

PACS numbers: 05.45.-a, 05.65.+b, 61.72.Bb, 61.72.Cc, 61.72.Yx, 61.80.Az

Радиационные дефекты в твёрдых телах

А. И. Олемской, И. А. Шуда*

*Институт прикладной физики НАН Украины,
ул. Петропавловская, 58,
40030 Сумы, Украина
*Сумский государственный университет,
ул. Римского-Корсакова, 2,
40007 Сумы, Украина*

Изложено описание дефектной структуры радиационных материалов на микро-, мезо- и макроуровнях. На первом из них ядра дефектов представлены ансамблем потенциальных рельефов, реализующихся в сильнонеравновесном состоянии кристалла. С учетом иерархической связи между различными структурными уровнями описана эволюция дефектной структуры, обладающей произвольным числом таких уровней. Определена новая характеристика структуры — сложность, характеризующая меру беспорядка иерархически соподчинённого статистического ансамбля.

Викладено опис дефектної структури радіаційних матеріалів на мікро-, мезо- і макрорівнях. На першому з них ядра дефектів представлено ансамблем потенціальних рельєфів, що реалізуються у дуженерівноважнім стані кристалу. З урахуванням ієрархічного зв'язку між різними структурними рівнями описано еволюцію дефектної структури, яка має довільне число таких рівнів. Визначено нову характеристику структури — складність, що характеризує міру безладу ієрархічно підпорядкованого статистичного ансамблю.

Description of defect structure of radiation materials is given on micro-, meso- and macrolevels. On the first of these levels, nuclei of defects are presented with help of ensemble of potential reliefs, which are realized in strong-nonequilibrium crystal state. Taking into account hierarchical coupling between different structure levels, evolution of defect structure with arbitrary number of such levels is studied. A new characteristic of crystal structure is defined to be a complexity determining a measure of disorder in hierarchically constrained ensemble.

Ключевые слова: дефектная структура, потенциальный рельеф, иерархическая связь, сложность.

(Получено 16 декабря 2008 г.)

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение
 2. Теоретико-полевое представление одиночных дефектов
 3. Коллективное поведение ансамбля дефектов
 4. Сложность иерархического ансамбля дефектов
- Цитированная литература

1. ВВЕДЕНИЕ

Длительное радиационное воздействие на кристаллические материалы приводит к образованию и эволюции дефектной структуры, представленной вакансиями, междоузельными атомами, дислокациями, границами раздела, порами, включениями различных фаз, зёрнами и т.д. Обычно при описании такой структуры ограничиваются рассмотрением одной её стороны, — например, описывают геометрические модели одиночных дефектов. При всей своей необходимости такое представление является весьма фрагментарным, поскольку дефектная структура радиационных материалов настолько сложна, что требует представления на нескольких структурных уровнях. Мы ограничимся рассмотрением трёх таких уровней, которые различаются, прежде всего, масштабами распределения дефектов: на микроскопическом уровне представлено строение одиночных дефектов, на мезоуровне описывается коллективное поведение дефектов, приводящее к зарождению нового уровня, и на макроуровне даётся статистическое описание иерархически соподчинённого ансамбля дефектов.

В отличие от геометрического представления решение первой из указанных задач достигается на основе концепции перестраиваемого потенциального рельефа (раздел 2). В рамках теоретико-полевой схемы такое представление приводит к разделению полного потенциала упругопластического поля на материальную компоненту, связанную с распределением атомов, и калибровочную составляющую, представляющую упругое поле.

Раздел 3 посвящён развитию синергетической картины эволюции однородного ансамбля дефектов кристаллического строения на мезоскопическом уровне. Отличительная особенность материалов, подверженных длительному радиационному воздействию, состоит в достижении столь высоких плотностей дефектов, что между ними устанавливается иерархическая связь. При этом дефекты нижнего структурного уровня автолокализовано образу-

ют структурный элемент более высокого уровня (например, кластеризация вакансий приводит к образованию дислокационных петель, а скопление дислокаций — к появлению границ разориентировки и дисклинаций). Такое отличие в коллективном поведении дефектов от обычной картины фазовых превращений обусловлено сильной неравновесностью ансамбля дефектов, в связи с чем следует использовать методы синергетики. В настоящее время эти методы с успехом прилагаются к решению различных задач физики, химии, экономики, биологии, социологии и других наук.

Характерная особенность иерархических дефектных структур состоит в том, что они определяются такой зависимостью термодинамического потенциала от конфигурационных координат, на которой дефектам нижнего структурного уровня отвечают более узкие и мелкие минимумы, чем супердефектам верхних уровней. В результате иерархическая соподчиненность приводит к фрактальной структуре распределения термодинамического потенциала в конфигурационном пространстве. Учёт этой структуры достигается, с одной стороны, рассмотрением пространства с ультраметрической топологией, а с другой требует использования теории фрактальных множеств. Учёт указанных особенностей в разделе 4 позволяет характеризовать развитую дефектную структуру радиационных материалов величиной сложности (complexity), которая по аналогии с энтропией характеризует беспорядок в распределении дефектов в иерархическом ансамбле.

2. ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ОДИНОЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

Мы основываемся на том факте, что ядро дефекта является автолокализованной областью, обладающей повышенной пластичностью, а его периферия представляет кристалл, слабо деформированный упругим полем ядра. В рамках такого представления основная проблема сводится к выяснению физической природы параметра порядка, величина которого определяет различие между упругим и пластическим состояниями. Для определения этого параметра рассмотрим потенциальный рельеф (не путать с потенциалом межатомного взаимодействия!), в котором движется пробная частица под действием атомов кристалла. На основе такого потенциала принято моделировать колебания атомов кристалла и элементарные акты флуктуационного преодоления барьера в процессе диффузии (см. рис. 1, *a*). Однако при этом молчаливо подразумевается, что кристалл является идеальной упругой средой, потенциальный рельеф которой не изменяется со временем. В действительности кроме упругого состояния реализуются зоны пластического течения типа полосы Людерса, где перескок

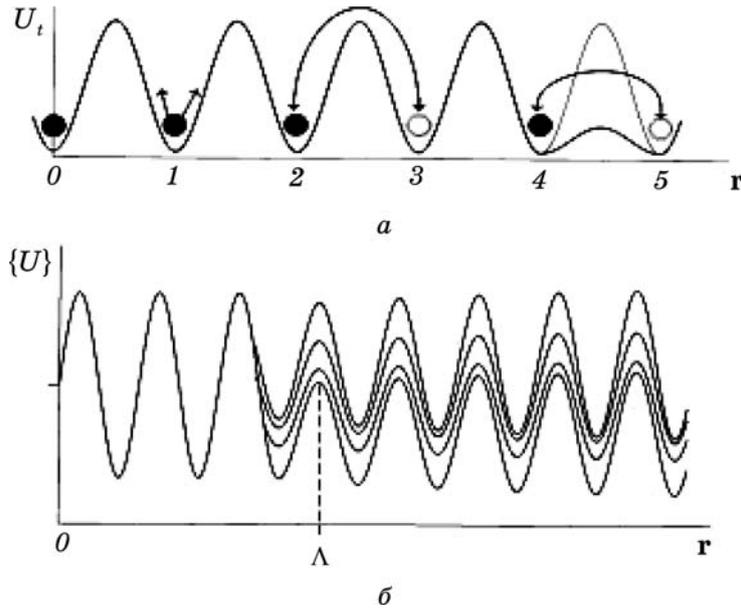


Рис. 1. (а) Элементарные акты колебаний (узел 1), диффузионного перескока (узлы 2, 3) и пластического течения (узлы 4, 5); (б) ансамбль потенциальных рельефов (область $r \ll \Lambda$ отвечает упругому состоянию, область $r > \Lambda$ — пластическому).

атома из одного узла в другой осуществляется безактивационно — за счёт флуктуационного проседания потенциального барьера (см. рис. 1, а). Поэтому описание вязкоупругого состояния твёрдого тела требует использования времени зависящего потенциального рельефа $U_t(\mathbf{r})$. Если различные состояния системы образуют статистический ансамбль, в котором выполняется эргодическая гипотеза, то от временной зависимости $U_t(\mathbf{r})$ можно перейти к набору потенциальных рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$ типа показанного на рис. 1, б. В результате описание вязкоупругой среды сводится к статистической теории распределения потенциальных рельефов по ансамблю $\{U(\mathbf{r})\}$.

Переходя к формальному представлению системы, рассмотрим распределение атомов, определяемое пространственно-временной зависимостью их плотности $n(\mathbf{r}, t)$ [1]. Если этому распределению отвечает энергия $E(t)$, то потенциальный рельеф определяется вариационной производной

$$U_t(\mathbf{r}) = \frac{\delta E(t)}{\delta n(\mathbf{r}, t)}. \quad (1)$$

Переходя от временной зависимости к ансамблю рельефов $\{U(\mathbf{r})\}$,

вводим усреднённый рельеф $\langle U(\mathbf{r}) \rangle$, отклонение от него $\delta U(\mathbf{r}) \equiv U(\mathbf{r}) - \langle U(\mathbf{r}) \rangle$ и структурный фактор

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \delta U(\mathbf{r}) \times \delta U(\mathbf{r}') \rangle. \quad (2)$$

Если при бесконечном удалении точек \mathbf{r}, \mathbf{r}' коррелятор (2) не сводится к нулю, то перестройка потенциального рельефа в одной из них сказывается на его форме во всём кристалле. Иными словами твёрдое тело испытывает вязкоупругий переход, определяемый квадратом параметра порядка

$$|\varepsilon(\mathbf{r})|^2 \equiv \lim_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \rightarrow \infty} \frac{S(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{S(\mathbf{r}, \mathbf{r})}. \quad (3)$$

Параметр упругопластической перестройки твёрдого тела представляется комплексной функцией

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \varepsilon(\mathbf{r}, t) \exp\{i\phi(\mathbf{r}, t)\} \quad (4)$$

с модулем $\varepsilon(\mathbf{r}, t)$, определённым соотношением (3), и фазой $\phi(\mathbf{r}, t)$ (здесь учтена временная зависимость, проявляющаяся на мезоскопическом масштабе эволюции неравновесной системы). С теоретико-полевой точки зрения [2] параметр порядка (4) представляет материальное поле, 4-потенциал $A_m^\mu = (\varphi_m, \mathbf{a}_m)$, $\mu = 0, 1, 2, 3$ которого обладает временной и пространственной компонентами

$$\varphi_m = i\Psi^* \left(\frac{\partial}{c\partial t} \right) \Psi, \quad \mathbf{a}_m = -i\Psi^* \nabla \Psi, \quad (5)$$

где c — характерная скорость звука. Эти компоненты определяют векторы сдвига и поворота

$$\bar{\chi}_m = -\frac{\partial \mathbf{a}_m}{c\partial t} - \text{grad } \varphi_m, \quad \bar{\omega}_m = \text{rot } \mathbf{a}_m, \quad (6)$$

первый из которых обусловлен образованием дислокаций, а второй дисклинациями, зародившимися при упругопластической перестройке среды. Их эволюция определяется 4-током $j^\mu = (c\rho, \mathbf{j})$, временная компонента которого задаёт пространственную плотность дефектов ρ , а пространственная \mathbf{j} — их поток.

Характерная особенность представленной схемы состоит в том, что изначально введенный параметр перестройки среды (3) не зависит от фазы ϕ комплексного параметра порядка (4), пространственно-временное распределение которого определяет 4-ток $j^\mu = (c\rho, \mathbf{j})$ дефектов, образовавшихся в результате такой перестройки. Эта особенность порождается *калибровочной инвариантностью*, которая означает неизменность полевой схемы при

одновременных заменах [2]

$$\Psi \rightarrow \Psi e^{ie\alpha}, \quad A^\mu \rightarrow A^\mu + \partial^\mu \alpha, \quad \partial^\mu \rightarrow D^\mu \equiv \partial^\mu - ieA^\mu. \quad (7)$$

Согласно (7) изменение фазы ϕ на произвольную величину $e\alpha$, определённую обобщённым зарядом e , не изменяет полевые уравнения, если к 4-потенциалу $A^\mu = (\phi, \mathbf{a})$ добавить 4-производную этой добавки $\partial^\mu \alpha$, а саму производную ∂^μ заменить выражением $D^\mu \equiv \partial^\mu - ieA^\mu$, удлинённым за счёт действия 4-потенциала. Хотя этому потенциалу отвечают поля сдвига и кручения, определённые выражениями типа (6), он вовсе не сводится к материальной составляющей, действие которой компенсируется калибровочным вкладом $A_e^\mu = (\phi_e, \mathbf{a}_e)$ с компонентами

$$\phi_e \equiv \phi - \phi_m, \quad \mathbf{a}_e \equiv \mathbf{a} - \mathbf{a}_m. \quad (8)$$

Именно эти компоненты определяются уравнениями теории поля, которые в нашем случае задают упругие составляющие сдвига $\bar{\chi}_e \equiv \bar{\chi} - \bar{\chi}_m$ и поворота $\bar{\omega}_e \equiv \bar{\omega} - \bar{\omega}_m$ упругопластической среды.

Для нахождения уравнений упругого поля следует определить лагранжиан, инвариантный относительно указанной калибровки. Согласно [3] этот лагранжиан определяется слагаемыми

$$L = (L_g + L_f + L_{fm}) - L_m, \quad (9)$$

первые три из которых играют роль кинетической энергии, а последнее представляет потенциальную. По физическому смыслу слагаемое

$$L_g = \frac{\beta}{2} |D^\mu \Psi|^2, \quad D^\mu \equiv \partial^\mu - ieA^\mu, \quad \beta = \text{const} > 0 \quad (10)$$

обусловлено неоднородностью системы, вклад которой удлинён действием калибровочного поля. Чисто полевая составляющая

$$L_f = \frac{1}{4} (\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu)^2 \quad (11)$$

определяется квадратом антисимметричного тензора поля, взаимодействие поля с материальной составляющей даётся членом

$$L_{fm} = -\frac{1}{c} A^\mu j_\mu, \quad (12)$$

а чисто материальная компонента представима разложением Ландау

$$L_m = \frac{A}{2} |\Psi|^2 + \frac{B}{2} |\Psi|^4 \quad (13)$$

со знакопеременным параметром A и $B > 0$.

Полевые уравнения, определяющие перестройку вязкоупругой среды, получаются подстановкой выражений (9)–(13) в уравнение Эйлера

$$\partial_\mu \frac{\partial L}{\partial q_{a,\mu}} - \frac{\partial L}{\partial q_a} = -\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_\mu}, \quad (14)$$

где $q_a \equiv (A_\mu, \Psi)$, $q_{a,\mu} \equiv \partial_\mu q_a$, точка означает дифференцирование по времени и введена диссипативная функция

$$R = \frac{1}{2\gamma} |\dot{\Psi}|^2, \quad (14a)$$

определяемая кинетическим коэффициентом $\gamma > 0$. В общем случае пространственно неоднородной диссипативной среды получаем

$$-\gamma^{-1} \dot{\Psi} + \beta W \Psi = (A - \beta e^2 A_\mu A^\mu) \Psi + B |\Psi|^2 \Psi, \quad W A^\mu = -c^{-1} j_{\text{tot}}^\mu, \quad (15)$$

где обозначено $W \equiv -\partial_\mu \partial^\mu = \nabla^2 - \partial^2 / (c \partial t)^2$. Полный поток

$$j_{\text{tot}}^\mu \equiv j^\mu + j_m^\mu + j_f^\mu \quad (16)$$

состоит из трёх составляющих: слагаемого j^μ , обусловленного внешним воздействием, материальной компоненты

$$j_m^\mu = \frac{i}{2} \text{vec}(\Psi \partial^\mu \Psi^* - \Psi^* \partial^\mu \Psi), \quad (17)$$

и полевого вклада

$$j_f^\mu = -\beta e^2 c |\Psi|^2 A^\mu. \quad (18)$$

Как показывает анализ уравнений (15), поведение системы задаётся соотношением характерных масштабов

$$\lambda = \frac{1}{e} \sqrt{\frac{B}{|A|\beta}}, \quad \xi = \sqrt{\frac{\beta}{|A|}}, \quad (19)$$

определяющих изменение упругого поля и параметра порядка, соответственно. Учёт феноменологического выражения $\lambda = \eta / \rho_m c$ приводит к определению упругого заряда

$$e = \frac{1}{\eta} \sqrt{\frac{\mu \rho_m B}{\beta |A|}} \quad (20)$$

через сдвиговую вязкость η , модуль сдвига μ и плотность среды

ρ_m . Если параметр Гинзбурга–Ландау

$$\kappa \equiv \frac{\lambda}{\xi} = \sqrt{\frac{B}{e\beta}} = \sqrt{\eta} \left(\frac{|A|B}{\beta\mu\rho} \right)^{1/4} \quad (21)$$

принимает малые значения $\kappa < 2^{-1/2}$, то в стационарном состоянии $\dot{\Psi} = 0$, $W\Psi = 0$, $j^\mu = 0$, $A < 0$ параметр порядка определяется выражением

$$\Psi_0 = \sqrt{1 - \frac{\beta e^2}{A} A_\mu A^\mu} \varepsilon_0, \quad \varepsilon_0 \equiv \sqrt{\frac{|A|}{B}}, \quad (22)$$

а упругое поле описывается уравнением

$$WA^\mu = \beta e^2 |\Psi|^2 A^\mu. \quad (23)$$

Очевидно, такое состояние отвечает полосе Людерса, в которой осуществляется однородное пластическое течение кристалла.

Для нас основной интерес представляет противоположный случай $\kappa \gg 2^{-1/2}$, в котором стационарные уравнения (15) принимают форму Гинзбурга–Ландау

$$\kappa^{-2} \nabla^2 \varepsilon = -(1 - \mathbf{u}^2) \varepsilon + |\varepsilon|^2 \varepsilon, \quad -\text{rot}^2 \mathbf{u} = |\varepsilon|^2 \mathbf{u}, \quad (24)$$

где $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r})$ представляет скальвующую компоненту тензора пла-

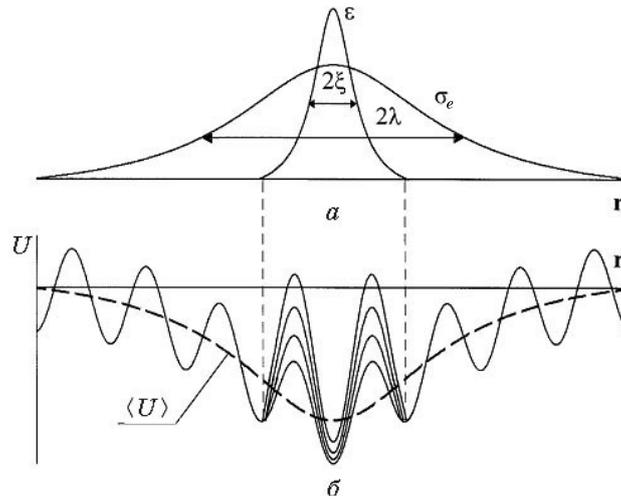


Рис. 2. Профили скальвующих компонент тензоров пластической деформации ε и упругих напряжений σ_e вблизи дислокации/дисклинации (a) и соответствующее распределение потенциального рельефа (b).

стической деформации, а $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r})$ — вектор упругого смещения среды. Исследование уравнений (24) показывает [4], что в рамках калибровочной теории, отвечающей группе $U(1)$, представляются возможными два типа цилиндрических солитонов. Первый из них является носителем сдвиговой компоненты поля, а упругие напряжения изменяются как $\chi_e \propto r^{-1}$, и естественно положить, что такое решение отвечает краевой дислокации. Солитон второго типа служит носителем компоненты поворота, где упругое поле изменяется как $\omega_e \propto \ln r$ — очевидно, он представляет дисклинацию. В этой связи интересно отметить, что точечный дефект, кажущийся на первый взгляд наиболее простым, требует использования нетривиального аппарата, отвечающего неабелевой группе $SU(2)$. Благодаря некоммутативности преобразований этой группы материальное поле приобретает две компоненты, а в определении напряженности упругого поля появляются слагаемые, нелинейные по потенциалу A_μ [2]. В результате точечный дефект представляется автолокализованным образованием — так называемым, ежом Полякова, стабилизация которого имеет существенно нелинейную природу.

На рис. 2, *a*, показаны пространственные профили скалывающих

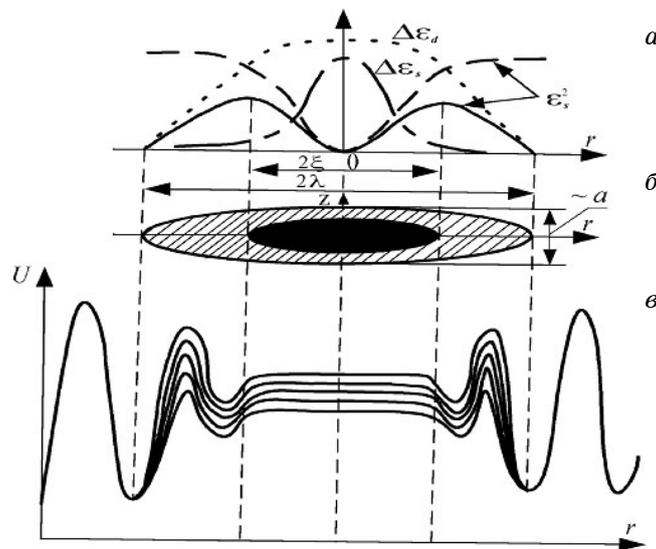


Рис. 3. (*a*) Координатные зависимости амплитуды флуктуаций дилатации $\Delta\epsilon_d$ (пунктир) и сдвиговой деформации $\Delta\epsilon_s$ (штрих-пунктир), а также квадрата сдвиговой деформации ϵ_s^2 в однородной системе (штриховая) и в дилатоне (сплошная); (*b*) модель элементарного носителя разрушения (затумбована область флуктуаций сдвиговых напряжений, заштрихована область пластического состояния); (*c*) соответствующее распределение потенциального рельефа.

компонент тензоров пластической деформации $\varepsilon(\mathbf{r})$ и упругих напряжений $\sigma_e(\mathbf{r})$ вблизи солитона указанного типа. Из соответствующей картины потенциального рельефа вблизи дислокации/дисклинации (см. рис. 2, б) видно, что упругие напряжения плавно изменяют уровень его отсчёта, тогда как переход в вязкое состояние в области ядра дефекта размывает потенциальный рельеф, способствуя снижению его эффективной высоты. Именно этим обстоятельством объясняются повышенные значения коэффициента трубочной диффузии по ядрам линейных дефектов.

Развитая схема позволяет описать также элементарный носитель разрушения, представленный на рис. 3. Анализ полевых уравнений типа (24) показывает, что в этом случае выполняется условие $\kappa < 2^{-1/2}$, препятствующее автолокализации тёмных солитонов, профиль которых отвечает штриховой линии $\varepsilon_s^2(r)$. За счёт накачки фононов в образце самопроизвольно возникают локализованные области флуктуаций дилатации $\Delta\varepsilon_d$ (дилатоны, отвечающие пунктирной линии) и сдвиговой деформации $\Delta\varepsilon_s$ (штрих-пунктир). Согласно рис. 3, б, в, это означает, что элементарный носитель разрушения образован внешней оболочкой повышенной пластичности (на рисунке она заштрихована) и внутренней областью разрушенных межатомных связей (она затушёвана).

3. КОЛЛЕКТИВНОЕ ПОВЕДЕНИЕ АНСАМБЛЯ ДЕФЕКТОВ

Как правило, в процессе пластической деформации и разрушения твёрдого тела дефекты кристаллического строения рассматриваются как автономные объекты, которые, взаимодействуя между собой и испытывая действие внешних полей, остаются самостоятельными структурными образованиями, обладающими присущими им свойствами (геометрической конфигурацией, распределением упругих полей и т.д.). В рамках такой концепции поведение системы представляется как результат эргодической эволюции ансамбля дефектов, траектории которых с течением времени заполняют все фазовое пространство. С другой стороны, предполагается отсутствие иерархической соподчиненности в поведении дефектов под действием силовых полей и термостата. В такой постановке зависимость термодинамического потенциала от конфигурационных координат имеет вид регулярного распределения минимумов, наиболее глубокий из которых отвечает устойчивому состоянию, а остальные метастабильным. В результате эволюция системы представляется как цепочка дебаевских процессов термофлуктуационного преодоления барьеров между минимумами термодинамического потенциала со временами релаксации, определяемыми аррениусовским соотношением.

Представленная картина реализуется в кристаллических мате-

риалах, подверженных слабому внешнему воздействию. В противоположном случае, — а именно он, как правило, реализуется на практике, — плотность дефектов достигает столь высоких значений, что проявляются коллективные эффекты в их поведении. Это означает установление когерентной связи в ансамбле дефектов типа той, что обуславливает фазовые и кинетические превращения. Однако, если для последних характерно гомогенное распределение, то установление когерентной связи в ансамбле дефектов одного структурного уровня приводит к автолокализованному образованию, играющему роль структурного элемента на более высоком уровне. Так, кластеризация вакансий может приводить к образованию дислокационных петель, скопление дислокаций — к появлению границ разориентировки и дисклинаций. Данное отличие в коллективном поведении дефектов от обычной картины фазовых превращений обусловлено сильной неравновесностью ансамбля дефектов, в связи с чем реализуется не термостатическое, а кинетическое превращение. Автолокализованный характер продуктов этого превращения (супердефектов) является следствием потери эргодичности, которая приводит к иерархической соподчиненности, означающей, что супердефект образуется в результате когерентной связи дефектов, принадлежащих более низким структурным уровням. Поскольку на зависимости термодинамического потенциала от конфигурационных координат исходным дефектам отвечают более узкие минимумы, чем супердефектам, то иерархическая соподчиненность означает фрактальную структуру распределения термодинамического потенциала в конфигурационном пространстве. Как показывают примеры спиновых стекол, мартенситных превращений, политипных структур и ползучести кристаллов, фрактальный характер системы коренным образом изменяет ее термодинамические и кинетические свойства. Это обусловлено разбиением конфигурационного пространства на множество областей (долин), каждой из которых отвечает свой статистический ансамбль. В результате определение средних производится в два этапа: сначала усреднением по чистому ансамблю данной долины, а затем — по ансамблю долин. Кинетическое поведение такой системы обусловлено слабым восстановлением эргодичности в процессе объединения долин в кластеры более крупных компонент. Этот процесс представляется движением по узлам иерархического дерева Кейли, которые отвечают долинам, к его стволу.

Основное отличие кристалла, содержащего различные дефекты, от аморфных систем состоит в том, что число структурных уровней здесь сравнительно невелико: по характерному масштабу l_α принято выделять микроскопический уровень ($a \ll l_1 \ll d$, a — межатомное расстояние, d — размер однородно ориентирован-

ной области типа ячейки или фрагмента), мезоскопический ($d \ll l_2 \ll D$, D — размер слабо разориентированной области, например зерна) и макроскопический ($D \ll l_3 \ll L$, L — характерный размер образца). На каждом из представленных уровней пластическая деформация осуществляется путем однородного течения дефектов — точечных, дислокаций, дисклинаций, планарных и т.д. Микроскопический уровень отвечает однородному распределению точечных дефектов, дислокаций и дисклинаций, мезоскопический — распределению ячеек и фрагментов, макроскопический — неоднородно ориентированным зернам, текстурным компонентам и т.д. С ростом степени пластической деформации каждый последующий структурный уровень зарождается в недрах предыдущего, когда тот за счет повышения однородной плотности дефектов исчерпает ресурс своего эволюционного развития. Так, первые границы ячеек зарождаются, когда критического значения достигает плотность дислокаций; частичные дисклинации (границы фрагментов) возникают при уменьшении размеров до 0,2 мкм слабо разориентированных ячеек; ножевые границы, оканчивающиеся дисклинацией, появляются с формированием развитой фрагментированной структуры с большими разориентировками. С течением времени рост характерного масштаба выше критического l_α приводит к неустойчивости однородного распределения дефектов на расстояниях $x > l_\alpha$ и автолокализованному образованию носителя пластической деформации на $l_{\alpha+1}$ -ом структурном уровне. Так, при $l > l_1$ пластическая неустойчивость приводит к образованию дислокаций, дисклинаций и их комплексов, при $l > l_2$ — полос сильных сдвигов-поворотов, при $l > l_3$ — макроскопических ротационно-сдвиговых полей. Включение каждого последующего структурного уровня не носит эволюционный характер, поскольку оно обусловлено спонтанным появлением новых гидродинамических (трансляционных и ротационных) мод при $l = l_\alpha$. Разумеется, после зарождения структуры, отвечающей $(\alpha + 1)$ -му уровню, занимаемый ею объем будет плавно возрастать за счет уменьшения объемов структур, соответствующих уровням 1, 2, ..., α (здесь ситуация аналогична фазовому равновесию в термодинамике). Кроме того, функция распределения по уровням может меняться таким образом, что будет существенна лишь узкая группа таких уровней (так, при хрупком разрушении определяющими являются только уровни $\alpha = 1, 2$).

Изложим количественную картину зарождения и эволюции структурного уровня. С учетом сильной неравновесности системы наиболее перспективным представляется использование синергетического подхода, в рамках которого коллективное поведение дефектов задается гидродинамической модой, — например, плотностью поляризованных дислокаций, образующих малоугловую

границу в стохастическом ансамбле разориентированных дислокаций. При этом сопряженное поле сводится к скалывающим компонентам тензора упругих напряжений, а управляющий параметр представляет степень внешнего воздействия (в простейшем случае — давление внешней среды). Использование такого подхода позволяет представить основные особенности экспериментальной картины структурообразования, в частности, причины реализации перехода первого рода, при котором в матричной фазе зарождается и растет новый структурный уровень [3].

При высокой плотности ρ из ансамбля дислокаций, ведущих себя автономным образом, выделяется коллективная составляющая плотностью $\rho_{\text{col}} \leq \rho$. При этом поля взаимодействия дислокаций становятся соизмеримыми с внешними напряжениями, и возникает долгоживущая гидродинамическая мода со временем релаксации $t_d \propto \omega_D^{-1}$ и амплитудой $d \propto b\sqrt{\rho_{\text{col}}}$ (здесь ω_D — дебаевская частота, b — параметр решетки). В автономном режиме релаксация этой моды протекает по дебаевскому закону $\dot{d} = -d/t_d$. Однако когерентная связь между дефектами приводит к релаксации сдвиговых напряжений τ , а уравнение для d дополняется положительным вкладом t_ε пластической деформации ε , обусловленной коллективными эффектами. Соответственно, к дебаевскому уравнению $\dot{\tau} = (\tau_e - \tau)/t_\tau$ для напряжений, релаксация которых происходит не к нулевому значению τ , а к стационарному $\tau_e(\sigma_{\text{ext}})$, определенному внешними напряжениями σ_{ext} , добавляется отрицательный вклад $d\varepsilon$ моды дефектов в поле деформации. Полная система уравнений, определяющих временное поведение величин τ , d , ε , замыкается уравнением Максвелла для вязкоупругой среды [3]

$$\dot{\tau} = (\tau_e - \tau)/t_\tau - g_\tau \varepsilon d, \quad \dot{d} = -d/t_d + g_d \varepsilon \tau, \quad \dot{\varepsilon} = -\varepsilon/t_\varepsilon + g_\varepsilon d. \quad (25)$$

Здесь t_τ , t_d , t_ε — времена релаксации величин τ , d , ε ; g_τ , g_d , g_ε — положительные константы связи. Характерное время релаксации напряжений t_τ задается дебаевским масштабом: $t_\tau \propto \omega_D^{-1} \cong 10^{-13}$ с; время релаксации моды дефектов t_d определяется термоактивируемыми процессами их миграции: $t_d \cong \omega_D^{-1} \exp(Q/T)$, где энергия Q имеет порядок электрон-вольта; и наконец, время релаксации деформации равно $t_\varepsilon \cong \eta/\mu$, где η — сдвиговая вязкость, μ — соответствующий модуль упругости.

Приведенные оценки показывают, что наибольшим значением обладает время релаксации деформации, величина которой ε определяет значения τ , d в уравнениях (25). Такая иерархия времен релаксации позволяет использовать принцип соподчинения эволюции управляющего параметра $\tau(t)$ и сопряженного поля $d(t)$ параметру порядка $\varepsilon(t)$. Математически это выражается в

пренебрежении скоростями $\dot{\tau}$, \dot{d} в уравнениях (25), после чего величины τ , d выражаются равенствами

$$\tau = \frac{\tau_e}{1 + (\varepsilon/\varepsilon_m)^2}, \quad \varepsilon_m^{-2} \equiv A_d A_\tau, \quad A_i = t_i g_i, \quad i = \tau, d, \varepsilon; \quad (26)$$

$$d = A_d \tau_e \frac{\varepsilon}{1 + (\varepsilon/\varepsilon_m)^2}, \quad \tau_e = \tau_e(\sigma_{\text{ext}}).$$

Зависимость $\varepsilon(t)$ задаётся уравнением регрессии Ландау–Халатникова

$$t_e \dot{\varepsilon} = -\frac{\partial V}{\partial \varepsilon} \quad (27)$$

с синергетическим потенциалом

$$V = \frac{\varepsilon^2}{2} - \frac{\varepsilon_m^2}{2} \frac{\tau_e}{\tau_c} \ln[1 + (\varepsilon/\varepsilon_m)^2], \quad \tau_c \equiv (A_e A_d)^{-1}. \quad (28)$$

Вид зависимости $V(\varepsilon)$ задаётся внешними напряжениями σ_{ext} , определяющими стационарное значение $\tau_e(\sigma_{\text{ext}})$ сдвиговой компоненты внутренних напряжений. Оставляя в стороне определение зависимости $\tau_e(\sigma_{\text{ext}})$, приводящее к отдельной задаче, укажем, что при нагрузке σ_{ext} , не обеспечивающей условие $\tau_e > \tau_c$, зависимость (28) имеет монотонно возрастающий характер. Это означает релаксацию в стационарное состояние $\varepsilon_0 = 0$, в котором коллективное поведение дислокационного ансамбля не сказывается на величине пластической деформации. С физической точки зрения малость напряжений $\tau_e(\sigma_{\text{ext}})$, связанных с внешним воздействием, обусловлена процессами релаксации и упрочнения. При выполнении условия $\tau_e > \tau_c$ синергетический потенциал приобретает минимум в точке ε_0 , определяющей добавку

$$\varepsilon_0 = \sqrt{\tau_e/\tau_c - 1} \quad (29)$$

к деформации, обусловленной автономным поведением дефектов. Согласно соотношениям (26), при этом коллективная составляющая напряжений сводится к критическому значению τ_c , а выражение для деформационной моды отличается от ε_0 множителем $A_d \tau_c$. Эффективное время перехода в когерентное состояние

$$t_{\text{ef}} = t_e (\tau_e/\tau_c - 1)^{-1} \quad (30)$$

монотонно спадает с ростом разности между напряжением τ_e и критическим значением τ_c .

Основной результат проведенного анализа состоит в том, что при

автокаталитическом размножении дефектов в поле напряжений $\tau_e(\sigma_{\text{ext}}) > \tau_c$ за время $t \cong t_{\text{ef}}$ устанавливается когерентная связь, и дефекты ведут себя коллективным образом. При этом деформация, обусловленная автономными дефектами, получает вклад

$$\varepsilon = \varepsilon_0[1 - \exp(-t/t_{\text{ef}})], \quad (31)$$

нарастающий со временем $t \gg t_{\text{ef}}$ до стационарного значения (29).

Для оценки основных параметров задачи учтем, что максимальная деформация $\varepsilon_m \cong 1$, а из последнего уравнения (25) для безразмерного параметра $A_\varepsilon = t_\varepsilon g_\varepsilon$ следует $A_\varepsilon \cong 1$. Тогда

$$\begin{aligned} A_d &= (A_\varepsilon \tau_c)^{-1} \cong \tau_c^{-1} \cong (10^1 \div 10^2) \mu^{-1}, \\ A_\tau &= (\varepsilon_m^2 A_d)^{-1} \cong A_d^{-1} \cong \tau_c \cong (10^{-2} \div 10^{-1}) \mu. \end{aligned}$$

С учетом оценок времен t_i , приведенных после уравнений (25), окончательно находим:

$$\begin{aligned} g_\varepsilon &= A_\varepsilon/t_\varepsilon \cong t_\varepsilon^{-1} \cong \mu/\eta, \\ g_d &= A_d/t_d \cong (\omega_D/\tau_c) \exp(-Q/T), \\ g_\tau &= A_\tau/t_\tau \cong \tau_c \omega_D. \end{aligned} \quad (32)$$

Выше мы использовали простейшую модель, позволяющую представить самоорганизацию дефектов в полосе пластической деформации по механизму непрерывного кинетического превращения. В реальных условиях зарождение полосы может протекать по механизму фазового перехода первого рода. Для описания такого перехода требуется учесть зависимость времени релаксации t_ε от деформации. При этом картина превращения не претерпевает существенных изменений, и мы оставляем в стороне соответствующее рассмотрение [3].

Проведем теперь явный учёт влияния стохастических источников и пространственной неоднородности в распределении полей $\tau(\mathbf{r})$, $d(\mathbf{r})$, $\varepsilon(\mathbf{r})$. С этой целью добавим в правые части уравнений (25) градиентные слагаемые, определенные масштабами l_τ , l_ε , l_d , и ланжевеновские источники ζ_τ , ζ_ε , ζ_d с интенсивностями σ_τ^2 , σ_ε^2 , σ_d^2 (при этом полагается, что эти источники отвечают процессам Орнштейна–Уленбека с временами автокорреляции τ_τ , τ_ε , τ_d). В результате поведение ансамбля дефектов задается системой стохастических уравнений

$$\begin{aligned} t_\varepsilon \dot{\varepsilon} &= -\varepsilon + d + l_\varepsilon^2 \nabla^2 \varepsilon + \sigma_\varepsilon \zeta_\varepsilon, \\ t_d \dot{d} &= -d + \varepsilon \tau + l_d^2 \nabla^2 d + \sigma_d \zeta_d, \\ t_\tau \dot{\tau} &= (\tau_e - \tau) - \varepsilon d + l_\tau^2 \nabla^2 \tau + \sigma_\tau \zeta_\tau. \end{aligned} \quad (33)$$

Здесь деформация ε отнесена к масштабу ε_m , амплитуда коллективной моды d — к характерному значению $d_m = A_d \tau_c \varepsilon_m$, а величина напряжений τ — к критическому значению τ_c .

При изменении коллективной моды на характерных длинах l_d наиболее существенное влияние на поведение системы оказывают кросс-корреляции шумов (принимается, что неупорядоченная фаза отвечает хаотическому распределению дислокаций, а упорядочение системы приводит к спонтанному появлению когерентной связи дислокаций с одинаковым направлением векторов Бюргерса). В отсутствие кросс-корреляций происходит кластеризация дефектов, отвечающая пунктирной линии на рис. 4 [5]. Включение кросс-корреляций нарушает симметрию распределения плотности вероятности, приводя к ее возрастанию в области отрицательных значений параметра порядка (кривая 1 на рис. 4). Кроме того в двукратно ограниченной области значений управляющего параметра (τ_c, τ^c) может появиться метастабильная фаза, характеризуемая положительной ориентацией вектора Бюргерса. Это означает, что в ходе пластической деформации определенная часть дислокаций испытывает мгновенную переориентацию векторов Бюргерса при напряжениях $\tau_e > \tau_c$, а с их ростом до верхнего предела $\tau_e = \tau^c$ происходит обратная переориентация. С другой стороны, совместное влияние кросс-корреляций, нелинейности и неоднородности распределения

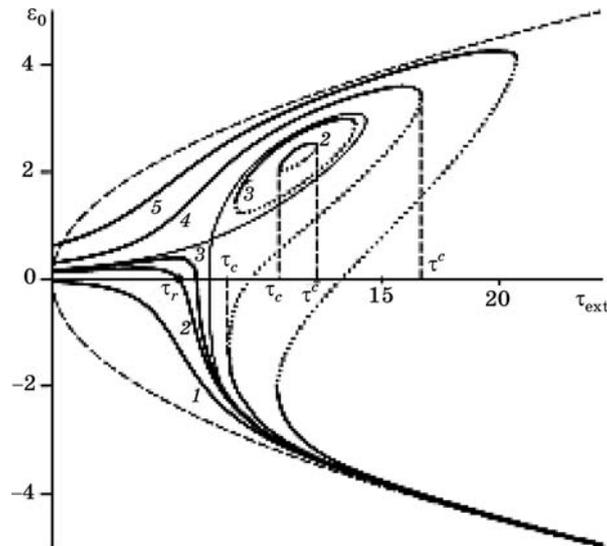


Рис. 4. Зависимость параметра порядка от внешних напряжений при временах кросс-корреляций, возрастающих при переходе от кривой 1 к 5 (штриховая линия отвечает загравочной зависимости (29), пунктирная — неустойчивым решениям).

дефектов приводит к изменению знака вектора Бюргера при малых деформациях (кривая 2 на рис. 4). При этом рост времён кросс-корреляций способствует формированию гистерезисной петли, при наличии которой происходит скачкообразная переориентация векторов Бюргера дислокаций с плавным ростом внешней нагрузки.

4. СЛОЖНОСТЬ ИЕРАРХИЧЕСКОГО АНСАМБЛЯ ДЕФЕКТОВ

Несмотря на достигнутое понимание экспериментальной ситуации, построение полной картины эволюции дефектной структуры сдерживалось тем, что до последнего времени не осознавалась её иерархическая природа [6]. На рис. 5 она проявляется в том, что с изменением масштаба увеличения электронно-микроскопической фотографии, рост которого отвечает переходу на более глубокий структурный уровень, закономерности грубой структуры определяют более тонкие её детали. Согласно рис. 6, каждому структурному уровню можно сопоставить горизонтальную линию иерархического дерева Кейли, которой отвечает определённый уровень разрешения минимумов термодинамического потенциала. В результате эволюция системы может быть представлена в рамках фрактальной кинетики иерархизованных структур. Следует, однако, иметь в виду одно важное обстоятельство. Подход, основанный на использовании

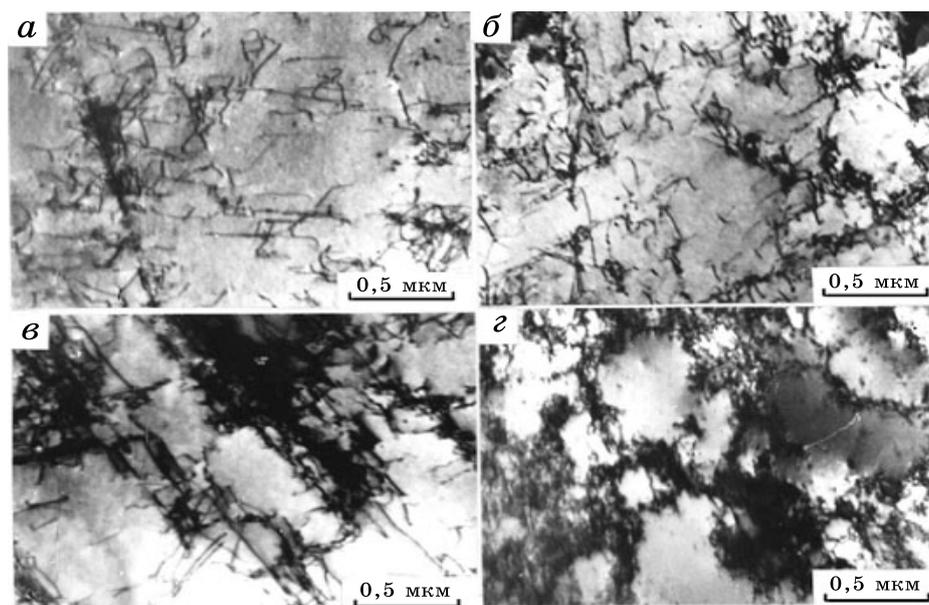


Рис. 5. Дислокационная структура сплава Ni_3Fe при деформациях 0,05, 0,05, 0,16, 0,28 (а, б, в, г, соответственно).

континуального ультраметрического пространства, предполагает, что число уровней бесконечно велико, а характер связи между ними не существен и важна только структура дерева. В нашем случае число структурных уровней (отвечающих дислокациям, дисклинациям, зернам, их конгломератам, ..., образцу) заведомо невелико и принципиально важен характер их связи. Поэтому полное описание картины эволюции дефектной структуры не может быть достигнуто в рамках аналитического подхода, и следует использовать численные методы, в рамках которых поле деформации на данном уровне определяется стандартным образом, а связь со следующим структурным уровнем задается через граничные условия.

С формальной точки зрения эволюция самоподобной дефектной структуры сводится к аномальной диффузии в ультраметрическом пространстве иерархической системы, геометрическим образом которой является дерево Кейли [7, 8]. Основная особенность случайных иерархических систем состоит в том, что при переходе на более глубокий уровень каждый статистический ансамбль разделяется на более мелкие подансамбли, которые, в свою очередь, состоят из ещё более мелких субансамблей следующего уровня, и т.д. Со статистической точки зрения набор указанных (под)ансамблей определяется *сложностью* системы, которая по аналогии с энтропией характеризует беспорядок иерархической связи [9].

Статистическая теория самоподобных структур основывается на

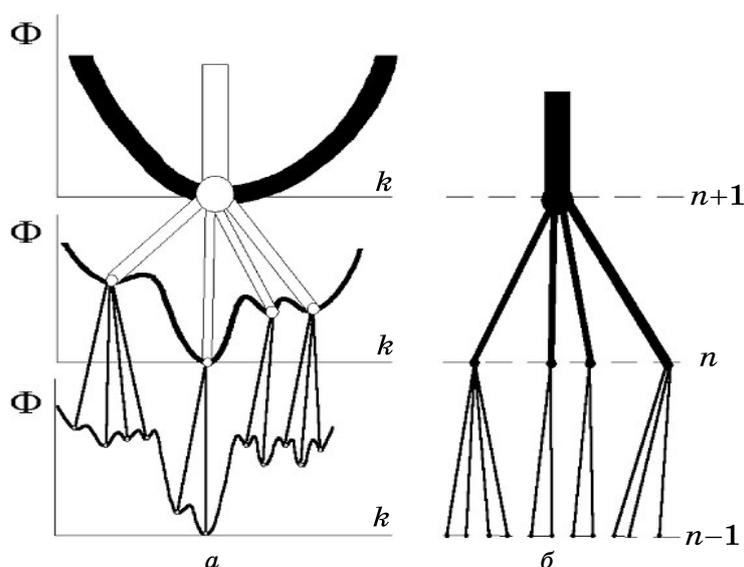


Рис. 6. (а) Распределение термодинамического потенциала по состояниям различных структурных уровней; (б) дерево Кейли, определяющее иерархическую связь этих состояний.

использовании деформированных функций логарифма и экспоненты, которые сохраняют свои свойства при соответствующем деформировании операций произведения и частного [10]. Для демонстрации необычности такого произведения на рис. 7 приведена зависимость такого произведения $p = 2 \otimes_q 2$ от параметра деформации q . Из рисунка видно, что обычное значение $p = 4$ получается только в отсутствие деформации ($q = 1$), тогда как при минимальном значении $q = 0$ имеем $p = 3$, а при $q = 2$ получаем $p = \infty$.

Использование деформированных полиномиальных коэффициентов приводит к следующей связи между сложностями ближайших иерархических уровней [9]

$$C_Q(p_{11}, \dots, p_{nm_m}) - C_Q(p_1, \dots, p_m) = \frac{1}{Q-1} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{m_i} (p_i^{Q-1} p_{ij} - p_{ij}^Q). \quad (34)$$

Здесь положено, что каждое состояние верхнего уровня разделяется на m групп i , занятых с вероятностью p_i ; каждая из них содержит узлы ij , которые заполняются с вероятностями p_{ij} на нижнем уровне иерархического кластера; кроме того, введен физический параметр неаддитивности $Q \equiv 2 - q$, принимающий значения $1 \leq Q \leq 2$. Если статистические состояния распределены по микроканоническим ансамблям, то вероятности и соответствующие сложности определяются номером уровня l :

$$\{p_{ij}\} \Rightarrow p_{l+1}, \{p_i\} \Rightarrow p_l; C_Q(p_{11}, \dots, p_{m_m}) \Rightarrow C(l+1), C_Q(p_1, \dots, p_m) \Rightarrow C(l). \quad (35)$$

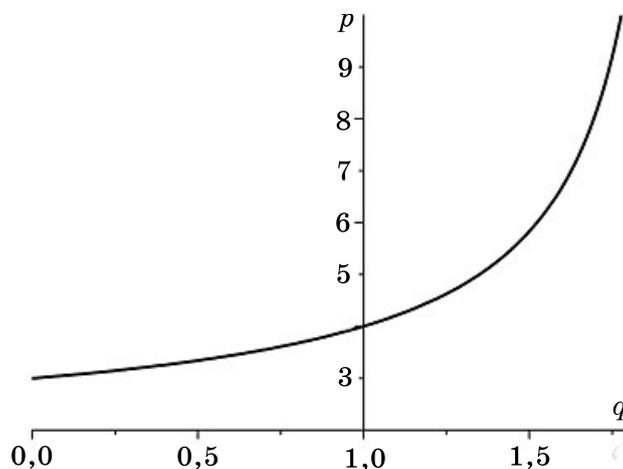


Рис. 7. Зависимость деформированного произведения $p = 2 \otimes_q 2$ от параметра q .

В результате равенство (34) принимает простой вид

$$C(l+1) - C(l) = \frac{M_l}{Q-1} p_{l+1} (p_l^{Q-1} - p_{l+1}^{Q-1}), \quad (36)$$

где число узлов распределено по уровням согласно степенному закону

$$M_l = (l+1)^a \quad (37)$$

с показателем $a > 1$, для которого условие самоподобия даёт

$$a = \frac{1}{Q-1}. \quad (38)$$

При этом вероятности реализации состояний на соседних иерархических уровнях определяются рекуррентным соотношением

$$p_{l+1} - p_l = -p_l^Q / \Delta, \quad l = 0, 1, \dots, n, \quad (40)$$

где n — число иерархических уровней. При $l \gg 1$ это соотношение сводится к стационарному уравнению Фоккера–Планка.

Для определения сложности дефектной структуры проще всего воспользоваться в равенстве (36) распределением Цаллиса [10]

$$p_l = \left[p_0^{-(Q-1)} + \frac{Q-1}{\Delta} l \right]^{-\frac{1}{Q-1}}; \quad p_0 \equiv \left(\frac{2-Q}{\Delta} \right)^{\frac{1}{2-Q}}, \quad 0 \leq l \leq n, \quad (41)$$

применимым в непрерывном пределе $l \gg 1$ (параметр Δ характеризует ширину разброса статистических состояний). При этом вероятности заполнения соседних уровней связаны соотношениями

$$p_{l+1}^{Q-1} - p_l^{Q-1} \cong \frac{d}{dl} p_{l+1}^{Q-1} = (Q-1) p_{l+1}^{Q-2} \frac{dp_{l+1}}{dl} \cong -\frac{Q-1}{\Delta} p_{l+1}^{2(Q-1)}, \quad (42)$$

в последнем из которых учтена связь (40), представленная в непрерывном приближении. Подстановка (42) в (36) даёт

$$C(l+1) - C(l) \cong \frac{M_l}{\Delta} p_{l+1}^{2Q-1}. \quad (43)$$

Полагая $C(l+1) - C(l) \cong dC/dl$, с учётом (41), (37) сводим разностное уравнение (43) к дифференциальному

$$\frac{dC}{dl} = \frac{l^a}{\Delta} \left[p_0^{-(Q-1)} + \frac{Q-1}{\Delta} l \right]^{-\frac{2Q-1}{Q-1}}, \quad (44)$$

где проведена замена $l+1$ на l . В предельном случае $a \rightarrow 1$ ре-

шение этого уравнения приводит к зависимости

$$C(n) = \frac{\Delta}{Q} p_0 \left[1 - \left(\frac{p_n}{p_0} \right)^Q \right] - n p_n^Q, \quad (45)$$

где использовано начальное условие $C(0) = 0$. Она означает, что с ростом n сложность монотонно нарастает до предельного значения

$$C(\infty) = Q^{-1} (2 - Q)^{\frac{1}{2-Q}} \Delta^{-\frac{Q-1}{2-Q}}, \quad (46)$$

спадающего с увеличением параметра неаддитивности Q и дисперсии Δ [9].

В общем случае решение уравнения (44) выражается через гипергеометрическую функцию:

$$C(n) = \frac{p_0^{2Q-1}}{\Delta} \frac{n^{1+a}}{1+a} F \left(\frac{2Q-1}{Q-1}, 1+a; 2+a; -vn \right), \quad v \equiv \frac{Q-1}{\Delta} p_0^{Q-1}. \quad (47)$$

Анализ правой части уравнения (44) показывает, что в пределе $n \rightarrow \infty$ его решение не принимает бесконечных значений, если показатель a не превышает максимальной величины

$$a_{\max} = Q/(Q-1). \quad (48)$$

С другой стороны, должно выполняться условие самоподобия (38). Тогда нечётные аргументы гипергеометрической функции совпадают, и она принимает простой вид [11]

$$F \left(\frac{2Q-1}{Q-1}, \frac{Q}{Q-1}; \frac{2Q-1}{Q-1}; -vn \right) = (1+vn)^{-\frac{Q}{Q-1}}. \quad (49)$$

В результате сложность (47) сводится к выражению

$$C(n) = \frac{Q-1}{Q} \frac{p_0^{Q-1}}{\Delta} p_n^Q n^{\frac{Q}{Q-1}}. \quad (50)$$

Как и для вырожденного дерева ($a \rightarrow 1$), эта величина монотонно нарастает с числом иерархических уровней до максимального значения

$$C(\infty) = \frac{(2-Q)^{\frac{Q-1}{2-Q}}}{Q(Q-1)^{\frac{1}{Q-1}}} \Delta^{\frac{Q+Q-1}{(Q-1)(2-Q)}(Q-Q)}, \quad (51)$$

где корни $Q_{\pm} \equiv (1 \pm \sqrt{5})/2$ представляют *золотое сечение*. С ростом параметра неаддитивности максимальная сложность монотонно спа-

дает от бесконечного значения при $Q = 1$ до нулевого при $Q = 2$. Однако, в отличие от (46), зависимость от дисперсии Δ становится немонотонной: при значениях параметра неаддитивности, ограниченных верхним пределом $Q_+ = 1,618$, максимальная сложность с ростом Δ увеличивается, а при $Q > Q_+$ — уменьшается. Характер изменения сложности S в зависимости от числа иерархических уровней n , параметра неаддитивности Q и дисперсии Δ показан на рис. 8, 9.

Изложенное рассмотрение показывает, что установление иерархической связи быстро повышает сложность статистического ансамбля до предельного значения. Хотя сложность определяется энтропией Цаллиса, их физическая природа совершенно различна: если для простых систем эта энтропия характеризует беспорядок в распределении наименьших структурных единиц (например, атомов), то в иерархических системах их роль играют подансамбли, на которые разделяется полный статистический ансамбль.

В общем случае поведение сложной системы определяется кластерной структурой всех иерархических уровней, однако свойство самоподобия позволяет ограничиться заданием типичного кластера и номера уровня n . Исследование различных иерархических деревьев показало [12], что возможны три их основных типа: вырожденное дерево, у которого на каждом уровне ветвится единственный узел, благодаря чему с ростом n число узлов нарастает по линейной зависимости; регулярное дерево, на каждом уровне которого все узлы ветвятся одинаковым образом и их число увеличивается экспоненциально; самоподобное дерево, у которого число узлов нарастает по степенному закону $(1+n)^a$ с показателем $a > 1$. В первом случае вероятность реализации состояний на различных иерархических уровнях изменяется логарифмически медленно, во втором экспоненциально быстро и только в последнем обнаруживает присущее самоподобным системам степенное поведение с показателем, определяющим фрактальную размерность ультраметрического про-

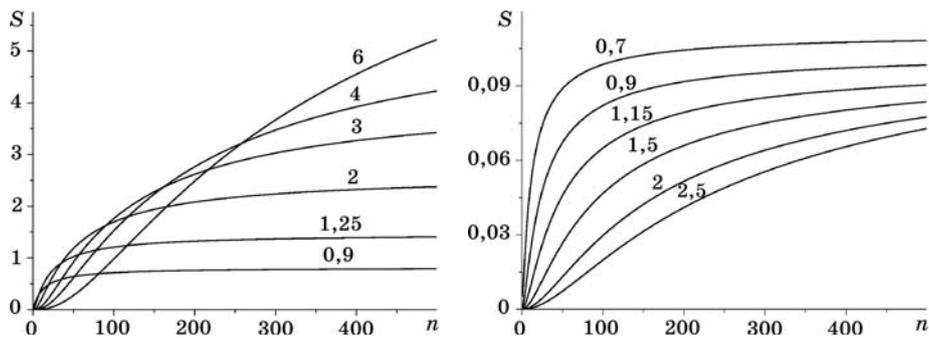


Рис. 8. Зависимость сложности от числа иерархических уровней при $Q = 1,5$ и $Q = 1,7$ (цифры у кривых указывают значения Δ).

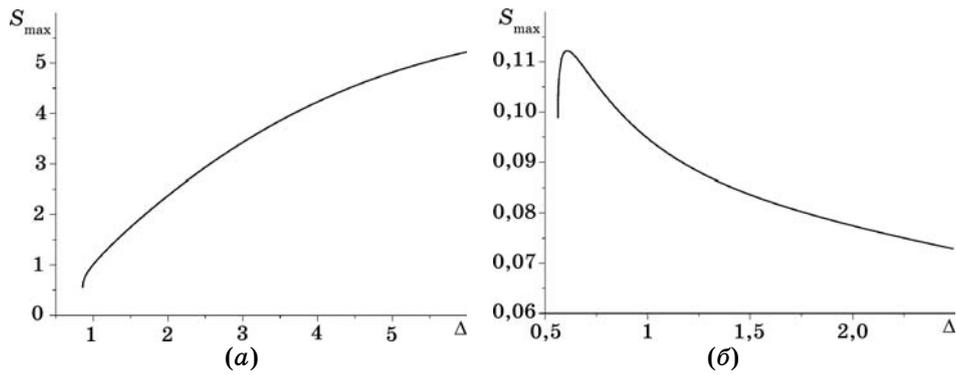


Рис. 9. Зависимость максимальной сложности от дисперсии иерархического ансамбля при $Q = 1,5$ (а) и $Q = 1,7$ (б).

странства, геометрическим образом которого является иерархическое пространство. Согласно (38), параметр неаддитивности $Q = (a + 1)/a$ определяется показателем ветвления a : регулярное ($a = \infty$) и вырожденное ($a = 1$) деревья характеризуются предельными значениями $Q = 1$ и $Q = 2$, а самоподобное распределение (41) с показателем $1 < Q < 2$ реализуется при $\infty > a > 1$. Такая связь объясняет бесконечное нарастание сложности при параметре неаддитивности $Q \rightarrow 1$ — при этом неограниченно возрастает показатель ветвления иерархического дерева ($a \rightarrow \infty$), обеспечивая предельную сложность системы.

Выше мы рассмотрели самоподобные иерархические ансамбли. При произвольном распределении по узлам иерархического дерева, не обладающего свойством самоподобия, разностное уравнение (36) приводит к более сложному выражению

$$C(n) = \frac{1}{Q-1} \sum_{l=1}^n C_l, \quad C_l \equiv \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^{m_{i_1}} \dots \sum_{i_l=1}^{m_{i_1 i_2 \dots i_{l-1}}} p_{i_1 \dots i_{l-1} i_l} (p_{i_1 \dots i_{l-1}}^{Q-1} - p_{i_1 \dots i_{l-1} i_l}^{Q-1}), \quad (52)$$

где вероятность $p_{i_1 \dots i_{l-1}}$ сводится к значению p_0 при $l = 1$. В (52) подразумевается, что на уровне l иерархического дерева, обладающего $n > 1$ уровнями, состояния $i_1 \dots i_{l-1} 1, i_1 \dots i_{l-1} 2, \dots, i_1 \dots i_{l-1} m_{i_1 \dots i_{l-1}}$ образуют кластер, которому отвечает узел $i_1 \dots i_{l-1}$ на более высоком уровне $l - 1$. Поэтому при вычислении сложности (52) следует сначала провести суммирование по узлам $i_1 \dots i_{n-1} i_n$ нижнего уровня n , принадлежащих кластеру, который отвечает узлу $i_1 \dots i_{n-1}$ следующего уровня $n - 1$. Затем выполняется суммирование по узлам уровня n , принадлежащим всем остальным кластерам, и процедура повторяется для каждого последующего уровня иерархии $l < n$ (при определении сложности слабо ветвящихся деревьев более удобно проводить суммирование не по кластерам, а по ветвям иерархического дерева).

Выражение (52) является основой численного определения сложности произвольного иерархического ансамбля (в частности, развитой дефектной структуры твёрдого тела, подверженного интенсивному внешнему воздействию типа пластической деформации или жёсткого облучения). Для определения сложности реальной структуры следует сначала разделить дефекты по иерархическим уровням $l = 0, 1, \dots, n$, затем на каждом из них провести подсчёт числа дефектов $N_{i_1 \dots i_{l-1}}$, принадлежащих кластеру $i_1 \dots i_{l-1} 1, i_1 \dots i_{l-1} 2, \dots, i_1 \dots i_{l-1} m_{i_1 \dots i_{l-1}}$, и приписать вероятность

$$p_{i_1 \dots i_{l-1}} = \frac{N_{i_1 \dots i_{l-1}}}{N} \quad (53)$$

узлу $i_1 \dots i_{l-1}$ следующего уровня $l - 1$. При этом полное число дефектов всех уровней определяется равенством

$$N = \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^{m_{i_1}} \dots \sum_{i_n=1}^{m_{i_1 \dots i_{n-1}}} N_{i_1 \dots i_n}, \quad n > 1, \quad (54)$$

где $m_{i_1 \dots i_{l-1}}$ — число возможных состояний $i_1 \dots i_l$ в кластере, отвечающем узлу $i_1 \dots i_{l-1}$ (при $n = 1$ следует положить $m_{i_1 \dots i_{n-1}} = m$). В общем случае распределение $m_{i_1 \dots i_l}$ состояний по кластерам определяет их число на данном уровне l согласно равенству

$$M_l = \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^{m_{i_1}} \dots \sum_{i_l=1}^{m_{i_1 \dots i_{l-1}}} m_{i_1 \dots i_l} \quad (55)$$

Для регулярного дерева, каждый узел которого ветвится с одинаковым показателем $m > 1$, отсюда следует $M_l = m^l \equiv \exp[\ln(m) \cdot l]$. Переход к нерегулярному самоподобному дереву трансформирует это выражение в биномиальную зависимость $M_l = [1 + (\ln m/a) \cdot l]^a$, которая в пределе $a \rightarrow \infty$ воспроизводит указанную экспоненту, а при показателе $a = \ln m$ сводится к степенному закону (37).

Подстановка вероятностей $\{p_{i_1 \dots i_l}\}$, $l = 1, 2, \dots, n$ в (52) даёт сложность иерархически соподчинённой дефектной структуры. Очевидно, величина этой сложности задаёт такие феноменологические параметры как прочность и пластичность твёрдого тела. Характерно, что определение структурной сложности не может быть достигнуто использованием одних экспериментальных методов (например, электронной микроскопии) и требует последующей компьютерной обработки согласно изложенному алгоритму.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. А. И. Olemskoi, *Theory of Structure Transformations in Non-Equilibrium*

- Condensed Matter* (New York: NOVA Science: 1999).
2. J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Oxford: Clarendon Press: 1993).
 3. А. И. Олемской, А. А. Кацнельсон, *Синергетика конденсированной среды* (Москва: Едиториал УРСС: 2003).
 4. A. I. Olemskoi and I. A. Sklyar, *Sov. Phys. Uspekhi*, **35**: 455 (1992).
 5. A. I. Olemskoi, D. O. Kharchenko, and I. A. Knyaz', *Phys. Rev. E*, **71**: 041101(12) (2005).
 6. A. I. Olemskoi, *Physics Reviews* (Ed. I. M. Khalatnikov) (1995), vol. **18**, part 1, p. 1.
 7. А. И. Олемской, *Письма в ЖЭТФ*, **69**: 391 (1999).
 8. А. И. Олемской, *Письма в ЖЭТФ*, **71**: 412 (2000).
 9. А. И. Олемской, *Письма в ЖЭТФ*, **85**: 137 (2007).
 10. M. Gellmann and C. Tsallis, *Nonextensive Entropy: Interdisciplinary Applications* (Oxford: Oxford University Press: 2004).
 11. *Справочник по специальным функциям* (Ред. М. Абрамовиц, И. Стиган) (Москва: Наука: 1979).
 12. A. I. Olemskoi and A. D. Kiselev, *Phys. Lett. A*, **247**: 221 (1998).