# ІНСТИТУТ ТЕОРЕТИЧНОЇ ФІЗИКИ ІМ. О.І. АХІЄЗЕРА НАЦІОНАЛЬНИЙ НАУКОВИЙ ЦЕНТР «ХАРКІВСЬКИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ» НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису

Лаврова Галина Миколаївна

УДК 539.21; 538.911; 538.913

## **ДИСЕРТАЦІЯ**

## КІНЕТИКА ФАЗОННИХ ДЕФЕКТІВ ТА РАДІАЦІЙНИХ ПОШКОДЖЕНЬ В КВАЗІКРИСТАЛАХ

01.04.02 – теоретична фізика Фізико-математичні науки

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук. Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

\_\_\_\_\_Г.М. Лаврова

Науковий керівник – Бакай Олександр Степанович, доктор фізикоматематичних наук, професор, академік НАН України

Харків – 2021

#### АНОТАЦІЯ

*Лаврова Г.М.* Кінетика фазонних дефектів та радіаційних пошкоджень в квазікристалах. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізикоматематичних наук за фахом 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 – Фізика та астрономія). – Інститут теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера, Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» Національної академії наук України, Харків, 2021.

Дисертаційна робота присвячена теоретичному дослідженню кінетики фазонних дефектів та радіаційних пошкоджень в квазікристалах.

Квазікристали, як правило, містять велику кількість структурних вакансій та інших точкових або протяжних дефектів, які залишаються при температурному відпалі. Очікується, що наявність таких стійких структурних дефектів може суттєво стримувати низку небажаних радіаційних явищ, а саме розпухання, радіаційний ріст, тощо. Незважаючи на наявність численних робіт з дослідження радіаційних ефектів в квазікристалах, вплив опромінення на рух дислокацій та на хід пластичної деформації в квазікристалах дотепер не досліджувався. Визначальну роль в процесі накопичення радіаційних дефектів в квазікристалі відіграють дислокації, що рухаються, і фазонні дефекти, які при цьому утворюються.

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. Незначні відмінності у виразах для мобільності пов'язані зі спрощеннями використаних моделей. Завдяки збігу результатів, що одержані різними методами, можна зробити висновок, що обидва підходи дають коректний опис рухливості дислокації в квазікристалі.

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 показують, 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 швидкостях дислокації,  $v < 10^{-8}$  см/с.

Аналіз наявних експериментальних результатів виявляє значний вплив взаємних закріплень дислокацій на їхню рухливість в ікосаедричному квазікристалі. Оскільки роль взаємних закріплень зменшується з ростом температури, отримані в роботі вирази можуть безпосередньо використовуватись за температур, близьких до температури плавлення. За більш низьких температур потрібно враховувати сили гальмування дислокацій на центрах пінінгу.

На основі відомих механізмів радіаційного розпухання кристалів описані моделі цього явища в квазікристалах. У квазікристалах будь-який рух дислокації пов'язаний з утворенням фазонних дефектів, а саме локалізованих топологічних фазонних дефектів вакансійного й міжвузлового типів. Так само радіаційний ріст дислокаційних петель супроводжується утворенням фазонного сліду всередині дислокаційних петель, оскільки дифузійна рухливість фазонних дефектів є значно нижчою, ніж вакансій. Фазонні дефекти взаємодіють з радіаційно-індукованими точковими дефектами (вакансіями й міжвузловими атомами) 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.

Розглянуто задачу про ефективність захвату точкових дефектів та преференс дислокаційних петель з урахуванням додаткових фазонних дефектів в квазікристалах. Знайдено наближений аналітичний розв'язок та проведено порівняння з чисельним розв'язком модельної задачі. Чисельними знайдено ефективність поглинання дефектів методами точкових дислокаційною петлею з комплементарним кільцем фазонних дефектів. У порівнянні зі звичайними кристалами ефективність поглинання виявляється значно вищою у всьому інтервалі розглянутих розмірів петель. Показано, що фазони суттєво зменшують преференціальне поглинання міжвузлових атомів дислокацією, внаслідок чого квазікристалічні матеріали повинні мати підвищену стійкість до вакансійного розпухання.

Сформульовано і розв'язано задачу про схильність дислокаційних петель до поглинання міжвузлових атомів (bias) в квазікристалах. В квазікристалах точкові дефекти поглинає не тільки дислокаційна лінія, а також її фазонний слід, який виступає в якості нейтрального поглинаючого стоку. При підвищених температурах фазонна стінка розпадається на окремі точкові фазонні дефекти, що призводить до зміни кінетики поглинання власних точкових дефектів. Фазонні дефекти розглядаються в моделі незбіжних вузлів в площині зсуву неперіодичної структури. Топологічно незбіжний вузол є порожниною поміж регулярними вузлами квазікристалу і збіжними вузлами в шарі зсуву. Незбіжний вузол може бути вакантним або містити атом, тобто бути вакансійно-подібним (v-) або міжвузловиноподібним (i-) дефектом. Поглинаючи регулярний міжвузловий атом, v-дефект перетворюється на i-дефект. З iншого боку i-дефект може поглинути регулярну вакансію i перетворитись на v-дефект. В радіаційній фізиці такі дефекти називають центрами змінної полярності.

Одним з фізичних явищ, що відбуваються в матеріалах під час опромінення, є розпухання. Рушійною силою цього ефекту є перерозподіл потоків точкових дефектів через наявність преференсу дислокацій до міжвузлових атомів. Проведено оцінку швидкості розпухання в квазікристалі на основі отриманих раніше значень преференсу. Для квазікристалу з порами та дислокаційними петлями використано систему рівнянь для концентрацій вакансій та міжвузлових атомів без урахування взаємної рекомбінації та термічної емісії вакансій з пор та дислокацій. Швидкість розпухання знайдена як надлишковий потік вакансій на пори. Отримані вирази для швидкості розпухання містять множник, що точно дорівнює величині преференсу дислокацій. Наявність фазонних дефектів в квазікристалах зменшує преференс, і таким чином зменшує швидкість розпухання. Отримано оцінку залежності швидкості розпухання від радіусу дислокаційної петлі для квазікристалу і кристалу відповідного складу. В такому підході встановлено, що в сенсі стійкості до розпухання квазікристал має істотну перевагу над звичайним кристалом.

Розв'язано задачу про граничний розмір ізольованої дислокаційної петлі в квазікристалі під опроміненням. Можна було очікувати, що генерація фазонних дефектів рухливою дислокацією створює умови для розділення потоків точкових дефекті різних знаків, а отже можливості для росту ізольованої дислокаційної петлі. Виявилось, що топологічна природа фазонних дефектів виключає таку можливість. Саме вакансійні пори, що зародилися в квазікристалі, які є стоками для залишкових вакансій, дозволяють дислокаціям рости і генерувати фазони. Внесок фазонів в кінетику точкових дефектів і розпухання квазікристалів сильно залежить від рухливості фазонів. При низьких температурах, коли фазони нерухомі, швидкісні рівняння для точкових дефектів мають ту ж форму, що і для кристалів, але зі зміненою потужністю стоку дислокаційних петель з фазонними кільцями всередині. За більш високих температур фазонні дефекти стають рухливими і можуть поглинатися порами. В цьому випадку швидкість вакансійного розпухання в квазікристалах також є нижчою, ніж в кристалах. Швидкість зростання петель і пор, а також швидкість розпухання сильно залежать від концентрації фазонних дефектів, яка контролюється дифузією останніх до стоків.

При помірних температурах коефіцієнт дифузії фазонних дефектів невеликий, що призводить до утворення фазонних слідів в формі кілець всередині дислокаційних петель. Для визначення ефективності поглинання точкових дефектів дислокаційної петлею з додатковим кільцем фазонів розв'язано стаціонарну дрейфово-дифузійна задачу в тороїдальній геометрії чисельним методом послідовної релаксації SOR. Показано, що фазони істотно знижують преференс дислокацій до міжвузлових атомів. Тому очікується, що квазікристалічні матеріали будуть проявляти підвищений опір вакансійному розпуханню.

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

## СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

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

- 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}.
- 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) <u>DOI: 10.1088/0953-8984/21/29/295401</u>.
- 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}.
- 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). <u>DOI: 10.12693/APhysPolA.126.505</u>.
- 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.

## Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

- Лазарєва Г.М., Бакай О. С. Рухливість дислокацій в ікосаедричних квазікристалах. *IX Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених* зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: Збірка тез (Львів, Україна, 28-29 травня 2009). Львів, 2009. С. 20.
- 7. Lazareva G.N., Bakai A.S. The influence of irradiation on dislocation motion in quasicrystals. XIX International Conference on Physics of Radiation Phenomena and Radiation Material Science. Труды XIX Международной конференции по физике радиационных явлений и радиационному

материаловедению (Алушта, Украина, 6-11 сентября 2010). Харьков, 2010. С. 37.

- 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.
- Лазарєва Г.М., Туркін А.А., Бакай О. С. Преференс дислокаційних петель в квазікристалах під опроміненням. *XII Всеукраїнська школа-семінар і* конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: Збірка тез (Львів, Україна, 30 травня-1 червня 2012). Львів, 2012. С. 37.
- 10.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.
- 11.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.

#### Abstract

*Galyna Lavrova*. Kinetics of phason defects and radiation damage in quasicrystals. – Qualifying scientific paper, manuscript copyright.

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

The thesis is devoted to theoretical studies of kinetics of phason defects and radiation damage in quasicrystals.

The thesis is devoted to theoretical investigation of the kinetics of phason defects and radiation damage in quasicrystals.

Quasicrystals generally contain a large number of structural vacancies and other point or extended defects that persist during temperature annealing. It is expected that the presence of such stable structural defects can significantly inhibit a number of undesirable radiation phenomena, namely swelling, radiation growth, etc. In spite of numerous works on the investigation of radiation effects in quasicrystals, the influence of irradiation on dislocation motion and on the course of plastic deformation in quasicrystals has not been studied so far. The defining role in the process of radiation defects accumulation in quasicrystals is played by moving dislocations and phason defects, which are formed in the process.

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. Minor differences in the expressions for mobility are due to simplifications of the models used. Since the results obtained by different methods coincide, it can be concluded that both approaches describe the dislocation mobility in quasicrystals correctly.

Direct expressions for the contributions of elastic deformations, viscous flow, phason defects, and the interaction of elastic fields with vacancy-induced dilatation are found using the self-similar solution of equations of dislocation displacement field dynamics in a quasicrystal. Numerical estimations of various terms in mobility show that phason deformations make the main contribution to the drag of free dislocation segments. The effect of vacancy redistribution on dislocation mobility in the Al-Pd-Mn icosahedral quasicrystal appears only at relatively high vacancy concentrations,  $C_v > 10^{-3}$ , which can occur only in nonequilibrium conditions, and at very low dislocation velocities,  $v < 10^{-8}$  cm/s.

The analysis of the available experimental results shows a significant influence of mutual pinning of dislocations on their mobility in an icosahedral quasicrystal. Since the effect of mutual pinning decreases with temperature increase, the expressions obtained in this work can be used at temperatures close to the melting point. At lower temperatures, the dislocation drag forces at pinning centers should be taken into account.

Based on the known mechanisms of radiation swelling of crystals, models of this phenomenon in quasicrystals are described. In a quasicrystal any dislocation motion is associated with the formation of phason defects, namely localized topological vacancy- and interstitial-type phason defects. Likewise, the radiation growth of dislocation loops is accompanied by the formation of a phason trace inside the dislocation loops since the diffusion mobility of phason defects is much lower than that of vacancies. Phason defects interact with radiation-induced point defects (vacancies and interstitial atoms), 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 problem of point defect capture efficiency and dislocation loop bias taking into account additional phason defects in a quasicrystal is solved. An approximate analytical solution is found and compared with the numerical solution of the model problem. The capture efficiency of point defects by a dislocation loop with a complementary ring of phason defects is found by numerical methods. Compared to conventional crystals, the capture efficiency turns out to be significantly higher over the entire range of the considered loop sizes. It is shown that phasons notably reduce the dislocation bias to interstitial atoms, hence quasicrystalline materials are expected to have an increased resistance to vacancy swelling.

The problem of the biased absorption of interstitial atoms by a dislocation loop in a quasicrystal is formulated and solved. In a quasicrystal, point defects are absorbed not only by the dislocation line, but also by its phason trace, which acts as a neutral absorbing sink. At elevated temperatures, the so-called phason wall disintegrates into individual phason point defects, which results in changes in the absorption kinetics of the intrinsic point defects. Phason defects are considered in the model of non-coincident sites in the shear layer of a non-periodic structure. Topologically, a non-coincident site is a cavity between regular quasicrystal sites and coincident sites in the shear layer. A non-coincident site can be vacant or can contain an atom, that is, it can be a vacancy-like (v-) or an interstitial-like (i-) defect. By absorbing a regular interstitial atom, a v-defect becomes an i-defect. On the other hand, an i-defect can absorb a regular vacancy and become a v-defect. In radiation physics such defects are called the centers of alternating polarity.

Swelling is one of the physical phenomena that occur in materials under irradiation. The driving force behind this effect is the redistribution of point defect fluxes due to the presence of dislocation bias to interstitial atoms. The swelling rate in a quasicrystal is estimated based on the previously obtained bias values. A quasicrystal with voids and dislocation loops is described by a system of equations for the concentrations of vacancies and interstitial atoms without taking into account mutual recombination and thermal emission of vacancies from voids and dislocations. The swelling rate is found as the excess flux of vacancies to voids. The obtained expressions for the swelling rate contain a multiplier exactly equal to the dislocation bias value. The presence of phason defects in quasicrystals reduces the bias, and thus reduces the swelling rate. The dependence of the swelling rate on the dislocation loop radius for a quasicrystal and a crystal of the corresponding composition is estimated. In this approach it is found that a quasicrystal has a significant advantage over a regular crystal in the sense of swelling stability.

The problem of the maximum size of an isolated dislocation loop in a quasicrystal under irradiation is solved. It could be expected that the generation of phason defects by a moving dislocation creates conditions for the separation of point defect fluxes of different signs and, consequently, opportunities for the growth of an isolated dislocation loop. It turned out that the topological nature of phason defects excludes such a possibility. It is vacancy voids nucleated in a quasicrystal, which are the sinks for excess vacancies, that allow dislocations to grow and generate phasons. The contribution of phasons to the kinetics of point defects and swelling of quasicrystals strongly depends on the mobility of phasons. At low temperatures, when phasons are immobile, rate equations for point defects have the same form as those for crystals, but with a changed sink strength of a dislocation loop with phasons inside. At higher temperatures, phason defects become mobile and can be absorbed by voids. In this case, the vacancy swelling rate in a quasicrystal also turns out to be lower than in a crystal. The growth rate of loops and voids, as well as the swelling rate, strongly depend on the concentration of phason defects, which is controlled by the diffusion of the latter to the sinks.

At moderate temperatures the diffusion coefficient of phason defects is small, resulting in the formation of ring-shaped phason traces within dislocation loops. 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. Therefore, quasicrystalline materials are expected to exhibit increased resistance to vacancy swelling.

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

## **3MICT**

3MICT	. 14
ПЕРЕЛІК АБРЕВІАТУР І УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	. 16
ВСТУП	. 19
РОЗДІЛ 1. КВАЗІКРИСТАЛИ І ДЕФЕКТИ В НИХ (ОГЛЯД	
ЛІТЕРАТУРИ)	. 25
1.1. Дислокації і фазонні дефекти в квазікристалах	. 25
1.2. Квазікристали під впливом опромінення	. 29
1.3. Зміцнені квазікристалами матеріали	. 32
Висновки до розділу 1	. 35
РОЗДІЛ 2. ДИНАМІКА ДИСЛОКАЦІЙ В КВАЗАКРИСТАЛІ	. 37
2.1. Швидкість руху дислокацій: гідродинамічне наближення	. 38
2.1.1. Загальне рівняння рухливості	. 39
2.1.2. Рівняння динаміки пружних і фазонних полів	. 41
2.1.3. Рухливість дислокації	. 45
2.1.4. Чисельні оцінки величини рухливості	. 51
2.1.5. Вплив взаємних закріплень дислокацій	. 61
2.2. Швидкість руху дислокацій: термодинамічний підхід	. 63
2.2.1. Внесок в'язкого потоку	. 63
2.2.2. Вакансійний внесок	. 66
2.2.3. Фазонний внесок	. 70
Висновки до розділу 2	. 72
РОЗДІЛ З. РАДІАЦІЙНІ ДЕФЕКТИ І РОЗПУХАННЯ	
КВАЗІКРИСТАЛІВ	. 74
3.1.Вступ	. 74
3.2. Формування та властивості фазонів як часткових точкових дефектів	375

3.3. Модель
3.4. Рівняння балансу ТД для квазікристалу з дислокаційними петлями,
рухомими фазонами та порами 81
3.5. Швидкість розпухання в квазікристалі без стоків фазонів
3.6. Аналітична оцінка швидкості розпухання квазікристала з
нейтральними стоками
3.7. Вплив фазонів на розпухання квазікристалів: чисельні розрахунки 91
Висновки до розділу 396
РОЗДІЛ 4. ЕФЕКТИВНІСТЬ ПОГЛИНАННЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ
ДИСЛОКАЦІЙНИМИ ПЕТЛЯМИ В КВАЗІКРИСТАЛАХ ПІД
ОПРОМІНЕННЯМ 98
4.1.Вступ
4.2. Аналітична модель 100
4.3. Дислокаційна петля і хмара фазонів 104
4.4. Рівняння балансу ТД 106
4.5. Ефективності поглинання дислокаційних петель 110
4.6. Результати розрахунків 118
Висновки до розділу 4 125
ВИСНОВКИ 126
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ 129
ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ
ДИСЕРТАЦІЇ138

## ПЕРЕЛІК АБРЕВІАТУР І УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ТД	точкові дефекти
MA	міжвузлові атоми
ДУ	фактор Дебая-Уоллера
SOR	successive overrelaxation method
TEM	transmission electron microscopy
2D	двовимірний
3D	тривимірний
q	хвильовий вектор
B	вектор Бюргерса шестивимірної гратки
<b>b</b> <sub>  </sub>	вектор Бюргерса у фізичному просторі
$b^{\perp}$	фазонна компонента вектора Бюргерса
M	рухливість дислокації
$\mathbf{F}_{\mathrm{D}}$	сила Піча-Келера
$A_{ijkl}$ , $D_{ijkl}$ , $C_{ijkl}$	тензори пружних констант
$u_{ij}$	тензор пружної деформації
$w_{ij}$	фазонна деформація
ρ	густина кристалу (розд. 2)
$\mathbf{v}$	швидкість руху малого об'єму
$\eta_{iklm}$	тензор в'язкості
$\Gamma_w$	кінетичний коефіцієнт релаксації сили $\widetilde{\mathbf{f}}$
j	густина потоку ТД
D	коефіцієнт дифузії
$k_p$	бародифузійне відношення
$v_{\mathrm{D}}$	швидкість руху дислокації
$e_{ijk}$	антисиметричний одиничний тензор,
1	одиничний вектор вздовж дислокаційної лінії

$E_v$	енергія утворення вакансії
$E_{\nu}^{m}$	енергія міграції вакансій
$k_{\mathrm{B}}$	стала Больцмана
T	температура
$\Delta G$	вільна енергія
$E_{\rm el}$	густина пружної енергії
T	температура,
S	ентропія (розд. 2)
S	ентропія на одиницю маси
V <sub>lm</sub>	тензор швидкості деформації
$\eta_{_{ m L}}$ i $\eta_{_{ m T}}$	поздовжня і поперечна в'язкості
p	тиск
μ	хімічний потенціал
$\sigma_{_{ij}}$	тензор пружних напружень
Ω	дилатаційний об'єм
$\Gamma_w$	фазонний кінетичний коефіцієнт
K	швидкість генерації вільно мігруючих ТД,
$K_{pi,pv}$	швидкість генерації фазонів
$n_{C}$ i $r_{C}$	густина і радіус пор
β	частка вузлів ґратки, які перетворюються у фазони під час
	переповзання дислокації
$ ho_{ m d}$	густина дислокацій
$lpha_{_{iv}}$	константа швидкості рекомбінації ТД
$r_{iv}$	радіус спонтанної рекомбінації вакансії і МА
ω	атомний об'єм
$k_{i,v}^2$	повні потужності стоків
$k_C^2$	потужність стоків пор

$Z_{str,m}$	ефективність поглинання
$ ho_{str}$	густина прямолінійних дислокацій
f(r)	функція розподілу дислокаційних петель по розмірах
$Z_n(r)$	ефективність поглинання ТД петлями радіуса $r$
F(r)	функція розподілу пор по розмірах
b	вектор Бюргерса
$B_{L}$	преференс петлі
$B_{mean}$	середньозважений преференс усіх типів стоків
$B_{str}$	преференс прямолінійних дислокацій
$\phi$	доза опромінення
$K_0$	швидкість створення зміщень згідно NRT стандарту
$\eta$	частка вільно мігруючих регулярних ТД
U	енергія взаємодії ТД із пружним полем дислокаційної
	петлі
μ	модуль зсуву
V	коефіцієнт Пуассона
K(k) i $E(k)$	є повні еліптичні інтеграли першого і другого роду
γ	параметр надрелаксаціі
$R_{i,j}^{(n+1)}$	вектор залишків
S	розпухання (розд. 3 і 4)
S'	швидкість розпухання

#### вступ

Обґрунтування вибору теми дослідження. 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 радіаційної стійкості конструкційного лосягнення матеріалу використовується дрібно-дисперсне зміцнення певними виділеннями, як-от оксидними (оксидно-дисперсні сплави), карбідними, нітрид ними, 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 ших квазікристалічних включень піл як правило, містять кількість опроміненням. Квазікристали, велику структурних вакансій та інших точкових та протяжних дефектів, які зберігаються при температурному відпалі. Очікується, що наявність таких стійких структурних дефектів може суттєво стримувати низку небажаних радіаційних явищ, а саме розпухання, радіаційний ріст тощо. Незважаючи на дослідженню радіаційних наявність численних робіт ПО 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.

**Метою** дисертаційної роботи є теоретичний опис еволюції дефектної структури квазікристалу під впливом опромінення; проведення чисельних розрахунків, в тому числі для перевірки результатів запропонованих теорій.

З цією метою у роботі визначено низку завдань, серед яких:

- розвиток теоретичного методу розрахунку рухливості дислокації в квазікристалі;
- побудування моделі радіаційних фазонних дефектів в квазікристалі;
- проведення чисельних розрахунків характеристик поведінки радіаційних дефектів в квазікристалі;
- розробка теорії радіаційного розпухання квазікристалів.

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 диференційних рівнянь і здобуття виразу для рухливості дислокації в квазікристалі. Для побудови моделі дислокації в двовимірному квазікристалі використаний метод процесу Соміліана. Для знаходження максимального радіусу 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 здобуто наступні результати:

- Розроблено теоретичний метод знаходження рухливості дислокацій в квазікристалах, що базується на співвідношеннях термодинаміки і гідродинаміки.
- 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.
- Запропоновано модель мікроскопічної структури фазонних дефектів вакансійного і міжвузлового типів, яка становить основу теорії радіаційних ефектів в квазікристалах.
- Одержано систему кінетичних рівнянь для опису радіаційного розпухання квазікристалів при наявності нерухомих і рухомих фазонних дефектів.
- Показано, що генерація фазонів дислокаціями, які переповзають, призводить до пригамування вакансійного розпухання квазікристалів. Ефективність пригамування розпухання залежить від рухливості фазонів.

**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. Уci результати, викладені y дисертаційній роботі, отримані автором у 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 порівнянні та числових розрахунках, результатів 3 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. Основні наукові результати та положення дисертації представлені та обговорені на наукових семінарах Інституту теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ ХФТІ НАНУ, а також були представлені на 9 міжнародних наукових конференціях, зокрема:

IX Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 28-29 травня 2009);

- Международная школа молодых ученых по ядерной физике и энергетике. (Алушта, Украина, 8-14 июня 2009);
- XIX International Conference on Physics of Radiation Phenomena (Alushta, Ukraine, 06-11 September 2010);
- XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography. Book of abstracts (Madrid, Spain, 22-30 August 2011).
- XII Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, Україна, 30 травня-1 червня 2012).
- XX International Conference on Physics of Radiation Phenomena. (Алушта, Украина, 10-15 сентября 2012).
- Международная конференция «Проблемы современной физики» (Харьков, Украина, 22-24 октября 2012).
- Международная школа молодых ученых по ядерной физике и энергетике. (Алушта, Украина, 3-7 июня 2013)
- 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 ІІІ-2-16 (ІТФ), номер держреєстрації 0116U007066, виконавець);

забезпечення цільова програма «Наукове розвитку ядерноенергетичного комплексу та перспективних ядерних технологій» на 2016 – 2018 pp. по темі «Розробка методів регулювання потужності перспективного швидкого реактора з хвилею ядерного горіння та моделювання матеріалів для ядерної енергетики наступного покоління» (шифр теми X-2-13-10, номер держреєстрації 0119U101826, виконавець).

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

Публікації. Результати, що представлені у дисертаційній роботі, опубліковано у 5 статтях [1-5] у фахових наукових журналах, а також у 9 тезах доповідей [6-11] у збірниках праць вітчизняних та міжнародних наукових конференцій за фахом.

Структура та обсяг 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.

#### **РОЗДІЛ 1**

## КВАЗІКРИСТАЛИ І ДЕФЕКТИ В НИХ (ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ)

Перший розділ дисертації містить огляд літератури за темою дисертації, його присвячено опису нового типу твердих тіл – квазікристалів та аналізу експериментальних даних і теоретичних робіт, в яких досліджувався рух дислокацій в квазікристалах та особливі дефекти, притаманні квазікристалам – фазони (підрозділ 1.1). В підрозділі 1.2 проаналізовано експериментальні роботи, які стосуються впливу опромінення на квазікристали. В підрозділі 1.3 розглянуто декілька експериментальних досліджень, які описують використання квазікристалів у якості зміцнюючих домішок до сплавів з метою покращення їх властивостей.

## 1.1. Дислокації і фазонні дефекти в квазікристалах

Квазікристали – це клас твердих тіл, що мають трансляційну квазіперіодичність й далекий орієнтаційний порядок. Вони були відкриті в 1982 р. Деном Шехтманом [12]. У 2011 р. за це відкриття Шехтману була присуджена Нобелевська премія з хімії. Безпосередньо термін *квазікристал* було вперше використано в роботі Левіна і Стейнгарда [13].

До відкриття квазікристалів серед твердих тіл були відомі тільки кристали і аморфні тіла. В кристалі атоми розташовані періодично і його повна структура може бути відтворена послідовним повторенням елементарної (примітивної) комірки у трьох напрямках. Тобто єдина примітивна комірка повністю описує симетрію кристалу, а періодичність забезпечує дальній порядок. В аморфному твердому тілі ближній порядок розташування атомів має велике різноманіття і зовсім не демонструє періодичності у просторі, тобто дальній порядок відсутній. Квазікристали мають проміжну структуру між кристалами і аморфними тілами, а саме вони мають дальній порядок, тобто повністю передбачувані положення атомів на будь-яких відстанях, але їм бракує трансляційної періодичності. З кристалами їх поєднує наявність дальнього порядку, а з аморфними тілами – розмаїтість локальних атомних розташувань.

Точна структура квазікристалів все ще є предметом дискусій, незважаючи на чисельні дослідження в цій галузі. Через унікальну структуру квазікристалів, їх фізичні й механічні властивості відрізняються від відповідних властивостей звичайних кристалів [14-16]. Це стосується й структурних дефектів. Крім властивих кристалам дефектів, таких як вакансії, міжвузлові атоми, дислокації й інші, у квазікристалах присутні так звані фазонні дефекти - локальні порушення квазіперіодичного трансляційного порядку квазікристала [17]. Їхня структура дотепер не цілком ясна.

В підході хвиль густини фазони були описані як додаткові гідродинамічні (довгохвильові) моди, крім фононних, наявних у звичайних кристалах [18]. Фазони з'являються у декількох фізичних формах, пов'язаних з різними переміщеннями атомів, таких як фазонна фаза, фазонне зміщення, фазонна деформація, фазонний стрибок, фазонні фліпи, фазонні коливання, тощо [19]. Такі локалізовані атомні перестановки можна представити у вигляді лінійних суперпозицій фазонних мод різних хвильових векторів, подібних до подання атомної вібрації як суперпозиції фононів.

Фазонні дефекти проявляються в так званих фазонних фліпах, які відповідають стрибкам одного атома або локалізованої групи атомів між розділеними позиціями [20]. З іншого боку, фазонні порушення є скорельованими на більших відстанях фазонними фліпами, які разом становлять макроскопічне зрушення. Кінетика довгохвильових фазонних порушень описується в гідродинамічному наближенні, відповідно до якого просторові Фур'є-компоненти фазонної флуктуації із хвильовим вектором **q**  релаксують з часовою сталою, яка є пропорційною  $q^{-2}$ . Таким чином, короткохвильова (великі q) компонента релаксує швидко, у той час як довгохвильова має великий час релаксації. Така незрелаксована флуктуація є якимось типом безладдя й приводить до дифузійного розсіювання навколо брегговських піків [21,22].

Для розуміння механізмів пластичного плину квазікристала необхідна теорія руху дислокацій. Пластична деформація ікосаедричних квазікристалів Al-Pd-Mn відбувається шляхом руху дислокацій та їх розмноження, як і у кристалах [23]. Дислокації в квазіперіодичних структурах можна створити за допомогою процесу Вольтерра [24]. Однак у цьому випадку можна застосувати два різних підходи:

1. Як і в будь-якому іншому твердому тілі, може бути створений процес Вольтерра в тривимірному фізичному просторі, тобто розріз вздовж довільного напряму і довжина, що відображає відповідне зміщення двох поверхонь розрізу структур. Через те, що ікосаедрична структура не є періодичною, ця процедура призводить до створення дефекту упаковки в площині розрізу, а термінаційні дислокації є неідеальними. Як і в кристалах, енергія дефекту пакування має локальні мінімуми для характерних векторів.

2. Процес Вольтерра можна проводити в шестивимірній гіперкубічній системі, з якої ікосаедрична структура отримується за допомогою розрізу та проектування в тривимірний фізичний простір. Якщо дві гіперкубічні частини розрізу зсунути на трансляційно інваріантний вектор Бюргерса В шестивимірної ґратки, то вони можуть бути ідеально зшиті, і ми отримаємо ідеальну дислокацію. Таким чином, після розрізу та проектування в фізичний ідеальною, простір дислокація залишається i структура навкруги дислокаційної лінії лише локально викривлена по відношенню до вихідної шестивимірної гіперкубічної ґратки. Відповідно, вектор Бюргерса побудованої таким чином дислокації описується шістьма компонентами, три з яких описують поле пружних деформацій фізичного простору ( $\mathbf{b}_{||}$ ), а інші три описують його компонент «фазонного зміщення» ( $\mathbf{b}_{||}$ ).

Поле фазонних зміщень ідеальної дислокації, створене після процедури 2, фізично реалізується у вигляді хмари хімічних і структурних точкових дефектів, локально оточуючих лінію дислокації. З іншого боку, дефект упаковки, створений в процесі 1, складається з плоского скупчення фазонів, тобто хімічних і структурних точкових дефектів, що вводяться для продовження двох частин структури. Як і в разі ідеальної дислокації, вектор Бюргерса термінаційної неідеальної дислокації може бути описаний компонентом вектора Бюргерса  $\mathbf{b}_{||}$  в фізичному просторі. Він може розглядатися як проекція шестивимірного вектора Бюргерса В. У фізичному просторі може бути розглянутий перехід від однієї картини до іншої, тобто від неідеальних до ідеальних дислокацій, що мають однакові компоненти вектора Бюргерса **b**<sub>11</sub> в фізичному просторі. Це відбувається шляхом розчинення дефекту пакування, пов'язаного з неідеальної дислокацією, і локальної перебудови відповідної густини фазонних дефектів навколо лінії дислокації. Навпаки, дефекти пакування можуть розглядатися як конденсація індивідуальних фазонів. З цієї причини дефекти пакування називають «фазонними дефектами» або, іноді, «фазонними стінками», а їх розчинення називається «фазонною дисперсією» або «перебудовою мозаїки».

Обидва типи дислокацій спостерігалися в просвічуючій електронної мікроскопії (TEM – transmission electron microscopy). Неідеальні дислокації з «власними» фазонними дефектами (тобто фазонними дефектами, що створюються дислокаціями), спостерігаються при низьких температурах, в той час як ідеальні дислокації спостерігаються при високих температурах [25-27]. Це є наслідком сильної термічної активації процесу дифузії фазонів.

Експериментальне спостереження руху дислокацій у квазікристалі Al-Pd-Mn показало [24], що дислокації переміщуються шляхом переповзання. Рух дислокацій починається за досить високих температур (вище 700<sup>o</sup>C) під дією термічних і внутрішніх напружень. Однак, через відсутність трансляційної симетрії квазікристалів, рухлива дислокація неодмінно залишає за собою плаский дефект, що складається із площини фазонних дефектів [24,28-30]. Схожим чином дислокація, що рухається у звичайному кристалі, спричиняє утворення дефекту укладання. Вважається, що при відпалі ця так звана «фазонна стінка» розчиняється, відповідно, цей процес називають «фазонною дисперсією». Крім того, як і в кристалах, взаємні закріплення породжують піннінгування дислокацій. Очевидно, ці два механізми є істотними в процесі переповзання дислокацій, хоча й інші – такі, як закріплення на виділеннях, домішках або гальмування хмарами вакансій, можуть впливати на рухливість дислокацій.

Для опису рухливості дислокацій у квазікристалах можна використати гідродинамічне наближення. В роботі [31] був розвинений загальний підхід і отримані вирази для рухливості в термінах констант вакансійної дифузії у квазікристалах, однак використовувані в ній гідродинамічні рівняння не враховують дифузію вакансій у загальноприйнятому виді [32]. У роботі [32] отримані рівняння динаміки взаємозалежних пружних і фазонних полів.

### 1.2. Квазікристали під впливом опромінення

Опромінення матеріалів викликає різноманітні мікроструктурні зміни. Вибивання атомів частинками високих енергій призводить до утворення точкових дефектів (ТД) - вакансій та міжвузлових атомів (МА). Кластеризація точкових дефектів та дифузія до стоків, тобто протяжних дефектів, таких як дислокації, межі зерен та пори, контролюють еволюцію мікроструктури матеріалу, що в більших масштабах спостерігається як розпухання, крихкість, повзучість та інші радіаційні ефекти. Явище вакансійного розпухання було відкрито Каторном і Фултоном в 1967 р. 3 цього часу численні експериментальні дослідження, а також теоретичні дослідження, дозволили зрозуміти механізми радіаційного пошкодження та розробити сплави з властивостями, прийнятними для застосування. Одним з найважливіших висновків, отриманих в результаті цих досліджень, є те, що преференс дислокацій до поглинання МА в порівнянні з вакансіями відповідає за більшість радіаційних ефектів, включаючи розпухання.

Очікується, що квазікристали повинні мати високу радіаційну стійкість з огляду на цілу низку структурних властивостей. Квазікристали, як правило, містять велику кількість так званих структурних вакансій, які зберігаються при температурному відпалі. В доповнення до структурних вакансій спостерігаються як звичайні температурні вакансії, так і точкові дефекти, які утворюються при пластичній деформації та опроміненні. Вплив опромінення на квазікристали вивчався в декількох працях [33-36], однак вплив опромінення на рух дислокацій та на хід пластичної деформації в квазікристалах дотепер не досліджувався.

Огляд експериментів з опромінення наведено в [37]. Зразки у вигляді тонких стрічок опромінювали електронами з енергією 1 МеВ та 400 кеВ у високовольтному електронному мікроскопі. Було встановлено, що електронне опромінення нижче певної критичної температури (наприклад, 130 К для  $Al_{86}Mn_{14}$  та 60 К для  $Al_{84}V_{16}$ ) індукує фазовий перехід з квазікристалічної фази до аморфної. Для  $Al_{86}Mn_{14}$  перехід квазікристалічна фаза відбувається при T > 720 К.

Перетворення декагональної квазікристалічної фази в Al<sub>62</sub>Cu<sub>20</sub>Co<sub>15</sub>Si<sub>3</sub> і Al<sub>65</sub>Cu<sub>15</sub>Co<sub>20</sub> в нормальну кристалічну фазу вивчалось за допомогою електронної дифракції та електронної мікроскопії з високою розподільною здатністю при 400 кеВ при кімнатній температурі [38]. На першій стадії

декагональна фаза трансформувалась до ОЦК фази. Після тривалого опромінення ця фаза перетворилася на кубічну фазу типу CsCl.

Раніше було показано, що ікосаедричний Al-Cu-Fe під дією низькоенергетичного іонного опромінення може переходити в аморфний стан, однак опромінення важкими іонами високої енергії призводить лише до формування дефектів [39,40]. Стабільність ікосаедричного Zr-Ti-Ni-Cu під опроміненням швидкими важкими іонами вивчалась в [36]. Фазова стабільність ікосаедричного Ti-Zr-Ni під дією рентгенівського опромінення досліджувалась в [41]. Там також було показано, що квазікристалічна дифракційна картина змінюється зі збільшенням дози опромінення. Поки достеменно невідомо, від чого залежить фазова нестабільність таких квазікристалічних матеріалів, однак квазікристалічним структурам властиві вельми специфічні фазонні дефекти, які можуть суттєво змінювати кінетику накопичення радіаційних пошкоджень. Розгляд впливу фазонних дефектів на розпухання квазікристалів міг би оцінити перспективність цих матеріалів для застосування в реакторах наступних поколінь.

Деякі деталі фазового перетворення квазікристалічних фаз сплаву Al<sub>62</sub>Cu<sub>20</sub>Co<sub>15</sub>Si<sub>3</sub> під пучком електронів 400 кВ наведені в [42]. Перехід спостерігається in situ за допомогою електронного мікроскопа високої роздільної здатності. Результати показують, випромінювання ЩО електронного пучка викликає послідовність змін, подібних до тих, що спостерігаються в процесі аморфізації, що спричиняється іонним пучком. Розглядаючи випромінюванням, аналіз пошкодження електронним результати добре узгоджуються з фазонним рухом або моделлю "стрибківобертів" (flip-flop) [43], де перехід від квазікристалічної фази до кристалічної відбувається за рахунок атомних переміщень, але не каскадним чином.

Індуковані опроміненням вакансії були виявлені в ікосаедричних Mg-Zn-Но та Al-Pd-Mn після електронного опромінення [34]. Електронне опромінення проводили для поліквазікристалу Mg<sub>26</sub>Zn<sub>64</sub>Ho<sub>10</sub> з енергією електронів 3 МеВ в діапазоні температур від 243 до 253К і моноквазікристалу  $Al_{70}Pd_{21}Mn_9$  з енергіями електронів 0.5 або 3 МеВ в діапазоні температур від 170 до 200К. При цих експериментальних умовах, дози оцінюються до  $1.8 \times 10^{19} \text{ m}^{-2}$  і  $1.5 \times 10^{19} \text{ m}^{-2}$  для 0.5- і 3-МеВ електронного опромінення.

## 1.3. Зміцнені квазікристалами матеріали

Було показано, що алюмінієві сплави, що містять Mn, Be і Cu можуть бути зміцнені за допомогою осадження квазікристалів зі швидкістю охолодження до 100 К/с, що забезпечує лиття майже до остаточної форми у плашки з водяним охолодженням [44]. Через відсутність трансляційної періодичності, вбудована квазікристалічна фаза перешкоджає руху дислокацій матриці під час деформації, що збільшує межу плину до понад 450 МПа без додаткової термічної обробки тільки-но виготовленого матеріалу. Ці квазікристалічно зміцнені сплави також демонструють дуже великі деформації до руйнування: а саме до 90% при однобічному стисненні і до 40% при одновісному розтягуванні, що свідчить про надпластичну поведінку [45]. Такі властивості забезпечують новим матеріалам значну перевагу над типовими інтерметалідними фазами зміцнення в алюмінієвих сплавах, які додаючи твердості матеріалу, одночасно збільшують його крихкість..

В роботі [46] зміцнюючи ефекти квазікристалічної ікосаедричної фази вивчались у двох сплавах  $Mg_{95}Zn_{4.2}Y_{0.8}$  та  $Mg_{92.5}Zn_{6.5}Y$ , екструдованих при 250 і 400°С. Квазікристалічні частинки мають грані, які чітку орієнтовані відносно матриці. Завдяки своїй симетрії і квазіперіодичності ікосаедрична фаза може утворювати стійкі поверхні розділу з матрицею в різних напрямках. Частинки ікосаедричної фази мають сильний піннінговий вплив на межі зерна, що стабілізує розмір зерна. Ікосаедричні частинки стійкі до огрубіння, і залишаються твердими при високих температурах, поєднуючи високу міцність з пластичністю при 200°С. Після екструзії або випробувань на розтягування спостерігається дуже мало деформаційних структур, таких як висока густина дислокацій або двійників. Зазвичай спостерігаються дислокації с-типу (дислокації, що знаходяться в базальтовій площині). Завдяки стабільності мікроструктури після екструзії можна застосовувати різні додаткові обробки. У сплаві  $Mg_{92.5}Zn_{6.5}Y$  при відпалі за температури 400°С ікосаедрична фаза перетворюється на гексагональну фазу  $Mg_{25}Zn_{58}Y_{17}$ . Ікосаедрична фаза згодом додатково осаджується на його поверхні розділу, утворюючи нанокомпозит.

Мартенситно-старіючі сталі знайшли широке застосування завдяки незвичайному поєднанню надвисокої міцності і пластичності. В роботі [47] було проведено дослідження, спрямоване на розробку нової мартенситностаріючої сталі, оскільки сплави, які традиційно використовуються для хірургічних інструментів різного типу, не відповідають вимогам, що пред'являються виробниками. Сплав Sandvik 1RK91, запропонований в [47], має міцність, що перевищує міцність традиційних сталей цієї категорії. 1RK91 не виявляє ознак втрати міцності після 1000 годин старіння за температури 475°С в поєднанні з межею міцності на розтяг, що перевищує 3000 МПа для найменших розмірів дроту. Дисперсійне зміцнення при ізотермічному старінні за температури 475°С в мартенситно-старіючій сталі 1RK91 термодинамічно-стійкими квазікристалічними викликається виділеннями ікосаедричної симетрії. Припускається, що чудова міцність 1RK91 зобов'язана саме квазікристалічним виділенням, які перешкоджають руху носіїв деформації. Квазікристалічні виділення, що утворилися при 475°С, зазнають фазовий перехід другого роду в кристалічну апроксимантну фазу Лавеса і R-фазу за температури приблизно 525°С. Наведене дослідження переконливо показує, що термічно сформовані квазікристали в металевому матеріалі, отриманому звичайним способом, можуть бути використані для дисперсійного зміцнення.

У більшості випадків квазікристалічні матеріали мають високу твердість і міцність, що наближається до теоретичної міцності. При цьому на мікроскопічних масштабах локальне навантаження індентором демонструє значну пластичну деформацію без ознак руйнування. З іншого боку, в умовах звичайних механічних випробувань на макроскопічних масштабах за помірних температур спостерігається крихке руйнування. Як було показано в роботах [48-50] локальна пластичність забезпечується завдяки фазовому перетворенню квазікристал-кристалічний апроксимант, яке відбувається завдяки накопиченню фазонних дефектів в області мікропластичності навколо індентора. Явище помітної пластичності при локальному навантаженні було також підтверджено методом нанотвердості [51-54]. Завдячуючи цьому явищу, зміцнені нанорозмірними квазікристалічними виділеннями металічні сплави мають підвищену пластичність.

В роботі [55] зазначено, що формування ікосаедричної фази (І-фази) як вторинної фази затвердіння в базових системах Mg–Zn–Y та Mg–Zn–Al забезпечують корисні переваги при проектуванні кованих магнієвих сплавів з високими показниками. Зміцнення у двофазних композитах (I-фаза + α-Mg) можна пояснити дисперсійним зміцненням через наявність частинок І-фази і завдяки властивості міцного зв'язку на межі розділу І-фаза/матриця. Наявність додаткової фази вторинного затвердіння може ще більше підвищити формотворення та механічні властивості. У сплавах Mg-Zn-Y спільна присутність фаз І та Ca<sub>2</sub>Mg<sub>6</sub>Zn<sub>3</sub> шляхом додавання Ca може значно покращити формотворення, тоді як у сплавах Mg–Zn–Al спільна присутність I-фази і фази Mg<sub>2</sub>Sn призводить до покращення механічних властивостей. Динамічна і статична рекристалізація значно прискорюється додаванням Са в сплав Mg-Zn-Y, в результаті чого маємо значно менший розмір зерен і більш випадкову текстуру. Висока міцність сплавів Mg-Zn-Al-Sn пояснюється наявністю тонко розподілених частинок Mg<sub>2</sub>Sn та І-фази, вбудованих в матрицю α-Мg.

## Висновки до розділу 1

Проведений огляд літератури показує велику кількість фізичних ефектів, які мають місце при русі дислокації в квазікристалі і при опроміненні квазікристала. Дослідженню цих явищ присвячено велику кількість теоретичних та експериментальних робіт. Прогрес у дослідженні квазікристалів дозволив вирішити багато задач, таких як

- опис фазонів як додаткових гідродинамічних мод;
- побудова дислокації в квазікристалі за допомогою процесу Вольтерра;
- знаходження рухливості дислокації в квазікристалі в гідродинамічному наближенні;
- дослідження руху дислокації, який пов'язаний з появою фазонних дефектів в квазікристалі;
- використання нанорозмірних квазікристалічних включень для зміцнення сплавів;
- вивчення фазових переходів в квазікристалах під впливом опромінення.

Проте залишається багато актуальних задач, які потребують детального вивчення. Серед них зазначимо наступні:

- знаходження рухливості дислокації в квазікристалі з урахуванням дифузії вакансій в загальноприйнятому виді;
- вивчення структури фазонних дефектів;
- знаходження системи кінетичних рівнянь для опису кінетики дефектів в квазікристалі;
- дослідження впливу фазонних дефектів на кінетику накопичення радіаційних пошкоджень;
- дослідження характеру утворення радіаційних пошкоджень в квазікристалах;

- знаходження ефективності поглинання вакансій і МА дислокаційною петлею;
- дослідження радіаційного вакансійного розпухання квазікристалів.

Перелічені задачі складають основу дисертації і викладені в роботах [1-11].
#### РОЗДІЛ 2

## ДИНАМІКА ДИСЛОКАЦІЙ В КВАЗАКРИСТАЛІ

Квазікристали \_ клас твердих тіл. характеризуються це ЩО трансляційною квазіпериодичністю і дальнім орієнтаційним порядком [12]. Як наслідок, їхні фізичні й механічні властивості відрізняються від відповідних властивостей звичайних кристалів [14-16]. Це стосується й структурних дефектів. Окрім звичайних дефектів кристалів, таких як вакансії, міжвузлові атоми, дислокації, тощо, у квазікристалах також присутні так звані фазонні дефекти - локальні порушення квазіперіодичного трансляційного порядку квазікристала. Структура цих дефектів дотепер не цілком зрозуміла.

Фазонні дефекти проявляються в так званих фазонних фліпах, які відповідають стрибкам одного атома або локалізованої групи атомів між розділеними позиціями [20]. З іншого боку, фазонні порушення є скорельованими на великих відстанях фазонними фліпами, які разом становлять макроскопічне зрушення. Кінетика довгохвильових фазонних порушень описується в гідродинамічному наближенні, відповідно до якого просторові Фур'є-компоненти фазонної флуктуації із хвильовим вектором q релаксують з часовою сталою, що є пропорційною  $q^{-2}$ . Таким чином, короткохвильова компонента (великі q) релаксує швидко, у той час як довгохвильова має великий час релаксації. Така незрелаксована флуктуація є деяким типом безладу і призводить до дифузійного розсіювання навколо бреггівських піків [21,22].

Механічні властивості квазікристалів, як і звичайних матеріалів, сильно залежать від поведінки дефектів [17,56,57]. Для розуміння механізмів пластичного плину квазікристалу потрібна теорія руху дислокацій. Експериментальне спостереження руху дислокацій у квазікристалі Al-Pd-Mn показало [24], що дислокації переміщуються шляхом переповзання. Рух дислокацій починається за досить високих температур (вище  $700^{9}$ C) під дією термічних і зовнішніх напружень. Однак, через відсутність трансляційної симетрії квазікристалів, рухлива дислокація обов'язково залишає за собою плаский дефект, що складається із шару фазонних дефектів [28]. Вважається, що при відпалі ця так звана «фазонна стінка» розчиняється, даний процес називають «фазонною дисперсією». Додатково, як і в кристалах, взаємні закріплення породжують піннінгування дислокацій. Очевидно, ці два механізми є істотними в процесі переповзання дислокацій, хоча й інші, такі як закріплення на виділеннях, домішках або гальмування хмарами вакансій, можуть впливати на рухливість дислокацій.

## 2.1. Швидкість руху дислокацій: гідродинамічне наближення

Цей підрозділ присвячено опису рухливості дислокацій у квазікристалах у гідродинамічному наближенні. Континуальні рівняння, що описують довгохвильові, низькочастотні збурення в квазікристалах були вперше одержані в роботі [58]. Далі в роботі [31] було розвинено загальний підхід і отримано вирази для рухливості в термінах констант вакансійної дифузії у квазікристалах, однак використовувані в ній гідродинамічні рівняння не враховують дифузію вакансій у загальноприйнятому виді [32]. Ми використовуємо рівняння динаміки взаємозалежних пружних і фазонних полів, що отримані в [32], і метод знаходження рухливості дислокації у квазікристалі, розроблений в [31]. Цей підхід дозволяє знайти залежність рухливості дислокації від концентрації вакансій у явному вигляді.

Виконаний нами в підрозділі 1.1 аналіз експериментальних даних стосовно руху дислокацій в ікосаедричному квазікристалі дозволяє з'ясувати природу високотемпературної дислокаційної повзучості цього матеріалу.

## 2.1.1. Загальне рівняння рухливості

Для обчислення рухливості дислокації треба знайти величину дисипації енергії при її русі. Почнемо з формулювання необхідних визначень. Розглянемо прямолінійну дислокацію з величиною вектора Бюргерса b, у кристалі або квазікристалі лінійного розміру L під дією напруження зсуву  $\sigma$ . Це напруження породжує силу, що діє на одиницю довжини дислокації  $F_{\rm D} = \sigma b$ . Швидкість руху дислокації в лінійному наближенні є пропорційною цій силі,

$$v_{\rm D} = MF_{\rm D}, \qquad (2.1)$$

де коефіцієнт М за визначенням є рухливість дислокації.

У звичайних кристалах сила Піча-Келера,  $\mathbf{F}_{\mathrm{D}}$ , на одиницю довжини прямолінійної дислокації є пропорційною до прикладеного тензора напруження  $\hat{\sigma}$  та величини вектора Бюргерса **b** [59]:

$$\mathbf{F}_{\mathrm{D}} = (\mathbf{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) \times \mathbf{I}, \qquad (2.2)$$

або, у компонентах,

$$F_{\mathrm{D}i} = e_{ijk} b_n \sigma_{nj} l_k, \qquad (2.3)$$

де  $e_{ijk}$  є антисиметричний за індексами одиничний тензор, 1 є одиничний вектор вздовж дислокаційної лінії.

Рівняння (2.3) можна конкретизувати у випадку ікосаедричних квазікристалів, що моделюються шляхом проектування шестивимірного (6D) кубічного кристала на тривимірний (3D) простір. Дійсне у шестивимірному

просторі рівняння (2.3) в результаті проектування набуває наступного вигляду [60]:

$$F_{\mathrm{D}i} = e_{ijk} b_n^{6\mathrm{D}} \sigma_{nj}^{6\mathrm{D}} l_k^{6\mathrm{D}} = e_{ijk} b_n^{||} \sigma_{nj} \left( \mathrm{P}\hat{\mathbf{r}}^{||} \mathbf{l} \right)_k + e_{ijk} b_n^{\perp} P_{nj} \left( \mathrm{P}\hat{\mathbf{r}}^{\perp} \mathbf{l} \right)_k, \qquad (2.4)$$

тут  $b_n^{||}$ ,  $b_n^{\perp}$  і  $(P\hat{\mathbf{r}}^{||}\mathbf{l})_k$ ,  $(P\hat{\mathbf{r}}^{\perp}\mathbf{l})_k$  є проекції шестивимірного вектора Бюргерса в та одиничного вектора **l** вздовж дислокаційної лінії на фізичний і фазонний простір відповідно.

Робота, що виконується силою **F**<sub>D</sub> дорівнює швидкості дисипації енергії рухливою дислокацією,

$$\mathbf{F}_{\mathrm{D}} \cdot \mathbf{v}_{\mathrm{D}} = -\frac{d}{dt} \int d^2 r E_{\mathrm{el}} \,, \qquad (2.5)$$

де  $E_{\rm el}$  є густина пружної енергії. Інтеграл береться по двовимірній площині, що ортогональна до лінії дислокації. Вектори  $\mathbf{F}_{\rm D}$  і  $\mathbf{v}_{\rm D}$  можна вважати паралельними, нехтуючи ефектами анізотропії [31]. Вибираючи координату х вздовж напрямку  $\mathbf{F}_{\rm D}$ , представимо зворотну рухливість  $M^{-1}$  в наступному вигляді:

$$M^{-1} = \left| \dot{E}_{\rm el} \right| \cdot \mathbf{v}_{\rm D}^{-2}, \qquad (2.6)$$

де  $\left| \dot{E}_{\mathrm{el}} \right| \epsilon$  величина швидкості дисипації пружної енергії.

Зазначимо, що в цьому підході до гальмування дислокації враховується тільки внесок полів на віддалені від ядра дислокації, де придатне гідродинамічне наближення.

## 2.1.2. Рівняння динаміки пружних і фазонних полів

Статично деформований квазікристал характеризується пружною енергією, густина якої  $E_{\rm el}(\mathbf{u}, \mathbf{w})$  у гармонічному наближенні має вигляд [32]:

$$E_{\rm el}(\mathbf{u}, \mathbf{w}) = \frac{1}{2} A_{ijkl} u_{ij} u_{kl} + \frac{1}{2} D_{ijkl} w_{ij} w_{kl} + C_{ijkl} w_{ij} u_{kl}, \qquad (2.7)$$

де  $A_{ijkl}$ ,  $D_{ijkl}$ ,  $C_{ijkl}$  є тензори пружних констант;  $u_{ij} = \frac{1}{2} \left( \nabla_i u_j + \nabla_j u_i \right)$ є тензор пружної деформації,  $w_{ij} = \nabla_i w_j$ є фазонна деформація;  $\nabla_i$  є частинна похідна по координаті  $x_i$ .

Тензор пружних напружень  $\sigma_{ij}$  у випадку квазікристалу запишемо в наступному вигляді

$$\sigma_{ij} = \frac{\partial E_{\rm el}}{\partial u_{ij}} = A_{ijkl} u_{kl} + C_{klij} w_{kl}.$$
(2.8)

Схожим чином можна ввести й тензор фазонних напружень  $P_{ij}$ :

$$P_{ij} = \frac{\partial E_{el}}{\partial w_{ij}} = D_{ijkl} w_{kl} + C_{ijkl} u_{kl}.$$
(2.9)

Запишемо рівняння динаміки пружних і фазонних полів у гідродинамічному наближенні. Рівняння безперервності або закон збереження речовини:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{v}) = 0, \qquad (2.10)$$

де *ρ* є густина кристалу (кількість речовини в одиниці об'єму), **v** є макроскопічна швидкість руху малого об'єму у фізичному просторі, доповнимо рівнянням збереження імпульсу:

$$\rho \left[ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right] = \mathbf{f} + \mathbf{f}', \qquad (2.11)$$

де

$$f_i = \nabla_j \sigma_{ji} \tag{2.12}$$

і **f'** є в'язка сила, що визначається через тензор в'язких напружень  $\sigma'_{ij}$ :

$$f_j' = \nabla_i \sigma'_{ij}, \qquad (2.13)$$

а  $\sigma'_{ij}$  пов'язаний з тензором швидкостей деформації  $v_{ij} = \frac{1}{2} \left( \nabla_i v_j + \nabla_j v_i \right)$ співвідношенням

$$\sigma'_{ik} = \eta_{iklm} v_{lm}, \qquad (2.14)$$

де  $\eta_{iklm}$  є тензор в'язкості.

На відміну від пружних зсувів **u**, фазонні зсуви **w** не можуть відбуватися консервативно, а пов'язані з термоактивованим процесом атомних перебудов. Тому сила

$$\tilde{f}_i = \nabla_j P_{ji}, \qquad (2.15)$$

що діє у фазонному просторі, викликає лише дифузійний дрейф, швидкість якого  $\partial \mathbf{w} / \partial t$  пропорційна  $\tilde{\mathbf{f}}$ , тобто

$$\left[\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{w}\right] = \Gamma_w \tilde{\mathbf{f}} , \qquad (2.16)$$

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

Тепер врахуємо внесок вакансій у рухливість дислокацій. Пружні деформації породжують збурювання концентрації вакансій. У свою чергу вакансії визначають дифузійну рухливість атомів. Оскільки розвиток фазонних деформацій пов'язаний з термоактивованими перебудовами атомної структури квазікристалу, то послідовний розгляд динаміки вимагає включення також процесу дифузії вакансій. Позначимо через *С* додаткову концентрацію вакансій, викликану деформаціями. Якщо вакансії є топологічно стійкими дефектами як і у звичайних кристалах, то для них виконується рівняння балансу:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla C = -\text{div}\mathbf{j}, \qquad (2.17)$$

де **j** є густина потоку вакансій. Тут потік **j** враховує тільки переміщення вакансій. Будемо вважати, що об'ємні джерела й стоки вакансій відсутні. Додаткова концентрація вакансій C у розглянутій моделі змінюється не за рахунок генерації нових або поглинання існуючих, а за рахунок дифузійного (дрейфового) перерозподілу наявних вакансій під дією неоднорідного поля. Співвідношення для потоку **j** при врахуванні градієнтів концентрації й тиску має вигляд:

$$\mathbf{j} = -D\left(\nabla C + \frac{k_p}{p}\nabla p\right),\tag{2.18}$$

де *D* є коефіцієнт дифузії,  $k_p D$  є коефіцієнт бародифузії;  $k_p$  є бародифузійне відношення:

$$k_p = p \left(\frac{\partial V}{\partial C}\right)_{p,T} / \left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)_{p,T}.$$
(2.19)

тут V є об'єм, p є тиск, T є температура,  $\mu$  є хімічний потенціал. Співвідношення (2.18) припускає, що вакансія є центром дилатації під дією тиску, при цьому

$$p = -\frac{1}{3} \left( \sigma_{ii} \right). \tag{2.20}$$

При наявності вакансій варто враховувати й породжувані ними зсуви. Співвідношення, що пов'язує повну дисторсію  $\nabla_i U_j$  із пружною дисторсією  $\beta_{ij}$  має вигляд:

$$\nabla_i U_j = \beta_{ij} + \frac{1}{3} \Omega C \delta_{ij}, \qquad (2.21)$$

де 
$$\Omega = \frac{1}{V_{\text{at}}} \left( \frac{\partial V}{\partial C} \right)_{p,T}, V_{\text{at}} \sim a^3 \sim b^3,$$
 а величина  $\frac{1}{3} \Omega C \delta_{ij}$  є дисторсією, що

викликана вакансіями. Ця дисторсія визначає дилатацію фізично малого, але великого у порівнянні з атомним об'ємом квазікристалу при відсутності прикладених напружень, тобто є власною або «пластичною» дисторсією. Оскільки концентрація вакансій у загальному випадку неоднорідна,  $C = C(\mathbf{r})$ , то така дисторсія є безпосереднім джерелом несумісності частин квазікристалічної решітки.

Вплив вакансій на динаміку пружних і фазонних полів описується співвідношенням (2.21). У виразах (2.8), (2.9) замість  $u_{kl}$  варто підставити величину повної деформації  $e_{kl}$ , що визначається з (2.21):

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left( \nabla_i U_j + \nabla_j U_i \right) - \frac{1}{3} \Omega C \delta_{ij}$$
(2.22)

Вектор макроскопічної швидкості v дорівнює похідній за часом від U:

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}.$$
 (2.23)

Швидкість переповзання дислокації v є завжди малою у порівнянні зі швидкістю звуку. З урахуванням цієї обставини представимо лінеаризовані гідродинамічні рівняння в наступному вигляді:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \text{div} \mathbf{v}_{\text{D}} = 0 \tag{2.24}$$

$$0 = \nabla \cdot \hat{\sigma} + \nabla \cdot \hat{\sigma}' \tag{2.25}$$

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \Gamma_w \Big( \nabla \cdot \hat{P} \Big) \tag{2.26}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\Delta C - \frac{1}{3} D\gamma \Delta \sigma_{ii}, \qquad (2.27)$$

де

$$\gamma = \frac{k_p}{p} = \left(\frac{\partial V}{\partial C}\right)_{p,T} / \left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)_{p,T}.$$
(2.28)

# 2.1.3. Рухливість дислокації

Розглянемо самоподібний розв'язок для швидкості руху дислокації, що описується однією змінною, **r** – **v**<sub>D</sub>t [31], а саме:

$$\begin{cases} \mathbf{U}(\mathbf{r},t) = \mathbf{U}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{\mathrm{D}}t) \\ \mathbf{w}(\mathbf{r},t) = \mathbf{w}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{\mathrm{D}}t) \end{cases}$$
(2.29)

Після цього представимо рівняння (2.26) у вигляді:

$$\Gamma_{w}\nabla\cdot\hat{P} = \partial_{t}\mathbf{w} = -(\mathbf{v}_{\mathrm{D}}\cdot\nabla)\mathbf{w}$$
(2.30)

і перейдемо до матричної форми:

$$P_{ij} = -\frac{1}{\Gamma_w \nabla_i} (\mathbf{v}_{\mathrm{D}} \cdot \nabla) w_j.$$
(2.31)

Похідна за часом від тензора пружної деформації,

$$\partial_t e_{ij} = \frac{1}{2} \Big( \nabla_i \partial_t U_j + \nabla_j \partial_t U_i \Big) - \frac{1}{3} \Omega \partial_t C \delta_{ij} = v_{ij} - \frac{1}{3} \Omega \partial_t C \delta_{ij}, \qquad (2.32)$$

після підстановки  $v_{ij}$  і  $\partial_t$  з виразів (2.14) і (2.27) отримує наступний вигляд:

$$\partial_{t}e_{ij} = -\frac{1}{\eta_{kmij}\nabla_{k}}\nabla_{l}\sigma_{lm} - \frac{1}{3}\Omega\left(D\Delta C - \frac{1}{3}D\gamma\Delta\sigma_{ll}\right)\delta_{ij} =$$

$$= \left(-\frac{1}{\eta_{kmij}\nabla_{k}}\nabla_{l} + \frac{1}{9}\Omega D\gamma\delta_{ml}\delta_{ij}\Delta\right)\sigma_{lm} - \frac{1}{3}\Omega D\delta_{ij}\Delta C$$

$$(2.33)$$

Звідси випливає,

$$\sigma_{lm} = \frac{\partial_t e_{ij} + \frac{1}{3}\Omega D\delta_{ij}\Delta C}{-\frac{1}{\eta_{kmij}\nabla_k}\nabla_l + \frac{1}{9}\Omega D\gamma \delta_{ml}\delta_{ij}\Delta} =$$

$$= \frac{\left(\partial_t e_{ij} + \frac{1}{3}\Omega D\delta_{ij}\Delta C\right)\eta_{kmij}}{-\frac{1}{\nabla_k}\nabla_l + \frac{1}{9}\Omega D\gamma \eta_{klii}\Delta}$$

$$(2.34)$$

Перетворюючи підінтегральні вирази в рівнянні (2.5) з урахуванням (2.8), (2.9) і (2.22), отримуємо

$$\frac{dE_{el}}{dt} = \frac{\delta E_{el}}{\delta w_{ij}} \cdot \partial_t w_{ij} + \frac{\delta E_{el}}{\delta e_{ij}} \cdot \partial_t e_{ij} = P_{ij} \cdot \partial_t w_{ij} + \sigma_{ij} \cdot \partial_t e_{ij} =$$

$$= P_{ij} \cdot \partial_t w_{ij} + \frac{\left(\partial_t e_{lm} + \frac{1}{3}\Omega D \delta_{lm} \Delta C\right) \eta_{kjlm} \partial_t e_{ij}}{\left(-\frac{1}{\nabla_k} \nabla_i + \frac{1}{9}\Omega D \gamma \eta_{kill} \Delta\right)}.$$
(2.35)

Виберемо систему координат таку, що вісь z направлено вздовж лінії дислокації. Використовуючи (2.29), (2.31), (2.32) представимо дисипацію енергії через змінні U, w, C за допомогою двовимірного перетворення Фур'є в площині (х,у). У результаті отримуємо наступні вирази:

$$\begin{split} \mathbf{F}_{\mathrm{D}} \cdot \mathbf{v}_{\mathrm{D}} &= \frac{1}{\Gamma_{w}} \int d^{2}q |w(\mathbf{q})|^{2} \left( \mathbf{v}_{\mathrm{D}} \cdot \mathbf{q} \right)^{2} + \eta_{kjlm} \int \frac{d^{2}q \left( \mathbf{v}_{\mathrm{D}} \mathbf{q} \right)^{2}}{\left( \frac{q_{i}}{q_{k}} + \frac{1}{9} \Omega D \gamma \eta_{kill} q^{2} \right)} \times \\ &\times \left[ \frac{1}{4} \left( q_{l} U_{m}(q) + q_{m} U_{l}(q) \right) (q_{i} U_{j}(-q) + q_{j} U_{i}(-q)) + \right. \\ &+ \left( \frac{\Omega D \gamma}{18} \right)^{2} \delta_{ij} \delta_{lm} \eta_{sgbc} \eta_{prdf} q^{4} \frac{q_{s}}{q_{g}} \left( q_{b} U_{c}(q) + q_{c} U_{b}(q) \right) \times \\ &\times \frac{q_{p}}{q_{r}} \left( q_{d} U_{f}(-q) + q_{f} U_{d}(-q) \right) + \\ &+ \frac{\Omega^{2} D^{2} \gamma}{54 \left( \mathbf{v}_{\mathrm{D}} \mathbf{q} \right)} \delta_{ij} \delta_{lm} \eta_{sgbc} q^{4} \frac{q_{s}}{q_{g}} \left( q_{b} U_{c}(q) + q_{c} U_{b}(q) \right) C(-q) + \\ &+ \frac{\Omega D}{6 \left( \mathbf{v}_{\mathrm{D}} \mathbf{q} \right)} \delta_{ij} q^{2} \left( q_{l} U_{m}(q) + q_{m} U_{l}(q) \right) C(-q) + \\ &+ \frac{\Omega D \gamma}{36} \eta_{sgbc} \left( \left( q_{i} U_{j}(q) + q_{j} U_{i}(q) \right) \delta_{lm} + \left( q_{l} U_{m}(q) + q_{m} U_{l}(q) \right) \delta_{ij} \right) \times \\ &\times q^{2} \frac{q_{s}}{q_{g}} \left( q_{b} U_{c}(-q) + q_{c} U_{b}(-q) \right) \right] \end{split}$$

Тут символами виду  $y(\mathbf{q})$  позначені Фур'є-образи полів  $y(\mathbf{x})$ . Нехтуючи ефектами анізотропії, можна вважати вектори  $\mathbf{F}_{\mathrm{D}}$  і **v** паралельними [31]. Вибравши координату x вздовж напрямку  $\mathbf{F}_{\mathrm{D}}$  з урахуванням (2.23) представимо вираз для рухливості дислокації в наступному вигляді:

$$M^{-1} = M_w^{-1} + M_{U1}^{-1} + M_{U2}^{-1} + M_{UC}^{-1}, (2.37)$$

$$\begin{split} M_{w}^{-1} &= \frac{1}{\Gamma_{w}} \int d^{2}q |w(\mathbf{q})|^{2} q_{x}^{2}; \\ M_{U1}^{-1} &= \eta_{kjkm} \int \frac{d^{2}qq_{x}^{2}}{\left(\frac{q_{x}}{q_{k}} + \frac{1}{9} \Omega D \gamma \eta_{kill} q^{2}\right)^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{q} \left(q_{l}U_{m}(q) + q_{m}U_{l}(q)\right) \left(q_{l}U_{j}(-q) + q_{j}U_{i}(-q)\right) \\ M_{U2}^{-1} &= \eta_{kjkm} \int \frac{d^{2}qq_{x}^{2}}{q_{k}} + \frac{1}{9} \Omega D \gamma \eta_{kill} q^{2} \left[ \left(\frac{\Omega D \gamma}{18}\right)^{2} \delta_{ij} \delta_{im} \eta_{sgbc} \eta_{prdj} q^{4} \times \right. \\ &\times \frac{q_{s}}{q_{g}} \left(q_{b}U_{c}(q) + q_{c}U_{b}(q)\right) \frac{q_{p}}{q_{r}} \left(q_{d}U_{f}(-q) + q_{f}U_{d}(-q)\right) + \\ &+ \frac{\Omega D \gamma}{36} \eta_{sgbc} \left( \left(q_{i}U_{j}(q) + q_{j}U_{i}(q)\right) \delta_{bn} + \left(q_{l}U_{m}(q) + q_{m}U_{l}(q)\right) \delta_{ij} \right) \times \\ &\times q^{2} \frac{q_{s}}{q_{g}} \left(q_{b}U_{c}(-q) + q_{c}U_{b}(-q)\right) \right] \\ M_{UC}^{-1} &= \eta_{kjkm} \int \frac{d^{2}qq_{x}^{2}}{q_{k}^{2}} \left[ \frac{\Omega^{2}D^{2}\gamma}{54(\mathbf{v}_{D}\mathbf{q})} \delta_{ij} \delta_{in} \eta_{kdpj} q^{4} \times \\ &\times \frac{q_{s}}{q_{g}} \left(q_{b}U_{c}(q) + q_{c}U_{b}(-q)\right) \right] \\ M_{UC}^{-1} &= \eta_{kjkm} \int \frac{d^{2}qq_{x}^{2}}{q_{k}^{2}} \left[ \frac{\Omega^{2}D^{2}\gamma}{54(\mathbf{v}_{D}\mathbf{q})} \delta_{ij} \delta_{in} \eta_{kdpj} q^{4} \times \\ &\times \frac{q_{s}}{q_{g}} \left(q_{b}U_{c}(q) + q_{c}U_{b}(-q)\right) \right] \end{split}$$

49

де

Переходячи від тензорного зображення до скалярного, одержуємо вирази для рухливості в наступному вигляді:

$$\begin{split} M_{w}^{-1} &\approx \frac{1}{\Gamma_{w}} \int |w(\mathbf{q})|^{2} d^{2}q; \\ M_{U1}^{-1} &\approx \eta \int \frac{d^{2}q \cdot q^{2}q_{x}^{2}}{1 + \frac{1}{9}\Omega D\gamma \eta q^{2}} |U(\mathbf{q})|^{2}; \\ M_{U2}^{-1} &\approx \eta \int \frac{d^{2}q \cdot q^{2}q_{x}^{2}}{1 + \frac{1}{9}\Omega D\gamma \eta q^{2}} \left[ \left( \frac{\Omega D\gamma \eta}{18} \right)^{2} q^{4} |U(\mathbf{q})|^{2} + \frac{\Omega D\gamma \eta}{36} q^{2} |U(\mathbf{q})|^{2} \right]; \end{split}$$
(2.39)  
$$\begin{split} M_{UC}^{-1} &\approx \eta \int \frac{d^{2}q \cdot q^{2}q_{x}^{2}}{1 + \frac{1}{9}\Omega D\gamma \eta q^{2}} \left[ \left( \frac{\Omega^{2} D^{2} \gamma \eta}{18} q^{3} U(\mathbf{q}) C(-\mathbf{q}) + \frac{\Omega D}{6 v_{D} q_{x}} q U(\mathbf{q}) C(-\mathbf{q}) \right], \end{split}$$

що остаточно дає такий результат

$$M_{w}^{-1} = \frac{1}{\Gamma_{w}} \int |w(\mathbf{q})|^{2} q_{x}^{2} d^{2} q;$$
  

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

$$M_{U2}^{-1} = \frac{\Omega D \gamma \eta^{2}}{36} \int d^{2} q \cdot q^{4} q_{x}^{2} |U(\mathbf{q})|^{2};$$
  
(2.40)

$$M_{UC}^{-1} = \frac{\Omega D\eta}{6\mathbf{v}_{\mathrm{D}}} \int d^2 q \ q^3 q_x U(\mathbf{q}) C(-\mathbf{q}).$$

Вирази (2.40) для рухливості містить два доданки, що аналогічні виразам, отриманим в роботі [31]. 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. Крім того, у зв'язку з урахуванням впливу вакансій з'являються ще два доданки. Доданок  $M_{U2}^{-1}$ враховує більш високий порядок впливу пружних деформацій і, як буде показано далі, він виявляється нехтовно малим. Нарешті, останній доданок виразу (2.40) відповідає за взаємодію пружних полів з дилатаціями, викликаними вакансіями.

## 2.1.4. Чисельні оцінки величини рухливості

Щоб одержати оцінку величини рухливості М, необхідно оцінити коефіцієнти й доданки, що входять до (2.40). Відзначимо, що незважаючи на те, що пружна енергія квазікристалу в загальному випадку анізотропна, але градієнти, через які вона вираховується, в усіх напрямках приблизно однакові [31]. Отже, з точністю до множників порядку одиниці, величини  $\nabla \mathbf{u}$  та  $\nabla \mathbf{w}$  є приблизно сталими на колі, центр якого лежить на лінії дислокації. Вибираючи коло радіуса г як шлях обходу, одержуємо:

$$(\nabla u)r \approx b \approx (\nabla w)r$$
,
$$(2.41)$$

$$(\nabla u) \approx (\nabla w) \approx \frac{b}{r}$$

де ми врахували, що проекції шестивимірного радіус-вектора на підпростори **u** і **w** є порівнянними за величиною, що виконується принаймні для дислокацій, що мають найменшу енергію (мала величина вектора Бюргерса) і є найбільш рухливими. Виконуючи перетворення Фур'є, знаходимо:

$$u_D(\mathbf{q}) \approx w_D(\mathbf{q}) \approx \frac{b}{q^2}.$$
 (2.42)

Зі співвідношень (2.21) і (2.41) одержуємо:

$$\nabla U(r) = \frac{b}{r} + \Omega C(r), \qquad (2.43)$$

або:

$$U(r) \approx b \ln \frac{r}{b} + \Omega \int_{b}^{r} C(r) dr. \qquad (2.44)$$

Для чисельних оцінок спочатку використовуємо експериментальні дані з роботи [24]. Дислокації у квазікристалах стають рухливими при температурі, що дорівнює приблизно 80% від температури плавлення [24]. У розглянутому квазікристалі Al-Pd-Mn ця температура становить T = 993K і при цьому швидкість дислокації складає приблизно  $v \approx 2 \cdot 10^{-6}$  м/с [24].

Коефіцієнт дифузії вакансій записуємо у формі Ареніуса [61]:

$$D_{\nu} = D_{\nu 0} \exp\left(-\frac{E_{\nu}^{m}}{k_{\rm B}}T\right), \qquad (2.45)$$

де  $E_{\nu}^{m}$  є енергія міграції вакансій,  $D_{\nu 0}$  є передекспоненційний множник. За експериментально знайдених для квазікристалів значеннях  $E_{\nu}^{m} = 1.5$  eB і  $D_{\nu 0} = 10^{-4} \text{ m}^{2}/\text{c}$  [61] і температурі T = 993К одержуємо  $D = 2.7 \ 10^{-12} \ \text{m}^{2}/\text{c}$ .

У зв'язку з малою швидкістю дислокацій у квазікристалі можна вважати, що концентрація вакансій навколо дислокації, що рухається, приблизно дорівнює концентрації вакансій навколо нерухливої дислокації. Вирази для концентрації вакансій навколо дислокації в циліндричних координатах можна одержати зі стаціонарного рівняння дифузії

$$\Delta C = 0. \tag{2.46}$$

з граничними умовами: поблизу ядра дислокації  $C(r_d) = C_d$ , де  $r_d \approx b \in$ радіус ядра дислокації, і віддалік від дислокації  $C(R) = C_1$ . Розв'язок цього рівняння має вигляд:

$$C(r) = C_d + C_2 \ln \frac{r}{r_d},$$
 (2.47)

де ми ввели позначення  $C_2 = (C_1 - C_d) / \ln(R \, / \, r_d).$ 

У якості *R* виберемо середню відстань між дислокаціями. Його можна оцінити в такий спосіб:  $R = 1/\sqrt{\rho}$ , де  $\rho$  – густина дислокацій. При  $\rho = 10^{14} \text{ м}^{-2}$  [62] одержуємо  $R = 10^{-7} \text{ м}$ .

Формулою для концентрації вакансій у такому виді можна користуватися за умови, що дифузійний час  $\tau_{\text{diff}}$  багато менший часу проходження  $t_1$  дислокацією відстані R:  $\tau_{\text{diff}} \ll t_1$ . Тут  $\tau_{\text{diff}} = R^2 / D$  і  $t_1 = R / v$ . Підставивши значення параметрів, одержуємо  $\tau_{\text{diff}} \approx 10^{-2}$  с, а величина  $t_1$  виявляється на порядок більшою, так що вираз (2.47) є прийнятним.

Величина вектора Бюргерса складає  $b \approx 0.5$  нм =  $0.5 \cdot 10^{-9}$  м [24].

Оцінимо величину  $C_2$ . Для цього розглянемо потік вакансій через циліндр радіусом r, що оточує дислокацію. Густина потоку вакансій:

$$j_v = -D\nabla C , \qquad (2.48)$$

потік вакансій на одиницю довжини дислокації:

$$J = j_v \cdot 2\pi r = \text{const.}$$
(2.49)

3 (2.47) знаходимо градієнт концентрації вакансій і підставляємо його в (2.49):

$$\nabla C = C_2 \cdot \frac{1}{r},\tag{2.50}$$

$$J = -2\pi D \frac{C_2}{V_{at}} L.$$
 (2.51)

3 іншого боку, при проходженні дислокацією довжини L відстані  $x = v_{\rm D} t$  потік вакансій становить:

$$J = \frac{\partial}{\partial t} \alpha \frac{L}{b} \frac{x}{b} = \frac{\partial}{\partial t} \alpha \frac{L}{b} \frac{v_D t}{b} = \alpha \frac{L v_D}{b^2}, \qquad (2.52)$$

тут  $\alpha L/b$  є число вакансій, що випускаються дислокацією при переміщенні на одну міжатомну відстань,  $\alpha = 1$  для крайової дислокації й  $\alpha = 0$  для гвинтової. Розглядаючи змішану дислокацію, покладемо  $\alpha = 0.1$ . Величина x/b є число вузлів, які проходить дислокація при переміщенні на відстань x. Тобто  $\alpha (L/b)(x/b)$  це є число вакансій, що народжує дислокація при переміщенні на відстань x. Потік вакансій визначається зміною цього числа вакансій в одиницю часу. У такий спосіб одержуємо співвідношення (2.52).

Прирівнюючи вирази для потоку (2.51) і (2.52):

$$-2\pi D \frac{C_2}{V_{at}} L = \alpha \frac{L v_D}{b^2}, \qquad (2.53)$$

знаходимо шукану константу:

$$C_2 \approx -\frac{\alpha v_D V_{at}}{2\pi b^2 D_v}.$$
(2.54)

Тепер ми можемо оцінити цю величину:

$$V_{\rm at} \approx b^3, \ C_2 \approx -\frac{\alpha v_D b^3}{2\pi b^2 D_v} = -\frac{\alpha v_D b}{2\pi D_v} \approx -4.7 \cdot 10^{-6}.$$
 (2.55)

Припустимо, що концентрація вакансій на відстані R від дислокації дорівнює рівноважній. Для прикладу розглянемо добре вивчені ікосаедричні квазікристали Al-Pd-Mn. За температури плавлення рівноважна концентрація вакансій  $C_v^{\text{melt}}$  складає приблизно 10<sup>-4</sup>. Температура плавлення Al<sub>72</sub>Pd<sub>80</sub>Mn<sub>8</sub> є  $T_{\text{m}} = 1140$  K [63]. Рівноважна концентрація вакансій описується формулою:

$$C_v^{eq} = \exp(-E_v/k_{\rm B}T),$$
 (2.56)

де  $k_{\rm B}$  є стала Больцмана,  $E_v$  є енергія утворення вакансії, яка для цього матеріалу становить величину близько 0.9 еВ.

Підставляємо значення  $E_v$  в (2.56) і за температури 1000 К (80% від температури плавлення) одержуємо:

$$C_1 = 3 \cdot 10^{-5}. \tag{2.57}$$

Тепер знаходимо концентрацію вакансій поблизу дислокації:

$$C_d = C_1 - C_2 \ln\left(\frac{R}{b}\right), \ C_d = 5.5 \ 10^{-5}.$$

Величина  $\Omega$  визначає дилатацію квазікристала при внесенні однієї вакансії, віднесену до атомного об'єму. Її можна оцінити, як  $\Omega = 0.1$ .

Далі, підставляємо (2.47) в (2.44), інтегруємо й одержуємо:

$$U(r) = b \ln \frac{r}{r_d} + \Omega C_d \left(r - r_d\right) + \Omega C_2 r \left(\ln \frac{r}{r_d} - 1\right).$$
(2.58)

Щоб оцінити рухливість дислокації по формулі (2.40) необхідно знайти Фур'є-образ зсуву  $U(\mathbf{q})$  (**q**) і концентрації  $C(\mathbf{q})$  у циліндричних координатах.

Таким чином, одержуємо вирази для  $U(\mathbf{q})$  і  $C(\mathbf{q})$ :

$$U(q) \approx \frac{b}{q^2} + \frac{\Omega}{q^3} \left( C_d + C_2 \right) - 2\pi \Omega C_d r_d \delta(q_x) \delta(q_y), \qquad (2.59)$$

$$C(q) \approx \left(C_d - C_2 \ln r_d\right) 2\pi \delta(q_x) \delta(q_y) + \frac{C_2}{q^2} .$$
(2.60)

Наведемо значення ще декількох параметрів. Коефіцієнт в'язкості  $\eta = 10^{-1}$  Па·с [31]. Параметр  $\gamma$  залежить від дилатації  $\Omega$  і хімічного потенціалу  $\mu = \mu_{\rm vac} - \mu_{\rm at}$ :

$$\gamma = \left(\frac{\partial V}{\partial C}\right)_{p,T} / \left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)_{p,T} = \Omega V_{at} / \left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)_{p,T}, \qquad (2.61)$$

тут  $\mu_{\rm vac}$ ,  $\mu_{\rm at}$  є хімічні потенціали вакансії та атома. Зі співвідношень  $C_{\rm vac} + C_{\rm at} = 1$  і  $\mu = \mu_0 + k_{\rm B} T \ln(C/C_0)$  одержуємо:

$$\left(\frac{\partial\mu}{\partial C}\right)_{p,T} = \frac{k_B T}{C_{\text{vac}}(1 - C_{\text{vac}})}.$$
(2.62)

При  $C_{\text{vac}} = C_d$ , величина  $\gamma$  дорівнює:  $\gamma = -5 \cdot 10^{-14} \,\text{м}^3 / \text{Дж.}$ 

Перейдемо тепер до оцінювання складових зворотної рухливості виразу (2.40). Перший доданок, що містить *w*, має такий вигляд:

$$M_w^{-1} = \frac{1}{\Gamma_w} \int |w(\mathbf{q})|^2 q_x^2 d^2 q \,. \tag{2.63}$$

3 урахуванням (2.42) проведемо інтегрування в межах від  $q_{\min} = 1/R \approx 10^7 \text{ м}^{-1}$  до  $q_{\max} = 1/b = 2 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}$  і одержимо:

$$M_w^{-1} \approx \frac{b^2}{\Gamma_w} \ln\left(\frac{R}{b}\right).$$
 (2.64)

Фазонний кінетичний коефіцієнт  $\Gamma_w$  було оціненено в [31] як  $\Gamma_w \sim D_v / K$ , де K є модуль зсуву,  $D_v$  є коефіцієнт дифузії вакансій. Підставляючи у вирази для  $\Gamma_w$  отриманий вище коефіцієнт дифузії й значення для модулю зсуву K = 70 ГПа [64], одержуємо коефіцієнт  $\Gamma_w \approx 3.8 \cdot 10^{-23}$  м<sup>3</sup>с/кг, отже фазонний внесок є

$$M_w^{-1} \approx 3.4 \cdot 10^4 \text{ kg} \cdot \text{m/c.}$$
 (2.65)

Оцінимо також внески інших складових виразу (2.40), що входять до рухливості дислокації:

$$M_{U1}^{-1} = \eta \int \frac{d^2 q \cdot q^2 q_x^2}{\left(1 + \frac{1}{9} \Omega D \gamma \eta q^2\right)} |U(\mathbf{q})|^2 \approx 5 \cdot 10^{-2} \text{ kr} \cdot \text{m/c}$$
(2.66)

$$M_{UC}^{-1} = \frac{1}{6} \frac{\Omega D \eta}{v_{Dx}} \int U(\mathbf{q}) C(-\mathbf{q}) q^5 dq \approx 1.3 \cdot 10^{-5} \text{ kr} \cdot \text{m/c}$$
(2.67)

$$M_{U2}^{-1} = \frac{1}{36} \Omega D \gamma \eta^2 \int |U(\mathbf{q})|^2 q^7 dq \approx 3.7 \cdot 10^{-12} \text{ kr} \cdot \text{m/c.}$$
(2.68)

Таким чином,

$$M^{-1} = M_w^{-1} + M_{U1}^{-1} + M_{UC}^{-1} + M_{U2}^{-1} \approx 0.05 (6.8 \cdot 10^5 + 1 + 2.6 \cdot 10^{-4} + 7.4 \cdot 10^{-11}) \text{ Kr} \cdot \text{m/c.}$$
(2.69)

При обраних значеннях параметрів, що входять у вирази для рухливості дислокацій у квазікристалах, виявляється, що фазонний доданок вносить основний внесок до рухливості. За цих умов вакансії мало впливають на рухливість. Однак важливо з'ясувати, у яких випадках внесок вакансій у рухливість буде істотним. Для цього розглянемо залежність рухливості дислокацій (2.40) від температури:

$$M^{-1}(T) = M_w^{-1}(T) + M_{U1}^{-1}(T) + M_{U2}^{-1}(T) + M_{UC}^{-1}(T) =$$

$$= \frac{1}{\Gamma_w(T)} \int |w(\mathbf{q})|^2 d^2 q + \eta \int \frac{d^2 q \cdot q^2 q_x^2}{\left(1 + \frac{1}{9} \Omega D(T) \gamma(T) \eta q^2\right)} |U(\mathbf{q}, T)|^2 +$$

$$+ \frac{\Omega D(T) \gamma(T) \eta^2}{36} \int d^2 q \ q^4 q_x^2 |U(\mathbf{q}, T)|^2 +$$

$$+ \frac{\Omega D(T) \eta}{6 v_D(T)} \int d^2 q \ q^3 q_x U(\mathbf{q}, T) C(-\mathbf{q}, T)$$
(2.70)

Залежність коефіцієнта дифузії від температури описується співвідношенням (2.45). Відповідно фазонний кінетичний коефіцієнт буде мати такий вигляд:

$$\Gamma_w = \frac{D(T)}{K}.$$
(2.71)

Термічно активований рух дислокації описується співвідношенням Арреніуса [65]. Таким чином, швидкість дислокації можна записати як:

$$v = v_0 \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right),\tag{2.72}$$

де  $v_0$  є передекспоненційний множник,  $\Delta G = 3.4 \text{ eB} = 5.4 \cdot 10^{-19}$  Дж є вільна енергія активації Гіббса [66]. Концентрація вакансій залежить від температури як показано у виразах (2.56), (2.54) і (2.60), відповідно,

$$\begin{split} C_{1}(T) &= e^{-\frac{E_{v}}{kT}}, \\ C_{2}(T) &= -\frac{\alpha v_{D}(T)b}{2\pi D(T)}, \\ C_{d}(T) &= C_{1}(T) - C_{2}(T) \ln \frac{R}{b}, \\ C(q,T) &= \frac{C_{2}(T)}{q^{2}}. \end{split}$$
(2.73)

Зауважимо, що тут відсутній доданок до C(q,T) з  $\delta$ -функціями, який у результаті інтегрування дає нульовий внесок.

Залежність коефіцієнта  $\gamma$  від температури описується формулами (2.61), (2.62):

$$\gamma(\mathbf{T}) = \frac{\Omega V_{\mathrm{at}}}{k_{\mathrm{B}}T} C_d(\mathbf{T}) (1 - C_d(\mathbf{T}))$$
(2.74)

З виразу (2.59) одержуємо залежність повного зсуву від температури:

$$U(q,T) \approx \frac{b}{q^2} + \frac{\Omega}{q^3} (C_d(T) + C_2(T)),$$
 (2.75)

тут, як і в C(q,T) відсутні доданки з  $\delta$ -функціями.

Змінюючи значення різних параметрів у вираженні (2.70) можна одержати відмінні від отриманих раніше значення рухливості дислокацій (2.69). Зокрема, за малої швидкості дислокації та великої концентрації вакансій доданок  $M_{UC}^{-1}$  стає порівнянним до фазонного внеску  $M_w^{-1}$ . Дійсно, підставляючи  $v = 10^{-12}$  м/с і  $C(q,T) = -10^{-3}/q^2$ , одержуємо за температури T = 993 К величину  $M_{UC}^{-1} \approx 4.10^3$  кг·м/с.

Основною метою даного підрозділу було одержання залежності рухливості дислокацій від концентрації вакансій. У роботі [31] вплив вакансій на рухливість дислокацій (або дисипацію енергії) було описано за допомогою коефіцієнта  $\Gamma_{\mu}$  – дифузійної рухливості вакансій. Написавши в явному вигляді рівняння для концентрації вакансій, в даній роботі було знайдено залежність рухливості дислокацій від додаткової концентрації вакансій. Отриманий вираз (2.40) містить два доданки, аналогічні виразу, отриманому в роботі [31]. Це доданок (2.66), відповідальний за гальмування, пов'язане із пружними деформаціями, і доданок (2.65), що описує гальмування дислокації, викликане наявністю фазонних дефектів. Крім того, у зв'язку з урахуванням впливу вакансій з'являються ще два доданки. Вираз (2.67) описує внесок взаємодії пружних полів з дилатаціями, викликаними вакансіями. У виразі (2.68) ураховується більш високий порядок впливу пружних деформацій, але він виявляється нехтовно малим.

У роботі [31] величини, що входять у вирази для внеску фазонних деформацій у гальмування дислокації були оцінені з використанням

динамічних характеристик дислокацій у звичайних кристалах. Це призвело до оцінки  $M_w^{-1} \approx 10^5$  кг·м/с. У даному підрозділі при одержанні оцінки (2.65) було використано значення величин, експериментально отриманих для квазікристалу Al-Pd-Mn. У результаті значення величини  $M_w^{-1}$ , пов'язаної з фазонними деформаціями, виявилося на порядок менше, ніж в [31]. Звідси бачимо, що отримана в [31] оцінка рухливості незакріпленої дислокації у квазікристалі виявляється завищеною.

#### 2.1.5. Вплив взаємних закріплень дислокацій

Становить інтерес порівняти отримані в цьому підрозділі оцінки величини рухливості дислокацій для сплаву Al-Pd-Mn з виміряними експериментально в роботі [62] при різних температурах і густинах дислокацій. Будемо вважати, що пластична деформація квазікристалів Al-Pd-Mn, що спостерігалася, є чисто дислокаційною й описується рівнянням Орована:

$$\dot{\varepsilon}_{\text{plast}} = \rho b v_{\text{D}}, \qquad (2.76)$$

де  $\dot{\varepsilon}_{\text{plast}}$  є швидкість пластичної деформації,  $v_{\text{D}}$  є швидкість дислокації. Звідси випливає, що

$$v_{\rm D} = \dot{\varepsilon}_{\rm plast} / b\rho \,. \tag{2.77}$$

3 (2.1), (2.3) отримуємо, що  $F = b\sigma$  і рухливість дислокації складає

$$M = v/b\sigma. \tag{2.78}$$

Співвідношення (2.77),(2.78) дозволяють знайти оцінки величини рухливості, використовуючи експериментально виміряні в [62] значення величин  $\rho$ ,  $\sigma$ , v при різних температурах. Експериментальні дані й отримані з їхньою допомогою значення величини рухливості наведені в таблиці 2.1. Як видно, сила гальмування дислокацій у реальному квазікристалі при 730<sup>0</sup>С виявляється приблизно на 3 порядки більшою, ніж величина, обчислена для поодиноких дислокацій (2.65). Причина цієї розбіжності складається, насамперед, у наявності гальмування дислокацій внаслідок їхніх взаємних закріплень.

Якщо вважати, що густина центрів закріплення є порядку  $\rho$ , та відстань між двома точками закріплення на дислокації  $l \propto 1/\sqrt{\rho}$ , отже, сила, що діє на ділянку дислокації довжиною l дорівнює  $F_d = \sigma l \approx \sigma/\sqrt{\rho}$ . З таблиці 2.1 видно, що ця величина слабо залежить від температури й складає  $F_d \approx 46$  Н/м. Таким чином, саме взаємні закріплення дислокацій визначають величину сили гальмування в квазікристалі Al-Pd-Mn, за умов, що наведені в [62].

Таблиця 2.1. Рухливість дислокацій, розрахована на основі експериментальних даних з [62] при різних температурах.

<i>T</i> , <sup>0</sup> C	$\sigma$ , МПа	<i>ρ</i> , 10 <sup>9</sup> см <sup>-2</sup>	v, 10 <sup>-10</sup> м/с	<i>М</i> <sup>−1</sup> , 10 <sup>8</sup> кг·м/с	<i>F</i> <sub>d</sub> , Н/м
695	500	9	2.2	11	52.7
730	350	6	3.3	5.3	45.2
790	150	1	20	3.75	47.4
820	100	0.5	40	1.25	44.7

Це означає, що дислокації стають рухливими, коли сила натягу ділянки дислокації  $F_d$  дорівнює величині сили закріплення, яка слабко залежить від температури.

Як видно, густина дислокацій швидко зменшується з температурою (див. таблицю 2.1). Отже, очікується, що при високих температурах, близьких до температури плавлення, ефекти пінінгу дислокацій внаслідок взаємних закріплень малі і механізм гальмування, описаний у цьому підрозділі, буде переважним.

#### 2.2. Швидкість руху дислокацій: термодинамічний підхід

В роботі [7] були використані динамічні рівняння для взаємопов'язаних пружних і фазонних полів, отримані в [6], і опис рухливості дислокацій в квазікристалі, розроблений в [5]. Цей підхід дозволив нам знайти залежність рухливості дислокацій від дифузії вакансій в явному вигляді.

У цьому підрозділі ми знаходимо вираз для рухливості дислокацій з використанням альтернативного підходу, що базується на класичних рівняннях термодинаміки та гідродинаміки з урахуванням в'язкості. Основні рівняння для рухливості (2.1)-(2.6) зберігають силу. Так само, як і в попередньому підході знаходимо внески дифузії вакансій та фазонів у дислокаційний опір. Зроблено оцінки отриманих співвідношень для найбільш вивченого ікосаедричного квазікристалу Al-Pd-Mn.

#### 2.2.1. Внесок в'язкого потоку

У квазікристалі виникають напруження, що породжуються рухомою дислокацією. Ці напруження та відповідна механічна енергія релаксують. Ці процеси дисипації енергії можна назвати як і у рідинах процесами внутрішнього тертя або в'язкості [67,68]. Релаксацію можна описати за допомогою звичайного гідродинамічного підходу.

Рух дислокації в квазікристалі ускладнений через відсутність трансляційної симетрії. В'язкість спричиняє дисипацію енергії дислокації. Як відомо [69], дисипація механічної енергії за одиницю часу становить

$$\dot{E}_{\rm mech} = -T\dot{S}, \qquad (2.79)$$

де T є температура,  $\dot{S}$  є похідна ентропії від часу. Нехтуючи теплопровідністю та використовуючи загальне рівняння тепловіддачі [69], ми отримуємо

$$\rho T \left( \frac{\partial s}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla s \right) = \sigma'_{ik} \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial x_k}, \qquad (2.80)$$

де  $\rho$  є густина, *s* є ентропія на одиницю маси, **v** є швидкість (**v** = **v**<sub>D</sub>),  $\sigma'_{ik}$  є тензор в'язкого напруження. Звідси ми знаходимо

$$\frac{\partial}{\partial t} \int \rho s dV = \int \frac{\sigma'_{ik}}{T} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} dV, \qquad (2.81)$$

де ліва частина рівняння відповідає швидкості зміни загальної ентропії за одиницю часу. Підставляючи (2.81) в (2.79), отримуємо:

$$\dot{E}_{\text{mech}} = -\int \sigma'_{ik} \frac{\partial v_i}{\partial x_k} dV = -\frac{1}{2} \int \sigma'_{ik} \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_k} + \frac{\partial v_k}{\partial x_i} \right) dV.$$
(2.82)

Остання рівність випливає з симетрії тензора  $\sigma'_{ik}$ .

У роботі Ханнанова [32] тензор в'язкого напруження для квазікристалів представлений таким чином:

$$\sigma'_{ik} = \eta_{iklm} \mathbf{v}_{lm}, \qquad (2.83)$$

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

$$\mathbf{v}_{ij} = \frac{1}{2} \Big( \nabla_i \mathbf{v}_j + \nabla_j \mathbf{v}_i \Big). \tag{2.84}$$

Вектор макроскопічної швидкості v визначається похідною загального поля зміщення U за часом,

$$\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}.$$
 (2.85)

Знову розглянемо самоподібний розв'язок для поля переміщення дислокації, який описується однією змінною **r** – **v**<sub>D</sub>t [31], тобто

$$\mathbf{U}(\mathbf{r},t) = \mathbf{U}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{\mathrm{D}}t). \tag{2.86}$$

Підставляючи (2.83), (2.84) в (2.82) і враховуючи (2.86), отримуємо

$$\dot{E}_{\text{visc}} = -\frac{1}{4} \eta_{iklm} \int d^2 r \left[ \nabla_i (\mathbf{v}_{\text{D}} \nabla) U_k + \nabla_k (\mathbf{v}_{\text{D}} \nabla) U_i \right] \times \\ \times \left[ \nabla_l (\mathbf{v}_{\text{D}} \nabla) U_m + \nabla_m (\mathbf{v}_{\text{D}} \nabla) U_l \right]$$
(2.87)

Виберемо систему координат з віссю z, спрямованою вздовж лінії дислокації. Після виконання двовимірного перетворення Фур'є в площині (x,y), отримуємо з (2.87):

$$\dot{E}_{\text{visc}} = -\frac{1}{4} \eta_{iklm} \int d^2 q (\mathbf{v}_{\text{D}} \mathbf{q})^2 [q_i U_k(-\mathbf{q}) + q_k U_i(-\mathbf{q})] \times \\ \times [q_l U_m(\mathbf{q}) + q_m U_l(\mathbf{q})]$$
(2.88)

Оскільки в'язкість є ізотропною для ікосаедричного квазікристалу, компоненти в'язкості можна представити наступним чином,

$$\eta_{ijkl} = \left(\eta_{\rm L} - \frac{4}{3}\eta_{\rm T}\right)\delta_{ij}\delta_{kl} + \eta_{\rm T}\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}\right),\tag{2.89}$$

де  $\eta_{\rm L}$  і  $\eta_{\rm T}$ є поздовжня і поперечна в'язкості відповідно.

Діагональна складова тензора в'язкості спрощується до  $\eta_{iiii} = 9\eta_{\rm L}$ . У цьому випадку

$$\dot{E}_{\text{visc}} = -9\eta_{\text{L}} \int \left| U_i(\mathbf{q}) \right|^2 q_i^2 \left( \mathbf{v}_{\text{D}} \mathbf{q} \right)^2 d^2 q \,. \tag{2.90}$$

3 (2.6) та (2.90) випливає, що внесок в'язкості в дислокаційну рухливість становить

$$M_{\rm visc}^{-1} = 9\eta_{\rm L} \int |U_i(\mathbf{q})|^2 q_i^2 q_x^2 d^2 q \,. \tag{2.91}$$

#### 2.2.2. Вакансійний внесок

Відсутність трансляційної симетрії квазікристалів виявляється у властивих фазонних дефектах, тобто термічно активованих перетвореннях атомної структури квазікристалів. В результаті виникають додаткові дефекти, а отже, потрібно враховувати дифузію вакансій для опису динаміки дислокацій. Швидкість зростання ентропії з часом, що враховує вакансії, була отримана в [69]:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\int \frac{1}{T} \mathbf{j} \nabla \mu d^2 r \,. \tag{2.92}$$

Тоді дисипація енергії дорівнює

$$\dot{E}_{\rm dif} = \int \mathbf{j} \nabla \mu d^2 r \,. \tag{2.93}$$

Позначимо через *С* додаткову концентрацію вакансій (відносну частину вакантних вузлів), що спричинена деформаціями [32]. У цьому випадку вираз для густини потоку вакансій виглядає наступним чином,

$$\mathbf{j} = -D\frac{k_{\rm p}}{p}\nabla p\,,\tag{2.94}$$

де D є коефіцієнт дифузії,  $k_{\rm p}D$  є коефіцієнт бародифузії,  $k_{\rm p}$  є бародифузійне відношення,

$$k_{\rm p} = p \left( \frac{\partial V}{\partial C} \right)_{p,T} / \left( \frac{\partial \mu}{\partial C} \right)_{p,T}, \qquad (2.95)$$

де V є об'єм, p є тиск, T є температура,  $\mu$  є хімічний потенціал;  $\mu = \mu_{at} - \mu_{v}$ , де  $\mu_{at}, \mu_{v}$  є хімічні потенціали атома та вакансії. Для спрощення розглядається однокомпонентний квазікристал.

Вакансія є центром дилатації і тиск визначається співвідношенням

$$p = -\frac{1}{3} \sum_{i} \sigma_{ii} , \qquad (2.96)$$

де  $\sigma_{ij}$  є тензор пружних напружень.

Беручи до уваги поле напружень вакансій, зв'язок повної дисторсії  $\nabla_i U_j$  з пружною дисторсією  $\beta_{ij}$  є таким:

$$\nabla_i U_j = \beta_{ij} + \frac{1}{3} \Omega C \delta_{ij}, \qquad (2.97)$$

де  $\Omega = \left(\frac{\partial V}{\partial C}\right)_{p,T}$  є дилатаційний об'єм вакансії. Величина  $\frac{1}{3}\Omega C\delta_{ij}$  є

дисторсія, що спричинена вакансіями. За відсутності прикладених напружень ця дисторсія визначає дилатацію фізично малого об'єму квазікристалу, який є досить великим порівняно з атомним, отже є власною дисторсією. Оскільки концентрація вакансій  $C = C(\mathbf{r})$  неоднорідна в загальному випадку, така дисторсія спричиняє несумісність ділянок квазікристалічної решітки.

Градієнт хімічного потенціалу залежить від градієнтів концентрації та тиску наступним чином,

$$\nabla \mu = \left(\frac{\partial \mu}{\partial C}\right)_{p,T} \nabla C + \left(\frac{\partial \mu}{\partial p}\right)_{C,T} \nabla p .$$
(2.98)

Введемо нову константу  $\gamma = k_{\rm p} \ / \ p$  , тоді

$$\left(\frac{\partial\mu}{\partial C}\right)_{p,T} = \frac{\Omega}{\gamma}.$$
(2.99)

3 рівняння (2.98) отримуємо:

$$\nabla \mu = \frac{\Omega}{\gamma} \nabla C + \Omega \nabla p \,. \tag{2.100}$$

Поєднуючи (2.93), (2.18) і (2.98). Отримуємо

$$\dot{E}_{\rm dif} = -D\Omega \int \left[ \gamma (\nabla p)^2 + \nabla C \nabla p \right] d^2 r \,. \tag{2.101}$$

Лінеаризоване рівняння збереження імпульсу для квазікристалу має вигляд [32]

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} = \nabla_j \boldsymbol{\sigma}_{ji} + \nabla_i \boldsymbol{\sigma}'_{ij}.$$
(2.102)

За малої швидкості дислокації ліву частину цього рівняння можна прирівняти нулю, тоді з (2.82)-(2.86), (2.103) випливає, що

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} \eta_{kjlm} \frac{1}{\nabla_i} \nabla_k \left( \nabla_l (\mathbf{v}_D \nabla) U_m + \nabla_m (\mathbf{v}_D \nabla) U_l \right).$$
(2.103)

Градієнт тиску можна отримати з (2.20) і (2.103),

$$\nabla p = -\frac{1}{6} \nabla \frac{\nabla_i}{\nabla_k} \eta_{iklm} \Big( \nabla_l \Big( \mathbf{v}_D \nabla \Big) U_m + \nabla_m \Big( \mathbf{v}_D \nabla \Big) U_l \Big).$$
(2.104)

Підставляючи (2.104) в (2.101) та роблячи перетворення, подібні до формули (2.88), отримуємо

$$\dot{E}_{\rm dif} = -\frac{1}{6} D\Omega \eta_{iklm} \int \left( q_l U_m(\mathbf{q}) + q_m U_l(\mathbf{q}) \right) \frac{q_i}{q_k} q^2 C(-\mathbf{q}) \left( \mathbf{v}_{\rm D} \mathbf{q} \right) d^2 q - \frac{1}{36} D\Omega \gamma \eta_{iklm} \eta_{pfdg} \times$$
(2.105)

$$\times \int \left( q_l U_m(\mathbf{q}) + q_m U_l(\mathbf{q}) \right) \left( q_d U_g(-\mathbf{q}) + q_g U_d(-\mathbf{q}) \right) \frac{q_i}{q_k} \frac{q_p}{q_f} q^2 (\mathbf{v}_D \mathbf{q})^2 d^2 q.$$

При ненульовій діагональній складовій в'язкого тензора для дисипації енергії отримуємо

$$\dot{E}_{\rm dif} = -3D\Omega \eta_{\rm L} \int U_i(\mathbf{q}) C(-\mathbf{q}) q_i q^2 (\mathbf{v}_{\rm D} \mathbf{q}) d^2 q -$$

$$-9D\Omega \gamma \eta_{\rm L}^2 \int |U_i(\mathbf{q})|^2 q_i^2 q^2 (\mathbf{v}_{\rm D} \mathbf{q})^2 d^2 q$$
(2.106)

Як видно з (2.6) і (2.106), внесок дифузії у рухливість дислокації становить

$$M_{\text{dif}}^{-1} = \frac{3D\Omega\eta_{\text{L}}}{\left|\mathbf{v}_{D}\right|} \int U_{i}(\mathbf{q})C(-\mathbf{q})q^{2}q_{i}q_{x}d^{2}q +$$

$$+9D\Omega\gamma\eta_{\text{L}}^{2}\int \left|U_{i}(\mathbf{q})\right|^{2}q^{2}q_{i}^{2}q_{x}^{2}d^{2}q$$

$$(2.107)$$

Перший та другий члени правої частини (2.38) описують взаємодію пружних полів із дилатаціями, що спричинені вакансіями, та вищим порядком впливу пружних деформацій, відповідно. Таким чином, нарешті

$$M_{\rm dif}^{-1} = M_{\rm difUC}^{-1} + M_{\rm difU}^{-1},$$

$$M_{\rm difUC}^{-1} = \frac{3D\Omega\eta_{\rm L}}{|v_D|} \int U_i(\mathbf{q})C(-\mathbf{q})q^2q_iq_xd^2q,$$

$$M_{\rm difU}^{-1} = 9D\Omega\gamma\eta_{\rm L}^2 \int |U_i(\mathbf{q})|^2 q^2q_i^2q_x^2d^2q.$$
(2.108)

#### 2.2.3. Фазонний внесок

Як зазначалося раніше, квазікристали мають так звані фазонні дефекти – локальні порушення квазіперіодичності квазікристалу [17,32,56]. Їх наявність додатково перешкоджає руху дислокації в квазікристалі. Через відсутність трансляційної симетрії квазікристалів дислокація, що рухається, залишає за

собою площинний дефект, що складається з площини фазонних дефектів [28]. Вважається, що так звана фазонна стінка зникає при відпалі. Дисипацію енергії, зумовлену цим процесом, можна обчислити подібно до того, що описано рівнянням (2.82). Але в цьому випадку ми маємо підставляти тензор фазонних напружень  $P_{ij}$  [32] замість тензора в'язких напружень і швидкість фазонного дрейфу  $\dot{\mathbf{w}}$ , де  $\mathbf{w}$  є фазонне поле, замість швидкості дислокації  $\mathbf{v} = \partial \mathbf{U}/\partial t$ :

$$\dot{E}_{\rm mech} = \int P_{ik} \frac{\partial \dot{w}_i}{\partial x_k} dV. \qquad (2.109)$$

Як і для поля U, ми розглянемо поле w, яке описується однією змінною  $\mathbf{r} - \mathbf{v}_{\mathrm{D}} t$  [31],  $\mathbf{w}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{w}(\mathbf{r} - \mathbf{v}_{\mathrm{D}} t)$ . Лінеаризоване рівняння руху для поля w отримано в [32]

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \Gamma_w \Big( \nabla \cdot \hat{P} \Big), \tag{2.110}$$

де Г<sub>w</sub> є фазонний кінетичний коефіцієнт.

3 (2.110) отримуємо вираз для тензора фазонних напружень,

$$P_{ij} = -\frac{1}{\Gamma_w \nabla_i} (\mathbf{v}_{\mathrm{D}} \cdot \nabla) w_j. \qquad (2.111)$$

Підставляючи (2.9) в (2.109), отримуємо

$$\dot{E}_{\text{phas}} = \frac{1}{\Gamma_w} \int \frac{1}{\nabla_i} (\mathbf{v}_{\text{D}} \nabla) w_k \cdot \nabla_k (\mathbf{v}_{\text{D}} \nabla) w_i d^2 r =$$

$$= -\frac{1}{\Gamma_w} \int w_k(\mathbf{q}) w_i(-\mathbf{q}) \frac{q_k}{q_i} (\mathbf{v}_{\text{D}} \mathbf{q})^2 d^2 q$$
(2.112)

Для діагональної складової маємо

$$\dot{E}_{\text{phas}} = -\frac{1}{\Gamma_w} \int |w(\mathbf{q})|^2 (\mathbf{v}_{\text{D}} \mathbf{q})^2 d^2 q \,. \tag{2.113}$$

Таким чином, внесок фазонних деформацій у дислокаційну рухливість є

$$M_w^{-1} = \frac{1}{\Gamma_w} \int |w(\mathbf{q})|^2 q_x^2 d^2 q \,. \tag{2.114}$$

Порівнюючи отримані результати для дислокаційної рухливості з результатами, отриманими в [1], можна побачити, що додаток  $M_w^{\text{diag},-1}$  однаковий в обох роботах. Додатки дифузії вакансій  $M_{\text{difUC}}^{-1}$  і  $M_{\text{difU}}^{-1}$  (2.108) в [1] відрізняються лише числовими коефіцієнтами  $\propto 1$ . Ця різниця є незначною через спрощення використовуваних моделей. Додаток в'язкості  $M_{\text{visc}}^{-1}$  має дещо інший вигляд у [1], але його загальна структура залишається незмінною.

## Висновки до розділу 2

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. Незначні відмінності у виразах для мобільності пов'язані зі спрощеннями використаних моделей.
Завдяки збігу результатів, що одержані різними методами, можна зробити висновок, що обидва підходи дають коректний опис рухливості дислокації в квазікристалі.

Самоподібний розв'язок рівнянь динаміки полів зміщень дислокації в квазікристалі дозволило знайти безпосередні вирази для внесків пружних деформацій, в'язкого плину, фазонних дефектів, взаємодії пружних полів з дилатаціями, що викликані вакансіями. Проведені чисельні оцінки різних доданків у рухливість показують, 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 швидкостях дислокації,  $v < 10^{-8}$  см/с.

Аналіз наявних експериментальних результатів виявляє значний вплив взаємних закріплень дислокацій на їхню рухливість в ікосаедричному квазікристалі. Оскільки роль взаємних закріплень зменшується з ростом роботі температури, отримані в вирази можуть безпосередньо використовуватись за температур, близьких до температури плавлення. За температур потрібно більш низьких враховувати сили гальмування дислокацій на центрах пінінгу.

З огляду на подібність механізмів дислокаційної повзучості в кристалах і квазікристалах можна скористатися моделями радіаційної повзучості кристалів для опису цього явища в квазікристалах.

Матеріали цього розділу опубліковано в роботах [1,2].

#### РОЗДІЛ З

### РАДІАЦІЙНІ ДЕФЕКТИ І РОЗПУХАННЯ КВАЗІКРИСТАЛІВ

Розглянуто радіаційно індуковане розпухання квазікристалів. У квазікристалах кінетика дислокацій включає утворення фазонів: вакансійних та міжвузлових локалізованих топологічних дефектів. Фазони взаємодіють з індукованими радіацією точковими дефектами (вакансіями та міжвузловими атомами) і впливають на поведінку розпухання квазікристалів. Після поглинання вакансій фазони міжвузлового типу перетворюються на фазони вакансійного типу і навпаки. Іншими словами, фазони є центрами рекомбінації змінної полярності для точкових дефектів. Припускаючи, що (і) швидкість утворення фазонів пропорційна швидкості ковзання дислокації, а (іі) пори є стоками для рухомих фазонів, набір рівнянь швидкості для точкових дефектів і фазонів формулюється та аналізується як аналітично, так і чисельно. Показано, що швидкість розпухання квазікристалів нижча порівняно з кристалами. Швидкість росту петель і пор, а також швидкість розпухання сильно залежать від концентрації фазонів, яка контролюється дифузією фазонів до стоків.

### 3.1. Вступ

У квазікристалах під опроміненням фазони утворюються за рахунок росту дислокаційних петель завдяки переважному поглинанню МА. Як правило, фазони менш рухливі, ніж вакансії, і можуть утворювати «фазонний слід» дислокації, що повзе. Наша стаття [4] стосувалась впливу нерухомих фазонів, що належать до призматичного дефекту укладання, на кінетику ТД. Метою цього розділу є опис розпухання квазікристалів з рухомими фазонами. У наступному підрозділі обговорюється утворення та властивості фазонів у 2D-моделі квазікристалу. Потім формулюється система рівнянь швидкостей реакцій для ТД та фазонів. Ця система розв'язується як аналітично, так і чисельно, щоб оцінити поведінку розпухання квазікристалічних матеріалів. Слід зазначити, що застосування квазікристалів як радіаційно стійких конструкційних матеріалів не є на часі; однак ми вважаємо, що дослідження розвитку мікроструктури в квазікристалах під опроміненням допомагають зрозуміти властивості фазонів.

### 3.2. Формування та властивості фазонів як часткових точкових дефектів

Фазони набагато менш вивчені, ніж топологічні дефекти кристалічних твердих речовин, незважаючи на їх очевидне значення для пластичної деформації квазікристалів. Фазони візуалізуються за допомогою мікроскопії з високою роздільною здатністю як дефекти, що містять дефект укладання, який утворюється під час руху дислокації [24]. Дифузна міграція фазонів від дефекту укладання є термічно активованим процесом з енергією активації до 4 еВ, як повідомляють Фейербахер і Кайяр [70].

Утворення фазонів, тобто незбіжних вузлів, є результатом деформації зсуву [71], що схематично продемонстровано на рис. 3.1. Незбіжний вузол топологічно відповідає порожнині між регулярними вузлами квазікристалічної ґратки й співпадаючими вузлами в шарі зміщення [3]. Незбіжний вузол може бути вільним або зайнятим. Вільний незбіжний вузол є схожим до вакансії, але його об'єм є меншим, ніж у регулярної вакансії. Вакантний незбіжний вузол можна розглядати як вільний об'єм, пов'язаний з навколишніми атомами, що його фіксують. Вільний об'єм вакантного незбіжного вузла становить приблизно  $0.5\omega$ , де  $\omega$  - середній атомний об'єм. Незбіжний вузол, який зайнятий атомом, є подібним до міжвузлового дефекту. Об'єм зайнятого незбіжного вузла перевищує об'єм регулярної міжвузлової порожнини, але є меншим, ніж об'єм регулярної вакансії. Незбіжні вузли не формують протяжні ланцюги в шарі зсуву внаслідок відсутності трансляційної інваріантності.



Рис. 3.1. Зсув уздовж площини ковзання в кристалі (ліворуч) і квазікристалі (праворуч). Лінії вказують атомні площини атомів, перпендикулярні площині ковзання. У квазікристалі дефект пакування з фазонами показаний переривчастими лініями. Фазонна компонента вектора Бюргерса  $b^{\perp}$  параметризує їх густину і енергію невідповідності.

За визначенням, фазони – це незбіжні вузли, зайняті й вільні, що формують дефект пакування. Вони беруть участь у кінетичних процесах [72,73]. Взаємодії фазонних квазівакансій  $\tilde{v}$  і фазонних квазіміжвузлових атомів  $\tilde{i}$  з вакансіями v і власними МА i приводять до взаємних перетворень

$$\widetilde{i} + v \to \widetilde{v},$$

$$\widetilde{v} + i \to \widetilde{i}.$$
(3.1)

Зворотні перетворення малоймовірні, тому що потрібна значна енергія для утворення регулярних ТД. Швидкість реакцій залежить від концентрації вільно мігруючих ТД, які утворюються під опроміненням у вигляді пар Френкеля. Абе та ін. [74] посилалися на динамічну природу фазонів і описували локальну аномалію атомних коливань у декагональному  $Al_{72}Ni_{20}Co_8$  при T = 1100К. Вони вважали, що виникнення аномалій фактора Дебая-Уоллера (ДУ) в вузлі  $Al - \alpha$  (атом Al в ядрі кластера), ймовірно, індукується наявністю фазонних атомних вузлів  $\beta$  типу, що перестрибують (phason-flip atomic sites), які розташовані на відстанях менш ніж типова міжатомна відстань. Типова міжатомна відстань становить 0.2 нм, а відстань між  $\alpha - \beta$  локусами (між мінімумами потенціалу подвійної ями) дорівнює 0.095 нм. Тому вузли  $\alpha$  і  $\beta$  не можна зайняти одночасно, і  $\beta$ -вузли, які вважаються енергетично подібними до вузлів  $Al - \alpha$ , можуть виконувати роль вакансій, забезпечуючи ефективний простір для релаксації. Розумно припустити, що це спричиняє значну анізотропію фактора ДУ [74].

Максимальний потенціал між  $\alpha$  і  $\beta$  вузлами становить ~ 0.1 eB, оскільки при T = 1100 K Al коливається, як і в потенціалі однієї ями.  $\beta$ -вузол не був зайнятий під час експериментального спостереження ( $\tilde{v}$ -фазон). Однак цей вузол може бути зайнятий атомом, утворюючи  $\tilde{i}$ -фазон.

Щоб продемонструвати утворення фазонного сліду у двовимірному квазікристалі, розглянемо, як приклад, квазікристал, що складається з семикутних координаційних багатогранників двох типів (рис. 3.2а).

Пласка теселяція квадратів та рівносторонніх трикутників, що утворюють гратку з далеким порядком, була введена Коллінзом [75]. Подібні розбиття на квадрати і трикутники, які моделюють квазікристали та їх властивості, розглядалися у [76-78]. Гептагональний квазікристал розглядався як приклад 2D-структури без трансляційної інваріантності (рис. 3.2).



Рис. 3.2. Моделювання квазікристалу шляхом укладання трикутників і квадратів. (а) семикутні координаційні багатогранники двох типів, з яких побудований квазікристал. (б) Шар атомів видаляється з розрізу 2 і вставляється в розріз 1. Сині точки позначають 5-координовані вузли ідеальної ґратки. (с) Дефект упаковки. Червоні точки позначають вузли з 5-кратною координацією ідеальної ґратки, що збігаються. Червоні зірочки позначають вузли з неповною координацією, що збігаються. Півмісяцем позначені вакансійні дефекти.

Кожний координаційний багатогранник містить 5-координований вузол. Фрагмент квазікристалу цього типу представлений на рис. 3.26. Щоб показати фазонний слід дислокації, ми приготували перетин вакансійної і міжвузлової призматичних дислокацій, використовуючи процедуру Сомигліана [79]. Потім шар ширини *а* (довжина катета трикутника) вставляється в ортогональний розріз 1; з перетину 2 видаляється шар ширини а (рис. 3.2б). Поверхні перетину склеєні й утворюють дефект пакування призматичних дислокацій (рис. 3.2б). Ядра лежать 3a межами квазікристалічного фрагмента. Незбіжні вузли, позначені колами, утворюють фазонні сліди дислокацій (рис. 3.2в). Розподіл фазонів в дефекті пакування не випадковий, тому що пентагональна структура має впорядкування середнього порядку в упакуванні пентагонів різних типів. Зазначимо, що у збіжних вузлів дефекту пакування може бути координація, що відрізняється від координації п'ятикутників. Наприклад, на рис. 3.2в 6- і 4-координовані вузли позначені зірочками. Зверніть увагу, що збіжні вузли в дефекті укладання можуть координацію, відмінну від координації мати п'ятикутників. Наприклад, на рис. 3.2в 6-кратні та 4-кратні вузли, що збігаються, позначені зірками.

Побудова дислокації, використовуючи процедуру Вольтерра [80] у двовимірному квазікристалі, складеному з трикутників та квадратів, дає фазонні сліди, подібні до тих, що показані на рис. З.2в. Таким чином, приклад двовимірного квазікристалу показує, що відсутність трансляційної інваріантності гратки уздовж розрізу призводить до формування фазонного сліду. З цієї причини у ЗD-квазікристалах також очікується утворення фазонів із подібними топологічними властивостями. Багатокомпонентний склад та топологічні особливості початкового «ідеального» квазікристалу можуть впливати на властивості фазонів; проте здається, що загальною властивістю цих дефектів є існування вакансійно- і міжвузлово-подібних фазонів.

### 3.3. Модель

У твердих тілах вакансії і МА, створені опроміненням, рекомбінують один з одним і мігрують на стоки. Рівняння швидкостей реакцій ТД в

кристалах добре вивчені [81]. Подібні рівняння можуть бути застосовані для опису кінетики точкових дефектів в опромінюваних квазікристалах, проте необхідно враховувати вплив фазонів, оскільки вони взаємодіють з регулярними ТД. Відомо, що дислокації є стоками для ТД.

У квазікристалі поведінка дислокацій при опроміненні відрізняється від поведінки кристала через фазонні дефекти. Експериментально було встановлено, що у квазікристалі дислокація, що переповзає, створює фазонний слід, який поступово розпливається через термічно-активовану Подібним дифузію фазонів [24,80]. чином під опроміненням ріст дислокаційних петель також супроводжується формуванням фазонних дефектів усередині петель. Фазонні дефекти по-різному взаємодіють із регулярними ТД при високих і низьких температурах.

Коли термічно активована дифузія фазонів уповільнена, фазони залишаються всередині дислокаційної петлі. У спрощеній моделі, якщо концентрація фазонів висока, слід фазонів варто розглядати як ідеальний стік у формі кільця для ТД. Це припущення виглядає обгрунтованим у випадку високої концентрації фазонів, коли міжфазонні відстані невеликі, а захоплений точковий дефект може легко мігрувати до найближчих фазонних дефектів до остаточного поглинання ядром петлі дислокації. При низьких температурах, коли фазони нерухомі, рівняння швидкостей реакцій для ТД мають той самий вигляд, що і для кристалів, але з модифікованою потужністю стоків дислокаційних петель із фазонними кільцями всередині. Потужність такого комбінованого стоку була аналітично оцінена в [3]. Було встановлено, що фазони суттєво сприяють потужності стоків дислокаційних петель. Це призводить до пригамування радіаційних ефектів, таких як розпухання і радіаційний ріст. Детальні розрахунки ефективності поглинання дислокаційної петлі з кільцем фазонів будуть представлені в розділі 4.

# 3.4. Рівняння балансу ТД для квазікристалу з дислокаційними петлями, рухомими фазонами та порами

У цьому розділі ΜИ описуємо високотемпературну поведінку квазікристалів, що містять дислокаційні петлі та пори під опроміненням, що створює вакансії та МА. Як відомо (див., наприклад, [82]), дислокації переважно поглинають МА, що призводить до накопичення надлишкових вакансій, які утворюють вакансійні пори. Припускаючи досить високу термічно активовану дифузію фазонів, ми вважаємо, що часовий масштаб розтікання фазонів малий у порівнянні з часовим масштабом еволюції мікроструктури. В цьому випадку створені фазонні дефекти мають тенденцію бути однорідно розподіленими по квазікристалу, але не локалізуватися всередині дислокаційної петлі, як це відбувається при низьких температурах. Для простоти стадія зародження протяжних дефектів не розглядається. Вважається, що пори й дислокаційні петлі мають однаковий початковий розмір. Під опроміненням, внаслідок кращого поглинання МА, дислокаційні петлі ростуть і генерують фазони. Малоймовірно, що фазонні дефекти вакансійного й міжвузлового типів можуть рекомбінувати. Однак, вони можуть поглинатися порами. Було експериментально встановлено, що коефіцієнти дифузії МА й вакансій набагато більше, ніж у фазонів,  $D_i > D_v >> D_p$  [83]. Використовуючи ці припущення, у рамках стандартної моделі ефективного середовища [82], одержуємо рівняння швидкостей реакцій (рівняння балансу) для концентрацій вакансій  $C_v$ , міжвузлових атомів  $C_i$  і фазонів двох типів,  $C_{pv}$  і  $C_{ni}$ 

$$\frac{dC_i}{dt} = K - \alpha_{iv} D_i C_i C_v - k_i^2 D_i C_i - \alpha_{ip} D_i C_i C_{pv}, \qquad (3.2)$$

$$\frac{dC_v}{dt} = K - \alpha_{iv} D_i C_i C_v - k_v^2 D_v C_v - \alpha_{vp} D_v C_v C_{pi}, \qquad (3.3)$$

$$\frac{dC_{pi}}{dt} = K_{pi} + \alpha_{ip} D_i C_i C_{pv} - \alpha_{vp} D_v C_v C_{pi} - k_C^2 D_p C_{pi}, \qquad (3.4)$$

$$\frac{dC_{pv}}{dt} = K_{pv} + \alpha_{vp} D_v C_v C_{pi} - \alpha_{ip} D_i C_i C_{pv} - k_C^2 D_p C_{pv}, \qquad (3.5)$$

де K — швидкість генерації вільно мігруючих регулярних ТД,  $K_{pi,pv}$  — швидкість генерації фазонів. Вважається, що коефіцієнти дифузії  $D_p$  *i* - i v- фазонів є однаковими. Константи швидкості рекомбінації мають вигляд

$$\alpha_{iv} = \frac{4\pi r_{iv}}{\omega}, \quad \alpha_{ip,vp} = \frac{4\pi r_{ip,vp}}{\omega}, \quad (3.6)$$

де  $r_m \sim a$  (m = iv, ip, vp) є радіуси захоплення відповідних точкових дефектів,  $\omega$  – атомний об'єм

Потужності стоків мають звичайний вигляд

$$k_{i,v}^2 = k_{di,v}^2 + k_C^2, (3.7)$$

$$k_{di,v}^2 = 2\pi r_L n_L Z_L^{i,v}, (3.8)$$

$$k_C^2 = 4\pi r_C n_C, (3.9)$$

де  $n_C$  й  $r_C$  - густина і радіус пор,  $n_L$  і  $r_L$  – густина і радіус петель. Тут вважається, що ефективності поглинання пор однакові для всіх типів дефектів.

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

$$K_{pi} = K_{pv} = \frac{1}{2} \beta n_L \frac{d}{dt} \left( \pi r^2 b \right) = \frac{1}{2} \beta K \frac{dS}{d\phi}, \qquad (3.10)$$

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

Швидкість росту дислокаційної петлі визначається різницею потоків МА і вакансій

$$\frac{dr_L}{dt} = \frac{1}{b} \left( Z_L^i D_i C_i - Z_L^i D_v C_v \right), \tag{3.11}$$

Швидкість росту пори має вигляд

$$\frac{dr_C}{dt} = \frac{1}{r_C} \left( D_v C_v - D_i C_i \right) + \frac{D_p}{2r_C} \left( C_{pv} - C_{pi} \right).$$
(3.12)

Другий доданок у правій частині цього рівняння – це внесок фазонів (коефіцієнт 1/2 пов'язаний з половинним релаксаційним об'ємом фазона 0.5Ω). Очевидно, що внесок фазонів у швидкість росту пори - величина другого порядку малості в порівнянні з першим доданком, який пов'язаний з ефектом кращого поглинання МА дислокаціями. Нижче внесок фазонів у виразі (3.12) не враховується.

На перший погляд в квазікристалі, що опромінюється, дислокаційні петлі можуть рости до більших розмірів навіть без пор через утворення іфазонів, які є стоками для надлишкових вакансій. Покажемо, що у квазікристалі без пор петлі ростуть незначним чином і досягають стаціонарного стану. Після деякого перехідного періоду можна використовувати квазістаціонарні рівняння для ТД  $dC_{i,v}/dt = 0$ , з яких випливає

$$k_i^2 D_i C_i - k_v^2 D_v C_v = \alpha_{vp} D_v C_v C_{pi} - \alpha_{ip} D_i C_i C_{pv}.$$
(3.13)

Використовуючи це співвідношення й рівняння (3.10) і (3.11), при  $n_C = 0$  запишемо рівняння (3.4) і (3.5) у вигляді

$$\frac{dC_{pi}}{dt} = (0.5\beta - 1)n_L \frac{d}{dt} \left(\pi r^2 b\right),\tag{3.14}$$

$$\frac{dC_{pv}}{dt} = (0.5\beta + 1)n_L \frac{d}{dt} \left(\pi r^2 b\right).$$
(3.15)

Розв'язок цих рівнянь дає співвідношення між радіусом петлі й концентраціями фазонів

$$C_{pi} + (1 - 0.5\beta)\pi b n_L r^2 = \text{const},$$
 (3.16)

$$C_{pv} - (1 + 0.5\beta)\pi b n_L r^2 = \text{const.}$$
 (3.17)

Згідно з рівняннями (3.11) і (3.13), коли петлі досягають максимального розміру, dr/dt = 0, концентрації фазонів пов'язані співвідношенням

$$C_{pi} = C_{pv} \frac{Z_L^v}{Z_L^i} \frac{\alpha_{ip}}{\alpha_{vp}}.$$
(3.18)

3 рівнянь (3.16)-(3.18) знаходимо співвідношення між початковим і кінцевим радіусом петлі

$$r_{L}^{2} - r_{L0}^{2} = \frac{2}{\pi b n_{L}} \left( C_{pi0} - C_{pv0} \frac{Z_{L}^{v}}{Z_{L}^{i}} \frac{\alpha_{ip}}{\alpha_{vp}} \right) \left[ 2 - \beta + (\beta + 2) \frac{Z_{L}^{v}}{Z_{L}^{i}} \frac{\alpha_{ip}}{\alpha_{vp}} \right]^{-1}, \quad (3.19)$$

де нижній індекс 0 позначає початкові величини. Видно, що петлі можуть рости тільки за рахунок існуючих раніше фазонів. Петлі можуть навіть розчинитися під опроміненням, якщо початкова концентрація і-фазонів є невеликою. Використовуючи просту початкову умову для оцінки концентрацій фазонів

$$C_{pi}\Big|_{t=0} = C_{pv}\Big|_{t=0} = 0.5\beta\pi r_{L0}^2 bn_L, \qquad (3.20)$$

з рівняння (3.19) знаходимо, що кінцевий радіус є більшим, ніж початковий, якщо  $\frac{Z_L^v}{Z_L^i} \frac{\alpha_{ip}}{\alpha_{vp}} < 1.$ 

$$\frac{r_L^2}{r_{L0}^2} - 1 = \beta \left( 1 - \frac{Z_L^v}{Z_L^i} \frac{\alpha_{ip}}{\alpha_{vp}} \right) \left[ 2 - \beta + (\beta + 2) \frac{Z_L^v}{Z_L^i} \frac{\alpha_{ip}}{\alpha_{vp}} \right]^{-1}.$$
(3.21)

Фактично це означає, що дислокаційний преференс до МА є більшим, ніж преференс v-фазонів до МА. При  $\alpha_{vp} = \alpha_{ip}$  права частина рівняння (3.21) пропорційна до преференсу дислокації

$$B_{d} = 1 - \frac{Z_{L}^{v}}{Z_{L}^{i}}, \qquad (3.22)$$

який зазвичай є невеликим, тобто розмір петлі збільшується незначно у квазікристалах без альтернативних стоків для вакансій.

### 3.5. Швидкість розпухання в квазікристалі без стоків фазонів

У цьому розділі ми обчислюємо швидкість розпухання в системі, що містить пори і призматичні дислокаційні міжвузлові петлі. Будемо вважати, що фазони не поглинаються порами, і одержуємо концентрацію фазонів після розсіювання в об'ємі, що доводиться на одну петлю

$$C_{ph} = \frac{N_{ph}\Omega}{V_R} = \beta \pi r_L^2 b n_L.$$
(3.23)

Швидкість розпухання зручно виразити як швидкість росту об'єму всіх пор  $S = (4\pi/3)n_c r_c^3$  в одиниці об'єму матеріалу

$$\frac{dS}{d\phi} = \frac{1}{K} k_c^2 \left( D_v C_v - D_i C_i \right). \tag{3.24}$$

Використовуючи (3.13), (3.24) і (3.22), одержуємо

$$\frac{dS}{d\phi} = k_c^2 \left( \frac{1}{k_{dv}^2 + \alpha_v C_{pi} + k_c^2} - \frac{1}{k_{di}^2 + \alpha_i C_{pv} + k_c^2} \right)$$

$$= k_c^2 \frac{B_d k_{di}^2 + \alpha_i C_{pv} - \alpha_v C_{pi}}{\left(k_{dv}^2 + \alpha_v C_{pi} + k_c^2\right) \left(k_{di}^2 + \alpha_i C_{pv} + k_c^2\right)}$$
(3.25)

Враховуючи, що  $k_{di}^2 \approx k_{dv}^2$ ,  $\alpha_i \approx \alpha_v$  і підставляючи повну концентрацію фазонів в (3.25), знаходимо

$$\frac{dS}{d\phi} \approx \frac{B_d k_c^2 k_{di}^2 + k_c^2 \alpha_i (2x - 1)C_{ph}}{\left(k_{di}^2 + \alpha_i x C_{ph} + k_c^2\right)^2}.$$
(3.26)

де  $x = C_{pv} / C_p$ .

Швидкість розпухання немонотонно залежить від потужності стоку дислокацій. Цікаво знайти максимум швидкості розпухання (3.26). З умови рівності нулю першої похідної

$$\frac{d}{dk_{di}^{2}} \left( \frac{dS}{d\phi} \right) \Big|_{k_{di}^{2} = k_{di0}^{2}} = \frac{B_{d}k_{c}^{2}}{\left( k_{di}^{2} + \alpha_{i}xC_{ph} + k_{c}^{2} \right)^{2}} \left( 1 - \frac{2\left( k_{di}^{2} + B_{d}^{-1}\alpha_{i}(2x-1)C_{ph} \right)}{k_{di}^{2} + \alpha_{i}xC_{ph} + k_{c}^{2}} \right) \Big|_{k_{di}^{2} = k_{di0}^{2}} = 0$$
(3.27)

одержуємо умову досягнення екстремуму швидкості розпухання

$$k_{di0}^{2} = k_{c}^{2} - \frac{2}{B_{d}} \alpha_{i} (2x - 1)C_{ph} + \alpha_{i} x C_{ph}.$$
(3.28)

У максимумі друга похідна (3.26) повинна бути від'ємною

$$\frac{d^2}{d(k_{di}^2)^2} \left(\frac{dS}{d\phi}\right)\Big|_{k_{di}^2 = k_{di0}^2} = , \qquad (3.29)$$

$$= \frac{2B_d k_c^2}{\left(k_{di}^2 + \alpha_i x C_{ph} + k_c^2\right)^3} \left(\frac{k_{di}^2 + B_d^{-1} \alpha_i (2x - 1)C_p h}{k_{di}^2 + \alpha_i x C_{ph} + k_c^2} - 1\right) \bigg|_{k_{di}^2 = k_{di0}^2} < 0$$

що дає нерівність

$$k_{c}^{2}\Big|_{k_{di}^{2}=k_{di0}^{2}} > \left[\left(\frac{2}{B_{d}}-1\right)x - \frac{1}{B_{d}}\right]\alpha_{i}C_{ph}.$$
(3.30)

Використовуючи визначення потужності стоку пор і концентрацію фазонів (3.23), одержуємо співвідношення для середнього радіуса пори, при якому досягається локальний максимум швидкості розпухання

$$r_{c}|_{k_{di}^{2}=k_{di0}^{2}} > \left[ \left( \frac{2}{B_{d}} - 1 \right) x - \frac{1}{B_{d}} \right] \frac{\beta \pi r_{pi}}{4N_{c}} \left( \frac{r_{L}}{b} \right)^{2}.$$
(3.31)

Після підстановки (3.26) в (3.28) одержуємо максимальну швидкість розпухання

$$\left(\frac{dS}{d\phi}\right)_{\max} = \frac{B_d}{4} \left(1 + \left(1 + x\left(B_d - 2\right)\right)\frac{\alpha_i C_{ph}}{B_d k_c^2}\right)^{-1}.$$
(3.32)

Щоб одержати залежність швидкості розпухання від радіусу дислокаційної петлі, підставляємо визначення концентрації фазонів (3.23) в (3.32)

$$\left(\frac{dS}{d\phi}\right)_{\max} = \frac{B_d}{4} \left(1 + \left(1 + x\left(B_d - 2\right)\right)\frac{\alpha_i\beta\pi r_L^2 bn_L}{B_d k_c^2}\right)^{-1}.$$
(3.33)

Повчально порівняти швидкості розпухання в різних випадках, а саме коли  $C_{pi} = C_{pv}$ , або без фазонів, у максимумі швидкості розпухання. Спочатку, коли всі фазони зосереджені в середині петлі в дископодібному нейтральному стоці, концентрації і- та v-фазонів дорівнюють одна одній, тобто  $x_0 = 1/2$ , то швидкість розпухання (3.33) має вигляд

$$\left(\frac{dS}{d\phi}\right)_{\max}\Big|_{x=\frac{1}{2}} = \frac{B_d}{4} \left(1 + \frac{\alpha_i \beta \pi r_L^2 b}{2k_c^2 V_R}\right)^{-1}.$$
(3.34)

Порівнюючи (3.33) і (3.34) видно, що швидкість розпухання квазікристала з розподіленими фазонами (3.33) є більшою, ніж швидкість розпухання у випадку, коли фазони нерухливі й перебувають у дислокаційній петлі (3.34).

Коли фазони відсутні,  $C_p = 0$ , рівняння (3.34) переходить у відомий вираз для максимальної швидкості розпухання в кристалах

$$\left(\frac{dS}{d\phi}\right)_{\max}^{\text{crystal}} = \frac{B_d}{4}.$$
(3.35)

Наявність фазонів у квазікристалах пригамовує потоки ТД до стоків. Тому швидкість розпухання квазікристалів є меншою, ніж кристалів.

### 3.6. Аналітична оцінка швидкості розпухання квазікристала з нейтральними стоками

Розглянемо квазікристал, що містить дислокаційні петлі, пори, рухливі фазони й фазонні стоки при досить високій температурі, коли рекомбінацією ТД можна знехтувати. Стаціонарні рівняння балансу ТД і фазонів мають вигляд

$$K - \left(k_{di}^2 + k_n^2 + k_c^2 + \alpha_i C_{pv}\right) D_i C_i = 0, \qquad (3.36)$$

$$K - \left(k_{\rm dv}^2 + k_n^2 + k_c^2 + \alpha_v C_{pi}\right) D_v C_v = 0, \qquad (3.37)$$

$$K_{pi} - \alpha_v D_v C_{pi} C_v + \alpha_i D_i C_{pv} C_i - \kappa_{pi}^2 D_p C_{pi} = 0, \qquad (3.38)$$

$$K_{pv} - \alpha_i C_{pv} D_i C_i + \alpha_i C_{pv} D_i C_i - \kappa_{pv}^2 D_p C_{pv} = 0, \qquad (3.39)$$

де  $\kappa_{pi}^2, \kappa_{pv}^2$  є потужності стоків фазонів, а потужності нейтральних стоків складають  $k_n^2$ .

Швидкість розпухання є пропорційною потоку надлишкових вакансій на пори

$$\frac{dS}{d\phi} = k_c^2 \frac{\left(k_{di}^2 + \alpha_i C_{pv}\right) - \left(k_{dv}^2 + \alpha_v C_{pi}\right)}{\left(k_{di}^2 + k_n^2 + k_c^2 + \alpha_i C_{pv}\right) \left(k_{dv}^2 + k_n^2 + k_c^2 + \alpha_v C_{pi}\right)}.$$
(3.40)

Оцінимо швидкість розпухання в наближенні

$$\alpha_v D_v C_{pi} C_v = \alpha_i D_i C_{pv} C_i, \qquad (3.41)$$

яке справедливо за умови

$$D_i C_i \cong D_v C_v \Longrightarrow \frac{\kappa_p^2}{\alpha_p} D_p.$$
(3.42)

Для швидкості розпухання одержуємо

$$\frac{dS}{d\phi} = k_c^2 \frac{k_{di}^2 - k_{dv}^2}{\left(k_{di}^2 + k_n^2 + k_c^2 + \alpha_i C_{pv}\right) \left(k_{dv}^2 + k_n^2 + k_c^2\right)},$$
(3.43)

де

$$\alpha_i C_{pv} = \frac{2\pi r_{pi}}{\omega} \frac{K_{pi} + K_{pv}}{\kappa_p^2 D_p}.$$
(3.44)

Швидкість генерації фазонів знаходиться з балансу дефектів (див. також рівняння (3.10))

$$K_{pi} + K_{pv} = k_{di}^2 D_i C_i - k_{dv}^2 D_v C_v.$$
(3.45)

Вирази (3.43) і (3.45) визначають співвідношення швидкості розпухання й швидкості генерації фазонів. У кристалах, де фазони відсутні, швидкість розпухання є

$$\frac{dS^{cr}}{d\phi} = k_c^2 \frac{k_{di}^2 - k_{dv}^2}{\left(k_{di}^2 + k_n^2 + k_c^2\right)\left(k_{dv}^2 + k_n^2 + k_c^2\right)}.$$
(3.46)

Таким чином, відношення швидкостей розпухання в кристалі (3.46) і квазікристалі (3.43) має вигляд

$$\xi = \frac{dS^{cr}}{d\phi} \left/ \frac{dS^{qcr}}{d\phi} = \frac{k_{di}^2 + k_n^2 + k_c^2 + k_{pi}^2}{k_{di}^2 + k_n^2 + k_c^2} = 1 + \frac{k_{pi}^2}{\left(k_{di}^2 + k_n^2 + k_c^2\right)}.$$
(3.47)

Видно, що *ξ* > 1, тому швидкість розпухання в кристалі є завжди більшою, ніж у квазікристалі. Чим більше концентрація фазонів у квазікристалі, - тим менше його швидкість розпухання.

### 3.7. Вплив фазонів на розпухання квазікристалів: чисельні розрахунки

У цьому розділі рівняння (3.2)-(3.12) розв'язуються чисельно, щоб продемонструвати вплив фазонів на швидкість розпухання квазікристалу. Ми використовуємо код RADAU, розроблений для розв'язку жорстких диференційно-алгебраїчних систем рівнянь [84]. Числовий алгоритм базується на неявному методі Рунге-Кутта змінного порядку з адаптивним контролем часового кроку.

Параметр	Значення
Температура, К	900
Швидкість набору дози, $K$ , зна/с	10 <sup>-7</sup>
Атомний об'єм, $\omega$ , нм <sup>3</sup>	0.015
Вектор Бюргерса, b, нм	0.25
Коефіцієнт дифузії вакансій, $D_v$ , м²/с	$3x10^{-6} \exp(-0.7 \text{eV}/k_B T)$
Коефіцієнт дифузії МА, $D_i$ , м²/с	$3 \mathrm{x} 10^{-7} \exp \left(-0.15 \mathrm{eV} / k_B T\right)$
Коефіцієнт дифузії фазонів, $D_p$ , м²/с	$3 \mathrm{x} 10^{-6} \exp \left(- E_{pm} / k_B T\right)$
Частка вузлів решітки, що перетворені на фазони, $\beta$	0.25
Ефективність поглинання МА дислокаціями, $Z_L^i$	3
Ефективність поглинання вакансій, $Z_L^v$	3.3
Константи швидкості рекомбінації, $\alpha_{iv}$ і $\alpha_{i,v}$ , м <sup>-2</sup>	$4.3 \times 10^{20}$
Густина петель, $n_L$ , м <sup>-3</sup>	10 <sup>21</sup>
Початковий радіус петель, $r_L$ , нм	5
Густина пор, $n_C$ , м <sup>-3</sup>	$5x10^{21}$
Початковий радіус пор, $r_C$ , нм	2.5

Таблиця 3.1. Параметри, використані для чисельних розрахунків.

Ми не розглядаємо стадію зародження пор. Припускається, що спочатку матеріал містить невеликі дислокаційні петлі та пори. Параметри матеріалу, використані для розрахунків, наведені в табл. 3.1. Результати розрахунків представлені на рис. 3.3-3.5.



Рис. 3.3. Залежність радіусу петлі (а), радіусу пори (б) від дози. Суцільні криві відповідають кристалу, а штрихові криві - квазікристалу з різними енергіями міграції фазонів  $E_{\rm pm}$ .

Швидкість росту петель і пор, а також швидкість розпухання сильно залежать від дифузійності фазонів. Ми знайшли, що розпухання квазікристалу з енергією міграції фазонів  $E_{pm} \leq 2 \,\mathrm{eV}$  дуже близьке до розпухання кристала ( $\beta = 0$ ).



Рис. 3.4. Вплив фазонів на розпухання квазікристалів. Залежність швидкості розпухання (а) і розпухання (б) від дози. Суцільні криві відповідають кристалу, а штрихові криві - квазікристалу з різними енергіями міграції фазонів  $E_{\rm pm}$ .

У цьому випадку фазони ефективно видаляються з системи шляхом дифузії та поглинання порами. Слід зазначити, що в розглянутій тут моделі пори вважаються ідеальними стоками для фазонів, тобто концентрація фазонів контролюється дифузією. У загальному випадку квазікристалу атомна кінетика перебудови фазонів на поверхні пори може відігравати роль обмежувального фактора для поглинання фазонів.



Рис. 3.5. Дозні залежності потужностей стоку петель і пор в кристалі (а). Дозні залежності потужностей стоку петель, пор і фазонів з високою енергією міграції  $E_{pm} = 3$  еВ в квазікристалі (б).

Це означає, що концентрації фазонів можуть бути вищими, ніж передбачається в дифузійній моделі.

За високої енергії міграції фазонів  $E_{pm}$  = 3 еВ потужність стоків фазонів  $\alpha_i C_{pv}$  і  $\alpha_v C_{pi}$  перевищує потужність стоків петель та пор (рис. 3.5б). Це є причиною дуже низької швидкості розпухання квазікристалу (рис. 3.4).

Однак при високих енергіях міграції фазонів наближення однорідного розподілу фазонів може бути недійсним при досить низьких температурах. Наприклад, при  $E_{pm}$  =3 eB й T = 900 K, характерна доза дифузії фазонів до стоків становить приблизно  $K(k_p^2 D_p)^{-1}$  ~10 зна.

Розв'язуючи квазістаціонарні рівняння (3.2)-(3.5) за умови високої потужності стоків фазонів  $\alpha_i C_{pv} \sim \alpha_v C_{pi} >> k_{i,v}^2$  можна знайти критерій низької дифузійної рухливості фазонів, який необхідний для низької швидкості розпухання квазікристалів

$$D_p \ll \frac{\alpha_i \beta}{2} \frac{\rho Z_L^i B_d K}{k_C^2 k_i^4}.$$
(3.48)

### Висновки до розділу 3

Було розглянуто радіаційне вакансійне розпухання квазікристалів. Подібно до кристалічних матеріалів, преференс дислокацій до МА є необхідною передумовою для вакансійного розпухання квазікристалів. На відміну від кристалічних матеріалів, в квазікристалах кінетика дислокації пов'язана з утворенням дефектів, властивих квазікристалам, – фазонів вакансійного і межвузлового типів. Фазони грають роль центрів рекомбінації змінної полярності для радіаційно-індукованих вакансій і МА.

Показано, що в квазікристалах з дислокаційними петлями генерація тільки фазонів не може призводити до розпухання. Вакансійні пори, присутні або що зародилися в квазікристалі, які є стоками для залишкових вакансій, дозволяють дислокаціям рости і генерувати фазони. Внесок фазонів в кінетику ТД і розпухання квазікристалів сильно залежить від рухливості фазонів. При низьких температурах, коли фазони нерухомі, швидкісні рівняння для ТД мають ту ж форму, що і для кристалів, але зі зміненою силою стоку дислокаційних петель з фазонними кільцями всередині.

За більш високих температур фазони стають рухливими і можуть поглинатися порами. Показано, що швидкість вакансійного розпухання в квазікристалах є нижчою, ніж в кристалах. Швидкість зростання петель і пор, а також швидкість розпухання сильно залежать від концентрації фазонів, яка контролюється дифузією фазонів до стоків.

Матеріали цього розділу опубліковані в роботі [5].

#### РОЗДІЛ 4

## ЕФЕКТИВНІСТЬ ПОГЛИНАННЯ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ ДИСЛОКАЦІЙНИМИ ПЕТЛЯМИ В КВАЗІКРИСТАЛАХ ПІД ОПРОМІНЕННЯМ

Розглянуто вакансійне розпухання квазікристалів під дією опромінення. Як раніше. квазікристалах еволюція лислокацій зазначалось V супроводжується утворенням фазонів, які представляють собою локалізовані топологічні дефекти вакансійного і межвузлового типів. При помірних температурах коефіцієнт дифузії фазонів невеликий, що призводить до утворення фазонних слідів в формі кілець всередині дислокаційних петель. Для визначення ефективності поглинання точкових дефектів дислокаційної петлею з додатковим кільцем фазонів розв'язується стаціонарна дрейфоводифузійна задача в тороїдальній геометрії методом послідовної релаксації SOR. Показано, що фазони істотно знижують преференс дислокацій до міжвузлових атомів. Тому очікується, що квазікристалічні матеріали будуть проявляти підвищений опір вакансійному розпуханню.

### 4.1. Вступ

Як зазначалось раніше, під опроміненням в квазікристалах фазони утворюються при зростанні дислокаційних петель завдяки преференсу дислокацій до нерівноважних МА [5]. Фазонні дефекти вакансійного і межвузлового типів утворюють кластери всередині дислокаційних петель, які можуть поступово розчинятися за рахунок термічно активованої дифузії фазонів. Енергія активації міграції фазонів досить велика, до 4 еВ [70]. При помірних температурах фазони залишаються всередині дислокаційної петлі, утворюючи слід фазонів, оскільки термічно активована дифузія фазонів сповільнюється [4].

У розділі 3 розглядалося розпухання квазікристалів з рухомими фазонами [5], які рівномірно дисперговані в об'ємі квазікристалу. Було показано, що радіаційно-індуковані вакансії і МА взаємодіють з фазонами. Після поглинання вакансій фазони міжвузлового типу перетворюються на фазони вакансійного типу і навпаки. Іншими словами, фазони є центрами рекомбінації змінної полярності для ТД. З цієї причини швидкість розпухання квазікристалів нижче, ніж кристалів.

У цьому розділі ми розглядаємо квазікристал під опроміненням при температурах, коли фазони залишаються всередині дислокаційної петлі, що утворює фазонний слід. У спрощеній моделі фазонний слід можна розглядати як ідеальний стік для ТД у формі кільця. Це припущення здається доцільним у випадку високої концентрації фазонів, коли міжфазонні відстані короткі і захоплений ТД може легко мігрувати до найближчих фазонних дефектів до остаточного поглинання ядром дислокаційної петлі. У цій моделі ми аналітично знайдемо ефективності поглинання дислокаційною петлею ТД та преференс дислокаційної петлі.

У цьому розділі ми сформулюємо систему рівнянь швидкостей реакцій для ТД в матеріалі з дислокаційними петлями і порами різних розмірів. Потім розраховуються ефективності поглинання ТД дислокаційної петлею в тороідальному резервуарі, як функції радіуса петлі. Додержуючись Ву та ін. [85], задача дифузії ТД в полі напругі дислокаційної петлі розв'язується чисельно за допомогою методу скінченних різниць, відомого як метод послідовної релаксації SOR (successive overrelaxation method) [86], заснований на ітераційному методі Лібмана [87]. Результати розрахунків дозволяють оцінити (і) вплив фазонного сліду на ефективності поглинання ТД і (іі) порівняти опір розпуханню квазікристалів з кристалічними матеріалами.

### 4.2. Аналітична модель

У періодичному кристалі зростаюча дислокаційна петля оточена майже ідеальним бездефектним кристалом. Отже, в кристалі петля поглинає точкові дефекти опромінення лише на самій лінії дислокації. На відміну від періодичних кристалів, в квазікристалах відсутня трансляційна інваріантність. Отже, зсув двох частин квазікристалу призводить до невідповідностей квазікристалічної решітки, які називають фазонами.

Ми розглядаємо спрощену модель кругової дислокаційної петлі під опроміненням, що містить фазонний диск, який виступає нейтральним стоком. Передбачається, що температура є достатньо низькою, щоб фазонний диск був стабільним в об'ємі.

Брейлсфорд і Буллоу [88] розробили теорію потужності стоку та преференсу дислокаційної петлі в кристалах. Для того, щоб бути застосовною для квазікристалів, цю модель слід модифікувати з урахуванням фазонних дефектів дислокаційної петлі.



Рис. 4.1. Дислокаційна петля з фазонним слідом всередині.

Тороїдальну дислокаційну петлю радіуса  $r_1$  та її локальне оточення, що не має інших стоків (рис. 4.1), розглядаємо в ефективному середовищі. Ми припускаємо, що існує незначна ймовірність того, що будь-який інший стік знаходиться в межах сферичного об'єму радіуса  $r_1$ , що містить петлю та фазонний диск.

$$\Delta C = 0, \tag{4.1}$$

з граничними умовами

$$C(L) = \overline{C},\tag{4.2}$$

$$\left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_{S_{\alpha}} = \frac{C_1 v_n}{D}, \tag{4.3}$$

де L є розмір зразка,  $C_1 v_n$  є густина потоку ТД на поверхні петлі,  $v_n$  є швидкість переносу на поверхні  $S_s$  тороїдального стоку петлі та  $C_1$  є концентрація на поверхні. Ця задача має електростатичну аналогію: ми можемо прийняти C за аналог потенціалу і  $\frac{\partial C}{\partial n}$  як значення електричного поля на поверхні металевого тора. Таким чином, аналог електричного поля є  $\frac{C_1 v_n}{D}$ , де  $C_1$  виконує роль електричного потенціалу поверхні. Він також дорівнює  $4\pi$  помноженому на величину поверхневого заряду,

$$\frac{C_1 v_n}{D} = 4\pi \frac{\overline{C}C_s}{S_s},\tag{4.4}$$

де  $C_s$  є ємність стоку.

Потужність стоку визначається наступним чином:

$$k^2 = \frac{N_{\rm sinks}}{V} \frac{J}{D\overline{C}},\tag{4.5}$$

де  $N_{sinks}$  є кількість стоків в об'ємі V,  $J = C_1 v_n S_s$  є загальний потік ТД на поверхні стоку. Підставляючи  $C_1 v_n$  з (4.4) у (4.5), отримуємо

$$k^2 = \frac{N_{\text{sinks}}}{V} 4\pi C_s. \tag{4.6}$$

Ємності фазонного диску і тору дислокаційної петлі відповідно

$$C_{\rm ph} = \frac{2}{\pi} r_{\rm l}, \qquad C_{\rm d} = \frac{\pi r_{\rm l}}{\ln(8r_{\rm l}/r_{\rm 0})}.$$
 (4.7)

Поєднуючи (4.6) та (4.24), отримуємо потужність поглинання дислокаційної петлі та фазонного диску

$$k_{\rm d}^2 = \rho_{\rm d} \frac{2\pi}{\ln(8r_1/r_0)}, \qquad k_{\rm ph}^2 = \frac{N_{\rm d}}{V} 8r_1,$$
 (4.8)

де  $\rho_{\rm d}$  є густина петель дислокації,  $r_0$  є радіус захоплення ТД.

Ще однією важливою концепцією теорії реакцій точкових дефектів у матеріалах під опроміненням, є ефективність поглинання стоку точкових дефектів:

$$Z^{v,i} = \frac{k^2}{\rho_{\rm s}},\tag{4.9}$$

де  $\rho_{\rm s}$  є густина стоків.

Для квазікристалів дифузійну задачу можна розв'язати аналітично в наближенні простої суперпозиції стоків. Очевидно, взаємодією стоків у цьому наближенні нехтують. У цьому випадку ефективності поглинання дислокаційною петлею вакансій та МА є

$$Z_{\rm qcr}^{v,i} = \frac{2\pi}{\ln\left(8r_1/r_0^{v,i}\right)} + \frac{4}{\pi}.$$
(4.10)

Преференс визначає швидкість розпухання матеріалу, що опромінюється. Преференс дислокації визначається формулою (3.22).

Залежності ефективності поглинання дислокаційною петлею та преференсу петлі від радіуса петлі (в одиницях значення вектора Бюргерса, b) для кристалів та квазікристалів розраховуються з використанням експериментально отриманих параметрів для квазікристалу Al-Pd-Mn (див. рис. 4.2 і 4.3). Припускаємо, що радіус захоплення вакансій  $r_{0v} = b$ , і відповідно для MA  $r_{0i} = 3b$ .



Рис. 4.2. Ефективності поглинання дислокаційною петлею вакансій і МА в кристалі ( $Z^v, Z^i$ ) і в квазікристалі ( $Z^{v}_{qer}, Z^i_{qer}$ ) як функції радіуса петлі.

Як і очікувалося, ефективність поглинання точкових дефектів у квазікристалі є більшою, ніж у кристалі, через більшу концентрацію стоків. З іншого боку, преференс дислокаційної петлі щодо МА є нижчим у квазікристалах і він суттєво залежить від радіуса петлі.



Рис. 4.3. Преференс дислокаційної петлі в кристалі (*B*) і в квазікристалі (*B*<sub>qcr</sub>) як функції радіуса петлі.

### 4.3. Дислокаційна петля і хмара фазонів

Зі збільшенням температури фазони дифундують із петлі в об'єм, в результаті формуючи хмару навколо петлі. Розглянемо петлю в сферичному об'ємі радіуса *R* без стоків (рис. 4.4).

Об'єм сферичної області, що припадає на одну петлю є

$$V_R = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{1}{n_L}.$$

Потужність стоку диска фазонів складає

$$k_{\rm disc}^2 = 8n_L r_L. \tag{4.11}$$



Рис. 4.4. Диск фазонів в області без стоків радіуса *R* навколо дислокаційної петлі.

Кількість фазонів у диску може бути апроксимовано кількістю атомних вузлів у диску

$$N_{ph} = \frac{\beta \pi r_L^2 b}{\omega},\tag{4.12}$$

де  $\Omega$  - атомний об'єм, b - вектор Бюргерса петлі, що складає величину біля сталої ґратки,  $0 < \beta \le 1$ . Припускаючи, що фазони не поглинаються стоками, одержуємо концентрацію фазонів після розсіювання в об'ємі, що доводиться на одну петлю

$$C_{ph} = \frac{N_{ph}\Omega}{V_R} = \beta \pi r_L^2 b n_L.$$
(4.13)

Повна концентрація фазонів - це сума концентрацій фазонних квазівакансій і квазіміжвузлових атомів:

$$C_{ph} = C_{pi} + C_{pv}. (4.14)$$

Потужність стоку фазонів щодо реакції з МА й вакансіями

$$k_{pi}^{2} = \frac{4\pi r_{pi}}{\omega} C_{pv}, \qquad k_{pv}^{2} = \frac{4\pi r_{pv}}{\omega} C_{pi}, \qquad (4.15)$$

де  $r_{pi}$  й  $r_{pv}$  - радіуси захоплення ТД фазонами відповідних типів. Порівнюючи вирази (4.11) і (4.16) легко переконатися, що потужність стоку фазонів, розподілених у квазікристалі, більше, ніж потужність стоку диска нерухливих фазонів.

$$\frac{k_{\rm disc}^2}{k_{pv}^2} \approx \frac{2b}{\pi^2 r_L}.$$
(4.16)

### 4.4. Рівняння балансу ТД

В квазікристалах при опроміненні поведінка дислокацій як стоку для ТД відрізняється від поведінки в кристалі. Експериментально встановлено, що дислокація, що рухається/ковзає в квазікристалі, створює фазонний дефект, який поступово розпливається за рахунок термічно активованої дифузії [2,10]. Аналогічним чином при опроміненні зростання дислокаційних петель супроводжується утворенням фазонів всередині кожної дислокаційної петлі. У кристалічних матеріалах вакансії і міжвузлові атоми, що створюються опроміненням, рекомбінують один з одним і мігрують на стоки. Рівняння балансу (або рівняння швидкостей реакцій) для ТД в кристалах добре розроблені і вивчені [81]. Аналогічні рівняння можуть бути застосовані для опису кінетики ТД в квазікристалах під опроміненням з урахуванням впливу фазонів. При низьких і високих температурах фазонні дефекти по-різному взаємодіють з регулярними ТД. В цьому розділі ми розглянемо квазікристал, що містить міжвузлові дислокаційні петлі та пори під опроміненням, що створює вакансії та МА. Відомо, що преференс дислокацій до поглинання МА призводить до накопичення надлишку вакансій [82], які утворюють вакансійні пори. Ми припускаємо, що термічно активована дифузія фазонів уповільнена. У цьому випадку фазони локалізуються в середині дислокаційної петлі у вигляді кільцеподібного скупчення. Коли фазони нерухомі, рівняння балансу для ТД мають такий самий вигляд, як і для кристалів; однак потужність стоків дислокаційних петель змінюється за наявністю фазонних кілець усередині петель. Для простоти ми не розглядаємо стадію зародження пор і дислокаційних петель. Тепловим випаровуванням вакансій із дислокацій та пор ми нехтуємо.

З урахуванням цих припущень, у рамках стандартної моделі ефективного середовища [82] рівняння для концентрацій вакансій та міжвузлових атомів записуються як

$$\frac{dC_i}{dt} = K - \alpha_{iv}C_iC_v - k_i^2 D_iC_i, \qquad (4.17)$$

$$\frac{dC_v}{dt} = K - \alpha_{iv}C_iC_v - k_v^2 D_v C_v, \qquad (4.18)$$

де K є швидкість генерації вільно мігруючих регулярних ТД,  $\alpha_{iv}$  є константа швидкості рекомбінації

$$\alpha_{iv} = \frac{4\pi r_{iv}}{\omega} \left( D_i + D_v \right), \tag{4.19}$$

де  $r_{iv}$  є радіус спонтанної рекомбінації вакансії і МА.

Повні потужності стоків  $k_{i,v}^2$  складаються з потужності стоків дислокацій і пор

$$k_n^2 = k_{dn}^2 + k_C^2, \quad n = i, v.$$
(4.20)

Потужність стоків дислокацій має вигляд

$$k_{dn}^{2} = Z_{\text{str},n} \rho_{str} + 2\pi \int Z_{n}(r) r f(r) dr , \qquad (4.21)$$

де  $Z_{\text{str},m}$  і  $\rho_{str}$  – ефективність поглинання і густина прямолінійних дислокацій, f(r) – функція розподілу петель по розмірах, нормалізована до загальної густини петель,  $Z_n(r)$  – ефективність поглинання ТД петлями радіуса r,  $k_C^2$  – потужність стоків пор. Далі ми припускаємо, що пори мають однакову ефективність поглинання вакансій і МА, тобто не мають преференсу

$$k_C^2 = 4\pi \int rF(r)dr \,, \tag{4.22}$$

де F(r) – функція розподілу пор по розмірах, нормалізована до загальної густини пор.

Детальні розрахунки ефективності поглинання ТД дислокаційної петлі з кільцем фазонів будуть представлені в наступному підрозділі. Швидкість зростання дислокаційної петлі радіуса  $r_L$  визначається різницею потоків міжвузлових атомів і вакансій [82].

$$\frac{dr_L}{dt} = \frac{1}{b} \left( Z_i D_i C_i - Z_v D_v C_v \right), \tag{4.23}$$
де b – вектор Бюргерса. У квазістаціонарному стані концентрації дефектів пов'язані між собою  $k_v^2 D_v C_v = k_i^2 D_i C_i$ . Отже, швидкість росту дислокаційної петлі може бути представлена у вигляді

$$\frac{dr_{L}}{dt} = \frac{1}{b} \Big[ Z_{i}(r_{L}) D_{i}C_{i} - Z_{v}(r_{L}) D_{v}C_{v} \Big] = \frac{1}{b} \Big( B_{L}(r_{L}) - B_{mean} \Big) Z_{i}(r_{L}) D_{v}C_{v} , \qquad (4.24)$$

де  $B_L = 1 - Z_v / Z_i$  – преференс петлі радіуса  $r_L$ ,  $B_{mean}$  – середньозважений преференс усіх типів стоків.

$$B_{\text{mean}} = \frac{k_i^2 - k_v^2}{k_i^2} = \frac{1}{k_i^2} \Big( B_{\text{str}} Z_{\text{str},i} \rho_{str} + 2\pi \int B_L(r) Z_i(r) r f(r) dr \Big).$$
(4.25)

де  $B_{\text{str}} = 1 - Z_{\text{str},v} / Z_{\text{str},i}$  – преференс прямолінійних дислокацій.

Швидкість росту пори радіуса *R* пропорційна середньому преференсу системи

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{R} \left( D_v C_v - D_i C_i \right) = \frac{D_v C_v}{R} B_{\text{mean}} \,. \tag{4.26}$$

Швидкість розпухання представляється як швидкість зростання об'єму всіх пор в одиниці об'єму матеріалу

$$\frac{dS}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\Delta V}{V} \right) = B_{\text{mean}} k_C^2 D_v C_v.$$
(4.27)

де V<sub>0</sub> – початковий об'єм зразка.

Квазістаціонарна концентрація вакансій знаходиться з рівнянь (4.17) і (4.18)

$$C_{v} = \frac{D_{i}k_{i}^{2}}{2\alpha_{iv}} \left( \sqrt{1 + \frac{4K\alpha_{iv}}{D_{i}D_{v}k_{i}^{2}k_{v}^{2}}} - 1 \right).$$
(4.28)

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

$$S' = \frac{dS}{d\phi} = \eta B_{\text{mean}} \frac{k_C^2}{k_v^2},\tag{4.29}$$

де  $\phi = K_0 t$  є доза опромінення згідно NRT стандарту [89],  $K_0$  є швидкість створення зміщень згідно NRT стандарту [89],  $\eta$  є частка вільно мігруючих регулярних ТД [90].

Рівняння (4.24)-(4.28) показують, що залежність ефективностей поглинання ТД і преференсу петлі від розміру суттєво впливає на еволюцію ансамблю петель і пор. Середній преференс є важливою характеристикою мікроструктури матеріалу, яка контролює швидкість розпухання.

# 4.5. Ефективності поглинання дислокаційних петель

У цьому розділі ми обчислюємо ефективність поглинання вакансій та МА дислокацією у квазікристалі. Розглядається міграція ТД на дислокаційну петлю, що оточена областю впливу, вільною від інших стоків, і яка вбудована в ефективне середовище. Ефективне середовище, описане рівняннями (4.1) і (4.2), відіграє роль резервуару, що підтримується при сталій середній концентрації ТД  $\overline{C}$ . Точковий дефект моделюється як центр дилатації з релаксаційним об'ємом  $\Omega = \Omega_{v,i}$ , що відрізняється для вакансій та МА. Зовнішня границя області впливу обирається у вигляді тороїдальної поверхні, коаксіальної з внутрішній границею, яка є поверхнею захоплення, що обмежує дислокаційне ядро. Тут ми розглядаємо зростаючу міжвузлову

дислокаційну петлю з фазонним слідом всередині петлі. Для того, щоб оцінити максимальний вплив фазонів на ефективність поглинання, припускається, що фазонний слід утворює кільце шириною *d*, який поглинає ТД, подібно до ядра дислокації (рис. 4.5).



Рис. 4.5. Область впливу дислокаційної петлі радіуса *R*, малий радіус тора відповідає половині середньої відстані між стоками в поглинаючому середовищі, *d* – ширина кільця фазонів.

Для чисельних розрахунків тороїдальна конфігурація зручна для будьякого розміру дислокаційної петлі. При  $R \ll L$ , тобто для малої петлі, область впливу близька до сфери; при  $R \gg L$  область впливу перетворюється на циліндр, що охоплює прямолінійну дислокацію [91]. Через симетрію обертання щодо осі z відповідну крайову задачу можна сформулювати як 2D стаціонарну дифузійно-дрейфову задачу (див. рис. 4.6)



Рис. 4.6. Розміщення системи координат, що використовується для тороїдального резервуара: (а) R < L і (б) R > L.

$$div\mathbf{j} = 0, \quad \mathbf{j} = -D\nabla C - \frac{DC}{k_B T} \nabla U, \qquad (4.30)$$

де **ј** – потік дефектів на петлю, *D* – коефіцієнт дифузії, *U* – енергія взаємодії ТД із пружним полем дислокаційної петлі [92],

$$U(r,z) = -\frac{\mu\Omega(1+\nu)}{3\pi(1-\nu)} \frac{b}{\sqrt{(R+r)^2 + z^2}} \left[ K(k) + E(k) \frac{R^2 - r^2 - z^2}{(R-r)^2 + z^2} \right],$$
 (4.31)

$$k^{2} = \frac{4rR}{\left(R+r\right)^{2} + z^{2}},\tag{4.32}$$

де  $\mu$  – модуль зсуву, b – вектор Бюргерса,  $\Omega$  – релаксаційний об'єм,  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона, K(k) і E(k) є повні еліптичні інтеграли першого і другого роду.

На внутрішній границі області впливу – на дислокаційному ядрі та кільці фазонів – концентрація ТД вважається рівною нулю, тобто ми нехтуємо термічним випаровуванням ТД із дислокаційних петель.

Ефективність поглинання визначається на одиницю довжини дислокаційної лінії [82]

$$Z = \frac{J}{2\pi R D \overline{C}},\tag{4.33}$$

де  $J = \oint \mathbf{j} d\mathbf{S}$  – повний потік ТД на петлю.

Слідом за [85,91] визначаємо нову змінну

$$\psi(r,z) = \frac{C(r,z)}{\overline{C}} \exp\left[\frac{U(r,z)}{k_B T}\right]$$
(4.34)

і перетворюємо рівняння (4.30) до форми

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{\partial E}{\partial r}\right) \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\partial E}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \qquad (4.35)$$

де  $E(r,z) = U(r,z)/k_B T$ .

Граничні умови такі

$$\psi = \exp(E)$$
 на зовнішній границі  $\sigma$ , (4.36)

$$\psi = 0$$
 на внутрішній границі  $\tau$ . (4.37)

Додаткові граничні умови задаються нульовим потоком через лінії симетрії  $o_r$  та  $o_z$  (рис. 4.6)

$$\partial \psi / \partial r = 0$$
 на лінії  $o_z$ , (4.38)

$$\partial \psi / \partial z = 0$$
 на лінії  $o_r$ . (4.39)

Ефективність поглинання виражається через нову змінну  $\psi$  як

$$Z = -\frac{1}{2\pi R} \oint_{s} e^{-E} \nabla \psi d\mathbf{S}, \qquad (4.40)$$

де інтеграція здійснюється по будь-якій замкненій поверхні, яка оточує ядро петлі. Крайова задача, задана рівняннями (4.35)-(4.39) розв'язується чисельно. З цією метою рівняння (4.35) перетворюється на набір алгебраїчних рівнянь із використанням консервативної центральної скінченної схеми диференціювання на прямокутній сітці (*i*,*j*)

$$a_{i,j}^{(1)}\psi_{i+1,j} + a_{i,j}^{(2)}\psi_{i-1,j} + a_{i,j}^{(3)}\psi_{i,j} + a_{i,j}^{(4)}\psi_{i,j+1} + a_{i,j}^{(5)}\psi_{i,j-1} = 0, \qquad (4.41)$$

де  $\boldsymbol{\psi}_{i,j} = \boldsymbol{\psi}(r_{\!i}, \boldsymbol{z}_{j})$ , а положення точок сітки є

$$r_i = \begin{cases} i\Delta r & R < L \text{ мала петля} \\ R - L + i\Delta r & R < L \text{ велика петля} \end{cases} \quad i = 0, \dots, i_{\max}, \quad (4.42)$$

$$z_j = j\Delta z, \quad j = 0, ..., j_{\text{max}}.$$
 (4.43)

Максимальна кількість точок  $(i_{\max}, j_{\max})$  вздовж напрямків r та z визначається розміром обчислювальної області та кроками сітки  $\Delta r$  і  $\Delta z$ . В рівнянні (4.41) коефіцієнти задаються формулами

$$a^{(1)} = \begin{cases} 2 - \frac{\partial E}{\partial r} \frac{\Delta r}{2}, & r = 0\\ 1 + \left(\frac{1}{r} - \frac{\partial E}{\partial r}\right) \frac{\Delta r}{2}, & r > 0 \end{cases}$$
(4.44)

$$a^{(2)} = \begin{cases} 2 + \frac{\partial E}{\partial r} \frac{\Delta r}{2}, & r = 0\\ 1 - \left(\frac{1}{r} - \frac{\partial E}{\partial r}\right) \frac{\Delta r}{2}, & r > 0 \end{cases},$$
(4.45)

$$a^{(3)} = \begin{cases} -2\left(2 + \frac{\Delta r^2}{\Delta z^2}\right), & r = 0\\ -2\left(1 + \frac{\Delta r^2}{\Delta z^2}\right), & r > 0 \end{cases}$$
(4.46)

$$a^{(4)} = \frac{\Delta r^2}{\Delta z^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial E}{\partial z} \frac{\Delta r^2}{\Delta z}$$
(4.47)

$$a^{(5)} = \frac{\Delta r^2}{\Delta z^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial E}{\partial z} \frac{\Delta r^2}{\Delta z}.$$
(4.48)

Тут індекси і та ј коефіцієнтів  $a_{i,j}$  опущені для стислості.

Безрозмірна енергія взаємодії та її похідні залежать від змінної k, яка є функцією  $r_i$  і  $z_j$  ( $0 \le k < 1$ ). Щоб заощадити час розв'язку задачі, ми заздалегідь будуємо таблиці пошуку повних еліптичних інтегралів у дискретному наборі k-точок (як правило, більше ніж  $10^3$  точок), використовуючи нормальну форму Лежандра. Для проміжних значень ми використовуємо двійковий розшук таблиць пошуку та лінійну інтерполяцію. Рівняння (4.23) розв'язується методом послідовної релаксації (SOR) [71] з використанням ітераційної схеми

$$\psi_{i,j}^{(n+1)} = \psi_{i,j}^{(n)} - \frac{\gamma}{a_{i,j}^{(3)}} R_{i,j}^{(n+1)}, \qquad (4.49)$$

де n нумерує ітерації,  $\gamma$  – параметр надрелаксації і  $R_{i,j}^{(n+1)}$  – вектор залишків

$$R_{i,j}^{(n+1)} = a_{i,j}^{(1)} \psi_{i+1,j}^{(n)} + a_{i,j}^{(2)} \psi_{i-1,j}^{(n+1)} + a_{i,j}^{(3)} \psi_{i,j}^{(n)} + a_{i,j}^{(4)} \psi_{i,j+1}^{(n)} + a_{i,j}^{(5)} \psi_{i,j-1}^{(n+1)}$$
(4.50)

При  $\gamma = 1$  рівняння (4.49) еквівалентно рівнянню (4.41). На прямокутній сітці SOR найшвидше збігається, коли  $\gamma$  присвоюється оптимальне значення [93]

$$\gamma = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \chi^2}},\tag{4.51}$$

де

$$\chi = \frac{\cos(\pi/i_{\text{max}}) + (\Delta r/\Delta z)^2 \cos(\pi/j_{\text{max}})}{1 + (\Delta r/\Delta z)^2}.$$
(4.52)

В нашій задачі область інтегрування не є прямокутною; однак значення параметра надрелаксаціі, задане рівнянням (4.51), дає хорошу збіжність ітераційного алгоритму.

Сітка сканується в порядку збільшення *i* та *j*. Послідовність обчислення за рівнянням (4.49) починається з нижнього лівого кута, рухається вгору до досягнення верхньої межі, а потім переходить до нижньої частини наступної вертикальної лінії праворуч. Цей процес повторюється, поки не буде отримано нове значення  $\psi$  в останній внутрішній точці у верхньому правому куті. Нові обчислені значення  $\psi_{i,j}$  автоматично використовуються в подальших обчисленнях під час наступного сканування сітки.

Відповідно до [85] умовою стабільності кінцево-різницевого розв'язку є те, що коефіцієнти у залишковому векторі змінюються повільно, тобто відстані між точками сітки  $\Delta r$  і  $\Delta z$  повинні бути малими

$$\left|\frac{1}{r} - \frac{\partial E}{\partial r}\right| \frac{\Delta r}{2} < 1$$

$$\frac{\partial E}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} < 1$$
(4.53)

Ці умови накладають обмеження на вибір радіуса дислокаційного ядра, поблизу якого енергія взаємодії має великі градієнти. У наших розрахунках ми використовуємо однакові кроки сітки  $\Delta r$  і  $\Delta z$  вздовж осей r і z.

Початкове наближення щодо розв'язку  $\psi^{(0)}$  дорівнює нулю у всіх внутрішніх точках сітки, крім тих, що прописані на границях  $\sigma$  і  $\tau$  (рис. 4.6).

Для задоволення граничних умов на лініях симетрії  $o_r$  та  $o_z$  (рис. 4.6), тобто нульового потоку через лінії симетрії, ми вводимо фіктивні точки

$$\psi_{-1,j}^{(n)} = \psi_{1,j}^{(n)},$$

$$\psi_{i,-1}^{(n)} = \psi_{i,1}^{(n)}.$$
(4.54)

Норма вектора залишків  $R_{i,j}^{(n+1)}$  використовується як критерій припинення ітерацій. Довільна поверхня *S* у вигляді прямокутника обертання вибирається в області впливу для обчислення ефективності поглинання (4.22).

# 4.6. Результати розрахунків

У розрахунках використані параметри, типові для сплаву на основі Al-Pd-Mn: модуль зсуву  $\mu = 70$  ГПа, коефіцієнт Пуассона  $\nu = 0,27$ , середній атомний об'єм  $\omega = 0,015$  нм<sup>-3</sup>, релаксаційний об'єм вакансій  $\Omega_v = -0,5\omega$  і MA  $\Omega_i = \omega$ , радіус ядра дислокації 2*b*, крок сітки  $\Delta r = \Delta z = 0,2b$ . Петлі у квазікристалі мають фазонне кільце шириною 25*b*, 50*b* і 150*b*. Якщо радіус петлі менше, ніж ширина кільця, то кільце заповнює всю петлю. Температура, прийнята в розрахунках – 600 К. Відносна точність розрахунків 10<sup>-4</sup>.

На рис. 4.7 показано порівняння ефективностей поглинання вакансій і МА дислокаційними петлями без фазонного кільця (кристал) і з фазонним кільцем (квазікристал).



Рис. 4.7. Ефективності поглинання ТД дислокаційною петлею в кристалі і квазікристалі. Радіус петлі і розмір області впливу вимірюються в одиницях вектора Бюргерса.

В області малих розмірів петель ефективності поглинання не залежать від типу матеріалу. Це пов'язано з тим, що для петель малого розміру ефективний радіус пружної взаємодії з ТД перевищує радіус дислокаційної петлі. Тобто такі петлі поводяться як 3-вимірні стоки, внутрішня структура яких не впливає на повний потік ТД. При збільшенні розміру ефективність поглинання петель із фазонним кільцем є вищою, ніж петель без кільця. При подальшому збільшенні радіуса петлі ефективності поглинання виходять на насичення, тобто прямують до ефективностей поглинання прямолінійної крайової дислокації.

Рис. 4.8 демонструє, що ефективність поглинання ТД залежить від середньої відстані між стоками, тобто від густини стоків, або, в термінах ефективного середовища, від повної потужності стоків.



Рис. 4.8. Залежність ефективності поглинання МА від радіуса петлі. Розрахунки проведені для двох розмірів області впливу, які вказані на графіку.



Рис. 4.9. Порівняння залежності преференсу дислокаційної петлі від радіуса в кристалі і квазікристалі. Фазонне кільце d = 25b, 50b, 150b.

На рис. 4.9 показано залежність преференсу петлі  $B_L = 1 - Z_{Lv}/Z_{Li}$  від радіуса. Видно, що преференс дислокаційних петель із фазонним кільцем є меншим, ніж у звичайному кристалі. Причому преференс петлі суттєво

залежить від ширини фазонного кільця. В той же час відстань між стоками не дуже впливає на залежність преференсу петлі від радіуса (рис. 4.10).



Рис. 4.10. Залежність преференсу петлі від радіуса та розміру області впливу L = 200b, 500*b*.

Згідно з нашими розрахунками, в квазікристалі преференс дислокаційних петель є меншим, ніж у звичайному кристалі, отже при однакових початкових умовах та однаковій функції розподілу дислокаційних петель швидкість росту пор і відповідно розпухання квазікристалів будуть меншими, ніж у кристалічних матеріалах.

Використовуючи (4.29), оцінимо зменшення швидкості розпухання квазікристала в порівнянні з кристалом на ранній стадії пороутворення (перехідна стадія або інкубаційний період) і на пізній стадії, коли швидкість розпухання багатьох реакторних сталей і сплавів прямує до насичення [94-96]  $S'_{max} \sim 1\%/3$ на.

У табл. 4.1 наведені параметри для оцінки  $S'_{Quasi}/S'_{Cryst}$  – зменшення швидкості розпухання квазікристала в порівнянні зі швидкістю розпухання кристалічного матеріалу з такими ж параметрами.

	<b>TT</b>	•	•	
	Параметри п		IIIDIA TROCTI	noonwyauug
$1 a 0 \pi \mu \mu \pi + 1$ .	$11apamerph \Delta$	ил оцики	шындкостт	розпулаппл.
1	1 I '	, ,	/ 1	1 2

Параметр	Значення
Вектор Бюргерса, нм	0,25
Частка вільно мігруючих регулярних ТД, $\eta$	0,25
Густина прямолінійних дислокацій, $ ho_{str}$ , м <sup>-2</sup>	$1 x 10^{14}$
Потужність стоків прямолінійних дислокацій, $Z_{str,v} \rho_{str}$ , м <sup>-2</sup>	$1,7x10^{14}$
Повна густина петель, $n_L$ , м <sup>-3</sup>	10 <sup>21</sup>
Потужність стоків петель, $k_{Lv}^2$ , м <sup>-2</sup>	2x10 <sup>14</sup>
Потужність стоків пор, $k_C^2$ , м <sup>-2</sup>	3,6x10 <sup>14</sup>

Функція розподілу петель за розмірами обрана у вигляді розподілу Гаусса (4.55) (див. рис. 4.11)

$$f(r) = 3.4 \times 10^{28} \,\mathrm{m}^{-4} \exp\left(-\frac{(r-15\,\mathrm{Hm})^2}{400\,\mathrm{Hm}^2}\right). \tag{4.55}$$

Ми розглядаємо достатньо високі температури, коли ТД переважно поглинаються стоками, а об'ємною рекомбінацією ТД можна знехтувати. На ранній перехідній стадії пороутворення основними стоками ТД є прямолінійні дислокації і великі міжвузлові дислокаційні петлі (в моделі даного розділу такими вважаються найбільші петлі r = 2000b з відповідними ефективностями поглинання).



Рис. 4.11. Функція розподілу петель за розмірами (рівняння (4.55) без передекспоненційного множника).

$$Z_{str,n}\rho_{str} >> k_{C}^{2} + 2\pi \int Z_{n}(r)rf(r)dr$$
. (4.56)

На цій стадії швидкість розпухання є малою

$$S' = \gamma B_{mean} \frac{k_C^2}{Z_{str,v} \rho_{str}} \approx \gamma B_{str} \frac{k_C^2}{Z_{str,v} \rho_{str}} \ll \gamma B_{str}.$$
(4.57)

Відношення  $S'_{Quasi}/S'_{Cryst} = B^{Quasi}_{str}/B^{Cryst}_{str}$  (рис. 4.12) дає уявлення про збільшення інкубаційного періоду розпухання в порівнянні з кристалічним матеріалом.



Рис. 4.12. Вплив розміру фазонного кільця на зменшення швидкості розпухання квазікристала в порівнянні з кристалічним матеріалом. Пунктирна лінія відповідає початковій стадії опромінення, потужності стоку пор і дислокацій складають 10% від відповідних потужностей на пізній стадії (див. табл. 4.1). Суцільна лінія – відношення максимальних швидкостей розпухання квазікристала і кристалічного матеріалу.

Максимальна швидкість розпухання матеріалу досягається на пізній стадії, коли потужності стоків пор і дислокацій приблизно однакові  $k_{dv}^2 \approx k_C^2$ 

$$S' = \frac{dS}{d\phi} = \gamma B_{\text{mean}} \frac{k_C^2}{k_{dv}^2 + k_C^2} \sim 0.5 \gamma B_{\text{mean}}.$$
 (4.58)

На рис. 4.12 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.

# Висновки до розділу 4

Розглянуто радіаційно-індуковане вакансійне розпухання квазікристалів. Подібно до кристалічних матеріалів, дислокації переважно поглинають МА, що є причиною вакансійного розпухання квазікристалів. У квазікристалах дислокацій супроводжується утворенням фазонів: локалізованих pyx топологічних дефектів вакансійного і міжвузлового типів. Оскільки дифузійна рухливість фазонів є значно нижчою, ніж вакансій, при невисоких температурах вони утворюють фазонний слід всередині дислокаційних петель. Чисельним методом знайдено ефективність поглинання точкових дефектів дислокаційною петлею з комплементарним кільцем фазонів. Показано, що фазони суттєво зменшують преференс дислокацій до міжвузлових атомів, внаслідок чого квазікристалічні матеріали повинні мати вакансійного підвищену стійкість розпухання. підвищенні ДО При температури фазони стають рухливими, ширина кільця фазонів зменшується. Але і в цьому випадку також очікується значне уповільнення розпухання квазікристалів під опроміненням (розділ 3), завдяки тому, що рухливі фазони грають роль рекомбінаційних центрів для вакансій і МА.

Таким чином, генерація фазонів дислокацією, що переповзає, призводить до пригамування вакансійного розпухання квазікристалів.

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:

- 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 дислокацій вирази рухливості В ікосаедричному для 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 коректний опис рухливості дислокації дають 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-Мп 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.

- 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 и 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 дислокацій до міжвузлових атомів.

 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- 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={<u>mfint.imp.kiev.ua/ru/browse.html</u>}.
- 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.
- 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={<u>https://periodicals.karazin.ua/eejp/article/view/13514</u>}.
- 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.
- 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.
- 6. Лазарєва Г.М., Бакай О.С. Рухливість дислокацій в ікосаедричних квазікристалах. *IX Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини*: Збірка тез (Львів, Україна, 28-29 травня 2009). Львів, 2009. С. 20.
- 7. Lazareva G.N., Bakai A.S. The influence of irradiation on dislocation motion in quasicrystals. XIX International Conference on Physics of Radiation Phenomena and Radiation Material Science. Труды XIX Международной конференции по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению (Алушта, Украина, 6-11 сентября 2010). Харьков, 2010. С. 37.
- 8. 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

- 9. Лазарєва Г.М., Туркін А.А., Бакай О. С. Преференс дислокаційних петель в квазікристалах під опроміненням. XII Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: Збірка тез (Львів, Україна, 30 травня-1 червня 2012). Львів, 2012. С. 37.
- 10. Лазарева Г.Н., Туркин А.А., Бакай А.С. О механизме подавления распухания в квазикристаллах. XX International Conference on Physics of Radiation Phenomena and Radiation Material Science. Труды XX Международной конференции по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению (Алушта, Украина, 10-15 сентября 2012). Харьков. 2012. С. 84.
- 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.
- 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.
- Levine D., Steinhardt P.J. Quasicrystals: a New Class of Ordered Structures. *Phys. Rev. Lett.* 1984, V. 53. P. 2477–2480.
- Братковский А.М., Данилов Ю.А., Кузнецов Г.И. Квазикристаллы. *ФММ*.
   1989. Т. 68. Вып. 6. С. 1045-1095.
- 15. Гратиа Д. Квазикристаллы. *УФН*. 1988. Т. 156. Вып. 2. С. 347-364.
- Носкова Н.И., Ярцев С.В. Квазикристаллы и квазикристаллические фазы.
   ФММ. 1994. Т. 78. Вып. 6. С. 34-38.
- 17. Janot C. Quasicrystals: a primer. Oxford University Press Inc. New York. 1994
- Socolar J., Lubensky T.C., Steinhardt P. Phonons, phasons, and dislocations in quasicrystals. *Phys. Rev. B.* 1986. V. 34. №5. P. 3345-3360.

- Widom M. Discussion of phasons in quasicrystals and their dynamics. *Phil.* Mag. 2008. V. 88. № 13-15. P. 2339–2350.
- Henley C.L., de Boissieu M., Steurer W. Discussion on clusters, phasons and quasicrystal stabilisation. *Philosophical Magazine*. 2006. V. 86. № 6-8. P. 1131-1151.
- Ishii Y. Phason softening and structural transitions in icosahedral quasicrystals. *Phys. Rev. B.* 1992. V. 45. P. 5228-5239.
- de Boissieu M., Boudard M., Hennion B. et al. Diffuse scattering and phason elasticity in the AlPdMn icosahedral phase. *Phys. Rev. Lett.* 1995. V. 75. P. 89-92.
- Wollgarten M., Beyss M., Urban K. et al. Direct evidence for plastic deformation of quasicrystals by means of a dislocation mechanism. *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 71. P. 549-552.
- Mompiou 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.
- Rosenfeld R., Feuerbacher M., Baufeld B. et al. Study of plastically deformed icosahedral Al[sbnd]Pd[sbnd]Mn single quasicrystals by transmission electron microscopy. *Philosophical Magazine Letters*. 1995. V. 72. Issue 6. P. 375-384.
- 26. Caillard D., Vanderschaeve G., Bresson L., Gratias D. Transmission electron microscopy study of dislocations and extended defects in as-grown icosahedral Al-Pd-Mn single grains. *Philosophical Magazine A*. 2000. V. 80. № 1. P. 237-253.
- Mompiou F., Bresson L., Cordier P., Caillard D. Dislocation climb and lowtemperature plasticity of an Al–Pd–Mn quasicrystal. *Phil. Mag.* 2003. V. 83. Issue 27. P. 3133-3157.
- 28. Feuerbacher M., Haggen M., Urban K. Defects in complex intermetallics and quasicrystals. *Mater. Sci. Eng. A.* 2004. V. 375-377: P. 84-89.

- 29. Feuerbacher M. Dislocations in icosahedral quasicrystals. *Chem. Soc. Rev.* 2012. V. 41. P. 6745-6759.
- Mompiou F., Caillard D. Dislocations and mechanical properties of icosahedral quasicrystals. *Comptes Rendus Physique*. 2014. V. 15. P. 82-89.
- 31.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.
- 32. Ханнанов Ш.Х. Динамика упругих и фазонных полей в квазикристаллах.
   ФММ. 2002. Т. 93. № 5. С. 5-12.
- Chatterjee R., Kanjilal A., Dunlop A. The Effect of Swift Heavy Ion Irradiation on Quasicrystals. *MRS Online Proceedings Library*. 2000. V. 643. P. 63.
- 34. Sato K., Baier F., Sprengel W., Schaefer H.-E. Vacancies in quasicrystals: Effects of electron irradiation. *Phys. Rev. B.* 2002. V. 66. P. 092201.
- 35. Kanjillala A., Dutt R.N. et al. Effect of irradiation by 100 MeV<sup>58</sup>Ni<sup>+8</sup> ion on quasicrystalline thin films. *Vacuum*. 2003. V. 68. Issue 4. P. 349-355.
- Mechler S., Abromeit C. et al. Phase transformation quasicrystalline– amorphous in Zr–Ti–Ni–Cu by swift heavy ions. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B.* 2006. V. 245. P. 133-146.
- 37. Urban K., Bauer M., Csanady A., Mayer J. Phase transitions between quasicrystalline, crystalline and amorphous phases in alloys. *Materials Science Forum*. 1987. V. 22-24. P. 517-538.
- Zhang H., Urban K. Swift-heavy-ion irradiation on Al<sub>62</sub>Cu<sub>25.5</sub>Fe<sub>12.5</sub> quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.* 1992. V. 66. №4. P. 209-215.
- Chatterjee R., Kanjilal A. Swift-heavy-ion irradiation on Al<sub>62</sub>Cu<sub>25.5</sub>Fe<sub>12.5</sub> quasicrystals. J. Non-Cryst. Solids. 2004. V. 334–335. P. 431-435.
- Wang R., Yang X., Takahashi H., Ohnuki S. Phase transformation induced by irradiating an Al<sub>62</sub>Cu<sub>25.5</sub>Fe<sub>12.5</sub> icosahedral quasicrystal. *J. Phys.: Condens. Matter.* 1995. V. 7. P. 2105-2114.

- 41. Ажажа В.М., Лавриненко С.Д., Лонин Ю.Ф. и др. Изменение характеристик структуры быстрозакаленных лент Ti<sub>41.5</sub>Zr<sub>41.5</sub>Ni<sub>17</sub> и Ti<sub>41.5</sub>Hf<sub>41.5</sub>Ni<sub>17</sub> при радиационном воздействии. *Вопросы атомной науки и техники*. 2011. Т. 2. С. 33-38
- 42. Reyes-Gasga J. et al. Electron-beam-induced structure transformation of the quasicrystalline phases of the alloy. *Radiat. Phys. Chem.* 1995. V. 45. № 2. P. 283-291.
- Coddens G., Bellissent R., Calvayrac Y., Ambroise J. P. Evidence for Phason Hopping in Icosahedral AlFeCu Quasi-Crystals. *Europhys. Lett.* 1991. V. 16. P. 271-276.
- 44. Zupanic F. et al. Quasicrystalline phase in melt-spun Al–Mn–Be ribbons. J. *Alloys and Compounds*. 2008. V. 452. Issue 2. P. 343-347.
- 45. Markoli B., Bončina T., Zupanič F. Behaviour of a quasicrystalline strengthened Al-alloy during compression testing. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik.* 2012. V. 43. P. 340-344.
- 46. Singh A., Watanabe M., Kato A., Tsai A.P. Strengthening in magnesium alloys by icosahedral phase. *Science and Technology of Advanced Materials*. 2005.
  V. 6. Issue 8. P. 895-901.
- 47. Liu P., Hultin Stigenberg A., Nilsson J.-O., Isothermally formed quasicrystalline precipitates used for strengthening in a new maraging stainless steel. *Scripta Metallurgica et Materialia*. 1994. V. 31. P. 249-254.
- 48. Мильман Ю.В., Чугунова С.И., Гончарова И.В. Характеристика пластичности, определяемая методом индентирования. *Вопросы атомной науки и техники*. 2011. № 4. С. 182-187.
- Milman Yu.V., Lotsko D.V., Dub S.N., Ustinov A.I., Polishchuk S.S., Ulshin S.V. Mechanical properties of quasicrystalline Al–Cu–Fe coatings with submicron-sized grains. *Surf. Coat. Technol.* 2007. V. 201. P. 5937-5943.
- 50. Мильман Ю.В., Чугунова С.И., Голубенко А.А., Ефимов Н.А., Самелюк А.В. Исследование влияния температуры на механическое поведение

квазикристаллов системы Al-Cu-Fe методом индентирования. Электронная микроскопия и прочность материалов. 2009. № 16. С. 60-67.

- 51. Azhazha V., Dub S., Khadzhay G., Merisov B., Malykhin S., Pugachov A. Structure and peculiarities of nanodeformation in Ti–Zr–Ni quasi-crystals, *Philos. Magazine*. 2004. V. 84. № 10. P. 983-990.
- Azhazha V.M., Borisova S.S., Dub S.N. et al. Mechanical behavior of Ti-Zr-Ni quasicrystals during nanoindentation. *Phys. Solid State*. 2005. V. 47. P. 2262– 2267
- 53. Ажажа В.М., Бовда А.М., Лавриненко С.Д., Онищенко Л.В., Малыхин С.В., Пугачёв А.Т., Решетняк М.В., Стеценко А.Н., Савицкий Б.А. Синтез и стабильность Ti-Zr-Ni-квазикристаллов. Вопросы атомной науки и техники. 2007. № 4. С. 82-87.
- 54. Malykhin S. Residual stresses in Ti<sub>41.5</sub>Zr<sub>41.5</sub>Ni<sub>17</sub> quasi-crystalline ribbons measured by X-ray diffraction. *Functional Materials*. 2007. V. 14. № 2. P. 223-227.
- 55. Kim Y.K., Kim W. T., Kim D. H. Quasicrystal-reinforced Mg alloys. Sci. Technol. Adv. Mater. 2014. V. 15. P. 024801.
- 56. Dubois J.-M. Quasicrystals. J. Phys.: Condens. Matter. 2001. V. 13. P. 7753-7762.
- 57. Quasicrystals: An Introduction to Structure, Physical Properties and Applications. Eds: Suck J-B., Schreiber M., Häussler P. Springer, Berlin, 2004.
- 58. Lubensky T.C., Ramaswamy S., Toner J. Hydrodynamics of icosahedral quasicrystals. *Phys. Rev. B.* 1985. V. 32. P. 7444–7452.
- 59. Peach M., Koehler J.S. The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them. *Phys. Rev.* V. 80. №3. P. 436-439.
- 60. Li X.-F., Fan T.-Y. A straight dislocation in one-dimensional hexagonal quasicrystals. *phys. stat. sol. b.* 1999. V. 212. P. 19-26.

- Blüher R., Scharwaechter P., Frank W., Kronmüller H. First Low-Temperature Radiotracer Studies of Diffusion in Icosahedral Quasicrystals. *Phys. Rev. Lett.* 1998. V. 80. № 5. P. 1014-1017.
- 62. Shall P., Feuerbacher M., Bartsch M. et al. Dislocation density evolution upon plastic deformation of Al-Pd-Mn single quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.* 1999.
  V. 79. № 10. P. 785-796.
- 63. Okada J.T. et al. Dynamics in the melt of an icosahedral Al<sub>72</sub>Pd<sub>20</sub>Mn<sub>8</sub> quasicrystal. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2006. V. 18. P. L613-L618.
- 64. Feuerbacher M. Mechanical spectroscopy of Al-Pd-Mn single quasicrystals. *Phil. Mag. Lett.* 1996. V. 74. P. 81-88.
- 65. Evans A.G., Rawlings R.D. The thermally activated deformation of crystalline materials. *physica status solidi A*, 1969. Vol. 34. P. 9-31.
- 66. Messerschmidt U., Bartsch M., Geyer B. et al. Plastic deformation of icosahedral Al-Pd-Mn single quasicrystals II. Interpretation of the experimental results. *Phil.Mag. A*. 2000. V. 80. № 5. P. 1165-1181.
- Martin P.C., Parodi O., Pershan P.S. Unified hydrodynamic theory for crystals, liquid crystals, and normal fluids. *Phys. Rev. A.* 1972. V. 6. № 6. P. 2401-2420.
- 68. Landau L.D., Lifshitz E.M. Theory of Elasticity. Oxford: Pergamon Press. 1986. 195 p.
- 69. Landau L.D., Lifshitz E.M. Fluid Mechanics. Oxford: Pergamon Press. 1982.
   554 p.
- Feuerbacher M., Caillard D. Dynamics of phason diffusion in icosahedral Al– Pd–Mn quasicrystals. *Acta Mat.* 2006. V. 54. P. 3233-3240.
- 71. Schaaf G. Numerical simulation of dislocation motion in icosahedral quasicrystals. Ph.D Thesis. Institut für Theoretische und Angewandte Physik Universität Stuttgart. 2002.
- 72. Бакай А.С. О радиационной стойкости мелкодисперсных и аморфных материалов. Письма в ЖТФ. 1983. Т. 9. № 24. С. 1477–1479.

- Bakai A.S. The polycluster concept of amorphous solids; Bakai, A. S. *Topics in Applied Physics*. V. 72. Berlin: Springer-Verlag. 1994.
- 74. Abe E., Pennycook S.J., Tsai A.P. Direct observation of a local thermal vibration anomaly in a quasicrystal. *Nature*. 2003. V. 421. P. 347-350.
- Collins R. Statistics of a simplified two-dimensional Bernal liquid. *Proc. Phys.* Soc. 1964. V. 83. P. 553-565.
- 76. Widom M. Bethe ansatz solution of the square-triangle random tiling model. *Phys. Rev. Lett.* 1993. V. 70. № 14. P. 2094-2098.
- 77. Oxborrow M., Henley C.L. Random square-triangle tilings: A model for twelvefold-symmetric quasicrystals. *Phys. Rev. B.* 1993. V. 48. № 10. P. 6966-6999.
- Steurer W., Deloudi S. Crystallography of Quasicrystals. Concepts, Methods and Structure. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. 2009. 384 p.
- 79. Somigliana C. Sulla teoria delle distorsioni elastiche. *Nuovo Cim.* 1916. V. 11.
  P. 177–192. https://doi.org/10.1007/BF02960970.
- 80. Hirth J.P., Ed. Dislocations in solids. V. 14. Amsterdam: North-Holland. 2008.
- Golubov S.I., Barashev A.V., Stoller R.E. Radiation Damage Theory. Comprehensive Nuclear Materials. Konings R. Ed. Vol. 1. Elsevier Press. 2012. P. 357–391.
- Was G.S. Fundamentals of Radiation Materials Science. Springer-Verlag. 2007. 827 p.
- 83. Francoual S., Livet F., de Boissieu M. et al. Dynamics of long-wavelength phason fluctuations in the i-Al-Pd-Mn quasicrystal. *Phil. Mag.* 2006. V. 86. №6–8. P. 1029-1035.
- 84. Hairer E., Wanner G. Solving ordinary differential equations II. Stiff and differential-algebraic problems. Springer Series in Comput. Mathematics. V. 14. Springer-Verlag. 1996. 614 p.

- 85. Woo C.H., Liu W.S., Wuschke M.S. A finite-difference calculation of point defect migration into a dislocation loop. AECL-6441. Whiteshell Nuclear Research Establishment Pinawa, Manitoba ROE 1LO. 1979.
- Biringen S., Chow Ch.-Y. An introduction to computational fluid mechanics by example. John Wiley&Sons. 2011. 310 p.
- Smith G.D. Numerical Solution of Partial Differential Equations. Oxford University Press. 1965. 351 p.
- 88. Brailsford A.D., Bullough R. The theory of sink strengths. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical sciences.* 1981. V. 302. № 1465. P. 87-137.
- 89. 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.
- 90. Sublet J.-Ch., Bondarenko I.P., Bonny G., Conlin J. L. et al. Neutron-induced damage simulations: Beyond defect production cross-section, displacement per atom and iron-based metric. *Eur. Phys. J. Plus.* 2019. V. 134 (7). P. 350.
- 91. Dubinko V.I., Abyzov A.S., Turkin A.A. Numerical evaluation of the dislocation loop bias. *J. Nucl. Mat.* 2005. V. 336. P. 11-21.
- Bastecka J., Kroupa F. Elastic interaction of dislocation loops and point defects *Czech. J. Phys.* 1964. V. 14. P. 443-453.
- Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P. Numerical recipes 3rd Edition: The art of scientific computing. Cambridge University Press. 2007. 1256 p.
- 94. Garner F.A. Recent insights on the swelling and creep of irradiated austenitic alloys. J. Nucl. Mater. 1984. V. 122-123. P. 459-471.
- 95. Garner F.A. Irradiation performance of cladding and structural steels in liquid metal reactors. in: Materials Science and Technology: A Comprehensive Treatment. 1994. Vol. 10A. VCH Publishers. P. 419-543.
- 96. Garner F.A. Radiation damage in austenitic steels. Comprehensive Nuclear Materials; Konings R. Ed. Vol. 4. Elsevier Press. 2012. P. 33-95.

#### ДОДАТОК А.

# СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

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

- 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={<u>mfint.imp.kiev.ua/ru/browse.html</u>}.
- 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) <u>DOI: 10.1088/0953-8984/21/29/295401</u>.
- 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={<u>https://periodicals.karazin.ua/eejp/article/view/13514</u>}.
- 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.
- 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.

## Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

- Лазарєва Г.М., Бакай О. С. Рухливість дислокацій в ікосаедричних квазікристалах. ІХ Всеукраїнська школа-семінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: Збірка тез (Львів, Україна, 28-29 травня 2009). Львів, 2009. С. 20.
- Lazareva G.N., Bakai A.S. The influence of irradiation on dislocation motion in quasicrystals. XIX International Conference on Physics of Radiation Phenomena and Radiation Material Science. Труды XIX Международной

конференции по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению (Алушта, Украина, 6-11 сентября 2010). Харьков, 2010. С 37.

- Lazareva G.N., Bakai A.S. Dislocation mobility in icosahedral quasicrystals. XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography. Program book of abstracts (Madrid, Spain, 22-30 August 2011) Acta Cryst. A67 (2011) C625
- Лазарєва Г.М., Туркін А.А., Бакай О. С. Преференс дислокаційних петель в квазікристалах під опроміненням. XII Всеукраїнська школасемінар і конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини: Збірка тез (Львів, Україна, 30 травня-1 червня 2012). Львів, 2012. С. 37.
- 10. Лазарева Г.Н., Туркин А.А., Бакай А.С. О механизме подавления распухания в квазикристаллах. XX International Conference on Physics of Radiation Phenomena and Radiation Material Science. Труды XX Международной конференции по физике радиационных явлений и радиационному материаловедению (Алушта, Украина, 10-15 сентября 2012). Харьков, 2012. С. 84.
- 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.