу, действующую между единичными точечными массами на расстоянии единичной длины. Другими словами, в них ньютоновская константа  $G$  не выполняет никаких ограничительных функций. Поэтому кажется естественным сделать набор фундаментальных констант более однородным и более эффектив-

ным для последующего анализа физики на планковских масштабах, если заменить гравитационную постоянную  $G$  на некоторую новую предельную величину, связанную с ОТО. В этом случае планковские единицы будут выражаться только через предельные величины, лежащие в основе квантовой механики ( $\hbar$ ), СТО( $c$ ) и ОТО (эту величину мы должны определить).

Предельные величины играют центральную роль как в феноменологии, так и в аксиоматических (микроскопических) теориях. Утверждение о существовании предельных величин может быть использовано в качестве основ физической аксиоматики. Хорошо известно, что квантовая механика может быть построена исходя из существования минимального кванта действия  $\hbar$ , специальная теория относительности – максимальной скорости  $c$ . Относительно недавно стало понятно, что аналогичный подход может быть реализован и в ОТО, которая может быть построена, постулируя существование максимальной силы [20–33].

Пределы действительны для всех физических систем, независимо от их природы и для любого наблюдателя. Не столь важно значение предельной величины, важен сам факт её существования. Уточним, что понятие предельного значения отличается от понятия рекорда: рекорд может быть улучшен, предельное значение нет. Будем различать два класса предельных величин: «фундаментальные» и все остальные. Под фундаментальными будем понимать предельные величины, значения которых не могут быть выведены из существующих теорий, а их существование может быть положено в основу аксиоматики будущих теорий. Статус фундаментальной предельной величины может быть достигнут в процессе физической эволюции. Классический пример – фундаментальная константа  $c$ : формальный параметр (Максвелл), скорость электромагнитных волн (Герц), предельная скорость передачи взаимодействия (Эйнштейн). Цель настоящей работы продемонстрировать эффективность предельных величин как инструмента описания ФПМ. Более того, в силу своей универсальности предельные величины позволяют установить связи между, на первый взгляд, далёкими друг от друга областями физики.

## 2. КВАНТОВЫЕ ПРОЯВЛЕНИЯ КЛАССИЧЕСКОЙ ГРАВИТАЦИИ

В этом разделе мы рассмотрим простейшие следствия включения в квантовую реальность гравитационных эффектов. Не имея к настоящему времени натуральных экспериментов, мы будем опираться на аргументы, полученные в результате анализа мысленных экспериментов (Gedankenexperiment). Важнейшим следствием учёта гравитационных

эффектов является неизбежность перехода от классической концепции континуума к дискретному пространству-времени. Ниже будут подробно проанализированы физические механизмы возникновения минимальной длины.

## 2.1. О б о б щ ё н н ы й п р и н ц и п н е о п р е д е л ё н н о с т и

Основой феноменологии ФПМ является так называемый обобщённый принцип неопределённости (GUP). Необходимость обобщения исходного принципа неопределённости Гейзенберга (HUP) [23] связана со следующей очевидной причиной. Принцип неопределённости Гейзенберга несовместим с ОТО. Дело в том, что любой процесс измерения сопровождается передачей энергии. Эта энергия искажает фоновое пространство-время, вводя дополнительную неопределённость в положение измеряемого объекта. Обобщённый принцип неопределённости устраняет эту несогласованность.

Первоначально обобщённый принцип неопределённости был получен в теории струн и ряде обобщений этой теории [24–27]. Эти работы породили следующий вопрос: может ли этот принцип в силу своей простоты и общности быть получен вне рамок конкретной квантовой теории? Утвердительный ответ на этот вопрос был найден очень скоро. Рассмотрим простейший вывод обобщённого принципа неопределённости [28, 29]. Более строгие выводы не изменяют окончательный результат.

При рассеянии фотона с длиной волны  $\lambda$  мы можем локализовать его положение с точностью

$$\Delta x_e \geq \lambda. \quad (2.1)$$

Так как  $\lambda = \hbar / p$ , где  $p$  – импульс фотона, а  $\Delta p \approx p$ , то

$$\Delta x_e \geq \frac{\hbar}{\Delta p}. \quad (2.2)$$

Гравитационное взаимодействие между фотоном и электроном в этом выражении не учитывалось.

Оценим теперь гравитационное взаимодействие фотона с электроном в грубом ньютоновском приближении, предполагая, что фотон ведет себя как классическая частица с эффективной массой  $E / c^2$ . Предположим, что взаимодействие происходит в области характерного размера  $L$ . Ускорение электрона, вызванное гравитационным взаимодействием с фотоном

$$|\ddot{x}| = \frac{GE / c^2}{x^2}, \quad (2.3)$$

где  $x$  – расстояние между электроном и фотоном. За характерное время взаимодействия  $L / c$  электрон сместится на расстояние

$$\Delta x_g \approx \frac{GE}{c^2 x^2} (L / c)^2. \quad (2.4)$$

Для  $x \approx L$  и  $E = pc$  найдём

$$\Delta x_g \approx \frac{Gp}{c^3}. \quad (2.5)$$

Учитывая, что неопределённость электронного импульса должна быть порядка импульса фотона, и вводя планковскую длину  $l_{Pl} = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}}$ , получим

$$\Delta x_g \approx l_{Pl}^2 \frac{\Delta p}{\hbar}. \quad (2.6)$$

Суммируя вклады электромагнитного гравитационного взаимодействия, окончательно найдём

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{\Delta p} + l_{Pl}^2 \frac{\Delta p}{\hbar}. \quad (2.7)$$

Принцип неопределённости Гейзенберга можно рассматривать как предельный случай обобщённого принципа неопределённости

$$(GUP, \Delta p \rightarrow 0) \rightarrow (HUP). \quad (2.8)$$

Воспроизведём результат (2.6), используя полевые уравнения

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} R = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu}. \quad (2.9)$$

Левая часть (2.9) имеет порядок  $\frac{\delta g}{L^2}$ , а правая –  $\frac{8\pi GE}{c^4 L^3} \approx \frac{Gp}{c^3 L^3}$  – здесь  $L$  – характерный линейный размер задачи. Следовательно

$$\delta g \approx \frac{Gp}{c^3 L}. \quad (2.10)$$

Неопределённость в измерении расстояний приводит к флуктуациям метрики

$$\delta g \approx \frac{\Delta x}{L}. \quad (2.11)$$

Сравнивая (2.10) и (2.11), мы вернёмся к результату (2.6).

Модификация соотношения неопределенности Гейзенберга, учитывающая эффекты гравитации, может быть представлена в форме

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} [1 + \beta_0 (\Delta p / m_p c)^2]. \quad (2.12)$$

Здесь  $\beta_0$  – свободный параметр. Напомним, что принцип неопределенности Гейзенберга – это следствие некоммутативности соответствующих операторов или наблюдаемых величин.

Поэтому мы можем считать, что эта модификация является следствием деформации коммутационных соотношений

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta p &\geq \frac{1}{2} \langle [x, p] \rangle, \\ [x, p] &= i\hbar \left( 1 + \beta_0 \left( \frac{\Delta p}{m_p c} \right)^2 \right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Достигнутая в настоящее время точность измерения даёт  $\beta_0 < 10^{33}$ . Это исключает существование промежуточного масштаба основной длины вплоть до  $10^{-19} m$ . Модификация на масштабе Планка соответствует  $\beta_0 \approx 1$ .

Драматическим следствием учёта гравитации в процессе измерения является появление такого фундаментального понятия как минимальная длина. Физика его появления крайне проста. При малых импульсах фотона (большие длины волн) локализация измеряемого объекта будет плохой. Для больших импульсов фотона его гравитационное взаимодействие с измеряемым объектом вновь скажется негативно на процессе измерения. Между этими двумя крайностями можно выбрать импульс фотона, оптимизирующий процесс измерения. На рис. 1 представлены границы областей, допустимых в процессе измерения положе-

ния частицы с учётом обобщённого принципа неопределённости и без учёта гравитации – принцип неопределённости Гейзенберга

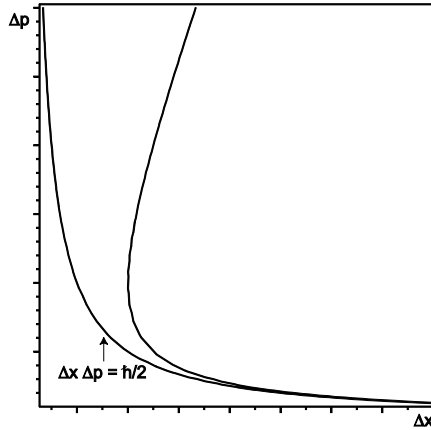


Рис. 1. Границы областей, допустимых в процессе измерения положения частицы с учётом обобщённого принципа неопределённости и без учёта гравитации – принцип неопределённости Гейзенберга

## 2.2. Минимальная длина

Вероятно, наиболее важным следствием перехода от принципа неопределённости Гейзенберга к обобщённому принципу неопределённости является возникновение минимальной пространственной длины. Действительно, минимизируя соотношение (2.7), найдём

$$\Delta x_{\min} = 2\sqrt{\frac{G\hbar}{c^3}} = 2l_{Pl}. \quad (2.14)$$

Минимум реализуется для

$$\Delta p_{\max} = \sqrt{\frac{\hbar c^3}{G}} = m_{Pl}c. \quad (2.15)$$

Каков физический механизм генерации минимальной длины? Как он связан с гравитацией?

Появление в теории сингулярностей принято считать первым сигналом того, что теория вышла за пределы своей применимости и нуждается в модернизации. Последняя состоит в учёте выпавших из рассмотрения эффектов, что позволит сделать теорию свободной от расходимостей. Существует и альтернативная точка зрения, сформулированная Р. Пенроузом [30] в форме «принципа космической цензуры»: «Природа

питает отвращение к голой сингулярности». Сингулярности пространства-времени появляются в таких местах, которые подобно внутренним областям черных дыр скрыты от наблюдателей. Естественный вопрос: можно ли обобщить принцип космической цензуры до уровня «принципа физической цензуры», сделав его универсальным физическим принципом? Существование минимальной длины позволяет дать утвердительный ответ на этот вопрос, а механизмом генерации минимальной длины служит образование горизонта событий. В простейшем случае решения Шварцшильда, горизонт событий – гипотетическая сфера вокруг точки гравитационной сингулярности, разделяющая пространство на две причинно не связанные области. Гравитационный радиус  $r_g$  – радиус этой сферы для тела массы  $m$

$$r_g = \frac{2mG}{c^2}. \quad (2.16)$$

Рассмотрим теперь как этот механизм работает на планковском масштабе. Предварительно покажем, что для частицы с массой порядка планковской гравитационный радиус совпадает с комптоновской длиной волны. В самом деле

$$\lambda_c = r_g \rightarrow \frac{\hbar}{mc} = \frac{2mG}{c^2}, \quad (2.17)$$

$$m = \sqrt{\frac{\hbar c}{2G}}, \quad m_{Pl} = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}}.$$

Как мы видели выше (см. соотношения (2.9)–(2.11))

$$\frac{\delta g}{L^2} \approx \frac{GE}{c^4 L^3}. \quad (2.18)$$

Локализация энергии не должна противоречить квантовой механике

$$\frac{L}{c} \approx \frac{\hbar}{E}. \quad (2.19)$$

Подставляя  $L \approx \frac{\hbar c}{E}$  в соотношение (2.18), найдём

$$\delta g \approx \frac{GE^2}{c^5 \hbar}. \quad (2.20)$$

Гравитационное возмущение существенно, если  $\delta g \approx 1$  и, следовательно,  $E = m_p c^2$ . Но как мы видели выше (2.17) именно такое возмущение пространства-времени приведёт к образованию горизонта событий.

Дискретное пространство-время очень старая идея, никак не связанная с гравитацией. Сейчас становится понятным, что М. Бронштейн был первым, кто нашёл связь между этими понятиями. Уже в 1936 году он утверждал [31], что гравитация отличается от других фундаментальных взаимодействий, так как не допускает сколь угодно большой концентрации энергии в конечной области пространства. Бронштейн первым обратил внимание на то, что так как гравитационный радиус должен быть меньше линейных размеров тела, то возможности измерений в экстремально малых областях ограничены. Поэтому без изменения квантовомеханических коммутационных соотношений вряд ли возможно объединить квантовую теорию и гравитацию. Таким образом, более 80 лет назад Бронштейн сформулировал практически современную концепцию роли гравитации в процессе прецизионных измерений.

### 2.3. Принцип максимальной силы

Роль горизонта событий как границы наблюдаемой физической реальности становится более понятной, если обратиться к так называемому принципу максимальной силы. Принцип максимальной силы был впервые сформулирован G. Gibbons [33]: *I suggest that classical General Relativity in four spacetime dimensions incorporates a Principal of Maximal Tension and give arguments to show that the value of the maximal tension is*

$$F_{\max} = \frac{c^4}{4G} \approx 3,25 \times 10^{43} \text{ N}. \quad (2.21)$$

Предел не зависит от природы сил и выполняется для гравитационных, электромагнитных, ядерных и любых других сил. Абсолютно эквивалентно этому утверждение о существовании максимальной мощности

$$P_{\max} = \frac{c^5}{4G} \approx 9,07 \times 10^{51} \text{ W}. \quad (2.22)$$

Обе эти величины являются компонентами 4-вектора  $F^\lambda = \frac{dp^\lambda}{dt}$ .

Предельная сила и предельная мощность являются инвариантами: это следует из инвариантности величин  $c$  и  $G$ . Зависимость от времени, вообще говоря, не исключается. Силовой предел имеет место как для каждой компоненты 3-силы, так и для её абсолютной величины.

Предельная мощность допускает тривиальную физическую интерпретацию. Рассмотрим мощность, выделяемую при «аннигиляции» черной дыры массы  $m$ . Минимальное время реализации такого процесса есть время прохождения светом её «гравитационного диаметра»

$$t = 2r_g / c = \frac{4mG}{c^3},$$

$$P = \frac{mc^2}{4mG / c^3} = \frac{c^5}{4G}, \quad (2.23)$$

что в точности совпадает с введенной выше предельной мощностью.

Предельная мощность – долгожитель ОТО. Гравитационная светимость (полная мощность, теряемая на гравитационное излучение)

$$L_{GR} = \frac{G}{5c^5} \langle \ddot{Q}_{ij} \ddot{Q}^{ij} \rangle \rightarrow L_{GR}^{\max} = \frac{c^5}{G}. \quad (2.24)$$

Здесь  $Q$  – массовый квадрупольный момент системы. Верхний предел светимости в природе, так называемая естественная светимость, введенная Эйнштейном, с точностью до численного множителя совпадает с предельной мощностью.

Остановимся теперь на принципиально важном вопросе – механизме возникновения максимальной силы [33]. Рассмотрим два тела с массами  $m_1$  и  $m_2$ , находящиеся на расстоянии  $R$ . Согласно ньютоновской теории силы, действующие между ними

$$F = G \frac{m_1 m_2}{R^2} = \left( \frac{Gm_1}{c^2 R} \right) \left( \frac{Gm_2}{c^2 R} \right) \frac{c^4}{G}. \quad (2.25)$$

Так как  $m_1 m_2 \leq \frac{1}{4} (m_1 + m_2)^2$ , то

$$F \leq \left[ \frac{(m_1 + m_2)G}{c^2 R} \right]^2 \frac{c^4}{4G}. \quad (2.26)$$

Сближение тел ограничено условием  $R > r_g$   $\left( r_g = \frac{2mG}{c^2} \right)$ , предотвращающим образование черной дыры с массой  $m_1 + m_2$ . Следовательно

$$F \leq \frac{c^4}{4G}. \quad (2.27)$$

Поверхности, на которых реализуется максимальная сила (максимальный поток импульса) или максимальная мощность (максимальный

поток энергии) представляют собой горизонты событий. При любой попытке превзойти силовой предел возникает горизонт, который препятствует дальнейшему увеличению силы.

Заметим вначале, что максимальная сила не может быть реализована в объёме. Если бы это было возможным, то можно было преобразованием Лоренца перейти к большему значению силы. Таким образом, максимальная сила может быть реализована только на поверхности, но не в объёме. Кроме того, эти поверхности должны быть недостижимы в рамках ОТО. Такие поверхности представляют собой горизонты. Максимальная сила и максимальная мощность достигаются только на горизонтах.

Связь между понятиями горизонта и предельной силы играет центральную роль при получении уравнений ОТО. Также как в специальной теории относительности преобразования Лоренца являются следствием существования предельной скорости, наличие предельной силы приводит к полевым уравнениям ОТО [20, 21].

В виду принципиальной важности этого результата приведем ещё один пример, проясняющий механизм связи предельной силы и минимальной длины. В ньютоновской механике  $F = dp / dt$ , и следовательно

$$F_{max} = \frac{(\Delta p)_{max}}{(\Delta t)_{min}} \approx \frac{mc}{t_{Pl}} = \frac{mc^2}{l_{Pl}}. \quad (2.28)$$

На первый взгляд, кажется, что неограниченно увеличивая массу, мы можем получить произвольно большую силу. Однако это не так, и ограничение связано с возникновением горизонта при увеличении массы на фиксированном масштабе длины ( $l_{Pl}$ ). В самом деле, опуская численные множители  $O(1)$ , найдем массу, для которой гравитационный радиус равен планковской длине

$$m \approx \frac{l_{Pl} c^2}{G} = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} \frac{c^2}{G} = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} = m_{Pl}. \quad (2.29)$$

Следовательно, максимальная масса, которую мы можем использовать в (2.28), предотвращая возникновение горизонта, есть планковская масса, и поэтому

$$F_{max} \approx \frac{m_{Pl} c^2}{l_{Pl}} = \frac{c^4}{G}. \quad (2.30)$$

Очевидно, что результат (2.30) может быть получен из размерных соображений

$$F_{Pl} = m_{Pl} \frac{l_{Pl}}{t_{Pl}^2} = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}} \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} \frac{c^5}{\hbar G} = \frac{c^4}{G}. \quad (2.31)$$

Заметим, что все наши утверждения относятся только к  $D = 3 + 1 = 4$ .

Рассмотрим ещё один важный мыслимый эксперимент, позволяющий понять роль квантовых эффектов при образовании горизонта событий [28]. Этот эксперимент позволяет обнаружить новый механизм нарушения меры локализации частицы по сравнению с предсказываемым НУР. Эксперимент заключается в максимально возможном сжатии объёма, содержащего массу  $m$ . Сжатие предполагается изотропным. Под максимально возможным мы понимаем сжатие до сферы Шварцшильда с радиусом  $r_g = 2mG / c^2$ . При дальнейшем сжатии образуется чёрная дыра. Формально гравитационный радиус не имеет нижнего предела при  $m \rightarrow 0$ .

Из принципа неопределенности Гейзенберга следует, что неопределенность в импульсе массы  $m$  в объеме с характерным размером  $l$ , по крайней мере, порядка  $\Delta p \approx \hbar / l$ . Поскольку энергия в объеме задается соотношением  $E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$ , неопределенность в энергии  $\Delta E \approx c \Delta p \approx \hbar c / l$ . При сжатии объёма мы можем достичь столь малых значений  $l$ , что эта неопределенность энергии возрастает до величины  $\approx 2mc^2$ , после чего станет возможным рождение пар частица – античастица, как показано на рис. 2. При этом локализация разрушается, и дальнейшее сокращение объёма не имеет смысла.

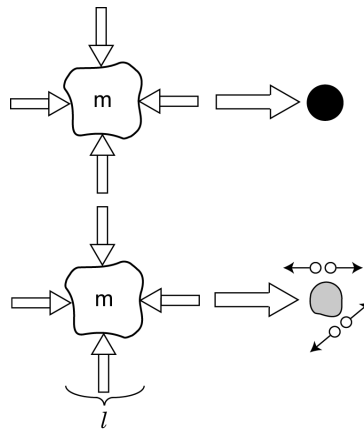


Рис. 2. Сокращение объёма, содержащего массу  $m$ , ограничено гравитационным коллапсом в чёрную дыру (верхняя часть рисунка) и созданием пар (нижняя часть рисунка)

Этот предельный объём имеет энергию и размер

$$mc^2 \approx \Delta E, \quad l \approx \hbar / mc.$$

Здесь величина  $\hbar / mc$  – комптоновская длина волны массы  $m$ . Она представляет предел локализации частицы в квантовой механике. Следовательно, мы имеем два характерных размера, описывающих процесс сжатия объёма, содержащего массу. Как мы видели выше для  $m = m_{Pl}$  эти величины совпадают и  $l = l_{Pl}$ .

Таким образом, мы ещё раз убедились, что сочетание гравитации и квантовых эффектов создает непреодолимое препятствие для дальнейшего сжатия на линейных размерах тела  $l \approx l_{Pl} \approx l_{\min}$ .

## 2.4. Модифицированные планковские единицы

Как отмечалось ранее, введение планковской системы единиц ещё до создания квантовой механики, специальной и общей теории относительности было удивительным предвосхищением в физике. Даже по прошествии более века остается множество вопросов, ответы на которые остаются не найденными. Глубина этих вопросов возможно станет понятной уже после создания квантовой теории гравитации. Систему планковских единиц сейчас можно рассматривать как своеобразную лабораторию, позволяющую заглянуть в будущее. Именно с этой точки зрения она представляет огромный интерес.

Следует отметить, что выбор в качестве исходных констант, необходимых для построения фундаментальных масштабов –  $\hbar, c, G$  не является единственным. В качестве исходного материала могут использоваться разнообразные комбинации этих констант. Можно привести много примеров, когда использование именно той или иной комбинации фундаментальных констант существенно упрощает теорию. Классический пример – постоянная тонкой структуры  $\alpha = e^2 / \hbar c$ . Трудно представить квантовую электродинамику без использования этой комбинации.

Обсуждению разнообразных вопросов, связанных с планковскими системами единиц посвящено огромное число публикаций (см. например [34]), затрагивающих как физику элементарных частиц, так и космологию. Среди таких работ следует отметить попытки построить альтернативные наборы фундаментальных масштабов, отличающиеся как выбором констант, так и их числом [35, 36].

Кажется естественным модифицировать систему планковских таким образом, чтобы в неё входили только предельные величины [37, 38]. Для этого из исходного набора  $(\hbar, c, G)$  следует исключить гравитацион-

ную постоянную  $G$  (она не является предельной величиной), выразив её через предельную мощность  $\eta \equiv P_{\max} = \frac{c^5}{G}$  или  $l_{\min} = l_{Pl}$  (мы опускаем множители порядка единицы). В первом случае, выполнив переход  $(\hbar, c, G) \rightarrow (\hbar, c, \eta)$ , получим модифицированную систему планковских единиц

$$\begin{aligned} m_{Pl} &= \sqrt{\frac{\hbar \eta}{c^4}}, \\ l_{Pl} &= \sqrt{\frac{\hbar c^2}{\eta}}, \\ t_{Pl} &= \sqrt{\hbar / \eta}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

а во втором варианте перехода  $(\hbar, c, G) \rightarrow (\hbar, c, l_{\min} = l_{Pl})$

$$\begin{aligned} m_{Pl} &= \frac{\hbar}{l_{Pl} c}, \\ l_{Pl} &, \\ t_{Pl} &= \frac{l_{Pl}}{c}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Разумеется, предельные величины  $\eta$  и  $l_{Pl}$  связаны соотношением

$$\eta = \frac{c^5}{G} = \frac{\hbar}{t_{Pl}^2} = \frac{\hbar c^2}{l_{Pl}^2}. \quad (2.34)$$

Еще раз подчеркнем, что необходимым условием существования горизонта (событий) является конечность реализуемой мощности и конечное значение скорости света. При этом, как мы уже отмечали, не столь важно значение предельной величины, как сам факт её существования. Легко видеть, что

$$\begin{aligned} \lim_{c \rightarrow \infty} r_g &= \lim_{c \rightarrow \infty} \frac{2mG}{c^2} = 0, \\ \lim_{P_{\max} \rightarrow \infty} r_g &= \lim_{c \rightarrow \infty} \frac{2mc^3}{P_{\max}} = 0. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Другими словами, при  $\eta \rightarrow \infty$  или  $c \rightarrow \infty$  понятие гравитационного радиуса и, следовательно, горизонта теряет смысл.

Выбор в качестве новой фундаментальной постоянной максимальной мощности или минимальной длины приводит к планковским масштабам, сохраняющим прежние численные значения. Однако этот переход открывает интересные возможности как для интерпретации оценок, сделанных с помощью модифицированных планковских единиц, так и для получения новых результатов.

## 2.5. Пространственно-временная пена

Пространство-время в ОТО воспринимается как безусловно классический объект. Попытка изучить его свойства на малых масштабах неизбежно приводит к необходимости привлечения квантовой теории. Качественно возникающее изменение можно проиллюстрировать на переходах квантовой частицы. Вычисление в фейнмановском подходе перехода такой частицы из одной точки в другую требует учета не одной классической траектории перехода, а суммирования вкладов всех возможных траекторий. В случае пространства-времени аналогично нужно учесть вклады от всех возможных метрик. По-видимому, первым это осознал Дж. А. Уилер [39] и после этого образ флуктуирующего, пеннистого пространства-времени вошел в качестве фундаментального элемента физической картины. Согласно Уилеру на планковских масштабах флуктуируют кривизна, размерность пространства и даже его топология.

Наличие таких квантовых флуктуаций приводит к ряду глубоких следствий, некоторые из которых обсудим в этом разделе. Прежде всего, с ними связаны неопределенности при различного типа измерениях и, в частности, измерении пространственных и временных расстояний.

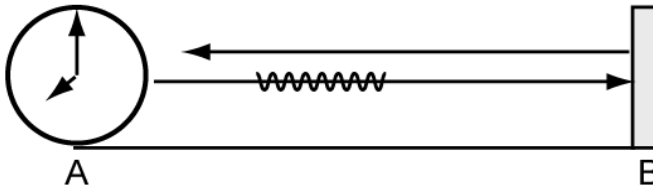


Рис. 3. Схема мысленного эксперимента Вигнера

Используя простые соображения, Вигнер [40] рассмотрел задачу о величине неопределенности в измерении расстояния между двумя точками. Для этого он предположил мысленный эксперимент (см. рис. 3). Пусть в одной точке помещаются часы, а в другой зеркало. В качестве часов можно использовать два зеркала на расстоянии  $d$ , между которыми движется фотон. Масса каждого зеркала  $m/2$ . Посылая

фотон к удаленной точке и наблюдая его возвращение после отражения, по времени возврата можно определить расстояние между точками. Пусть существует неопределенность  $\delta l$  в положении часов, связанная с присутствием квантовых флуктуаций. Тогда неточность в вычисленном расстоянии состоит из двух вкладов

$$\Delta l = \delta l + \frac{\delta p}{m} \cdot \frac{l}{c}.$$

Здесь  $\Delta l$  – полная неопределенность в расстоянии,  $\delta p$  – изменение импульса часов при приеме сигнала,  $l$  – расстояние между точками,  $m$  – масса часов. Оценку изменения импульса часов легко провести, учитывая неопределенность в измерении длины волны

$$\delta p = \frac{\hbar}{\delta l}.$$

После подстановки получим

$$\Delta l = \delta l + \frac{\hbar l}{\delta l \cdot mc}.$$

Остается только вычислить значение  $\delta l$ , при котором  $\Delta l$  минимально. Тогда

$$\delta l_{\min} = \sqrt{\frac{\hbar l}{mc}}.$$

Откуда следует неравенство

$$\delta l^2 \geq \frac{\hbar l}{mc}. \quad (2.36)$$

Здесь мы используем для удобства вместо  $\Delta l$  обозначение  $\delta l$ , пренебрегая числовым множителем. На первый взгляд, кажется, что неопределенность в измерении расстояния можно уменьшить, увеличивая массу часов. Так, при  $m \rightarrow \infty$  согласно соотношению (2.36) неточность измерения расстояния из-за квантовых флуктуаций  $\delta l \rightarrow 0$ .

Однако часы не являются абстрактным объектом, а подчиняются вполне определенным физическим законам. К таким законам относятся законы квантовой физики и ОТО.

Это автоматически означает, что часы должны удовлетворять и дополнительным ограничениям. Так, размер часов  $d$  должен превышать их гравитационный радиус

$$\delta l \geq d > \frac{Gm}{c^2}, \quad (2.37)$$

в противном случае часы превратятся в черную дыру и их показания станут нам недоступны. Кроме этого, по условию мысленного эксперимента  $\delta l \geq d$ , которое соответствует условию на «тиканье» часов. Ясно, что они должны тикать чаще, чем время прохождения фотоном  $\delta l$ , т. е.  $d/c \leq \delta l/c$ . Тогда, используя неравенства (2.36) и (2.37), получим [41]

$$\delta l \geq (ll_{Pl}^2)^{1/3} = l_{Pl} \left( \frac{l}{l_{Pl}} \right)^{1/3}, \quad l_{Pl} \equiv \left( \frac{G\hbar}{c^3} \right)^{1/2}. \quad (2.38)$$

Полученное неравенство определяет фундаментальное ограничение на точность измерения расстояния независимо от используемого метода измерений. Меняя приборы и методы измерения, нельзя выйти за это ограничение.

Точно так же, как минимальная неопределенность при измерении длины связана с длиной измеряемого пространственного интервала, можно связать минимальную неопределенность при измерении времени с измеряемым временным интервалом. Разумеется, и в этом случае речь идет не о точности конкретной конструкции часов, а об универсальных ограничениях на точность измерения времени. Такие ограничения базируются на фундаментальных физических законах.

Для установления неопределенности времени снова обратимся к мысленному эксперименту. Соотношения (2.36) и (2.37) можно записать в терминах неопределенности  $\delta t = \delta l/c$  при измерении времени  $t = l/c$

$$\delta t^2 \geq \frac{\hbar t}{mc^2}, \quad \delta t \geq \frac{Gm}{c^3}. \quad (2.39)$$

Объединяя эти неравенства, получим

$$\delta t \geq (tt_{Pl}^2)^{1/3}. \quad (2.40)$$

Соотношение (2.40) устанавливает минимальную неопределенность при измерении произвольного временного интервала  $t$ . Для того, чтобы представить масштабы величин такой неопределенности, можно

попытаться измерить возраст Вселенной. Тогда временной интервал  $t$  порядка времени жизни Вселенной и  $\delta t \sim 10^{-23}$  секунды. Это очень малая величина. Следует отметить, что абсолютная величина неопределенности растёт  $\delta t \propto t^{1/3}$ , в то время как относительная  $\delta t / t \propto t^{-2/3}$  убывает. Неравенству (2.40) можно придать и другой смысл. Для этого разрешим его относительно измеряемого временного интервала  $t$

$$t \leq \delta t \left( \frac{\delta t}{t_{Pl}} \right)^2. \quad (2.41)$$

Это неравенство можно понять как ограничение на временной интервал  $t$ , который может быть измерен часами с заданной точностью  $\delta t$ . Однако по смыслу этот интервал соответствует времени правильного функционирования часов или, другими словами, времени их «жизни» [4]. Поэтому мы приходим к удивительному выводу, что чем точнее часы, тем меньшее время они функционируют с заданной точностью. На что мы можем рассчитывать, покупая часы, скажем, фемтосекундной точности? Используя  $\delta t = 10^{-15}$  секунды из неравенства (2.41), найдём

$$t \leq 10^{34} \text{ y}. \quad (2.42)$$

Таким образом, если бы нам удалось их купить в момент рождения вселенной (и как-то сохранить их), то они продолжали бы функционировать не только сейчас ( $10^{10}$  y), но даже дожили бы до эпохи распада. Эпоха распада – это период  $10^{15} - 10^{39}$  y, на котором обычные звезды исчезают. Вся вселенная на этом этапе эволюции наполнена белыми карликами, нейтронными звездами и черными дырами. Неравенство (2.41) приводит к еще одному интересному и важному следствию. Давайте в качестве часов используем черную дыру. Тогда в качестве точности  $\delta t$  работы такого «устройства» естественно выбрать  $\delta t = r_g / c$ . Теперь, используя неравенство (2.40), определим время жизни такого «будильника» [42]

$$t \leq \frac{m^3 G^2}{\hbar c^4}. \quad (2.43)$$

Полученное время жизни черной дыры таким необычным способом совпадает со временем испарения черной дыры, которое вычислил Хокинг. Отличие только в численном множителе. Поэтому используя ограничения на измерение времени, можно получить замечательный результат Хокинга об испарении черных дыр.

Неравенство (2.40) важно не только для покупки часов, но и оценки возможностей таких важных инструментов, как компьютеры. К их обсуждению вернемся чуть позже.

Разумеется, неопределенность в измерении длин и времен автоматически приводит к неопределенностям метрического тензора, который и определяет локально соответствующие величины. Поэтому легко получить

$$\delta g_{\mu\nu} = \left( \left( \frac{l_{Pl}}{l} \right)^{2/3}, \left( \frac{t_{Pl}}{t} \right)^{2/3} \right). \quad (2.44)$$

Часы, фигурирующие в предыдущих рассуждениях, тесно связаны со специальной теорией относительности и использовались в ней для проведения мысленных экспериментов. Интересно выяснить, какие особенности в измерении пространственно-временных интервалов возникнут с использованием элементов квантовой физики. Для этого в мысленном эксперименте используем другой тип часов.

Рассмотренный формализм позволяет, в частности, ответить на вопрос, почему нельзя построить идеальные квантовые часы? [43, 44]

В качестве конкретной реализации часов рассмотрим квантовые часы, основанные на наблюдении радиоактивного распада, который описывается уравнением

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda N, \quad (2.45)$$

где  $N(t)$  – текущее число радиоактивных частиц в образце. Среднее число распавшихся частиц (ядер) за время  $\Delta t = \lambda^{-1}$  есть  $\Delta N = \lambda N \Delta t$ , что позволяет измерять временные интервалы путем подсчета числа распавшихся частиц

$$\Delta t = \frac{\Delta N}{\lambda N}. \quad (2.46)$$

Относительная ошибка такого способа измерения времени  $\varepsilon = (\lambda N \Delta t)^{-1/2} = 1 / \sqrt{\Delta N} \leq 1$ . Казалось бы, увеличивая число распадов  $N$ , можно с помощью такого процесса неограниченно улучшать точность измерения временных интервалов. Увеличение числа распадов неизбежно связано с увеличением массы (размеров) часов. Однако такой процесс ограничен условием: увеличение массы не должно привести к трансформации часов в чёрную дыру (т. е. к образованию горизонта). Проанализируем, к каким количественным ограничениям приведет это условие.

Используя принцип неопределенности  $\Delta E \Delta t \geq \hbar / 2$ , мы можем трансформировать соотношение (2.46) в неравенство

$$\Delta t \geq \frac{\hbar}{2\varepsilon^2 c^2} \frac{1}{M}, \quad (2.47)$$

где  $M = Nm_p$  – масса часов ( $m_p$  – масса одной частицы). Если радиус часов  $R$  (будем предполагать, что они имеют сферическую форму) станет меньше гравитационного радиуса  $r_g$ , мы утратим возможность использовать часы для измерения времени. Условие  $R > r_g$  трансформируется в условие

$$\frac{1}{M} > \frac{2G}{c^2 R}. \quad (2.48)$$

Подставляя соотношение (2.48) в (2.47), получим

$$\Delta t R > \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{G}{c^4} \hbar. \quad (2.49)$$

Понимая под  $R$  неопределённость  $\Delta r$  в положении физического объекта, на основе которого построен процесс измерения времени и учитывая, что  $\varepsilon \leq 1$ , окончательно найдем

$$\Delta t \Delta r > \frac{G}{c^4} \hbar. \quad (2.50)$$

Полученное неравенство ограничивает возможность определения временной и пространственной координаты события с произвольной точностью.

Давайте проанализируем выражение (2.50), используя понятие предельной силы (2.21). Для этого представим (2.50) в виде

$$\Delta t \Delta r > \frac{1}{F_{\max}} \hbar. \quad (2.51)$$

При фиксированной постоянной Планка  $\hbar$ , только предельная сила  $F_{\max}$  определяет ограничение, накладываемое на размер квантовых часов. Если в теории отсутствует предельная сила, т. е.  $F_{\max} = \infty$ , то  $r_g \rightarrow 0$  и ограничение на размер квантовых часов отсутствует. Основной причиной ограничения размера квантовых часов является требование

$R > R_g$ , эквивалентное условию предотвращения образования горизонта. Поэтому появление в соотношении (2.5) силы  $F_{\max}$ , которая может быть достигнута только на горизонте, кажется абсолютно естественным.

Структура соотношения (2.50), в которой отсутствует какая-либо информация о процессе, на основе которого сконструированы часы, наводит на мысль, что это соотношение может быть получено из достаточно общих соображений. В самом деле, используем для этого соотношение неопределенности

$$\Delta x_{\min} \Delta p_{\max} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.52)$$

Учитывая, что  $F_{\max} = \frac{\Delta p_{\max}}{\Delta t_{\min}}$  мы немедленно получим, что минимальный размер часов  $\Delta x_{\min}$ , необходимых для измерения временных интервалов  $\Delta t_{\min}$ , подчиняется ограничению

$$\Delta x_{\min} \Delta t_{\min} \geq \frac{\hbar}{F_{\max}} = \frac{\hbar c}{\eta}, \quad (2.53)$$

в полном соответствии с (2.51). Собственно, это соотношение и определяет структуру пространственно-временной пены! Другими словами, ячейстая структура конфигурационного пространства-времени определяется соотношением вполне аналогично делению квазиклассического фазового пространства на ячейки при учете соотношения неопределенности Гейзенберга. Отличие состоит в величине минимального объема, который для пространства-времени определяется тремя предельными величинами. Простота соотношения (2.53) подчеркивает фундаментальный характер всех трёх предельных величин  $\hbar$ ,  $c$ ,  $\eta$ .

Разумеется, полученные ранее ограничения на пределы измеримости расстояний и времени (2.38) и (2.40) согласованны с соотношениями (2.53). Действительно, перемножая эти неопределенности, получим

$$\delta l \cdot \delta t \geq \left( \frac{l\hbar}{c\eta} \right)^{1/3} c \left( \frac{t\hbar}{\eta} \right)^{1/3} = (l \cdot t)^{1/3} \left( \frac{\hbar c}{\eta} \right)^{2/3}. \quad (2.54)$$

Предположим, что мы измеряем минимальные масштабы длины и времени т. е.  $l = \delta l$  и  $t = \delta t$ . В этом случае (2.54) воспроизводит полученное выше соотношение (2.53).

### 3. НОВАЯ ФИЗИКА, ПОРОЖДАЕМАЯ СИНТЕЗОМ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И ГРАВИТАЦИИ

Существование минимальной длины и, как следствие, дискретная структура пространства являются, с одной стороны, практически неограниченным источником новых эффектов, отсутствующих в пространственном континууме, а с другой стороны, позволяет обнаружить ранее неизвестные связи между уже изученными явлениями. Кроме того, любая теория с минимальной длиной неизбежно противоречит ряду традиционных формулировок как квантовой механики, так и ОТО. Ряд вопросов этого круга будет рассмотрен в настоящем разделе.

#### 3.1. СВЯЗЬ БОЛЬШИХ И МАЛЫХ МАСШТАБОВ (IR-UV соответствие)

До сих пор (на феноменологическом уровне) различные предельные величины рассматривались как независимые. Ситуация кардинально меняется, если мы учтем, что даже макро объекты обладают квантовыми свойствами. Классический пример такого симбиоза – излучение черных дыр. Эта связь облегчает решение некоторых фундаментальных проблем, в частности, проблему космологической константы. Поясним суть этой проблемы.

Для описания наблюдаемой динамики Вселенной мы вынуждены предположить, что темная энергия, обеспечивающая ускоренное расширение Вселенной, представляет её доминирующую компоненту Вселенной. Поэтому мы можем, используя первое уравнение Фридмана, оценить ее плотность

$$\rho_{\Lambda} \approx \frac{H_0^2 m_{Pl}^2}{8\pi} \approx 10^{-47} GeV^4. \quad (3.1)$$

Согласно наиболее популярной версии темная энергия в форме космологической константы  $\Lambda$  представляет нулевые колебания квантованных полей и, следовательно, в рамках такой интерпретации

$$\rho_{vac} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sqrt{k^2 + m^2} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\infty} dk k^2 \sqrt{k^2 + m^2}. \quad (3.2)$$

Интеграл расходится (ультрафиолетовая расходимость) и  $\rho_{vac} \propto k^4$ . Предполагая, что в квантовой теории поля существует некоторый масштаб обрезания  $k_{max}$ , сделаем интеграл (3.2) конечным

$$\rho_{vac} \approx \frac{k_{max}^4}{16\pi^2}. \quad (3.3)$$

Естественным выбором кажется  $k_{max} = m_{pl} = 1,22 \times 10^{19} GeV$  ( $\hbar = c = 1$ ), поскольку с этой величиной принято отождествлять границу применимости ОТО. Результатом такого выбора будет плотность вакуумной энергии

$$\rho_{vac} \approx 10^{74} GeV^4. \quad (3.4)$$

Полученное значение плотности энергии более чем на 120 порядков (!) превосходит наблюдаемое значение

$$\rho_{vac}^{(obs)} : 10^{-48} GeV^4. \quad (3.5)$$

Это противоречие представляет так называемую проблему космологической константы [45–47]. Физика еще никогда не сталкивалась с таким гигантским численным противоречием.

До открытия ускоренного расширения Вселенной (1998 год) усилия были в основном сосредоточены на поисках универсальной симметрии, приводящей к  $\Lambda = 0$ . Однако несмотря на десятилетия поисков не удалось найти механизм, требующий равенства нулю космологической константы и не вступающий в конфликт с известными физическими законами. Вызывает удивление, как может ускользнуть столь сильный механизм, сокращающий гигантское число значащих цифр? После открытия ускоренного расширения отношение к космологической константе резко изменилось. Будучи наиболее простым механизмом, генерирующим «антигравитацию», она привлекала всеобщее внимание. Теперь основные усилия были направлены не на ее «зануление», а на поиск причин, делающих ее значительно меньше значения, ожидаемого по размерным соображениям.

К решению проблемы космологической константы привлекались и так называемые антропные соображения, опирающиеся на необходимость существования наблюдателя. Как известно [48], галактики могут образовываться только в узком диапазоне  $\rho_{min} < \rho_{\Lambda} < \rho_{max}$  плотности космологической константы. Это, по-видимому, необходимое условие существования наблюдателя, и поэтому мы не должны удивляться, что обнаруживаем себя именно в этой области. Почему  $\Lambda$  имеет отношение к образованию структур? Чтобы образовались галактики, исходные малые возмущения плотности должны расти под действием собственной гравитации.

тации, пока они не войдут в нелинейный режим и «отвяжутся» от космологического расширения. Этот рост является логарифмическим в период доминирования излучения и линейным в период доминирования материи. Плотность вакуумной энергии не убывает со временем, поэтому наверняка наступит период ее доминирования. Вскоре после того как это случится, возмущения плотности перестанут расти, и останутся только те гравитационно связанные образования, которые уже успели войти в нелинейный режим. Это означает, что во Вселенной не будет структур, если космологическая константа станет достаточно большой перед тем, как образуются первые галактики. Это приведет к верхней границе для плотности космологической константы. Нижняя граница предотвращает реколлапс до образования галактик.

Открытие суперсимметрии привело к надежде, что, так как бозоны и фермионы (с одинаковыми массами в пределе точной суперсимметрии) дают одинаковые вклады в вакуумное среднее, но с противоположными знаками, то проблема космологической константы может быть решена с помощью разумного баланса фермионов и бозонов в природе. Однако суперсимметрия (если она существует) очевидно нарушена при низких температурах, господствующих сегодня во Вселенной. По этой причине можно ожидать, что космологическая константа равнялась нулю в ранней Вселенной, но возродилась в последнее время, когда температура опустилась ниже некоторой температуры  $T_{SUSY}$ . Однако это нежелательный сценарий, почти противоположный тому, который мы ищем, так как большие значения  $\Lambda$  в ранней Вселенной привлекательны с точки зрения инфляции, в то время как очень маленькие текущие значения  $\Lambda$  согласуются с наблюдениями.

«Игра» с фундаментальными константами допускает переход к новому набору планковских переменных. Коль скоро космологическая константа играет такую фундаментальную роль в динамике Вселенной, то давайте рассмотрим переход от первоначального набора планковских единиц  $m_{Pl}$ ,  $l_{Pl}$ ,  $t_{Pl}$  построенному на фундаментальных константах  $\hbar$ ,  $c$ ,  $G$  к новому набору  $m_\Lambda$ ,  $l_\Lambda$ ,  $t_\Lambda$  построенному на константах  $\Lambda$ ,  $c$ ,  $G$ . Новые «планковские» единицы [49]

$$\begin{aligned}
 m_\Lambda &= \left( \frac{\hbar_\Lambda c}{G} \right)^{1/2} = \frac{c^3}{G(8\pi\Lambda)^{1/2}} = 5,90 \times 10^{56} \text{ GeV}, \\
 l_\Lambda &= \left( \frac{G\hbar_\Lambda}{c^3} \right)^{1/2} = \left( \frac{8\pi c^2}{\Lambda} \right)^{1/2} = 4,38 \times 10^{28} \text{ cm}, \\
 t_\Lambda &= \left( \frac{G\hbar_\Lambda}{c^5} \right)^{1/2} = \left( \frac{8\pi}{\Lambda} \right)^{1/2} = 1,46 \times 10^{18} \text{ s},
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

(нужно проверить) прекрасно воспроизводят массу, размер и время жизни наблюдаемой Вселенной, но решая проблему космологической константы, порождают проблему постоянной Планка

$$\hbar_{\Lambda} = 7,35 \times 10^{122} \hbar = 7,75 \times 10^{88} J \cdot s. \quad (3.7)$$

Все те же 120 порядков! Просто трудность «зарыта» в другом месте, и, видимо, для решения проблемы космологической константы следует искать принципиально новые подходы.

Хорошо известно, что «на свете нет ничего опаснее, чем пытаться преодолеть пропасть в два прыжка». Концепция предельных величин даёт нам шанс, по крайней мере в принципе, одним прыжком преодолеть пропасть в 120 порядков. Для того, чтобы подготовиться к этому прыжку кратко изложим гипотезу [5], получившую название IR-UV (ультрафиолетового – инфракрасного) соответствия. Гипотеза базируется на следующих аргументах.

В любой эффективной квантовой теории поля, определенной в пространственной области с характерным размером  $L$  и использующей ультрафиолетовое обрезание  $\Lambda$ , энтропия  $S \propto \Lambda^3 L^3$ . Например, фермионы, размещённые в узлах пространственной решётки характерного размера  $L$  периода  $\Lambda^{-1}$ , находятся в одном из  $2^{(L\Lambda)^3}$  состояний. Следовательно, энтропия такой системы  $S \propto \Lambda^3 L^3$ . Согласно голографическому принципу [4] (см. раздел 3.3) величина обрезания должна удовлетворять неравенству

$$L^3 \Lambda^3 \leq S_{BH} = \frac{A}{4l_{Pl}^2} = \pi L^2 m_{Pl}^2. \quad (3.8)$$

Здесь  $S_{BH}$  – энтропия черной дыры с гравитационным радиусом  $L$ . Мы получили важный результат [3] в рамках голографической динамики величина инфракрасного обрезания (IR-cutoff)  $L$  жестко связана с величиной ультрафиолетового обрезания (UV-cutoff)  $\Lambda$ . Другими словами, физика на UV-масштабах зависит от параметров физики на IR-масштабах. В частности, в случае насыщения неравенства (3.8)

$$L \sim \Lambda^{-3} m_{Pl}^2. \quad (3.9)$$

С точки зрения физики предельных величин связь малых и больших масштабов может быть получена из достаточно естественного условия: полная энергия, заключенная в области размера  $L$ , не должна превышать массы черной дыры того же размера, т. е.

$$L^3 \rho_\Lambda \leq M_{BH} \sim L m_{Pl}^2. \quad (3.10)$$

Здесь  $\rho_\Lambda$  – плотность энергии в объёме  $L^3$ . В случае нарушения этого неравенства образуется черная дыра с горизонтом событий, предотвращающим дальнейший рост плотности энергии.

Рассмотрим ещё одну возможность получения такой связи. Соотношение (2.39)  $\delta l = l_{Pl}^{2/3} l^{1/3}$  мы можем рассматривать как соотношение между инфракрасным и ультрафиолетовым масштабами в эффективной квантовой теории поля, в которой выполняются термодинамические законы чёрных дыр. В частности, это означает, что энтропия  $S$  любого объекта линейного размера  $l$  в такой теории должна быть меньше энтропии чёрной дыры  $S_{BH}$  такого же размера

$$S \leq S_{BH} \approx \left( \frac{l}{l_{Pl}} \right)^2. \quad (3.11)$$

Рассмотрим теперь ящик размера  $l$  (IR-масштаб), заполненный субстанцией с UV-масштабом обрезания  $\Lambda$ . Тогда энтропия такой системы  $S \propto l^3 \Lambda^3$  и согласно (3.11)

$$l^3 \Lambda^3 \leq \left( \frac{l}{l_{Pl}} \right)^2. \quad (3.12)$$

Естественно отождествить обратный UV-масштаб с минимальной неопределённостью измерения длины  $\delta l = \Lambda^{-1}$ . В этом случае соотношение (3.12) немедленно трансформируется в  $\delta l \leq l_{Pl}^{2/3} l^{1/3}$ .

С точки зрения физики предельных величин связь малых и больших масштабов может быть получена из достаточно естественного условия: полная энергия, заключенная в области размера  $L$ , не должна превышать массы черной дыры того же размера, т. е.

$$L^3 \rho_\Lambda \leq M_{BH} \sim L m_{Pl}^2. \quad (3.13)$$

Здесь  $\rho_\Lambda$  – плотность энергии в объёме  $L^3$ . В случае нарушения этого неравенства образуется черная дыра с горизонтом событий, предотвращающим дальнейший рост плотности энергии.

Возвращаясь к проблеме космологической константы, применим неравенство (3.14) к Вселенной в целом. В этом случае естественно отождествить IR-масштаб с хаббловским радиусом  $H^{-1}$ , а под  $\rho_\Lambda$  понимать плотность доминирующей компоненты, заполняющей Вселенную, т. е. тёмной энергии в форме космологической константы. Тогда для верхней границы плотности энергии найдем

$$\rho_\Lambda \sim L^{-2} m_{Pl}^2 \sim H^2 m_{Pl}^2. \quad (3.14)$$

Учитывая, что

$$m_{Pl} \simeq 1,2 \times 10^{19} GeV, \\ H_0 \simeq 1,6 \times 10^{-42} GeV,$$

найдем

$$\rho_\Lambda \sim 10^{-46} GeV^4 \quad (3.15)$$

Это знамение близко (отличие всего в два порядка, а не в 120) к наблюдаемой плотности темной энергии  $\rho_{vac}^{(obs)} \sim 10^{-48} GeV^4$  (3.5). Результат кажется крайне интересным, однако его значение не следует преувеличивать: он является не решением проблемы космологической константы, а лишь указанием на направление, в котором это решение следует искать.

### 3.2. Информационные пределы

В течение нескольких последних десятилетий мы стали свидетелями гигантского роста скорости обработки информации и объёмов её сохранения. Перспектива практической реализации квантовых вычислений открывает новые возможности. Возникает естественный вопрос, как долго будет продолжаться этот рост, существует ли предельная скорость обработки информации?

Как мы видели выше, квантовые флуктуации, приводящие к дискретности пространства и определяющие ФПМ, играют важную роль и далеко за пределами планковского масштаба величин. Универсальность гравитации приводит к фундаментальным ограничениям, накладываемым на характеристики любого процесса. Механизм возникновения этих ограничений проще всего понять в терминах предельных величин. Ниже мы увидим, что предельные величины  $\hbar, c, \eta$  контролируют (ограничивают) скорости любых физических процессов и, в частности, скорость передачи информации. Значение этой величины выходит далеко за рамки чисто технологических приложений. Уровень развития че-

ловеческого общества в значительной мере определяется скоростью передачи и обработки информации.

В основу рассмотрения положены следующие аргументы:

1. Информация материальна, т. е. информация всегда нуждается в материальном носителе. Вне материи информация не существует;
2. Концентрация информации в некотором объёме неизбежно связана с концентрацией материальных носителей в этом же объёме;
3. Имеющиеся физические ограничения на концентрацию энергии ведут к прямому запрету на процессы чрезмерной концентрации информации.

Информация, необходимая для ответа на поставленные выше вопросы отчасти содержится в фундаментальном неравенстве (2.41). Для дальнейшего нам будет удобно несколько изменить обозначения:  $\delta t \rightarrow t$ ,  $t \rightarrow T$ . В этих обозначениях неравенство (2.41)

$$T \leq t \left( \frac{t}{t_{Pl}} \right)^2. \quad (3.16)$$

Применим это неравенство для оценки эффективности работы компьютера. Величину  $\nu = t^{-1}$  можно трактовать как операционную частоту, а  $I \equiv T/t$  – как максимальное количество этапов обработки информации. Тогда неравенство (3.16) трансформируется в

$$It^{-2} = I\nu^2 \leq t_{Pl}^{-2} = \frac{c^5}{\hbar G} \approx 10^{86} s^{-2}. \quad (3.17)$$

Заметим, что это универсальное ограничение включает все три фундаментальные константы  $\hbar$ ,  $c$ ,  $G$  так как базируется на ограничениях как квантовой механики, так и ОТО. Для современных компьютеров

$$It^{-2} \approx 10^{30} s^{-2} \quad (3.18)$$

Неравенство (3.17) насыщается для чёрных дыр. Поэтому интересно, используя соотношение  $I \equiv T/t$  в качестве меры максимального количества этапов обработки информации, оценить эту величину для чёрной дыры, рассматривая её как идеальный компьютер. Предположим [51], что мы формируем чёрную дыру массы  $m$ , начальные условия которой кодируют определенную информацию, подлежащую обработке.

Выбирая в качестве  $T$  время жизни чёрной дыры  $T_{BH} \approx \frac{m^3 G^2}{\hbar c^4}$ , а в ка-

честве временного разрешения  $t_{BH} \approx r_g / c = mG / c^3$ , найдём для объёма памяти чёрной дыры

$$\frac{T_{BH}}{t_{BH}} \approx \left( \frac{m}{m_{Pl}} \right)^2. \quad (3.19)$$

Это дает количество бит  $I$  в области пространства, ограниченной горизонтом событий чёрной дыры. Легко видеть, что эта величина равна площади поверхности чёрной дыры в планковских единицах

$$I = \frac{T_{BH}}{t_{BH}} \approx \left( \frac{m}{m_{Pl}} \right)^2 \approx \left( \frac{r_g}{l_{Pl}} \right)^2, \quad (3.20)$$

в полном соответствии с голографическим принципом, который будет рассмотрен в следующем разделе.

Принципиальный интерес представляет и непосредственная оценка максимальной операционной частоты  $\nu$ . Одну из первых попыток определения предельной скорости обработки информации, пользуясь размерными соображениями, представляет так называемый Bremermann's limit [52]  $\nu = mc^2 / \hbar = (m / kg) 10^{50}$  бит в секунду ( $m$  – масса процессора). Для  $m = 1 \text{ kg}$  время выполнения одной операции  $\Delta t_B \approx 10^{-50}$  секунды, много меньше планковского времени, что вызывает сомнение в адекватности сделанной оценки. Позднее это ограничение было заменено более строгим утверждением, теоремой Марголиса – Левитина [53], согласно которой скорость вычислений любого компьютера не может превзойти величину  $2E / \pi \hbar$ , где  $E$  – доступная энергия. В более странной формулировке теорема утверждает, что полное число элементарных логических операций, которые система может выполнить за единицу времени ограничена средним превышением энергии над основным состоянием.

Подчеркнем, однако, что теорема Марголиса–Левитина получена в рамках только квантовой механики. Слабое место любых оценок, сделанных на её основе – игнорирование ограничений, накладываемых специальной и общей теориями относительности.

Если учесть [54], принцип неопределенности  $\Delta E \Delta t \geq \hbar$  и конечную скорость сигнала  $\Delta t \geq L / c$ , то  $\Delta t > \max \left[ \hbar / mc^2, L / c \right]$ . Следовательно, при выполнении условия  $L < \hbar / mc$  мы воспроизведем Bremermann's limit  $\Delta t_B = \hbar / mc^2$ . Однако очевидно, что и в этом случае учет гравитации делает невозможным независимый выбор размера  $L$  и массы процессо-

ра  $m$ . Размеры процессора ограничены условием  $L > r_g = \frac{2mG}{c^2}$ , предотвращающим образование черной дыры (горизонта). С учётом этого ограничения минимальное время выполнения одной операции

$$\Delta t_{\min} = (G\hbar / c^5)^{1/2} \sim 10^{-43} \text{ sec}, \quad (3.21)$$

есть планковское время, а предельная скорость обработки информации любым вычислительного устройства  $V$

$$v = t_{pl}^{-1} = (c^5 / G\hbar)^{1/2} \sim 10^{43} \text{ bit / sec}. \quad (3.22)$$

Этот же результат в терминах предельной мощности  $\eta = P_{\max}$  (см. соотношение (2.22))

$$v = t_{pl}^{-1} = (c^5 / G\hbar)^{1/2} = \left( \frac{\eta}{\hbar} \right)^{1/2}, \quad (3.23)$$

имеет простую интерпретацию. Так как информация материальна, она всегда нуждается в материальном носителе. Концентрация информации в некотором объёме неизбежно связана с концентрацией материальных носителей в этом же объёме. Имеющиеся физические ограничения на концентрацию энергии, препятствующие образованию чёрных дыр, ведут к прямому запрету на процессы чрезмерной концентрации информации. Предельная мощность  $\eta$  есть количественная мера этого ограничения. При  $\eta \rightarrow \infty$  (горизонт событий отсутствует при любой концентрации энергии) вычислительное устройство могло бы работать с произвольно высокой скоростью.

Предельные соотношения, обсужденные выше, применимы к любой физической системе. Все системы в ходе эволюции регистрируют и обрабатывают информацию. Давайте рассмотрим два примера применения полученных ограничений к конкретным физическим системам различного масштаба.

### 3.3. Д и с к р е т н а я с т р у к т у р а п р о с т р а н с т в а и г о л о г р а ф и я

Традиционная точка зрения предполагала, что доминирующую часть степеней свободы нашего мира составляют поля, заполняющие пространство. Однако постепенно стало понятно, что такое представле-

ние затрудняет построение квантовой теории поля. Для придания смысла последней требуется обрезание всех входящих в теорию интегралов на малых расстояниях. Формально избежать этой трудности можно, перейдя к описанию нашего мира на дискретной пространственной решётке. Период такой решётки остается свободным параметром теории, который должен быть определен в будущих микроскопических теориях.

В последнее время часть физиков придерживается ещё более радикальной точки зрения: вместо трёхмерной решётки полное описание природы требует только двумерной решётки, расположенной на пространственной границе исследуемой области [56, 57]. Такой подход базируется на так называемом «голографическом принципе». Название принципа связано с оптической голограммой, представляющей двумерную запись трёхмерного объекта.

В основе голографического принципа лежит связь между энтропией и информацией. Количество информации  $I$ , связанное с материей и ее положением (в любой микроскопической теории), измеряется в терминах энтропии  $S$

$$\Delta S = -\Delta I. \quad (3.24)$$

Изменение энтропии при смещении материи приводит к так называемой энтропийной силе [58]. Следовательно, ее происхождение основано на универсальной тенденции любой микроскопической системы максимизировать энтропию. Фундаментальные поля, связанные с энтропийными силами, отсутствуют, и динамические уравнения непосредственно выражаются в терминах изменения энтропии.

Простейшая формулировка голографического принципа содержит два утверждения:

1. Вся информация, содержащаяся в некоей области пространства, может быть «записана» (представлена) на границе этой области, (голографическом экране);

2. Теория на границах исследуемой области пространства должна содержать не более одной степени свободы на планковскую площадь или, другими словами, полное число степеней свободы  $N$  подчиняется неравенству

$$N \leq \frac{A}{l_{Pl}^2} = \frac{Ac^3}{G\hbar}. \quad (3.25)$$

Это означает, что плотность информации на голографическом экране ограничено величиной  $10^{69} \text{ bit} / \text{m}^2$ .

Голографический принцип как строгое утверждение справедлив только для чёрных дыр. В остальных случаях он является всего лишь гипотезой. Поэтому представляет интерес ответ на вопрос: справедлив ли голографический принцип в теории, объединяющей квантовую меха-

нику и гравитацию? С одной стороны, такая теория генерирует минимальную длину и обеспечивает естественный переход на трёхмерную пространственную решётку. Но с другой стороны, для справедливости голографического принципа требуется, чтобы вся объёмная информация такой трёхмерной решетки могла быть записана на двумерной решетке. Другими словами, такая решетка должна быть, по крайней мере, эффективно двумерной.

Давайте убедимся, что включение гравитационных эффектов обеспечивает эффективную двумерность [59]. Для этого рассмотрим некоторый трёхмерный объём с характерным линейным размером  $l$ . В теории с минимальной длиной  $l_{\min} \simeq l_{Pl}$  естественно предположить, что объём разделён на ячейки величины  $(l_{Pl})^3$ . Однако как показано выше, (см. раздел 2.3) такой вывод ошибочен. В силу фундаментального ограничения  $\delta l \geq (l_{Pl}^2)^{1/3}$  (см. соотношение (2.38)) минимальное ребро ячейки, на которые можно разбить куб с ребром  $l$  есть  $(l_{Pl}^2)^{1/3}$  (см. рис. 4). Другими словами, пространственно-временная пена приводит к образованию динамической решётки с периодом, зависящим от длины решётки. Следовательно, максимальное число ячеек в такой решетке

$$N = \left[ \frac{l}{(l_{Pl}^2)^{1/3}} \right]^3 = \frac{l^2}{l_{Pl}^2}. \quad (3.26)$$

Если мы свяжем с каждой ячейкой одну степень свободы системы, то полученное соотношение воспроизведет голографический принцип в форме (3.25).

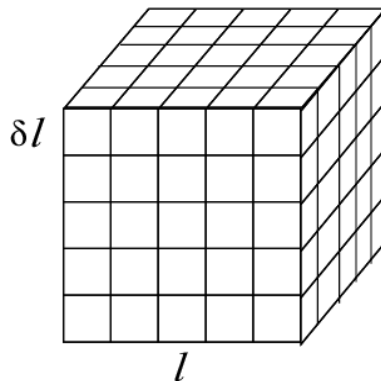


Рис. 4. Показано деление объема на элементарные ячейки

Легко заметить, что хотя исходная формулировка голографического принципа была сделана в терминах информации, его доказательство (3.26) носит чисто динамический характер. Подобная ситуация типична для физики в целом.

Действительно, есть два способа описания реальности: в терминах динамики (динамических переменных) и в терминах статистической физики, где ключевую роль играет энтропия, непосредственно связанная с информацией. Способы описания не исключают, а дополняют друг друга. Для иллюстрации этого приведем простой пример.

Рассмотрим гипотетический случай превращения Солнца в чёрную дыру. (Массы Солнца недостаточно для реализации такого процесса, поэтому в реальности под Солнцем можно понимать звезду с большей массой). В динамических терминах этот процесс протекает следующим образом.

Гравитация вначале превзойдет давление излучения, потом давление вырожденного электронного газа, а затем и давление вырожденного нейтронного газа, переходя в конечное состояние – чёрную дыру.

Давайте сравним энтропию Солнца в естественном состоянии и после превращения его за счет сжатия в черную дыру. Если считать, что Солнце – идеальный газ, состоящий из нуклонов, тогда

$$S_e = k_B N \left\{ \ln \left[ \left( \frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \frac{V}{N} \right] + \frac{5}{2} \right\}.$$

Здесь  $N \approx 10^{57}$ ,  $V \approx 1,4 \cdot 10^{33} \text{ см}^3$ ,  $T \approx 10^7 \text{ К}$ , так что

$$S_{\odot} \approx 1,4 \cdot 10^{58} k_B \approx 2 \cdot 10^{35} \frac{J}{K}.$$

С другой стороны, для черной дыры с массой Солнца

$$S_{BH,\odot} = \frac{k_B}{4} \frac{A_{\odot}}{l_p^2} \approx 10^{77} k_B \approx 1,4 \cdot 10^{54} \frac{J}{K}.$$

Следовательно, отношение энтропии черной дыры к энтропии Солнца достигает значения

$$\frac{S_{BH,\odot}}{S_{\odot}} \approx 0,7 \cdot 10^{19}.$$

Мы видим, что процесс коллапса сопровождается гигантским ростом энтропии, т. е. потерей информации, так как изменения этих вели-

чин связаны соотношением  $\Delta S = -\Delta I$ . В этих терминах результат кажется абсолютно естественным, если сравнить гигантское количество информации, необходимое даже для упрощённого описания Солнца, и всего один параметр – массу, необходимый для описания незаряженной, невращающейся чёрной дыры.

Соответственно, если у нас имеется два способа описания реальности, то всегда возникает вопрос об «эквивалентности» принципов, лежащих в их основе. Другими словами, должен существовать словарь перевода с одного языка на другой. Это означает наличие некоторого соответствия между терминами того и другого подхода. Под термином эквивалентность будем понимать следующее утверждение: все результаты одного подхода могут быть получены в рамках другого. Конечно, это очень длинный путь. И всегда остаётся возможность, что какое-то новое наблюдение окажется камнем преткновения для одного из подходов, и тогда мы найдем «главный». Второй подход: прямое доказательство тождественности принципов, которое состоит в получении одного из другого и наоборот.

Доказательство эквивалентности фундаментальных принципов или попытка найти «главный» принцип диктуется желанием застраховать себя на тот случай, если между принципами возникнут противоречия. А такие противоречия уже случались и приводили к кризисам. Достаточно вспомнить проблему с многовековой историей: обратимость механики и стрелу времени в термодинамике.

Для того чтобы избежать потенциальных противоречий давайте рассмотрим под таким углом зрения принцип максимальной силы, базирующийся на динамическом подходе, и голографический принцип информационной природы [60].

Априори принцип максимальной силы и голографический принцип роднит то, что каждый из этих принципов представляет собой утверждение о существовании некоторого предельного значения: предельной силы (или мощности) в первом случае, и предельной плотности информации во втором случае. Кроме того, при сравнительном анализе этих принципов обращает на себя внимание общий источник их происхождения – горизонт событий. Дополнительный интерес представляет то обстоятельство, что принципы могут быть реализованы в существенно различных масштабах, и доказательство их эквивалентности может послужить ещё одним подтверждением IR-UV соответствия.

Пройдём вначале намеченный путь в одном направлении, получим принцип максимальной силы из голографического принципа или, другими словами, попытаемся получить значение предельной мощности  $c^5 / 4G$ , используя фундаментальные ограничения теории информации. (Мы по-прежнему будем опускать численные коэффициенты порядка единицы).

Как мы видели выше, полное число элементарных логических операций, которые система может выполнить за единицу времени, ограничена средним превышением энергии над основным состоянием

$N_{ops/sec} \leq \frac{2E}{\pi\hbar}$ , а полное число битов, с которыми система может работать,

ограничено её энтропией  $N_{bits} \leq S / k_B \ln 2$ .

Принцип максимальной силы и голографический принцип роднит то, что каждый из этих принципов представляет собой утверждение о существовании некоторого предельного значения: предельной силы (или мощности) в первом случае, и предельной плотности информации во втором случае. Более того, при сравнительном анализе этих принципов обращает на себя внимание общий источник их происхождения – горизонт событий.

Для количественного перевода информации в энергию используем принцип Ландауэра [62], согласно которому в любой вычислительной системе, независимо от её физической реализации, при создании одного бита информации необходима энергия

$$E_{bit} \geq E_{SNL} = k_B T \ln 2. \quad (3.27)$$

Здесь  $E_{SNL}$  – так называемая Shannon-von Neumann-Landauer энергия. Для  $T = 300\text{ K}$  энергия  $E_{SNL} \approx 0,017\text{ eV}$ . Соотношение (3.27) эквивалентно утверждению, что температуру можно рассматривать как среднюю энергию одного бита информации на голографическом экране. Рассматривая создание одного бита информации как элементарную логическую операцию, мы можем написать для предельной мощности, затрачиваемой при запасе энергии  $E$  и температуре голографического экрана  $T$

$$\eta \approx N_{ops/sec} \times E_{SNL} \approx \frac{E}{\hbar} k_B T. \quad (3.28)$$

Как мы видели выше, предельные величины достигаются только на горизонте событий. Используя в качестве температуры горизонта температуру Хокинга  $T_H = \frac{\hbar c^3}{8\pi k_B GM}$  и  $E = Mc^2$ , получим

$$\eta \approx \frac{c^5}{G}, \quad (3.29)$$

что в точности соответствует значению предельной мощности. Прделаем теперь обратный путь, т. е. покажем, что предельная мощность

$\eta \approx \frac{c^5}{G} \approx 10^{52}\text{ W}$  не позволяет добиться плотности информации, превосходящей  $l_{Pl}^{-2} \approx 10^{69}\text{ bit} / m^2$ .

Как показано в [21], прямым следствием принципа максимальной силы является так называемое уравнение горизонта

$$\delta E = \frac{c^2}{8\pi G} a \delta A, \quad (3.30)$$

где  $a$  – поверхностная гравитация, связанная с температурой горизонта  $T$  соотношением

$$a = \frac{2\pi k_B}{\hbar c} T. \quad (3.31)$$

Для потока энергии  $\delta E$ , пересекающая элемент площади горизонта  $\delta A$  (с поверхностной гравитацией  $a$ ) подчиняется уравнению баланса [20]

$$\delta S = \frac{\delta E}{T}. \quad (3.32)$$

Подставляя соотношение (3.31) и соотношение (3.32) в (3.30), воспроизведём голографический принцип в дифференциальной форме

$$\delta S = \frac{c^3}{4G\hbar} \delta A = k_B \frac{\delta A}{4l_{Pl}^2}. \quad (3.33)$$

Отсюда после подстановки  $N_{bits} \leq S / k_B \ln 2$  следует ограничение  $N_{bits} / A \leq l_{Pl}^{-2} \approx 10^{69} \text{ bit} / \text{m}^2$  в полном соответствии с плотностью записи на голографическом экране. Эти рассуждения заканчивают объяснение эквивалентности этих принципов.

### 3.4. П р е д е л ь н о е у с к о р е н и е

Условие существования традиционного пространства-времени при наличии процессов поляризация вакуума (виртуальные процессы рождения и аннигиляции пар, обусловленные квантовыми флуктуациями) приводит к ограничению собственного ускорения относительно вакуума или, другими словами, к появлению максимального ускорения [63–65].

Собственным ускорением частицы  $a$  в искривлённом пространстве-времени является скалярная величина, которая определяется соотношением

$$a^2 = -c^4 g_{\mu\nu} \frac{Dv^\mu}{ds} \frac{Dv^\nu}{ds}, \quad (3.34)$$

где  $g_{\mu\nu}$  – метрический тензор,  $v^\mu \equiv dx^\mu / ds$  – безразмерная 4-скорость частицы и  $D/ds$  – ковариантная производная по линейному элементу мировой линии частицы

$$\frac{Dv^\mu}{ds} \equiv \frac{dv^\mu}{ds} + \Gamma_{\alpha\beta}^\mu v^\alpha v^\beta. \quad (3.35)$$

Здесь  $\Gamma_{\alpha\beta}^\mu$  – аффинные связности (символы Кристоффеля) пространства-времени с метрикой  $g_{\mu\nu}$  и  $ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$  – линейный элемент этого пространства-времени.

Под действием только гравитационного поля частица движется по геодезической с нулевым собственным ускорением. При включении негравитационных сил ускорение отлично от нуля. Используя простые физические аргументы покажем, что величина этого ускорения фундаментальное свойство пространства-времени.

Приведем эти аргументы, следуя [66]. Из принципа неопределённости энергия-время следует, что время жизни виртуальной пары частица – античастица (с массой частицы  $m$ ), возникающей за счёт вакуумных флуктуаций  $\approx \hbar / 2mc^2$ , а проходимое за это время расстояние  $\approx \hbar / 2mc$  (комптоновская длина волны частицы). Если частице сообщить энергию, равную её массе покоя, виртуальная частица трансформируется в реальную. Переходя в систему покоя частицы, которая вообще говоря является неинерциальной, найдем, что на частицу действует сила инерции  $F_{in} = |ma|$ , где  $a$  – ускорение частицы. Выполняемая силой

инерции за время жизни частицы работа  $A = ma \times \frac{\hbar}{2mc}$ . Если  $A = mc^2$ , то

$$a = \frac{2mc^3}{\hbar}. \quad (3.36)$$

При таком ускорении частицы массы  $m$  будут в избытке рождаться из вакуума. Рост ускорения приведет к увеличению массы рождающихся частиц. К каким критическим последствиям может привести неограниченный рост ускорения? Для достаточно большого ускорения образующиеся частицы могут трансформироваться в чёрные дыры. Это произойдёт тогда, когда комптоновская длина частицы  $\hbar / mc$  станет меньше её гравитационного радиуса  $2Gm / c^2$

$$\hbar / mc < \frac{2Gm}{c^2}. \quad (3.37)$$

Отсюда следует, что порогом образования черных дыр служит масса порядка планковской  $(\hbar c / G)^{1/2}$ . Подставляя  $m = m_{pl}$  в соотношение (3.36), найдем

$$a_0 \approx \left( \frac{c^7}{\hbar G} \right)^{1/2}. \quad (3.38)$$

Мы по-прежнему опускаем множители порядка единицы. При таком ускорении рождение черных дыр с планковской массой за счёт поляризации вакуума приведет к разрушению традиционного представления о структуре пространства-времени, и сама концепция ускорения утратит привычный смысл. По этой причине величину  $a_0$  следует рассматривать как максимальное собственное ускорение частицы относительно вакуума. Рассмотрим теперь механизм появления максимального ускорения на микроскопическом уровне. Как показал Швингер [67], вероятность  $P$  рождения из вакуума под действием внешнего электрического поля  $E$  электрон-позитронной пары за единицу времени в единице объёма равна

$$\frac{d^4 P}{dt dV} = \left( \frac{e^2 E^2}{\pi^2 \hbar^2 c} \right) \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n \frac{E_c}{E}} \frac{1}{n^2}. \quad (3.39)$$

Здесь  $m$  – масса электрона и  $E_c$  – характерное электрическое поле, представляющее порог эффективного рождения пар

$$E_c = \pi m^2 \frac{c^3}{e \hbar}. \quad (3.40)$$

Как оценить критическое поле  $E_c$ ? Используя принцип неопределенности энергия-время, найдем, что виртуальная электрон-позитронная пара живет в вакууме

$$\Delta t \sim \frac{\hbar}{\Delta E} \sim \frac{\hbar}{2mc^2} \quad (3.41)$$

Флуктуация распространяется на расстояние

$$\Delta x \sim c \Delta t \sim \hbar / 2mc, \quad (3.42)$$

т. е. на расстояние порядка комптоновской длины электрона. Если в течение времени  $\Delta t$  внешнее поле  $E$ , действующее с силой  $eE$  на каждую из виртуальных частиц, выполнит (на расстоянии  $\Delta x$ ) работу

$$(eE)(\hbar / 2mc) \sim mc^2, \quad (3.43)$$

то виртуальная частица трансформируется в реальную. Из соотношения (3.43) найдём

$$E_c = \frac{2m^2c^3}{e\hbar} \sim \frac{\pi m^2c^3}{e\hbar}. \quad (3.44)$$

Разумеется, если вместо электрической силы ( $eE$ ) использовать силу инерции ( $ma$ ), то мы воспроизведём результат (3.38).

Хорошо известно [69], что наблюдатель в равномерно ускоренной системе с ускорением  $a$  зафиксирует генерируемое вакуумом излучение с температурой  $T$  (температуру Унру)

$$T = \frac{\hbar a}{2\pi k_B c}, \quad (3.45)$$

Подставляя соотношение (3.38) в (3.45), мы найдём максимально возможную температуру Унру (температуру Сахарова [71, 72])

$$T_{U_{\max}} = \frac{\left(\frac{c^5}{G}\hbar\right)^{1/2}}{k_B}. \quad (3.46)$$

Следовательно, наблюдатель в системе с максимальным ускорением ( $a_0 \approx l_{pl} / t_{pl}^2 \approx 10^{52} m / \text{sec}^2$ ) будет окружен тепловым излучением с температурой порядка планковской  $T_{U_{\max}} \approx T_{pl} \approx 10^{32} K$ . Результату (3.46) можно придать более изящную форму, вспомнив определение предельной мощности  $\eta = c^5 / G$

$$k_B T_{U_{\max}} = \left(\frac{c^5}{G}\hbar\right)^{1/2} = (\eta\hbar)^{1/2}. \quad (3.47)$$

Мы видим, что существование предельной мощности предопределяет температуру Сахарова. Как первое, так и второе ограничение имеют общий источник – горизонт событий.

Заметим, что первым привлек внимание к проблеме максимального ускорения Е. Caianiello [73]. Значение максимального ускорения, полученное им  $a_{\max} = c^2 / \lambda$ , где  $\lambda$  – линейный размер частицы. Подстав-

ляя  $\lambda = l_{pl} = (\hbar G / c^3)^{1/2}$ , мы немедленно получим (3.38). Результат привлёк внимание, поскольку наличие конечного максимального ускорения устраняло целый ряд нежелательных бесконечностей, однако способ его получения вызывал определенные сомнения. Несколько позднее [74] Caianiello воспроизвел первоначальный результат, используя принцип неопределенности энергия-время в форме

$$\Delta E \Delta f(t) \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{df}{dt} \right|. \quad (3.48)$$

Где  $f(t)$  – произвольная дифференцируемая функция. Так как нас интересует максимальное ускорение, то естественно рассмотреть первоначально покоящуюся частицу и выбрать  $f(t) = v(t)$ . Тогда при условии, что  $\Delta E \leq E$ ,  $\Delta v \leq v \leq c$  получим

$$\frac{\hbar}{2} |a| \leq \Delta E \Delta v \leq mc^2 \times c. \quad (3.49)$$

Откуда мы немедленно найдем (3.37), а при подстановке  $m = m_{pl}$  воспроизведем фундаментальный результат (3.38).

Наличие максимального собственного ускорения  $a_0$  автоматически приводит к существованию минимального радиуса кривизны  $R_{\min}$  вдоль мировой линии частицы. Радиус кривизны мировой линии  $R = c^2 / a$  (вспомним, что центростремительное ускорение при движении по окружности радиуса  $R$  равно  $a = v^2 / R$ ). Следовательно, минимальный радиус кривизны

$$R_{\min} = \frac{c^2}{a_0} \approx \left( \frac{\hbar G}{c^3} \right)^{1/2} = c \left( \frac{\hbar}{\eta} \right)^{1/2}. \quad (3.50)$$

Мы еще раз убеждаемся в ключевой роли горизонта, порождающего предельную мощность и, как следствие, максимальное собственное ускорение и минимальный радиус кривизны мировой линии.

### 3.5. Нарушение лоренц-инвариантности

Как мы убедились, попытка синтеза квантовой механики и ОТО неизбежно приводит к дискретизации пространства или, другими слова-

ми, к появлению минимальной длины. С другой стороны, введение минимальной длины заведомо противоречит традиционным формулировкам как квантовой механики, так и специальной и общей относительности и требует их модификации. Остановимся кратко на этом вопросе.

Включить в теорию факт существования минимальной длины можно двумя способами. Первый способ состоит в построении аксиоматики, изначально базирующейся на дискретном пространстве с минимальной длиной. К настоящему времени такая теория не построена, и мы вынуждены обратиться ко второму способу – модификации канонических теорий (квантовой механики и теории относительности как специальной, так и общей). При этом на первом этапе приходится ограничиваться раздельной модификацией этих теорий, оставив на будущее поиск взаимосвязанных подходов.

Начнём с модификации квантовой механики, вызванной учётом гравитации в процессе измерения координаты частицы. Наиболее прямой модификацией квантовой механики, учитывающая переход от принципа неопределенности Гейзенберга к обобщенному принципу неопределенности, состоит в изменении коммутационных соотношений (2.13). В феноменологической теории мы можем прийти к таким коммутационным соотношениям для  $\beta_0 \approx 1$ , не ссылаясь на процесс измерения, если переопределить (в импульсном приближении) оператор координаты

$$\hat{x} = i\left(1 + l_{Pl}^2 p^2\right) \frac{\partial}{\partial p}. \quad (3.51)$$

Такое переопределение приводит к тому, что при переходе в гамильтониане от классических переменных к операторам модифицируется и уравнение Шредингера. Так, для одномерного гармонического осциллятора с гамильтонианом

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2, \quad (3.52)$$

уравнение Шредингера в импульсном представлении

$$\frac{\partial^2}{\partial p^2} \psi(p) + \frac{2l_{Pl}}{1 + l_{Pl}^2} \frac{\partial}{\partial p} \psi(p) + \frac{E / m\omega^2 - p^2 / (m\omega)^2}{(1 + l_{Pl}^2)^2} \psi(p) = 0. \quad (3.53)$$

При  $l_{Pl} \rightarrow 0$  мы возвращаемся к каноническому уравнению Шредингера.

Следует отметить, что среди решений уравнения (3.53) возможны хорошо локализованные решения с длиной локализации меньше мини-

мальной длины. Однако как показано в [75], такие столь резко локализованные функции обладают бесконечной энергией и, следовательно, являются нефизическими.

Аналогичная процедура может быть применена к другим типам потенциалов в уравнении Шредингера. В частности, были найдены поправки, связанные с введением минимальной длины, для  $n$ -мерного гармонического осциллятора [76, 77], для атома водорода [78–80] и целого ряда других задач.

Как и следовало ожидать, поправки оказались крайне малыми, если в качестве минимальной длины выбрать планковскую длину. Альтернативная возможность состоит в рассмотрении минимальной длины в качестве свободного параметра, который может быть определён из сравнения модельных данных, учитывающих гравитационные поправки с экспериментом. Ниже мы вернёмся к этому вопросу.

Остановимся теперь кратко на проблемах, связанных с введением минимальной длины в теорию относительности. Трудности возникают уже в рамках специальной теории относительности. Приведём хорошо известный пример трудности такого типа. Очевидно, что любая теория с минимальной длиной ограничивает степень пространственной локализации любого объекта. Рассмотрим объект, локализованный в некоторой инерциальной системе отсчёта со степенью локализации  $\Delta$ , близкой к предельной  $\Delta \sim l_{pl}$ . Мы всегда можем найти другую инерциальную систему с субпланковской локализацией за счёт сокращения Лоренца.

Один из возможных путей разрешения проблем такого типа состоит в переходе к двухпараметрическому классу пространства-времени, структура которого определяется минимальной длиной и масштабом скорости, зависящими от энергии. Это направление получило название “doubly-special relativistic” (“DSR”) [81]. Такая структура пространства-времени обеспечивает соблюдение в любой инерциальной системе отсчёта неравенства

$$l > l_{pl(\min)}. \quad (3.54)$$

В такой теории ожидаемый масштаб поправок  $\sim E / E_{pl}$ . В частности, закон дисперсии фотонов в вакууме с учётом этих поправок

$$c^2 p^2 = E^2 \left[ 1 + f(E / E_{pl}) \right], \quad (3.55)$$

где  $f$  – модельно зависящая функция отношения  $E / E_{pl}$ . Такое изменение закона дисперсии приведет к зависимости от энергии скорости безмассовых частиц. Для  $E = E_{pl}$

$$c^2 p^2 \approx E^2 [1 + \xi E / E_{Pl}], \quad \xi = \pm 1, \quad (3.56)$$

и зависящая от энергии скорость безмассовой частицы

$$v = \frac{\partial E}{\partial p} \approx c(1 + \xi E / E_{Pl}). \quad (3.57)$$

Сделаем несколько замечаний по поводу включения в рассмотрение поправок порядка  $\sim E / E_{Pl}$ .

Поскольку мы ожидаем, что квантовые проявления классической гравитации будут обнаружены при очень высоких (возможно, планковских) масштабах, естественно считать, что параметры, описывающие эти эффекты, будут включать предельные величины типа  $E_{Pl}$ ,  $l_{Pl}$ . Но с другой стороны, следы эти параметров должны сохраниться при низких энергиях, т. е. в ОТО. Однако каноническая формулировка не содержит свободных параметров. Объяснение этого кажущегося парадокса тривиально: при низких энергиях роль квантовых эффектов настолько мала, что ими можно пренебречь.

Заметим в заключение этого раздела, что введение в теорию минимальной длины, другими словами, переход к описанию дискретной реальности, вообще говоря, требует соответствующего изменения математического аппарата теории. Теория не должна оперировать с бесконечно малыми пространственно-временными величинами. Если в теорию включена минимальная длина, любая ненулевая измеримая величина размерности длины должны быть кратной  $l_{\min}$ .

Очевидно, что ФПМ лучше чувствует дискретность пространства, т. е. минимальную длину  $l_{\min}$ . Однако формально минимальная длина должна присутствовать на всех «энергетических уровнях» теории, включая низкие энергии. Например, это присутствие может проявляться виде поправок  $E / E_{Pl} (l_{Pl} / l)$ .

В настоящее время математический аппарат как специальной, так и общей теории относительности приспособлен к концепции пространственно-временной непрерывности. Переход на планковский масштаб должен сопровождаться параллельной перестройкой как физического, так и математического аппарата теории.

### 3.6. Космологические аспекты физики предельных величин

Выше мы использовали предельные величины для описания ФПМ. Теперь давайте попробуем решить обратную задачу. Анализируя

конкретные физические процессы, убедимся в естественной необходимости возникновения предельных величин как полезной комбинации фундаментальных констант.

В центре нашего внимания будут два объекта: ранняя Вселенная и чёрные дыры. В ранней Вселенной с её экстремальными параметрами совместное рассмотрение квантовых и гравитационных эффектов неизбежно [82]. Чёрные дыры изначально являлись чисто классическим порождением ОТО [83], однако позднее стало понятно, что их эволюция сопровождается квантовыми эффектами [84, 85]. На планковском (предельно квантовом) масштабе классическое понятие горизонта событий порождает минимальную длину и принципиально изменяет структуру пространства–времени.

Стоящая перед нами задача может быть сформулирована следующим образом: как выйти на планковский масштаб, используя физические, а не размерные соображения? Начнём с планковской массы. Определим её как массу, для которой гравитационный радиус  $mG/c^2$  по порядку величины совпадает с комптоновской длиной волны  $\lambda_c = \hbar/mc$  (мы опускаем численные множители порядка единицы). Как мы видели выше, это условие выполняется для  $m = m_{Pl} = \sqrt{\hbar c/G}$ .

Выразим теперь чисто классическую характеристику чёрной дыры, её гравитационный радиус в квантовых терминах. Как известно [83] сферическая статическая черная дыра массы  $m$  генерирует планковский спектр с температурой  $T_H$

$$T_h = \frac{\hbar c^3}{8\pi G k_B m}. \quad (3.58)$$

Длина волны, соответствующая максимуму спектрального распределения излучения,  $\lambda_{\max}$  всего на порядок отличается от гравитационного радиуса

$$\lambda_{\max} = \frac{8\pi^2}{4,965} \frac{2mG}{c^2} \approx 16r_g. \quad (3.59)$$

Этот результат означает, что большая часть теплового излучения приходится на длинах волн, сравнимых или больше размера горизонта событий чёрной дыры, делая нечётким её гипотетическое изображение в космическом тепловизоре.

Насколько хорошо связь (3.59) согласуется с данным выше определением планковской массы? Длине волны  $\lambda_{\max}$  соответствует фотон с энергией

$$E \approx \frac{hc}{\lambda_{\max}} \approx \frac{hc}{16r_g} = \frac{hc^3}{32mG}. \quad (3.60)$$

Предполагая, что вся энергия чёрной дыры передаётся  $N$  фотонам такой энергии, для массы дыры ( $N = 2$ ) найдём

$$m \approx \frac{NE}{c^2} \approx \sqrt{\frac{hc}{16r_g}} \approx 0,6m_{Pl}, \quad (3.61)$$

в хорошем согласии с определением планковской массы. Перейдём теперь от чёрных дыр к сценарию рождения Вселенной, известному под названием «Вселенная из ничего» [86, 87]. Несмотря на эстетическую красоту названия, физическая формулировка «Вселенная из ничего» принципиально неверна. Рождение Вселенной рассматривается как квантовый процесс. Вселенная рождается из вакуума точно так, как рождается виртуальная частица. И первым, и вторым процессом управляет принцип неопределённости энергия-время

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar / 2. \quad (3.62)$$

Интерпретация требует осторожности, так как не существует оператора, представляющего время. Мы будем понимать под  $\Delta E$  неопределённость энергии микрообъекта в некотором процессе длительностью  $\Delta t$ .

Вселенная, родившаяся как квантовая флуктуация, в дальнейшем эволюционирует согласно законам квантовой механики и ОТО. Адекватность такой модели рождения Вселенной предопределяется ответами на два простых вопроса. Каково время жизни флуктуации? Можно ли использовать параметры флуктуации в качестве начальных условий для Стандартной космологической модели?

На первый вопрос ответить легко. Время жизни квантовой флуктуации, сравнимое со временем жизни Вселенной  $T_U$ , может быть достигнуто при выполнении условия  $\Delta E \approx \hbar / \Delta t \approx \hbar / T_U$ . Малость  $\Delta E$  обеспечивается взаимной компенсацией положительной энергии покоя флуктуации и отрицательной энергии гравитационного взаимодействия.

Для ответа на второй вопрос проследим временную эволюцию флуктуации. Предполагая эту эволюцию сферически симметричной (изотропная Вселенная), представим энергию флуктуации в виде

$$\Delta E \sim \frac{4}{3} \pi R^3 \rho. \quad (3.63)$$

Здесь  $\rho$  – плотность энергии флуктуации, а  $R$  – её радиус. Оценим радиус «хаббловского пузыря» как  $R \sim cH^{-1}$ , а время жизни рождающейся Вселенной  $\Delta t \sim H^{-1}$ . Используя эти оценки из соотношения (3.62), получим

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar / 2 \Rightarrow \frac{4\pi}{3} \rho \left( \frac{c}{H} \right)^3 H^{-1} \simeq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.64)$$

Отсюда для массовой плотности найдём

$$\frac{\rho}{c^2} \simeq \frac{3c^5}{8\pi G^2 \hbar} = \frac{3}{8\pi} \rho_{Pl}. \quad (3.65)$$

Родившаяся в рамках рассматриваемого сценария Вселенная обладает плотностью близкой к планковской, а её дальнейшая эволюция может быть рассмотрена в рамках Стандартной космологической модели.

Кратко остановимся на роли предельных величин в описании наблюдаемой Вселенной.

С. Вайнберг [88] высказал предположение, что такие важные характеристики, как, например, массы элементарных частиц, определяются как микроскопичкой, так и влиянием Вселенной в целом. Он сконструировал массу гипотетической частицы, используя фундаментальные константы  $\hbar$ ,  $c$ ,  $G$  и параметр Хаббла  $H$

$$m = \left( \hbar^2 H / Gc \right)^{1/3}. \quad (3.66)$$

Как оказалось эта масса не сильно отличается от массы «типичной» элементарной частицы  $m \approx 100 \text{ MeV}$ . Заметим, что при наличии четырёх исходных констант  $\hbar$ ,  $c$ ,  $G$ ,  $H$  процедура конструирования массы не является однозначной.

Собственная гравитационная энергия такой частицы

$$E_g = Gm^2 / \left( \hbar / mc \right) = Gm^3 c / \hbar. \quad (3.67)$$

Используя в качестве массы выражение (3.66), найдём

$$E_g = H\hbar. \quad (3.68)$$

Так как  $H \sim 1/T$ , где  $T$  – время жизни Вселенной, то величину  $E_g$  можно трактовать как минимальный квант гравитационной энергии.

Для нашей Вселенной

$$\begin{aligned} E_g^0 &= H_0 \hbar \approx 10^{-52} \text{ J}, \quad H_0^{-1} \approx 4,55 \times 10^{17} \text{ sec}, \\ M_g^0 &= \frac{E_g^0}{c^2} \approx 10^{-66} \text{ g}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Индексом «0» обозначены текущие значения величин.

Учитывая, что согласно Стандартной космологической модели в энергетическом бюджете Вселенной в настоящее время доминирует тёмная энергия в форме космологической константы  $\Lambda$  ( $\Lambda \approx 10^{-56} \text{ cm}^{-2}$ ,  $\rho_\Lambda \approx 6 \times 10^{30} \text{ g / cm}^3$ ), сконструируем из величин  $\hbar$ ,  $c$ ,  $G$  и  $\Lambda$  величины размерности массы. В результате получим две существенно различные массы

$$\begin{aligned} m_1 &= \frac{\hbar}{c} \sqrt{\Lambda} \approx 2 \times 10^{-65} \text{ g}, \\ m_2 &= \frac{c^2}{G} \frac{1}{\sqrt{\Lambda}} \approx 10^{56} \text{ g}. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Для Вселенной с доминированием космологической константы  $H \sim c\sqrt{\Lambda}$ . Следовательно,  $m_1 \sim H\hbar$  и мы можем интерпретировать массу  $m_1$  как массу кванта гравитационной энергии – гравитона. Массу  $m_2 \propto \Lambda H^{-3} \propto 1/\sqrt{\Lambda}$  можно интерпретировать как массу наблюдаемой части Вселенной (массу внутри хаббловской сферы). В самом деле, представим эту массу в виде

$$M_g = \frac{c^2}{G} \frac{1}{\sqrt{\Lambda}} = \frac{\Lambda c^4}{G} \frac{1}{\sqrt{\Lambda^3}} \frac{1}{c^2}. \quad (3.71)$$

Первый множитель представляет плотность энергии  $\rho_\Lambda$ , генерируемую космологической константой  $\Lambda$ , в то время как второй множитель представляет объём хаббловской сферы. Представив  $M_g = N_g m_g$ ,

где  $m_g = m_1 = \frac{\hbar}{c} \sqrt{\Lambda}$  для полного числа гравитонов в наблюдаемой Вселенной  $N_g$  найдем

$$N_g = \frac{c^3}{G\hbar\Lambda}. \quad (3.72)$$

Любопытно, что  $N_g$  с точностью до численного множителя совпадает с отношением планковской плотности  $\rho_{Pl}$  к плотности космологической константы  $\rho_\Lambda$  [89]

$$\frac{\rho_{Pl}}{\rho_\Lambda} \approx \frac{c^7}{\hbar G^2} \frac{G}{\Lambda c^4} = \frac{c^3}{\hbar G \Lambda} = N_g \approx 10^{120}. \quad (3.73)$$

Этот результат намекает на простое решение проблемы космологической константы: отношение  $\frac{\rho_{Pl}}{\rho_\Lambda}$  так велико в силу гигантского числа массивных гравитонов в наблюдаемой Вселенной.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исторический опыт учит, что наиболее интересные открытия в физике происходят при переходе к новым характерным масштабам величин, описывающим изучаемую проблему. Граница области, в которой действует определённая парадигма, определяется фундаментальными константами. Так, например, переход от классической механики к релятивистской контролируется скоростью света  $c$ , а переход от классической механики к квантовой – постоянной Планка  $\hbar$ . Переход на планковский масштаб многократно сложнее как количественно (эта область отделена от достигнутых в настоящее время параметров на десятки порядков), так и качественно (совместима ли концепция непрерывного пространства-времени с квантовой механикой). Перечисленные трудности заставляют искать обходные пути решения проблемы. В частности, в качестве предварительного этапа может быть рассмотрена феноменология ФПМ. Феноменология как способ учёта квантовых проявлений классической гравитации позволила получить два фундаментальных результата: минимальную длину и пространственно-временную пену.

В рамках изучения феноменологии ФПМ мы получили следующие новые результаты:

1. Используя предельную мощность для перехода от набора фундаментальных констант  $(\hbar, c, G)$  к набору  $(\hbar, c, \eta)$ , была построена система модифицированных планковских единиц. При таком переходе

численные значения планковских единиц сохраняются, однако открываются новые интересные возможности для интерпретации полученных результатов.

2. В терминах модифицированных планковских единиц поучены ограничения на параметры произвольных квантовых часов.

3. Доказана точная эквивалентность голографического принципа и принципа максимальной силы.

В заключение мы кратко остановимся на ближайших перспективах исследований в области феноменологии ФПМ. Эти исследования можно разделить на две группы, преследующие различные цели. Первая группа ставит во главу угла экспериментальный поиск квантовых проявлений классической гравитации, в то время как вторая сосредоточивает внимание на более принципиальном вопросе: существует ли вообще такой объект исследования как квантовая гравитация.

Обсудим вначале планируемые эксперименты по поиску квантовых проявлений классической гравитации. Эти эксперименты ещё совсем недавно считались невозможными и относились к классу мыслительных экспериментов. Наиболее близки к реализации астрофизические эксперименты. Астрофизика представляет ряд возможностей сделать слабые гравитационные эффекты наблюдаемыми (по крайней мере, в недалёком будущем). В частности можно:

1) использовать коммулятивные эффекты и тогда слабые эффекты накопятся за длительное время воздействия;

2) наблюдать частицы сверхвысоких энергий, для которых новые эффекты могут быть намного сильнее.

Вселенная предоставляет нам обе эти возможности.

Особый интерес представляют планируемые эксперименты по определению статуса квантовой гравитации. Недавно были опубликованы два проекта таких экспериментов [90, 91], близких по постановке, но отличающихся по реализации. Предполагается, что эксперименты дадут возможность определить, могут ли два объекта (два микроалмаза), между которыми существует только гравитационное взаимодействие, находиться в запутанном состоянии, т. е. в состоянии квантовой суперпозиции. Если запутанное состояние будет реализовано, то, по мнению авторов, это будет означать, что единственная сила, действующая между ними (гравитация), представляет квантовое взаимодействие. Однако проблема определения статуса квантовой гравитации настолько сложна, что даже положительный результат экспериментов не приведёт к окончательному решению проблемы. Ф. Дайсон, наиболее авторитетный противник квантовой гравитации, так прокомментировал планируемые эксперименты: «Предлагаемые эксперименты безусловно представляют большой интерес, однако мне непонятно, смогут ли они разрешить вопрос существования квантовой гравитации. Вопрос, который я задавал – наблюдаем ли отдельный гравитон – это другой вопрос, и он может иметь другой ответ».

Работа была поддержана ДФФД проект № 32367.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Planck M. Über irreversible Strahlungsvorgänge. 5 Mitteilung // S.-B. Preuß. Akad. Wiss. – 1899. – S. 440.
2. Amelino-Camelia G., Are we at the dawn of quantum-gravity phenomenology? // Lect. Notes Phys. – 2000. – V. 541. – P. 1.
3. Amelino-Camelia G. Quantum Gravity Phenomenology // Living Rev. Rel. – 2013. – V. 16. – P. 5.
4. Amelino-Camelia G., Planck-length phenomenology // Int. J. Mod. Phys. D – 2003. – V. 10 – P. 1.
5. Cohen A., Kaplan D., Nelson A., Effective Field Theory, Black Holes, and the Cosmological Constant // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 82. – P. 4971.
6. Ng Y.J. and van Dam H., Limitation to quantum measurements of space-time distance // Ann. N. Y. Acad. Sci. – 1995. – V. 755 – P. 579.
7. Ng Y., Various Facets of Spacetime Foam, [arXiv:1102.4109 [gr-qc]].
8. Hossenfelder S., Minimal Length Scale Scenarios for Quantum Gravity // Living Rev. Relativity – 2013. – V. 16. – P. 2.
9. Hossenfelder S., Experimental Search for Quantum Gravity, in Frignanni, V. R., ed., Classical and Quantum Gravity: Theory, Analysis and Applications, (Nova Science Publishers, Hauppauge, NY, 2011). [arXiv:1010.3420 [gr-qc]].
10. Lake N.J., Minimum length uncertainty relations for a dark energy Universe, [arXiv:1712.00271[gr-qc]].
11. Rovelli C., Notes for a brief history of quantum gravity, [arXiv:0006061[gr-qc]].
12. Faraoni V., Three new roads to the Planck scale, [arXiv:1705.09749[gr-qc]].
13. F. Dyson F., in “The Scientist as Rebel” New York Review Books –2006.
14. Chirikov, B.V., Linear and Non-linear Dynamical Chaos The Budker Institute of Nuclear Physics Preprint INP 95–100, 55.
15. Bolotin. Yu., Tur A., Yanovsky V., Chaos: Concepts, Control and Constructive Use, Second Edition. – Berlin: Springer, 2016. –P. 281.
16. Горбунов Д. С., Рубаков В. А. Введение в теорию ранней Вселенной. – Москва – ЛКИ, 2006. – 464 с.
17. Amelino-Camelia G. et al. Potential Sensitivity of Gamma-Ray Burster Observations to Wave Dispersion in Vacuo // Nature – 1998. – V. 393. – P. 763.
18. Pikovski I. et al., Probing Planck-scale physics with quantum optics// Nature Physics – 2012. – V. 8. – P. 393.
19. Barcelo C., Liberati S. Visser M, Analogue Gravity // Living Rev. Rel. – 2005. – V. 8. – P. 122.
20. Jacobson, T., Thermodynamics of spacetime: the Einstein equation of state // Physical Review Letters – 1995. – V. 75. – P. 1260.
21. Schiller C., General relativity and cosmology derived from principle of maximum power or force // International Journal of Theoretical Physics – 2005. – V. 44. – P. 1629.
22. Gibbons G. The Maximum Tension Principle in General Relativity // Found. Phys. – 2002. – V. 32. – P. 1891.
23. Heisenberg W. Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik // Zeitschrift für Physik. – 1927. – V. 43. – P. 172.
24. Veneziano G. A., Stringy nature needs just two constants // Europhys. Lett. – 1986. – V. 2. – P. 199.
25. Amati D., Ciafaloni M., Veneziano G. Can spacetime be probed below the string size? // Phys. Lett. B – 1987. – V. 197 – P. 81.
26. Witten E. Reflections on the fate of spacetime // Phys. Today – 1996. – V. 49. – P.24.
27. Polchinski J. String Theory. – Cambridge, UK: Cambridge University Press. – 1998.
28. Adler R., Chen P. and Santiago D. The Generalized uncertainty principle and black hole remnants // Gen. Rel. Grav. – 2001 – V. 33. – P. 2101.
29. Adler R. Six easy roads to the Planck scale // Am. J. Phys. – 2010. – V. 78 – P. 925.
30. Penrose R. Naked singularities // Ann. N. Y. Acad. Sci. – 1973 – V. 224 – P. 25.
31. Bronstein M. Quantentheories schwacher Gravitationsfelder // Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion – 1936. – V. 9. – P. 140.
32. Бронштейн М. Квантование гравитационных волн // ЖЭТФ –1936. – V. 6 – P. 619.
33. Barrow J., Gibbons G. Maximum Tension: with and without a cosmological constant // Mon. Not. Roy. Astron. Soc. – 2014. – V. 446. – P. 3874.

34. Томилин К., Фундаментальные физические постоянные в историческом и методологическом аспектах, Москва: Физматлит, – 2006. – 368 с.
35. Окунь Л. Б., Фундаментальные константы физики // УФН – 1991. – т. 161. – № 9. – 530 с.
36. Duff M, Okun L.B., Veneziano G . Trialogue on the number of fundamental constants // JHEP – 2002. – V. 0203. – P. 023.
37. Bolotin Yu. L., Yanovsky V. V. Limit values as an universal method of description of physical reality // Odessa Astronomical Publications – 2017. – V. 30 – P. 1.
38. Bolotin Yu., Yanovsky V // Modified Planck units , arXiv: physics.gen-p/1701.09710
39. Wheeler J. A., in Relativity, Groups and Topology, edited by B. S. DeWitt and C. M. DeWitt - New York: Gordon & Breach, – 1963. – 315 p.
40. Salecker H., Wigner E. Quantum Limitations of the Measurement of Space-Time Distances // Phys. Rev. – 1958. – V. 109 – P. 571.
41. Karolyhazy F., Gravitation and quantum mechanics of macroscopic objects // Nuovo Cim. – 1966. – V. A 42. – P. 390.
42. Ng Y. From computation to black holes and space-time foam // Phys. Rev. Lett. – 2002. – V. 86. – P. 2946.
43. Burderi L., Di Salvo T., and Iaria R., Quantum clock: A critical discussion on space-time // Physical Review – 2016. – V. D 93. – P. 064017.
44. Bolotin Yu., Cherkaskiy V., Tur A. and Yanovsky V., An ideal quantum clock and Principle of maximum force // [arXiv: gr- qc/1604.01945].
45. Weinberg S., The Cosmological Constant Problem // Rev. Mod. Phys. – 1989. – V. 61. – P. 1.
46. Peebles P. and Ratra B., The Cosmological constant and dark energy // Rev. Mod. Phys. – 2003. – V. 75. – P. 559.
47. Carroll S., The Cosmological constant // Living Rev. Rel. – 2001. – V. 4. – P. 1.
48. Liddle A., Lyth D. Cosmological Inflation and Large-Scale Structure - Cambridge: University Press – 2000. – 399 p.
49. Chavanis P-H. Models of universe with a polytropic equation of state: II. The late universe // Eur. Phys. J. Plus – 2001. – V. 129. – P. 38.
50. Cohen A., Kaplan D., Nelson A., Effective Field Theory, Black Holes and the Cosmological Constant // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 82. – P. 4971 Phys. J. Plus – 2001. – V. 129 – P. 38.
51. Ng Y., Selected topics in Planck-scale physics // Mod. Phys. Lett. – 2003. – V. A1 8. – P. 1073.
52. Bremermann H, Optimization through Evolution and Recombination, in Self-organizing Systems, eds. Washington, DC: Spartan Books, 1962. P. 93.
53. Margolus N., Levitin L. // The maximum speed of dynamical evolution, Physica – 1998. – V. D 120. – P. 188.
54. Gorelik G., Bremermann's Limit and cGh-physics, [arXiv: gr-qc/0910.3424]
55. Lloyd S., Computational capacity of the universe // Phys. Rev. Lett. – 2002. – V. 88 – P. 237901.
- [56]. G.'t Hooft, Dimensional reduction in quantum gravity, arXiv:gr-qc/9310026.
57. Susskind L. The World As A Hologram // J. Math. Phys. – 1995. – V. 36. – P. 6377.
58. Verlinde E., On the Origin of Gravity and the Laws of Newton // JHEP – 2011. – 1104:029
59. Bolotin Yu.L, Cherkaskiy V.A., Principle of maximum force and holographic principle: two principles or one? [gr-qc]1507.02839.
60. Bekenstein J. The Limits of Information // Stud. Hist. Philos. Mod. Phys. – 2001. – V. 32. – P. 511.
61. Барьяхтар В.Г., Болотин Ю.Л., Тур А.В., Яновский В.В., Физическая ткань Вселенной. – Харьков: НАН Украины – 2010. – 510 с.
62. Landauer R. Dissipation and noise immunity in computation and communication // Nature – 1988. – V. 335 – P. 779.
63. Brandt H., Maximal proper acceleration relative to the vacuum // Lett. Nuovo Cimento – 1983. – V. 38. – P. 522.
64. Brandt H., The maximal acceleration group // in Proceedins, XiIth International Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics, W. W. Zachary, ed. (World Scientific, Singapore – 1984). – P. 519.
65. Brandt H., Maximal-acceleration invariant phase space // in The Physics of Phase Space, Y. S. Kim and W. W. Zachary, eds. (Springer, Berlin, 1987), P. 414–416.
66. Brandt H. Maximal proper acceleration and the structure of spacetime // Foundations of Physics Letters. – 1989. – V. 2 – P. 17.

67. Schwinger J. On Gauge Invariance and Vacuum Polarization // *Phys. Rev.* – 1951. – V. 82. – P. 664.
68. Davies P. Scalar particle production in Schwarzschild and Rindler metrics // *J. Phys.* – 1975. – V. A 8 – P. 609.
69. Unruh W. Notes on black-hole evaporation // *Phys. Rev.* – 1976. – V. D 14. – P. 870.
70. Birrell N. and Davies P., *Quantum Fields in Curved Space.* – Cambridge: Cambridge University Press – 1982. – 352 p.
71. Sakharov A.D., Maximum temperature of thermal radiation // *JETP Lett.* – 1966. – V. 3. – P. 288.
72. Sakharov A.D., *The scientific works of A. D. Sakharov* – New –York: Marcel Dekker, 1982.
73. Caianiello E., Is there a maximal acceleration? // *Lett. Nuovo Cimento.* –1981. – V. 32. – P. 65.
74. Caianiello E., Maximal acceleration as a consequence of Heisenberg's uncertainty relations // *Lett. Nuovo Cimento* – 1984. – V. 41. – P. 370.
75. Chang L.N., Minic D., Okamura N. and Takeuchi T., The Effect of the minimal length uncertainty relation on the density of states and the cosmological constant problem // *Phys. Rev.* – 2002. – V. D65. – P. 125028.
76. Chang L.N., Minic D., Okamura N. and Takeuchi T., Exact solution of the harmonic oscillator in arbitrary dimensions with minimal length uncertainty relations // *Phys. Rev.* – 2002. – V. D65. – P. 125027.
77. Kempf A., Non-pointlike particles in harmonic oscillators // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 1997. – V. 30. – P. 2093.
78. Bouaziz D. and Ferkous N., Hydrogen atom in momentum space with a minimal length // *Phys. Rev.* – 2010. – V. A 82. – P. 022105.
79. Hossenfelder, S., Bleicher, M., Hofmann, S., Ruppert, J., Scherer, S. et al., Collider signatures in the Planck regime // *Phys. Lett.* – 2003. – V. B575. – P. 85.
80. Stetsko M., Harmonic oscillator with minimal length uncertainty relations and ladder operators // *Phys. Rev.* – 2006. – V. A74 – P. 062105.
81. Amelino-Camelia G., Doubly Special relativity // *Nature* – 2002. –V. 418. – P. 34.
82. Gorbunov D. S. and V. A. Rubakov V. A., *Introduction to the Theory of the Early Universe: ot Big Bang Theory.* – NY: World Scientific, Hackensack – 2011. – P. 488.
83. Новиков И. Д., Фролов В.П. *Физика чёрных дыр.* – Москва: Наука, 1986. – 327 с.
84. Hawking S. W., Black hole explosions? // *Nature* – 1974. – V. 248 – P. 30.
85. Hawking S., W. Particle creation by black holes // *Communications in Mathematical Physics* – 1975. – V. 43. – P. 199.
86. Tryon E.P., Is the Universe a Vacuum Fluctuation? // *Nature (London)* – 1973. – V. 246. – P. 396.
87. Fomin P. I., Gravitational instability of vacuum and the cosmological problem // *Dokl. Akad. Nauk Ukr. SSR.* – 1975. – V. 9A. – P. 831.
88. Weinberg, S., *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity.* – New John Wiley & Sons. – 1972. – 619 p.
89. Novello M., The mass of the graviton and the cosmological constant puzzle // *PoSIC.* – 2006. – 2006:009.
90. Bose S., et al. Spin entanglement witness for quantum gravity // *Phys. Rev. Lett.* – 2017. – V. 119. – 240401.
91. C. Marletto and V. Vedral Gravitationally Induced Entanglement between Two Massive Particles is Sufficient Evidence of Quantum Effects in Gravity // *Phys. Rev. Lett.* – 2017. – V. 119. – 240402.

УДК 53.01

PACS numbers: 52.35.Mw; 47.35.Bb ; 47.55.pb; 68.35.B

## ЧАСТЬ V

---

# МОДУЛЯЦИОННЫЕ НЕУСТОЙЧИВОСТИ

*Куклин В. М.*

*Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина  
г. Харьков, пл. Свободы, 4, 61022, Украина*

**В** обзоре обсуждаются различные случаи развития модуляционной неустойчивости интенсивных периодических структур в волновых и в неволновых средах. Особенностью модуляционной неустойчивости является возникновение практически симметричного относительно волнового вектора волны большой амплитуды спектра часто несобственных для данной среды возмущений. В случае большого уровня диссипации вблизи и выше порога неустойчивость представляет собой каскад процессов с увеличивающимся временем развития и все большим характерным масштабом. Спектр возмущений в развитом режиме оказывается практически линейчатым. Формируя при этом самоподобную структуру большой пространственной четкости. При незначительном уровне диссипации вдали от порога волновое движение формирует волны и огибающие аномальной амплитуды, в максимуме превышающие среднюю амплитуду волнения в три раза. Форма огибающей или волнового пакета подобна форме бризера, причем динамика во времени также подобна. Бризеры являются автоволнами в консервативных волновых системах, здесь же формирование подобного бризеру волнового пакета происходит за счет вынуждаемой накачкой интерференции возникающих в этой окрестности стоячих волн разной длины, скорость которых оказывается больше или меньше скорости основного волнового движения. Показано формирование самоподобных пространственных структур в развитой конвекции тонкого слоя жидкости или газа вследствие развития модуляционной неустойчивости. При этом тороидальные вихри конвекции генерируют полоидальные вихри большого

*масштаба – эффект гидродинамического динамо. Представлены экспериментальные результаты исследования возникающих самоподобных структур на поверхности графита. Обсуждаются особенности развития параметрических неустойчивостей. Характер самосогласованных параметрических неустойчивостей подобен процессам модуляционной неустойчивости.*

Введение

Раздел 1. Самоподобные структуры и модуляционная неустойчивость

Раздел 2. Возникновение волн аномальной амплитуды

Раздел 3. Волны-убийцы в океане

Механизм образования волн аномальной амплитуды

Раздел 4. Модуляционная неустойчивость слоя конвекции и эффект гидродинамического динамо

Раздел 5. Структуры на поверхности и в объеме кристаллов

Раздел 6. Параметрическая и/или модуляционная неустойчивости.

Литература

## В В Е Д Е Н И Е

Обычно модуляционная неустойчивость проявляет себя в форме крупномасштабной модуляции однородного волнового движения с определенной частотой и волновым вектором. Причем модуляция часто представляет собой набор стоячих волн с некоторым разбросом скоростей, движущихся относительно основной волны, амплитуда которой даже в развитой фазе неустойчивости остается значительной. Спектр модуляционной неустойчивости чаще всего симметричный относительно спектральной линии интенсивного волнового движения. Можно рассматривать случай распада периодического во времени волнения с очень большим пространственным периодом, который обычно относят к параметрическому воздействию. Понятно, что можно ожидать развития модуляционной неустойчивости и для периодического возмущения значительной амплитуды в случае, когда его частота равна нулю. Это модуляционная неустойчивость в неволновой среде.

Модуляционная неустойчивость в волновых средах была обнаружена авторами работ [1–4]. Оказалось, что периодические волны конечной амплитуды в средах с наиболее распространенным видом локальной кубической нелинейности являются неустойчивыми с возбуждением двух боковых спектров вынужденных возмущений, соответственно с большей и меньшей длиной волны. Развитие такой неустойчивости приводит к амплитудной и фазовой модуляции начальной волны. Это впоследствии определило название этого типа неустойчивостей – модуляционные [5].

В неоднородных случаях кроме модуляционных неустойчивостей, конечно, возможны и процессы самофокусировки [6].

Замечательным свойством модуляционной неустойчивости вблизи порога оказалась ее способность создавать распределенные самоподобные структуры [7]. Действительно, в условиях баланса механизмов генерации основной интенсивной волны и механизмов поглощения волновой энергии развитие модуляционной неустойчивости приводит к формированию стационарных самоподобных структур, пространственные масштабы и интенсивность которых обусловлена нелинейным резонансным взаимодействием между основной волной и возбуждаемыми боковыми сателлитами.

Взаимодействие возникающих в результате неустойчивости связанных резонансными условиями пар возмущений ( $ck = k_0 \pm \Delta k$ ) между собой в этих условиях ослаблено, они в большей степени взаимодействуют с основной волной, причем их действие на основную волну носит интегральный характер. В работах [7] были отмечены две основные черты модуляционных неустойчивостей, поддерживаемых внешним источником волнового движения в средах и системах с большим уровнем поглощения энергии. Во-первых, в режиме насыщения модуляционной неустойчивости в результате обсуждаемых ниже механизмов конкуренции мод формируются узкие спектры боковых возмущений, и в пределе больших времен развитая пространственная структура приобретает характерный линейчатый спектр. Во-вторых, теоретически было предсказано, что формирование линейчатого спектра облегчает выполнение условий для следующей, уже вторичной модуляционной неустойчивости, которая развивается в рамках подобного сценария [8]. Причем промодулированная в результате развития первичной модуляционной неустойчивости волна (или структура) должна подвергаться модуляции из-за вторичной неустойчивости уже на существенно большем масштабе [8, 9].

Результаты численных исследований такой многомодовой системы, качественно подтвердили сделанные авторами [8] предположения и их теоретические выводы о возникновении мультифрактальной структуры возмущений. Кроме этого, было обнаружено, что в режиме насыщения неустойчивости интегральная энергия спектра стабилизируется, что свидетельствует о формировании долгоживущего квазиустойчивого физического состояния, и остается заметно меньше энергии основной волны.

В условиях слабого поглощения энергия спектра модуляционной неустойчивости достигает значений, сравнимых с начальной энергией волны конечной амплитуды. Показано, что развитая авторами [10, 11] и модифицированная в работах [12, 13] S-теория позволяет с достаточной степенью точности описывать начальную стадию нелинейного режима процесса модуляционной неустойчивости в модели Лайтхилла-НУШ, позволяя количественно оценить максимальную амплитуду огибающей поля волн, время появления максимума огибающей и энергию, сосредоточенную в спектре возмущений. В одномерном случае макси-

мальная амплитуда аномальной волны может в три раза превышать среднюю амплитуду волн. В двумерном случае для сходящейся волны максимальная амплитуда огибающей способна оказаться заметно больше [14].

Так как система находится вдали от порога и диссипация слабая, то описания процессов в условиях интенсивного волнения, развитые в работах [15–17], могут оказаться применимы к рассматриваемому случаю. Однако найденные авторами [15–17] нестационарные решения-автоволны, которые существуют в волновой среде с бесконечной энергией, не проясняют природу своего происхождения, обмен энергией между этими возмущениями и окружающей средой не рассматривается. Кроме того, периодические возмущения-бризеры (breathers), как показали эксперименты и наблюдения, обычно не реализуются. Тем не менее одиночный короткоживущий бризер – солитон Перегринна [16], оказывается в значительной степени подобен полученному в [13] решению, описывающему возникающую в результате модуляционной неустойчивости волну аномальной амплитуды. Природа образования волновых пакетов аномальной амплитуды, подобных бризеру, связана с формированием бегущих навстречу друг другу возмущений, представляющих собой наборы стоячих волн, как показано в результате теоретических расчетов [18] и наблюдалось в экспериментах [19]. Так, например, в технологическом университете Гамбурга был проведен эксперимент в резервуаре с водой для волнового движения и обнаружено соответствие возникшей волны аномальной амплитуды с солитоном Перегринна [20].

Изучение природы появления волн аномальной амплитуды важно для судоходства в океане, где большинство современных судов может выдержать до 15 тонн на квадратный метр, и в случае даже сильного волнения это соответствует более чем двукратному запасу прочности. Однако аномально большие волны, интенсивность которых почти на порядок превосходит среднюю интенсивность волнового движения способны вызвать давление до сотни тонн на квадратный метр [21].

Как уже отмечалось, возможна модуляционная неустойчивость и в неволновой периодической системе. Ниже рассмотрено развитие конвекции в тонком слое жидкости или газа с плохо проводящими тепло границами и с градиентом температуры. Подобные условия реализуются, например, в тонкой облачности. Вблизи порога конвективной неустойчивости формируется пространственно однородное поле конвективных ячеек, которое оказывается модуляционно неустойчивым. Именно линейчатый спектр конвективных тороидальных вихревых ячеек создает условия для развития крупномасштабной модуляционной неустойчивости. Представлено формирование самоподобных пространственных структур в развитой конвекции тонкого слоя жидкости или газа вследствие развития модуляционной неустойчивости. При этом тороидальные вихри конвекции генерируют полоидальные вихри большого масштаба – эффект гидродинамического динамо [22–24]. Подобное явление возможно и в локальных областях со спиральной турбулентностью [25].

Представлены экспериментальные результаты исследования возникающих самоподобных структур на поверхности графита. Важным в полученных экспериментальных данных является не столько факт наличия вертикальной составляющей модуляции, а скорее, несомненное подобие первичной структуры – элементарной ячейки и вторичной структуры – модуляции поверхности электронной плотности [26]. Обсуждается природа модуляционной неустойчивости, которая приводит к образованию подобных самоподобных поверхностных структур за счет потенциальной энергии напряжений внутри кристалла [27].

Рассмотрены особенности развития параметрических неустойчивостей при воздействии на среду однородных в пространстве полей. Обычно параметрическими неустойчивостями называются процессы, когда некоторый параметр системы испытывает высокочастотные осцилляции как в уравнении Матье (или так называемый мультипликативный шум, как в уравнении Хилла) и тем самым вызывает рост возмущений. При этом может возникать и обратное воздействие возмущений на источники осциллирующих параметров или мультипликативного шума (самосогласованная система). Подобная неустойчивость была рассмотрена в работах [10–11] – это так называемая параллельная накачка спиновых волн. То есть переменное однородное в пространстве магнитное поле возбуждало спиновые волны в образцах, причем параметры уравнений для возмущений содержали мультипликативную составляющую.

Не трудно увидеть аналогию обсуждаемого выше случая с возбуждением однородным в пространстве интенсивным ленгмюровским полем спектра мелкомасштабных ленгмюровских волн и ионных возмущений в плазме в моделях В. Е. Захарова [28] и В. П. Силина [29]. То есть формально подобная неустойчивость является самосогласованной параметрической. Однако характер такой неустойчивости весьма подобен процессу неустойчивости модуляционной, тем более, что в результате действительно появляется мелкомасштабная модуляция плотности плазмы. Поэтому использование и такого названия можно считать приемлемым.

Здесь полезно заметить, что нелинейное затухание интенсивных ленгмюровских волн, которое приводит к нагреву плазмы, и традиционно поясняется затуханием Ландау в возникающих коллапсирующих кавернах плотности плазмы, по-видимому лишь в некоторой степени имеет место. Показано [30, 31], что определяющим механизмом передачи энергии поля ионам и их дальнейшей термализации является многократное рассеяние на многочисленных возникающих при неустойчивости неоднородностях поля (так это рассматривалось, например, в [32]).

## 1. САМОПОДОБНЫЕ СТРУКТУРЫ И МОДУЛЯЦИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ

Обсудим характер развития модуляционной неустойчивости волны конечной амплитуды поддерживаемой внешним источником в условиях

конечного уровня поглощения волновой энергии в среде. Для описания этих режимов используем модифицированную S-теорию, учитывающую резонансные взаимодействия возмущений с основной волной и взаимодействия этих возмущений между собой. Покажем, что в этих режимах возможно возникновение долгоживущих состояний модулированной волны с линейчатыми спектрами, которые являются причиной развития следующих каскадов неустойчивости. При этом может сформироваться самоподобная пространственная волновая структура на разных масштабах, что и подтвердили результаты численного моделирования.

Рассмотрим неустойчивость монохроматической волны

$$A(x, t) \cdot \exp \{i\omega t - ikx\} \quad (1.1)$$

в волновой среде со слабой дисперсией и локальной кубической нелинейностью, где  $A(x, t)$  – медленно меняющаяся ее комплексная амплитуда. В общем случае, если известна дисперсия системы

$$\omega = \omega_0 + \beta \cdot \vec{k}^2 + \alpha |A|^2, \quad (1.2)$$

то уравнение для изменения комплексной амплитуды  $A$  можно записать в виде

$$\frac{\partial}{\partial t} A = i\omega_0 A - i\beta \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} A + i\alpha A |A|^2, \quad (1.3)$$

или в одномерном случае

$$\frac{\partial}{\partial t} A = i\omega_0 A - i\beta \frac{\partial^2}{\partial x^2} A + i\alpha A |A|^2. \quad (1.4)$$

Подобная дисперсия характерна для ленгмюровских волн в плазме и колебаний в плазменных волноводах в соответствующей нормировке

$$\omega = \omega_0 + \vec{k}^2 - |A|^2. \quad (1.5)$$

Критерий Лайтхилла [1],

$$(\partial^2 \omega / \partial k^2)^{-1} \cdot \partial \omega(|A|^2) / \partial |A|^2 < 0, \quad (1.6)$$

согласно которому волна (модуляционно) неустойчива в направлении своего распространения, в этом случае оказывается выполнен.

Ниже рассмотрим случай наличия сбалансированных источника и стока (распределенного вывода, поглощения или диссипации) энергии волны. Уравнение Лайтхилла, описывающее медленную эволюцию огибающей колебаний в этих условиях принимает вид

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\delta A - i \frac{\partial^2 A}{\partial x^2} - iA |A|^2 + g, \quad (1.7)$$

где  $\delta$  – декремент поглощения и  $g$  – внешний источник волновой энергии. Медленно меняющаяся со временем амплитуда колебаний  $A(t, x)$  может быть представлена в виде спектра возмущений

$$\sum_{n \neq 0} u_n(t) \cdot \exp\{i\varphi_{k_n}(t)\} \cdot \exp\{i\omega_0 t - ik_n x\}, \quad (1.8)$$

где  $u_n(t) \cdot \exp\{i\varphi_{k_n}(t)\}$  – медленно меняющаяся комплексная амплитуда  $n$ -ной моды спектра. Реальное поле представляет собой модулированную волну на частоте  $\omega_0$ . Поэтому для восстановления вида волнового поля следует выражение (1.8) умножить на  $\exp\{i\omega_0 t\}$ . Выделяя отвечающий основной волне «быстрый» фазовый множитель  $\exp\{i\omega_0 t - ik_0 x\}$ , получим в этом случае поле колебаний как произведение

$$A = \exp\{i\omega_0 t - ik_0 x\} \cdot \{u_0 \exp[i\phi_{k_0}] + \sum_{n \neq 0} u_n \exp[i\phi_{k_n} - i(k_n - k_0)x]\}, \quad (1.9)$$

где  $\exp\{i\omega_0 t - ik_0 x\}$  – быстро меняющаяся фаза.

Часто используют несколько иной вид представления поля, выделяя полную фазу основной волны  $\exp\{i\omega_0 t - ik_0 x + i\phi_{k_0}\}$

$$A = \exp\{i\omega_0 t - ik_0 x + i\phi_{k_0}\} \cdot \{u_0 + \sum_{n \neq 0} u_n \exp[i(\phi_{k_n} - \phi_{k_0}) - i(k_n - k_0)x]\} \quad (1.10)$$

В случае модуляционной неустойчивости монохроматической волны большой амплитуды речь идет только об одной волне, которая характеризуется фазовой  $v_f = \omega/k$  и групповой  $v_g = \partial\omega / \partial k$  скоростями. В системе отсчета, движущейся с групповой скоростью волны, уравнение, описывающее поведение огибающей волнового поля, возникающего при модуляции волны с начальной комплексной амплитудой  $u_0$  при малых амплитудах возмущений  $|u_k| \ll |u_0|$  принимает вид

$$\frac{\partial u_{k_{1,2}}}{\partial \tau} + \delta u_{k_{1,2}} + i \frac{\partial^2 u_{k_{1,2}}}{\partial \zeta^2} + i \{ |u_{k_{1,2}}| |u_0|^2 + u_{k_{2,1}}^* u_0^2 \} = 0, \quad (1.11)$$

где  $\delta$  – декремент поглощения в выбранных масштабах времени  $\tau$  и координаты  $\zeta$ . Не трудно видеть, что взаимодействие двух возмущений  $u_{k_1}$  и  $u_{k_2}^*$  происходит с потоком увлечения пропорциональным  $|u_0|^2$  и второй гармоникой волны, пропорциональной  $u_0^2$ . Последнее слагаемое правой части (1.11) в фигурной скобке показывает, что наиболее эффективно, по крайней мере на линейной по возмущениям ( $|u_0| \gg |u_{k_{1,2}}|$ ) стадии модуляционной неустойчивости, взаимодействуют пространственные моды<sup>4</sup> с волновыми векторами, удовлетворяющие пространственно-временному синхронизму  $2k_0 = k_1 + k_2$ , где  $k_1 = k_0 + K$ ,  $k_2 = k_0 - K$ ,  $k_0 \gg |K|$ .

Запишем систему взаимодействующих мод, причем уравнение для  $u_{k_2}^*$  получим, используя комплексно сопряженное уравнение (1.11), где заменим индексы

$$\frac{\partial u_{k_1}}{\partial \tau} + \delta u_{k_{1,2}} + i \frac{\partial^2 u_{k_1}}{\partial \zeta^2} + i \{ |u_{k_1}| |u_0|^2 + u_{k_2}^* u_0^2 \} = 0, \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial u_{k_2}^*}{\partial \tau} + \delta u_{k_2}^* - i \frac{\partial^2 u_{k_2}^*}{\partial \zeta^2} - i \{ |u_{k_2}^*| |u_0|^2 + u_{k_1} u_0^2 \} = 0. \quad (1.13)$$

Полагая зависимость от времени и координаты в виде  $\exp\{-i\Omega\tau + iK\zeta\}$ , представим дисперсионное уравнение процесса

$$D(\Omega, K) = (\Omega + i\delta + K^2 - |u_0|^2)(\Omega + i\delta - K^2 + |u_0|^2) + |u_0|^4 = 0, \quad (1.14)$$

откуда получим, что абсолютная неустойчивость в системе отсчета, которая движется с групповой скоростью волны относительно лабораторной, обладает инкрементом, равным

$$\text{Im } \Omega = -\delta + \sqrt{K^4 - 2K^2 |u_0|^2}, \quad (1.15)$$

<sup>4</sup> Важно отметить, что возмущения с волновыми числами  $k_1$  и  $k_2$  обыкновенно не являются собственными волнами системы, то есть не способны существовать в этой среде самостоятельно без поддержки волны с волновым числом  $k_0$ .

причем с максимальным инкрементом

$$(\text{Im}\Omega)_{\text{MAX}} = -\delta + |u_0|^2,$$

растут возмущения (см. рис. 1.1), волновое число которых  $K^2 = K_0^2 + |u_0|^2$ . Ширина спектра определяет локализацию этой модуляции. Значение  $(K_0 - \delta) = 2\pi / L$  отвечает области локализации модуляции  $L$ . Положение максимума инкремента определяет средний пространственный период модуляции  $T$ , то есть  $K_0 = 2\pi / T$ . Как показано ниже<sup>5</sup> модуляция представляет собой пакет стоячих волн, смещающихся друг относительно друга в системе отсчета, движущейся с фазовой скоростью основной волны. Скорость смещения этих стоячих волн в этой системе отсчета обусловлена изменением амплитуды основной волны.

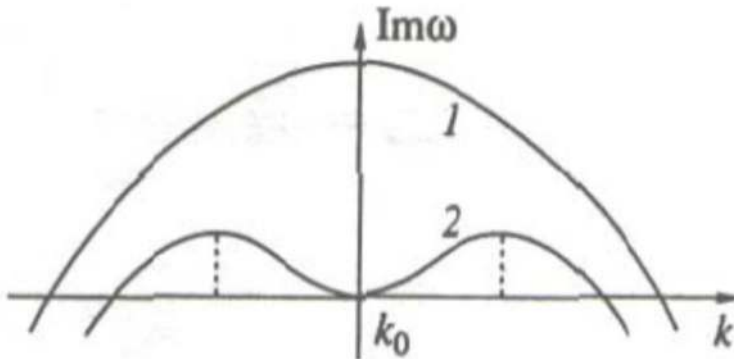


Рис. 1. 1 — инкремент основной волны (периодической структуры),  
2 — инкремент модуляционной неустойчивости уже развитой основной волны  
(периодической структуры)

Порог неустойчивости не трудно определить

$$|u_0|_{\text{thr}} = \delta^{1/2}. \quad (1.16)$$

Можно записать огибающую (модуляцию) поля в виде

$$a = \{u_0 \exp[i\phi_0] + \sum_{n \neq 0} u_n \exp[i\phi_n - iK_n \xi]\}, \quad (1.17)$$

<sup>5</sup> См. пояснение в разделе 3 после рис. 3.12.

где  $\phi_k \equiv \phi_n(K_n)$ ,  $u_k \equiv u_n(K_n)$ , а для волнового вектора в области линейной неустойчивости справедливо выражение

$$K_n^2 = 1 + \left( \frac{2|n| - N}{N} \right) \sqrt{1 - \delta}.$$

При учете нелинейных по амплитуде возмущений слагаемых уравнения для основной моды и мод неустойчивых спектров можно представить в следующем виде

$$\frac{d\phi_0}{dt} = -u_0^2 - 2 \sum_{m>0}^N (u_m^2 + u_{-m}^2) - 2 \sum_{m>0}^N u_m u_{-m} \cos \Phi_m, \quad (1.18)$$

$$u_0 = -g \left\{ -\delta - 2 \sum_{m>0}^N u_m u_{-m} \sin \Phi_m \right\}^{-1}, \quad (1.19)$$

$$\frac{du_n}{dt} = \left\{ -\delta + u_0^2 \frac{u_{-n}}{u_n} \sin \Phi_n \right\} u_n, \quad (1.20)$$

$$\frac{d\phi_n}{dt} = K_n^2 - u_0^2 \frac{u_{-n}}{u_n} \cos \Phi_n - 2 \left[ u_0^2 + \sum_{m>0}^N (u_m^2 + u_{-m}^2) - \frac{1}{2} u_n^2 \right]. \quad (1.21)$$

В начале развития процесса, когда все фазы начальных возмущений случайно распределены (и особенно вблизи порога неустойчивости) скорость изменения амплитуд мод оказывается намного меньше скорости изменения их фаз. Потому можно считать, что левая часть уравнения (1.21) всегда мала. Откуда можно найти значение установившейся или устойчивой фазы  $\Phi_n^*$  для каждой пары возмущений, взаимодействующих с основной волной, которое определяется из выражения

$$\cos(\Phi_n^*) \approx (2K_m^2 - 2u_0^2) / u_0^2 \left[ \frac{u_{-m}}{u_m} + \frac{u_m}{u_{-m}} \right].$$

Из уравнения (1.20) следует, что при  $\delta = 0$  устойчивые фазы растущих мод находятся в интервале  $0 < \Phi_n^* < \pi$ , максимальный инкремент отвечает значению  $\Phi_n^* = \pi / 2$ . При  $K_m > u_0$  получим  $\Phi_n^* < \pi / 2$ , а при  $K_m < u_0$ , напротив  $\Phi_n^* > \pi / 2$ . При увеличении уровня поглощения  $\delta$  интервал  $\Phi_n^*$  сужается. Собственно, при достижении этого устойчивого значения фазы  $\Phi_n \rightarrow \Phi_n^*$  и начинается рост возмущений.

Учет наиболее эффективных взаимодействий, которые происходят только между симметричными по отношению к накачке модами спектра

$(k_S + k_{-S} = k_n + k_{-n})$  согласно модифицированной S-теории [12–13] приводит к следующим уравнениям

$$\frac{dv_s}{dt} = v_s \left\{ -\delta + u_0^2 \frac{v_{-s}}{v_s} \sin \Phi_s + 2 \frac{v_{-s}}{v_s} \sum_{n \neq s}^N u_n u_{-n} \sin \Psi_{sn} \right\}, \quad (1.22)$$

$$\frac{d\phi_s}{dt} = K_s^2 - 2(u_0^2 + \frac{3}{2}v_s^2 + 2 \sum_{n \neq s}^N u_n^2) - u_0^2 \frac{v_{-s}}{v_s} \cos \Phi_s - 2 \frac{v_{-s}}{v_s} \sum_{n \neq s}^N u_n u_{-n} \cos \Psi_{sn}, \quad (1.23)$$

к которым следует добавить первые два уравнения системы (1.18) – (1.21). Выше использовано обозначение  $\Psi_{sn} = \Phi_s - \Phi_n$ . Здесь для удобства анализа использовано обозначение  $V_s \equiv U_s$  амплитуд мод спектра с волновыми числами  $k_s$ . В развитой стадии неустойчивости данная система уравнений способна описывать не только процессы обмена энергией между модами спектра, но и развитие каскада модуляционных неустойчивостей, результатом которой может быть формирование фрактального спектра возмущений.

Численное решение представленной выше системы дифференциальных уравнений (1.18) – (1.21) демонстрирует возбуждение спектра неустойчивости по обе стороны от основной волны [13]. По мере возбуждения спектра неустойчивости наблюдается модулирование основной моды. Ниже приведены результаты численного моделирования, проведенного при разных уровнях надпороговости  $1 - \delta$ , понимаемой как степень отдаления от порога неустойчивости (1.16). Количество мод  $N$  взято равным 100. При уровне надпороговости  $u_{00} - \delta = 0, 2$ , или, что то же самое, декременте поглощения  $\delta = 0, 8$  (т. к.  $u_{00} = u_0(t = 0) = 1$ ), результат эксперимента следующий.

Вначале наблюдается одна основная мода и в результате нелинейного взаимодействия начинается медленный, но ускоряющийся рост спектра неустойчивости. Значение амплитуд мод неустойчивости на данном этапе мало, поэтому не оказывает существенного влияния на основную волну. При этом малы уровень спектральной дефектности структуры  $D = \frac{2}{u_0^2} \sum_{m>0} u_m^2$  и уровень интенсивности спектра  $I_s = 2 \sum_{m>0} u_m^2$ ,

а интенсивность основной волны  $I_0 = u_0^2$  близка к единице.

Потом производная амплитуд мод спектра неустойчивости по времени достигает своего максимума, быстро формируется спектр возбужденных мод, которые достигают значений, достаточных для эффективного воздействия на основную волну (рис. 1.2–1.3). На данном этапе спектр широкий, амплитуда возбужденных мод составляет 1–5 % от амплитуды

основной, однако их взаимодействие приводит к отклонениям вида основной волны на 15–20 % от правильной синусоидальной формы. При данном процессе наблюдается рост уровня дефектности D.

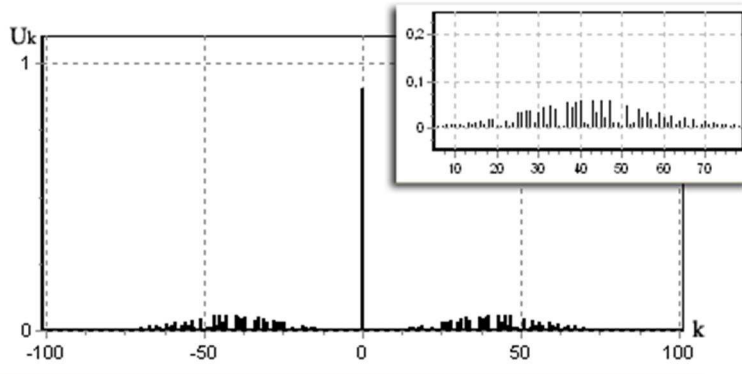


Рис. 1.2. Возбуждение широкого спектра неустойчивости ( $t \approx 50$ ,  $\delta = 0,8$ )

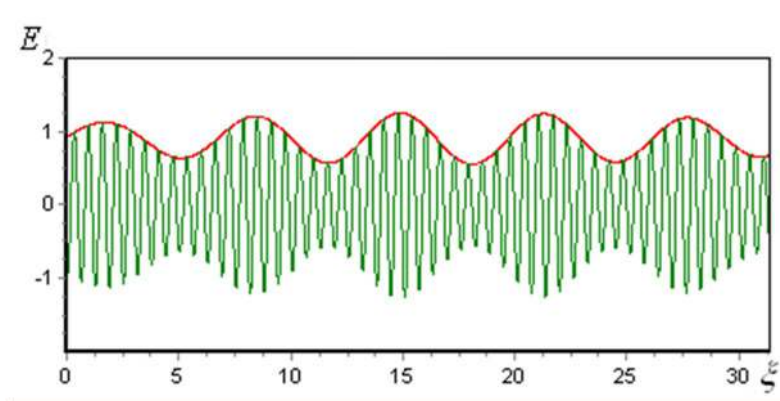


Рис. 1.3. Основная волна, промодулированная модами возбужденного спектра ( $t \approx 50$ ,  $\delta = 0,8$ )

На следующем этапе развития процесса ( $t > 100$ ) наблюдается сужение спектра модуляционной неустойчивости с одновременным увеличением амплитуды возбужденных мод (рис. 1.4). Производная крайних мод спектра принимает отрицательное значение, максимум спектра смещается в сторону основной моды. Далее скорость изменения амплитуды возбужденных мод уменьшается, и система выходит на квазиустойчивое состояние. Увеличение амплитуды возбужденных мод приводит к более заметному воздействию на основную волну (рис. 1.5).

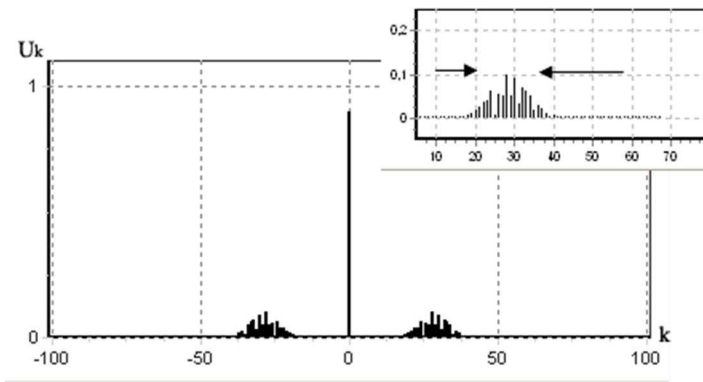


Рис. 1.4. Спектр неустойчивости на заключительной стадии развития  
( $t \approx 300, \delta = 0,8$ )

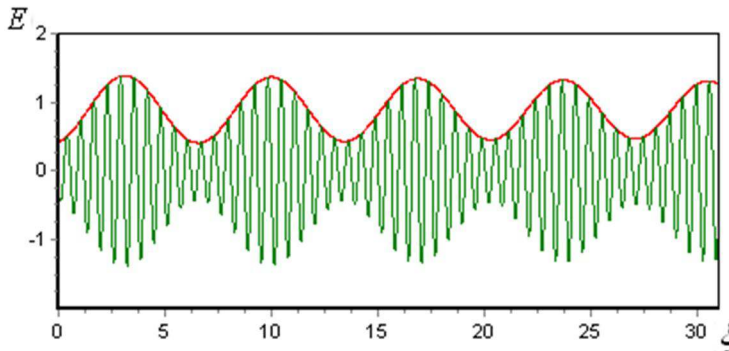


Рис. 1.5. Вид основной волны на заключительной стадии развития спектра  
неустойчивости ( $t \approx 300, \delta = 0,80$ )

Рассмотрим детально процесс формирования спектра и выход системы на квазилинейную стадию в терминах интенсивности мод. Как видно из рис. 1.6 и рис. 1.7 интенсивность основной моды на начальных стадиях процесса заметно уменьшается и при значении  $t \approx 100$  приближается к значению  $\delta$ . Уровни надпороговости  $(1 - \delta)$  ограничивают снизу интенсивность основной моды. Во время уменьшения интенсивности основной моды начинает расти интенсивность спектра возбуждаемых мод, также приближаясь к верхней границе, значение которой зависит от параметра  $\delta$ .

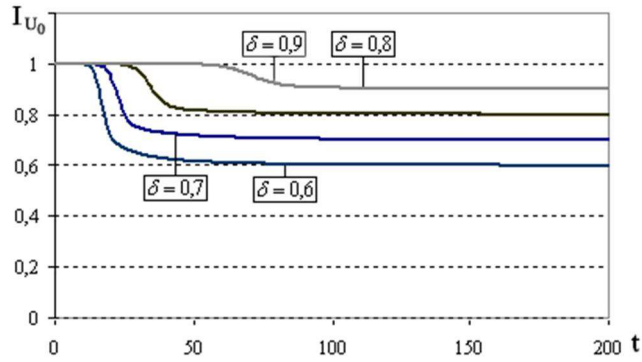


Рис. 1.6. Интенсивность основной моды  $I_0 = u_0^2$  на линейной стадии процесса

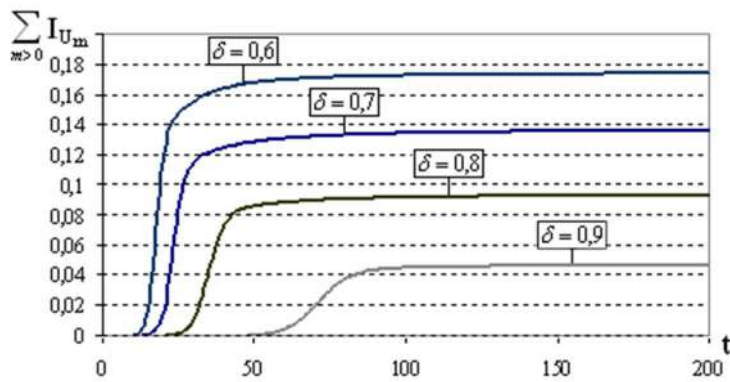


Рис. 1.7. Суммарная интенсивность спектра возбуждаемых мод  $I_s = 2 \sum_{m=0} u_m^2$  на линейной стадии процесса

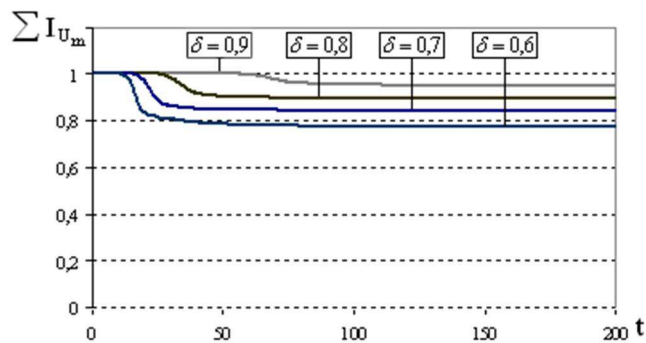


Рис. 1.8. Суммарная интенсивность структуры

При этом суммарная интенсивность не превышает единицы (рис. 1.8) и с развитием неустойчивости уменьшается, ограничиваясь снизу значениями, зависящими от параметра  $\delta$ .

При рассмотрении системы на временах перехода в квазилинейную стадию можно получить зависимость интенсивности мод от значения параметра  $\delta$ .

Численный анализ модели показал, что вблизи порога неустойчивости (1.16), то есть при  $\delta \leq 1$ , интенсивность основной моды на начальных стадиях процесса заметно уменьшается и при значении  $t \approx 100$  приближается к значению  $\delta$ . Во время уменьшения интенсивности основной моды начинает расти интенсивность спектра возбуждаемых мод, также приближаясь к верхней границе, значение которой зависит от параметра  $\delta$ . Такая квазилинейная стадия неустойчивости проявляет себя в условиях, когда интегральные характеристики процесса практически не меняются. При этом скорости изменения амплитуд мод спектра резко уменьшаются. Неизменное значение общей интенсивности системы мод при крайне медленном изменении внутренней её структуры на квазилинейной стадии процесса позволяет говорить о формировании квазиустойчивого долгоживущего физического состояния. Важно отметить, что монотонное уменьшение количества мод спектра, которое наблюдается на квазилинейной стадии процесса эволюции такого состояния, фактически соответствует уменьшению возбужденных степеней свободы вплоть до нескольких (здесь число мод спектра  $N_B$ , см. рис. 1.9).

**Формирование долгоживущего квазиустойчивого состояния.** В режиме развитой неустойчивости дальнейшее изменение интегральной интенсивности не происходит. Можно считать, что нелинейная, а точнее квазилинейная стадия неустойчивости проявляет себя в условиях, когда интегральные характеристики процесса практически не меняются.

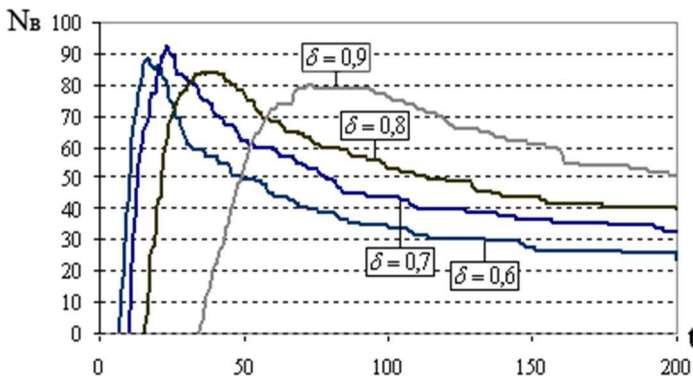


Рис. 1.9. Изменение количества возбужденных мод спектра неустойчивости  $N_B$

Из рис. 1.9 видно, что на начальной стадии возбуждается набор мод, состоящий более чем из 70 % мод начального спектра, причем максимальное количество мод возбуждается в области перехода в квазилиней-

ную стадию. Мода считалась возбужденной, если ее амплитуда превышала 0,1 % от начального уровня основной моды. Скорость изменения амплитуды моды со временем уменьшается, но продолжает быть значимой. В результате конкуренции, амплитуда мод на периферии спектра уменьшается практически до нуля, а амплитуда части мод в центре спектра увеличивается. Таким образом, на квазилинейной стадии спектр в целом сужается, количество степеней свободы – возбужденных мод уменьшается, то есть можно говорить об уменьшении значений характерных величин, связанных с энтропией системы в целом. Производная амплитуд периферийных мод спектров от времени принимает отрицательное значение, спектры как целое смещаются в сторону волнового числа основной моды. Далее скорость изменения амплитуды возбужденных мод уменьшается, и система выходит на квазилинейный режим неустойчивости.

При слабом превышении порога неустойчивости интегральные показатели ведут себя аналогично соответствующим показателям простой модели, что подтверждает справедливость сделанных ранее допущений о возможности пренебрежения взаимодействием мод внутри спектра при слабом превышении порога неустойчивости, а также дает оценку границе применимости простой модели  $\delta = 0.7$ .

**Формирование самоподобных структур.** Данное поведение спектра неустойчивости позволило построить теорию формирования фрактальной структуры. Обсудим на примере модуляционно неустойчивой волны природу формирования каскада неустойчивостей. Рассмотренная в предыдущем разделе модуляционная неустойчивость монохроматической волны формирует новое состояние – модулированную волну, которая, как это следует из приведенного ниже рассмотрения [13, 14], в свою очередь является нестабильной. Покажем, что в результате вторичной модуляционной неустойчивости формируется ещё более крупномасштабная модуляция уже ранее промодулированной основной волны. Для описания вторичной модуляционной неустойчивости будем считать начальным состоянием системы, сформированный в результате первичной неустойчивости линейчатый спектр, состоящий из трех мод. Именно формирование линейчатого спектра модулированной волны при насыщении первичной модуляционной неустойчивости создает условия для превышения порога вторичной модуляционной неустойчивости. В результате вторичной неустойчивости в окрестности мод  $k = \pm k_2^*$  возникают спектры неустойчивых возмущений с волновыми числами, равными  $\pm(k_2^* + \kappa)$ . Как и прежде, можно убедиться в том, что моды с  $\pm(k_2^* + \kappa)$  имеют одинаковые по абсолютной величине значения амплитуды. Можно убедиться [8, 9] в том, что максимальный линейный инкремент вторичной неустойчивости равен

$$\gamma_{2eff} = -\delta + [u_1^4 + 4u_{k_2^*}^4]^{1/2} \approx 2u_{k_2^*}^4 / u_1^2 \approx (u_{10}^2 - \delta)^2 / 2u_1^2, \quad (1.27)$$

где  $\text{Sin } \Phi_{\kappa} = -u_1^2 / [u_1^4 + 4u_{k_2^*}^4]^{1/2}$ , а также  $\text{Sin}(\Phi_{k_2^*} - \Phi_{\kappa}) \approx -\text{Cos } \Phi_{\kappa} = 2u_{k_2^*}^2 / [u_1^4 + 4u_{k_2^*}^4]^{1/2}$ , так как  $\Phi_{k_2^*} \approx -\pi/2$ . Для наиболее быстро растущих мод на линейной стадии развития вторичной модуляционной неустойчивости  $(k_2^* + \kappa)^2 = u_1^2 + 2u_{k_2^*}^2$  и сдвиг волнового числа  $\kappa$  относительно волновых чисел мод первичной неустойчивости  $k_2^*$

$$\kappa^* = k_2^* u_{k_2^*}^2 / u_1^2 = k_2^* (u_{10}^2 - \delta) / 2u_1^2. \quad (1.28)$$

Можно показать, что в результате развития вторичной неустойчивости происходит сужение её спектра. Фактически в спектре вторичной неустойчивости сохраняются моды с волновыми числами  $\pm(k_2^* + \kappa^*)$ . Отношение характерных времен развития первичной и вторичной модуляционных неустойчивостей

$$\tau_{1M} / \tau_{2M} = \gamma_{2eff} / \gamma_{1eff} = (u_{10}^2 - \delta) / 2u_1^2, \quad (1.29)$$

а также отношение пространственных масштабов модуляции основной волны из-за последствий развития первичной и вторичной неустойчивости

$$L_{1M} / L_{2M} = (\kappa^* / k_2^*) \approx (u_{10}^2 - \delta) / 2u_1^2, \quad (1.30)$$

совпадают [27]. Таким образом, последующие каскады неустойчивости формируют все более крупномасштабные структуры – модуляции. Такие структуры являются масштабно-инвариантными [7].

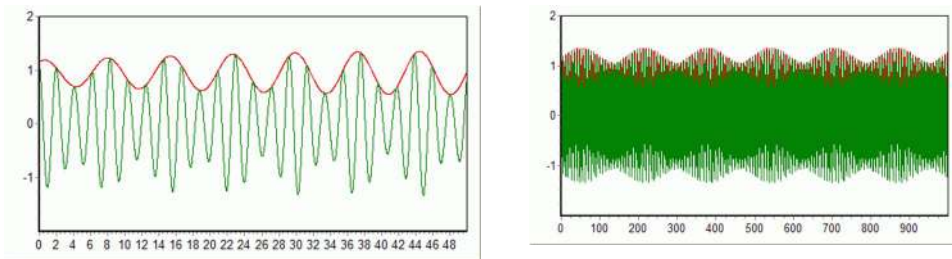


Рис. 1.10. Формирование самоподобных структур поля в численном эксперименте:  $k_0 = 3$  – волновое число основной волны,  $K_{OPT} = 0.8$  – волновое число огибающей первого порядка,  $\Delta K = 0.05$  – волновое число огибающей второго порядка

Таким образом, пояснено формирование каскада модуляционных околупороговых неустойчивостей, формирующих самоподобные структуры

за счет сужения спектров каждого такого отдельного процесса и создания условий для развития нового, более крупномасштабного. Кроме того, узкие спектры каждой неустойчивости каскада формируют четко наблюдаемую на каждом масштабе самоподобную пространственную структуру.

## 2. ВОЗНИКНОВЕНИЕ ВОЛН АНОМАЛЬНОЙ АМПЛИТУДЫ

Обсудим развитие модуляционной неустойчивости волнового движения вдали от ее порога. Покажем, что результатом неустойчивости может быть формирование огибающей волнового движения аномальной амплитуды. При этом интенсивность поля в максимумах огибающей может почти на порядок превышать среднюю интенсивность волнового движения. Проанализируем динамику модуляционной неустойчивости практически не затухающего океанского волнения большой интенсивности, покажем механизм образования волн аномальной амплитуды. Частота появления этих волн оказалась сравнима в численных экспериментах при формировании статистики как по ансамблю множества расчетов, так и по времени в одном эксперименте с интервалом рассмотрения, превышающим время жизни аномальных волн. Проведем сравнение результатов расчетов, использующих формализм S-теории и прямых расчетов уравнения Лайтхилла-НУШ, покажем качественное согласие этих двух подходов.

В случае существенного превышения порога неустойчивости  $\delta \leq 0,7$  модель (1.28) – (1.19), (1.22), (1.23), учитывающая взаимодействия между симметричными по отношению к накачке модами спектра ( $k_s + k_{-s} = k_n + k_{-n}$ ), обнаруживает качественно новые эффекты в процессе развития спектра неустойчивости. Речь идет о немонотонном характере обмена энергией между основной волной и развивающейся структурой при модуляционной неустойчивости.

Рассмотрим модуляцию основной волны при заметном превышении порога неустойчивости. Учет взаимодействий между модами возбуждаемого спектра позволяет рассмотрение модели в области заметного превышения порога неустойчивости  $\delta = 0,4$ . Результаты расчетов изображены на рис. 2.1 – рис. 2.3. В данной области параметров интенсивность развитого спектра неустойчивости выше в сравнении с областью слабой надпороговости ( $\delta \geq 0,7$ ). Так как более интенсивный спектр сильнее воздействует на основную волну, то возможно появление более выраженных всплесков огибающей.

При многократном моделировании процесса было отмечено, что на начальной стадии развитой модуляционной неустойчивости возможно появление значительных всплесков амплитуды основной волны. При возбуждении спектров мод с неизбежностью возникают интерференци-

онные эффекты, состоящие в реализации всплесков модуляции волнового движения и в появлении значительных амплитуд отдельных волн. Вопрос в том, являются ли эти эффекты проявлением случайного характера интерференции мод или они детерминированы.

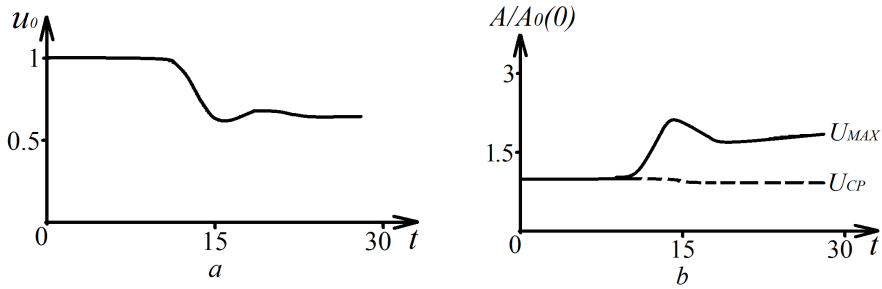


Рис. 2.1. Поведение амплитуды основной волны со временем (а), максимальная (сплошная кривая) и средняя (пунктир) амплитуды огибающей волнового поля для случая  $\delta = 0,4$ , число мод –  $N = 200$  [13]

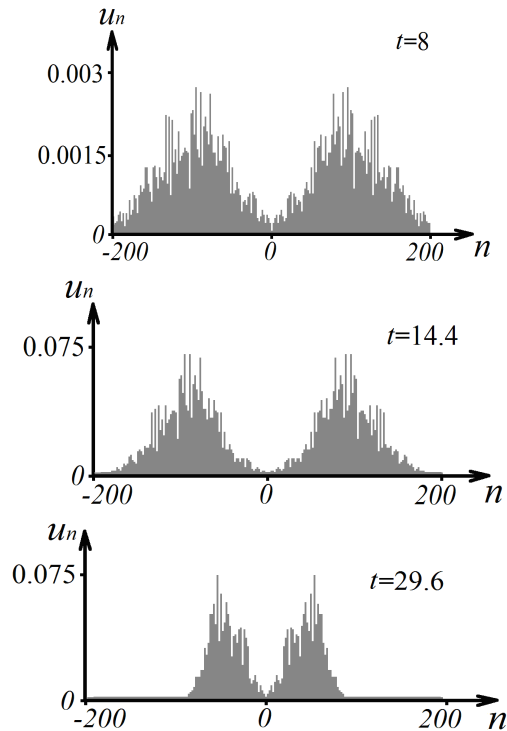


Рис. 2.2. Поведение спектра неустойчивости для трех моментов времени ( $\delta = 0,4$   $N = 200$ ) [13]

Выше отмечалось, что поведение мод возбуждаемого спектра управляется накачкой, которой в данном случае является волна большой амплитуды. В большинстве случаев при реализации подобных многомодовых процессов, даже если взаимодействием неустойчивых мод между собой можно пренебречь, влияние накачки на каждую отдельную моду спектра неустойчивости может оказаться велико. Поэтому интерференция в подобных случаях носит вынужденный характер, навязанный накачкой. Случайность проявляется лишь в той степени, насколько случайным было распределение фаз мод спектра неустойчивости в начальный момент.

При данных условиях также можно наблюдать сужение спектра неустойчивости.

Представляют также интерес зависимости изменения энергии спектра мод:  $\sum_{m \neq 0} u_m^2$  и энергии основной волны:  $u_0^2$  от времени в процессе развития неустойчивости, представленные на рис. 2.3.

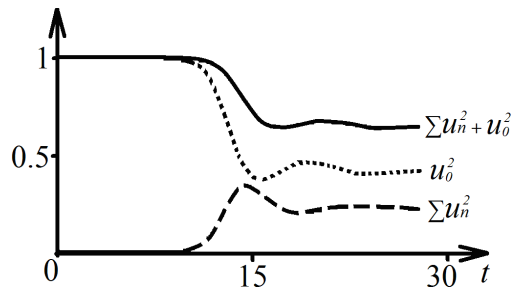


Рис. 2.3. Изменение энергии спектра мод:  $\sum_{m \neq 0} u_m^2$  и энергии основной волны:  $u_0^2$  и их суммы от времени ( $\delta = 0,4$ ,  $N = 200$ ) [13]

**2D модель Лайтхилла.** Обсудим неустойчивости волны большой амплитуды в 2D модели Лайтхилла [14]. В этом случае разрешено возбуждение спектров мод с волновым вектором, составляющим ненулевой угол с волновым вектором основной волны.

Процесс возбуждения двумерного спектра неустойчивости (изображен на рис. 2.4) формирует спектр неустойчивости на начальной стадии развития – широкий, с небольшими ( $u_k < 0,05$ ) значениями амплитуд мод. В процессе развития, спектр сужается, при этом амплитуда возбужденных мод увеличивается (рис. 2.4b).

В результате численного моделирования получены трехмерные картины огибающей поля для значений параметров  $N = 100$  и  $\delta = 0,5$  при  $\tau = 15$ . На рис. 2.5а показана мелкомасштабная картина огибающей основной волны, рис. 2.5b иллюстрирует всплески огибающей поля в бо-

лее крупном масштабе. Трехмерная визуализация этого волнового поля представлена на рис. 2.6.

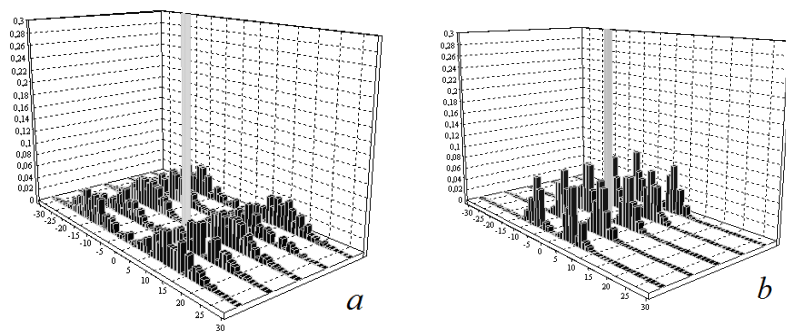


Рис. 2.4. Двумерный спектр неустойчивости квазимонохроматической волны

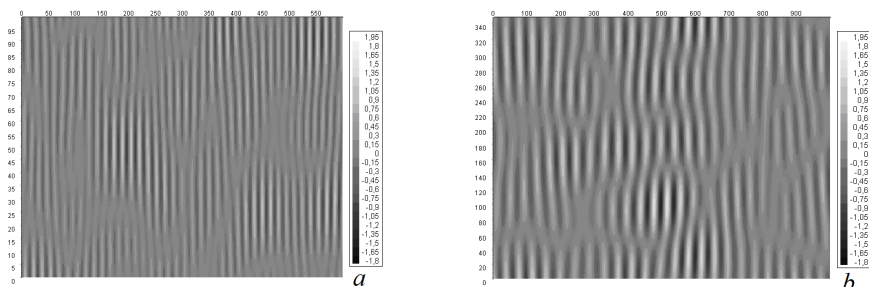


Рис. 2.5. Двумерная модуляция основной волны: а) мелкомасштабное представление, б) фрагмент

Можно убедиться в том, что учет даже малого угла между волновыми фронтами несколько увеличивает амплитуды больших волн, что было неоднократно отмечено ранее разными авторами.

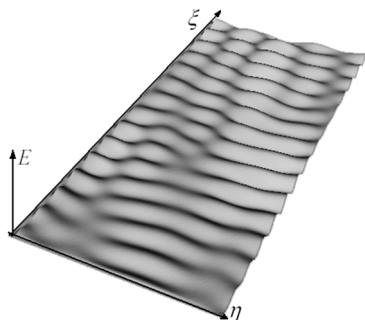


Рис. 2.6. Трехмерная визуализация поля огибающей, построенная на основании карты высот (рис. 2.5)

**Сравнение 1D моделей Лайтхилла в случаях применения S-теории (1.21) – (1.22), (1.25), (1.26) и прямого вычисления уравнения (1.7).** Вблизи порога неустойчивости характеристики процесса модуляции основной волны в двух случаях применения S-теории и НУШ практически не изменяются. На рис. 2.7 показаны зависимости изменения энергии спектра мод  $\sum_{m \neq 0} u_m^2$  и энергии основной волны  $u_0^2$  от времени в процессе развития неустойчивости.

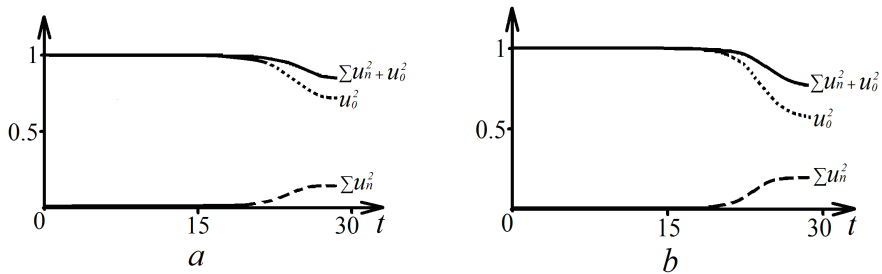


Рис. 2.7. Изменение энергии спектра мод  $\sum_{m \neq 0} u_m^2$  и энергии основной волны  $u_0^2$  и их суммы от времени для случаев применения S-теории (a) и НУШ (b) при  $\delta = 0,7$ ,  $N = 200$  [13]

В случае применения S-теории (a) средняя амплитуда волн и максимальная амплитуда огибающей волнения несколько меньше, чем при описании нелинейным уравнением Лайтхилла – Шредингера с данным типом дисперсионного слагаемого (b). Эта динамика представлена на рис. 2.8.

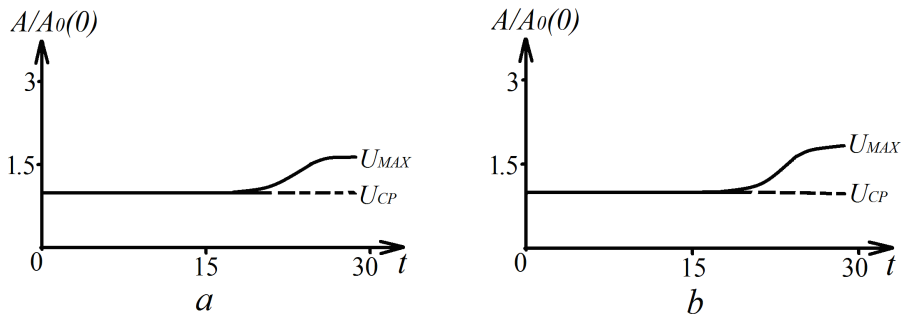


Рис. 2.8. Максимальная (сплошная кривая) и средняя (пунктир) амплитуды огибающей волнового поля для случаев применения S-теории (a) и НУШ (b) при  $\delta = 0,7$ ,  $N = 200$  [13]

**Режим неустойчивости вдали от порога.** Несколько больше отличий в развитии неустойчивости при малых уровнях поглощения вдали

от порога. Так, характерные времена модуляции амплитуды основной волны при уровне поглощения  $\delta = 0,1$  при учете всех видов взаимодействия мод становятся менее регулярными. Зависимости энергии спектра мод  $\sum_{m \neq 0} u_m^2$  и энергии основной волны  $u_0^2$  от времени в процессе развития неустойчивости представлены на рис. 2.9. Уже явно заметен осцилляторный характер обмена энергией между основной волной и спектром неустойчивых мод.

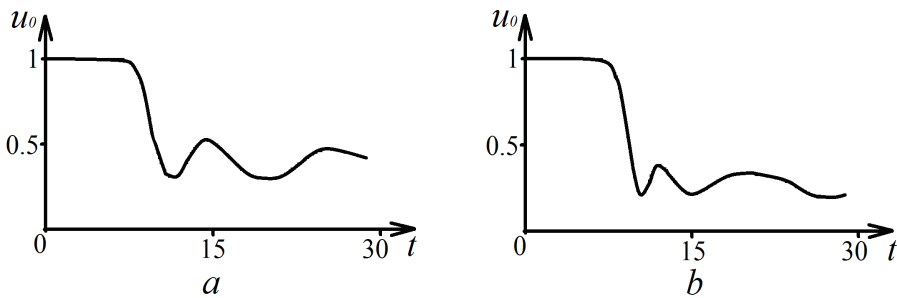


Рис. 2.9. Поведение амплитуды основной волны со временем для случаев применения S-теории (а) и НУШ (b) при  $\delta = 0,1$  и  $N = 200$  [17–1]

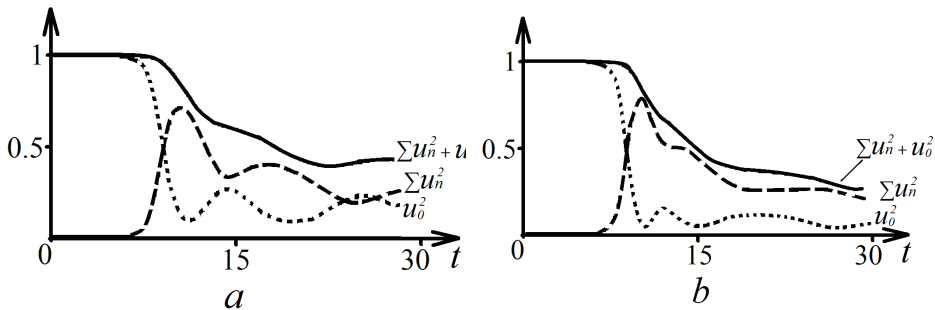


Рис. 2.10. Зависимости энергии спектра мод  $\sum_{m \neq 0} u_m^2$ , энергии основной волны  $u_0^2$  и их суммы от времени для случаев применения S-теории (а) и НУШ (b) при  $\delta = 0,1$  и  $N = 200$  [13]

Максимумы амплитуд огибающей в обоих случаях достигаются практически в одно время и примерно равны друг другу, что можно увидеть на рис. 2.11. Важно отметить, что **локальная плотность энергии в максимумах огибающей может на порядок превосходить среднюю плотность энергии модулированной волны.**

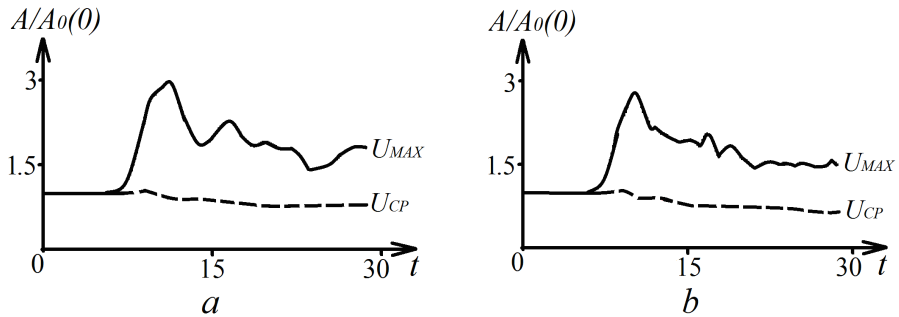


Рис. 2.11. Максимальная (сплошная кривая) и средняя (пунктир) амплитуды огибающей волнового поля для случаев применения  $S$ -теории (а) и НУШ (б) при  $\delta = 0,1$  и  $N = 200$  [13]

Изменяется и поведение спектра неустойчивости. Характерный для модуляционной неустойчивости двугорбый спектр в случае описания в рамках  $S$ -теории (а) сужается, а при более общем описании (б) наблюдается противоположная тенденция к расширению. Времена рассмотрения спектра выбраны на линейной по амплитудам возмущений стадии процесса в момент достижения максимальной амплитуды огибающей волнового поля и в стадии развитой неустойчивости (рис. 2.12).

В условиях слабого поглощения энергия спектра модуляционной неустойчивости достигает значений, сравнимых с начальной энергией волны конечной амплитуды. Из рис. 2.11 видно, что на начальной стадии нелинейного режима процесса возможно появление волн и всплесков огибающей с весьма большой амплитудой. В дальнейшем происходит снижение амплитуды основной волны (см. рис. 2.12), ее влияние на интерференцию мод спектра ослабляется, и их (всплесков) амплитуда заметно уменьшается.

Характер модуляции основной волны в пространстве (фрагмент вблизи области с максимальной амплитудой огибающей) для тех же моментов времени для этих двух случаев описания неустойчивости представлен на рис. 2.13. Таким образом, созданная авторами [10, 11] и модифицированная в работах [12, 13]  $S$ -теория позволяет с достаточной степенью точности описывать начальную стадию нелинейного режима процесса модуляционной неустойчивости в модели Лайтхилла-НУШ, позволяя количественно оценить максимальную амплитуду огибающей поля волн, время появления максимума огибающей и энергию, сосредоточенную в спектре возмущений.

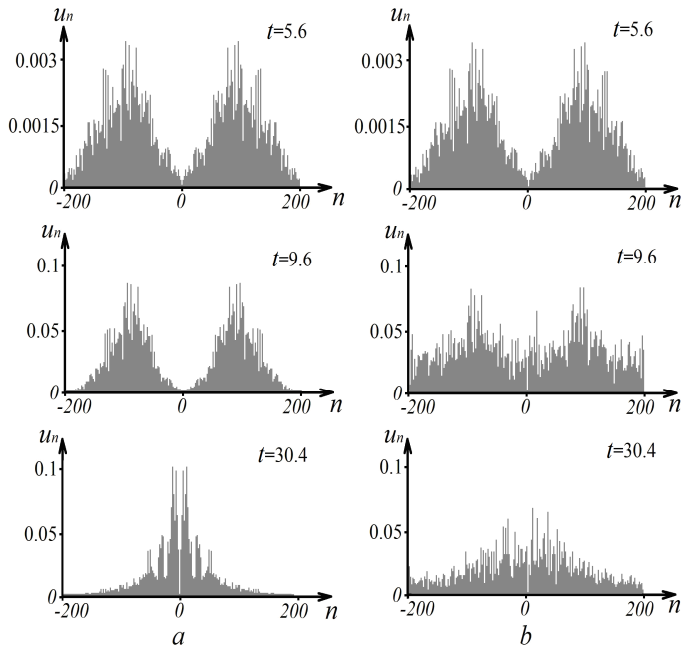


Рис. 2.12. Спектры неустойчивости для трех моментов времени в случае описания в рамках  $S$ -теории (а) и для описания на основе НУШ (б) при  $\delta = 0,1$  и  $N = 200$  [13]

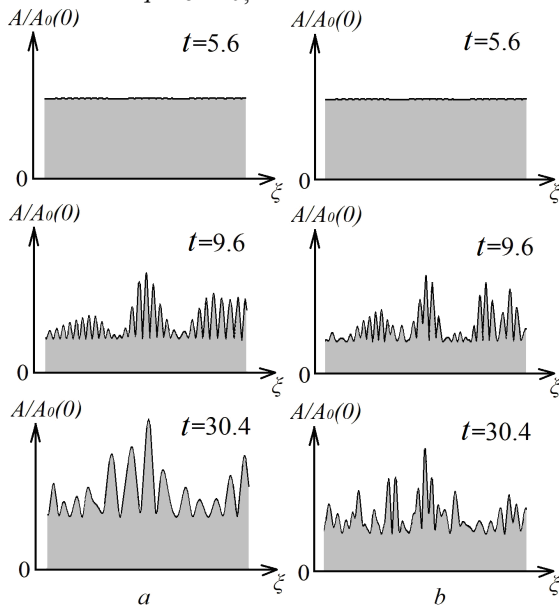


Рис. 2.13. Модуляция основной волны для трех моментов времени в случае описания в рамках  $S$ -теории (а) и для описания на основе НУШ (б) при  $\delta = 0,1$  и  $N = 200$  [13]

Стоит обратить внимание на то, что в одномерном случае при малых уровнях поглощения максимальная амплитуда аномальной волны может примерно в три раза превышать среднюю амплитуду волн. В двумерном случае для сходящейся волны максимальная амплитуда огибающей способна оказаться заметно больше [13, 14]. Это можно понять, если рассматривать изменение ширины спектра неустойчивости в развитом режиме. Действительно, ширина спектра возрастает, что приводит к уменьшению характерного размера области локализации огибающей. Расширение спектра развитого возмущения приводит при сохранении энергии волнового пакета также к увеличению в соответствующее число раз максимальной амплитуды пространственного пакета огибающей.

### 3. ВОЛНЫ-УБИЙЦЫ В ОКЕАНЕ

Для гравитационных поверхностных волн на глубокой воде, представляющих интерес для судоходства в районах с высоким уровнем возбуждения океанского волнения, справедливо следующее выражение для частоты волн большой амплитуды [33]

$$\omega = \sqrt{g \cdot k} \cdot \{1 + |A|^2 k^2 / 2\} \quad (3.1)$$

где  $A$  – отклонение поверхности,  $W$  – скорость волны,  $g$  – ускорение свободного падения. Данные экспериментальных наблюдений и исследований [36–37] указывают на следующие характеристики таких волн: максимальная крутизна для устойчивых длинных (гравитационных) волн на глубокой воде до их обрушения  $H/\lambda \approx 0,11 \div 0,13$ , где  $H = 2|A|$  – крутизна волны, то есть расстояние между верхней точкой гребня волны и нижней точкой впадины волны,  $\lambda = 2\pi/k_0$  – длина волны большой амплитуды. Откуда  $(k_0 A)^2 < 0,12 \div 0,17$ . Важно отметить, что волны с большей амплитудой не существуют из-за эффекта обрушения. В отсутствие модуляции  $|A_0|$  – средняя амплитуда,  $\bar{H} = 2|A_0|$  – средняя крутизна. Для аномально больших волн их крутизна достигает  $(2 \div 3) \cdot 2|A_0|$ , причем для наиболее высоких неразрушающихся волн должно быть выполнено условие  $(2 \div 3) \frac{2|A_0|}{2\pi} k_0 < 0,11 - 0,13$ .

Анализируя эти данные, легко видеть, что ширина пространственного спектра неустойчивости в этих условиях не столь мала в сравнении с волновым числом волны большой амплитуды, как в предыдущих моделях. Именно поэтому уравнение для комплексной медленной меняющейся (здесь исключена зависимость  $\propto \exp\{-i\omega_0 t\} = \exp\{-igk_0 t\}$ ) амплитуды поля представляется в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_K}{\partial t} &= -\delta A_K - i(\sqrt{g(k_0 + K)} - \sqrt{gk_0})A_K - i\sqrt{g(k_0 + K)} \frac{(k_0 + K)^2}{2} \{|A|^2 A\}_K = \\ &= -\delta A_K - i(\sqrt{g(k_0 + K)} - \sqrt{gk_0})A_K - i\sqrt{g(k_0 + K)} \frac{(k_0 + K)^2}{2} \cdot \\ &\cdot \{A_K [2|A_0|^2 + 2 \sum_{K' \neq K, 0} |A_{K'}|^2 + |A_K|^2] + A_{-K}^* \{A_0^2 + \sum_{K \neq K, 0} A_K \cdot A_{-K}\}\}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Определим величину  $2\varphi_0 - \varphi_K - \varphi_{-K} = \Phi_K$ . Используя это представление, запишем систему уравнений, описывающую модуляционную неустойчивость гравитационной поверхностной волны большой амплитуды в условиях сильной дисперсии глубокой воды

$$\begin{aligned} \frac{\partial |A_K|}{\partial t} &= -\delta |A_K| + \sqrt{g(k_0 + K)} \frac{(k_0 + K)^2}{2} \cdot [|A_{-K}| |A_0|^2 \sin \Phi_K + \\ &+ |A_{-K}| \sum_{K \neq K, 0} |A_K| \cdot |A_{-K}| \sin(\Phi_K - \Phi_K)], \end{aligned} \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_K}{\partial t} &= -[\sqrt{g(k_0 + K)} - \sqrt{gk_0}] - \sqrt{g(k_0 + K)} \frac{(k_0 + K)^2}{2} \cdot [2|A_0|^2 + 2 \sum_{K' \neq K, 0} |A_{K'}|^2 + \\ &+ |A_K|^2] + \frac{|A_{-K}|}{|A_K|} |A_0|^2 \cos(\Phi_K) + \frac{|A_{-K}|}{|A_K|} \sum_{K \neq K, 0} |A_K| \cdot |A_{-K}| \cos(\Phi_K - \Phi_K)]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Для волны большой амплитуды

$$\frac{\partial |A_0|}{\partial t} + \delta |A_K| + \sqrt{gk_0} \frac{k_0^2}{2} \cdot [|A_0| \sum_{K \neq K, 0} |A_K| \cdot |A_{-K}| \sin(\Phi_K)] = G, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \varphi_0}{\partial t} = -\sqrt{gk_0} \frac{k_0^2}{2} \cdot [(|A_0|^2 + 2 \sum_{K \neq 0} |A_K|^2) + \sum_{K \neq 0} |A_K| \cdot |A_{-K}| \cos(\Phi_K)]. \quad (3.6)$$

Используем следующие обозначения  $A_K / A_0 = a_K = |a_K| \exp\{i\varphi_K\} = u_K \exp\{i\varphi_K\}$ ,  $k_0 \xi = \zeta$ ,  $\omega_0 t / 2 = \tau / \alpha$ ,

$$\alpha = k_0^2 |A_0|^2, \quad \tau = t \cdot \sqrt{gk_0} \frac{k_0^2 |A_0|^2}{2}, \quad K \rightarrow K / k_0, \quad \omega_0 K^2 t / 8k_0^2 = (\tau / 4\alpha) \cdot K^2,$$

$2\varphi_0 - \varphi_K - \varphi_{-K} = \Phi_K$ . Моды спектра располагаем в интервалах  $0 < K < 2K_{Max}$  и  $-2K_{Max} < -K < 0$ , где  $K_{Max} / k_0 = 2\sqrt{2}k_0 |A_0| = 2\sqrt{2}\alpha^{1/2}$ . Интервал  $0 < K < 2K_{Max}$  можно представить в виде суммы  $N$  мод обычным способом, как и ранее, вводя интервал в пространстве волновых чисел  $\Delta K = 2K_{Max} / N$  и перехо-

для  $K$  к использованию безразмерных величин  $K_i = i \cdot \Delta K / k_0$ ,  $i = \pm(1, 2, \dots, N)$ . Окончательно система уравнений, описывающая модуляционную неустойчивость волны большой амплитуды, принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_K}{\partial \tau} = & -\delta_d u_K + (1+K)^{2.5} \cdot [u_{-K} \cdot u_0^2 \sin \Phi_K + \\ & + u_{-K} \sum_{K \neq K, 0} u_K u_{-K} \sin(\Phi_K - \Phi_K)]. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Здесь следует различать моды с волновыми числами  $K$  и  $K$ , соответственно и фазы  $\Phi_K$  и  $\Phi_K$ , а также сделана замена  $K \rightarrow K/k_0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi_K}{\partial \tau} = & -\frac{2[\sqrt{(1+K)} - 1]}{\alpha} - (1+K)^{2.5} \cdot [2u_0^2 + 2 \sum_{K \neq K, 0} u_K^2 + u_K^2] + \\ & + \frac{u_{-K}}{u_K} u_0^2 \cos \Phi_K + \frac{u_{-K}}{u_K} \sum_{K \neq K, 0} u_K u_{-K} \cos(\Phi_K - \Phi_K)], \end{aligned} \quad (3.8)$$

где использованы традиционные обозначения  $A_K / A_0 = a_K = |a_K| \exp\{i\varphi_K\} = u_K \exp\{i\varphi_K\}$ , а также  $\Delta_K \cdot \alpha = 2\{[\sqrt{(1+K)} - 1] + \sqrt{(1-K)} - 1\}$  и  $P_K = \{2(1+K)^{2.5} + 2(1-K)^{2.5} - 2\}$ , причем при расчетах следует не использовать разложение подкоренных выражений. Уравнения для основной волны можно записать как

$$\frac{\partial u_0}{\partial \tau} + \delta u_0 + u_0 \sum_{K \neq K, 0} u_K u_{-K} \sin \Phi_K = G, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \varphi_0}{\partial \tau} = -u_0^2 - 2 \sum_{K \neq 0} u_K^2 - \sum_{K \neq 0} u_K u_{-K} \cos \Phi_K. \quad (3.10)$$

Для анализа размахов волн (то есть расстояния между верхней точкой гребня волны и нижней точкой впадины), выделим из них треть наибольших. Найдем для каждого момента времени в области рассмотрения ( $\zeta \subset L = 2\pi / (\Delta K / k_0) = \pi N / K_m = \frac{\pi N}{\sqrt{2} \cdot \alpha^{1/2}}$ , где  $\zeta = k_0 x$ ) средний размах всех волн

$H = U_{Cp}$  и средние значения размаха трети самых больших  $H = U_{SWH}$ , а также самый большой размах волны из ансамбля  $H = U_{Max}$ .

**Численный анализ динамики и статистические показатели при использовании S-теории.** Расчеты проводились для 600 мод спектра, отношение декремента поглощения к величине максимального инкремент-

та выбиралось равным  $\delta$ . При этом для нормировки амплитуды основной волны на единицу на начальной стадии процесса был выбран уровень внешней накачки  $G = \delta$ . Для модели (3.7) – (3.10), построенной на основе S-теории, с уменьшением поглощения величина  $u_0^2$ , определяющая энергию основной волны, уменьшается, а величина  $\sum_{m \neq 0} u_m^2$ , определяющая энергию спектров неустойчивости, растет.

Поскольку затухание гравитационных волн на поверхности океана мало, рассматривать случаи неустойчивости, близкие к порогу неустойчивости не имеет смысла. Основное внимание уделим случаю, когда поглощение энергии волн достаточно мало: пусть отношение декремента поглощения к величине максимального инкремента выбиралось на уровне 0,1 (то есть  $\delta = 0,1$ ). Результаты расчета для одной реализации начальных условий приведены на рис. 3.1. Прежде всего следует отметить, что критерий, по которому выделяют anomalously большие волны, вида

$$U_{AG} > 2U_{SWH} \tag{3.11}$$

или подобный этому неоднозначен, ибо наибольшие амплитуды наблюдаются именно в начальной стадии развития неустойчивости, особенно при конечном затухании. Тем не менее волны заметно меньших амплитуд или размахов в режиме развитой неустойчивости также подпадают под этот критерий, так как со временем наблюдается снижение как средних, так и больших амплитуд волн.

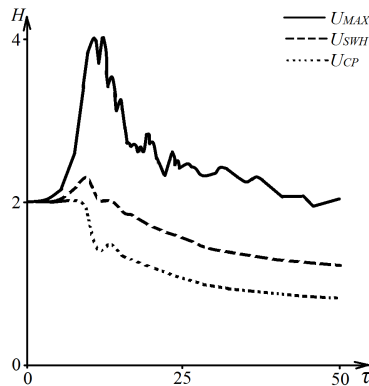


Рис. 3.1. Размах волн (расстояние между верхней точкой гребня волны и нижней точкой впадины) как функция времени  $\tau \propto 10$ : средний для всех волн  $U_{CP}$ , средний для трети самых больших волн  $U_{SWH}$ , максимальный для каждого момента времени  $U_{Max}$  [13]

На рис. 3.2 приведен волновой пакет, амплитуда наибольшей волны которого соответствует критерию (3.11).

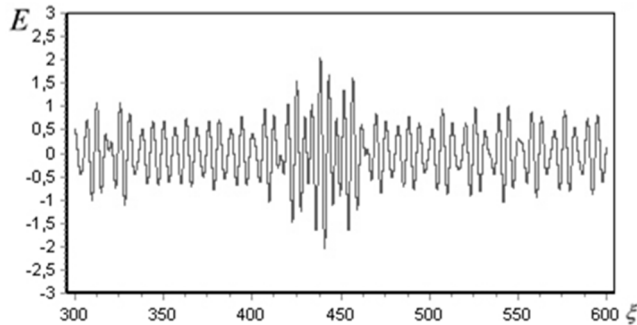


Рис. 3.2. Локальный всплеск волнового поля  $E$ , превышающий средний размах трети самых больших волн более чем в 2 раза ( $N = 300$ ,  $t = 10.2$ ) [13]

С уменьшением уровня поглощения  $\delta$  процессы обмена энергией между спектром и основной волной усиливаются. Вид спектра при этом несимметричный. Можно убедиться, что при уменьшении амплитуды основной волны на начальной стадии неустойчивости, происходит смещение максимума инкремента неустойчивости в сторону меньших значений  $K$ . При этом, так как максимуму инкремента соответствует значение суммарной фазы  $2\varphi_0 - \varphi_K - \varphi_{-K} = \Phi_K$ , равное  $\pi/2$ , то происходит синхронизация этих фаз для большинства мод с различными значениями  $K$ . Тот факт, что интегральные фазы  $\Phi_K$  спектра неустойчивости сосредоточиваются вблизи  $\pi/2$  создает условия практически однотипного взаимодействия многих пар мод с основной волной. Это коллективное взаимодействие мод спектра с основной волной и поясняет природу интенсивных осцилляций интенсивности основной волны и спектра в начальной стадии неустойчивости.

С развитием неустойчивости разброс интегральных фаз увеличивается и обмен энергией между основной волной и спектром ослабляется. Вследствие того, что фазы отдельных мод  $\varphi_K$  сохраняют случайное распределение (в частности, не имеют место симметрии  $\varphi_K = \varphi_{-K}$ ,  $\varphi_K = -\varphi_{-K}$ ), то в каждой реализации синхронизованный с основной волной спектр неустойчивости формирует различную интерференционную структуру. Тем не менее интенсивность интерференции мод спектра в начальной стадии оказывается наибольшей<sup>6</sup>. Рассматривая динамику

<sup>6</sup> Кстати, фазовая синхронизация за счет выбора симметричных начальных фаз взаимодействующих мод спектра модуляционной неустойчивости интенсивной волны или симметризация самих уравнений обычно приводили к режимам с обострением. Отсутствие же сим-

спектра неустойчивости в проведенных в данной работе расчетах, можно обнаружить явление значительного его сдвига по отношению к спектральной области линейной неустойчивости. Этот сдвиг обусловлен снижением амплитуды основной волны. Кроме этого следует отметить, что амплитуды отдельных мод спектра остаются много меньше амплитуды основной волны. Отметим также несимметричность спектра относительно основной волны, что обусловлено сильной дисперсией и достаточно большой величиной инкремента модуляционной неустойчивости для волн большой амплитуды.

Из анализа спектров можно увидеть, что в режиме развитой неустойчивости в условиях конечного поглощения длина модуляции на больших временах увеличивается почти в 3,5 раза. Поведение относительной характерной длины модуляции представлено на рис. 3.3. Динамика двумерных волновых процессов оказывается подобной. Таким образом, количество волн на длине модуляции в начальной стадии развитой неустойчивости значительно меньше, чем на поздних стадиях процесса. Отметим, что с уменьшением уровня поглощения в системе этот эффект ослабляется (см. ниже).

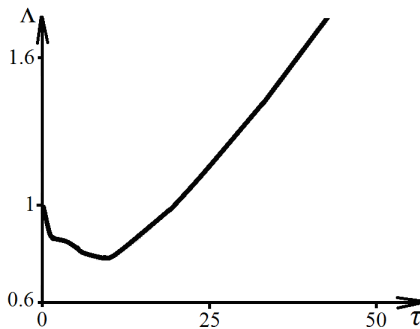


Рис. 3.3. Поведение относительной характерной длины модуляции  $\Delta \approx 2\pi / \Delta K$  в процессе неустойчивости [13]

Анализируя частоту появления аномальных волн в разных реализациях процесса, найдем, что одна такая волна появляется среди  $10^4$  волн, что качественно соответствует известным наблюдениям (рис. 3.3). Из-за заметного поглощения в системе только на начальной стадии нелинейного режима процесса возможно появление волн и всплесков огибающей с весьма большой амплитудой. При развитии процесса происходит снижение амплитуды основной волны и ее влияние на интерференцию мод спектра ослабляется. Амплитуды больших волн, даже удовлетворяющих критерию (3.11), также заметно снижаются.

---

метрии фаз в парах взаимодействующих волн способно ослабить интенсивность интерференционных всплесков и сократить время их существования.

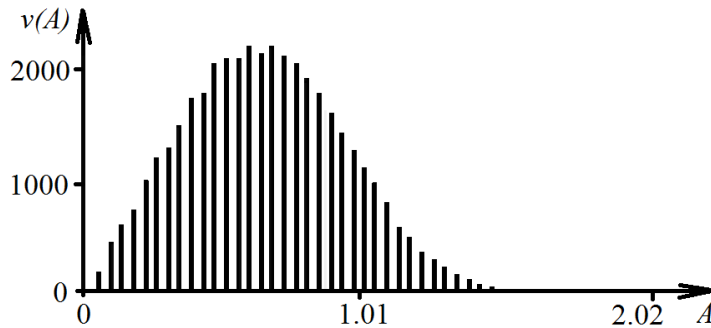


Рис. 3.4. Частота появления волн разной амплитуды  $v(A)$  в численных экспериментах при разных реализациях процесса (в условиях усреднения по ансамблю) в один и тот же момент времени  $\tau \propto 10$  [13]

Таким образом, в условиях заметного поглощения энергии колебаний появление аномальных волн весьма большой амплитуды характерно только для начальной стадии развитой модуляционной неустойчивости. С развитием неустойчивости средние и максимальные значения волн для данного уровня поглощения ( $\delta = 0,1$ ) заметно убывают (рис. 3.1).

Однако согласно принятому критерию (3.11), даже в этих условиях можно выделить аномально большие волны, хотя их амплитуда уже при  $\tau \propto 30$  в полтора-два раза меньше, чем в наиболее интересном случае самых больших подобных волн при  $\tau \propto 10$ . На длине модуляции в начальной стадии процесса укладывается несколько волн, одна из которых может в отдельных реализациях оказаться аномально большой. В режиме развитой неустойчивости количество волн на длине модуляции возрастает в три-четыре раза.

**Сравнение 1D моделей в случаях применения S-теории и более общего описания.** В реальных условиях поглощение энергии гравитационных волн большой амплитуды весьма мало. Поэтому рациональным будет сравнение двух моделей описания проводить для более реалистичного случая малого поглощения океанских волн  $\delta = 0,01$  и значительной амплитуды волнения  $\Delta = 0,566 / N$ ;  $\alpha = 0,01$ . Ниже приведем результаты расчетов, демонстрирующие развитие спектра неустойчивости для трех моментов времени в случае описания в рамках S-теории (a) и в общем случае (b).

Легко видеть формирование характерного двугорбого спектра (рис. 3.5) модуляционной неустойчивости. Если в случае описания в рамках S-теории такая форма спектра сохраняется, то в общем случае описания спектр с развитием неустойчивости сглаживается. На рис. 3.6 показан характер изменения амплитуды основной волны в случае описания в рамках S-теории (a) и в общем случае (b)

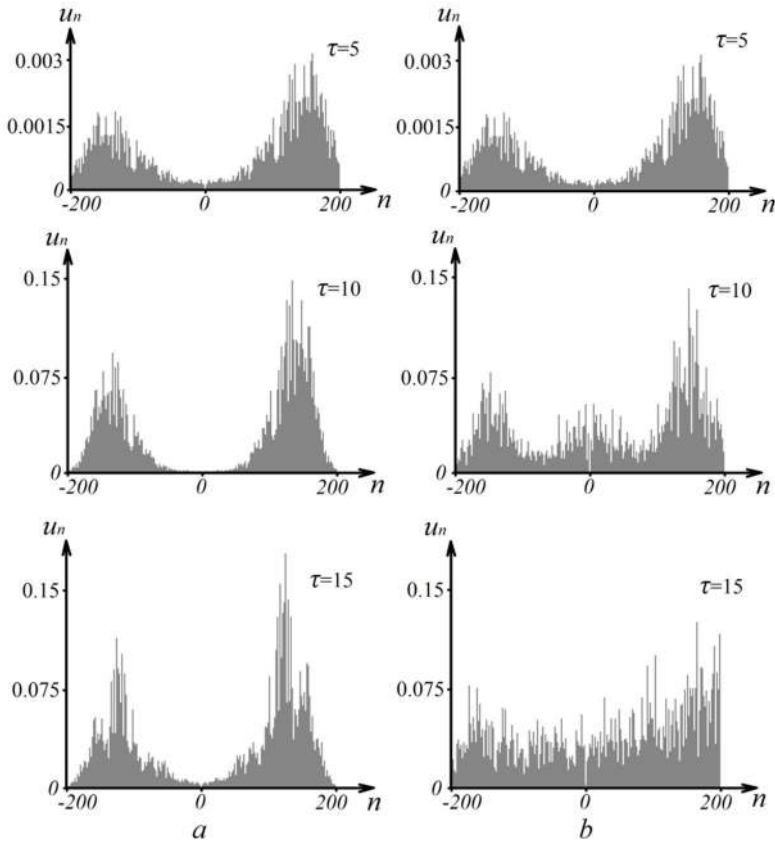


Рис. 3.5. Спектр неустойчивости для трех моментов времени в случае описания в рамках S-теории (a) и в общем случае (b) [13]

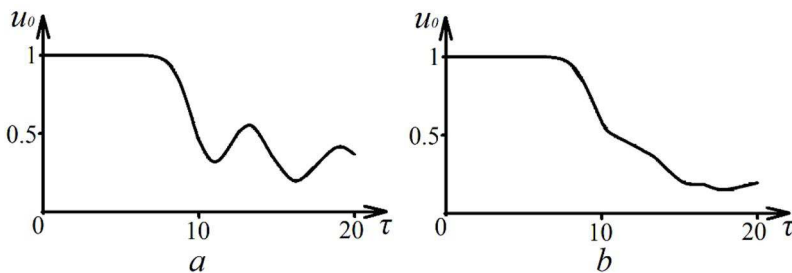


Рис. 3.6. Изменение амплитуды основной волны со временем: а) при описании в рамках S-теории и б) в общем случае, когда учитываются все виды взаимодействия мод в нелинейном слагаемом вида  $\{|A|^2 A\}$  [13]

Можно видеть, что нерезонансные взаимодействия, для которых не выполнены соотношения S-теории, приводят к срыву осцилляторного режима поведения амплитуды основной волны, характерного для режима резонансного взаимодействия, описываемого S-теорией [34, 35]. Дина-

мика изменения средней амплитуды  $U_{CP}$ , средней амплитуды трети наибольших мод  $U_{SWH}$  и максимальных в текущий момент мод представлена на рис. 3.7. Кружками отмечено появление волн аномального размаха  $U_{AG}$ , которые удовлетворяют соотношению (3.11), то есть  $U_{AG} > 2U_{SWH}$ .

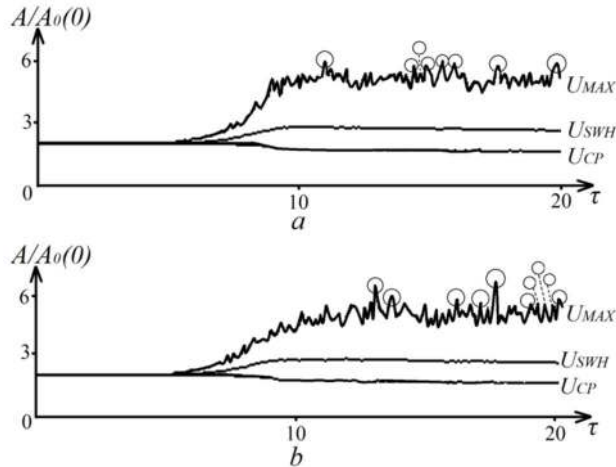


Рис. 3.7. Средняя амплитуда  $U_{CP}$ , средняя амплитуда трети наибольших мод  $U_{SWH}$  и самый большой размах волны из ансамбля  $U_{Max}$  как функции времени. Кружками отмечено появление волн аномальной амплитуды  $U_{AG}$  в рамках  $S$ -теории (а) и в общем случае (б) [13]

Распределения амплитуд размахов  $H$ , то есть расстояний между верхней точкой гребня волны и нижней точкой впадины, в режиме развитой неустойчивости в один момент и за все время расчетов представлены на рис. 3.8 и рис. 3.9 в случае описания в рамках  $S$ -теории (а) и в общем случае (б). Подсчет волн происходил в одном и том же варианте расчета через моменты времени, равные времени жизни аномально большой волны<sup>7</sup>. Время жизни определили, рассматривая поведение волны аномальной амплитуды в данной области в течение некоторого необходимого времени наблюдения. То есть усредняли по существу по времени в отличие от случая, представленного на рис. 3.1, где волны с разными амплитудами подсчитывались в многочисленных расчетах (усреднение по ансамблю расчетов). Важно отметить, что в двух этих случаях частоты появления аномальных волн в статистике по ансамблям и по времени в обеих моделях описания океанского волнения практически не отличаются. Одна такая волна возникает среди 15–20 тысяч волн.

<sup>7</sup> Из-за слабого поглощения средние характеристики волнения практически не изменялись.

В численном эксперименте по сравнению двух подходов (S-теория и прямой расчет) характер распределения размахов подобен обсуждаемому в работах [34, 35], где их число подсчитывалось в разных реализациях, и величины усреднялись по ансамблю реализаций. Число и распределение размахов обнаруженных волн аномальной амплитуды в этих двух случаях представлены в Таблице 3.1. Следует обратить внимание на наличие выраженных «хвостов» распределений в обоих случаях.

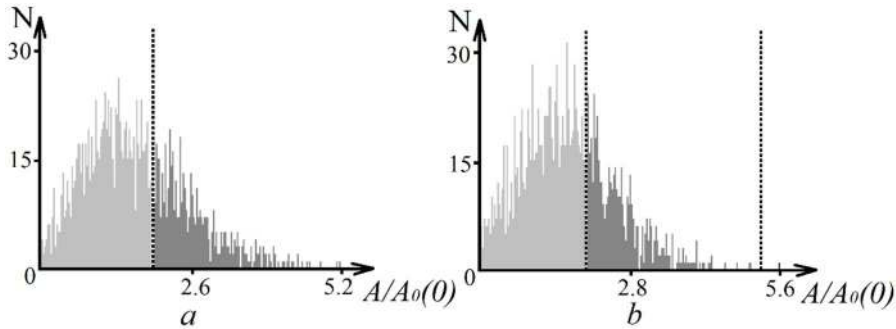


Рис. 3.8. Распределение амплитуд размахов в интервале наблюдения в момент времени  $\tau = 20$  в случае описания в рамках S-теории (а) и в общем случае (б). Пунктирные линии определяют границу между модами малой амплитуды и третью самых больших мод и величиной, в два раза превышающей среднее значение от трети самых больших мод [13]

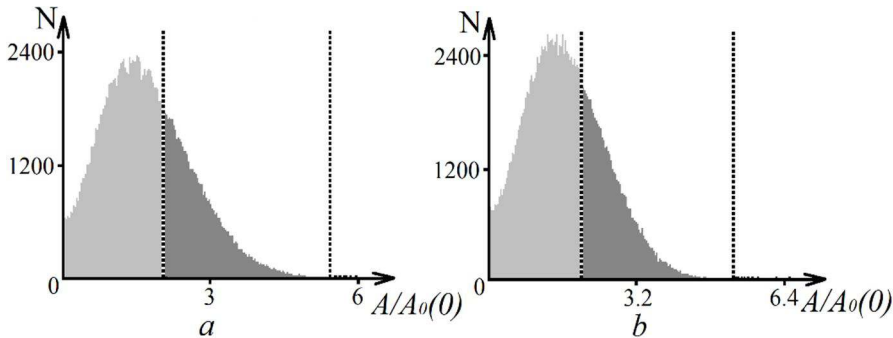


Рис. 3.9. Распределение амплитуд размахов за все время расчетов в области наблюдения в случае описания в рамках S-теории (а) и в общем случае (б): а) – всего размахов 173526, треть наибольших размахов 57842, размахов в 2 раза больше среднего трети наибольших размахов 8; б) – всего размахов 176386, треть наибольших размахов 58795, размахов в 2 раза больше среднего трети наибольших размахов 10 [13]

Таблица 3.1

## Аномальные размахи

значение $U_{AG}/2U_{SH}$	S-теория	Общий случай
от 2 до 2,1	4	7
от 2,1 до 2,2	2	1
от 2,2 до 2,3	2	-
от 2,3 до 2,4	-	1
от 2,4 до 2,5	-	1
всего	8	10

Источник [13].

Анализ наблюдений и численных экспериментов показывает, что аномальные волны часто возникают в составе группы волн, имеющих форму солитоноподобных образований. И в данном случае такие волны появляются именно в составе групп достаточно больших волн, причем в общем случае характерная длина модуляции оказывается меньше, чем при описании в рамках S-теории (см. рис. 3.10).

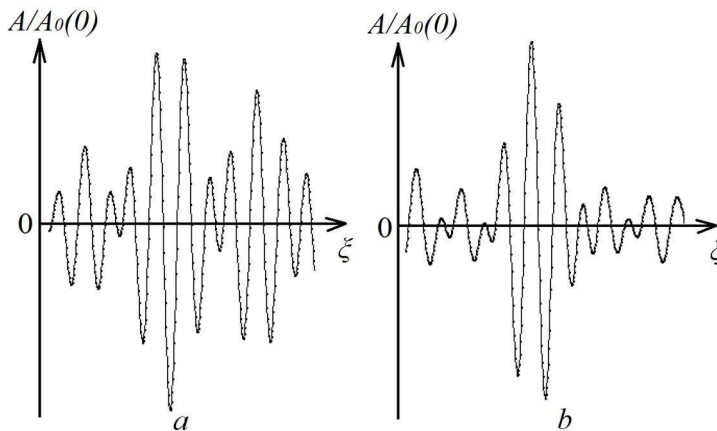


Рис. 3.10. Характерный вид аномальных волн в составе групп волн в случае описания в рамках S-теории (a) и в общем случае (b) [13]

Так как обсуждаемая система может считаться консервативной, ибо механизмы диссипации энергии волн весьма слабы<sup>8</sup>, то описания неравновесных процессов в условиях интенсивного волнения, развитые в работах [15–17], могут оказаться применимы и к рассматриваемому случаю. Однако следует отметить, что найденные авторами [15–17] нестационарные решения автоволны, имеющие подобную солитонам

<sup>8</sup> Поэтому прежнее рассмотрение, где диссипативные эффекты существенны, было проведено без использования методов получения решений для консервативных сред (как, например, в работах [15–17]).

природу, получают энергию из бесконечной среды, заполненной волновым движением. Поэтому обмен энергией между этими возмущениями и окружающей средой не рассматривался. Кроме того, периодические возмущения-бризеры (breathers), как показал эксперимент, не реализуются. Однако одиночный короткоживущий бризер – солитон Перегринна [16] – оказывается подобен рассмотренному на рис 3.10 решению, описывающему волну аномальной амплитуды.

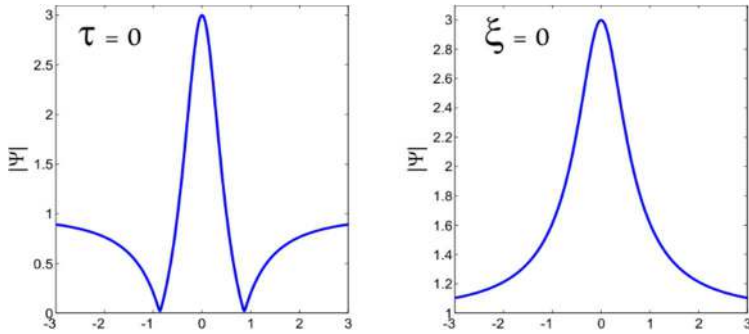


Рис. 3.11. Вид нестационарного возмущения в виде солитона Перегринна в пространстве (справа) и со временем (слева), где  $\Psi = \{1 - 4(1 + 2i\tau)(1 + 4\xi^2 + 4\tau^2)^{-1}\} \exp\{i\tau\}$ , а  $\Psi$  удовлетворяет уравнению  $i\Psi_\tau + 0,5 \cdot \Psi_{\xi\xi} + |\Psi|^2 \Psi = 0$

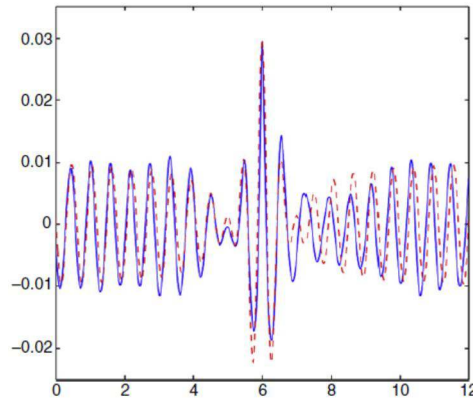


Рис. 3.12. Сравнение экспериментально наблюдаемой волны аномальной амплитуды (сплошная кривая) с наполнением огибающей, представляющей собой солитон Перегринна (пунктир) [20]. По оси ординат – амплитуда в метрах, по оси абсцисс – время в секундах

Подобное возмущение возникает в поле волнового движения и затем исчезает, что соответствует рассмотренному выше появлению и исчезновению короткоживущей аномальной волны за счет интерференции

пакета стоячих волн спектра модуляционной неустойчивости, движущихся с разной скоростью под действием основной волны. Важно отметить, что в обсуждаемом одномерном случае максимальная амплитуда аномальной волны (бризера) в три раза превышает среднюю амплитуду волнения.

В технологическом университете Гамбурга был проведен эксперимент в резервуаре с водой и размерами  $15 \times 1,5 \times 1,6$  метра для волнового движения с  $k_0 A \approx 0,1$  и обнаружено соответствие возникшей волны аномальной амплитуды (сплошная кривая, ср. с рис. 3.10) с солитоном Перегринна (пунктирная кривая).

Таким образом, волны аномальной амплитуды в условиях развитого волнения, которые представляются как перманентно существующие и непредсказуемо проявляющие себя в этих условиях автоволны – солитонобразные возмущения с переменной амплитудой [15–17], в действительности весьма определенно генерируются модуляционной неустойчивостью. Она формирует волну (или огибающую) аномальной амплитуды за счет вынужденной интерференции мод спектра неустойчивости под действием волнового движения. Однако следует заметить, что тот тип огибающей вида солитона Перегринна не является наиболее распространенным [36, 37] что может быть связано не только с несимметричным спектром модуляционной неустойчивости и сходящимися фронтами волн, но и с недостатками описания этого процесса уравнениями вида Лайтилла-НУШ.

**Механизм образования волн аномальной амплитуды.** Рассмотрим этот процесс на более простом примере, разобранным в первых двух разделах. При различных начальных амплитудах мод  $u_n$  и  $u_{-n}$ , для которых значение волновых чисел  $K_n^2$  попадает в интервал  $1 + \frac{2|n| - N}{N} \sqrt{1 - \delta}$ , имеет место их неравномерный рост при  $\{-\delta + u_o^2 \sin \Phi_n^*\} = \gamma > 0$ . Мода с большей амплитудой растет медленнее, чем мода меньшей амплитуды. Для разности амплитуд из уравнений (1.21) – (1.24) получим

$$\frac{\partial(u_m - u_{-m})}{\partial t} = \{-\delta - u_o^2 \sin \Phi_n^*\} \cdot (u_m - u_{-m}),$$

которое и описывает динамику выравнивания растущих амплитуд мод. Выравнивание амплитуд и их рост происходит уже в процессе развития неустойчивости. Для корректного выяснения поведения разности фаз этих мод полезно использовать уравнения системы (1.21) – (1.24), откуда получим

$$\frac{d(\phi_n - \phi_{-n})}{dt} = 2 \frac{d(\phi_n - \phi_0)}{dt} = 2(u_n^2 - u_{-n}^2) \cdot \left\{ 1 + \frac{(K_n^2 - u_0^2)}{(u_n^2 + u_{-n}^2)} + \frac{2}{(u_n^2 + u_{-n}^2)} \sum_{m>0}^N u_m u_{-m} \cos \Phi_m \right\}.$$

Следует отметить, что при выравнивании амплитуд мод разность фаз уже не меняется на начальной стадии развитой неустойчивости. Таким образом, несмотря

на синхронизацию основной волной суммарных фаз мод спектра  $\Phi_n \rightarrow \Phi_n^*$  каждая пара мод на нелинейной стадии процесса сохраняет разность фаз, что приводит к навязанной основной волной интерференции. Но это не значит, что каждая сформированная парой мод стоячая волна не меняет своего положения относительно основной волны.

Рассмотрим детальнее поведение фаз растущих мод. Полезно перейти в систему отсчета, в которой фаза основной волны не меняется. В этой системе отсчета

$$\frac{d\phi_n}{dt} - \frac{d\phi_0}{dt} = K_n^2 - u_0^2 \left\{ \frac{u_{-n}}{u_n} \cos\Phi_n + 1 \right\} + \left\{ u_n^2 + 2 \sum_{m>0}^N u_m u_{-m} \cos\Phi_m \right\}.$$

Считая, что суммарная фаза в процессе развития неустойчивости подстраивается под свое квазиустойчивое положение  $\Phi_n^*$  и воспользовавшись тем обстоятельством, что амплитуды симметричных мод выравниваются  $u_m \approx u_{-m}$ , получим с точностью до квадратичных слагаемых по  $u_n^2$

$$\frac{d\phi_n}{dt} - \frac{d\phi_0}{dt} = K_n^2 - u_0^2 \left\{ \frac{u_0^2 - u_n^2 - K_n^2 + u_0^2 + 2u_n^2}{u_0^2 + 2u_n^2} \right\} + \left\{ u_n^2 + \sum_{m>0}^N u_m^2 \frac{u_0^2 - K_m^2}{u_0^2} \right\} \approx 2(K_n^2 - u_0^2),$$

причем отметим, что вследствие асимметрии  $-\sum_{m>0}^N u_m^2 \frac{u_0^2 - K_m^2}{u_0^2}$  в начальный момент равно нулю и на начальной стадии остается малым. Сдвигая фазу основной волны на  $\pi/4$ , представим волновой пакет спектра в виде

$$a - u_0 \exp[i\pi/4] \propto 2 \sum_{m>0}^N u_m \cdot \text{Cos} \{ -K_m \xi + 2(K_n^2 - u_0^2)t + \alpha_n \},$$

где  $\alpha_n = (\frac{\Phi_n^* - \pi/2}{2})$ . Полученное выражение – это набор стоячих волн. Более короткие  $K_m > u_0$  возмущения, отставшие от основной волны из-за меньшей фазовой скорости, располагаются в отрицательной области и двигаются в положительном направлении, а более длинные  $K_m < u_0$  находятся в положительной области и движутся в отрицательном направлении. То есть более длинные стоячие волны  $K_m < u_0$  движутся навстречу более коротким  $K_m > u_0$ , причем с уменьшением амплитуды основной волны энергия в большей степени оказывается сосредоточенной в длинноволновой части спектра огибающей. Чем более отличается длина стоячей волны, образованной парой мод, от длины растущего с максимальным инкрементом возмущения, тем больше скорость изменения ее фазы. Интерференция этих стоячих волн, навязанная основной волной, является вынужденной [18] и ускоряется с изменением амплитуды основной волны. Процесс интерференции набора стоячих волн, формирующих аномальную огибающую, можно усмотреть в представленных в работе [19] наблюдениях. Детальный анализ возникновения волны аномальной амплитуды в случае плоского волнового фронта в составе цуга из трехволн экспериментально был прежде проведен в работе [63] и теоретически в работах [14, 35]. Одна такая волна возникала среди нескольких десятков тысяч волн, как показали подсчеты, представленные в работе [64], где данные усреднялись как по ансамблю реализаций, так и в одном и том же ва-

рианте расчета [13] через моменты времени, равные жизненному циклу аномально большой волны. В работе [36] отмечалось, что, вообще говоря, в наблюдениях обнаружилось несколько видов волн аномальной амплитуды. Причем обсуждаемый выше случай возникновения волн-убийц относился к типу «три сестры», то есть это ярко выраженная тройная волна с центральным высоким всплеском. Этот тип характерен для волновых фронтов, распространяющихся под малыми углами к друг другу. Увеличение угла между волновыми фронтами способно значительно увеличивать центральный всплеск в цуге волн, подавляя соседние возмущения [13, 14].

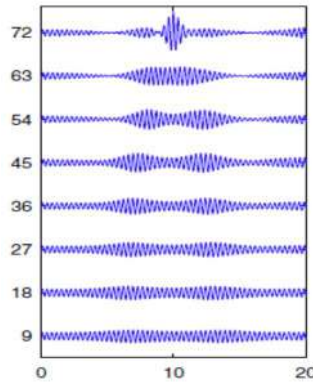


Рис. 3.13. Эволюция профиля волны аномальной амплитуды в эксперименте [19]. По оси ординат смещение области формирования аномальной волны (в метрах) для последовательных моментов времени, по оси абсцисс – область модуляции (в метрах)

Ван де Бремер и его коллеги на той же самой установке для волновых фронтов поверхностных волн, распространяющихся под углами 60–120 градусов, увидели [65] возникновение одиночной волны аномальной амплитуды – волны Дропнера<sup>9</sup>. То есть природа разных видов волн аномальной амплитуды, по-видимому, в большей степени связана с интерференционными явлениями в двумерной динамике распространения волновых фронтов.

#### 4. МОДУЛЯЦИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ СЛОЯ КОНВЕКЦИИ И ЭФФЕКТ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ДИНАМО

В разделе показано, что в результате каскада структурно-фазовых превращений в тонком слое конвективно неустойчивых жидкости или газа в рамках модели описания Проктора–Сивашинского, справедливой для

<sup>9</sup> Волна Дропнера – названа по аналогии с одиночной волной аномальной амплитуды высотой 25,6 метра, которая наблюдалась в 1995 году на нефтяной платформе «Дропнер» в Северном море.

низкого уровня теплообмена на границах слоя, формируется система тороидальных вихревых конвективных ячеек. При этом учет полоидальных вихрей в рамках обобщенной модели Проктора – Сивашинского – Письмена приводит к модуляционной неустойчивости развитой конвекции и формированию вихрей большого масштаба, то есть к эффекту регулярного гидродинамического динамо, предсказанного С. С. Моисеевым.

В ряде приложений, таких как тонкая облачность, конвекция между близко расположенными плохо проводящими тепло поверхностями, большой интерес представляла модель Проктора – Сивашинского [38, 39], которая была использована для описания процесса развития конвекции в тонком слое жидкости с плохо проводящими тепло границами. Авторы работ [40] обнаружили стационарные решения и изучили их устойчивость.

Особенность модели в том, что она выделяет один пространственный масштаб взаимодействия, оставляя для эволюции системы возможность выбрать характер симметрии. Все пространственные возмущения одного размера, но разной ориентации взаимодействуют между собой. То есть нелинейность в системе векторная. Оказалось, что наличие минимумов потенциала взаимодействия мод, абсолютная величина векторов волновых чисел которых неизменна, определяет выбор симметрии и, соответственно, характеристики пространственной структуры. Модифицируя в рамках подобной обобщенной модели Проктора – Сивашинского структуру потенциала взаимодействия мод можно за счет изменения числа минимумов изменить симметрию устойчивых решений.

Перспективность модели Проктора – Сивашинского проявилась также в возможности, при учете полоидальных вихрей внутри тонкого слоя, сформировать обобщенную модель Проктора – Сивашинского – Письмена [41], которая как показали дальнейшие исследования была способна корректно описать процесс трансформации энергии периодической структуры тороидальных вихрей Проктора – Сивашинского в энергию крупномасштабного полоидального вихревого движения [42]. Это явление «гидродинамического динамо» ответственно за формирование крупных вихрей в конвективных слоях, в частности в атмосфере планет. Эти процессы являются следствием вторичной, уже модуляционной неустойчивости системы развитых конвективных ячеек, в результате которой не только появляется самоподобная структура – конвективные ячейки разного масштаба, но и формируется крупномасштабный полоидальный вихрь [43, 44]. Это явление, которое ранее исследовали только для нерегулярных моделей (см. подробный обзор [25]), как и предполагал С. С. Моисеев, может иметь место в результате процесса неустойчивости регулярной пространственной конвективной структуры конечной амплитуды.

Полагая слой жидкости (или газа) тонким, можно проинтегрировать все возмущения, обусловленные конвекцией, по высоте слоя и перейти к двумерному описанию [38, 39] (см., также, [45]). В двумерной геометрии уравнение Проктора – Сивашинского для температурного поля конвекции принимает вид

$$\frac{\partial \varphi}{\partial T} + \nabla^4 \varphi + \nabla[(2 - \gamma_V \varphi - |\nabla \varphi|^2) \nabla \varphi] + a \varphi = 0. \quad (4.1)$$

где двумерный оператор  $\nabla \phi = \vec{i} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \zeta} + \vec{j} \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \vartheta}$ , причем  $\vec{i}, \vec{j}$  - единичные ортогональные к друг другу единичные векторы в плоскости  $(\zeta, \vartheta)$  раздела сред. Следует обратить внимание, на тот факт, что квадратичная нелокальная (то есть наличие производных по времени или по координате) нелинейность в уравнении присутствует в виде слагаемого, пропорционального  $\gamma_V$  и обусловлена зависимостью вязкости от температуры по высоте слоя, а нелокальная кубическая учтена членом, пропорциональным  $\varphi^3$ . Если не учитывать температурную зависимость вязкости  $\gamma_V = 0$ , в модели, которую принято называть моделью Проктора – Сивашинского, остается лишь нелокальная кубическая нелинейность  $\nabla[|\nabla \varphi|^2 \nabla \varphi]$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial T} + \nabla^4 \varphi + \nabla[(2 - |\nabla \varphi|^2) \nabla \varphi] + a \varphi = 0, \quad (4.2)$$

Именно это уравнение можно представить в виде  $\partial \varphi / \partial T = -\delta F[\varphi] / \delta \varphi$ , где  $\delta F[\varphi] / \delta \varphi$  – вариационная производная, а функционал

$$F[\varphi] = -\int d\zeta \cdot d\vartheta \cdot \left\{ (\nabla \varphi)^2 - \frac{1}{4} (\nabla \varphi)^4 - \frac{1}{2} (\nabla^2 \varphi)^2 - \frac{a}{2} \varphi^2 \right\}. \quad (4.3)$$

Особенность этой модели в том, что она описывает также конвекцию Марадони и конвекцию слоя с одной из свободных границ.

Наиболее интересным явлением в конвекции тонкого слоя жидкости являются процессы изменения топологии и интенсивности пространственных конвективных структур, которые как оказалось не сложно исследовать. Эти процессы, как будет показано ниже, являются аналогами фазовых превращений второго рода, когда в системе изменяется топология и отчасти интенсивность пространственной структуры конвекции.

Ограничимся случаем отсутствия зависимости вязкости от температуры ( $\gamma_V = 0$ ). Уравнение, которое определяет динамику температурного поля этого процесса в горизонтальной плоскости  $(x, y)$  имеет вид

$$\frac{\partial \Phi}{\partial T} = \varepsilon^2 \Phi - (1 - \nabla^2)^2 \Phi + \frac{1}{3} \nabla(\nabla \Phi |\Phi|^2) + \varepsilon^2 f, \quad (4.4)$$

где  $\Phi$  – нормированная температура,  $f$  – случайная функция, описывающая внешний шум, а величину  $\varepsilon^2 = e$ , определяющую превышение порога развития конвекции, полагаем, как и прежде достаточно малой ( $0 < \varepsilon < 1$ ). Решение представим в форме ряда  $\Phi = \varepsilon \sum_j A_j \exp(i\vec{k}_j \vec{r})$

с  $|\vec{k}_j| = 1$ . При заменах  $T \cdot \varepsilon^2 = t$ , для медленных амплитуд  $A_j$  в отсутствии шума получим удобное представление модели Проктора – Сивашинского для описания конвекции

$$\frac{\partial A_j}{\partial t} = A_j - \sum_{i=1}^N V_{ij} |A_i|^2 A_j + f, \quad (4.5)$$

где коэффициенты взаимодействия определены соотношениями

$$V_{ij} = 1, \\ V_{ij} = (2/3) \left( 1 - 2(\vec{k}_i \vec{k}_j)^2 \right) = (2/3) (1 + 2 \cos^2 \vartheta_{ij}), \quad (4.6)$$

а  $\vartheta_{ij}$  – угол между векторами  $\vec{k}_i$  и  $\vec{k}_j$ . Выражения (4.5) – (4.6) нужно дополнить начальными значениями амплитуд спектра  $A_j$ . То есть  $A_j|_{t=0} = A_{j0}$ .

В отличие от уравнения Свифта–Хоэнберга, где кубическая нелинейность из качественных соображений представлена в изотропной форме, здесь нелинейность векторная, что и является причиной последовательных изменений в топологии конвективных структур.

Ширина интервала неустойчивости в  $k$  – пространстве представляет собой кольцо – средний радиус которого равен единице, а ширина порядка величины относительной надпороговости  $\varepsilon$ , т. е. много меньше единицы. Во время развития неустойчивости из-за роста нелинейных членов эффективный инкремент мод, лежащих вне весьма малой окрестности вблизи единичной окружности, будет убывать и может изменить знак, что приведет к сужению спектра к единичной окружности в  $k$ -пространстве. Так как целью дальнейших исследований будет изучение устойчивости пространственных структур с характерным размером порядка  $2\pi/k \propto 2\pi$  и важной характеристикой для визуализации результатов моделирования будет четкость данных структур, то ниже ограничимся рассмотрением несколько идеализированной модели явле-

ния, полагая, что спектр колебаний уже располагается на единичной окружности в  $k$ -пространстве.

Из результатов предварительных исследований [40] стало ясно, что в системе возможно существование по крайней мере двух стационарных (или квазистационарных) решений в виде валиковой структуры (валы) (см. рис. 4.1 а), и в виде поля квадратных ячеек (см. рис. 4.1 б).

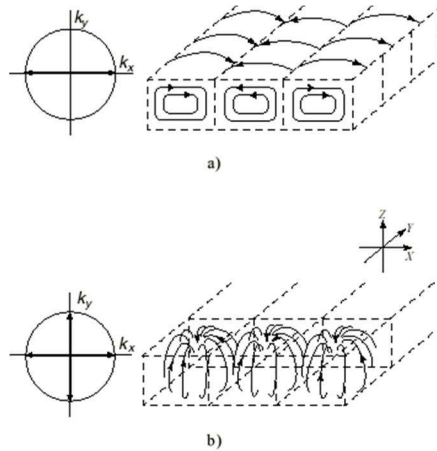


Рис. 4.1. Конвективные структуры: валы (а) и квадратные ячейки (б)

Из уравнений (4.5) – (4.6) при начальных условиях вида  $A_j |_{t=0} = A_{j0}$  видно, что в начальный момент развитие процесса будет определяться взрывным экспоненциальным ростом амплитуд спектра с одинаковым линейным инкрементом, равным единице в данном масштабе времени. Ограничение темпов роста происходит при необходимости учета второго слагаемого (21.5), что отвечает нелинейному инкременту, равному

$$(\text{Im } \omega)_{NL} = 1 - \left\langle \sum_{i=1}^N V_{ij} |A_i|^2 \right\rangle \propto 1 - \langle V \rangle \sum_{i=1}^N A_i^2, \quad (4.7)$$

причем среднее значение потенциала взаимодействия

$$\langle V \rangle \propto \frac{4}{3}. \quad (4.8)$$

Откуда в начале процесса активной стадии взаимодействия мод, когда амплитуды мод спектра примерно одинаковы, получим для плотности возмущений такого «аморфного состояния»

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i^2 \approx I_{amor} = \frac{3}{4}. \quad (4.9)$$

Покажем, что аморфное состояние неустойчиво. Рассмотрим нелинейный инкремент нарастания (или декремент затухания, что зависит от знака выражения)  $j$ -той моды (очевидно  $\text{Im } \omega_L = 1$ )

$$(\text{Im } \omega)_{jNL} = 1 - \sum_{i=1}^N V_{ij} |A_i|^2. \quad (4.10)$$

В конце линейной стадии быстрого роста амплитуд возмущений и достижения так называемого «аморфного» состояния, когда нелинейные инкременты становятся значительно меньше единицы, процесс резко замедляется. В результате случайного выброса одной из мод (то есть если одна из мод оказывается больше других), то для нее второе слагаемое правой части становится меньше, чем у соседних мод. То есть для этой моды большей амплитуды величина (4–10) остается положительно определенной и наибольшей, а для соседних мод нелинейный инкремент оказывается или меньше, или даже отрицательным, что отвечает их затуханию. Окрестность растущих мод быстро уменьшается и в результате в спектре остается лишь две моды, сдвинутые на угол  $\pi$ , а полная энергия такой валиковой структуры равна  $I = 1$ .

В действительности и это состояние неустойчиво, что приводит к росту бокового спектра  $\mathcal{G} = \pi/2$  относительно моды-лидера, где также в результате конкуренции, которая развивается по тому же сценарию, формируется лишь одна мода  $A_2 = A(\mathcal{G} = \pi/2)$ . Основная мода  $A_1 = A(\mathcal{G} = 0)$  несколько уменьшает свою амплитуду, а мода  $A_2 = A(\mathcal{G} = \pi/2)$  увеличивает свою, пока они не выровняются. В результате формируется состояние, структура которого представляет собой четырехгранные ячейки. Энергия такого состояния оказывается несколько больше  $I = 1,2$ . Каждое из этих двух состояний характеризуется различными значениями интенсивности и имеет различную топологию.

Пусть  $\mathcal{G}_s(t=0)$  для каждой моды заданы равномерно от нуля до  $2\pi$ , и разбить следует интервал на  $N$  равных частей (количество которых равно числу базовых мод). Тогда, если потребовать нулевых значений на границах, пространственная зависимость каждой  $n$ -ой моды будет представлять собой

$$A_{n,m} \text{Sin}(2\pi nx) \text{Sin}(2\pi ny), \quad (4.11)$$

где  $n$ ,  $m$  (их можно представить как  $n = N \cdot \cos \vartheta_s$ ,  $m = N \cdot \sin \vartheta_s$ ) – целые числа, причем  $N^2 = n^2 + m^2$ . При расчетах, вообще говоря, достаточно суммировать по  $n$ , так как  $m$  определяется из соотношения  $m^2 = N^2 - n^2$ . Очевидно

$$n \leq N, \quad m = \sqrt{N^2 - n^2} \geq 0. \quad (4.12)$$

То есть в этом случае (21.11) можно записать как

$$A_{n, \sqrt{N^2 - n^2}} \sin(2\pi n x) \sin(2\pi y \sqrt{N^2 - n^2}). \quad (4.13)$$

Развитие возмущений в системе, как показывает численный анализ уравнения (4.5), происходит следующим образом. Из начальных флуктуаций быстро возбуждается широкий спектр по  $\mathcal{G}$ . Значение квадратичной формы этого спектра  $I = \frac{1}{N} \sum_j A_j^2$  можно оценить, приравняв правую часть (21.5) нулю, при этом получим значение близкое к 0,75. В случае большого числа мод при высокой точности расчетов система задерживается в своем развитии, оставаясь в динамическом равновесии. Для дальнейшего развития – «кристаллизации», одна из мод должна получить порцию энергии, превышающую некоторый порог. То есть в этих условиях необходимо наличие определенного уровня шума – флуктуаций. Это достигается при конечном значении шума  $f \neq 0$ , или при уменьшении точности расчетов, что, как отмечается в [46] эквивалентно. Подобные случаи, когда шум способен спровоцировать или ускорить процесс неустойчивости собраны в книге [47]. Исследования процесса обнаружили следующую динамику изменения интегральных характеристик процесса со временем.

Именно после первого всплеска производной  $\partial I / \partial t$  формируется аморфная структура, причем вплоть до второго всплеска величина  $I \approx 0,75$  мало изменяется. Следующий всплеск  $\partial I / \partial t$  сигнализирует о появлении нестабильной структуры (валы и модулированные в продольном направлении валы) с новым значением  $1 < I \leq 1,07$  после этого всплеска производной  $\partial I / \partial t$  валы испытывают продольную модуляцию, период которой уменьшается, и следующий третий всплеск производной  $\partial I / \partial t$  приводит к появлению стабильной структуры конвективных ячеек с  $I = 1,2$ . Подобное поведение системы убеждает в существовании структурно-фазовых переходов в данной системе (см. рис. 4.2).

Функцией состояния, как легко увидеть, является величина  $I$ . Выше было показано, что структуры, которые возникают при переходах, описываемых всплеском производной этой функции, имеют отличимые

топологии и характеризуются ее фиксированными значениями. Для каждой структуры имеется определенное равновесное значение функции состояния. Тем не менее несмотря на продолжительное время существования каждой квазистационарной структуры существует механизм ее разрушения и формирования структуры с иной топологией. Вообще говоря, времена развития релаксационных процессов при движении системы к более равновесному состоянию обычно определяются разностью значений функции состояния после перехода и до него. Чем больше эта разность, тем быстрее происходит процесс перехода из одного состояния в другое. Важно отметить и другое: последовательность смены состояний определяется временами развития неустойчивостей (выполняющих роль релаксационных процессов) обеспечивающих переход ко все более приближающемуся к равновесному состоянию системы. Причем ранее проявляют себя более быстрые релаксационные процессы, обусловленные большими перепадами равновесных значений функции состояния. Убедимся, что и в этом случае все явления происходят в подобной последовательности и в рамках подобного сценария [48].

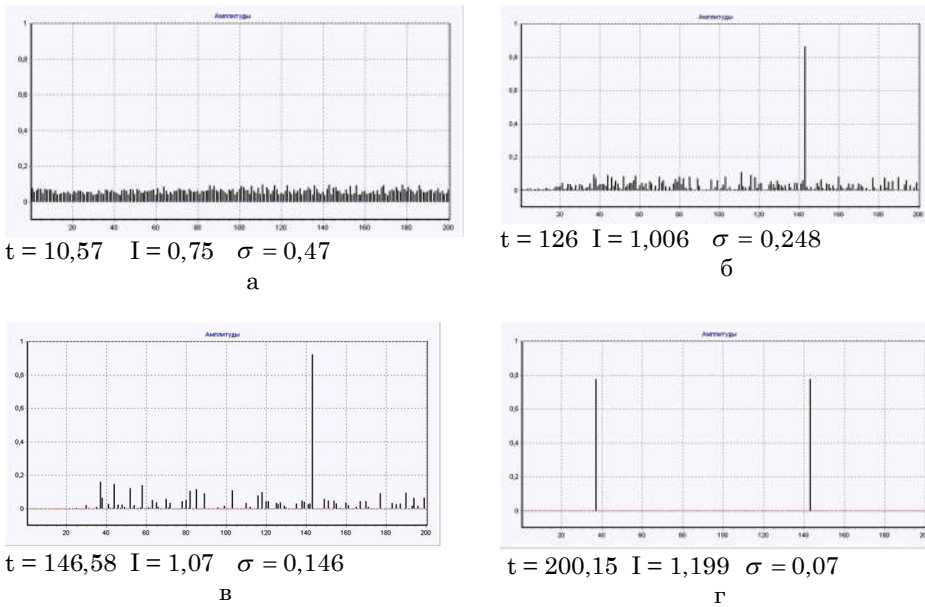


Рис. 4.2. Этапы развития неустойчивости: спектры аморфного состояния (а), короткоживущего относительно нестабильного состояния (б – конвективные валы), промежуточного короткоживущего нестабильного состояния (в – нестабильные модулированные в продольном направлении конвективные валы) и стабильного состояния (г – конвективные ячейки) [45]

Именно численный анализ модели позволил подтвердить наличие структурно-фазовых переходов (см. рис. 4.3).

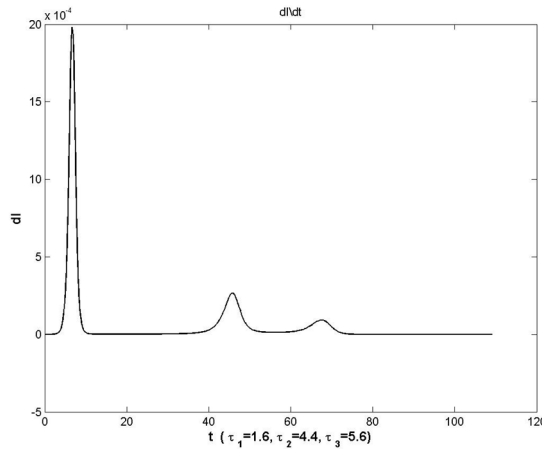


Рис. 4.3. Поведение производной функции состояния. Характерные времена переходных процессов  $\tau_1 = 1,6$  – время возникновения «аморфного» состояния  $\tau_2 = 4,4$  – время формирования выраженных валобразных структур  $\tau_3 \approx 5,6$  – время формирования системы ячеек для одной из реализаций процесса установления конвективного движения

Можно убедиться в том, что времена формирования состояний  $\tau_n$  обратно пропорциональны разности между значениями  $I = \sum_i A_i^2$  после структурно-фазового перехода  $I_n^{(+)} = (\sum_i A_i^2)_n^{(+)}$  и до этого перехода  $I_n^{(-)} = (\sum_i A_i^2)_n^{(-)}$ . То есть

$$\tau_n : \left\{ \left( \sum_i A_i^2 \right)_n^{(+)} - \sum_i A_i^2 \right\}^{-1} = \Delta I_n^{-1} \quad (4.14)$$

Легко видеть, что

$$\tau_3 / \tau_2 \approx \Delta I_2 / \Delta I_3. \quad (4.15)$$

Таким образом, на основе численного исследования модели Проктора – Сивашинского было доказано, что функцией состояния, обладающего определенной топологией, является сумма квадратов амплитуд мод  $I$ . Каждое состояние, имеющее определенную топологию, характеризуется определенным равновесным значением функции состояния. Квазиустойчивые состояния разрушаются из-за неустойчивостей, время развития которых можно оценить по величине импульса во времени произ-

водной функции состояния. Показано, что характерные времена неустойчивостей, разрушающих прежнее и формирующих новое состояние обратно пропорциональны разности между значениями функции состояния после и до структурно-фазового перехода. Также показано, что более быстрые релаксационные процессы, то есть структурно-фазовые переходы предшествуют более медленным, что видно из рис. 4.2 и рис. 4.3.

Особенностью модели Проктора – Сивашинского для описания конвекции является наличие трех состояний. Времена структурных переходов между метастабильными состояниями много меньше времени их существования. Характерный размер конвективных образований в режиме развитой неустойчивости и принятых единицах измерения порядка  $2\pi/k \propto 2\pi$ , а длина волновых векторов порядка единицы. Потенциал взаимодействия пространственных мод  $V_{ij} = (2/3)(1 + 2 \cos^2 \vartheta_{ij})$  имеет глубокий минимум для углов  $\vartheta_{ij} = \vartheta_i - \vartheta_j$  между векторами  $\vec{k}_i$  и  $\vec{k}_j$  двух пространственных мод  $\vartheta_{ij} = \pm\pi/2$ . Именно эти минимумы, как показано еще в работах [49] порождают неустойчивость структуры валов. Ибо существование минимума  $V_{ij}$  для мод с относительно небольшими амплитудами позволяет им продолжать свой рост, подавляя при этом возникшие прежде возмущения. При приближении к стабильному состоянию пространственная структура избавляется от множества дефектов, причем наблюдается корреляция между относительной долей наблюдаемых визуально (геометрически) дефектов структуры и величиной дефектности, определяемой как отношение квадратов амплитуд мод спектра, не отвечающего системе квадратных ячеек к полной сумме квадратов мод.

Впервые о возможности возникновения модуляционной неустойчивости системы конвективных ячеек в чрезвычайно продуктивной модели Проктора – Сивашинского – Письмена [41] было заявлено в докладе [42]. Эта модуляция системы развитых конвективных ячеек в тонком слое жидкости между плохо проводящими тепло горизонтальными поверхностями (формирование которой обсуждалось выше) обусловлена генерацией вихрей иной природы, нежели те, которые формируют конвективную структуру. В результате развития модуляционной неустойчивости в системе развитой регулярной структуры конвективных ячеек – тороидальных вихрей возникают также плоские вихри большого размера. Другими словами, это эффект гидродинамического (вихревого) динамо [43, 44], которое в отличие от рассмотренных хорошо известных физических моделей в среде со спиральной гидродинамической турбулентностью (подробнее см. обзор [25]) является регулярным процессом и не обязательно обусловлен наличием нескомпенсированной спиральности в системе.

Модель Проктора – Сивашинского в результате модификации автором работы [41] описывает конвекцию, подобную рассмотренной выше, однако с учетом полоидальной скорости  $\vec{U}_{\text{tor}} = \text{rot}(\vec{e}_z \Psi)$ ,

$$\Phi = \varepsilon^2 \Phi - (1 - \nabla^2)^2 \Phi + \frac{1}{3} \nabla (\nabla \Phi |\Phi|^2) + \gamma_{\text{Pr}} \nabla \Phi \times \nabla \Psi \quad (4.16)$$

$$\nabla^2 \Psi = \nabla \nabla^2 \Phi \times \nabla \Phi, \quad (4.17)$$

где  $\gamma_{\text{Pr}}$  – величина обратная числу Прандтля  $\text{Pr} = \nu/\kappa$ , характеризующему неравновесное состояние жидкости,  $\nu$  – кинематическая вязкость, здесь  $\kappa$  – удельная теплопроводность, при этом  $\varepsilon \ll 1$ .

Порог вторичной уже модуляционной неустойчивости определяется обращением в нуль  $\varepsilon_2 = 27b^2\Gamma^2/20 - 1$ , где  $\Gamma = \varepsilon \cdot \gamma_{\text{Pr}}$ ,  $b = \sqrt{5/3}A$  – перенормированная амплитуда возмущений в первичной неустойчивости, рассмотренной выше.

При превышении порога ( $\varepsilon_2 > 0$ ) возникают условия для существования вторичной неустойчивости, причем максимумы инкремента

$$\text{Im } \omega_{\text{max}} = 1 - 6b^2/5 + 27\Gamma^2 b^4/200 + 2/27\Gamma^2 \quad (4.18)$$

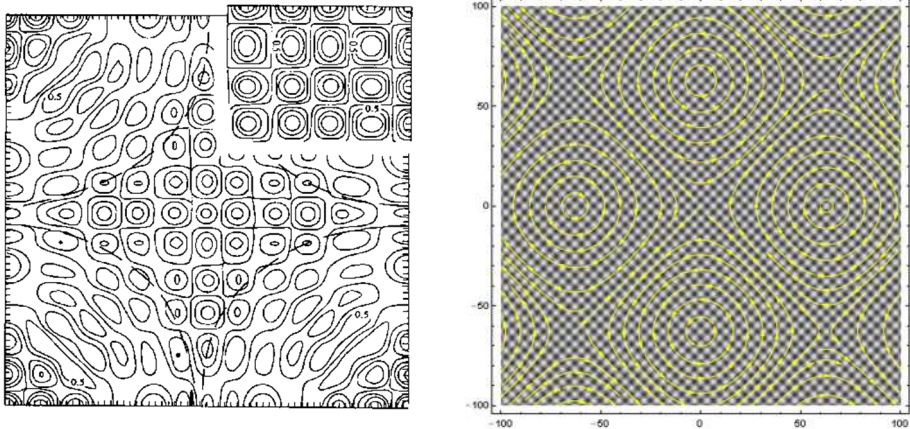


Рис. 4.4. Слева регулярный дефект в конвективной структуре. В правом верхнем углу фрагмент первичной невозмущенной структуры. Пунктиром показаны характерные линии тока крупномасштабных вихрей. Справа на фоне поля модулированных конвективных ячеек вид больших полоидальных вихрей

находятся вблизи основных мод первичной структуры ( $k_x = \pm 1, k_y = 0$  и  $k_x = 0, k_y = \pm 1$ ) на взаимно перпендикулярных направлениях на расстоянии от этих точек, равных  $\Delta = (\sqrt{2}/b\Gamma) |\varepsilon_2| \ll 1$ . При приближении в пространстве волновых чисел к модам первичной структуры инкремент модуляционной неустойчивости стремится к нулю. Появление в результате модуляционной неустойчивости крупномасштабных вихревых возмущений приводит к возникновению сдвиговых течений и деформирует конвективную структуру на больших масштабах.

Уравнение, описывающее эволюцию спектров неустойчивости, имеет следующий вид

$$\dot{b}_j = b_j - \sum_j^N V_{ij} |b_i|^2 b_j + \sum_{i,n,m}^N W_{jinn} b_i b_n b_m, \quad (4.19)$$

где коэффициенты взаимодействия определены соотношениями  $V_{ij} = 1$ ,  $\vartheta$  – угол между векторами  $\vec{k}_i$  и  $\vec{k}_j$  [44]

$$V_{ij} = (2/3) \left( 1 - 2(\vec{k}_i \vec{k}_j)^2 \right) = (2/3) (1 + 2 \cos^2 \vartheta), \quad (4.20)$$

$$W_{jinn} = (\vec{k}_i \times \vec{k}_n) (\vec{k}_m \times \vec{k}_j) \left[ \frac{k_i^2 - k_n^2}{(\vec{k}_i + \vec{k}_n)^2} + \frac{k_i^2 - k_m^2}{(\vec{k}_i + \vec{k}_m)^2} \right] \delta_{\vec{k}_j, \vec{k}_i + \vec{k}_n + \vec{k}_m}. \quad (4.21)$$

Можно показать, что в условиях симметрии возникающих возмущений уравнения для основных мод конвективных ячеек (каждая из которых имеет амплитуду равную  $b$ ) и для наиболее быстро растущих мод спектра  $b_d$  (в режиме, когда в результате рассмотренных выше механизмов конкуренции остальной спектр подавлен) модуляционной неустойчивости имеют вид

$$\dot{b} = b(1 - b^2 - 4b_d^2), \quad (4.22)$$

$$\dot{b}_d = b_d(1 - b^2 - b_d^2) + \frac{2}{27\Gamma^2} b^2 b_d \theta(\varepsilon_2), \quad (4.23)$$

где появление порога модуляционной неустойчивости качественно описано с помощью тета-функции  $\theta(\varepsilon_2)$ . При превышении порога модуляционной неустойчивости, в результате её развития амплитуды мод первичной структуры уменьшаются от величин, сравнимых с единицей до значений  $b_\infty^2 = 20/27\Gamma^2$ , в то время как амплитуды основных растущих

мод спектров достигают значений  $b_{d\infty} = 1/2(1 - b_\infty^2)^{1/2}$ . Интенсивность (то есть, величина  $I = \sum |b_{k_i}|^2$ ) первичной структуры без возникновения модуляционной неустойчивости (при  $\Gamma^2 < 20/27$  первичная структура устойчива) и интенсивность дефектной структуры, которая является результатом развития данной неустойчивости оказываются равны. Дефектность развитой структуры оказывается равной  $\varepsilon_2$ .

Взаимодействие между модами, определяющими модуляцию (моды распределенного дефекта) и модами основной структуры обусловлено существованием крупномасштабных вихрей, линии тока которых в конфигурационном пространстве могут быть представлены в виде

$$\Psi \approx \varepsilon \varepsilon_2 b^2 [\cos(l_0 \xi) - \cos(l_0 \eta)], \quad (4.24)$$

где и отношение характерного линейного размера крупномасштабных вихрей  $L_V$  и линейного размера конвективной ячейки  $L_C$  равно  $L_V/L_C \approx (b\varepsilon\varepsilon_2)^{-1}$ . Возникновение таких крупномасштабных вихрей представляет собой одну из возможных реализаций эффекта гидродинамического динамо. Таким образом, при модуляционной неустойчивости системы развитых конвективных ячеек не только появляется самоподобная структура – конвективные ячейки разного масштаба, но и формируется крупномасштабный полоидальный вихрь.

Высокая пространственная четкость вихревых структур определялась небольшим превышением порога обсуждаемых неустойчивостей, которые формировали линейчатые спектры, обеспечивающие развитие последующих каскадов процессов.

## 5. СТРУКТУРЫ НА ПОВЕРХНОСТИ И В ОБЪЕМЕ КРИСТАЛЛОВ

Любая кристаллическая решетка в объеме и на поверхности твердого тела формируется в результате некоторого процесса – процесса упорядочения, первичной неустойчивости, обладающей определенным обратным характерным временем развития и насыщающейся нелинейностью. Эта нелинейность обусловлена отклонением от положения равновесия достаточно однородной подсистемы атомов, внутри которой преобладают взаимодействия с ближайшими соседними атомами. Очень часто нелинейность кубическая или выше (чаще всего соседних атомов больше, но их вклад во взаимодействие не всегда равноценный, и именно поэтому доминируют лишь некоторые типы взаимодействий). Источником неравновесности являются возмущения плотности среды, обусловленные перегревом, а значительное поглощение энергии в процессе упо-

рядочения – неустойчивости обусловлено выносом энергии упругими волнами из этой области.

Процесс возникновения первичной структуры в целом определяется, прежде всего, доминирующим механизмом взаимодействия элементов, который формирует её геометрию, характерные размеры и ориентацию. Можно предположить, что на стадии первичного процесса формирования периодической структуры происходит за счет сужения спектра возмущений плотности из-за нелинейного механизма конкуренции возмущений, подобного рассмотренным выше.

Однако кроме основного механизма взаимодействия элементов, в системе зачастую присутствует ряд и более слабых взаимодействий, проявляющих себя лишь в условиях, когда процесс построения основной (первичной) структуры близок к завершению.

Структура поверхности кристалла всегда привлекала внимание исследователей. Прежде всего потому, что отличия структуры поверхностного слоя от внутренней структуры кристалла были несомненны, в частности существовали поверхностные регулярные образования, линейные размеры которых значительно превышали соответствующие размеры элементарных ячеек кристалла. Полагали [50, 51], что твердое тело всегда стремится понизить свою поверхностную (а значит и общую) свободную энергию, образуя при этом на своих границах «горную» структуру холмов и долин. Так, например, известны поверхностные крупномасштабные ромбовидные регулярные образования на поверхности монокристалла кремния (так называемая «7×7 ячейка», где располагаются 12 выпуклостей электронной плотности, соответствующих позициям отдельных атомов [52]).

Поверхностные слои атомов, характер взаимодействия и соответствующее расположение которых отличаются от подобных параметров атомов, входящих в состав объемных слоев решетки, уже на масштабах, сравнимых с размерами элементарной ячейки, демонстрируют отклонения в регулярности, отмеченные, например, в экспериментах [53]. Были замечены периодические отклонения в положениях локальных максимумов электронной плотности на расстояниях значительно превышающих характерный размер элементарной ячейки, но какие-либо искажения границы в направлении нормали к поверхности образца не обсуждались.

Ниже представлены результаты экспериментальных исследований [54] поверхности графита методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). Исследования проводили в воздушной среде на сканирующем туннельном микроскопе СТМ-1, описанном в работе [55].

Разрешение в горизонтальной плоскости  $XU$  меньше  $1,4 \text{ \AA}$ , а по вертикали –  $0,7 \text{ \AA}$ . В качестве зонда использовались иглы, приготовленные способом электрохимического травления с вытяжкой. Очистка поверхности графита производилась скалыванием верхнего слоя непосред-

ственно перед измерением. На рис. 5.1. а, b, с представлены топографические изображения участков высоко ориентированного графита при различном увеличении, полученные сканированием в режиме стабилизации туннельного тока. Время сканирования участков – 10–20 сек. На рис. 5.1. а представлено изображение участка высоко ориентированного графита при максимальном увеличении. Наблюдаются упорядоченные ряды гексагональной структуры графита: шестиугольник состоит из атомов с разным уровнем локальной плотности состояний. Отметим, что параметры элементарной ячейки согласуются с данными, представленными в работах других авторов.

На отдельных участках образцов обнаружена периодическая модуляция поверхностной электронной плотности (крупномасштабная гофрировка), характер которой подобен (с коэффициентом подобия близким к 10) мелкомасштабной модуляции электронной плотности в пределах элементарной ячейки на поверхности графита (см. рис. 5.1. b). На другом образце (см. рис. 5.1. c) была обнаружена поверхностная гофрировка, продольные линейные размеры которой на два порядка превосходят соответствующие размеры элементарной ячейки (размер вертикальной модуляции поверхности здесь лишь вдвое больший, чем в предыдущем случае, показанном на рис. 5.1. b). Отметим, что линейный масштаб модуляции поверхностной электронной плотности, обсуждаемый в работе [55], соответствует продольному масштабу гофрировки, изображенной на рис. 5.b.

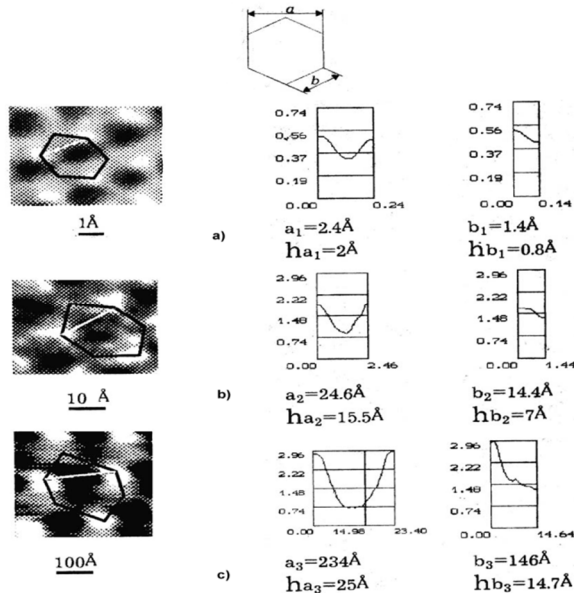


Рис. 5.1. Топографические изображения участков высоко ориентированного графита при различном увеличении, полученные методом сканирующей туннельной микроскопии [54]

Продольный масштаб гофрировки, изображенный на рис. 5.1. с, на порядок больше. Наблюдаемые отличия в характерных размерах модуляции поверхности графита связаны, видимо, с различными модификациями его внутренней структуры. Возможно, что в случае, изображенном на рис. XVI.1. b, представлена наиболее распространенная аллотропная форма углерода – графит с гексагональной структурой. Рис. 5.1. с соответствует, как можно предположить, ромбоэдрической упаковке графита. Важным в полученных экспериментальных данных является не столько факт наличия вертикальной составляющей модуляции, а скорее, несомненное подобие первичной структуры – элементарной ячейки и вторичной структуры – модуляции поверхности электронной плотности, по крайней мере, в случае, изображенном на рис. 5.1. b.

Причиной модуляционной неустойчивости, формирующей самоподобные структуры, могут быть сдвиговые напряжения, обусловленные нелинейным взаимодействием первичной структуры с несобственными возмущениями недивергентного типа, которые вблизи поверхности способны изменяться. Подход [56, 57] к описанию устойчивости решетки тоже может оказаться конструктивным. Можно рассмотреть и более простую модель.

Графит представляет собой многослойную структуру, каждый слой которой представляет собой атомы углерода, объединенные сильными ковалентными связями. Связь между слоями определяется более слабыми вандерваальсовыми взаимодействиями. Можно считать поверхность каждого слоя нерастяжимой, а вандерваальсовы силы приводят лишь к ее гофрировке. Не трудно построить модель, которая может качественно прояснить появление крупномасштабной гофрировки на поверхности графита. Рассмотрим более простой двумерный случай, причем ось  $X$  направим вдоль нерастяжимого слоя, а ось  $OY$  определим перпендикулярно границе образца. Тогда волновое число гофрировки внутри графитового образца можно записать как  $k_0 = k_{00} + a_0^2 k_0^3 / 4$  где соотношение между пространственным периодом  $\lambda$  и волновым числом периодической структуры  $k = 2\pi / \lambda$ ,  $k_{00}$  – волновое число в отсутствие гофрировки,  $a_0$  – амплитуда гофрировки, причем приведенное выше выражение справедливо для  $(k_0 a_0)^2 < 1$ . Для возмущенной системы можно записать уравнение

$$(k - i \frac{\partial}{\partial y}) \cdot a = k_{00} + \frac{k^3 |a|^2}{4} a. \quad (5.1)$$

Пусть возмущения гофрировки имеют волновые числа  $k_{\pm} = k_0 \pm K$  и амплитуды  $a_{\pm}$ , тогда для этих возмущений можно записать уравнение

$$\frac{\partial}{\partial y} a_{\pm} \pm i K a_{\pm} = i \frac{k_0^3 a_0^2}{4} a_{\mp}^*, \quad (5.2)$$

откуда не трудно найти нарастающее к поверхности решение:  $\exp\{-iKy\} \cdot \exp\{k_0^3 a_0^2 y / 4\}$ , где из-за осциллирующего множителя рост

амплитуд крупномасштабных возмущений гофрировки ограничивается. Выполняется примерное равенство  $(k_0 a_0)^2 \approx (ka)^2 + (a_{\pm} K)^2$ , где  $(k_0 a_0)^2$  значение в глубине образца. На поверхности  $(ka)^2 \approx \alpha \cdot (a_{\pm} K)^2$ , причем, как можно предположить,  $\alpha \approx 1$  для аллотропной формы, а  $\alpha \approx 0,2$  для ромбоэдрической упаковки графита.

Вместо одного устойчивого положения отдельного атома в поверхностных слоях могут появиться два и больше таких положений. Сдвиг атомных слоев в глубине кристалла заметно ослабляется, поэтому вблизи поверхности может происходить наложение однотипных периодических решеток друг на друга с последующим поворотом одной из них по отношению к более глубоко лежащей на небольшой угол.

Такие структуры носят название структур Муара (Moire structures), причем период крупномасштабной модуляции полностью определяется углом поворота  $\phi$  – с уменьшением  $\phi$  период растет. Поверхностный слой кристалла может оказаться развернут на небольшой угол относительно следующего за ним слоя, а также выходом на поверхность достаточного количества дислокаций одного знака [58–60]. При этом на поверхности кристалла вполне может возникнуть, так называемая сверхрешетка, т. е. решетка, обладающая той же топологией, что и основная, но имеющая больший период, зависящий от угла разворота. Несоответствие масштабов первичной структуры (периода решетки) в плоскостях, касательных к поверхности каждого из кристаллических слоев, способно приводить к появлению нормальных к этой поверхности напряжений вблизи границы кристалла. Эти силы, действующие как в вертикальном, так и в горизонтальном (то есть, параллельно макроскопической поверхности образца) направлениях могут при относительно низком уровне флуктуаций реализовать некоторое равновесное состояние. Это равновесное состояние должно иметь определенную глубину вертикальной модуляции поверхности кристалла, чтобы совместить масштабы на поверхности и в объеме.

Очевидно, формирование пространственной модуляции поверхностного слоя происходит в условиях воздействия более слабого физического механизма, поэтому роль флуктуаций, сопровождающих этот процесс, может оказаться существенной. В некоторых случаях флуктуации могут сорвать вторичную неустойчивость, и глубокая вертикальная модуляция поверхности может и не реализоваться. Таким образом, в первом случае (рис. 5.1. b)  $\varepsilon_2 \propto 10^{-1}$ , а во втором (рис. 5.1. c)  $\varepsilon_2 \propto 10^{-2}$ . Характерное время формирования регулярной поверхностной структуры, как следует ожидать, соответственно в 10 и 100 раз превышает время формирования атомной структуры графита.

При формировании монокристалла возникающая регулярная периодическая микроструктура – атомная решетка кристалла в нелинейной среде неустойчива и в объеме образца. Развитие этой неустойчивости (т. е. вторичного, более слабого процесса по сравнению с процессом фор-

мирования решетки монокристалла) приводит к крупномасштабному регулярному смещению атомов от положений, характерных для совершенной решетки (аналогу модуляционной неустойчивости). В местах наибольшего отклонения атомов происходит пространственный сдвиг атомных рядов и появление характерных дефектов – дислокаций. Отношение масштабов элементарной ячейки кристалла и крупномасштабной дислокационной сетки – сетки Франка – порядка  $10^{-4}$ . Если предположить, что механизм формирования сетки Франка подобен рассмотренным выше процессам, то  $\varepsilon_2 \propto 10^{-4}$ . Можно также ожидать, что характерное время формирования сетки Франка в  $10^4$  раз превышает время формирования регулярной атомной решетки. В той же пропорции находятся и силы взаимодействия, формирующие мелкомасштабную и крупномасштабную структуры.

## 6. ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ И/ЛИ МОДУЛЯЦИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТИ?

С увеличением энергии волны в средах с кубической нелинейностью появляется зависимость частоты от ее амплитуды, то есть спектр волны уширяется. Этот процесс уширения спектра прежде монохроматической волны и представляет собой модуляционную неустойчивость. То есть результатом этой неустойчивости является уширение спектра, а также и ее модуляция, амплитудная и фазовая. Причем уширение спектра происходит практически симметрично относительно частоты и волнового вектора волны большой амплитуды. В процессе такого уширения спектра преимущества получают резонансные возмущения, для которых выполнены соотношения  $2\omega_0 = \omega_1 + \omega_2$  и  $2k_0 = k_1 + k_2$ . При этом их инкремент роста отличен от нуля. Причем возмущения  $(\omega_1, k_1)$  и  $(\omega_2, k_2)$  – часто в отсутствие волны большой амплитуды не способны самостоятельно распространяться в среде, хотя это не обязательно.

В процессе развития неустойчивости амплитуды возмущений растут и их взаимодействие между собой усиливается. При этом характер резонансного взаимодействия возмущений между собой и с волной большой амплитуды описывается следующими соотношениями  $2\omega_0 = \omega_1' + \omega_2' = \omega_1'' + \omega_2''$  и  $2k_0 = k_1' + k_2' = k_1'' + k_2''$ . Именно это обстоятельство было использовано авторами работ [10, 11, 61], для описания так называемой параллельной накачки однородным в пространстве переменным магнитным полем с  $k_0 = 0$  спиновых волн. Понятно, что с развитием процесса неустойчивости возможны и другие виды взаимодействия, однако эти взаимодействия являются доминирующими, по край-

ней мере на начальной стадии уже нелинейного взаимодействия и определяют интенсивность спектра неустойчивости.

Этот подход позволил авторам [10, 11] построить достаточно эффективную теорию, которая получила название S-теории спиновых волн, где были использованы корреляторы взаимодействия пар возмущений, связанных этими резонансными условиями. Однако для описания колебаний большой амплитуды с конечной длиной волны пришлось несколько модифицировать S-теорию [12, 13], сохраняя индивидуальность каждого возмущения. Такое описание и приведено выше в данном обзоре.

Возвращаясь к параллельной накачке спиновых волн нельзя не заметить, что это в действительности традиционная параметрическая неустойчивость, о чем авторы [10, 11] отметили со всей определенностью. Ибо переменное магнитное поле изменяло параметры среды распространения спиновых волн и это мультипликативное воздействие порождало параметрическую неустойчивость этих колебаний. Действительно, как и в теории параметрических неустойчивостей, описанных уравнениями Матве и Хилла, мультипликативное воздействие переменного параметра или шума способно обеспечить экспоненциальный рост возмущений, обычно низкочастотных.

Именно поэтому в ряде работ, собранных в книге [29], В. П. Силин назвал процессы распада интенсивных, в частности ленгмюровских колебаний, параметрическими, так как длина волны этих колебаний в этих моделях была бесконечна и поле этих колебаний приводило к переменному изменению параметров плазмы. Так как в бесконечно протяженной системе плотность энергии интенсивного ленгмюровского однородного в пространстве поля конечна, как и плотность энергии возбуждаемых колебаний, то можно было попытаться согласовать задачу, то есть учесть обратное влияние возбуждаемых возмущений на поле интенсивных колебаний. Такое обобщение модели В. П. Силина было выполнено в работах, подробная библиография которых приведена в обзоре [30].

В одно время с представлением модели распада ленгмюровских колебаний в холодной плазме В. П. Силина [29], В. Е. Захаров, исследуя явление неустойчивости ленгмюровского поля высокой интенсивности в неизотермической плазме, обнаружил исключительно важный и чрезвычайно эффективный механизм поглощения энергии поля частицами плазмы [28]. Причем и здесь интенсивное поле ленгмюровских колебаний в начальный момент было однородным в пространстве, что фактически не отличалось от задачи, рассмотренной В. П. Силиным для холодной плазмы. Поэтому и модель В. Е. Захарова (уравнения Захарова) также можно отнести к параметрической неустойчивости, где корректно учтены нелинейные процессы и обратное воздействие возбуждаемого спектра колебаний на поле накачки. То есть это самосогласованная модель описания распада ленгмюровских колебаний большой амплитуды в плазме.

С другой стороны неустойчивости в моделях В. Е. Захарова и В. П. Силина часто называют модуляционными, так как спектр не-

устойчивости подобен спектру модуляционной неустойчивости, представленному в данной книге с той лишь разницей, что волновой вектор интенсивных колебаний равен нулю  $k_0 = 0$  (см. рис. 6.1).

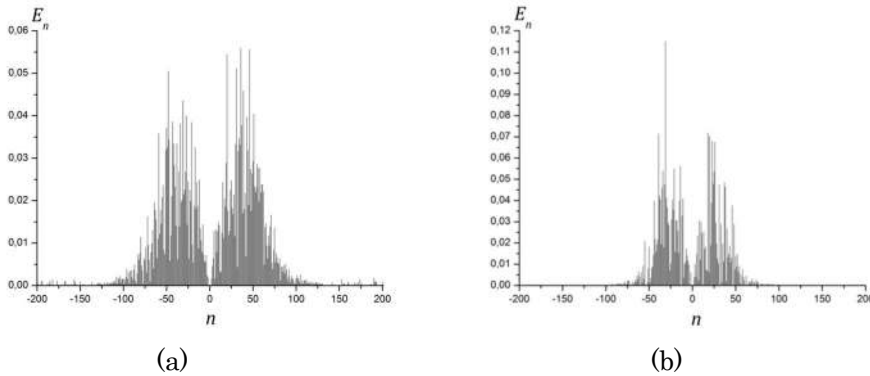


Рис. 6.1. Вид спектра неустойчивости в начале нелинейной стадии процесса в модели Захарова (а) и в модели Силина (б) [30, 31]

А результатом неустойчивости является сильная модуляция плотности  $S$  плазмы (см. рис. 6.2. и рис. 6.3).

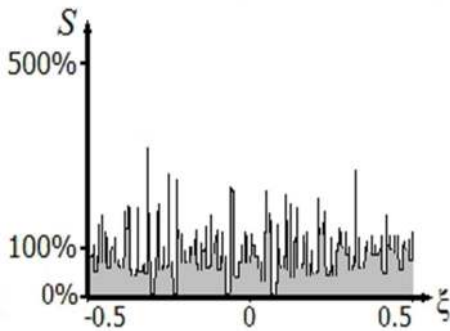


Рис. 6.2. Распределение ионов в пространстве в режиме развитой неустойчивости в модели Захарова [30]

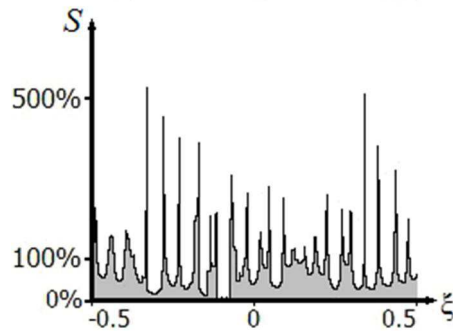


Рис. 6.3. Распределение ионов плазмы в пространстве в режиме развитой неустойчивости в модели Силина [30]

Точно также можно считать, что при нормальном падении электромагнитного излучения на поверхность плазмы, процесс возбуждения спектра поверхностных волн, рассмотренный в книге В. П. Силина [29] и обобщенный на случай самосогласованного нелинейного взаимодействия в работе [62], также представляет собой параметрическую неустойчивость, так как воздействующее на плазму поле падающей волны во всех точках поверхности раздела имеет одну амплитуду и периодически меняется со временем.

Однако тот факт, что плазма двухкомпонентная (ионы и электроны с разными характерными временами релаксации, причем связанные квазинейтральностью) приводит к тому, что все процессы существенно усложняются, и в ее описании можно увидеть черты физических явлений, прежде считавшихся отличными друг от друга. Это дало основание А. А. Рухадзе считать<sup>10</sup>, что «идеи о параметрическом воздействии излучения на плазму, сближаясь с идеями теории модуляционной неустойчивости развиваются в направлении универсальности описания плазменных неустойчивостей». Именно поэтому не предосудительно полагать такую параметрическую неустойчивость разновидностью модуляционной неустойчивости или, напротив, такую модуляционную неустойчивость считать разновидностью параметрической<sup>11</sup>.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Lighthill M. J. Contribution to the theory of waves in nonlinear dispersive system // *J. Inst. Math. Appl.* 1965. – Vol. 1. – No. 2. – P. 269–306.
2. Silin V. P. Parametric resonance in plasma // *JETP*. 1965. – Vol. 48. – No.6. – P. 1679–1691.
3. Zakharov V. E. Stability of nonlinear waves in dispersive media // *J. Theor. Prikl. Fiz.*, – 1966. – Vol. 51. – P. 668–671.
4. Benjamin T. B., Feir J. E. The disintegration of wave trains on deep water // *J. Fluid Mech.* 1967. – Vol. 27. – P. 417–430.
5. Zakharov V. E. The Instability of Waves in Nonlinear Dispersive Media // *Sov. Phys. JETP*. 1967. – Vol. 24. – P. 740.
6. Аскарьян Г. А. Эффект самофокусировки // *УФН*. 1973. – Вып. 10. – Т. 111. – С. 249–260.
7. Куклин В. М. Роль поглинання та дисипації енергії у формуванні просторових нелінійних структур у нерівноважних середовищах // *УФЖ. Огляди*. 2004. – Т. 1, № 1. – С. 49–81. The self-similar Structures Formation in Modulation unstable Media // *Electromagnetic Phenomena*. 2004. – V. 4. – N. 1.
8. Куклина О. В., Киричок А. В., Куклин В. М. Динамика формирования самоподобных структур в нелинейных волновых диссипативных средах с нераспадным спектром // *The Journal of Kharkiv National University, physical series “Nuclei, Particles, Fields”*. 2001. – № 541. – Iss.4(16). – P. 73–76.
9. Куклин В. М., Киричок А. В., Куклина О. В. О механизмах образования самоподобных структур в неравновесной сплошной среде // *Вопросы атомной науки и техники. (ВАНТ). Сер. Плазменная электроника и новые методы ускорения*. 2000. – № 1. – С. 222–224.
10. Захаров В. Е., Львов В. С., Старобинец С. С. Турбулентность спиновых волн за порогом их параметрического возбуждения // *УФН*. 1974. – Т. 114. – №. 4. – С. 609–654.
11. Львов В. С. Нелинейные спиновые волны. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1987. – 272 с.
12. Chernousenko V. M., Kuklin V. M., Panchenko I. P., Vorob'ev V. M. Spatial Dissipative Structures. // *Nonlinear World (IV Int. Workshop on Nonlinear and Turbulent Proc. in Physics)*. Singapore, World Scientific 1990, V. 2, p.776–803.
13. Белкин Е. В., Киричок А. В., Куклин В. М., Приймак А. В. Аномальные волны в модуляционно неустойчивом волновом поле // *East Eur. J. Phys.* 2014. – V. 1 – №. 2. – С. 4–39.
14. Belkin E. V. The mathematical models of modulation instability processes of waves in media with cubic nonlinearity / Manuscript. PhD-thesis by speciality 01.05.02 – Mathematical modeling and computational methods. V.N. Karasin Kharkiv National University, Kharkiv, 2010. – 150 p.

<sup>10</sup> См. [https://ufn.ru/dates/various/2016/silin\\_90.pdf](https://ufn.ru/dates/various/2016/silin_90.pdf) – материалы поздравлений В. П. Силина, подготовленные, несомненно, А. А. Рухадзе.

<sup>11</sup> Тем более, что многие математики формально и не без оснований считают модуляционную неустойчивость важным частным случаем параметрической.

15. E. Kuznetsov E. Solitons in a parametrically unstable plasma /Akademii Nauk SSSR Doklady, 236, 1977, pp. 575–577.
16. Peregrine D. Water waves, nonlinear Schrodinger equations and their solutions/ Journal of the Australian Mathematical Society Series 25 (1) (1983) 16–43.
17. Akhmediev N., Korneev V. Modulation instability and periodic solutions of the nonlinear Schrodinger equation / Theoretical and Mathematical Physics 69 (2) (1986) 1089–1093.
18. Куклин В. М. Об интерференционной природе формирования тонкой структуры лазерных импульсов и аномальных всплесков амплитуды колебаний в модели Лайтхилла / VIII Харитоновские научные чтения. 21–24 марта, 2006 г. Саров, Россия, Сб. докладов. – Саров, 2006. – С. 450–456; Effect of induced interference and the formation of spatial perturbation fine structure in nonequilibrium open-ended system // Вопросы атомной науки и техники (ВАНТ) Сер. «Плазменная электроника и новые методы ускорения». – 2006. – № 5(5). – С. 63–68.
19. Chabchoub A., Hoffmann N, Onorato M and Akhmediev N. Super RogueWaves: Observation of a Higher-Order Breather in Water Waves./ Physical Review X 2, 011015 (2012).
20. Chabchoub A., Hoffmann N., Akhmediev N. Rogue wave observation in a water wave tank / Physical Review Letters 106 (20) (2011) 204502.
21. Бердичевский А. Гигантские волны-убийцы все еще представляют опасность для судоходства. – РИА новости, 2007. – Режим доступа: <http://transbez.com/info/sail/wave-killer.html>.
22. Киричок А. В., Куклин В. М., Панченко И. П., Моисеев С. С., Письмен Л. М. Динамика образования крупномасштабных вихрей в режиме конвективной неустойчивости. // Inter. Conf. “Physics in Ukraine”, Kiev, 22–27 June 1993. Proc. Contr. Pap. ITP, 1993. – P. 76–80.
23. Киричок А. В., Куклин В. М., Панченко И. П. О возможности динамо-механизма в неравновесной конвективной среде. Доклады НАНУ / 1997. – № 4. – С. 87–92.
24. Kirichok A. V. and Kuklin V. M. Allocated Imperfections of Developed Convective Structures. Physics and Chemistry of the Earth Part A 1999. – № 6. – P. 533–538.
25. Вихревое динамо в спиральной турбулентности. //Авт.: Моисеев С. С., Оганесян К. Р., Руткевич П. Б., Тур А. В., Хоменко Г. А., Яновский В. В. в кн.: Интегрируемость и кинетические уравнения для солитонов. Под ред. В. Г. Барьяхтара, В. Е. Захарова, В. М. Черноусенко. Сб. науч. тр. Киев, Наукова Думка, 1990. – 472 с.
26. О распределенных дефектах на поверхности и в объеме кристалла. // Авт: Бабаскин А. А., Каменский Ю. В., Кириченко В. Г., Киричок А. В., Куклин В. М., Твардовский А. // Вісник ХНУ ім. В. Н. Каразіна 2000. – № 49. – В.4 (12). – С. 23–28.
27. Куклин В. М. Избранные главы (теоретическая физика) – X: ХНУ имени В. Н. Каразіна. 2018. – 224 с.
28. Захаров В. Е. Коллапс ленгмюровских волн // ЖЭТФ. 1972. – Т. 62. –№ 5. – С. 1745–1759.
29. Силин В. П. Параметрический резонанс в плазме // ЖЭТФ. 1965. –Т. 48. – С. 1679.
30. Загородний А. Г., Киричок А. В., Куклин В. М. Одномерные модели модуляционной неустойчивости интенсивных ленгмюровских колебаний в плазме на основе уравнений Захарова и Силина // УФН. 2016. – Т. 186, №7. – С. 743–762.
31. Kirichok A. V., Kuklin V. M., Pryjmak A. V., Zagorodny A. G. Ion heating, burnout of the HF field and ion sound generation with the development of modulation instability of an intensive Langmuir wave in a plasma. Physics of Plasmas, 22, 092118 (2015).
32. Наплеков Д. М. Яновский В. В., Тур А. В. Минимальная модель ускорения Ферми. // ЖТФ. 2010. – Т. 80. – С. 11–22.
33. Карпман В. И. Нелинейные волны в диспергирующих средах. – М.: Наука. – 1973. – 175 с.
34. Белкин Е. В., Гуштин И. В. Анализ численной модели модуляционной неустойчивости волны конечной амплитуды в нелинейной среде // Вісник ХНУ ім. В. Н. Каразіна. – Сер. Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління. 2008 – № 809 (9). –С. 20–31.
35. Белкин Е. В., Киричок А. В., Куклин В. М. Модуляционная неустойчивость волн, поддерживаемых внешним источником в среде с поглощением // ВАНТ, Сер. «Плазменная электроника и новые методы ускорения. 2010. – No. 4(68)). – С. 291–295.
36. Dyachenko A. I, Zakharov V. E. Modulation instability of stokes wave – Freak wave // JETP Lett. 2005. –Vol.81(6). – P. 255–259.
37. Kharif C., Pelinovsky E., Slunyaev A. Rogue Waves in the Ocean. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2009.
38. Chapman, J. and Proctor, M.R.E., Nonlinear Rayleigh-Benard convection between poorly conducting boundaries, /J. Fluid Mech. 1980. – No 101. – P. 759–765.
39. Gertsberg, V. and Sivashinsky G. E., Large cells in nonlinear Rayleigh-Benard convection// Prog. Theor. Phys., 1981. – No 66. – P. 1219–1229.

40. Маломед Б. А., Непомнящий А. А., Трибельский М. П. Двумерные квазипериодические структуры в неравновесных системах. ЖЭТФ. 1989. – Т. 96. – С. 684–699.
41. Pismen, L., Inertial effects in long-scale thermal convection, *Phys. Lett. A*. 1986. – V. 116. – P. 241–243.
42. Киричок А. В., Куклин В. М., Панченко И. П., Моисеев С. С., Письмен Л. М. Динамика образования крупномасштабных вихрей в режиме конвективной неустойчивости. // *Inter. Conf. "Physics in Ukraine"*, Kiev, 22–27 June 1993. Proc. Contr. Pap. ITR, 1993. – P. 76–80.
43. Киричок А. В., Куклин В. М., Панченко И. П. О возможности динамо-механизма в неравновесной конвективной среде. Доклады НАНУ / 1997. – №4. – С. 87–92.
44. Kirichok A. V. and Kuklin V. M. Allocated Imperfections of Developed Convective Structures. *Physics and Chemistry of the Earth Part A* 1999. – № 6. – P. 533–538.
45. I. V. Gushchin, A. V. Kirichok, V. M. Kuklin. Pattern formation in convective media/ «*Journal of Kharkiv National University*», physical series «Nuclei, Particles, Fields» 2013. issue 1 /57. – V. 1040. – С. 4–27.
46. Белкин Е. В., Гущин И. В. Математическая модель конвекции слоя жидкости с градиентом температуры // Харьков, ХНУ, КМНТ, 2010. – Т. 1. – С. 39–40.
47. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. Пер с англ. – М.: Мир, 1987. – 400 с.
48. I. V. Gushchin, A. V. Kirichok, V. M. Kuklin. Structural-phase transitions and state function in unstable convective medium/ *Problems of Atomic Science and Technology*, 2015. – N 4 – series "Plasma Electronics and New Methods of Acceleration" – P. 252–254.
49. Структурные переходы в модели Проктора-Сивашинского/ Белкин Е. В., Гущин И. В., Киричок А. В., Куклин В. М. // ВАНТ, Сер. «Плазменная электроника и новые методы ускорения, 2010.– №4(68). – С. 296–298.
50. Кристиан Дж. Теория превращений в металлах и сплавах. Т. 1. Термодинамическая и общая кинетическая теория. – М.: Мир, 1978. – 806 с.
51. Christian J. W. Transformations in metals and alloys. – Pergamon Press, 1975.
52. Ramstad A., Brocks G., Kelly P. J. Theoretical study of Si (100) surface reconstruction // *Phys. Rev.* 1995. – V.51 – N. 20. – P. 14504.
53. Исследование асимметрии атомного изображения поверхностной решетки графита методом СТМ. // Авт.: Алекперов С. Д., Васильев С. И., Леонов В. Б., Панов В. И., Семенов А. Э. // Доклады АН СССР, Физика, 1989. – Т. 307. – № 5. – С. 1104–1109.
54. О распределенных дефектах на поверхности и в объеме кристалла. // Авт: Бабаскин А. А., Каменский Ю. В., Кириченко В. Г., Киричок А. В., Куклин В. М., Твардовский А. // Вестник ХНУ им. В. Н. Каразина, 2000.– № 49.. – В.4 (12). – С. 23–28.
55. Kamensky Yu., Limansky A., Limanskaya O. Imaging of oligonucleotides and DNA by Scanning Tunneling Microscopy. "Nano–2" Second International Conference on Nanometer Scale Science and Technology Aug. 2–6. – 1993.
56. Hill R. On the elasticity and stability of perfect crystals at finite strain // *Math. Proc. Camb. Phill. Soc.*, 1975. – V. 77. – P. 225–234.
57. Thompson J.M.T. Instabilities and catastrophes in science and engineering. – John Willey & Sons, 1982. – 320 p.
58. Фридель Ж. Дислокации. – М.: Мир, 1967. – 643 с.
59. Fridel J. Dislocations. – Pergamon Press. 1964.
60. Эшелби Дж. Континуальная теория дислокаций. – М.: Изд. Иностран. Лит. 1963. – 247 с.
61. Suhl H. Effective nuclear spin interactions in ferromagnets.// "Phys. Rev.", 1958, v. 109, № 2, p. 606.
62. Куклин В. М., Панченко И. П. Возбуждение коротковолнового спектра поверхностных волн в плазме мощным электромагнитным излучением. Письма в ЖЭТФ, 1986, Т.43, в. 5, С. 237–239.
63. G. F. Clauss, M. Klein. The New Year Wave: Spatial Evolution of an Extreme Sea State/ *J. Offshore Mech. Arct. Eng* 131(4), 041001 (Oct 01, 2009) (9 pages).
64. Belkin E., Kirichok A., Kuklin V. Extreme wave events at the initial stage of the modulational instability in a forced and damped wave medium // arXiv preprint arXiv:1211.6623. – 2012.
65. M. L. McAllister, S. Draycott, T. A. A. Adcock, P. H. Taylor and T. S. van den Bremer // V.860. 10 February 2019; pp. 767-786. <https://doi.org/10.1017/jfm.2018.886>.

---

**Захаров В. Е., Карась В. И., Соколенко В. И. Неравновесная кинетика электрон-фононной подсистемы кристалла при действии переменных электрических и магнитных полей как основа электро- и магнито-пластического эффектов // Проблемы теоретической физики. Научные труды. Выпуск 3 / В. Г. Барьяхтар, Ю. Л. Болотин, А. Г. Данилевич, В. Е. Захаров, В. И. Карась, В. М. Куклин, Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, В. И. Соколенко, А. В. Тур, А. А. Туркин, В. В. Яновский ; под общей редакцией А. Г. Загороднего, Н. Ф. Шульги, ред. вып. В. В. Яновский – Х. : ХНУ имени В. Н. Каразина, 2019. – Вып. 3. – 398 с. (Серия «Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды»).**

#### **Аннотация**

Представлены результаты теоретических и экспериментальных исследований магнитного кристалла в электрическом и магнитном полях. В результате последовательного кинетического рассмотрения неравновесной динамики электрон-фононной подсистемы на основе предложенного метода численного решения системы уравнений Больцмана для функций распределения электронов и фононов показано, что электрическое поле возбуждает электронную подсистему, которая, передавая энергию в фононную подсистему, создает большое количество коротковолновых фононов, эффективно влияющих на дефекты решетки (точечные, линейные, границы разных фаз), что приводит к перераспределению и уменьшению плотности дефектов кристаллической решетки, устранению повреждений, снижению локальных пиков напряжений и снижению степени деградации конструктивных свойств материалов. Для магнитных кристаллов в изменяющемся магнитном поле установлено, что под действием индукционного электрического поля функция распределения электронов становится неравновесной вблизи энергии Ферми и благодаря электрон-фононным столкновениям передает существенную энергию в фононную подсистему, формируя неравновесную функцию распределения фононов. На основе модифицированной модели Гранато–Люкке и Ландау–Гофмана с помощью рассчитанной функции распределения фононов показано, что сила влияния фононов на дислокации значительно больше, чем это было бы в случае термодинамического равновесия при нагревании образца на наблюдаемые в эксперименте 12 К.

**Ключевые слова:** численное моделирование, кинетические процессы, магнитные кристаллы, магнитное поле, электрическое поле, структура, механические, диссипативные и магнитные характеристики.

PACS numbers: 61.72.Ff, 61.72.Nh, 62.20.Hg, 63.20.kd, 63.20.kp, 75.80.+q, 83.60.Np

#### **Реферат**

Теоретические и экспериментальные исследования и численное моделирование кинетических процессов в магнитных кристаллах, находящихся в изменяющемся магнитном поле и/или импульсном электрическом поле, были направлены на установление основных механизмов их влияния на структуру, механические, диссипативные и магнитные характеристики магнитных кристаллов (на

примере сильно деформированной феррито-перлитной стали 15Х2НМФА и никеля). Представлены результаты последовательного кинетического рассмотрения неравновесной динамики электрон-фононной подсистемы магнитного кристалла в электрическом поле на основе предложенного метода численного решения системы уравнений Больцмана для функций распределения электронов и фононов без разложения функции распределения электронов в ряд по энергии фононов. Показано, что электрическое поле возбуждает электронную подсистему, которая, передавая энергию в фононную подсистему, создает большое количество коротковолновых фононов, эффективно влияющих на дефекты решетки (точечные, линейные, границы разных фаз), что приводит к перераспределению и уменьшению плотности дефектов кристаллической решетки, устранению повреждений, снижению локальных пиков напряжений и снижению степени деградации конструктивных свойств материалов. Установлено, что под действием индукционного электрического поля функция распределения электронов становится неравновесной вблизи энергии Ферми и благодаря электрон-фононным столкновениям передает существенную энергию в фононную подсистему, формируя неравновесную функцию распределения фононов. На основе модифицированной модели Гранато–Люкке и Ландау–Гофмана с помощью рассчитанной функции распределения фононов показано, что сила влияния фононов на дислокации значительно больше, чем это было бы в случае термодинамического равновесия при нагревании образца на наблюдаемые в эксперименте 12 К.

**Ключевые слова:** численное моделирование, кинетические процессы, магнитные кристаллы, магнитное поле, электрическое поле, структура, механические, диссипативные и магнитные характеристики.

PACS numbers: 61.72.Ff, 61.72.Nh, 62.20.Hg, 63.20.kd, 63.20.kp, 75.80.+q, 83.60.Np

**Захаров В. Є., Карась В. І., Соколенко В. І. Нерівноважна кінетика електрон-фононної підсистеми кристала під час змінних електричних і магнітних полів як основа електро- і магніто-пластичного ефектів**

#### Анотація

Наведено результати теоретичних та експериментальних досліджень магнітного кристала в електричному і магнітному полях. У результаті послідовного кінетичного розгляду нерівноважної динаміки електрон-фононної підсистеми магнітного кристала в електричному полі на основі запропонованого метода числового розв'язку системи рівнянь Больцмана для функцій розподілу електронів та фононів показано, що електричне поле збуджує електронну підсистему, яка, передаючи енергію в фононну підсистему, створює велику кількість короткохвильових фононів, що ефективно впливають на дефекти решітки (точкові, лінійні, межі різних фаз), що призводить до перерозподілу та зменшення густини дефектів кристалічної решітки, усунення пошкоджень, зниження локальних піків напружень та ступеню деградації конструкційних властивостей матеріалів. Для магнітних кристалів у магнітному полі, яке змінюється, встановлено, що під дією індукційного електричного поля функція розподілу електронів стає нерівноважною поряд з енергією Фермі та завдяки електрон-фононним зіткненням передає суттєву енергію в фононну підсистему, формуючи нерівноважну функцію розподілу фононів. На основі модифікованої моделі Гранато–Люкке та Ландау–Гофмана за допомогою розрахованої функції розподілу фононів показано, що сила впливу фононів на дислокації значно більша, ніж це було б у випадку тер-

модинамічної рівноваги під час нагрівання зразка на спостереженні в експерименті 12 К.

**Ключові слова:** числове моделювання, кінетичні процеси, магнітні кристали, магнітне поле, електричне поле, структура, механічні, дисипативні та магнітні характеристики.

PACS numbers: 61.72.Ff, 61.72.Hh, 62.20.Hg, 63.20.kd, 63.20.kp, 75.80.+q, 83.60.Np

### Реферат

Теоретичні та експериментальні дослідження та числове моделювання кінетичних процесів в магнітних кристалах, що знаходяться в магнітному полі, яке змінюється, та/або імпульсному електричному полі, були спрямовані на встановлення основних механізмів їх впливу на структуру, механічні, дисипативні та магнітні характеристики магнітних кристалів (на прикладі сильно деформованої ферито-перлітної сталі 15X2НМФА та нікеля). Наведено результати послідовного кінетичного розгляду нерівноважної динаміки електрон-фононої підсистеми магнітного кристала в електричному полі на основі запропонованого метода числового розв'язку системи рівнянь Больцмана для функцій розподілу електронів та фононів без розкладу функції розподілу електронів у ряд по енергії фононів. Показано, що електричне поле збуджує електронну підсистему, яка, передаючи енергію в фононну підсистему, створює велику кількість короткохвильових фононів, що ефективно впливають на дефекти решітки (точкові, лінійні, межі різних фаз), що призводить до перерозподілу та зменшення густини дефектів кристалічної решітки, усунення пошкоджень, зниження локальних піків напружень та ступеню деградації конструкційних властивостей матеріалів. Встановлено, що під дією індукційного електричного поля функція розподілу електронів стає нерівноважною поряд з енергією Фермі та завдяки електрон-фононним зіткненням передає суттєву енергію в фононну підсистему, формуючи нерівноважну функцію розподілу фононів. На основі модифікованої моделі Гранато–Люкке та Ландау–Гофмана за допомогою розрахованої функції розподілу фононів показано, що сила впливу фононів на дислокації значно більша, ніж це було б у випадку термодинамічної рівноваги під час нагрівання зразка на спостереженні в експерименті 12 К.

**Ключові слова:** числове моделювання, кінетичні процеси, магнітні кристали, магнітне поле, електричне поле, структура, механічні, дисипативні та магнітні характеристики.

PACS numbers: 61.72.Ff, 61.72.Hh, 62.20.Hg, 63.20.kd, 63.20.kp, 75.80.+q, 83.60.Np

**Zakharov V. E., Karas V. I., Sokolenko V. I. Non-equilibrium kinetics of electron-phonon subsystem of crystals at alternating electric and/or magnetic fields action as base electric- and magnetic-plasticity effects**

### Annotation

The results of theoretical and experimental studies of a magnetic crystal in electric and magnetic fields are presented. As a result of a consistent kinetic analysis of the nonequilibrium dynamics of the electron-phonon subsystem, based on the proposed numerical solution of the system of Boltzmann equations for electron and phonon distribution functions, it is shown that an electric field excites an electronic subsystem that, by transferring energy to a phonon subsystem, creates a large number

of short-wave phonons, effectively affecting the lattice defects (point, linear, boundaries of different phases), which leads to redistribution and reduction of the lattice defects densities, elimination of damage, reducing the local peak stresses and reduce the degree of degradation of the properties of constructional materials. For magnetic crystals in a changing magnetic field it is established that under the action of an induction electric field the electron distribution function becomes nonequilibrium near the Fermi energy and, due to electron-phonon collisions, transfers significant energy to the phonon subsystem, forming a nonequilibrium phonon distribution function. On the basis of the modified model of Granato–Luccke and Landau–Hoffmann, it was shown with the help of the calculated phonon distribution function that the force of the effect of phonons on the dislocation is much larger than it would be in the case of thermodynamic equilibrium when the sample was heated to the observed values of 12 K.

**Key words:** numerical modeling, kinetic processes, magnetic crystals, magnetic field, electric field, structure, mechanical, dissipative and magnetic characteristics.

PACS numbers: 61.72.Ff, 61.72.Hh, 62.20.Hg, 63.20.kd, 63.20.kp, 75.80.+q, 83.60.Np

#### Abstract

Theoretical and experimental studies and numerical simulation of kinetic processes in magnetic crystals located in a changing magnetic field and/or pulsed electric field are aimed at establishing the main mechanisms of influence on the structure, mechanical, dissipative and magnetic characteristics of magnetic crystals (for example, strongly deformed 15Kh2NMFA and nickel). The results of a sequential kinetic analysis of the nonequilibrium dynamics of the electron-phonon subsystem of a magnetic crystal in an electric field are presented on the basis of the proposed method for numerically solving the Boltzmann equation for the electron and phonon distribution functions without expanding the electron distribution function in a series in the phonon energy. It is shown that the electric field excites the electronic subsystem, which, by transferring energy to the phonon subsystem, creates a large number of short-wave phonons effectively affecting the lattice defects (point, linear, boundaries of different phases), which leads to a redistribution and a decrease in the density of crystal lattice defects, Elimination of damage, reduction of local peak stresses and reduction of degradation of structural properties of materials. It is established that under the action of an induction electric field the electron distribution function becomes nonequilibrium near the Fermi energy and, due to electron-phonon collisions, transfers significant energy to the phonon subsystem, forming a nonequilibrium phonon distribution function. On the basis of the modified model of the Granato–Luccke and Landau–Gofman with the help of the calculated phonon distribution function, it is shown that the force of the effect of phonons on the dislocation is much larger than it would be in the case of thermodynamic equilibrium when heated to 12 K observed in the experiment.

**Key words:** numerical modeling, kinetic processes, magnetic crystals, magnetic field, electric field, structure, mechanical, dissipative and magnetic characteristics.

PACS numbers: 61.72.Ff, 61.72.Hh, 62.20.Hg, 63.20.Kd, 63.20.Kp, 75.80.+q, 81.40.Lm, 81.70.Bt

**Туркин А. А. Теория фазовых превращений в неупорядоченных сплавах замещения под облучением** // Проблемы теоретической физики. Научные труды. Выпуск 3 / В. Г. Барьяхтар, Ю. Л. Болотин, А. Г. Данилевич, В. Е. Захаров, В. И. Карась, В. М. Куклин, Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, В. И. Соколенко, А. В. Тур, А. А. Туркин, В. В. Яновский ; под общей редакцией А. Г. Загороднего, Н. Ф. Шульги, ред. вып. В. В. Яновский – Х. : ХНУ имени В. Н. Каразина, 2019. – Вып. 3. – 398 с. (Серия «Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды»).

#### **Аннотация**

Построена теория фазовых превращений в неупорядоченных бинарных сплавах замещения под облучением. Исследован рост выделений новой фазы в концентрированных сплавах замещения с учетом основных механизмов потери фазовой стабильности: радиационно-индуцированной сегрегации и каскадного разупорядочения. Разработан метод построения радиационно-модифицированных фазовых диаграмм. Сформулирована модель низкотемпературного переноса атомов вследствие перемешивания в каскадах смещений, которая учитывает неоднородность пространственной структуры каскада. С помощью моделирования по методу Монте-Карло установлено, что низкотемпературная диффузия носит гауссов характер. Исследовано влияние потери когерентности на характер эволюции выделений при каскадообразующем облучении. Построена модель эволюции смешанного ансамбля когерентных, полукogerентных и некогерентных выделений. Показано, что зарождение когерентных выделений, их рост с последующей потерей когерентности, а также каскадное растворение больших некогерентных выделений могут происходить одновременно, что приводит к формированию узкого квазистационарного распределения по размерам полукogerентных выделений. Предложен новый численный метод для моделирования кинетики зарождения, роста и поздней стадии эволюции выделений новой фазы. Проведено моделирование кинетики распада в сплавах с сильными гетерофазными флуктуациями. Показано, что гетерофазные флуктуации замедляют гомогенное зарождение даже в сильно перенасыщенных твердых растворах.

**Ключевые слова:** облучение, бинарные сплавы, радиационно-индуцированная сегрегация, фазовая стабильность, радиационно-модифицированные фазовые диаграммы.

PACS numbers: 61.80.Az; 61.82.Bg; 81.30.Mh

#### **Реферат**

Обобщены результаты теоретических исследований кинетики фазовых превращений и стабильности фаз в облучаемых сплавах, и построена теория фазовых превращений в неупорядоченных бинарных сплавах замещения под облучением. Сформулирована модель радиационно-индуцированной сегрегации в концентрированных бинарных сплавах. Проведен анализ устойчивости стационарного распределения компонентов в облучаемом сплаве относительно пространственных флуктуаций состава сплава и показано, что стационарное состояние асимптотически устойчиво. Для нахождения средних концентраций радиа-

ционных точечных дефектов построена модель эффективной среды для сплавов. Показано, что радиационно-индуцированная сегрегация не приводит к возникновению эффектов предпочтения (преференса) в сплаве без выделений. Необходимой предпосылкой для сегрегационного преференса является различие состава сплава в окрестности стоков различных типов. Исследован рост выделений новой фазы в концентрированных сплавах замещения с учетом основных механизмов потери фазовой стабильности: радиационно-индуцированной сегрегации и каскадного разупорядочения. Условия стабильности фаз сформулированы в терминах радиационно-модифицированных растворимостей примеси по отношению к когерентным и некогерентным выделениям. Разработан метод построения радиационно-модифицированных фазовых диаграмм. Построена модель низкотемпературного растворения пластинчатых выделений каскадами атомных соударений, которая согласуется с экспериментальными данными. Сформулирована модель низкотемпературного переноса атомов вследствие перемешивания в каскадах смещений, которая учитывает неоднородность пространственной структуры каскада. Показано, что доминирующий вклад в области термического пика вносит атомное перемешивание. С помощью моделирования по методу Монте-Карло установлено, что диффузия носит гауссов характер. Исследовано влияние потери когерентности на характер эволюции выделений при каскадообразующем облучении. Сформулирована модель эволюции смешанного ансамбля когерентных, полукogerентных и некогерентных выделений. Показано, что зарождение когерентных выделений, их рост с последующей потерей когерентности, а также каскадное растворение больших некогерентных выделений могут происходить одновременно, что приводит к формированию узкого квазистационарного распределения по размерам полукogerентных выделений. Предложен новый численный метод для моделирования кинетики зарождения, роста и поздней стадии эволюции выделений новой фазы. В развитом методе гибридный подход (конечно-разностная система уравнений в области малых размеров и континуальное описание в области больших размеров) используется в комбинации с методом линий по временной переменной и неравномерной сеткой по пространственной переменной. Проведено моделирование кинетики распада в сплавах с сильными гетерофазными флуктуациями, в которых стандартные модели зарождения и коалесценции не применимы. Показано, что гетерофазные флуктуации замедляют гомогенное зарождение даже в сильно пересыщенных твердых растворах. Гетерофазные флуктуации влияют на форму функции распределения выделений на стадии перехода к асимптотическому режиму коалесценции. В сплавах без облучения на больших временах распределение выделений по размерам стремится к устойчивому распределению, близкому к автомодельному решению Лифшица–Слэзова.

**Ключевые слова:** облучение, бинарные сплавы, радиационно-индуцированная сегрегация, фазовая стабильность, радиационно-модифицированные фазовые диаграммы.

PACS numbers: 61.80.Az; 61.82.Bg; 81.30.Mh

**Туркін А. А. Теорія фазових перетворень у неупорядкованих сплавах заміщення під опроміненням**

#### **Анотація**

Побудовано теорію фазових перетворень у неупорядкованих бінарних сплавах заміщення під опроміненням. Досліджено зростання виділень нової фази в концентрованих сплавах заміщення з урахуванням основних механізмів

втрати фазової стабільності: радіаційно-індукованої сегрегації та каскадного розупорядкування. Розроблено метод побудови радіаційно-модифікованих фазових діаграм. Сформульовано модель низькотемпературного перенесення атомів внаслідок перемішування в каскадах зсувів, яка враховує неоднорідність просторової структури каскаду. За допомогою моделювання за методом Монте-Карло встановлено, що низькотемпературна дифузія має гаусів характер. Розглянуто вплив втрати когерентності на характер еволюції виділень під час каскадоутворюючого опромінення. Побудовано модель еволюції змішаного ансамблю когерентних, напівкогерентних і некогерентних виділень. Показано, що зародження когерентних виділень, їх зростання з наступною втратою когерентності, а також каскадне розчинення великих некогерентних виділень можуть відбуватися одночасно, що приводить до формування вузького квазістаціонарного розподілу за розмірами напівкогерентних виділень. Розроблено новий чисельний метод для моделювання кінетики зародження, перехідної стадії і пізньої стадії еволюції виділень нової фази. Проведено моделювання кінетики розпаду в сплавах із сильними гетерофазними флуктуаціями у термічних умовах і під опроміненням. Показано, що гетерофазні флуктуації сповільнюють гомогенне зародження навіть у сильно перенасичених твердих розчинах.

**Ключові слова:** опромінення, бінарні сплави, радіаційно-індукована сегрегація, фазова стабільність, радіаційно-модифіковані фазові діаграми.

PACS numbers: 61.80.Az; 61.82.Bg; 81.30.Mh

### Реферат

Узагальнено результати теоретичних досліджень кінетики фазових перетворень і стабільності фаз у сплавах, що опромінюються, і побудована теорія фазових перетворень у неупорядкованих бінарних сплавах заміщення під опроміненням. Сформульовано модель радіаційно-індукованої сегрегації в концентрованих бінарних сплавах. Проведено аналіз стійкості стаціонарного розподілу компонентів у сплаві під опроміненням щодо просторових флуктуацій складу сплаву, і показано, що стаціонарний стан є асимптотично стійким. Для знаходження середніх концентрацій радіаційних точкових дефектів побудовано модель ефективного поглинаючого середовища для сплавів. Показано, що радіаційно-індукована сегрегація не призводить до виникнення ефектів переваги (преференса) у сплаві без виділень. Необхідною передумовою для сегрегаційного преференса є відмінність складу сплаву поблизу стоків різних типів. Досліджено зростання виділень нової фази в концентрованих сплавах заміщення з урахуванням основних механізмів втрати фазової стабільності: радіаційно-індукованої сегрегації й каскадного розупорядкування. Умови стабільності фаз сформульовані в термінах радіаційно-модифікованих розчинностей домішки стосовно когерентних і некогерентних виділень. Розроблено метод побудови радіаційно-модифікованих фазових діаграм. Побудовано модель низькотемпературного розчинення пластинчастих виділень каскадами атомних зіткнень, яка узгоджується з експериментальними даними. Сформульовано модель низькотемпературного перенесення атомів внаслідок перемішування в каскадах зсувів, яка враховує неоднорідність просторової структури каскаду. Показано, що домінуючий внесок робить атомне перемішування в області термічного піка. За допомогою моделювання за методом Монте-Карло встановлено, що дифузія має гаусів характер. Досліджено вплив втрати когерентності на характер еволюції виділень під час каскадотворчого опромінення. Сформульовано модель еволюції змішаного ансамблю когерентних, напівкогерентних і некогерентних виділень. Показано, що

зародження когерентних виділень, їх зростання з наступною втратою когерентності, а також каскадне розчинення більших некогерентних виділень можуть відбуватися одночасно, що призводить до формування вузького квазістаціонарного розподілу за розмірами напівкогерентних виділень. Запропоновано новий чисельний метод для моделювання кінетики зародження, зростання і пізньої стадії еволюції виділень нової фази. У розвинутому методі гібридний підхід (кінцево-різницева система рівнянь в області малих розмірів і континуальний опис в області великих розмірів) використовується в комбінації з методом ліній за часом змінюю і нерівномірною сіткою за просторовою змінною. Проведено моделювання кінетики розпаду в сплавах із сильними гетерофазними флуктуаціями, де стандартні моделі зародження і коалесценції не придатні. Показано, що гетерофазні флуктуації сповільнюють гомогенне зародження навіть у сильно перенасичених твердих розчинах. Гетерофазні флуктуації впливають на форму функції розподілу виділень на стадії переходу до асимптотичного режиму коалесценції. У сплавах без опромінення на великих часах розподіл виділень за розмірами наближається до стійкого розподілу, близького до автомоделної функції Ліфшиця–Сльозова.

**Ключові слова:** опромінення, бінарні сплави, радіаційно-індукована сегрегація, фазова стабільність, радіаційно-модифіковані фазові діаграми.

PACS numbers: 61.80.Az; 61.82.Bg; 81.30.Mh

**Turkin A. A. Theory of phase transformations in disordered substitutional alloys under irradiation.**

#### Annotation

The kinetics of phase transformations and phase stability in substitution random alloys under irradiation are considered. The method is developed to construct radiation-modified phase diagrams taking into account the major mechanisms of phase stability loss (radiation-induced segregation and cascade disorder-dissolution of precipitates). A model of low-temperature atomic transport due to mixing in displacement cascades is formulated, which takes into account the inhomogeneity of the spatial structure of cascades. Using the Monte-Carlo simulations it was established that low-temperature diffusion is Gaussian. A new numerical method is developed for simulation of precipitate ensemble evolution, i. e. the nucleation, the transient stage and the coarsening stage (Ostwald ripening). Evolution of a mixed population of coherent, semicoherent and incoherent precipitates in irradiated alloys is studied. It is shown that under certain conditions in irradiated alloys a narrow quasistationary size distribution of semicoherent precipitates forms. The effect of heterophase fluctuations on kinetics of diffusion-limited decomposition of supersaturated solid solutions under thermal conditions and under irradiation is studied. Simulations of precipitation kinetics in alloys with strong heterophase fluctuations are carried out, which show that heterophase fluctuations slow down the homogeneous nucleation even in highly supersaturated solid solutions.

**Keywords:** irradiation, binary alloys, radiation-induced segregation, segregation bias, phase stability, radiation-modified phase diagrams.

PACS numbers: 61.80.Az; 61.82.Bg; 81.30.Mh

#### Abstract

The results of theoretical studies of the kinetics of phase transformations and phase stability in irradiated alloys are generalized and a theory of phase transformations in substitution random binary alloys under irradiation is constructed. A model of radiation-induced segregation in concentrated binary alloys is formulat-

ed. The stability of the steady state distribution of components in the irradiated alloy with respect to the spatial fluctuations of composition is analyzed. It is shown that the steady state is asymptotically stable. To find the average concentrations of radiation point defects in alloy a model of the effective lossy medium is constructed. It is shown that radiation-induced segregation does not lead to preferential absorption of one type of point defects by a certain type of sinks (bias effects) in alloys without precipitates. A necessary prerequisite for bias effects is the difference in the alloy composition in vicinity of sinks of various types. The growth of new phase precipitates in concentrated substitutional alloys is studied, taking into account the main mechanisms of phase stability loss: radiation-induced segregation and cascade disordering. The phase stability conditions are formulated in terms of radiation-modified solute solubilities with respect to coherent and incoherent precipitates. A method for constructing radiation-modified phase diagrams has been developed. A model of low-temperature dissolution of platelet precipitates by displacement cascades is constructed, which agrees with the experimental data. A model of low-temperature atomic transport due to mixing in displacement cascades is formulated, which takes into account the inhomogeneity of cascade spatial structure. It is shown that the dominant contribution to atomic mixing is due to thermal spikes in cascade regions. Using the Monte–Carlo simulations it was established that the diffusion is Gaussian. The effect of coherency loss on the precipitate evolution under cascade-producing irradiation is studied. Evolution of a mixed population of coherent, semicoherent and incoherent precipitates in irradiated alloys is modeled. It is shown that under certain conditions a quasistationary size distribution of semicoherent precipitates forms in alloys under cascade-producing irradiation. A new numerical method is developed for simulating the precipitate ensemble evolution, i. e. the nucleation, the transient stage and the coarsening stage (Ostwald ripening). In the developed method a hybrid approach (a finite-difference set of equations in the small-size region and a continual description in the region of large precipitate sizes) is used in combination with the method of lines over time variable. The effect of heterophase fluctuations on kinetics of diffusion-limited decomposition of supersaturated solid solutions under thermal conditions and under irradiation is studied. Simulations of precipitation kinetics in alloys with strong heterophase fluctuations are carried out, which show that heterophase fluctuations slow down the homogeneous nucleation even in highly supersaturated solid solutions. The heterophase fluctuations affect the shape of the precipitate size distribution at the transient stage to the asymptotic coarsening stage. Without irradiation at large time the precipitate size distribution tends to a stable distribution close to the self-similar Lifshitz–Slezov solution.

**Keywords:** irradiation, binary alloys, radiation-induced segregation, segregation bias, phase stability, radiation-modified phase diagrams.

PACS numbers: 61.80.Az; 61.82.Bg; 81.30.Mh

**Папицкий Э. А., Пентегов В. И. Фазовые переходы и спонтанно нарушенные симметрии в ранней вселенной** // Проблемы теоретической физики. Научные труды. Выпуск 3 / В. Г. Барьяхтар, Ю. Л. Болотин, А. Г. Данилевич, В. Е. Захаров, В. И. Карась, В. М. Куклин, Э. А. Папицкий, В. И. Пентегов, В. И. Соколенко, А. В. Тур, А. А. Туркин, В. В. Яновский; под общей редакцией А. Г. Загороднего, Н. Ф. Шульги, ред. вып. В. В. Яновский – X. : ХНУ имени В. Н. Каразина, 2019. – Вып.3. – 398 с. (Серия «Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды»).

#### Аннотация

Обсуждаются некоторые наиболее актуальные проблемы современной космологии, включая вопросы происхождения и эволюции нашей Вселенной и природы гравитации. В работе рассматриваются механизмы возникновения нелинейных скалярных полей и вопросы формирования пространственно неоднородной крупномасштабной структуры современной Вселенной, а также происхождение «тёмной энергии» и «тёмной материи». Подчёркивается единство законов природы в широком диапазоне энергий и температур, который охватывает 32 порядка, начиная с явлений сверхпроводимости и сверхтекучести и вплоть до планковских температур порядка  $10^{32}$  К.

**Ключевые слова:** ранняя Вселенная, уравнение состояния, фазовый переход, инфляция, космологическая постоянная, калибровочная симметрия, гравитон, скалярный бозон, тензорный бозон.

PACS numbers: 04.60.-m, 04.60.Bc, 98.80.Bp, 98.80.Cq

#### Реферат

В данном обзоре обсуждаются некоторые наиболее актуальные проблемы современной космологии, включая вопросы происхождения и эволюции нашей Вселенной и природы гравитации. Не привлекая такие широко распространённые и популярные в настоящее время понятия и методы, как супергравитация и теория струн в многомерных антидеситтеровских пространствах, авторы старались показать, что большинство проблем гравитации и космологии могут быть решены в рамках обычной квантовой теории поля. Показано, что с помощью методов и представлений, хорошо развитых в физике конденсированного состояния для описания таких макроскопических квантовых явлений, как сверхпроводимость, сверхтекучесть и фазовые переходы со спонтанным нарушением различных скрытых симметрий можно понять наиболее фундаментальные явления природы при сверхвысоких энергиях, сравнимых с энергией Планка. Это свидетельствует о единстве законов природы в чрезвычайно широком диапазоне энергий и температур, который охватывает 32 порядка, начиная с явлений сверхпроводимости и сверхтекучести квантовых ферми- и бозе-жидкостей при температурах порядка 1–100 К вплоть до планковских температур порядка  $10^{32}$  К в теории фундаментальных нелинейных бозонных полей, которая лежит в основе представлений о физическом вакууме. В работе рассматриваются механизмы возникновения нелинейных скалярных полей, и обсуждаются вопросы формирования пространственно неоднородной крупномасштаб-

ной структуры современной Вселенной, а также происхождение «тёмной энергии» и «тёмной материи».

**Ключевые слова:** ранняя Вселенная, уравнение состояния, фазовый переход, инфляция, космологическая постоянная, калибровочная симметрия, гравитон, скалярный бозон, тензорный бозон.

PACS numbers: 04.60.-m, 04.60.Bc, 98.80.Bp, 98.80.Cq

### Папицький Е. А., Пентегов В. І. Фазові переходи і спонтанно порушені симетрії у ранньому Всесвіті

#### Анотація

Обговорюються деякі найбільш актуальні проблеми сучасної космології включно із питанням походження та еволюції нашого Всесвіту і природи гравітації. В роботі розглядаються механізми виникнення нелінійних скалярних полів і питання формування просторово неоднорідної великомасштабної структури сучасного Всесвіту, а також походження «темної енергії» і «темної матерії». Наголошується на єдності законів природи в широкому діапазоні енергій і температур, який охоплює 32 порядки, починаючи з явищ надпровідності і надплинності і до планківських температур порядку  $10^{32}$  К.

**Ключові слова:** ранній Всесвіт, рівняння стану, фазовий перехід, інфляція, космологічна константа, калібрувальна симетрія, гравітон, скалярний бозон, тензорний бозон.

PACS numbers: 04.60.-m, 04.60.Bc, 98.80.Bp, 98.80.Cq

#### Реферат

В цьому огляді обговорюються деякі найбільш актуальні проблеми сучасної космології включно із питанням походження та еволюції нашого Всесвіту і природи гравітації. Без залучення таких поширених і популярних нині понять і методів, як супергравітація і теорія струн в багатовимірних антидесіттерівських просторах, автори намагалися показати, що більшість проблем гравітації і космології можуть бути вирішені в рамках звичайної квантової теорії поля. Показано, що за допомогою методів і уявлень, добре розвинених в фізиці конденсованого стану для опису таких макроскопічних квантових явищ, як надпровідність, надплинність і фазові переходи зі спонтанним порушенням різних прихованих симетрій можна зрозуміти найбільш фундаментальні явища природи за надвисоких енергій, що порівнюються із енергією Планка. Це свідчить про єдність законів природи в надзвичайно широкому діапазоні енергій і температур, який охоплює 32 порядки, починаючи з явищ надпровідності і надплинності квантових фермі- і бозе-рідин за температур порядку  $1-100$  К аж до планківських температур порядку  $10^{32}$  К в теорії фундаментальних нелінійних бозонних полів, що є основою уявлень про фізичний вакуум. В роботі розглядаються механізми виникнення нелінійних скалярних полів і обговорюються питання формування просторово неоднорідної великомасштабної структури сучасного Всесвіту, а також походження «темної енергії» і «темної матерії».

**Ключові слова:** ранній Всесвіт, рівняння стану, фазовий перехід, інфляція, космологічна константа, калібрувальна симетрія, гравітон, скалярний бозон, тензорний бозон.

PACS numbers: 04.60.-m, 04.60.Bc, 98.80.Bp, 98.80.Cq

**Pashitskii E. A., Pentegov V. I. Phase transitions and spontaneously broken symmetries in the early Universe****Annotation**

Some problems of current importance in modern cosmology, including the origin and evolution of our Universe and the nature of gravity, are examined. The paper treats the mechanisms of the emergence of nonlinear scalar fields and discusses the formation of the spatially inhomogeneous large-scale structure of the modern Universe, as well as the origin of “dark energy” and “dark matter”. The consideration emphasizes the unity of the laws of nature in an extremely wide range of energies and temperatures, which covers 32 orders of magnitude, starting with the phenomena of superconductivity and superfluidity up to Planck temperatures of the order of  $10^{32}$  K.

**Keywords:** early Universe, equation of state, phase transition, inflation, cosmological constant, gauge symmetry, graviton, scalar boson, tensor boson.

PACS numbers: 04.60.-m, 04.60.Bc, 98.80.Bp, 98.80.Cq

**Abstract**

This review touches upon some problems of current importance in modern cosmology, including the origin and evolution of our Universe and the nature of gravity. Without involving such widely used and currently popular concepts and methods as supergravity and string theory in multidimensional anti-de Sitter spaces, the authors were trying to show that most of the problems of gravity and cosmology could be solved within the framework of ordinary quantum field theory. It is shown that using methods and concepts well developed in condensed matter physics for describing such macroscopic quantum phenomena as superconductivity, superfluidity, and phase transitions with spontaneous violation of various hidden symmetries, one can understand the most fundamental phenomena of nature at ultrahigh energies comparable to Planck energy. This demonstrates the unity of the laws of nature in an extremely wide range of energies and temperatures, which covers 32 orders of magnitude, starting with the phenomena of superconductivity and superfluidity of quantum Fermi and Bose liquids at temperatures of about 1–100 K up to Planck temperatures of the order of  $10^{32}$  K in the theory of fundamental nonlinear bosonic fields, which underlies the concept of physical vacuum. The paper treats the mechanisms of the emergence of nonlinear scalar fields and discusses the formation of the spatially inhomogeneous large-scale structure of the modern Universe, as well as the origin of “dark energy” and “dark matter”.

**Keywords:** early Universe, equation of state, phase transition, inflation, cosmological constant, gauge symmetry, graviton, scalar boson, tensor boson.

PACS numbers: 04.60.-m, 04.60.Bc, 98.80.Bp, 98.80.Cq

**Болотин Ю. Л., Тур А. В., Яновский В. В. Физика планковского масштаба в терминах предельных величин** // Проблемы теоретической физики. Научные труды. Выпуск 3 / В. Г. Барьяхтар, Ю. Л. Болотин, А. Г. Данилевич, В. Е. Захаров, В. И. Карась, В. М. Куклин, Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, В. И. Соколенко, А. В. Тур, А. А. Туркин, В. В. Яновский ; под общей редакцией А. Г. Загороднего, Н. Ф. Шульги, ред. вып. В. В. Яновский – X. : ХНУ имени В. Н. Каразина, 2019. – Вып. 3. – 398 с. (Серия «Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды»)

#### Аннотация

Обзор посвящен предельно достижимым значениям физических величин в нашей Вселенной. По сути это означает переход в область физики, которая может быть названа физикой планковских масштабов. Достижения современной физики огромны, но на их фоне камнем преткновения служит амбициозная идея создания квантовой гравитации. Эта идея столкнулась с большими проблемами, даже сама возможность существования такой теории не является очевидной. В обзоре обсуждаются современные попытки обнаружения свойств, которые могут присутствовать в еще не созданной теории, объединяющей ОТО и квантовую теорию.

**Ключевые слова:** предельные величины, планковские масштабы, общая теория относительности, квантовая физика, минимальные масштабы, чёрные дыры, принцип неопределенности, голографический принцип.

PACS numbers: 03.65, 04.20.Dw, 04.70.Dy, 05.20

#### Реферат

Обзор посвящен предельно достижимым значениям физических величин в нашей Вселенной. По сути это означает переход в область физики, которая может быть названа физикой планковских масштабов. В момент появления планковских масштабов эти естественные масштабы природы выглядели удручающе нелепыми. Трудно было представить физику, стоящую за этими масштабами. Как обнаружилось довольно скоро такая физика еще не была создана. Сразу после появления этих масштабов была создана специальная теория относительности, квантовая физика и чуть позже общая теория относительности. Однако для того, чтобы даже правильно сформулировать вопросы потребовалось значительное время на развитие этих наук. Развитие квантовой теории полей и общей теории относительности привело к пониманию необходимости их синтеза. Прежде всего был осознан грубый механизм возникновения нестационарной Вселенной. Были открыты новые объекты Вселенной – чёрные дыры, нейтронные звезды. Построена стандартная теория элементарных частиц. Успех следовал за успехом, создавая огромное поле идей и экспериментов. На фоне огромных достижений камнем преткновения послужила амбициозная идея создания квантовой гравитации. Эта идея столкнулась с большими и пока непреодолимыми проблемами, даже сама возможность существования такой теории не является очевидной. Это послужило причиной, по которой физики испытывают непреодолимое желание заглянуть за «занавес» и понять явления сопутствующие квантовой гравитации

еще до создания такой теории. С этим связан ряд попыток усовершенствовать, изменить или перейти к новой теории даже таких признанных теорий как ОТО, специальная теория относительности, квантовая механика и другие. В последнее время элементы таких изменений широко обсуждаются и некоторые из них затронуты в этом обзоре.

**Ключевые слова:** предельные величины, планковские масштабы, общая теория относительности, квантовая физика, минимальные масштабы, чёрные дыры, принцип неопределенности, голографический принцип.

PACS numbers: 03.65, 04.20.Dw, 04.70.Dy, 05.20

**Болотін Ю. Л., Тур А. В., Яновський В. В. Фізика планківського масштабу у термінах граничних величин**

#### Анотація

Огляд присвячений гранично досяжним значенням фізичних величин у нашому Всесвіті. По суті це означає перехід в область фізики, яку можна назвати фізикою планківських масштабів. Досягнення сучасної фізики величезні, але на їхньому тлі каменем спотикання є претензійна ідея створення квантової гравітації. Ця ідея зіштовхнулася з величезними проблемами, навіть сама можливість існування такої теорії не є очевидною. В огляді обговорюються сучасні спроби виявлення властивостей, які можуть бути наявними у ще не створеній теорії, що поєднає загальну теорію відносності та квантову теорію.

**Ключові слова:** граничні величини, планківські масштаби, загальна теорія відносності, квантова фізика, мінімальні масштаби, чорні діри, принцип невизначеності, голографічний принцип.

PACS numbers: 03.65, 04.20.Dw, 04.70.Dy, 05.20

#### Реферат

Огляд присвячений гранично досяжним значенням фізичних величин у нашому Всесвіті. По суті це означає перехід в область фізики, яку можна назвати фізикою планківських масштабів. У момент появи планківських масштабів ці природні масштаби природи виглядали гнітюче безглуздими. Важко було уявити фізику, що співвідноситься із цими масштабами. Як виявилось незабаром така фізика ще не була створена. Відразу після появи була створена спеціальна теорія відносності, квантова фізика й трохи пізніше загальна теорія відносності. Однак для того, щоб навіть правильно сформулювати питання необхідно було багато часу на розвиток цих наук. Розвиток квантової теорії полів і загальної теорії відносності привів до розуміння необхідності їх синтезу. Насамперед був усвідомлений грубий механізм виникнення нестационарного Всесвіту. Були відкриті нові об'єкти Всесвіту – чорні діри, нейтронні зірки. Побудовано стандартну теорію елементарних частинок. Успіх прямував за успіхом, створюючи величезне поле ідей і експериментів. На тлі величезних досягнень каменем спотикання є претензійна ідея створення квантової гравітації. Ця ідея зіштовхнулася з величезними проблемами, навіть сама можливість існування такої теорії не є очевидною. Це є причиною, через яку фізики відчувають непереборне бажання зазирнути за «завісу» і зрозуміти явища, супутні квантовій гравітації ще до створення такої теорії. Із цим пов'язана низка спроб удосконалити, змінити або перейти до нової теорії навіть таких визнаних теорій, як ЗТВ, спеціальна теорія відносності, квантова механіка й інші. Останнім часом елементи таких змін широко обговорюються й деяких із них ми торкнулися в цьому огляді.

**Ключові слова:** граничні величини, планковські масштаби, загальна теорія відносності, квантова фізика, мінімальні масштаби, чорні діри, принцип невизначеності, голографічний принцип.

PACS numbers: 03.65, 04.20.Dw, 04.70.Dy, 05.20

**Bolotin Yu. L., Tur A. V., Yanovsky V. V. Planck scale physics in terms of limit values**

#### Annotation

This review deals with the maximum achievable physical values in our Universe. This means a transition to the field of physics, which can be called the physics of Planck scales.

The achievements of modern physics are huge, but against them the stumbling block is the claim idea of creating quantum gravity. This idea not only ran into huge problems, but even the very possibility of the existence of such a theory is not obvious. The review discusses modern attempts to discover properties that may be present in a theory that has not yet been created, combining **general relativity** and quantum theory.

**Keywords:** Maximum achievable physical values, Planck's scale, general relativity, quantum physic, minimum scale, black hole, uncertainty principle, holographic principle.

PACS numbers: 03.65, 04.20.Dw, 04.70.Dy, 05.20

#### Abstract

This review deals with the maximum achievable physical values in our Universe. This means a transition to the field of physics, which can be called the physics of Planck scales. At the time of Planck's scales appearance, these natural scales looked depressingly ridiculous. It was difficult to imagine the physics behind these scales. As it turned out soon, such physics has not yet been created. Immediately after the appearance of these scales, a special theory of relativity was created, quantum physics and later the general theory of relativity. However, it took considerable time to develop these sciences even to formulate correctly the questions. The development of quantum field theory and the general theory of relativity has led to a clear understanding that their synthesis was necessary. First, the general mechanism of the emergence of the non-stationary Universe was understood. New objects of the Universe are discovered: black holes, neutron stars. A standard theory of elementary particles is constructed. The successes followed creating a huge space for ideas and experiments. On the background of important achievements, the idea of creating quantum gravity theory stays as the stumbling block. This idea has not only faced large and yet insurmountable problems, but the very possibility of the existence of this theory is not obvious. This is the reason why physicists have an irresistible desire to look beyond the "curtain" to understand the phenomena accompanying quantum gravity even before the creation of such a theory. There are several attempts to improve, change or pass to the new theory in the recognized theories such as general relativity, special theory of relativity, quantum mechanics and others. New elements concerning these issues are now widely discussed and we present some of them in this review.

**Keywords:** Maximum achievable physical values, Planck's scale, general relativity, quantum physic, minimum scale, black hole, uncertainty principle, holographic principle.

PACS numbers: 03.65, 04.20.Dw, 04.70.Dy, 05.20

**Куклин В. М. Модуляционные неустойчивости** // Проблемы теоретической физики. Научные труды. Выпуск 3 / В. Г. Барьяхтар, Ю. Л. Болотин, А. Г. Данилевич, В. Е. Захаров, В. И. Карась, В. М. Куклин, Э. А. Пашицкий, В. И. Пентегов, В. И. Соколенко, А. В. Тур, А. А. Туркин, В. В. Яновский; под общей редакцией А. Г. Загороднего, Н. Ф. Шульги, ред. вып. В. В. Яновский – Х. : ХНУ имени В. Н. Каразина, 2019. – Вып. 3. – 398 с. (Серия «Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды»).

#### Аннотация

В работе обсуждаются различные случаи развития модуляционной неустойчивости интенсивных периодических структур в волновых и в неволновых средах. Особенностью модуляционной неустойчивости является возникновение практически симметричного относительно волнового вектора волны большой амплитуды спектра несобственных для данной среды возмущений. В случае высокого уровня диссипации, вблизи и выше порога неустойчивость представляет собой каскад процессов с увеличивающимся временем развития и все большим характерным масштабом. Спектр возмущений в развитом режиме оказывается практически линейчатым. Формируя при этом самоподобную структуру большой пространственной четкости. При незначительном уровне диссипации вдали от порога волновое движение формирует волны и огибающие аномальной амплитуды, в максимуме превышающие среднюю амплитуду волнения в три раза. Форма огибающей или волнового пакета подобна форме бризера, причем динамика во времени также подобна. Бризеры являются автоволнами в консервативных волновых системах, здесь же формирование подобного бризеру волнового пакета происходит за счет вынуждаемой накачкой интерференции возникающих в этой окрестности стоячих волн разной длины, скорость которых оказывается больше или меньше скорости основного волнового движения. Показано формирование самоподобных пространственных структур в развитой конвекции тонкого слоя жидкости или газа вследствие развития модуляционной неустойчивости. При этом тороидальные вихри конвекции генерируют полоидальные вихри большого масштаба – эффект гидродинамического динамо. Представлены экспериментальные результаты исследования возникающих самоподобных структур на поверхности графита. Обсуждаются особенности развития параметрических неустойчивостей. Характер самосогласованных параметрических неустойчивостей подобен процессам модуляционной неустойчивости.

**Ключевые слова:** Модуляционная неустойчивость, самоподобные структуры, волны аномальной амплитуды, эффект гидродинамического динамо, параметрические неустойчивости.

PACS numbers: 52.35.Mw; 47.35.Bb; 47.55.pb; 68.35.B

#### Реферат

В работе обсуждаются различные случаи развития модуляционной неустойчивости интенсивных периодических структур в волновых и неволновых средах. Особенностью модуляционной неустойчивости является возникновение

практически симметричного относительно волнового вектора волны большой амплитуды спектра несобственных для данной среды возмущений. При наличии источника, поддерживающего существование волны большой амплитуды, рассмотрены случаи разного уровня диссипации ее энергии.

В случае высокого уровня диссипации вблизи и выше порога неустойчивость приводит к возбуждению спектров, ширина которых сужается, формируя узкие спектральные линии. При этом возникают условия для развития более крупномасштабной модуляции. Таким образом, модуляционные неустойчивости вблизи порога представляют собой каскад процессов с увеличивающимся временем развития и все большим характерным масштабом. Спектр возмущений в развитом режиме оказывается практически линейчатым, формируя при этом самоподобную структуру большой пространственной четкости. При незначительном уровне диссипации вдали от порога модуляционной неустойчивости инициируемое источником волновое движение формирует волны и огибающие аномальной амплитуды, в максимуме превышающие среднюю амплитуду волнения в три раза, а для сходящихся волновых фронтов и более того. Несимметричность спектра модуляционной неустойчивости может привести к образованию волновых пакетов аномальной амплитуды с разной крутизной переднего и заднего фронтов. Форма огибающей или волнового пакета подобна форме бризера, причем динамика во времени также подобна. Бризеры являются автоволнами в консервативных волновых системах, здесь же формирование подобного бризеру волнового пакета происходит за счет вынуждаемой накачкой интерференции возникающих в этой окрестности стоячих волн разной длины, скорость которых оказывается больше или меньше скорости основного волнового движения. То есть показано, что образование данной автоволны – бризера – это результат развития модуляционной неустойчивости в неравновесной среде при наличии волнового движения большой амплитуды. Рассмотрено развитие конвекции в тонком слое жидкости или газа с градиентом температуры с плохо проводящими тепло границами. Подобные условия реализуются в тонкой облачности. Вблизи порога конвективной неустойчивости формируется поле пространственно однородных конвективных ячеек, которое оказывается модуляционно неустойчивым. Именно линейчатый спектр конвективных тороидальных вихревых ячеек создает условия для развития крупномасштабной модуляционной неустойчивости. Представлено формирование самоподобных пространственных структур в развитой конвекции тонкого слоя жидкости или газа вследствие развития модуляционной неустойчивости. При этом тороидальные вихри конвекции генерируют полоидальные вихри большого масштаба – эффект гидродинамического динамо. Представлены экспериментальные результаты исследования возникающих самоподобных структур на поверхности графита. Важным в полученных экспериментальных данных является не столько факт наличия вертикальной составляющей модуляции, а скорее, несомненное подобие первичной структуры – элементарной ячейки и вторичной структуры – модуляции поверхности электронной плотности. Обсуждается природа модуляционной неустойчивости, которая приводит к образованию подобных самоподобных поверхностных структур. Рассмотрены особенности развития параметрических неустойчивостей при воздействии на среду однородных в пространстве полей. Характер самосогласованных параметрических неустойчивостей подобен процессам модуляционной неустойчивости. Спектры параметрических неустойчивостей симметричны в пространстве волновых чисел соответственно в положительной и отрицательной областях. В результате развития параметрических неустойчивостей происходят модуляции параметров среды.

**Ключевые слова:** Модуляционная неустойчивость, самоподобные структуры, волны аномальной амплитуды, эффект гидродинамического динамо, параметрические неустойчивости.

PACS numbers: 52.35.Mw; 47.35.Bb; 47.55.pb; 68.35.B

## Куклін В. М. Модуляційні нестійкості

### Анотація

У роботі обговорюються різні випадки розвитку модуляційної нестійкості інтенсивних періодичних структур в хвильових і нехвильових середовищах. Особливістю модуляційної нестійкості є виникнення практично симетричного щодо хвильового вектора хвилі великої амплітуди спектра невластних для цього середовища збурень. У разі великого рівня дисипації поблизу і вище порога формується каскад процесів зі зростаючим часом розвитку і все більшим характерним масштабом. Спектр збурень в розвинутому режимі виявляється практично лінійчатим, формуючи водночас самоподібну структуру великої просторової чіткості. У випадку незначного рівня дисипації далеко від порога хвильовий рух формує хвилі і огинаючі аномальної амплітуди, що в максимумі перевищують середню амплітуду утричі. Форма огинаючої або хвильового пакета подібна формі бризера, причому динаміка в часі також подібна. Бризери є автохвилями в консервативних хвильових системах, тут же формування подібного бризеру хвильового пакета відбувається за рахунок інтерференції стоячих хвиль різної довжини, швидкість яких є більшою або меншою за швидкість основного хвильового руху. Показано формування самоподібних просторових структур в розвиненій конвекції тонкого шару рідини або газу внаслідок розвитку модуляційної нестійкості. Водночас тороїдальні вихори конвекції генерують полоїдальні вихори великого масштабу – ефект гідродинамічного динамо. Подано експериментальні результати дослідження самоподібних структур на поверхні графіту. Обговорюються особливості розвитку параметричних нестійкостей. Характер самоузгоджених параметричних нестійкостей подібний до процесів модуляційної нестійкості.

**Ключові слова:** Модуляційна нестійкість, самоподібні структури, хвилі аномальної амплітуди, ефект гідродинамічного динамо, параметричні нестійкості.

PACS numbers: 52.35.Mw; 47.35.Bb; 47.55.pb; 68.35.B

### Реферат

У роботі обговорюються різні випадки розвитку модуляційної нестійкості інтенсивних періодичних структур в хвильових і нехвильових середовищах. Особливістю модуляційної нестійкості є виникнення практично симетричного щодо хвильового вектора хвилі великої амплітуди спектра невластивих для цього середовища збурень. За наявності джерела, що підтримує існування хвилі великої амплітуди, розглянуто випадки різного рівня дисипації її енергії. У разі великого рівня дисипації поблизу і вище порога нестійкість призводить до появи спектрів, ширина яких зужується, формуючи вузькі спектральні лінії. Водночас виникають умови для розвитку більш великомасштабної модуляції. Отже, модуляційні нестійкості поблизу порога являють собою каскад процесів зі зростаючим часом розвитку і все більшим характерним масштабом. Спектр збурень в розвинутому режимі виявляється практично лінійчатим, формуючи при цьому самоподібну структуру великої просторової чіткості. У разі незначного рівня дисипації далеко від порога модуляційної нестійкості, хвильовий рух формує хвилі і огинаючі аномальної амплітуди, які в максимумі перевищують середню амплі-

туду як мінімум утричі, а для хвильових фронтів, що сходяться, і більш за це. Несиметричність спектру модуляційної нестійкості може призвести до утворення хвильових пакетів аномальної амплітуди з різною крутизною переднього і заднього фронтів. Форма огинаючої або хвильового пакету подібна до форми бризера Перегріна, причому динаміка в часі також подібна. Бризери є автохвилями в консервативних хвильових системах, тут же формування подібного бризера хвильового пакета відбувається за рахунок інтерференції стоячих хвиль різної довжини, швидкість яких виявляється більшою або меншою за швидкість основного хвильового руху. Тобто показано, що утворення цієї автохвилі бризера – це результат розвитку модуляційної нестійкості в нерівноважному середовищі за наявністю хвильового руху великої амплітуди. Розглянуто розвиток конвекції в тонкому шарі рідини або газу з градієнтом температури. Подібні умови реалізуються в тонкій шмарності. Поблизу порогу конвективної нестійкості формується поле просторово однорідних конвективних осередків, яке виявляється модуляційно нестійким. Саме лінійчатий спектр конвективних тороїдальних вихрових осередків створює умови для розвитку великомасштабної модуляційної нестійкості. Показано формування самоподібних просторових структур в розвиненій конвекції тонкого шару рідини або газу внаслідок розвитку модуляційної нестійкості. Водночас тороїдальні вихори конвекції генерують полоїдальні вихори великого масштабу – ефект гідродинамічного динамо. Подано експериментальні результати дослідження виникнення самоподібних структур на поверхні графіту. Важливим в отриманих експериментальних даних є не стільки факт наявності вертикальної складової модуляції, а скоріше, безсумнівна подібність первинної структури – елементарної комірки і вторинної структури – до модуляції поверхневої електронної щільності. Обговорюється природа модуляційної нестійкості, що призводить до утворення самоподібних поверхневих структур. Розглянуто особливості розвитку параметричних нестійкостей під час впливу на середовище однорідних в просторі полів. Характер самоузгоджених параметричних нестійкостей подібний до процесів модуляційної нестійкості. Спектри параметричних нестійкостей симетричні в просторі хвильових чисел відповідно в позитивній та негативній областях. В результаті розвитку параметричних нестійкостей відбувається модуляція параметрів середовища.

**Ключові слова:** Модуляційна нестійкість, самоподібні структури, хвилі аномальної амплітуди, ефект гідродинамічного динамо, параметричні нестійкості.

PACS numbers: 52.35.Mw; 47.35.Bb; 47.55.pb; 68.35.B

## Kuklin V. M. Modulation instabilities

### Annotation

Various cases of the development of the modulation instability of intense periodic structures in wave and non-wave media. The peculiarity of the modulation instability is the appearance of the perturbation spectrum which is practically symmetric with respect to large amplitude wave vector. In the case of a large dissipation level, near and above the threshold, the instability leads to the excitation of spectra whose width narrows, forming narrow spectral lines. The line spectrum creates the conditions for the development of a more large-scale modulation. The perturbation spectrum in the developed regime turns out to be practically linear. Forming thus self-similar structure of the big spatial clearness. At an insignificant level of dissipation, far from the threshold of modulation instability, the wave motion (initiated

by the source) forms anomalous amplitude waves and envelopes exceeding the average amplitude by at three times. The shape of the envelope or wave packet is similar to the shape of Peregrine breather, and the dynamics over time is similar. Breather are autowaves in conservative wave systems. In the nonequilibrium medium of the real ocean, the formation of a wave packet (similar to the breather) occurs due to the interference caused by pumping. One can observe the interference (analytically, numerically and experimentally) of standing waves of different lengths arising in this neighborhood, the velocity of which is greater or less than the velocity of the main wave motion. The formation of self-similar spatial structures in the developed convection of a thin liquid or gas layer due to the development of modulation instability is presented. In this case, toroidal convection vortices generate poloidal vortices of large scale – the effect of a hydrodynamic dynamo. Experimental results of the investigation of emerging self-similar structures on the graphite surface are presented. The features of the development of parametric instabilities are discussed. The nature of self-consistent parametric instabilities is similar to the processes of modulation instability.

**Key words:** Modulation instability, self-similar structures, waves of anomalous amplitude, hydrodynamic dynamo effect, parametric instabilities.

PACS numbers: 52.35.Mw; 47.35.Bb; 47.55.pb; 68.35.B

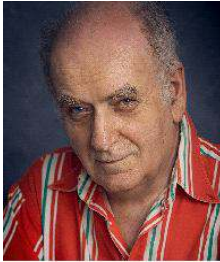
### Abstract

Various cases of the development of the modulation instability of intense periodic structures in wave and non-wave media. The peculiarity of the modulation instability is the appearance of the perturbation spectrum, which is practically symmetric with respect to large amplitude wave vector. The modes of the perturbation spectrum are improper for a given medium as a rule. The cases of different dissipation levels of large amplitude wave, in the presence of a source that supports its existence, are considered. In the case of a large dissipation level, near and above the threshold, the instability leads to the excitation of spectra whose width narrows, forming narrow spectral lines. The line spectrum creates the conditions for the development of a more large-scale modulation. Thus, the modulation instabilities near the threshold represent a cascade of processes with an increasing characteristic time of development and a larger characteristic scale. The perturbation spectrum in the developed regime turns out to be practically linear. Forming thus self-similar structure of the big spatial clearness. At an insignificant level of dissipation, far from the threshold of modulation instability, the wave motion (initiated by the source) forms anomalous amplitude waves and envelopes exceeding the average amplitude by at three times. For converging wave fronts and more. The asymmetry of the modulation instability spectrum can lead to the formation of wave packets of anomalous amplitude with different steepness of the leading and trailing fronts. The shape of the envelope or wave packet is similar to the shape of Peregrine breather, and the dynamics over time is similar. Breather are autowaves in conservative wave systems. In the nonequilibrium medium of the real ocean, the formation of a wave packet (similar to the breather) occurs due to the interference caused by pumping. One can observe the interference (analytically, numerically and experimentally) of standing waves of different lengths arising in this neighborhood, the velocity of which is greater or less than the velocity of the main wave motion. It is shown that the formation of a given autowave-breather is the result of the development of a modulation instability in a nonequilibrium medium in the presence of wave motion of large amplitude. The development of convection in a thin liquid or gas layer with a tem-

perature gradient with poorly conductive heat boundaries is considered. Similar conditions are realized in thin clouds. Near the threshold of convective instability, a field of spatially homogeneous convective cells is formed. Which turns out to be unstable. The line spectrum of convective toroidal vortex cells creates the conditions for the development of large-scale modulation instability. The formation of self-similar spatial structures in the developed convection of a thin liquid or gas layer due to the development of modulation instability is presented. In this case, toroidal convection vortices generate poloidal vortices of large scale – the effect of a hydrodynamic dynamo. Experimental results of the investigation of emerging self-similar structures on the graphite surface are presented. Important in the experimental data obtained is not so much the fact of the presence of a vertical component of the modulation, but rather an undeniable similarity of the primary structure – the unit cell and the secondary structure – of the modulation of the electron density surface. The nature of the modulation instability is discussed, which leads to the formation of similar self-similar surface structures. The features of the development of parametric instabilities under the influence of fields homogeneous in space are considered. The nature of self-consistent parametric instabilities is similar to the processes of modulation instability. The spectra of parametric instabilities are symmetric in the space of wave numbers, respectively, in the positive and negative regions. Because of the development of parametric instabilities, the parameters of the medium are modulated. This gives grounds for considering parametric instabilities similar to modulation instabilities and vice versa.

**Key words:** Modulation instability, self-similar structures, waves of anomalous amplitude, hydrodynamic dynamo effect, parametric instabilities.

PACS numbers: 52.35.Mw; 47.35.Bb; 47.55.pb; 68.35.B



**Болотин Юрий Львович** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий отделом Института теоретической физики им. А. И. Ахиезера Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт».



**Захаров Владимир Евгеньевич** – доктор физико-математических наук, профессор, академик Российской академии наук, директор (1993–2003 гг.), главный научный сотрудник Института теоретической физики имени П. Н. Лебедева РАН, профессор (Regent's Professor) университета Тусон (Аризона, США), награжден медалью Дирака, лауреат Государственных премий СССР и Российской Федерации.



**Карась Вячеслав Игнатьевич** – доктор физико-математических наук, начальник лаборатории ННЦ ХФТИ (Харьков) НАН Украины, профессор Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина, лауреат Государственной премии Украины в области науки и техники, член-корреспондент Международной академии наук прикладной радиоэлектроники Украины, Беларуси и России.



**Куклин Владимир Михайлович** – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина.



**Пашицкий Эрнст Анатольевич** – доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент Национальной академии наук Украины, главный научный сотрудник Института физики НАН Украины, лауреат Государственной премии УССР и премии НАН Украины имени С. И. Пекара.



**Пентегов Всеволод Игоревич** – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Института физики НАН Украины.



**Соколенко Владимир Иванович** – доктор физико-математических наук, заведующий отделом ННЦ ХФТИ (Харьков) НАН Украины.



**Тур Анатолий Валентинович** – доктор физико-математических наук, научный сотрудник Национального центра научных исследований Франции (CNRS), профессор Университета Пауль Сабатини, института исследований астрофизики и планетологии, выпускник Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина.



**Туркин Анатолий Аркадьевич** – доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института теоретической физики им. А. И. Ахиезера ННЦ ХФТИ (НАН Украины, г. Харьков).



**Яновский Владимир Владимирович** – доктор физико-математических наук, заведующий отделом Института монокристаллов НАН Украины (Харьков), профессор Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина.

ДЛЯ ПОДАТОК