

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР  
«ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ»**

**ЛАВРОВА ГАЛИНА МИКОЛАЇВНА**

УДК 539.21: 538.911: 538.913

**КІНЕТИКА ФАЗОННИХ ДЕФЕКТІВ ТА РАДІАЦІЙНИХ  
ПОШКОДЖЕНЬ В КВАЗІКРИСТАЛАХ**

01.04.02 – теоретична фізика

**Автореферат**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Харків – 2021

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України.

**Науковий керівник:** доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України  
**Бакай Олександр Степанович,**  
Інститут теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України, начальник відділу теорії конденсованих середовищ і ядерної матерії.

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук, професор,  
**Нацик Василь Дмитрович,**  
Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б.І. Веркіна НАН України, головний науковий співробітник відділу фізики реальних кристалів;

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Яновський Володимир Володимирович,**  
Інститут монокристалів НАН України, завідувач відділу теорії конденсованого стану речовини.

Захист відбудеться «10» вересня 2021 р. о 16 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.845.02 у Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України за адресою: 61108, м. Харків, вул. Академічна, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України за адресою: 61108, м. Харків, вул. Академічна, 1, та на офіційному сайті ННЦ ХФТІ.

Автореферат розісланий « 6 » серпня 2021 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д 64.845.02  
канд. фіз.-мат. наук

А.І. Кірдін

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми дисертації.** Дослідження радіаційних ефектів і розробка нових радіаційно-стійких матеріалів є серед пріоритетних напрямків ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут» та Відділення ядерної фізики та енергетики НАН України. В якості одного із засобів для досягнення радіаційної стійкості конструкційного матеріалу використовується дрібно-дисперсне зміцнення певними виділеннями, як-от оксидними (оксидно-дисперсні сплави), карбідними, нітридними, тощо. Після відкриття квазікристалів з унікальними структурними властивостями розглядалась також можливість їх використання в радіаційних технологіях. Оскільки квазікристали мають вельми обмежену пластичність за не дуже високих температур, пропонувалось їх використання саме в якості нанорозмірних включень до конструкційних матеріалів. В цьому випадку виникає питання стійкості цих квазікристалічних включень під опроміненням. Квазікристали, як правило, містять велику кількість структурних вакансій та інших точкових та протяжних дефектів, які зберігаються при температурному відпалі. Передбачається, що наявність таких стійких структурних дефектів може суттєво стримувати низку небажаних радіаційних явищ, а саме розпухання, радіаційний ріст тощо. Незважаючи на наявність численних робіт по дослідженню радіаційних ефектів в квазікристалах, вплив опромінення на рух дислокацій та на хід пластичної деформації в квазікристалах дотепер не досліджувався. Як буде показано далі, визначальну роль в процесі накопичення радіаційних дефектів в квазікристалі відіграють дислокації, що рухаються, і фазонні дефекти, які при цьому утворюються. Відомо, що дислокації рухаються або під дією зовнішнього / внутрішнього напруження, або завдяки поглинанню / випусканню нерівноважних точкових дефектів включно з тими, що виникають під опроміненням. Отже, особливості руху дислокацій є ключовим моментом для розуміння фізичних механізмів основних радіаційних ефектів в квазікристалах.

Наявність перерахованих вище нерозв'язаних проблем робить актуальним і важливим проведення теоретичних досліджень кінетики точкових і протяжних дефектів в квазікристалах. Результати таких досліджень становлять основний зміст даної дисертаційної роботи.

**Мета й завдання дослідження.** Метою дисертаційної роботи є теоретичний опис еволюції дефектної структури квазікристала під впливом опромінення. Для досягнення поставленої мети було сформульовано наступні завдання:

- розвинути теоретичний метод розрахунку рухливості дислокації в квазікристалі;
- побудувати моделі радіаційних фазонних дефектів в квазікристалі;
- розробити теорію радіаційного розпухання квазікристала;
- провести чисельні розрахунки характеристик радіаційних дефектів в квазікристалі.

*Об'єкт дослідження:* квазікристали та дефекти в них.

*Предмет дослідження:* особливості кінетики дефектів в квазікристалі без опромінення та під впливом опромінення.

**Методи дослідження.** Для розв'язання поставлених задач використано наступні методи теоретичної фізики: методи теорії гідродинамічного наближення, методи термодинаміки, метод перетворень Фур'є – для розв'язання системи гідродинамічних лінійних диференціальних рівнянь і здобуття виразу для рухливості дислокації в квазікристалі. Для побудови моделі дислокації в двовимірному квазікристалі використано метод процесу Соміліана. Для знаходження максимального радіусу відокремленої дислокаційної петлі в квазікристалі використано методи розв'язання системи рівнянь швидкостей реакцій. Для знаходження залежностей ефективностей поглинання точкових дефектів дислокаційною петлею, преференсу і швидкості розпухання від радіусу дислокаційної петлі використані чисельні методи SOR (successive overrelaxation method) та Рунге-Кутта.

**Наукова новизна отриманих результатів.** У дисертаційній роботі вперше отримані наступні результати:

1. Розроблено теоретичний метод знаходження рухливості дислокацій в квазікристалах, що базується на співвідношеннях термодинаміки і гідродинаміки.
2. На основі континуальних рівнянь динаміки пружних і фазонних полів отримані залежності рухливості вільних ділянок дислокації від концентрації вакансій. Показано, що фазонним дефектам належить основний внесок в гальмування дислокацій.
3. Отримано вираз для рухливості дислокації в ікосаедричному квазікристалі з урахуванням генерації вакансій і фазонних дефектів.
4. Запропоновано модель мікроскопічної структури фазонних дефектів вакансійного і міжвузлового типів, яка становить основу теорії радіаційних ефектів в квазікристалах.
5. Одержано систему кінетичних рівнянь для опису радіаційного розпухання квазікристалів при наявності нерухомих і рухомих фазонних дефектів.
6. Показано, що генерація фазонів дислокаціями, які переповзають, призводить до пригамування вакансійного розпухання квазікристалів. Ефективність пригамування розпухання залежить від рухливості фазонів.

**Наукове та практичне значення отриманих результатів.** Проблеми розробки нових конструкційних матеріалів для ядерної енергетики включають досягнення ясного розуміння фізичних процесів, що відбуваються в процесі експлуатації цих матеріалів. Таке розуміння виникає не лише внаслідок спостережень і накопичення емпіричних даних, але і завдяки виявленню фізичних механізмів, що контролюють розвиток відповідних явищ. Отримані в роботі результати охоплюють низку фундаментальних питань про природу радіаційних явищ в квазікристалах, як-от механізми пригамування розпухання, вплив температури та інтенсивності опромінення на характер розвитку розпухання, тощо. Ці результати допомагають передбачати поведінку квазікристалічного матеріалу в умовах опромінення. Проведені чисельні

розрахунки дозволяють відокремити температурні та дозові інтервали швидкості накопичення радіаційних пошкоджень.

**Особистий внесок здобувача.** Усі результати, узагальнені в дисертаційній роботі, отримані в співавторстві за безпосередньої участі здобувача та опубліковані в статтях [1-5] у фахових журналах і тезах доповідей наукових конференцій за фахом [6-11]. Автор приймала активну участь на всіх етапах наукового дослідження: у постановці завдання, аналітичних та числових розрахунках, порівнянні результатів з експериментальними даними, обговоренні результатів і написанні статей.

У роботі [1] автором отримано вирази для рухливості вільних ділянок дислокації в квазікристалі в гідродинамічному наближенні, розраховано оцінки рухливості дислокації та проведено порівняння з наявними експериментальними даними. У роботі [2] здобувачем отримано аналітичні вирази для рухливості дислокації в термодинамічному підході. У роботі [3] здобувачем запропоновано підхід для знаходження потужності стоку дислокаційної петлі та фазонного диску по електростатичній аналогії і знайдено оцінки ефективності захвату точкових дефектів дислокаційною петлею. У статті [4] здобувачем запропоновано аналітичну модель розрахунку ефективності захвату точкових дефектів дислокаційною петлею. У роботі [5] дисертантом проведено аналітичні розрахунки і знайдено вираз для максимального радіусу дислокаційної петлі в умовах опромінення.

**Апробація результатів дисертації.** Матеріали дисертації доповідалися та обговорювалися на наукових семінарах ІТФ ННЦ ХФТІ НАНУ, а також на міжнародних наукових конференціях:

1. IX Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 28-29 травня 2009).
2. Международная школа молодых ученых по ядерной физике и энергетике. (Алушта, Украина, 8-14 июня 2009).
3. XIX International Conference on Physics of Radiation Phenomena (Alushta, Ukraine, 06-11 September 2010).
4. XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography. Book of abstracts (Madrid, Spain, 22-30 August 2011).
5. XII Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 30 травня-1 червня 2012).
6. XX International Conference on Physics of Radiation Phenomena. (Алушта, Украина, 10-15 сентября 2012).
7. Международная конференция «Проблемы современной физики» (Харьков, Украина, 22-24 октября 2012).
8. Международная школа молодых ученых по ядерной физике и энергетике. (Алушта, Украина, 3-7 июня 2013)
9. 12th International Conference on Quasicrystals (Cracow, Poland, 1-6 September 2013).

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконана як частина досліджень, що проводилися в Інституті теоретичної фізики імені О.І. Ахієзера Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України. Вона є складовою частиною наступних проектів:

- базова програма «Відомче замовлення НАН України на проведення наукових досліджень з атомної науки і техніки Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» на 2016-2020 рр.» по темі «Кінетика фазових перетворень в конденсованих системах. Розвиток теорії ядерних взаємодій при високих енергіях» (шифр теми Ш-2-16 (ІТФ), номер держреєстрації 0116U007066, виконавець);
- цільова програма «Наукове забезпечення розвитку ядерно-енергетичного комплексу та перспективних ядерних технологій» на 2016-2018 рр. по темі «Розробка методів регулювання потужності перспективного швидкого реактора з хвилею ядерного горіння та моделювання матеріалів для ядерної енергетики наступного покоління» (шифр теми Х-2-13-10, номер держреєстрації 0119U101826, виконавець).

У 2010-2012 рр. робота над дисертацією проводилася в аспірантурі Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут».

**Структура дисертації.** Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел з 96 найменувань на 9 сторінках та одного додатку. Робота містить 17 рисунків і 3 таблиці в тексті. Загальний обсяг тексту дисертації складає 139 сторінок, обсяг основної частини складає 110 сторінок.

## **ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ**

У **вступі** наведено загальну характеристику роботи, викладено мету, сформульовано основні завдання, фундаментальне та прикладне значення проведених досліджень, наведено об'єкти та методи досліджень. Крім цього, обґрунтовано актуальність тематики, розкрито наукову новизну і практичне значення результатів роботи. Наведено дані про особистий внесок дисертанта, подані відомості про апробацію роботи та публікації. Описано структуру дисертаційної роботи.

У **розділі 1** представлено огляд літератури за темою дисертації, опис структурних особливостей квазікристалів, експериментальних даних і теоретичних робіт, в яких досліджувався рух дислокацій (підрозділ 1.1). Квазікристали – це тверді тіла, що мають трансляційну квазіперіодичність й дальній орієнтаційний порядок [1\*]. Крім властивих кристалам дефектів, таких як вакансії, міжвузлові атоми, дислокації, тощо, у квазікристалах також присутні так звані фазони, тобто локальні порушення квазіперіодичного трансляційного порядку квазікристала. Фазони з'являються у декількох фізичних формах, пов'язаних з різними переміщеннями атомів, такими як фазонна фаза, фазонне зміщення, фазонна деформація, фазонний стрибок, фазонні фліпи, фазонні коливання, тощо. Дислокації в квазікристалах теоретично будуються за допомогою процесу Вольтерра двома шляхами. У

першому цей процес виконується у 3-вимірному просторі з утворенням дефекту пакування в площині розрізу. У другому цей процес виконується в 6-вимірній гіперкубічній системі, з якої ікосаедрична структура отримується шляхом проектування на тривимірний фізичний простір. Обидва типи дислокацій спостерігалися експериментально за допомогою електронної мікроскопії.

В підрозділі 1.2 проаналізовано експериментальні роботи, які стосуються впливу опромінення на квазікристали. Увага дослідників була в основному зосереджена на фазових перетвореннях під дією опромінення. Вплив опромінення безпосередньо на рух дислокацій та на хід пластичної деформації в квазікристалах дотепер не досліджувались.

В підрозділі 1.3 розглянуто експериментальні дослідження, які описують використання квазікристалів у якості зміцнюючих домішок до сплавів. Наведені експериментальні роботи показують перспективність використання нанорозмірних квазікристалічних включень для зміцнення конструкційних матеріалів. Виникає потреба дослідження характеру утворення радіаційних пошкоджень в квазікристалах і зокрема розпухання.

**У розділі 2** на основі гідродинамічних рівнянь пружних і фазонних полів [2\*] та концентрацій вакансій [3\*] досліджено залежність рухливості від температури та концентрації вакансій в ікосаедричному квазікристалі.

Швидкість руху дислокації в лінійному наближенні має вигляд,

$$v_D = MF_D, \quad (1)$$

де  $F_D$  є сила, що діє на одиницю довжини дислокації, коефіцієнт  $M$  за визначенням є *рухливість* дислокації. У звичайних кристалах сила Піча-Келера  $F_D = (\mathbf{b} \cdot \hat{\sigma}) \times \mathbf{l}$ , де  $\hat{\sigma}$  є тензор напруження,  $\mathbf{b}$  є вектор Бюргерса,  $\mathbf{l}$  є одиничний вектор вздовж дислокаційної лінії, в компонентах має вигляд

$$F_{Di} = e_{ijk} b_n \sigma_{nj} l_k, \quad (2)$$

де  $e_{ijk}$  є антисиметричний за індексами одиничний тензор. Рівняння (2) у випадку ікосаедричних квазікристалів, що моделюються шляхом проектування шестивимірного (6D) кубічного кристала на тривимірний (3D) простір є

$$F_{Di} = e_{ijk} b_n^{6D} \sigma_{nj}^{6D} l_k^{6D} = e_{ijk} b_n^{\parallel} \sigma_{nj}^{\parallel} (P\hat{\Gamma}^{\parallel} \mathbf{l})_k + e_{ijk} b_n^{\perp} \sigma_{nj}^{\perp} (P\hat{\Gamma}^{\perp} \mathbf{l})_k, \quad (3)$$

де  $b_n^{\parallel}$ ,  $b_n^{\perp}$  і  $(P\hat{\Gamma}^{\parallel} \mathbf{l})_k$ ,  $(P\hat{\Gamma}^{\perp} \mathbf{l})_k$  є проекції шестивимірного вектора Бюргерса  $\mathbf{b}$  та одиничного вектора  $\mathbf{l}$  вздовж дислокаційної лінії на фізичний і фазонний простір відповідно. Робота, що виконується силою  $F_D$  дорівнює величині дисипації енергії рухливою дислокацією,

$$\mathbf{F}_D \cdot \mathbf{v}_D = -\frac{d}{dt} \int d^2r E_{el}, \quad (4)$$

де  $E_{el}$  є густина пружної енергії. Інтеграл береться по двовимірній площині, що ортогональна до лінії дислокації. Вектори  $F_D$  і  $v_D$  можна вважати паралельними, тоді зворотна рухливість  $M^{-1}$  набуває вигляду:

$$M^{-1} = |\dot{E}_{\text{el}}| / \mathbf{v}_D^2, \quad (5)$$

де  $|\dot{E}_{\text{el}}|$  є величина швидкості дисипації пружної енергії.

Статично деформований квазікристал характеризується пружною енергією, густина якої  $E_{\text{el}}(\mathbf{u}, \mathbf{w})$  у гармонічному наближенні має вигляд [3\*]:

$$E_{\text{el}}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) = \frac{1}{2} A_{ijkl} u_{ij} u_{kl} + \frac{1}{2} D_{ijkl} w_{ij} w_{kl} + C_{ijkl} w_{ij} u_{kl}, \quad (6)$$

де  $A_{ijkl}$ ,  $D_{ijkl}$ ,  $C_{ijkl}$  є тензори пружних констант;  $u_{ij} = (\nabla_i u_j + \nabla_j u_i)/2$  є тензор пружної деформації,  $w_{ij} = \nabla_i w_j$  є фазонна деформація;  $\nabla_i$  є частинна похідна по координаті  $x_i$ . Тензори пружних напружень  $\sigma_{ij}$  та фазонних напружень  $P_{ij}$  знаходяться відповідно до

$$\sigma_{ij} = \partial E_{\text{el}} / \partial u_{ij} = A_{ijkl} u_{kl} + C_{kl ij} w_{kl}, \quad P_{ij} = \partial E_{\text{el}} / \partial w_{ij} = D_{ijkl} w_{kl} + C_{ijkl} u_{kl}. \quad (7)$$

Рівняння безперервності або закон збереження речовини,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (8)$$

де  $\rho$  є густина кристалу,  $\mathbf{v}$  є швидкість руху елементарного об'єму у реальному просторі, доповнюються рівнянням збереження імпульсу,

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = \mathbf{f} + \mathbf{f}', \quad (9)$$

де  $f_i = \nabla_j \sigma_{ji}$  є пружна сила,  $f_j' = \nabla_i \sigma'_{ij}$  є в'язка сила, що визначається через тензор в'язких напружень  $f_j' = \nabla_i \sigma'_{ij}$ , а  $\sigma'_{ij}$  пов'язаний з тензором швидкостей деформації  $v_{ij} = (\nabla_i v_j + \nabla_j v_i)/2$  співвідношенням  $\sigma'_{ik} = \eta_{iklm} v_{lm}$ , де  $\eta_{iklm}$  є тензор в'язкості.

На відміну від пружних зсувів  $\mathbf{u}$ , фазонні зсуви  $\mathbf{w}$  не можуть відбуватися консервативно, а пов'язані з термоактивованим процесом атомних перебудов. Тому сила  $\tilde{f}_i = \nabla_j P_{ji}$ , що діє у фазонному просторі, викликає лише дифузійний дрейф, швидкість якого  $\partial \mathbf{w} / \partial t$  пропорційна  $\tilde{\mathbf{f}}$ , тобто

$$\left[ \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{w} \right] = \Gamma_w \tilde{\mathbf{f}}, \quad (10)$$

де  $\Gamma_w$  є кінетичний коефіцієнт, що описує релаксацію сили  $\tilde{\mathbf{f}}$ .

Пружні деформації породжують збурювання концентрації вакансій  $C$ , для яких виконується рівняння балансу:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla C = -\text{div} \mathbf{j}, \quad (11)$$

де  $\mathbf{j}$  є густина потоку вакансій. Додаткова концентрація вакансій  $C$  у розглянутій моделі змінюється за рахунок дифузійного перерозподілу наявних



вакансій під дією неоднорідного поля. Співвідношення для потоку  $\mathbf{j}$  при врахуванні градієнтів концентрації й тиску має вигляд:

$$\mathbf{j} = -D(\nabla C + \gamma \nabla p), \quad (12)$$

де  $D$  є коефіцієнт дифузії,  $\gamma = \left(\frac{\partial V}{\partial C}\right)_{p,T} / \left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)_{p,T}$ ,  $V$  є об'єм,  $p$  є тиск,  $T$  є температура,  $\mu$  є хімічний потенціал.

При наявності вакансій зв'язок повної дисторсії  $\nabla_i U_j$  із пружною дисторсією  $\beta_{ij}$  має вигляд:

$$\nabla_i U_j = \beta_{ij} + \Omega C \delta_{ij} / 3, \quad (13)$$

де другий доданок є вакансійна дисторсія, а  $\Omega$  є дилатаційний об'єм вакансії. Для врахування впливу вакансій на динаміку пружних і фазонних полів (13) у рівняннях (7) замість  $u_{kl}$  треба підставити величину повної деформації

$$e_{ij} = (\nabla_i U_j + \nabla_j U_i) / 2 - \Omega C \delta_{ij} / 3. \quad (14)$$

Швидкість переповзання дислокації  $\mathbf{v} = \partial \mathbf{U} / \partial t$  є завжди малою у порівнянні зі швидкістю звуку. В цьому випадку лінеаризовані гідродинамічні рівняння можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \operatorname{div} \mathbf{v}_D = 0 & \quad \nabla \cdot \hat{\sigma} + \nabla \cdot \hat{\sigma}' = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \Gamma_w (\nabla \cdot \hat{P}) & \quad \frac{\partial C}{\partial t} = D \Delta C - D \gamma \Delta \sigma_{ii} / 3 \end{aligned}, \quad (15)$$

де  $\gamma = \frac{k_p}{p} = \left(\frac{\partial V}{\partial C}\right)_{p,T} / \left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)_{p,T}$ .

Розглянемо самоподібний розв'язок для швидкості руху дислокації, що описується однією змінною,  $\mathbf{r} - \mathbf{v}_D t$ , а саме:

$$\mathbf{U}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{U}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_D t), \quad \mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{w}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_D t). \quad (16)$$

Тоді підінтегральні вирази в рівнянні (4) з урахуванням (7) і (14) записуються

$$\begin{aligned} \frac{dE_{\text{el}}}{dt} &= \frac{\delta E_{\text{el}}}{\delta w_{ij}} \cdot \partial_t w_{ij} + \frac{\delta E_{\text{el}}}{\delta e_{ij}} \cdot \partial_t e_{ij} = P_{ij} \cdot \partial_t w_{ij} + \sigma_{ij} \cdot \partial_t e_{ij} \\ &= P_{ij} \cdot \partial_t w_{ij} + \frac{\left( \partial_t e_{lm} + \frac{1}{3} \Omega D \delta_{lm} \Delta C \right) \eta_{kijlm} \partial_t e_{ij}}{\left( -\frac{1}{\nabla_k} \nabla_i + \frac{1}{9} \Omega D \gamma \eta_{kill} \Delta \right)}. \end{aligned} \quad (17)$$

Використовуючи (16), (17) представимо дисипацію енергії через змінні  $U$ ,  $w$ ,  $C$  за допомогою двовимірного перетворення Фур'є в площині  $(x, y)$ . Вибравши координату  $x$  уздовж напрямку  $\mathbf{F}_D$ , вираз для рухливості дислокації набуває вигляду

$$M^{-1} = M_w^{-1} + M_{U1}^{-1} + M_{U2}^{-1} + M_{UC}^{-1}, \quad (18)$$

де

$$M_w^{-1} = \frac{1}{\Gamma_w} \int |w(\mathbf{q})|^2 q_x^2 d^2 q; \quad M_{U1}^{-1} = \eta \int \frac{d^2 q \cdot q^2 q_x^2}{1 + \frac{1}{9} \Omega D \gamma \eta q^2} |U(\mathbf{q})|^2;$$

$$M_{U2}^{-1} = \frac{\Omega D \gamma \eta^2}{36} \int d^2 q q^4 q_x^2 |U(\mathbf{q})|^2; \quad M_{UC}^{-1} = \frac{\Omega D \eta}{6 v_D} \int d^2 q q^3 q_x U(\mathbf{q}) C(-\mathbf{q}). \quad (19)$$

Тут символами виду  $y(\mathbf{q})$  позначені Фур'є-образи полів  $y(\mathbf{x})$ .

Вирази (19) для рухливості містять два доданки, що аналогічні виразам, отриманим в роботі [2\*]. Перший доданок  $M_w^{-1}$  описує гальмування дислокації у квазікристалі, викликане наявністю фазонних дефектів. У випадку кристалів цей доданок відсутній. Другий доданок  $M_{U1}^{-1}$  відповідає за гальмування, пов'язане із пружними деформаціями. Доданок  $M_{U2}^{-1}$  враховує більш високий порядок впливу пружних деформацій і він виявляється нехтовно малим. Нарешті, останній доданок виразу (19) відповідає за взаємодію пружних полів з дилатаціями, викликаними вакансіями.

На основі відомих експериментальних даних проведено числові оцінки вкладів різних механізмів в рухливість дислокацій. При обраних значеннях параметрів виявляється, що фазонний доданок має основний внесок до рухливості, а вакансії впливають на неї мало. Змінюючи значення параметрів, зокрема, при малій швидкості дислокації й великій концентрації вакансій доданок  $M_{UC}^{-1}$  стає порівняним з фазонним внеском  $M_w^{-1}$ .

У розділі 2.2 знайдено рухливість дислокацій з використанням альтернативного підходу, що базується на класичних рівняннях *термодинаміки та гідродинаміки* з урахуванням в'язкості. Основні рівняння для рухливості (1)-(5) зберігають силу. Так само, як і в попередньому підході, знаходимо внески дифузії вакансій та фазонів у гальмування дислокацій.

Рух дислокації в квазікристалі ускладнений через відсутність трансляційної симетрії. В'язкість спричиняє дисипацію енергії дислокації. Як відомо [4\*], дисипація механічної енергії за одиницю часу становить

$$\dot{E}_{\text{mech}} = -T\dot{S}, \quad (20)$$

де  $T$  є температура,  $\dot{S}$  є похідна ентропії від часу. Нехтуючи теплопровідністю та використовуючи загальне рівняння тепловіддачі [4\*], отримуємо

$$\rho T \left( \frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla s \right) = \sigma'_{ik} \frac{\partial v_i}{\partial x_k}, \quad (21)$$

де  $\rho$  є густина,  $s$  є ентропія на одиницю маси,  $\mathbf{v}$  є швидкість ( $\mathbf{v} \equiv \mathbf{v}_D$ ),  $\sigma'_{ik}$  є тензор в'язкого напруження. Звідси ми знаходимо

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho s dV = \int \frac{\sigma'_{ik}}{T} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} dV, \quad (22)$$

де ліва частина рівняння відповідає швидкості зміни загальної ентропії за одиницю часу. Підставляючи (22) в (20), отримуємо:

$$\dot{E}_{\text{mech}} = - \int \sigma'_{ik} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} dV = - \frac{1}{2} \int \sigma'_{ik} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) dV. \quad (23)$$

В роботі [3\*] тензор в'язкого напруження для квазікристалів має вигляд:

$$\sigma'_{ik} = \eta_{iklm} v_{lm}, \quad v_{ij} = (\nabla_i v_j + \nabla_j v_i) / 2, \quad (24)$$

де  $\eta_{iklm}$  є тензор в'язкості,  $v_{lm}$  є тензор швидкості деформації.

Знову розглянемо самоподібний розв'язок для поля переміщення дислокації у вигляді (16). Підставляючи (24) в (23), після виконання двовимірного перетворення Фур'є в площині (x,y), отримуємо:

$$\dot{E}_{\text{visc}} = - \frac{1}{4} \eta_{iklm} \int d^2 q (\mathbf{v}_D \mathbf{q})^2 [q_i U_k(-\mathbf{q}) + q_k U_i(-\mathbf{q})] [q_l U_m(\mathbf{q}) + q_m U_l(\mathbf{q})]. \quad (25)$$

Оскільки в'язкість є ізотропною для ікосаедричного квазікристалу, то діагональна складова тензора в'язкості спрощується до  $\eta_{iiii} = 9\eta_L$ , отже

$$\dot{E}_{\text{visc}} = -9\eta_L \int |U_i(\mathbf{q})|^2 q_i^2 (\mathbf{v}_D \mathbf{q})^2 d^2 q. \quad (26)$$

З (5) та (26) випливає, що внесок в'язкості в дислокаційну рухливість становить

$$M_{\text{visc}}^{-1} = 9\eta_L \int |U_i(\mathbf{q})|^2 q_i^2 q_x^2 d^2 q. \quad (27)$$

*Внесок вакансій* оцінимо наступним чином. Швидкість зростання ентропії за рахунок вакансій [4\*] є:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = - \int \frac{1}{T} \mathbf{j} \nabla \mu d^2 r. \quad (28)$$

Звідси дисипація енергії є

$$\dot{E}_{\text{dif}} = \int \mathbf{j} \nabla \mu d^2 r. \quad (29)$$

Градiєнт хiмiчного потенцiалу залежить вiд концентрацiї та тиску як

$$\nabla \mu = \left( \frac{\partial \mu}{\partial C} \right)_{p,T} \nabla C + \left( \frac{\partial \mu}{\partial p} \right)_{C,T} \nabla p. \quad (30)$$

Оскільки  $\left( \frac{\partial \mu}{\partial C} \right)_{p,T} = \frac{\Omega}{\gamma}$ , де  $\gamma = k_p / p$ , i  $k_p = p \left( \frac{\partial V}{\partial C} \right)_{p,T} / \left( \frac{\partial \mu}{\partial C} \right)_{p,T}$  є

бародифузiйне вiдношення, то з (30) отримуємо

$$\nabla\mu = \frac{\Omega}{\gamma} \nabla C + \Omega \nabla p. \quad (31)$$

Після цього дисипація енергії за рахунок вакансій приймає вигляд

$$\dot{E}_{\text{dif}} = -D\Omega \int [\gamma(\nabla p)^2 + \nabla C \nabla p] d^2r. \quad (32)$$

Гرادієнт тиску записується в цьому випадку наступним чином

$$\nabla p = -\frac{1}{6} \nabla \frac{\nabla_i}{\nabla_k} \eta_{iklm} (\nabla_l (\mathbf{v}_D \nabla) U_m + \nabla_m (\mathbf{v}_D \nabla) U_l). \quad (33)$$

Підставляючи (33) в (32) та виконуючи Фур'є перетворення, знаходимо внесок дифузії у рухливість дислокації

$$M_{\text{dif}}^{-1} = \frac{3D\Omega\eta_L}{|\mathbf{v}_D|} \int U_i(\mathbf{q}) C(-\mathbf{q}) q^2 q_i q_x d^2q + 9D\Omega\gamma\eta_L^2 \int |U_i(\mathbf{q})|^2 q^2 q_i^2 q_x^2 d^2q. \quad (34)$$

Дисипацію енергії при утворенні фазонних дефектів можна знайти подібно до того, що описано рівнянням (23):

$$\dot{E}_{\text{mech}} = \int P_{ik} \frac{\partial \dot{w}_i}{\partial x_k} dV. \quad (35)$$

Як і для поля  $\mathbf{U}$ , ми розглянемо поле  $\mathbf{w}$ , яке описується автотельною змінною,  $\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{w}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_D t)$ . Тензор фазонних напружень має вигляд

$$P_{ij} = -\frac{1}{\Gamma_w \nabla_i} (\mathbf{v}_D \cdot \nabla) w_j. \quad (36)$$

Підставляючи (36) в (35) для діагональної складової маємо

$$\dot{E}_{\text{phas}} = -\frac{1}{\Gamma_w} \int |w(\mathbf{q})|^2 (\mathbf{v}_D \mathbf{q})^2 d^2q. \quad (37)$$

Таким чином, внесок фазонних деформацій у дислокаційну рухливість є

$$M_w^{-1} = \frac{1}{\Gamma_w} \int |w(\mathbf{q})|^2 q_x^2 d^2q. \quad (38)$$

Порівнюючи отримані результати для дислокаційної рухливості з результатами, отриманими в [1], можна побачити, що додток  $M_w^{-1}$  співпадає в обох роботах. Додатки дифузії вакансій  $M_{\text{difUC}}^{-1}$  і  $M_{\text{difU}}^{-1}$  (34) в [1] відрізняються лише числовими коефіцієнтами  $\propto 1$ . Ця різниця є незначною через спрощення використовуваних моделей. Додток в'язкості  $M_{\text{visc}}^{-1}$  має дещо інший вигляд у [1], але його загальна структура залишається незмінною.

У розділі 3 розглянуто утворення і властивості фазонів як часткових точкових дефектів та їх роль у радіаційних явищах. Фазони спостерігали за допомогою мікроскопії високої розподільної здатності як дефекти, що утворюють дефект пакування при переповзанні дислокації [5\*]. Утворення фазонів, тобто незбіжних вузлів, є результатом деформації зсуву. Незбіжний вузол може бути вакантним або зайнятим. Вакантний незбіжний вузол можна

розглядати як вільний об'єм, пов'язаний з навколишніми атомами, що його фіксують. Зайнятий незбіжний вузол є подібним до міжвузлового дефекту.

Щоб продемонструвати формування фазонів, як приклад, розглядається двовимірний квазікристал, складений із багатогранників двох типів, які містять 5-координований вузол. Процедура Сомігліана або Вольтерра побудови дислокації призводить до формування фазонного сліду, який складається з фазонів двох типів. Важливою властивістю фазонів є існування вакансійно- і міжвузлово-подібних фазонів.

У квазікристалі і кристалі поведінка дислокацій під опроміненням відрізняється. Експериментально було встановлено, що у квазікристалі дислокація, що переповзає, створює фазонний слід, який поступово розпливається через термічно-активовану дифузію фазонів [5\*] з великою енергією активації, до 4 еВ [6\*]. Під опроміненням ріст дислокаційних петель також супроводжується формуванням фазонних дефектів.

У розділах 3.2-3.7 розглянуто поведінку квазікристала, що містить дислокаційні петлі й пори під опроміненням при температурах, коли фазони рухливі. Фазони беруть участь у кінетичних процесах [6\*]. Взаємодія вакансійно-подібних  $\tilde{v}$  і міжвузлово-подібних фазонів  $\tilde{i}$  з вакансіями  $v$  і власними міжвузловими атомами (МА)  $i$  призводить до взаємних перетворень



Зворотні перетворення малоімовірні, тому що потрібна значна енергія для утворення регулярних ТД. Рівняння швидкостей реакцій для концентрацій вакансій  $C_v$ , міжвузлових атомів  $C_i$  і фазонів двох типів,  $C_{pv}$  і  $C_{pi}$  у квазікристалах, що опромінюються, записано в рамках стандартної моделі ефективного середовища

$$\frac{dC_v}{dt} = K - \alpha_{iv} D_i C_i C_v - k_v^2 D_v C_v - \alpha_{vp} D_v C_v C_{pi}, \quad (40)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = K - \alpha_{iv} D_i C_i C_v - k_i^2 D_i C_i - \alpha_{ip} D_i C_i C_{pv}, \quad (41)$$

$$\frac{dC_{pv}}{dt} = K_{pv} + \alpha_{vp} D_v C_v C_{pi} - \alpha_{ip} D_i C_i C_{pv} - k_C^2 D_p C_{pv}, \quad (42)$$

$$\frac{dC_{pi}}{dt} = K_{pi} + \alpha_{ip} D_i C_i C_{pv} - \alpha_{vp} D_v C_v C_{pi} - k_C^2 D_p C_{pi}, \quad (43)$$

де  $K$  є швидкість генерації вільно мігруючих регулярних ТД,  $K_{pi,pv}$  є швидкість генерації фазонів. Вважається, що коефіцієнти дифузії  $D_p$  фазонів двох типів співпадають. Константи швидкості рекомбінації мають вигляд

$$\alpha_{iv} = 4\pi r_{iv} / \omega, \quad \alpha_{ip,vp} = 4\pi r_{ip,vp} / \omega, \quad (44)$$

де  $r_m$  ( $m = iv, ip, vp$ ) є радіуси захоплення відповідних дефектів. Потужності стоків мають звичайний вигляд

$$k_{i,v}^2 = k_{di,v}^2 + k_C^2, \quad k_{di,v}^2 = 2\pi r_L n_L Z_{i,v}, \quad k_C^2 = 4\pi r_C n_C, \quad (45)$$

де  $n_C$  і  $r_C$  є густина і радіус пор,  $n_L$  і  $r_L$  є густина і радіус петель,  $Z_{i,v}$  є ефективності поглинання ТД. Стосовно пор вважається, що ефективності захоплення співпадають для всіх типів дефектів.

Швидкість генерації фазонів пропорційна швидкості росту повного об'єму дислокаційних петель, тобто швидкості розпухання  $dS/d\phi$ :

$$K_{pi} = K_{pv} = \frac{1}{2} \beta n_L \frac{d}{dt} (\pi r^2 b) = \frac{1}{2} \beta K \frac{dS}{d\phi}, \quad (46)$$

де  $\beta < 1$  є частка вузлів ґратки, які перетворюються на фазони під час переповзання дислокації, і  $\phi = Kt$  є доза опромінення.

Швидкість росту дислокаційної петлі визначається різницею потоків МА і вакансій

$$\frac{dr_L}{dt} = \frac{1}{b} (Z_i D_i C_i - Z_v D_v C_v). \quad (47)$$

Швидкість росту пори має вигляд

$$\frac{dr_C}{dt} = \frac{1}{r_C} (D_v C_v - D_i C_i) + \frac{D_p}{2r_C} (C_{pv} - C_{pi}). \quad (48)$$

Другий доданок у правій частині цього рівняння – це внесок фазонів (коефіцієнт 1/2 пов'язаний з половинним релаксаційним об'ємом фазона  $0.5 \omega$ ).

Аналітично розглянуто еволюцію дислокаційних петель та показано, що в квазікристалі без пор петлі досягають граничного розміру, незважаючи на наявність  $\tilde{i}$ -фазонів, які є стоками для надлишкових вакансій.

Рівняння (41)-(48) розв'язуються чисельно неявним методом Рунге-Кутта змінного порядку. Як показує рис. 1, швидкість росту пор, а також швидкість розпухання суттєво залежать від дифузійної рухливості фазонів. Швидкість розпухання квазікристалу з енергією міграції фазонів  $E_{pm} \leq 2$  еВ дуже близька до швидкості розпухання кристалу. У цьому випадку фазони ефективно поглинаються порами, які в розглянутій моделі вважаються ідеальними стоками для фазонів.

За високої енергії міграції фазонів  $E_{pm} = 3$  еВ потужність стоків фазонів  $\alpha_{ip} C_{pv}$  і  $\alpha_{vp} C_{pi}$  перевищує потужність стоків петель та пор. Це є причиною дуже низької швидкості розпухання квазікристалу (рис. 1б). Критерій низької дифузійної рухливості фазонів має вигляд

$$D_p \ll \frac{\alpha_i \beta \rho Z_L^i B_d K}{2 k_C^2 k_i^4}. \quad (49)$$

Однак при високих енергіях міграції фазонів наближення однорідного розподілу фазонів може бути недійсним при досить високих температурах. Наприклад, при  $E_{pm} = 3$  еВ,  $T = 900$  К, характерна доза дифузії фазонів до

стоків становить приблизно  $K(k_p^2 D_p)^{-1} \sim 10$  зна.

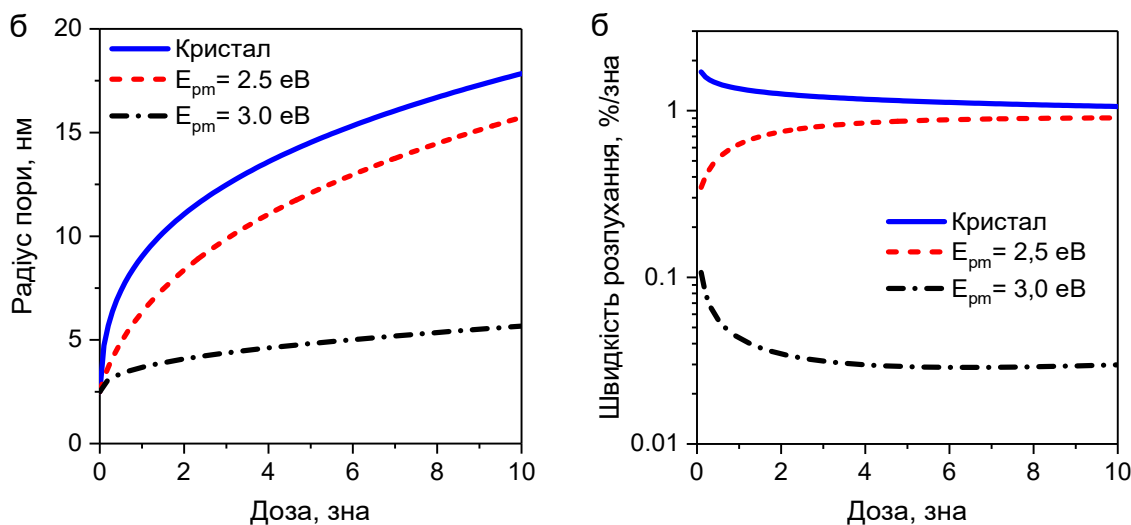


Рис. 1. Вплив фазонів на розпухання. Залежність радіусу пори (а), швидкості розпухання (б) від дози. Суцільні криві відповідають кристалу. Енергії міграції фазонів вказані на рисунках.

Загальний висновок розділу 3: фазони відіграють роль центрів рекомбінації змінної полярності для радіаційно-індукованих вакансій і міжвузлових атомів. Вакансійні пори є стоками для надлишкових вакансій і дозволяють дислокаціям рости і утворювати фазони. Ефективність фазонів для пригамування розпухання залежить від рухливості фазонів і від здатності пор поглинати фазони. Матеріали цього розділу опубліковані в роботі [5].

В розділі 4 розглядається вплив фазонного сліду на ефективності поглинання МА і вакансій дислокаційними петлями різного розміру  $Z_n(r)$ . Якщо термічно-активована дифузія фазонів є незначною, фазони, які генеруються при рості дислокаційної петлі залишаються всередині неї, утворюючи кільцеподібний ідеальний стік ТД. Ширина кільця фазонів залежить від швидкості генерації фазонів рухливою дислокацією і від коефіцієнта дифузії фазонів, який є значно меншим від коефіцієнта дифузії вакансій [6\*].

В квазікристалі з нерухомими фазонами, який містить пори і дислокації як основні стоки ТД, концентрації ТД задовольняють рівнянням балансу (41) і (40) без доданків, які описують реакції вакансій і МА з фазонами.

При достатньо високій температурі, коли об'ємною рекомбінацією ТД можна знехтувати, швидкість розпухання дається формулою

$$S' = \frac{dS}{d\phi} = B_{mean} \frac{k_C^2}{k_v^2}, \quad (50)$$

де  $\phi = K_0 t$  є доза опромінення,  $K_0$  є швидкість створення зміщень згідно NRT стандарту [7\*],  $\eta < 1$  є частка вільно мігруючих регулярних ТД.  $B_{mean}$  є середньозважений преференс усіх типів стоків.

$$B_{mean} = \frac{k_i^2 - k_v^2}{k_i^2} = \frac{1}{k_i^2} \left( B_{str} Z_{str,i} \rho_{str} + 2\pi \int B_L(r) r f(r) Z_i(r) dr \right). \quad (51)$$

$k_{i,v}^2$  є повні потужності стоків, де  $Z_{str,m}$  і  $\rho_{str}$  є ефективність поглинання і густина прямолінійних дислокацій,  $B_L = 1 - Z_v/Z_i$  є преференс петлі радіуса  $r_L$ ,  $f(r)$  є розподіл петель по розмірах.

Залежність ефективностей поглинання ТД і преференсу петлі від розміру суттєво впливає на еволюцію ансамблю петель і пір. Середній преференс є важливою характеристикою мікроструктури матеріалу, яка контролює швидкість розпухання (50).

Для розрахунку ефективностей поглинання ТД дислокаційною петлею з кільцем фазонів в середині розглядається дифузійна задача для концентрації дефектів  $C$  у тороїдальній області впливу дислокаційної петлі з урахуванням взаємодії ТД із пружним полем дислокаційної петлі. Точковий дефект моделюється як центр дилатації з об'ємом релаксації  $\Omega_{v,i}$ . Ефективність поглинання розраховується на одиницю довжини петлі  $Z = J/2\pi R \bar{C}$ , де  $\bar{C}$  є середня концентрація дефектів,  $J$  є повний потік ТД на петлю. Рівняння дифузії розв'язується чисельно за допомогою ітераційного методу SOR. У розрахунках використані наступні параметри:  $T = 600$  К, модуль зсуву  $\mu = 70$  ГПа, релаксаційний об'єм вакансій  $\Omega_v = -0,5\omega$  і МА  $\Omega_i = \omega$ .

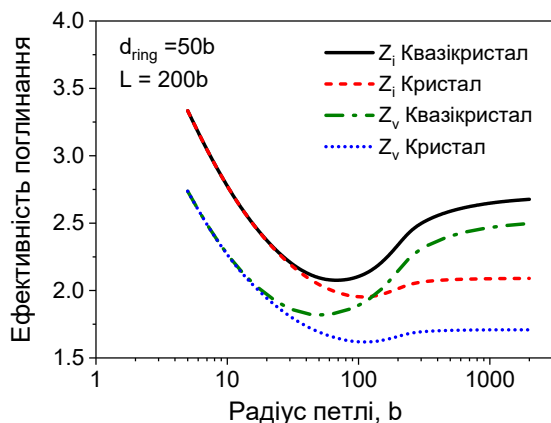


Рис. 2. Залежність ефективності поглинання від радіуса петлі в кристалі і квазікристалі.

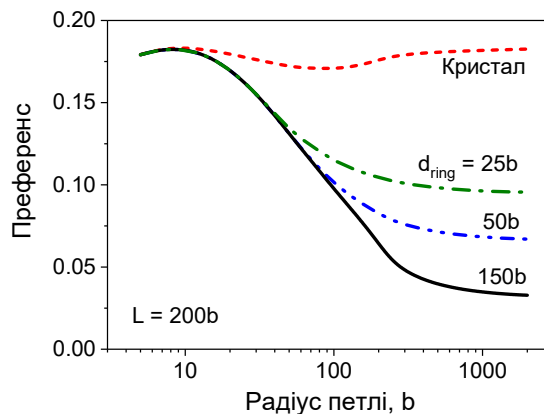


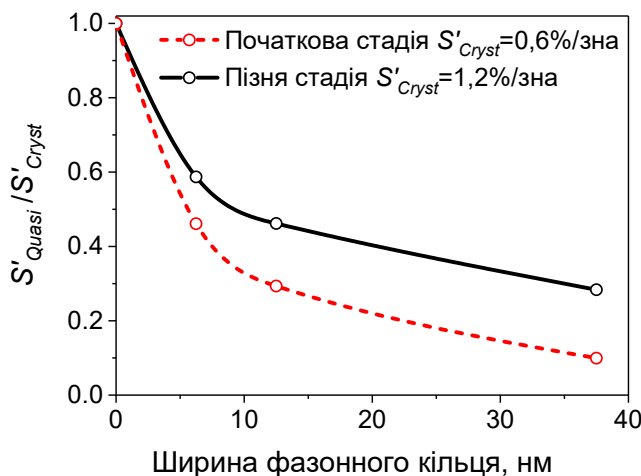
Рис. 3. Залежності преференсу дислокаційної петлі від радіуса в кристалі і квазікристалі.

На рис. 2 показано порівняння ефективностей захоплення вакансій і МА дислокаційними петлями без фазонного кільця (кристал) і з фазонним кільцем (квазікристал). В області малих розмірів петель ефективності захоплення не залежать від типу матеріалу. При збільшенні розміру ефективність поглинання петель із фазонним кільцем є вищою, ніж петель без кільця.

Рис. 3 показує, що преференс дислокаційних петель із фазонним кільцем є меншим, ніж у звичайному кристалі. Отже при однакових початкових умовах



(однакова функція розподілу дислокаційних петель) швидкість росту пор і відповідно розпухання квазікристалів будуть меншими, ніж у кристалічних матеріалах. Використовуючи (50), було знайдено зменшення швидкості розпухання квазікристала в порівнянні з кристалом на ранній стадії пороутворення і на пізній стадії, коли швидкість розпухання багатьох реакторних сталей і сплавів прямує до насичення [8\*]  $S'_{max} \sim 1\%/зна$ . Параметри для оцінки наведені у табл. 4.1 в дисертації.



*Рис. 4. Вплив розміру фазонного кільця на зменшення швидкості розпухання квазікристала в порівнянні з кристалічним матеріалом. Пунктирна лінія відповідає початковій стадії опромінення, Суцільна лінія – відношення максимальних швидкостей розпухання квазікристала і кристалічного матеріалу.*

На рис. 4 показано відношення максимальних швидкостей розпухання квазікристалу та кристалічного матеріалу. Видно, що при всіх розмірах фазонного кільця швидкість розпухання квазікристала менше швидкості розпухання кристалічного матеріалу з аналогічними параметрами. Таким чином, генерація фазонів дислокацією, що переповзає, призводить до пригамування вакансійного розпухання квазікристалів. У граничному випадку нерухливих фазонів очікується значне уповільнення розпухання квазікристалів під опроміненням. Матеріали цього розділу опубліковані в роботах [3,4].

## ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі розв'язані важливі задачі теоретичної фізики в області кінетики фазонних дефектів та радіаційних пошкоджень в квазікристалах, а саме запропоновано теоретичний метод розрахунку рухливості дислокації в квазікристалі, побудовано модель радіаційних фазонних дефектів в квазікристалі, проведено чисельні розрахунки характеристик поведінки радіаційних дефектів в квазікристалі, розроблено теорію радіаційного розпухання квазікристалів.

Основні результати, вперше отримані в дисертаційній роботі, сформульовані в наступних положеннях:

1. Розроблено теоретичний метод знаходження рухливості дислокацій в квазікристалі з використанням основних співвідношень термодинаміки і гідродинаміки та особливостей структури квазікристала, наявності вакансій і фазонів.
2. Знайдено вирази для рухливості дислокацій в ікосаедричному квазікристалі

з урахуванням перерозподілу концентрації вакансій та непружних перетворень, пов'язаних з фазонними деформаціями. До опису рухливості дислокацій застосовано також модифікований метод динаміки пружних і фазонних полів, що узагальнює статистичну теорію. Отримані результати підтверджують слушність обох підходів. Завдяки збігу результатів, що одержані різними методами, можна зробити висновок, що обидва підходи дають коректний опис рухливості дислокації в квазікристалі.

3. Самоподібний розв'язок рівнянь динаміки полів зміщень дислокації в квазікристалі дозволив знайти безпосередні вирази для внесків пружних деформацій, в'язкого плину, фазонних дефектів, взаємодії пружних полів з дилатаціями, викликаними вакансіями. Проведені чисельні оцінки різних доданків у рухливість показали, що фазонні деформації вносять основний внесок до гальмування вільних сегментів дислокації. Вплив перерозподілу вакансій на рухливість дислокації в ікосаедричних квазікристалах Al-Pd-Mn виявляється помітним лише за порівняно великих концентраціях вакансій,  $C_v > 10^{-3}$ , які можуть виникати в нерівноважних умовах, та за дуже низьких швидкостей дислокації,  $v < 10^{-8}$  см/с.
4. Запропоновано модель мікроскопічної структури фазонних дефектів вакансійного і міжвузлового типів, яка становить основу теорії радіаційних ефектів в квазікристалах.
5. Проведено теоретичний опис радіаційного вакансійного розпухання квазікристалів. Показано, що під опроміненням дислокаційні петлі, завдяки переважному поглинанню радіаційних МА, ростуть і генерують фазони вакансійного і міжвузлового типів. Внесок фазонів в кінетику ТД і розпухання квазікристалів сильно залежить від рухливості фазонів.
6. Сформульовано систему кінетичних рівнянь для опису кінетики власних точкових і рухомих фазонних дефектів. Показано, що вільно-мігруючі фазони виконують роль центрів рекомбінації для радіаційно-індукованих пар Френкеля. Запропонована модель передбачає пригамування вакансійного розпухання квазікристалів. Швидкість росту петель і пор, а також швидкість розпухання сильно залежать від концентрації фазонів, яка контролюється дифузією фазонів до стоків, як-от вакансійні пори, границі зерен.
7. Оскільки дифузійна рухливість фазонів є значно нижчою, ніж вакансій, при невисоких температурах опромінення вони утворюють всередині міжвузлових дислокаційних петель кільцеподібні скупчення фазонів і- та v-типів, які є додатковими стоками точкових дефектів. Чисельним методом знайдено ефективності поглинання власних точкових дефектів дислокаційною петлею з комплементарним кільцем фазонів в залежності від радіуса петлі й розміру кільця. Розрахунки показують, що фазонне кільце суттєво зменшує преференс дислокації до міжвузлових атомів.
8. Проведено оцінку зменшення швидкості розпухання квазікристала в порівнянні з кристалом на ранній перехідній та на пізній стадіях пороутворення.

Таким чином, усі поставлені завдання виконані і мета дисертаційної

роботи досягнута.

Розвинений в дисертаційній роботі теоретичний аналіз дозволяє поглибити уявлення про процеси, що мають місце в квазікристалічних матеріалах під дією зовнішнього навантаження та опромінення. Результати досліджень можуть бути використані для планування та проведення експериментів з вивчення можливості використання матеріалів, що містять включення квазікристалічних фаз, в якості конструкційних матеріалів реакторобудування.

## СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

### Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Бакай А.С., Лазарева Г.Н. Гидродинамика движения дислокаций в квазикристаллах. *Металлофиз. Новейшие технол.* 2008. Т. 30, № 12. С. 1693-1712. Квартиль Q3 (2008). url={[mfint.imp.kiev.ua/ru/browse.html](http://mfint.imp.kiev.ua/ru/browse.html)}.
2. Lazareva G.N., Bakai A.S. Thermodynamical approach to the description of the dislocation mobility in quasicrystals. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2009. V. 21. P. 295401. Квартиль Q1 (2009) DOI: [10.1088/0953-8984/21/29/295401](https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/29/295401).
3. Lazareva G.N., Bakai A.S. Phason Sinks of Radiation Defects in Quasicrystals. *East European Journal of Physics.* 2013. V.1041(2), P. 64-68. url={<https://periodicals.karazin.ua/eejp/article/view/13514>}.
4. Lavrova G.N., Turkin A.A., Bakai A.S. Phason contribution to the dislocation loop bias in quasicrystals. *Acta Physica Polonica A.* 2014. V. 126, № 2. P. 505-507. Квартиль Q3 (2014). DOI: [10.12693/APhysPolA.126.505](https://doi.org/10.12693/APhysPolA.126.505).
5. Lavrova G.N., Turkin A.A., Bakai A.S. The effect of phason defects on the radiation-induced swelling of quasicrystalline materials. *Radiation Effects and Defects in Solids.* 2018. V. 173, issue 7-8. P. 578-588. Квартиль Q3 (2018). DOI: [10.1080/10420150.2018.1484745](https://doi.org/10.1080/10420150.2018.1484745).

### Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

6. Лазарева Г.М., Бакай О. С. Рухливість дислокацій в ікосаедричних квазікристалах. *IX Всеукраїнська школа-семинар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: Збірка тез* (Львів, Україна, 28-29 травня 2009). Львів, 2009. С. 20.
7. Бакай А.С., Лазарева Г.Н., Влияние облучения на подвижность дислокаций в квазикристаллах. *Международная школа молодых ученых по ядерной физике и энергетике.* (Алушта, Украина, 8-14 июня 2009).
8. Lazareva G.N., Bakai A.S. The influence of irradiation on dislocation motion in quasicrystals. *XIX International Conference on Physics of Radiation Phenomena* (Alushta, Ukraine, 06-11 September 2010).
9. Lazareva G.N., Bakai A.S. Dislocation mobility in icosahedral quasicrystals. *XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography.* Book of abstracts (Madrid, Spain, 22-30 August 2011) Acta Cryst. A67 (2011) C625.
10. Лазарева Г.М., Туркін А.А., Бакай О. С. Преференс дислокаційних петель в квазікристалах під опроміненням. *XII Всеукраїнська школа-семинар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої*

речовини: Збірка тез (Львів, Україна, 30 травня-1 червня 2012). Львів, 2012. С. 37.

11. **Лазарева Г.Н.**, Туркин А.А., Бакай А.С. О механизме подавления распухания в квазикристаллах. *XX International Conference on Physics of Radiation Phenomena*. Труды XX Международной конференции по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению (Алушта, Украина, 10-15 сентября 2012). Харьков, 2012. С. 84.
12. **Lazareva G.N.**, Bakai A.S. Phason sinks of radiation defects in quasicrystals. *Международная конференция «Проблемы современной физики»* (Харьков, Украина, 22-24 октября 2012).
13. **Лаврова Г.Н.**, Бакай А.С., Поглощающая способность дислокационной петли в квазикристалле под облучением. *Международная школа молодых ученых по ядерной физике и энергетике*. (Алушта, Украина, 3-7 июня 2013).
14. **Lavrova G.**, Turkin A., Bakai A. Phason contribution to the dislocation loop bias in quasicrystals. *12th International Conference on Quasicrystals: Book of abstracts* (Cracow, Poland, 1-6 September 2013). Cracow, 2013. P-53.

### СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- 1\*. Shechtman D., Blech I., Gratias D., Cahn J. W. Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry. *Phys. Rev. Lett.* 1984. V. 53. P. 1951-1953
- 2\*. Lubensky T. C., Ramaswamy S., Toner J. Dislocation motion in quasicrystals and implications for macroscopic properties. *Phys. Rev. B.* 1986. V. 33. P. 7715-7719.
- 3\*. Ханнанов Ш. Х. Динамика упругих и фазонных полей в квазикристаллах. *ФММ*. 2002. Т. 93. № 5. С. 5-12.
- 4\*. Landau L. D., Lifshitz E. M. *Fluid Mechanics*. Oxford: Pergamon Press. 1982. 554 p.
- 5\*. Momprou F., Caillard D., Feuerbacher M. In-situ observation of dislocation motion in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals. *Philosophical Magazine*. 2004. V. 84. P. 2777-2792.
- 6\*. Feuerbacher M., Caillard D. Dynamics of phason diffusion in icosahedral Al-Pd-Mn quasicrystals. *Acta Mat.* 2006. V. 54. P. 3233-3240.
- 7\*. Norgett M.J., Robinson M.T., Torrens I. M., A proposed method of calculating displacement dose rates. *Nucl. Engineering and Design*. 1975. V. 33. P. 50-54.
- 8\*. Garner F.A. Radiation damage in austenitic steels. *Comprehensive Nuclear Materials*; Konings R. Ed. Vol. 4. Elsevier Press. 2012. P. 33-95.

### АНОТАЦІЯ

**Лаврова Г.М. Кінетика фазонних дефектів та радіаційних пошкоджень в квазікристалах. – На правах рукопису.**

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за фахом 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 – Фізика та астрономія). – Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України, Харків, 2021.

Запропоновано теоретичний метод знаходження рухливості дислокацій в квазікристалі з використанням основних співвідношень термодинаміки і гідродинаміки та особливостей структури квазікристала, наявності вакансій і фазонів. Знайдено вирази для рухливості дислокацій в ікосаедричному квазікристалі з урахуванням перерозподілу концентрації вакансій та непружних перетворень, пов'язаних з фазонними деформаціями. До опису рухливості дислокацій застосовано також модифікований метод динаміки пружних і фазонних полів, що узагальнює статистичну теорію. Отримані результати підтверджують слушність обох підходів. У квазікристалах будь-який рух дислокації пов'язаний з утворенням фазонних дефектів, а саме локалізованих топологічних фазонних дефектів вакансійного й міжвузлового типів. Фазонні дефекти взаємодіють з радіаційно-індукованими точковими дефектами і виявляються центрами рекомбінації змінної полярності для точкових дефектів. Сформульовано систему рівнянь балансу для власних точкових і фазонних дефектів. Показано, що швидкість розпухання квазікристалів є меншою, ніж швидкість розпухання кристалів. Швидкості росту дислокаційних петель і пор, а також швидкість розпухання істотно залежать від концентрації фазонних дефектів, яка контролюється дифузією останніх на стоки. Для визначення ефективності поглинання точкових дефектів дислокаційної петлею з додатковим кільцем фазонів розв'язано стаціонарну дрейфово-дифузійну задачу в тороїдальній геометрії чисельним методом послідовної релаксації SOR. Показано, що фазони істотно знижують преференс дислокацій до міжвузлових атомів.

**Ключові слова:** квазікристал, фазони, рухливість дислокації, опромінення, преференс дислокацій, швидкість розпухання.

### АННОТАЦІЯ

**Лаврова Г.Н. Кинетика фазонных дефектов и радиационных повреждений в квазикристаллах. – На правах рукописи.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика (104 – Физика и астрономия). – Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт» НАН Украины, Харьков, 2021.

Предложен теоретический метод нахождения подвижности дислокаций в квазикристалле с использованием основных соотношений термодинамики и гидродинамики и особенностей структуры квазикристалла, наличия вакансий и фазонов. Найдены выражения для подвижности дислокаций в икосаэдрическом квазикристалле с учетом перераспределения концентрации вакансий и неупругих превращений, связанных с фазонными деформациями. К описанию подвижности дислокаций применен также модифицированный метод динамики упругих и фазонных полей, обобщающий статистическую теорию. Полученные результаты подтверждают справедливость обоих подходов. В квазикристалле любое движение дислокации связано с образованием фазонных дефектов, а именно локализованных топологических фазонных дефектов вакансионного и междуузельного типов. Фазонные дефекты взаимодействуют с радиационно-

индуцированными точечными дефектами и оказываются центрами рекомбинации переменной полярности для точечных дефектов. Сформулирована система уравнений баланса для собственных точечных и фазонных дефектов. Показано, что скорость распухания квазикристаллов меньше, чем скорость распухания кристаллов. Скорости роста дислокационных петель и пор, а также скорость распухания существенно зависят от концентрации фазонных дефектов, которая контролируется диффузией последних на стоки. Для определения эффективности поглощения точечных дефектов дислокационной петлей с дополнительным кольцом фазонов решена стационарная дрейфово-диффузная задача в тороидальной геометрии численным методом последовательной релаксации SOR. Показано, что фазоны существенно снижают преференс дислокации к междоузельным атомам.

**Ключевые слова:** квазикристалл, фазоны, подвижность дислокации, облучение, преференс дислокации, скорость распухания.

### ABSTRACT

**Galyna Lavrova. Kinetics of phason defects and radiation damage in quasicrystals. – Manuscript copyright.**

Thesis for a candidate degree in physics and mathematics: speciality 01.04.02 "Theoretical physics" (104 – Physics and Astronomy) – National Science Center "Kharkiv Institute of Physics and Technology" NAS of Ukraine, Kharkiv, 2021.

A theoretical method of finding dislocation mobility in quasicrystals is proposed using basic relations of thermodynamics and hydrodynamics and taking into account peculiarities of quasicrystal structure, the presence of vacancies and phasons. The expressions for dislocation mobility in an icosahedral quasicrystal are found taking into account the redistribution of vacancy concentration and inelastic transformations related to phason deformations. The modified method of dynamics of elastic and phason fields that generalizes the static theory is also applied to describe the dislocation mobility. The results confirm the validity of both approaches. In a quasicrystal any dislocation motion is associated with the formation of phason defects, namely localized topological vacancy- and interstitial-type phason defects. Phason defects interact with radiation-induced point defects, and they turn out to be recombination centers of variable polarity for point defects. A system of rate equations for intrinsic point and phason defects is formulated. It is shown that the swelling rate of quasicrystals is lower than the swelling rate of crystals. The growth rates of dislocation loops and voids, as well as the swelling rate, depend strongly on phason concentration, which is controlled by the phason diffusion to sinks. The stationary drift-diffusion problem in the toroidal geometry is solved by the numerical successive over-relaxation (SOR) method to determine the capture efficiency of point defects by a dislocation loop with an additional phason ring. It is shown that phasons significantly reduce the dislocation bias to interstitial atoms.

**Key words:** quasicrystal, phasons, dislocation mobility, irradiation, dislocation bias, swelling rate.